Міністерство освіти і науки України
Запорізька державна інженерна академія

С.Г. ЄГОРОВ, І.Ф. ЧЕРВОНИЙ

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ЧОРНОЇ ТА КОЛЬОРОВОЇ МЕТАЛУРГІЇ

Навчальний посібник

Рекомендовано
Міністерством освіти і науки України
як навчальний посібник
для студентів вищих навчальних закладів

Запоріжжя
2009

Міністерство освіти і науки України
Запорізька державна інженерна академія

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ЧОРНОЇ ТА КОЛЬОРОВОЇ МЕТАЛУРГІЇ

Навчальний посібник

УДК 669.331

Єгоров С.Г., Червоний І.Ф. Моделювання процесів чорної та кольорової металургії. **Навчальний посібник** / Запоріжжя, 2009. – 227 с.

ISBN …

Рецензенти:
Куцова В.З. Академік АН ВОУ, доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри матеріалознавства Національної металургійної академії України (м. Дніпропетровськ);
Мітяєв О.А. Доктор технічних наук, професор кафедри технології металів Запорізького національного технічного університету (м. Запоріжжя);
Рабінович О.В. Доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри металургії кольорових металів Національної металургійної академії України (м. Дніпропетровськ);

Рекомендовано до друку:
рішенням вченої ради Запорізької державної інженерної академії
(протокол № 3 від 05.11.2009 р.)

У навчальному посібнику в стислій формі викладені основи математичного моделювання. Викладені загальні методологічні питання, можливість використання для математичного опису фізичних законів, методи подоби і аналогії, експериментально-статистичні методи і конкретні приклади побудови моделей. Природно, через обмеження обсягу книги розглянуті далеко не всі сторони настільки великого наукового напрямку, яким є математичне моделювання. Навчальний посібник має контрольні запитання для самопідготовки і тестові завдання. Навчальний посібник розрахований на студентів вузів, що навчаються за фахом «Металургія кольорових металів», а також може бути корисний інженерно-технічним і науковим працівникам, що працюють у цій галузі.

Рекомендовано Міністерством освіти і науки України як навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів. Гриф № …. від …

Рис. 35, табл. 10. Бібліогр. список: 19 назв.

Підписано до друку 01.11.2009 р. Формат 60х84 1,32. Папір офсетний.
Умовн. друк. арк. 10,7. Наклад 100 прим.
Замовлення № 1285К.

Віддруковано друкарнею
Запорізької державної інженерної академії
з комп'ютерного оригінал-макету

69006, м. Запоріжжя, пр. Леніна, 226
РВВ ЗДІА, тел. 22-38-240

Зміст

стор.

ВСТУП 5
1 ПОНЯТТЯ СИСТЕМИ. КЛАСИФІКАЦІЯ СИСТЕМ 7
1.1 Системи 7
1.2 Доцільні і керуючі системи 9
1.3 Принципи керування систем 13
1.4 Керування виробництвом 16
1.5 Класифікація систем 17
1.6 Металургійне виробництво як велика система 21
Питання для самоконтролю 24
2 ПИТАННЯ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ 25
2.1 Основні поняття моделювання і призначення моделей 25
2.2 Класифікація моделей 27
2.3 Структура процесу моделювання 31
2.4 Складність моделей 34
Питання для самоконтролю 39
3 ТЕОРІЯ ПОДОБИ 40
3.1 Ізоморфізм. Подоба. Аналогія 40
3.2 Основи теорії подоби 41
Питання для самоконтролю 48
4 МАТЕМАТИЧНИЙ ОПИС НА ОСНОВІ ФІЗИЧНИХ ЗАКОНІВ 49
4.1 Математичний опис термодинамічних закономірностей 49
4.1.1 Перший закон термодинаміки 50
4.1.2 Термохімічні розрахунки 55
4.1.3 Другий закон термодинаміки 57
4.2 Математичний опис рівноваги хімічних реакцій 62
4.3 Моделі кінетики хімічних реакцій, масо - і теплопередачі 66
4.3.1 Рівняння кінетики гомогенних реакцій 67
4.3.2 Гетерогенні реакції 74
4.3.3 Опис дифузії і масоперенесення 79
4.3.4 Опис теплопередачі 83
4.4 Закони збереження маси та імпульсу 86
4.5 Математична модель об'єкта при можливості 94
допущення зосередженості параметрів 94
4.6 Математичний опис об'єктів з розподіленими параметрами 98
Питання для самоконтролю 102
5 ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧНІ МЕТОДИ
МАТЕМАТИЧНОГО ОПИСУ 105
5.1 Основні характеристики випадкових величин 106
5.2 Регресійний аналіз при пасивному і активному 115
факторному експерименті 115
5.3 Визначення оптимальних умов 132
5.4 Види розподілів 134

5.4.1 Безперервні розподіли 135
5.4.2 Дискретні розподіли 144
Питання для самоконтролю 148
6 ТЕХНІЧНІ І ПРОГРАМНІ ЗАСОБИ МОДЕЛЮВАННЯ 149
6.1 Застосування АОМ і ЦОМ для моделювання 149
6.2 Методи рішення і програмні оболонки для моделювання 154
Питання для самоконтролю 159
7 ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ КОНКРЕТНИХ МЕТАЛУРГІЙНИХ ПРОЦЕСІВ 160
7.1 Синтез комбінованих моделей 160
7.2 Приклад складання спрощеної моделі доменної плавки 163
7.3 Приклади побудови моделей подових сталеплавильних 169
процесів 169
7.3.1 Процес побудови моделі зневуглецювання на основі 170
рівнянь дифузії 170
7.3.2 Побудова моделі зневуглецювання на основі закону 178
збереження речовини 178
7.3.3 Модель процесу зневуглецювання як об'єкта з 183
розподіленими параметрами 183
7.4 Приклад побудови моделі конвертерного процесу 189
7.5 Модель подачі шихти у сталеплавильні агрегати 197
7.6 Постановка завдань створення математичних моделей 209
використання ядерної енергії у металургії 209
Питання для самоконтролю 215
ТЕСТОВІ ЗАВДАННЯ 216
ЗАВДАННЯ ДО САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ 236
ПРЕДМЕТНИЙ ПОКАЖЧИК 244
ЛІТЕРАТУРА 246

ВСТУП

У вищій школі усе більше проявляється тенденція введення до навчального процесу елементів дослідження і персональних комп'ютерів. У зв'язку із цим математичне моделювання здобуває більшу популярність як інструмент наукового пізнання. У навчальні плани багатьох металургійних спеціальностей введені курси, присвячені вивченню питань математичного моделювання і дослідження систем на основі моделей. Одержання необхідних знань і навичок в області математичного моделювання є важливим пунктом по оволодінню основами обчислювальної техніки і програмування. Математичне моделювання процесів і об'єктів, а також методи оптимізації входять до змісту більш високих рівнів підготовки, тому що саме правильною постановкою завдань визначається ефективність використання ЕОМ у системах автоматизації керування технологічними процесами і виробництвом.

Дисципліна «Моделювання металургійних процесів в металургії за фахом» - базується на знаннях, які були отримані при вивченні дисциплін «Металургія чорних металів», «Металургія кольорових металів», «Інформатика», «Прикладна інформатика». Набуті студентом знання та навики з дисципліни «Моделювання металургійних процесів в чорній металургії» будуть необхідні при написанні випускного дипломного проекту (роботи) і у подальшій професійній діяльності.

Метою викладання дисципліни є надбання студентами чітких уявлень про основи методологічних питань моделювання, правил та методик математичного моделювання. Завдання дисципліни – ознайомлення студентів з засобами моделювання, створення математичних моделей дійсних металургійних процесів, а також їх оптимізація. Предмет дисципліни – математичне моделювання різних металургійних процесів в чорній металургії з метою керування і оптимізації. Місце навчальної дисципліни в системі професійної підготовки – спеціаліст.

В процесі вивчення дисципліни студент повинен опанувати наступні знання, уміння і навички:

- знати види моделей;
- знати структуру процесу моделювання;
- знати складність моделей і систем;
- знати теорію подоби при моделюванні;
- вміти використовувати фізичні закони для моделювання;
- вміти будувати моделі різних кінетичних реакцій, масо- і теплопередачі;
- володіти експериментально-статистичними методами математичного опису;
- вміти використовувати регресійний аналіз;
- вміти будувати математичні моделі різних металургійних процесів за допомогою обчислювальної техніки.

Даний навчальний посібник повинен допомогти студентам при проведенні науково-дослідних і навчальних завдань. Цей посібник адресовано студентам спеціальностей «Металургія кольорових металів», «Металургія чорних металів». Необхідний ступінь прорoблення матеріалу визначається викладачем.

1 ПОНЯТТЯ СИСТЕМИ. КЛАСИФІКАЦІЯ СИСТЕМ

Удосконалювання системи планування і керування в сучасних умовах вимагає широкого застосування економіко-математичних методів і обчислювальної техніки. Всі сучасні економіко-математичні методи використовують мову математичних моделей. Математичне моделювання починає займати одне із провідних місць і в дослідженнях, які проводяться в області металургії. Воно використовується при дослідженні металургійних процесів і систем, оптимізації існуючого виробництва, проектуванні автоматизованих систем керування. Цей метод дає можливість скоротити тривалість наукового дослідження і у той же час поставити на моделі такі експерименти, які неможливо провести на реальному об'єкті, наприклад, через пов'язаних із цим можливих великих виробничих втрат.

Металургійне виробництво характеризується винятковою складністю. Ця обставина і обумовлює необхідність удаватися до математичного моделювання при рішенні таких завдань, як створення централізованого керування.

Перш ніж будувати математичну модель, необхідно вивчити і описати реальну виробничу систему. Тут звичайно використовується кібернетичний підхід до опису системи. Побудова моделі пов'язана зі спрощенням систем, оскільки модель є нетотожним аналогом системи.

1.1 Системи

У сучасній науці поняття «система» є одним з найважливіших. Тому зупинимося на ньому досить докладно. Почнемо з найбільш загального визначення системи [1].

Коли розглядають сукупність об'єктів і вважають, що ці об'єкти взаємозалежні, то комплекс взаємозалежних об'єктів і називають *системою.*

Воно зручно тим, що охоплює системи найрізноманітнішої природи (математичні, фізичні, технічні, економічні, логічні, філософські, соціологічні та

ін.). Однак наведене визначення майже нічого не говорить про саму систему. Щоб заповнити цей недолік, уводять деякі додаткові визначення.

Об'єкти, з яких складається система, називають також її *елементами.* Елементи системи мають ряд властивостей або характеристик. Сукупність деяких елементів системи, що грає в системі певну самостійну роль, називають *підсистемою* системи. Взаємодія між елементами системи здійснюється через *зв'язки.* Передбачається, що зв'язки можуть існувати не тільки між окремими елементами системи, але і між її підсистемами. Через зв'язки систем може передаватися або матеріальний потік, або енергія, або інформація.

Розрізняють зв'язки першого, другого і третього порядків:

- *Зв'язками першого порядку* вважаються функціонально необхідні зв'язки. До таких зв'язків відносяться, наприклад, зв'язки між найважливішими органами в людському організмі. При загибелі одного з органів гине весь організм. Зв'язки цього типу існують і в техніці. Наприклад, без підведення електроенергії електродвигун працювати не може.
- *Зв'язки другого порядку* – це додаткові зв'язки. Вони не є функціонально необхідними, але при їхній присутності яка-небудь характеристика системи істотно міняється. Прикладом їх служать зв'язки, що збільшують при кооперативних діях декількох підприємств (об'єднання підприємств у комбінат) загальний ефект до величини більшої, ніж сума ефектів від дії кожного підприємства окремо. Подібних зв'язків багато і у техніці. Добре відомо, наприклад, що добавка невеликої кількості мазуту істотно підвищує світність газового факела, що призводить до поліпшення теплопередачі до поверхні, що нагріває .
- *Зв'язками третього порядку* називають зайві і суперечливі зв'язки. Якщо, наприклад, за допомогою зв'язку передається надлишкова або суперечлива інформація, то такий зв'язок і буде зв'язком третього порядку.

При розгляді системи враховують той факт, що система оточена іншими системами, тобто *зовнішнім середовищем.* Вплив зовнішнього середовища на систему проявляється через зв'язки, які називають *входами системи,* а вплив системи на зовнішнє середовище – через зв'язки, які називають її *виходами.*

Зв'язок між виходом і входом системи (підсистеми) називають *зворотним зв'язком.* Системи, що мають входи або виходи, вважають відкритими, а не взаємодіючі із середовищем – *закритими* (або *ізольованими).*

Вище відзначалося, що елементи системи мають ряд характеристик, які можуть мінятися в процесі функціонування системи. Точно так само в цьому процесі можуть мінятися її зв'язки. Вони можуть, наприклад, виникати або зникати. Таким чином, у кожний момент часу система описується певним набором характеристик. Нехай розглядається якийсь конкретний момент часу t_0. Сукупність всіх характеристик кожного елемента системи і зв'язків у ній у момент t_0 називають *станом системи* в цей момент часу.

Із сказаного вище випливає, що при функціонуванні системи може мінятися її стан. Усяка зміна стану системи в часі називають її *рухом.* Ми поки не конкретизуємо характеристик, що описують стан системи. Рух системи можна описати, розглядаючи характеристики самої системи і зовнішнього середовища, а також похідні від них у функції часу. Надходячи таким чином, ми одержуємо задачу, аналогічну тої, котра виникає в динаміці.

Тому системи, розглянуті в такому аспекті, називають *динамічними*, а системи, що не міняють у часі свого стану, *статичними* (або перебувають у статичному режимі).

1.2 Доцільні і керуючі системи

За допомогою характеристик, які були дані в попередньому параграфі, система не може бути повністю описана.

Необхідність введення додаткових понять видна з наступного визначення системи, яке використовують звичайно в системному аналізі: «Системою називають сукупність об'єктів, об'єднаних деякою регулярною взаємодією або деякою взаємною залежністю і діючих разом з метою виконання заздалегідь поставленого завдання». Відзначимо, що системи, що діють із метою виконання заздалегідь поставленого завдання, називають *доцільними системами*. Напри-

клад, сталеплавильний цех з погляду сталевара можна розглядати як доцільну систему, що робить сталеві злитки; з погляду працівника шлакового відвалу - як систему, що поставляє шлаки, а з погляду співробітника санітарної інспекції - як систему, що забруднює атмосферу димом [2, 3].

Виявляється, що виконувати своє завдання система може тільки в тому випадку, коли здійснюється керування цією системою. Вище ми відзначали, що в процесі функціонування система здійснює рух, тобто перехід з одного стану в інше. Звичайно існує безліч можливих рухів і для того, щоб система виконувала своє призначення, потрібно в деякі моменти часу вибирати одне з них. Втручання в процес функціонування системи для внесення в нього зміни називають *актом керування* або *керуючим впливом,* а всі правила і принципи, на основі яких відбувається акт керування – *стратегіями.*

Під *інформацією* будемо розглядати наявність деяких відомостей про стан системи і зовнішнього середовища [3, 4]. Розглянемо в загальному виді «технологію» керування, як інформаційного процесу. Розрізняють наступні етапи цього процесу:

- *Перший етап* – збір і підготовка інформації про стан об'єкта, яким керують. Скажемо, якщо мова йде про керування мартенівським цехом, то перш, ніж приймати які-небудь рішення, потрібно з'ясувати ситуацію в цеху (фактичні періоди плавок на печах, завантаженість обслуговуючих механізмів, заданий графік роботи цеху, ресурси шихти, кисню та ін.).
- *Другий етап* – переробка отриманої інформації з метою знаходження потрібних рішень. Тут повинна бути відома мета керування (критерій оптимальності керування). При керуванні цехом за допомогою системи оперативного керування такою метою може бути, наприклад, забезпечення мінімуму суми квадратів відхилень фактичного, ходу плавок на печах від заданого графіка. Для вибору потрібного продовження процесу за допомогою обчислювальної машини прораховують кілька можливих варіантів подальшого ходу процесу в цеху, і з них вибирають той, котрий забезпечує мінімум зазначеної суми. При керуванні виробництвом можуть бути і такі критерії якості керування, як максимі-

зація продуктивності, мінімізація виробничих втрат та ін. Сукупність логічних і математичних дій, які потрібно зробити при ухваленні рішення про подальший хід виробничого процесу по шляху, що найбільше повно задовольняє мети керування, називають *алгоритмом керування.*

- *Третій етап* керування як інформаційного процесу – видача виконавцям командної інформації на основі отриманих рішень. Якщо оператор, керуючий цехом, погодився з рекомендацією обчислювальної машини про подальше продовження виробничого процесу, то він забезпечує передачу в пости керування печами і окремими технологічними ділянками відповідної командної інформації (наприклад, на деяку піч повідомляється про перехід на новий тепловий і кисневий режим; якомусь крану дається команда про необхідність забезпечити розливання плавки, випущеної з певної печі та ін.).

Таким чином, *керування* – це видача командної інформації на основі ухвалених рішень, отриманих шляхом переробки інформації, що надійшла [3].

Ми розглянули керування як інформаційний процес. Але цей процес потрібно здійснювати за допомогою якого-небудь матеріального пристрою. Такий пристрій і називається *керуючою системою.* Описана вище «технологія» керування дає можливість легко представити основні елементи цієї системи. Таких елементів чотири:

1) контрольований параметр або стан;
2) чутливий елемент (датчик) або метод виміру даного параметра або стану;
3) блок керування або пристрій, який порівнює отримані при вимірюванні результати із запланованим еталоном і керує механізмом корекції;
4) блок впливу або механізм, здатний здійснювати зміни в керованій системі.

Блок керування може або не бути складовою частиною тієї системи, якою він керує, а може і належати їй. У першому випадку систему керування називають *розімкнутою,* а в другому *замкнутою.*

Прикладом розімкнутої системи може служити звичайна настільна лампа. Керуючий вплив, а саме, включення і вимикання лампи здійснюється людиною. Іншим прикладом такої системи служить світлофорна система, у якій видача сигналів на заборону або дозвіл руху автотранспорту здійснюється за допомогою годинного механізму через певні проміжки часу, тобто є заздалегідь запро-

грамованою. Наведені приклади показують, що в розімкнутій системі акти керування формуються без обліку значень параметрів основної системи. У загальному випадку тут мова може йти як про всі параметри системи, так і про деяку частину цих параметрів (так званих, *керованих параметрах).* Розглянуту вище світлофорну систему можна вдосконалити, додавши блок, що використовує фотоелементи і враховує скупчення транспорту на перехрестях. Тоді б всі чотири елементи керуючої системи належали одній системі («вуличний рух»), тобто керуюча система стала б замкнутою.

Видно, що процес керування здійснюється з обліком одержуваної через зворотний зв'язок інформації про керовані параметри. Ця особливість є характерною для всіх замкнутих систем.

Справа в тому, що інформація про значення параметрів системи може бути відома і без усякого зворотного зв'язку. Наприклад, нехай мова йде про керування двоступінчастою ракетою. Нехай заданий закон, по якому витрачається паливо ракети. Тоді легко заздалегідь визначити, коли скінчиться запас палива в першому щаблі ракети і коли необхідно включити другий ступінь. Відповідну команду можна за допомогою годинного механізму подати в заздалегідь відомий момент часу. Але тоді, мабуть, система керування буде розімкнутою.

Отже, обов'язковим елементом замкнутої системи керування є зворотний зв'язок. При регулюванні величини якого-небудь параметра здійснюється вимір фактичного значення цього параметра і встановлюється його відхилення від заданого рівня. Ці відхилення іноді називають неузгодженістю. У тому випадку, коли керуючий механізм підсилює виявлену неузгодженість, говорять, що має місце *позитивний зворотний зв'язок,* а коли зменшує – *негативна.*

Використанню зворотного зв'язку для керування в кібернетиці приділяється дуже велика увага. Це пояснюється тим, що регулятор зі зворотним зв'язком є досить універсальним. При використанні такого регулятора немає необхідності знати причину виникнення збурювання певного виду, щоб залежно від її шукати рецепт регулювання. Пояснимо сказане прикладом. Нехай мова йде про регулювання температури рідини, що перебуває в якій-небудь посудині.

Зворотний зв'язок дозволяє компенсувати коливання температури рідини поза залежністю від того, яким джерелом або споживачем тепла вони викликані.

1.3 Принципи керування систем

Рішення завдання керування зводиться до створення керуючої системи, яка буде здійснювати керування розглянутим об'єктом. При створенні керуючої системи використовують ряд кібернетичних принципів. Один з них - принцип зворотного зв'язку [3].

Припустимо, що є керуюча система зі зворотним зв'язком. Цей зворотний зв'язок стежить за зміною вихідного керованого параметра *Y*. Припустимо, що *Y* залежить від декількох вхідних величин $(x_1, x_2, \ldots, x_i, \ldots, x_m)$ і що серед x_i є випадкові величини, що не піддаються нашому контролю. Виявляється, що для керування параметром *Y* немає необхідності впливати на кожне x_i. Для рішення цього завдання досить знайти так званий головний фактор і впливати тільки на нього. Це є *принцип керування впливом на головний фактор.*

Розглянемо приклад такого керування [1]. На металургійний завод надходить кокс у кількості x_1 (т/місяць) і витрачається рядом цехів заводу (доменними, сталеплавильними, ливарними й ін.) у кількостях, відповідно рівних x_2, x_3, x_4 (т/місяць). Причому доменні цехи є основними споживачами коксу. Кількість коксу *G*, що є в наявності на заводі в розглянутий момент часу, можна представити в такий спосіб:

$$G = G_{min} + \Delta G .$$

де G_{min} – мінімально припустимий запас коксу для забезпечення безперебійної роботи заводу;

ΔG – надлишок коксу.

Цей надлишок відображає як надходження коксу, так і його витрату, тобто $Y = f(x_1, x_2, x_3, x_4)$. Взявши як вихідний сигнал величину *Y* і регулюючи загальне надходження коксу (x_1 – головний фактор), можна забезпечити стабільність зміни *Y* у заданих межах.

При розробці керуючих систем велике значення має також сформульований У. Ешбі *закон необхідної розмаїтості*. Справа в тому, що при цілеспрямованому керуванні відбувається зменшення розмаїтості системи. В ідеальному випадку керуюча система повинна виключити з безлічі всіх станів керованої системи такі стани, які не є оптимальними з погляду мети керування. Для цього керуюча система повинна мати розмаїтість не меншим, чим об'єкт керування. Якщо розмаїтість керуючої системи менше, ніж керованої, то вона не тільки не буде здатною працювати без помилок, але й взагалі не зможе правильно працювати.

Таким чином, для того щоб поліпшити якість керування, потрібно підвищити розмаїтість керуючої системи (якщо розглядати керування як інформаційний процес, то таке ствердження еквівалентно вимозі збільшення пропускної здатності керуючого пристрою як каналу зв'язку). Легко побачити, що розбивка системи на підсистеми так називана *структуризація системи* приводить до збільшення її розмаїтості і становить значний інтерес для практики. Він використовується, наприклад, при конструкції пристроїв типу місяцехода. Якби конструктори спроектували ходову частину місяцехода такою же, як у звичайного автомобіля, то система керування місяцеходом не впоралася б з розмаїтістю важко прохідного місячного рельєфу.

Якщо система розбита на підсистеми, не взаємодіючі між собою, то загальна розмаїтість системи дорівнює добутку розмаїтості підсистем. Наприклад, нехай система розбита на дві підсистеми, стани першої з яких позначимо через $a_1, a_2, ..., a_n,$ а стани другої – через $b_1, b_2, ..., b_m.$ Тоді в будь-який стан систему можна визначити, задавши два числа $(a_i b_j)$ $i = 1, 2, ..., n;$ $j = 1, 2, ..., m.$ Таких різних пар буде n x $m.$

Якщо ж між підсистемами є взаємодія, то загальна розмаїтість системи буде менше, ніж добуток розмаїтостей. Це зменшення буде тим більше, чим більше взаємодія підсистем.

Процес структуризації варто розуміти не тільки як конструювання якоїсь конкретної матеріальної керуючої системи у вигляді окремих підсистем, як це

має місце у випадку пристрою типу місяцехода. Цей процес також здійснюється, наприклад, тоді, коли людина керує яким-небудь агрегатом. Нехай мова йде про систему сталевар (регулятор) - контрольовані параметри - плавка в сталеплавильному агрегаті (об'єкт керування). Ця система має цілий ряд змінних: хімічний склад і температура металу; хімічний склад і фізичний стан шлаків; положення регуляторів витрати палива, повітря і кисню; параметри, що характеризують стан агрегату, і т.д. Якби всі ці змінні були настільки тісно зв'язані, що розглянуту систему не можна було б розділити на підсистеми, то ходом плавки взагалі було б неможливо керувати. Фактично все відбувається так, що в окремі моменти часу систему можна розглядати як таку, що розпалася на більш-менш незалежні підсистеми: сталевар - регулятор витрати кисню, сталевар - додавання присадок в агрегат і т.д. За допомогою цих окремих підсистем можна впливати на хід процесу. Крім того, плавку металу можна розділити на ряд щодо самостійних підсистем, пов'язаних з підсистемами керуючої системи, наприклад, недостатня швидкість вигоряння вуглецю - установка регуляторів витрати кисню на більшу інтенсивність продувки ванни; погано гріється метал - установка регулятора витрати палива в положення, що забезпечує більше високі теплові навантаження; не віддаляється сірка - команда на видалення старого і наведення нових шлаків і т.д.

Отже, якби ми спробували створити регулятор, що одночасно враховує вся сукупність надзвичайно складно зв'язаних між собою і швидко мінливих змінних, що характеризують керований об'єкт і навколишнє середовище, то такий регулятор ніколи б не запрацював, тому що в нього просто не вистачило б часу на те, щоб відреагувати на конкретне збурювання і ліквідувати його. Тому, для того щоб мати можливість керувати об'єктом, прагнуть розділити об'єкт на незалежні комплекси, а регулятор - на окремі підсистеми для того, щоб мати можливість послідовно пристосовувати їх до виникаючих ситуацій і знаходити потрібні керуючі впливи.

Зупинимося ще на одній особливості структуризації. Коли розбивають керуючу систему на підсистеми, намагаються дотриматися *принципу ієрархії*

керування, який полягає у тому, що керуюча система розбивається на підсистеми, які належать різним рівням керування [3]. Інформація про впливи, що обурюють, надходить у першу чергу підсистемам першого рівня. Якщо ці підсистеми справляються зі збурюванням і видають потрібні керуючі впливи, то інформація про збурювання не йде далі цього рівня. Якщо впливи, що обурюють, більше складні, то потрібне втручання в процес керування підсистем більш високого рівня. Принцип ієрархії керування використовується і при створенні виробничих систем керування, де можна розрізняти наступні рівні керування: ділянка - цех - група цехів - завод - комбінат.

Цей принцип характерний і для живих організмів. Відомі так називані реакції, що самозберігають, живого організму - миттєве відсмикання руки, закривання очей, відстрибання убік і т.д., пов'язані із захистом організму від якої-небудь небезпеки. Ці реакції організму здійснюються ще до того, як людина зуміла зміркувати, до яких наслідків може привести виникла ситуація. Відомий також «автоматизм» дій операторів, керуючих якими-небудь установками.

1.4 Керування виробництвом

Надалі ми будемо мати справу із системами керування виробництвом, тому варто більш докладно зупинитися на цьому понятті. Тут звичайно розрізняють два поняття – організація і власне керування. Організація визначається як порядок, структура і спосіб функціонування, які встановлюються на підприємстві і пропонують певні взаємодії між працюючими, їхню виробничу поведінку, взаємозв'язок, співпідпорядкованість і функції [1, 2].

Відзначимо, що цей порядок може порушуватися, і при порушенні виникають окремі неполадки і відхилення від установленого ходу виробництва, з'являється необхідність у керуванні, тобто в діяльності, що відновлює цей порядок. Відновлення не означає повну тотожність із тим, що було. Виробництво міняється, росте. Тому потрібні нові пропорції, нове розміщення людей. У зв'язку із цим *керування* визначається як дії, що зберігають і вдосконалюють існу-

ючу організацію. Таким чином, організація розуміється як статика виробництва, керування – як його динаміка.

До *функції планування* відносять вибір цілей системи, а також визначення політики, програм, образа дій і методу для їхнього досягнення. *Функція зв'язку* полягає в передачі різної інформації між центрами підсистем і систем, що забезпечує прийняття рішень. Крім цього, функція зв'язку включає взаємообмін інформацією із зовнішнім миром.

У висновку параграфа приведемо наступне формулювання поняття «керування виробництвом» – промислове підприємство являє собою доцільну систему, основне завдання якої складається у виробництві продукції певного виду. Ця система в дискретні моменти часу відчуває потребу в керуванні, яке забезпечує прийняття оперативних рішень. *Керування* такою *системою* є переведення системи з даного стану в бажане з метою досягнення екстремальних значень деяких величин – критеріїв оптимальності. Інакше кажучи, цей вплив на виробничий процес комплексу технічних, організаційних, планових, облікових, контрольних, адміністративних і соціальних заходів, які здійснюються з метою досягнення високих економічних результатів виробничої діяльності».

1.5 Класифікація систем

Існує декілька класифікацій систем [1, 2, 5]. Найбільше поширення одержали класифікації, згідно яким назви систем збігаються з назвами відповідних розділів науки, що розглядають такі системи. Наприклад, іноді системи ділять на формальні (математичні, логічні), механічні, фізичні (у які входять хімічні і фізико-хімічні) і живі. Класифікація подібного типу запропонована Боулдінгом, що розглядає вісім рівнів складності систем. Не вдаючись у подробиці, обмежимося, перерахуванням цих рівнів:

1. Статичні системи (карти Землі, Місяця).
2. Прості динамічні системи (годинниковий механізм, дизель, динамомашина).

3. Прості кібернетичні системи (термостат – прилад для підтримки постійної температури).

4. Відкриті або системи, що самовідновлюються (полум'я, ріка).

5. Рослини.

6. Тваринний мир.

7. Людина.

8. Соціальні організації.

Існує класифікація, відповідно до якої системи по ступеню невизначеності діляться на детерміновані і імовірнісні, а по ступеню складності – на прості, складні і дуже складні.

Найменш складні системи називають *простими.* Системи, що не є простими і відрізняються розгалуженою структурою і більшою розмаїтістю внутрішніх зв'язків, уважають *складними, що* піддаються опису. Системи настільки складного виду, що їх точно і докладно описати вже не можна, називають *дуже складними.*

Детермінованою системою вважають систему, у якій складові частини взаємодіють точно передбаченим образом. *Імовірнісної* називають систему, прогноз станів якої можна здійснити тільки з деяким ступенем імовірності.

Відзначимо, що границі між класами систем дуже умовні. Все залежить від ступеня деталізації системи, від характеру розв'язуваного завдання і необхідної точності рішення.

Наприклад, система, що складається із двох металевих куль, що переміщаються по гладкій площині назустріч один одному, є простій, якщо мова йде про завдання грубого опису траєкторії руху цих куль; однак якщо мова йде про точний опис траєкторії руху куль або про їхній деформації при зіткненні (теплові явища при ударі, точний характер залишкової деформації і т. п.), то систему варто вважати щонайменше складної.

Точно так само, коли мова йде про детерміновані і імовірнісні системи, то системи розглядаються начебто вони детерміновані або начебто вони імовірнісні в тій мері, у який відповідне допущення цілком улаштовує експеримен-

татора. Повертаючись до прикладу з кулями, помітимо, що при переході від першого завдання до другого, ми переходимо від простої детермінованої системи до складної імовірнісної.

У табл. 1.1 дані приклади різних систем. Тут немає тільки приклада дуже складної детермінованої системи, оскільки таких систем не існує.

Таблиця 1.1 – Класифікація систем за ступенем невизначеності і ступенем складності

Класифікація систем за ступенем невизначеності	Приклади систем		
	Класифікація систем за ступенем складності		
	прості	складні	дуже складні
Детерміновані	Ножиці	Система регулювання теплового режиму печі	-
	Арифмометр	Електронна обчислювальна машина	-
Імовірнісні	Цехова телефонна станція	Система протиповітряної оборони	Металургійний комбінат
	Система статистичного контролю якості продукції	Система зберігання запасів	Людський мозок

У літературі розглядаються так називані великі системи. Однак, відносно цього терміну немає єдиної думки. Так, наприклад, У. Ешбі відзначає, що система є великою з погляду спостерігача, можливості якого вона перевершує в якому-небудь аспекті, важливому для досягнення мети спостерігача. При цьому той самий матеріальний об'єкт залежно від мети і засобів спостерігача може приводити або не приводити до великої системи, причому фізичні розміри об'єкта не є істотними. У. Ешбі також виділяє особливість великих систем – наявність у них властивостей, що не випливають із відомих (спостережуваних) властивостей елементів системи і способів їхнього з'єднання.

Ю. І. Черняк [1] затверджує, що якщо система занадто велика для спостерігача, то її потрібно розглядати послідовно вроздріб. Тому великою системою він називає систему, що неможливо досліджувати інакше, як по підсистемах. Складною же системою він уважає таку систему, що будується для рішення багатоцільового, багатоаспектного завдання.

М. Гуд і Р. Макол [1] всі системи ділять на малі і великі, уважаючи, що малі системи однозначно визначаються властивостями процесу і обмежені одним типовим процесом, його внутрішніми зв'язками, а також особливостями апаратурного оформлення. Великі системи являють собою сукупність малих систем і відрізняються від них у кількісному і якісному відношенні. Вони відзначають, що великим системам властиві:

1) певна цілісність, наявність загальних цілей і призначення;
2) великі розміри, велика кількість виконуваних функцій;
3) складність поведінки;
4) наявність конкуруючих сторін (у системі можуть протікати протилежно спрямовані процеси, що супроводжується зменшенням її ефективності).

Е. В. Утеуш і З. В. Утеуш [1] ототожнюють поняття велика і складна система. Крім перерахованих вище, до властивостей таких систем вони відносять неможливість оцінити складну систему за результатами випробувань, тому що їхнє поводження звичайно так само складно і дорого, як і створення самої системи. Ще однією особливістю складних виробничих систем автори вважають обов'язкову участь людини в їхньому керуванні.

І. В. Кузьмін [1], крім відзначених вище особливостей складних систем, виділяє наступні:

1) багатоплановість рішення завдання;
2) складність підсистем;
3) багатомірність;
4) наявність усіляких перехресних прямих і зворотних зв'язків;
5) різноманіття структур з різними ієрархічними рівнями, з постійно, що змінюється составом.

Отже, *великими системами* можна вважати дуже складні імовірнісні системи з керуванням. Такі системи мають ряд перерахованих вище особливостей.

1.6 Металургійне виробництво як велика система

Сучасний металургійний завод – це складний комплекс виробничих цехів, технологічно і енергетично тісно зв'язаних між собою для послідовної переробки сировини і напівфабрикатів у чавун, сталь і прокат. У деяких випадках металургійний завод поєднують із підприємствами інших галузей промисловості, наприклад з підприємствами по видобутку гірничорудної сировини, коксохімічними, вогнетривкими та ін. Таким чином, металургійне підприємство являє собою доцільну систему, ціль якої складається у виробництві металургійної продукції. Зупинимося на деяких особливостях цієї системи [5, 6].

Про діяльності металургійного підприємства судять по показниках, що характеризує виконання планів (плани по виробництву, якості, собівартості, збуту, науці, поліпшенню умов праці, капітальній будівництву, ремонту та ін.).

Важливим показником роботи металургійного підприємства є його прибуток за планований період. Він визначається як різниця між вартістю реалізованої продукції і витратами на виробництво цієї продукції.

Металургійному виробництву властива *цілісність.* Поняття цілісності системи перенесено в кібернетику з біології, де під цілісністю живого організму розуміють єдність його реакцій на зовнішні впливи. Зупинимося більш докладно на питаннях цілісності металургійного виробництва.

Наприклад, ремонт домни приводить до недостачі чавуну в сталеплавильних цехах, що у свою чергу визначає скорочення поставки злитків у прокатні цехи. Сталеплавильні цехи не можуть значно форсувати виробництво без упевненості у тому, що вони будуть повністю забезпечені шихтою та іншими ресурсами, і в тому, що їхня продукція буде прийнята прокатними цехами. Ритм роботи сталеплавильних цехів істотно впливає на ритм роботи доменних печей і прокатних станів (ритм – кількість продукції, що випускає в одиницю часу). Вихід з ладу життєвоважливих центрів заводу (установок, що забезпечують подачу електроенергії, води і т.п.) звичайно призводить до зупинки всього заводу.

Цілісність характеризується рядом властивостей і особливостей. Багато-

гранність цілісності виражається поняттями – диференціація, інтеграція, симетрія, асиметрія та ін. *Диференціація* відображає властивість розчленованості цілого, прояву різноякісності його частин. Протилежне поняття *«інтеграція»* пов'язане з об'єднанням сукупності супідрядних елементів у єдине утворення.

Симетрія і *асиметрія* виражають ступінь домірності в просторових і тимчасових зв'язках системи.

Будь-яка кібернетична система перестає нею бути, якщо вона губить хоча б один із цих характерних ознак цілісності. Наприклад, якщо динамічна система не має жодного типу симетрії, то вона не має і динамічних зв'язків між частинами. З іншого боку, при нескінченному числі типів симетрії в системі реалізуються такі зв'язки, які дають на всіх виходах нульову результуючу. Таким чином, кожна ознака цілісності характеризується певним кінцевим числом типів симетрії.

Інтеграція, диференціація, симетрія мають велике значення для будь-якого виробництва, у тому числі і для металургійного. Інтеграція дозволяє скоротити число допоміжних виробництв, ділянок, устаткування, дозволяє найбільше ефективно використовувати можливості малих систем, поєднуваних у більшу систему. Прикладом металургійної інтеграції є об'єднання декількох металургійних підприємств у комбінат. Диференціація забезпечує більшу розмаїтість, більшу живучість підприємства.

Центральна симетрія широко використовується при побудові централізованих систем керування виробництвом. Взагалі без централізації неможливе керування виробництвом. Централізація забезпечує швидку передачу інформації, швидку пристосовуваність всієї системи до впливів, що обурюють.

Симетрія щодо осі виражається в наявності на підприємстві груп паралельних агрегатів ділянок, цехів. Така симетрія, з одного боку, забезпечує підвищення пропускної здатності системи, а з іншого боку – збільшення її життєздатності.

Характерною рисою металургійного виробництва є *великі розміри, складність* і *багатомірність*. Наприклад, система, що описує сучасний сталеплави-

льний цех із мартенівськими печами з двома ваннами, має розмаїтість, що оцінюється величиною порядку 10^{10} ситуацій. Дж. Форестер відзначає, що при вивченні діяльності підприємства доводиться розглядати від 30 до 3000 змінних. Ці цифри цілком можна віднести і до металургійного підприємства. Число змінних швидко зростає, якщо при вивченні системи розглядати взаємодії факторів.

Властивості металургійних систем не можна вивчити або описати, знаючи тільки властивості окремих агрегатів. Наприклад, при керуванні цехом часто доводиться вирішувати так звані конфліктні ситуації. Правильне рішення можна одержати перебором значного числа варіантів продовження процесу, розглядаючи систему в цілому.

При зміні деяких параметрів у металургійних системах виникають украй складні ситуації. Наприклад, зміна хімічного складу залізної руди, що подається до доменні печі, приводить до виникнення серйозних проблем як у доменному, так і в сталеплавильному виробництвах.

Освоєння нових марок стали (зміна хімічного складу металу) приводить до значних труднощів як у сталеплавильному, так і в прокатному виробництвах.

Керуючі впливи в металургійних системах можуть носити імовірнісний характер, тому що часто відомо тільки, у якому напрямку відбудеться зміна ходу технологічного процесу і точної кількісної оцінки наслідків керуючого впливу ми не знаємо. Наприклад, нам відомо, що при збільшенні теплового навантаження в сталеплавильному агрегаті метал буде грітися швидше. Але температуру металу через фіксований відрізок часу ми можемо оцінити лише приблизно, тому що на нагрівання металу, крім теплового навантаження, впливають ще фізичні властивості шлаків, через які підводять тепло, гідродинаміка сталеплавильної ванни і багато чого іншого. Точно також ми знаємо, що зі збільшенням темпу подачі кисню в сталеплавильний агрегат буде збільшуватися швидкість зневуглецювання. Величину збільшення швидкості ми можемо оцінити тільки орієнтовно, тому що недостатньо відомі фізико-хімічні і гідродинамічні особ-

ливості процесу, що безупинно змінюються параметри агрегату і пристроїв, через які здійснюється введення кисню та інші фактори.

Прогноз у металургійних системах носить імовірнісний характер. Наприклад, про тривалість періодів мартенівських плавок, про результати шихтовки плавки (хімічний склад і температура металу після розплавлюванні), про результати подачі розкислювачів у піч або в ківш ми можемо сказати тільки з якимось ступенем імовірності.

Питання для самоконтролю

1. Дайте визначення поняттю «система».
2. Що таке «елементи системи»?
3. Що таке «підсистема»?
4. Дайте визначення зв'язкам 1-го порядку.
5. Дайте визначення зв'язкам 2-го порядку.
6. Дайте визначення зв'язкам 3-го порядку.
7. Що таке «зовнішнє середовище»?
8. Дайте визначення поняттю «доцільна система».
9. Що таке «акт керування» (керуючий вплив)?
10. Перелічите основні елементи керуючої системи.
11. Поняття «зворотного зв'язку» замкнутої системи.
12. Керування системою.
13. Класифікація систем за Боулінгу.
14. Класифікація систем за ступені складності.
15. Класифікація систем за ступені невизначеності.

2 ПИТАННЯ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

2.1 Основні поняття моделювання і призначення моделей

Роль моделювання в сучасній науці настільки велика, що воно стало одним з основних інструментів наукового пізнання і знайшло широке поширення при дослідженні металургійних процесів і керуванні ними. У зв'язку із цим поряд з побудовою конкретних моделей великого значення набуває розгляд деяких загальних методологічних питань моделювання [2].

Моделювання – відтворення характеристик деякого об'єкта на іншому матеріальному або уявному об'єкті, спеціально створеному для їхнього вивчення. У цьому визначенні моделювання власне кажучи міститься також одне із загальних визначень моделі. У цей час є цілий ряд визначень *моделі*, жодне з яких повністю не вичерпує сутності цього поняття, видимо, через різноманіття видів моделей і широкої області застосування. Нижче наведене визначення моделі, що належить відомому фахівцеві в області ідентифікації П. Ейкхофу [3]. При цьому відзначається взаємозв'язок цього поняття зі спостереженням і експериментуванням. Підкреслюється, що спостереження і експериментування є одними з основних понять, використовуваних у природничих науках і техніку. Опираючись на спостереження, учений будує фізичну модель явища, на основі якої методом проб і помилок (або цілеспрямованого пошуку) створюється теорія. Розробка теорії власне кажучи зводиться до побудови моделі. Теорія ж є словесною або математичною моделлю дійсності.

Модель є відбиття істотних сторін реальної (або створюваної) системи, у зручній формі подає інформацію про неї. Тут під системою розуміється сукупність упорядкованих об'єктів, у якій якимось чином визначені цілі. Усе, що не входить у систему, є частиною середовища. Система характеризується зв'язками між вхідними і вихідними сигналами, вид яких залежить від вибору границі між системою і середовищем. Звідси можна зробити вивід, що вид моделі системи в певній мері залежить від точки зору спостерігача.

Розширюючи поняття моделі, можна відзначити, що вона не повинна бу-

ти описом фактичного устрою системи, а може імітувати систему або «наслідувати» її поводженню, володіючи при цьому властивостями «розщеплення» і «сполученості», що дає можливість досліджувати як характеристики окремих елементів, так і їхню взаємодію в системі.

Моделі можуть бути концептуальні (феноменологічні, словесні), фізичні, математичні. Модель повинна створювати передумови для наступних рішень (генерування гіпотез), тому інформацію в ній доцільно представляти в зручній для сприйняття формі. Ще раз підкреслимо, що модель є спрощене уявлення дійсності; відносна простота моделі – одна з головних її характеристик.

Призначення і функції моделі надзвичайно широкі. Модель, що відтворює об'єкт, може будуватися для наступних цілей:

1) *практичних* – становлення функціональних зв'язків між входом і виходом об'єкта для рішення конкретних завдань керування, створення протезів (штучні серце, кисті руки) і т.д.;

2) *навчальних* – навчання, демонстрації і полегшення засвоєння вже готових знань;

3) *наукових* – дослідження відтвореного об'єкта, що становить найбільший інтерес. У цьому випадку модель може використатися для:

а) удосконалювання або побудови теорії процесу, будучи деякої попередньою теорією;

б) пророкування поводження об'єкта, будучи його заступником;

в) заміни складної системи. Наприклад, диференціальних рівнянь більше простою системою із припустимої для певних умов точністю;

г) економії часу і засобів;

д) інтерпретації експериментальних і теоретичних результатів шляхом заміни експерименту на об'єкті експериментом на моделі з використанням АОМ або ЦОМ.

Сюди ж примикає критеріальна функція моделей, яка полягає у тому, що з її допомогою можна перевіряти істинність знань про оригінал, оскільки модель дає можливість представити накопичені знання в компактному і взаємозалежному (системному) виді і зрівняти їх з оригіналом.

2.2 Класифікація моделей

Моделі бувають *матеріальні* і *абстрактні* (концептуальні, математичні). Матеріальні моделі найбільш доступні для розуміння. Їх ділять на образотворчі моделі і моделі-аналоги. *Образотворча модель* має зовнішні характеристики системи (фотографія, географічна карта, скульптура). У *моделі-аналогу* сукупність одних властивостей моделюється за допомогою сукупності інших властивостей (моделювання механічних коливань за допомогою електричних сигналів) [1].

Для наших цілей найбільший інтерес представляють абстрактні моделі. *Математичною моделлю* системи називають її опис на якій-небудь формальній мові, що дозволяє виносити судження про деякі риси поводження цієї системи при проведенні формальних процедур над її описом.

Прикладами математичних моделей служать: графік, рівняння, граф, таблиця, алгоритм. Як матеріальні, так і математичні моделі бувають детермінованій і імовірнісній, статичній і динамічними, імітації і оптимізації.

Імовірнісною називають модель, яка містить імовірнісні елементи. У противному випадку модель називають *детермінованою.* У принципі можна побудувати модель переважно імовірнісного або переважно детермінованого характеру, причому при такому підході можливі чотири різних типи моделей (табл. 2.1).

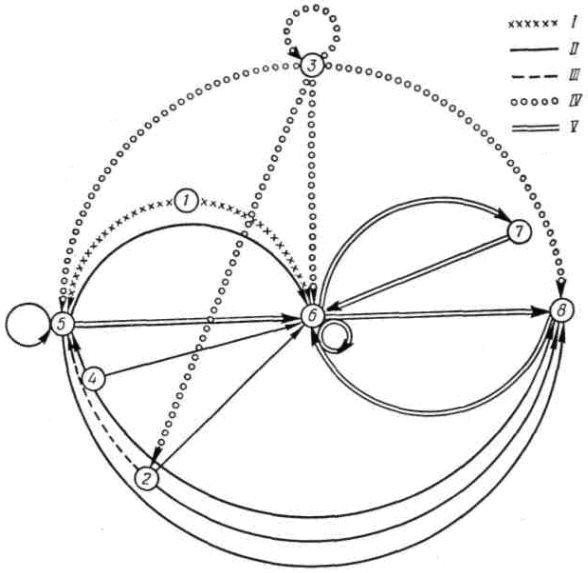
По відображенню функціонування складної системи в часі моделі підрозділяють на *одномоментні (статичні)* і *динамічні,* відтворюючий процес функціонування системи за ряд послідовних моментів часу.

Таблиця 2.1 – Класифікація моделей

Вид реальної системи	Вид і приклади моделей	
	детермінована	імовірнісна
Детермінована	Закон падіння тіла в порожнечі	Обчислення визначеного інтеграла методом Монте-Карло
Імовірнісна	Таблиці статистичних даних, які містять середні значення і не дають інших характеристик розподілів	Моделі черг, створюваних потоком транспорту на перехрестях доріг

Моделі, призначені для імітації роботи якої-небудь системи, називають *моделями імітації.* Моделі, призначені для оптимізації системи, називають *моделями оптимізації.* Основою моделі оптимізації служить математична модель, подібна моделі, що імітує. Але моделі оптимізації властиві при цьому два найважливіших додаткових компоненти – цільова функція і додаткові умови. *Цільова функція* оцінює відповідно до деякого закону за допомогою певного числа якість рішення, отриманого на моделі. За допомогою *додаткових умов* обмовляють, коли рішення взагалі припустиме.

Приклад побудови математичної моделі металургійного заводу, представленою у вигляді графа [1]. Зупинимося при цьому на основних матеріальних потоках металургійного заводу (рис. 2.1). Зрозуміло, що розглянута структура зв'язків неповна і має чисто ілюстративний характер.



1 – аглофабрика; 2 – коксохімічне відділення; 3 – вогнетривкий цех; 4 – киснева станція; 5 – доменний цех; 6 – сталеплавильний цех; 7 – копровий цех; 8 – прокатний цех; I – агломерат; II – газ; III – кокс; IV – вогнетриви; V – метал

Рисунок 2.1 – Схема матеріальних потоків металургійного комбінату

Аглофабрика 1 металургійного підприємства виробляє агломерат двох, сортів – доменний і мартенівський.

Коксохімічний цех 2 переробляє коксівні вугілля в кокс, що поставляє головним чином у доменні цехи. Побічні продукти цього виробництва, такі як коксовий газ, використовуються для опалення різних агрегатів, наприклад марте-

нівських печей і нагрівальних печей у прокатному цеху.

Вогнетривкий цех 3 виробляє вогнетриви для тих цехів, у яких є печі різного призначення (для власного цеху і для цехів коксохімічного, доменного і сталеплавильного).

Киснева станція 4 обслуговує головним чином цеху доменний (збагачення повітряного дуття киснем), сталеплавильний (інтенсифікація процесу плавки киснем) і прокатний (використання кисню при вогневому зачищенні металу).

Доменний цех 5 виробляє чавун, що надходить в основному в сталеплавильний цех. Цех частково обслуговує сам себе (наприклад, доменний газ використається для нагрівання насадок нагрівачів). Він поставляє також доменний газ для опалення печей у сталеплавильному й прокатному цехах. Доменний цех має зв'язок із цехами, що поставляють йому сировина.

Сталеплавильний цех 6 виробляє сталеві злитки, що надходять у прокатний цех. Цех використає свої відходи як шихту. Основну ж частину металобрухту сталеплавильний цех одержує з копрового цеху. Зв'язок з копровим цехом двосторонній, тому що цей цех одержує зі сталеплавильного цеху негабаритні відходи металу (аварійний скрап).

Копровий цех 7 переробляє негабаритний непідготовлений до завантаження в сталеплавильні печі металобрухт, доводячи його до кондиції.

Прокатний цех 8 виробляє готову продукцію. Зі зв'язків цього цеху тут слід зазначити зв'язок зі сталеплавильним цехом, у який надходять як шихтові матеріали відходи прокатного виробництва.

Розглянуті вище зв'язки представимо у вигляді графа. Множину, що складається з перерахованих вище восьми елементів, запишемо в такий спосіб:

$$X = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}.$$

Кожному елементу цієї множини поставимо у відповідність один або трохи з перерахованих елементів. Це відповідність, що означає спрямований зв'язок, визначимо за допомогою символу *Г*. Тоді

$$\Gamma(1) = \{5, 6\}$$

буде означати, що перший елемент спрямовано пов'язаний з елементами 5 і 6, а співвідношення

$$\Gamma(2) = \{5, 6, 8\},$$

що другий елемент спрямовано пов'язаний з елементами 5, 6 і 8. З наведених позначень ясно, що, коли зв'язок у даному напрямку відсутній, відповідний елемент не записується. Для Г(3) маємо

$$\Gamma(3) = \{2, 3, 5, 6, 8\}.$$

Тут наявність елемента 3 серед елементів 2, 5, 6 і 8 означає, що даний елемент спрямовано зв'язаний не тільки з елементами 2, 5, 6 і 8, але і з самим собою. Інші відповідності запишемо без пояснень:

$$\Gamma(4) = \{5, 6, 8\};\ \Gamma(5) = \{5, 6, 8\};\ \Gamma(6) = \{6, 7, 8\};\ \Gamma(7) = \{6\};\ \Gamma(8) = \{6\}.$$

Цей же граф може бути представлений за допомогою таблиці із двома входами (матриці), у якій 1 означає наявність спрямованого зв'язку, а 0 – її відсутність (табл. 2.2).У рядках цієї таблиці зазначені пункти відправлення, а в стовпцях – пункти прибуття матеріалів.

Таблиця 2.2 - Схема матеріальних потоків металургійного заводу

Пункти відправлення матеріалів	Пункти прибуття матеріалів							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0	0	0	0	1	1	0	0
2	0	0	0	0	1	1	0	1
3	0	1	1	0	1	1	0	1
4	0	0	0	0	1	1	0	1
5	0	0	0	0	1	1	0	1
6	0	0	0	0	0	1	1	1
7	0	0	0	0	0	1	0	0
8	0	0	0	0	0	1	0	0

2.3 Структура процесу моделювання

Насамперед, необхідно підкреслити, що в цьому процесі обов'язково беруть участь і взаємодіють один з одним суб'єкт, об'єкт дослідження і модель. У зв'язку із цим не можна забувати, що в більшості випадків моделям властива певна частка суб'єктивізму, оскільки практично в процесі дослідження доводиться мати справа не із самим об'єктом (системою), а з уявленнями про нього, тобто з його моделлю. Безумовно, у міру вдосконалювання моделі і наближення її до об'єкта об'єктивна сторона моделі стає переважної, відбувається поступовий рух від відносної до абсолютної істини.

Процес моделювання можна представити у вигляді наступних етапів [2]:

1. Постановка завдання.
2. Вибір і побудова моделі:
   а) вибір структури;
   б) математичний опис окремих блоків.
3. Дослідження моделі.
4. Перенос знань із моделі на оригінал, експериментальна перевірка моделі.

На першому етапі необхідно чітко усвідомити цілі, урахувати апріорні дані і, якщо необхідно, спостереження, експериментування. Дуже важливим прийомом є абстрагування і виділення яких-небудь сторін об'єкта, які в цьому випадку найбільше доцільно досліджувати і описати.

На другому етапі, насамперед, важливе усвідомлення загальної структурної схеми моделі. Тут більшу роль грають досвід, інтуїція, професіоналізм дослідника, тобто знання конкретних особливостей об'єкта. При побудові моделі більшу користь може принести використання принципу аналогій.

При недостатності знань про процес або великий вплив випадкових факторів метод аналогій повинен сполучатися із установленням зв'язків шляхом експерименту, наприклад, з використанням функціонального підходу або різних конкретних методів математичного опису.

Третій етап також є дуже важливим, тому що при дослідженні моделі у

випадку достатнього наближення її до дійсності можуть бути отримані нові цікаві результати, наприклад, знайдені оптимальні сполучення параметрів, що раніше не спостерігалися на об'єкті. Перевірку відповідності моделі і оригіналу також доцільно здійснювати саме в цих оптимальних або критичних областях, оскільки вони сутужніше всього піддаються адекватному відбиттю в моделі.

Четвертий етап – експериментальна перевірка моделі – дуже тісно пов'язаний із двома попередніми. У процесі вдосконалювання моделі доводиться неодноразово переходити від одного етапу до іншому і навіть повертатися, наприклад, від останнього до другого або третього етапу.

Процес керування об'єктом за допомогою моделі можна розглядати як процес керування знанням або навчання моделі (рис. 2.2). Дослідник, маючи певні знання про об'єкт, будує перший варіант моделі M_0 і шляхом порівняння з експериментальними даними перевіряє відповідність моделі об'єкту. При необхідності ставляться спеціальні експерименти і на основі аналізу передвіщених $\bar{y}(t)$ і фактичних реакцій об'єкта $y(t)$, коректуються параметри або структура моделі.

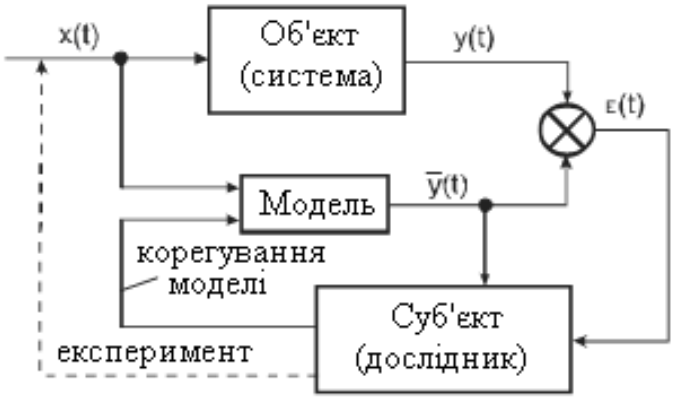


Рисунок 2.2 – Процес пізнання об'єкта за допомогою моделі

Такі цикли (суб'єкт – модель – об'єкт – суб'єкт), що становлять висхідний спіралеподібний процес пізнання, здійснюють доти, поки не буде отримана деяка модель M_1, що перебуває в задовільній відповідності з експериментальними даними про об'єкт.

Процес побудови моделі з використанням експерименту досить наочно

ілюструється структурною схемою, наведеної на рис. 2.3 [3].

Таким чином, моделювання можна розглядати як розгорнутий у часі процес експериментального дослідження, коректування або зміни моделей. Організація процесу моделювання аналогічна оптимальному керуванню, де критерієм оптимальності є співвідношення: втрати від помилкових рішень – витрата на ускладнення моделі.



Рисунок 2.3 – Процес побудови моделі з використанням експерименту

Більша цінність моделей як пізнавального засобу підкреслюється в цілому ряді робіт. На евристичний характер моделей, заданих у диференціальних рівняннях, указує, наприклад, В. В. Минів [4], що, будучи прихильником широкого застосування статистичних методів, у той же час визнає велике значення моделей із гносеологічної точки зору, відзначаючи, що модель повинна бути не тільки витонченої, але і змістовної. Вона повинна добре пояснювати відомі факти, виявляти нові, раніше непомічені явища, пророкувати їхній подальший

розвиток, і, що може бути саме головне, висувати перед дослідником нові проблеми. Він же підкреслює, що вихідні моделі у вигляді диференціальних рівнянь краще осмислюються, чим поліноміальні моделі.

У той же час необхідно відзначити, що в цілому ряді випадків для рішення практичних завдань доцільне використання поліноміальних моделей, побудованих, наприклад, з використанням експериментально-статистичних методів.

2.4 Складність моделей

Доцільність розгляду цього питання пов'язана з великою увагою, що приділяється в цей час керуванню багатомірними або так називаними складними системами. Насамперед, варто підкреслити відносність поняття «складна система». Справа в тому, що будь-яка система в принципі є нескінченно складної, тому що, якщо навіть атом невичерпний по складності, те наскільки ж складною системою є, наприклад, металевий розплав. У той же час досвідченому сталеварові або майстрові мартенівський або конвертерний процеси не представляються неймовірно складними, хоча вони і визначаються сполученнями практично нескінченної безлічі атомів і молекул. Тому що всі наші подання про систему є власне кажучи її моделлю, а не оригіналом, то, імовірно, більш доцільно говорити не про складності реальних систем, оскільки вона невичерпна, а про складності моделей.

Ступінь складності кожної конкретної моделі залежить від цілей і завдань, для яких вона будується, від рівня знань про процес і від правильності вибору того щабля ієрархії системи і її моделей, на якій потрібно зупинитися. Останнє в значній мірі залежить від дослідника, тобто в цьому процесі є певна частка суб'єктивізму. У зв'язку із цим нерідко система представляється більше складної, чим це потрібно і виправдано для досягнення поставленої мети, тобто порушуються принципи відповідності і конкретності. Оскільки неможливо в одній моделі вичерпати зміст всієї складної системи, то потрібно йти по шляху більше повного розкриття того її «зрізу», що необхідний у даних конкретних умовах [5, 6].

Це є відбиттям принципу множинності системних образів речей, що полягає в тім, що на різних стадіях дослідження або на різних щаблях науково-технічного прогресу ті самі речі (об'єкти) можуть розглядатися і використатися на різних рівнях складності. При цьому можна говорити про менш чи більш точні моделі об'єктів, маючи на увазі, що за кожною моделлю, що має яке-небудь об'єктивне значення, ховається деяка реальна підсистема досліджуваної системи, тобто мова моделей еквівалентна мові підсистеми. Тут проявляється діалектичний взаємозв'язок відносної і абсолютної істини. Рух пізнання від простого до складного розглядається як перехід від дослідження цілого до дослідження частин (аналіз), а потім знову до вивчення цілого, але на нової, більш змістовній і складній основі (синтез).

При побудові моделей складних систем велике значення має ідея переривчастості, на основі якої складні явища піддаються опису як закономірно складені із простих частин. Підкреслюючи переважну роль принципу переривчастості, слід зазначити, що при цьому не можна ігнорувати безперервність моделей як відбиття одного з важливих властивостей системності, що полягає в тім, що система не є проста сума складових її елементів. За рахунок взаємозв'язків і взаємодії елементів може бути отримане нова якість, не властиве кожному з них окремо.

Використовуючи принципи відповідності, конкретності і переривчастості в більшості випадків, принаймні, для систем керування окремими агрегатами, цехами й заводами можна побудувати розчленовані моделі, доступні для огляду як у цілому, так і для кожної зі структурних одиниць. Ніж складніше система, тим більше велику структурну одиницю потрібно розглядати на кожному щаблі ієрархії, а модель всієї системи може представлятися як система підмоделей. При цьому між структурними одиницями потрібно залишати лише мінімум дійсно необхідних зв'язків [6], з огляду на те, що усередині кожної із цих одиниць найчастіше тією чи іншою мірою існують самоорганізація, саморегулювання. Структурні одиниці необхідно вибирати таким чином, щоб найбільшою мірою використати властивість саморегулювання, роль якого в багатьох випадках

(особливо в людино-машинних системах) може бути підвищена шляхом використання принципів навчання і самонавчання.

Одна з можливих структурних схем моделі, побудованої з обліком відзначеного вище, наведена на рис. 2.4. Така модель може, наприклад, служити спрощеним аналогом системи керування металургійним заводом, для якої відзначається необхідність подання у вигляді децентралізованої ієрархічної системи і поділу на під об’єкт таким чином, щоб кожний з них мав якнайменше зв’язків з іншими.

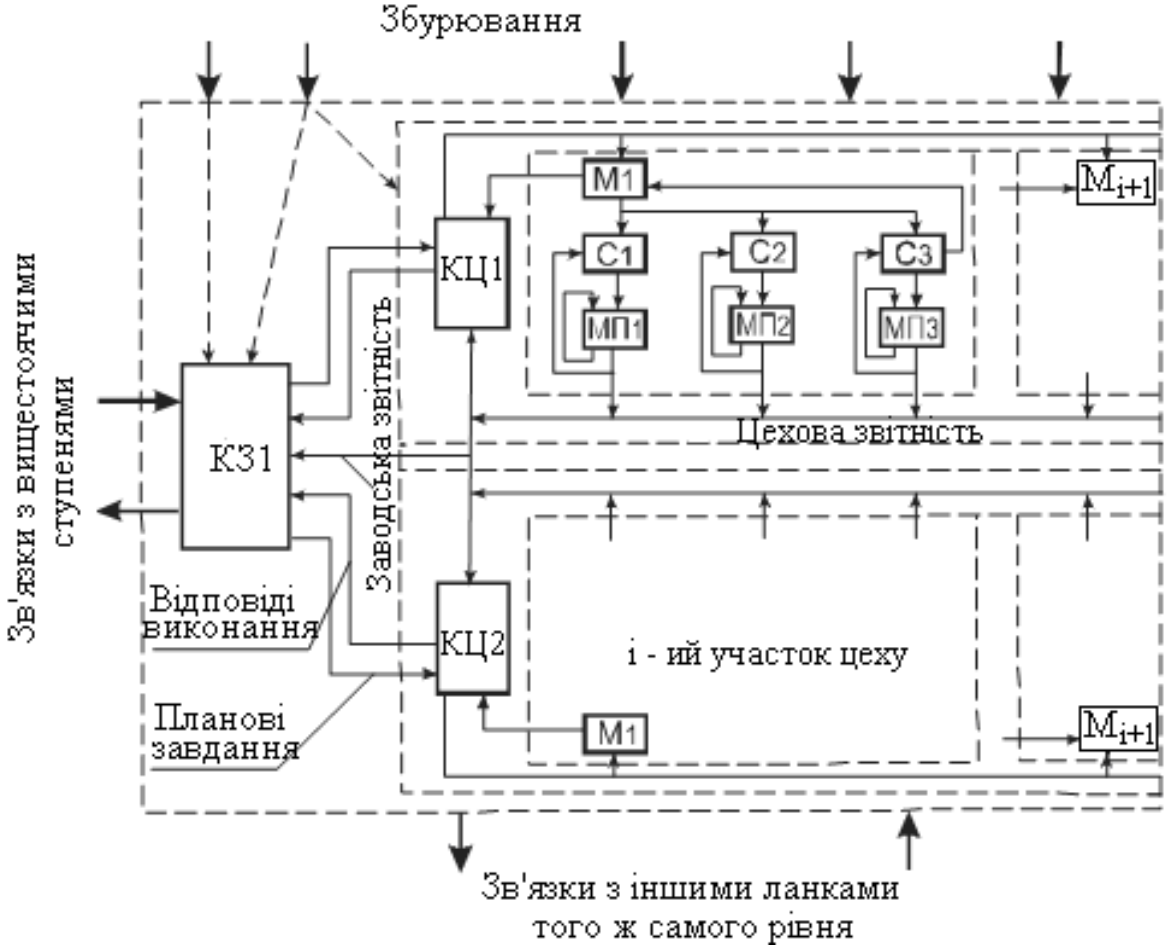


Рисунок 2.4 – Модель ієрархічної системи із самоорганізацією

Необхідно підкреслити те, що велике значення має саморегулювання системи. Кожна з підсистем, крім самих нижчих (процеси усередині агрегатів), замикається через людину, тому рівень саморегулювання й робота всієї системи в цілому в значній мірі залежать від кваліфікації керівників кожного з ланок

і наявності пристроїв, що полегшують аналіз інформації про роботу підвідомчих ланок. Відомо, що показники роботи, наприклад, різних майстрів і сталеварів для тих самих умов значно відрізняються. Причому діяльність керівника вищої ланки, наприклад, начальника зміни значно полегшується, якщо його підлеглі мають високу кваліфікацію і здатні самостійно приймати потрібні рішення.

Навіть для нижчої ланки цієї системи, у якості якого можна, наприклад, розглядати мартенівську піч $МП_i$, має місце явище саморегулювання, що виражається у тому, що при збільшенні швидкості зневуглецювання одночасно за рахунок кращого перемішування ванни зростає швидкість нагрівання металу, а в результаті збільшення окису вуглецю, що виділяється з ванни, відбувається гальмування процесу зневуглецювання за рахунок її дії, що екранує, і зменшення концентрації вільного кисню в газовій фазі. При цьому спостерігається в досить широких межах саморегулювання стосовно складу продуктів згоряння ($O_2 - 0,5CO$) на головці, що відводить, [1]. Більш ефективним є керування окисним потенціалом газової фази печі на основі математичної моделі з використанням аналізу продуктів згоряння лише як індикатор виходу за межі зони саморегулювання.

До незадовільних результатів може привести необґрунтоване втручання керуючої ланки (керівника) для щаблів більше високого рівня, що замикаються через людину, наприклад, часте втручання начальника цеху у функції майстра і сталевара. При цьому знижується рівень самоорганізації нижчестоящих ланок і системи в цілому.

Сталеварові C_i, що є разом з мартенівською піччю наступною ланкою системи керування, необхідно враховувати властивості печі як об'єкта з розподіленими параметрами: при визначенні готовності ванни до заливання чавуну, моменту розплавлювання, варіння шлаків і т.д. Із точки ж зору влучення в задані межі по змісту вуглецю і температурі найчастіше хід процесу спрощено можна розглядати як рух певної характерної точки в часі. Для забезпечення заданої швидкості протікання цього процесу сталевар повинен вибирати і під-

тримувати відповідний тепловий, окисний і шлаковий режим.

Майстер M_i, що стоїть на чолі наступної ланки керування, координує роботу печей своєї ділянки (блоку), а для кожної печі бере участь у прийнятті лише найбільш важливих рішень (визначення моменту початку доведення, дача присадок, розкислювачів).

Начальника цеху (зміни), що стоїть на чолі цехової системи керування $КЦ_i$ насамперед цікавить випуск заданих марок сталей за графіком. Конкретні ж рівні теплових навантажень, присадки і т.д. можуть цікавити його лише при аналізі аварійних випадків, порушеннях технології, контролі за підвищенням кваліфікації.

Керівництво заводу *КЗ* цікавлять ще більш укрупнені завдання, наприклад, виконання цехами добових завдань по виробництву і по якості продукції. У свою же чергу воно повинне забезпечувати цех сировиною, транспортом, робочою силою шляхом розподілу ресурсів усередині підвідомчої ланки (заводу), а також через зв'язки з вищестоящим щаблем і іншими подібними ланками (іншими підприємствами).

Безумовно, розглянута модель є спрощеної, тому що в дійсності є більше складні зв'язки між цехами і ділянками, а також випадкові впливи, що не залежать від даної системи, наприклад, погодні умови, зриви постачання і т.д. Однак процес удосконалювання цієї системи можна представити як підвищення рівня самоврядування у всіх ланках ієрархій, при цьому одночасно знижується невизначеність у прийнятті рішень (регулюючих впливів) для всієї системи в цілому.

Закінчуючи розгляд питання про складності систем і моделей, можна сказати наступне: якщо стояти на позиціях абсолютизації випадковості, то система здається дуже складною і не видно шляхів для її вдосконалювання; якщо йти по шляху поступового розкриття внутрішньої структури і встановлення причинно-наслідкових зв'язків, обмежуватися певним ступенем структурності і ієрархії, розглядати вивчення процесу із цілком певною конкретною метою, а не застосовність якого-небудь методу взагалі, то моделі більшості систем можна зроби-

ти помірковано складними і доступними для огляду.

Однак з існування принципу неповноти формалізованих систем не повинне випливати виводу про непізнаваність, про недоцільність математичного опису об'єктів. Справа лише у тому, що формалізований опис повинен доповнюватися природною людською мовою, що, до речі, необхідний також для побудови штучних формалізованих мов і їхнього застосування. При побудові математичних моделей, наприклад, металургійних об'єктів, існують такі сторони процесів, досить повна формалізація яких досить проблематична, у той час як для досвідченого оператора (сталевара, майстра і т.д.) оцінка стану і керування цими сторонами процесу не представляє особливих труднощів. Одним з таких прикладів може служити процес наведення шлаків, математичний опис якого надзвичайно утруднено, у той час як практично це питання тією чи іншою мірою вирішується.

Слід зазначити, що в ряді випадків (принаймні стосовно до металургійних агрегатів і цехів) повне усунення людини із системи керування найближчим часом неможливо і недоцільно. Для полегшення ж праці і підвищення ефективності керування в цих випадках необхідне застосування пристрою для переробки, згортання і подання інформації в зручному для сприйняття виді.

Питання для самоконтролю

1. Дайте визначення поняттю «моделювання».
2. Дайте визначення поняттю «модель».
3. Якими можуть бути моделі?
4. Призначення і функції моделей.
5. Приведіть приклади математичних моделей.
6. Класифікація моделей по ступені невизначеності.
7. Моделі імітації і оптимізації.
8. Етапи процесу моделювання.
9. Складність моделей.
10. Ідеї відповідності, конкретності та переривчастості при побудові моделей складних систем.
11. Значення саморегулювання системи.

3 ТЕОРІЯ ПОДОБИ

3.1 Ізоморфізм. Подоба. Аналогія

Ізоморфізм і гомоморфізм - поняття, що характеризують відповідність між структурами об'єктів [7].

Ізоморфізм (ізоморфний – однаковий за формою) є однозначна відповідність між двома множинами яких-небудь елементів або об'єктів. Нехай дані безлічі $M = \{m\}$ і $M' = \{m'\}$, а також множини відносин $F = \{f\}$ для М и $F' = \{f'\}$ для M'. Якщо між елементами множин M и M', а також між відносинами F і F' можна встановити такі однозначні співвідношення $m \leftarrow \rightarrow m'$, $f \leftarrow \rightarrow f'$, що з виконання співвідношень f для яких-небудь елементів множини M треба виконання співвідношень f' для відповідних елементів множини M' і зворотно, то множини M і M' ізоморфні, тобто при ізоморфізмі зберігається система співвідношень F. Усякій властивості множини M відповідає аналогічна властивість множини M'. Повний ізоморфізм може бути лише між геометричною фігурою і її аналітичним вираженням у вигляді формули. Однак, з огляду на те, що ізоморфізм пов'язаний не з усіма, а лише з деякими фіксованими в пізнавальному змісті властивостями, можна за рахунок вибору відповідних структурних елементів одержати близькі до ізоморфного відносини і для реальних об'єктів.

Гомоморфізм (гомоморфний – подібний за формою) відрізняється від ізоморфізму тим, що відповідність між множинами M и M' не є однозначною, один елемент множини M може відповідати багатьом елементам множини M'. Прикладом гомоморфної моделі є географічна карта стосовно місцевості, заміна небесного тіла матеріальною точкою, представлення динаміки зміни змісту вуглецю або температури металу в сталеплавильній ванні у вигляді траєкторії руху точки в часі (модель із зосередженими параметрами). На відміну від цього модель із розподіленими параметрами, що враховує граничні умови і розподіл фізичних властивостей металевої ванни не тільки в часі, але і у просторі, перебуває в більшій відповідності із принципами ізоморфізму.

Аналогія – установлення подібності в деяких сторонах, якостях і відно-

синах між нетотожними об'єктами. Найбільш характерна схема умовиводу за аналогією така: об'єкт *А* має ознаки *а, б, з, д;* об'єкт *В* має ознаки *а, б*, *з*, отже об'єкт *В,* можливо, має ознаку *д.* Як видно із цього визначення, аналогія не є строгим доказом подібності об'єктів; для цієї мети необхідно використовувати інші методи, які будуть розглянуті нижче.

Аналогія ж, будучи потужним генератором ідей, здатна стрибком виводити думку на нові щаблі пізнання, відіграючи роль компаса, який вказує проблеми. На думку багатьох учених велика частина знань у світі отримана з використанням методу аналогій. Так, незважаючи на те, що у фізиків є досить строгі математичні описи, що займають десятки друкованих сторінок, більшу евристичну роль зіграла запропонована Нільсом Бором модель збудженого ядра атома у вигляді підігрітої краплі, в основу якої покладена аналогія між радіоактивністю і випаром. При дослідженні металургійних процесів велику роль грають холодні гідравлічні моделі (наприклад, продувка рідини повітрям), хоча кількісні докази ступеня їхньої відповідності реальним процесам у багатьох випадках є досить скрутними.

Як ми вже відзначали, моделювання є відтворення характеристик об'єкта на іншому об'єкті, спеціально створеному для їхнього вивчення. Між моделлю і об'єктом повинне існувати відома подоба. Вона може полягати або в подібності фізичних характеристик моделі і об'єкта, або функцій, виконуваних моделлю і об'єктом, або тотожності математичного опису поводження об'єкта і моделі. Визначенням ступеня відповідності між моделлю і об'єктом займається теорія подоби, що формує критерії (числа) подоби.

3.2 Основи теорії подоби

Теорія подоби поряд з рішенням практичних завдань визначення ступеню відповідності моделі і об'єкта значною мірою відіграє роль методологічної бази моделювання. Ця сторона питання і найтісніший зв'язок теорії подоби з моделюванням (у тому числі математичним) дуже вдало відбиті в книзі В. А. Венікова [7].

Розглянемо основні положення і поняття цієї теорії, у тому числі три теореми подоби і два дуже важливих, з погляду практики побудови моделей, додаткові положення. Перемінні, що характеризують зміни стану процесу в часі або просторі, будемо називати параметрами процесу. Ці процеси протікають у системі, що складається з елементів, які характеризуються своїми параметрами, називаними параметрами системи Процеси (явища) вважаються подібними один одному, якщо існує деяка відповідність подібних величин розглянутих систем: положення точок, геометричних розмірів і т.д., тобто параметрів систем і параметрів процесів. На практиці звичайно мають справу з наближеним, а не з абсолютною подобою, тобто системи вважаються подібними, якщо подібні найбільш істотні з погляду поставленого завдання процеси. Звичайно співвідношення подоби мають такий вигляд:

$$\frac{P_i}{R_i} = m_i, \tag{3.1}$$

де P_i і R_i – подібні параметри процесів і елементів розглянутих систем;

m_i – коефіцієнт подоби або масштаб подібних параметрів.

Перша теорема. Явища, подібні в тім або іншому значенні (фізично, математично, кібернетично і т.д.), мають деякі однакові сполучення параметрів, які називають критеріями подоби. Наприклад, вивчаються два процеси, що описуються рівняннями, члени яких є однорідними функціями параметрів або їхніх похідних:

для першого процесу

$$\varphi_1 + \varphi_2 + \ldots + \varphi_n = \sum_{i=1}^{N} \varphi_i = 0, \tag{3.2}$$

де $\varphi_i = f(P_1, P_2, \ldots, P_m)$; (3.3)

для другого процесу

$$\Phi_1 + \Phi_2 + \ldots + \Phi_n = \sum_{i=1}^{N} \Phi_i = 0, \tag{3.4}$$

де $\Phi_i = f(R_1, R_2, \ldots, R_m)$... (3.5)

Рівняння (3.2) і (3.4) можна привести до безрозмірного виду розподілом на n-й член

$$1+\frac{\varphi_1}{\varphi_n}+\frac{\varphi_2}{\varphi_n}+...+\frac{\varphi_{n-1}}{\varphi_n}=\sum_{i=1}^{n-1}\frac{\varphi_i}{\varphi_n}=0; \qquad (3.2а)$$

$$1+\frac{\Phi_1}{\Phi_n}+\frac{\Phi_2}{\Phi_n}+...+\frac{\Phi_{n-1}}{\Phi_n}=\sum_{i=1}^{n-1}\frac{\Phi_i}{\Phi_n}=0. \qquad (3.4а)$$

Оскільки процеси подібні, то між подібними параметрами існують співвідношення

$$P_1=m_1\cdot R_1;\ P_2=m_2\cdot R_2;\ ...;\ P_m=m_m\cdot R_m \qquad (3.6)$$

Після підстановки цих співвідношень у рівняння (3.3) можна внаслідок однорідності функції φ винести масштаби m_1, m_2...., m_m у відповідних ступенях за знак функції у вигляді загального множника:

$$\varphi_i=f\left(P_1,...,P_m\right)=f\left(m_1\cdot R_1,...,m_m\cdot R_m\right)=N_i f\left(R_1,...,R_m\right)=N_i\cdot\Phi_i, \qquad (3.7)$$

або $\varphi_i=N_i\cdot\Phi_i$. (3.8)

При підстановці вираження (3.8) у формулу (3.2а) одержимо

$$1+\frac{N_1}{N_n}\cdot\frac{\Phi_1}{\Phi_n}+\frac{N_2}{N_n}\cdot\frac{\Phi_2}{\Phi_n}+...+\frac{N_{n-1}}{N_n}\cdot\frac{\Phi_{n-1}}{\Phi_n}=0. \qquad (3.2\ б)$$

Внаслідок однорідності рівняння (3.2) загальні множники N_i для кожного члена φ_i рівні, тобто

$$N_1=N_2=...=N_{n,}\ \frac{N_1}{N_n}=\frac{N_2}{N_n}=...=\frac{N_{n-1}}{N_n}=1, \qquad (3.9)$$

Отже, рівняння (3.2 б) і (3.4 а) виявляються тотожними, а між відповідними членами рівнянь (3.2 а) і (3.4 а) існують співвідношення:

$$\frac{\varphi_1}{\varphi_n} = \frac{\Phi_1}{\Phi_n}; \ldots; \frac{\varphi_{n-1}}{\varphi_n} = \frac{\Phi_{n-1}}{\Phi_n}. \qquad (3.10)$$

Узагальнюючи на *S* подібних процесів, одержуємо

$$\frac{\varphi_i^{(1)}}{\varphi_n^{(1)}} = \frac{\varphi_i^{(2)}}{\varphi_n^{(2)}} = \ldots = \frac{\varphi_i^{(s)}}{\varphi_n^{(s)}} = \text{idem}, \qquad (3.11)$$

де *idem* означає «відповідно однаково для всіх розглянутих процесів».

Критерії або числа подоби – відносини членів рівняння, що представляють собою безрозмірні комбінації параметрів, чисельно однакові для всіх подібних процесів.

Позначаючи критерій через π, одержуємо коротке формулювання першої теореми: у всіх подібних процесів π = *idem*. Це достатня умова існування подоби.

Розглянутий спосіб знаходження чисел подоби заснований на аналізі рівнянь процесів.

Друга теорема (π-теорема). Вона говорить: усяке повне рівняння фізичного процесу, записане в певній системі одиниць, може бути представлено залежністю між числами подоби, тобто рівнянням, що зв'язує безрозмірні величини, отримані з параметрів, які беруть участь у процесі.

Можна здійснити заміну перемінних, скоротивши їхнє число з *m* розмірних величин до *m* - *k* безрозмірних (запис у критеріальної формі). При цьому досить спрощується обробка аналітичних і експериментальних досліджень.

Перехід до безрозмірних співвідношень (до зв'язків між критеріями) дозволяє поширити результати, отримані при дослідженні конкретного процесу, на ряд подібних процесів, тобто відкривається можливість узагальнень. Причому можна знаходити критеріальні співвідношення, не маючи математичного опису процесу у вигляді рівняння, а знаючи тільки всі величини, що впливають, та їхню розмірність.

Наприклад, зв'язки між параметрами процесу і параметрами елементів

системи, у якій він протікає, можна представити в такий спосіб:

$$\left(P_1, P_2, ..., P_i, ..., P_k, ..., P_s, ..., P_m\right) = 0, \qquad (3.12)$$

де $1 \le i \le k$; $k+1 \le s \le m$.

Ця залежність називається повною, якщо вона враховує всі зв'язки між вхідними до неї величинами. Тоді вона не міняється при будь-якому значенні одиниць виміру фізичних величин. Це правило порушується, якщо рівняння відображає не всі зв'язки між перемінними, а тільки деякі частки залежності, справедливі за певних умов. Наприклад, для якоїсь частки випадку можна записати рівняння в наступному виді:

$$\left(P_1, P_2, P_3, k\right) = 0, \qquad (3.13)$$

де $k = const$.

Це неповне рівняння, що залежить від системи одиниць, можна перевести в повне, якщо розкрити функціональний зв'язок

$$k = f_1\left(P_4, ..., P_m\right).$$

Як приклад можна привести рівняння Гей-Люсака $V = k \cdot T$, що є неповним, якщо під k розуміти деяку постійну чисельну величину. Воно перейде в повне, якщо розкрити залежність k від тиску p і універсальної газової постійної R:

$$V = n\frac{R}{p}T.$$

π-теорема відноситься тільки до процесів, які відображаються повними рівняннями і записаними в певній системі одиниць. Покажемо, що відповідно до цієї теореми можна перейти від залежності між фізичними величинами (вихідними змінними) до залежності між критеріями.

Оскільки рівняння (3.12), по попередньому допущенню, повне і однорідне, те всі вхідні до нього параметри можна виразити у відносних величинах, у част-

ках від деяких обраних величин $P_{01}, P_{02}, ..., P_{0k}$, *що* мають ті ж розмірності, що і $P_1, P_2, ..., P_m$.

Тоді рівняння (3.12) можна записати в такий спосіб:

$$f\left(\frac{P_1}{P_{01}}, \frac{P_2}{P_{02}}, ..., \frac{P_k}{P_{0k}}, ..., \frac{P_s}{P_{0s}}, ..., \frac{P_m}{P_{0m}}\right) = 0. \qquad (3.14)$$

Не всі величини $P_{01}, P_{02}, ..., P_{0m}$ можна вибирати довільно. Наприклад, вибравши величини, що вимірюють струм і напругу, не можна незалежно вибрати величини, що вимірюють потужність і опір. Можна визначити, яке число незалежних величин $P_{01}, P_{02}, ..., P_{0k}$ вибирається із загальної безлічі $P_{01}, P_{02}, ..., P_{0m}$ і знайти спосіб вибору інших, розглянувши формули розмірностей цих величин, що входять у зазначене співвідношення.

Оскільки k незалежних величин P_0 вибираються довільно, те можна прийняти, що $P_{01} = P_1; P_{02}=P_2; P_{0k} = P_k$. Тоді (3.14) приймає вид

$$f_1(1, 1, ..., \pi_1, \pi_{s-k}, \pi_{m-k}) = 0, \qquad (3.15)$$

або

$$f_2(\pi_1, ..., \pi_{s-k}, \pi_{m-k}) = 0, \qquad (3.16)$$

де $\pi_1, \ldots, \pi_{m-k}$ – числа подоби.

Це рівняння відповідає формулюванню другої теореми подоби, представляючи зв'язок між m-k числами подоби замість m вихідних параметрів.

Воно може бути вирішено щодо одного із чисел подоби

$$\pi_1 = \Phi(\pi_2, \pi_3, ..., \pi_{m-k}). \qquad (3.17)$$

Співвідношення такого виду (математичне формулювання π-теореми) називається критеріальним рівнянням, яке показує, що одне з (m-k) чисел подоби є функцією інших (m-k–1). Залежний критерій при дотриманні незалежних виконується автоматично.

Третя теорема формулює умови, необхідні і достатні для практичної реалізації подоби. Вона затверджує: для подоби явищ повинні бути відповідно однаковими визначальні числа подоби (утримуючі незалежні параметри процесів і систем) і подібні умови однозначності (параметри і залежності, що виділяють дане явище із усього різноманіття явищ даного виду).

Подоба складних систем. Подоба складних систем ($A \cong B$), що складаються з декількох підсистем відповідно подібних окремо *($a' \cong b'$; $a'' \cong b''$),* забезпечується подобою всіх подібних елементів, що є загальними для підсистем (рис. 3.1). Або в іншому формулюванні: дві незалежні підсистеми *(a', a'')* окремо подібні двом іншим системам (*b'*, *b''),* будучи схожо з'єднані один з одним через треті системи (*c*, *d),* утворять дві нові складні системи *(A, B),* які будуть подібні, якщо тільки з'єднуючі системи подібні один одному (*c* подібна *d).*

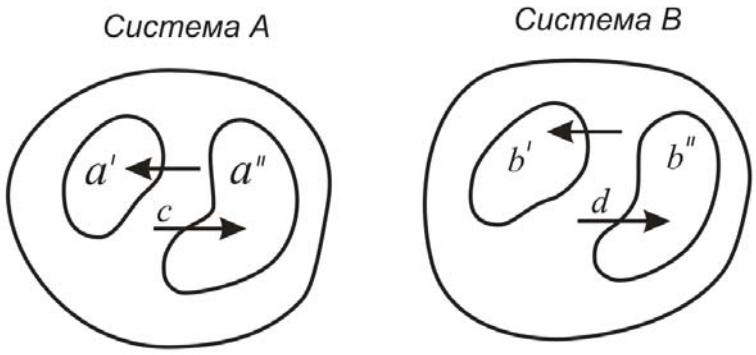
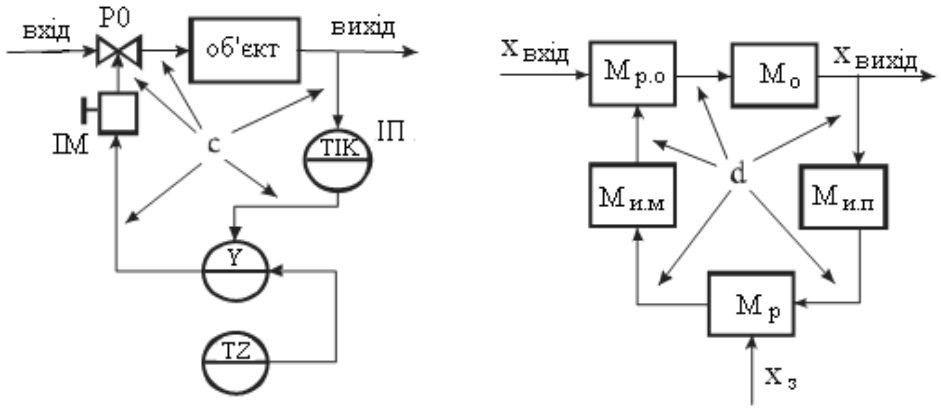


Рисунок 3.1 - Подоба складних систем

Наприклад, якщо є з однієї сторони реальна система автоматичного регулювання (рис. 3.2 а), з іншого боку – моделі об'єкта M_o, вимірювального приладу $M_{u.n}$, виконавчого механізму $M_{u.м}$, регулятора M_p і регулювального органу $M_{p.o}$, то, з'єднавши їхній схожим способом, одержимо модель системи автоматичного регулювання (рис. 3.2 б).

Подоба при імовірнісному характері досліджуваних явищ. Всі теореми, що відносяться до детермінованих систем, будуть справедливі для випадків з імовірнісним характером досліджуваних явищ при дотриманні певних умов.



а) б)

Рисунок 3.2 - Синтез структури моделі на основі положення про подобу складних систем

Повинні бути однаковими щільності ймовірностей для схожих параметрів, представлених у вигляді відносних характеристик, а також математичні очікування і дисперсії (з урахуванням масштабів). Додатковою умовою подоби є вимога фізичної реалізованості схожої кореляції між стохастичне заданими параметрами, що входять в умови однозначності.

Наприклад, кореляція між витратами газоподібного палива і повітря, що подаються в нагрівальну піч, цілком з'ясовна фізично, оскільки для спалювання одиниці об'єму газу потрібен певний об'єм повітря (за умови повного змішання і допалювання).

Питання для самоконтролю

1. Дайте визначення поняттю «гомоморфізм».
2. Дайте визначення поняттю «ізоморфізм».
3. Між чим може бути повний ізоморфізм
4. Приведіть приклади ізоморфної моделі.
5. Приведіть приклади гомоморфних моделей.
6. Що таке аналогія?
7. Приведіть найбільш характерну схему умовиводу за аналогією.
8. Чи є аналогія строгим доказом подібності об'єктів?
9. У чому може полягати подоба між моделлю і об'єктом?
10. Умови подоби процесів або явищ.
11. Перша теорема подоби.
12. Друга теорема подоби.
13. Третя теорема подоби.
14. Подоба складних систем.
15. Подоба при імовірнісному характері досліджуваних явищ.

4 МАТЕМАТИЧНИЙ ОПИС НА ОСНОВІ ФІЗИЧНИХ ЗАКОНІВ

В кожному металургійному агрегаті протікає складний комплекс взаємозалежних фізико-хімічних перетворень: зміна агрегатного стану речовин, хімічні реакції, масо - і теплопередачі, механічний рух потоків (гідродинаміка), змішання і витиснення і т.д. Успіх створення адекватної математичної моделі для конкретного металургійного процесу (агрегату) у значній мірі визначається з однієї сторони правильним розкриттям механізму цих процесів і структури їхніх взаємозв'язків, з іншого боку - адекватним описом закономірностей елементарних процесів.

4.1 Математичний опис термодинамічних закономірностей

З використанням законів термодинаміки можна вирішувати дві дуже важливі для металургії групи завдань [2]:

- Перша група пов'язана зі складанням енергетичних балансів. Прикладом такого завдання може служити розрахунок підвищення температури стали в конвертері при продувці киснем за даними про теплові ефекти реакцій окислювання заліза, кремнію, а також про теплоємність металу.
- Друга група завдань пов'язана з визначенням характеристик рівноваги, у тому числі напрямку і повноти протікання процесів. Як приклад тут можна розглянути розрахунок виходу реакції відновлення оксиду заліза воднем, що має місце в доменних печах, особливо, в агрегатах прямого відновлення заліза з руд на заводах бездоменної металургії:

$$FeO(т) + H_2(г) = Fe(т) + H_2O(г).$$

Ця реакція не доходить до повного перетворення *FeO* в *Fe* і H_2 у H_2O, а припиняється при досягненні певного співвідношення між концентраціями водяної пари і водню в газовій суміші і відносини *FeO*/*Fe*, що і визначає ступінь відновлення при даній температурі [2, 8].

Розглянуті завдання, що є предметом хімічної термодинаміки, засновані на двох фундаментальних законах природи – першому і другому початках термодинаміки. Ці закони є емпіричними. Пізніше за допомогою статистичної фізики, у тому числі – кінетичної теорії газів, удалося встановити зв'язок цих законів з характеристиками атомно-молекулярного стану речовини. Перш ніж перейти до опису законів термодинаміки, конкретизуємо введене раніше (розділ 1) поняття системи.

Система – сукупність тіл, фактично або подумки виділювана з навколишнього середовища. Якщо система має постійний об'єм і енергію, вона називається ізольованої. Така система не може обмінюватися з навколишнім середовищем речовиною або енергією. Більшість реальних металургійних систем, природно, не є ізольованими. Стан системи визначається сукупністю таких параметрів як об'єм, тиск, температура, концентрація та ін.

4.1.1 Перший закон термодинаміки

Рух є формою існування матерії. Різним видам руху відповідають і різні види енергії, що є мірою руху. Як випливає із закону збереження енергії, при взаємних перетвореннях енергія не втрачається і не створюється знову. Стосовно до законів механіки це виражається в сталості суми кінетичної і потенційної енергій в ізольованих системах. При складанні ж балансів для теплових явищ необхідно враховувати три складові – роботу, внутрішню енергію і тепло [2].

Величина елементарної роботи δA, чиненої, наприклад, при переміщенні поршня, дорівнює добутку сили F на переміщення dl

$$\delta A = F \cdot dl . \qquad (4.1)$$

Якщо поверхня розглянутої системи дорівнює S, а діюче на неї тиск p, то $F = p \cdot S$ і $\delta A = p \cdot S \cdot dl$.

Тому що $S \cdot dl = d$, де V – об'єм системи, то

$$\delta A = p \cdot dV . \qquad (4.2)$$

Робота для кінцевого, неелементарного процесу виражається визначеним інтегралом

$$A = \int_{V1}^{V2} p \cdot dV . \qquad (4.3)$$

де *V1* і *V2* – початковий і кінцевий об'єми, відповідно.

Для визначення роботи необхідно знати зв'язок між параметрами *p* і *V,* який повинен бути заданий у вигляді рівняння стану *f*(*p, V, T*) = 0, що для ідеального газу має вигляд:

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T , \qquad (4.4)$$

де *n* – число молів газу в об'ємі *V;*
R – універсальна газова постійна, *R* = 8,314 Дж/(моль·К);
T – абсолютна температура, К.

Після підстановки значення *p* з рівняння (4.4) у рівняння (4.3) можна зробити інтегрування останнього з урахуванням заданих умов. Наприклад, при ізотермічному розширенні *n* молей ідеального газу (*T* = *const*) одержуємо:

$$A = \int_{V1}^{V2} pdV = \int_{V1}^{V2} \frac{n \cdot R \cdot T}{V} dV = n \cdot R \cdot T \cdot \ln \frac{V2}{V1} . \qquad (4.5)$$

Процес протікає таким чином, що на будь-якій його стадії зберігається співвідношення (4.4), тобто складається із сукупності станів рівноваги. Такий процес, що нескінченно повільно протікає, можна уявити собі лише подумки, він називається оборотним.

Представимо газ, що робить роботу, знаходиться у теплонепроникному циліндрі з поршнем і є єдиним джерелом роботи. Тоді доцільно ввести поняття внутрішньої енергії *U.* При цьому робота відбувається за рахунок зменшення *U,* а газ охолоджується. Вільна енергія визначається кінетичною енергією молекул, що рухаються, потенційною енергією їхньої взаємодії, а також атомною енергією. Швидкості молекул (кінетична енергія) залежать від температури, а потенційна енергія взаємодії – від відстані між молекулами, тобто *U = f(T, V).*

Для ідеального газу, близьким до якого можна вважати стан будь-якого газу при досить малих тисках і високих температурах, енергія взаємодії між молекулами зневажливо мала в порівнянні з кінетичної, а їхній власний об'єм малий у порівнянні з усім об'ємом, займаним газом. Тому внутрішня енергія такого газу не залежить від об'єму $(\partial U / \partial V)_T = 0$.

Для реальних же газів при зміні об'єму змінюється і потенційна енергія, тобто $(\partial U / \partial V)_T \neq 0$. Розширення газів звичайно супроводжується їхнім охолодженням, тому що необхідні витрати енергії на подолання притягання між молекулами.

Внутрішня енергія на відміну від роботи є функція стану, вона однозначно визначається його параметрами і не залежить від шляху процесу, тобто диференціал внутрішньої енергії d є повним

$$\partial \mathrm{U} = \left(\frac{\partial \mathrm{U}}{\partial \mathrm{T}}\right)_{\mathrm{V}} \mathrm{dT} + \left(\frac{\partial \mathrm{U}}{\partial \mathrm{T}}\right)_{\mathrm{T}} \mathrm{dV}\,. \tag{4.6}$$

В ізольованих системах складові балансу визначаються лише внутрішньою енергією і роботою. У реальних же металургійних системах, які, як правило, не є ізольованими, енергія, що надходить ззовні, може витрачатися як на проведення роботи, так і на збільшення внутрішньої енергії системи (підвищення температури).

Між кількістю тепла q, що надходить у систему, роботою і зміною внутрішньої енергії існує співвідношення

$$q = dU + A \tag{4.7}$$

або для нескінченно малих приростів

$$\delta \mathrm{q} = \mathrm{dU} + \delta \mathrm{A}\,. \tag{4.8}$$

Ці співвідношення і є виразом першого закону термодинаміки, який говорить, що кількість тепла, отримана системою, дорівнює збільшенню її внутрішньої енергії і зробленої нею роботи. Залежно від характеру процесу зміни

внутрішньої енергії системи може по-різному розподілятися співвідношення між теплом і роботою, які не є функціями стану і залежать від шляху процесу.

Конкретизуємо рівняння (4.8) для ряду типових процесів.

При ізотермічному розширенні ідеального газу, робота якого описується рівнянням (4.5), $d = 0$, а $\delta q = \delta A$, тобто усе тепло, що додається до системи, перетворюється в роботу $q = A$.

При ізохоричному процесі $V = const$, а $\delta A = pd = 0$, тобто робота не відбувається зовсім і $\delta q = d$ або

$$q_V = U_2 - U_1 = \Delta U , \tag{4.9}$$

тобто усе тепло, яке додається до системи, йде тільки на збільшення внутрішньої енергії, обумовлене співвідношенням

$$dU = c_V dT , \tag{4.10}$$

де c_V – мольна теплоємність при постійному об'ємі.

При ізобаричному процесі ($p = const$), з огляду на те, що $\delta A = p \cdot d$, з рівняння (4.8) одержуємо

$$\delta q_p = dU + d(p \cdot V) = d(U + p \cdot V) . \tag{4.11}$$

Таким чином, тепло, що надається системі, витрачається на збільшення функції ($U + p$), яка називається ентальпією і визначається тотожністю

$$H = U + p \cdot V . \tag{4.12}$$

Тоді рівняння (4.11) приймає вид

$$\delta q_P = dH , \tag{4.13}$$

тобто зміна ентальпії еквівалентно зміні кількості тепла в системі при постійному тиску, а для кінцевого процесу

$$q_P = H_2 - H_1 = \Delta H . \tag{4.14}$$

На основі співвідношення (4.13) можна одержати вираження для мольної теплоємності при постійному тиску

$$c_P = \lim_{\Delta T \to 0}\left(\frac{\delta q_P}{\Delta T}\right) = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P, \qquad (4.15)$$

а також виразити ентальпію через теплоємність

$$dH = c_P \cdot dT. \qquad (4.16)$$

Зі співвідношень (4.10) - (4.12) можна одержати і інше вираження для ентальпії

$$dH = c_V dT + pdV. \qquad (4.17)$$

З порівняння двох останніх виражень можна зробити цікавий вивід, що мольна теплоємність при постійному тиску більше теплоємності при постійному об'ємі на величину роботи розширення одного моля газу при нагріванні його на 1 К, а, з огляду на те, що $p = RT$, доручаємо співвідношення

$$c_P - c_V = R, \qquad (4.18)$$

яке послужило основою для експериментального визначення газової постійної.

Докладний аналіз представлених вище термодинамічних співвідношень наведений не тільки через важливість першого закону термодинаміки як такого, але, що не менш важливо, у зв'язку з метою нашого посібника, і тому, що тут ми маємо дуже гарний приклад для ілюстрації принципів математичного опису з використанням фізичних законів. Крім того, введене в цьому розділі поняття ентальпії є основою термодинамічних розрахунків.

4.1.2 Термохімічні розрахунки

З першого закону термодинаміки випливає ряд важливих наслідків, два з яких носять назви законів Геса і Кірхгофа. Перший з них дозволяє визначати теплоту однієї з реакцій за теплотою інших (проміжних) реакцій або теплоту даної реакції за теплотою утворення речовин, що беруть участь у ній. Другий дає можливість ураховувати залежність теплових ефектів реакцій від температури.

Закон Геса формулюється в такий спосіб: тепловий ефект хімічної реакції не залежить від шляху реакції (характеру проміжних продуктів), а залежить від природи (внутрішньої енергії) вихідних і кінцевих речовин і їхніх станів [2, 9].

Якщо реакція протікає при постійному тиску, то тепловий ефект визначається різницею ентальпій у кінцевому і початковому стані. Тоді математичне формулювання закону Геса виглядає у такий спосіб:

$$\Delta H^0_{\text{реакции}} = \sum_{i=1}^{n} b_i \cdot \Delta H^0_{i,\text{кон}} - \sum_{j=1}^{m} a_j \cdot \Delta H^0_{j,\text{исх}}\ , \qquad (4.19)$$

де a_j, b_i – стехіометричні коефіцієнти при вихідних і кінцевих речовинах, які беруть участь у реакції;

$\Delta H^0_{i,\text{исх}}, \Delta H^0_{i,\text{кон}}$ – стандартні теплоти (ентальпії) утворення вихідних і кінцевих речовин (у спеціальній літературі використається позначення ΔH^0_{298}).

Є таблиці стандартних ентальпій утворення для багатьох широко розповсюджених з'єднань (речовин). Дані, наведені в цих таблицях, являють собою ентальпії утворення одного моля речовини при строго фіксованих умовах: T=298 К (25 °С) і p =100 кПа. Знак «мінус» перед величиною ΔH означає, що реакція супроводжується зменшенням ентальпії системи, тобто виділенням тепла. Знак «плюс» відповідає ендотермічній реакції.

Закон Геса дає можливість визначати теплові афекти реакцій, у тому числі таких, які не піддаються безпосередньому виміру, якщо відомі стандартні ентальпії речовин, що беруть участь у них, або проміжних реакцій. У зв'язку з

тим, що при цих розрахунках нас цікавлять не абсолютні значення ентальпій, а їхнє збільшення, то ентальпії утворення елементів прийнято вважати рівними нулю.

Розглянемо приклад визначення теплового ефекту складної реакції по теплових ефектах простих реакцій. Як випливає із закону Геса

$$\Delta H^0_{\text{складної реакції}} = \sum_{i=1}^{n} \Delta H^0_i , \qquad (4.20)$$

де ΔH^0_i - тепловий ефект (ентальпія) *і-тої* простої (проміжної) реакції.

Наприклад, при окислюванні графіту неможливо одержати чистий оксид вуглецю без домішки діоксиду і, отже, виміряти теплоту реакції *С (*т) + *0,5* O_2 *(*г) = *СО (*г). Але цю реакцію можна одержати як суму доступних для виміру реакцій повного горіння графіту і допалювання оксиду вуглецю

$$\begin{aligned}
&\mathrm{C}(\textit{т}) + \mathrm{O_2}(\textit{г}) = \mathrm{CO_2}, && \Delta H = -393{,}5 \text{ кДж};\\
&\mathrm{CO_2}(\textit{г}) = \mathrm{CO}(\textit{г}) + 0{,}5 \cdot \mathrm{O_2}(\textit{г}), && \Delta H = +283{,}0 \text{ кДж};\\
&\text{---------------------------------------} &&\\
&\mathrm{C}(\textit{т}) + 0{,}5 \cdot \mathrm{O_2}(\textit{г}) = \mathrm{CO}(\textit{г}), && \Delta H = -110{,}5 \text{ кДж}.
\end{aligned}$$

Реакція допалювання оксиду вуглецю записана тут у зворотному напрямку з відповідною зміною знака величини *ΔН,* що дозволило чисто формально одержати потрібну результуючу реакцію і розрахунковим шляхом знайти її тепловий ефект [10, 11].

Реакції в металургійних агрегатах протікають при високих температурах. У зв'язку із цим необхідно знать закон зміни *ΔН* у залежності від температури. З визначення теплоємності рівняння (4.15) можна записати у вигляді

$$\frac{d\Delta H}{dT} = \Delta c_P , \qquad (4.21)$$

або

$$\frac{d\Delta H}{dT} = \sum_{i=1}^{n} c_{P,\,i,\,\text{кон}} - \sum_{j=1}^{m} c_{P,\,j,\,\text{исх}} . \qquad (4.22)$$

Це співвідношення і є диференціальною формою рівняння Кірхгофу, що після інтегрування для визначеного діапазону температур приймає вид

$$\Delta H_{T2} = \Delta H_{T1} + \int_{T1}^{T2} \Delta c_P dT \,. \qquad (4.23)$$

Необхідно знати також залежності теплоємності всіх речовин, що беруть участь у реакції, від температури, що для діапазону температур від кімнатної до температури плавлення описуються звичайно емпіричними статечними поліномами виду:

$$c_P = \gamma_0 + \gamma_1 \cdot T + \gamma_2 \cdot T^2 + \ldots, \qquad (4.24)$$

де γ_0, γ_1, γ_2, … - емпіричні коефіцієнти.

Таким чином, перший закон термодинаміки і наслідки, що випливають із нього, стосовно до металургійних агрегатів і процесів дозволяють описувати широке коло завдань, пов'язаних зі співвідношеннями приходу і витрати енергії, у тому числі з урахуванням взаємних переходів одного виду енергій в іншій.

Наприклад, за допомогою системи рівнянь (4.19) – (4.24) можна визначати теплові ефекти окислювання домішок у доменні і феросплавних печах, конвертерній або мартенівській ванні і розраховувати підвищення температури ванни в результаті цього. Однак не слід забувати, що оскільки металургійні агрегати, не будучи замкнутими системами, обмінюються з навколишнім середовищем речовиною і енергією і володіють розподіленням параметрів, при виконанні зазначених вище розрахунків доводиться робити цілий ряд допущень, значимість і правомірність яких можна оцінити лише для чітко зафіксованих конкретних умов.

4.1.3 Другий закон термодинаміки

Перший закон термодинаміки описує процеси взаємних переходів одних видів енергії в інші. Однак не менш важливими є завдання, пов'язані з визначенням напрямки і повноти протікання цих процесів [2]. Всі процеси, мимові-

льно протікають у природі, неухильно приходять до певного кінцевого стану рівноваги і без впливу ззовні не можуть повертатися в початковий стан. Цю спрямованість (необоротність) процесів і відображає другий закон термодинаміки, який говорить, що перехід тепла від менш нагрітого тіла до більше нагрітого не може відбуватися мимовільно. Для здійснення такого процесу необхідно затратити роботу.

Цей закон і необоротність природних процесів є наслідком атомно-молекулярної природи речовини і хаотичного характеру теплового руху часток.

Математичне формулювання другого закону термодинаміки приймає наступний вид:

$$\Delta S = \frac{q}{T}. \tag{4.25}$$

Отримане рівняння справедливо тільки для оборотних процесів, які протікають нескінченно повільно і не супроводжуються втратами енергії, а робота, чинена при цьому, є максимальною. При необоротних процесах робота A и тепло q завжди менше, ніж при оборотних. Зміна ж ентропії ΔS, що є функцією стану, не залежить від характеру процесу. Тому для необоротного процесу

$$\Delta S > \frac{q}{T}, \tag{4.26}$$

для будь-якого ізотермічного процесу

$$\Delta S \geq \frac{q}{T}, \tag{4.27}$$

а для нескінченно малих приростів

$$dS \geq \frac{\delta q}{T}, \tag{4.28}$$

В ізольованих системах $(\delta q = 0)$ ентропія може або залишатися постійною, або збільшуватися, останнє відноситься до необоротних процесів. При рівновазі ентропія досягає максимуму, а $dS = 0$. Це рівність і виражає умову рів-

новаги в ізольованих системах.

В основі співвідношень, використовуваних для пророкування напрямку процесів і розрахунку рівноваги хімічних реакцій за термодинамічним даними лежить рівняння

$$dS = \frac{\delta q}{T}, \tag{4.29}$$

використання якого можливо лише в припущенні, що процес може проходити в зворотному напрямку. Таке припущення не позбавлене підстав, наприклад, для процесу плавлення

$$\Delta S_{пл} = \frac{\Delta H_{пл}}{T_{пл}},$$

Для заліза теплота плавлення ΔH = 15062 Дж/моль, а температура плавлення $T_{пл}$ = 1812 К, тоді

$$\Delta S_{пл} = S(\boldsymbol{p}) - S(\boldsymbol{m}) = 15062/1812 = 8,368 \text{ Дж/(моль·К)}.$$

Таким чином, ентропія грам-молю рідкого заліза на 8,368 Дж більше, ніж твердого, що пов'язане з більшою невпорядкованістю розташування атомів.

Зі збільшенням температури хаотичність теплового руху молекул зростає, отже, збільшується і ентропія. Проінтегрував рівняння (4.29) для визначеного діапазону температур, одержимо співвідношення для розрахунку збільшення ентропії залежно від температури

$$\Delta S = \int_{T1}^{T2} \frac{\delta q}{T} = \int_{T1}^{T2} \frac{c_P}{T} dT. \tag{4.30}$$

Тут, як і в рівнянні Кірхгофа для ентальпії, потрібно знати залежності теплоємності c_p від температури, які представляються у вигляді поліномів.

З умови адитивності ентропії треба, щоб при хімічних реакціях зміна ентропії дорівнювала різниці ентропії продуктів реакції і вихідних речовин

$$\Delta S^0 = \sum_{i=1}^{n} b_i \cdot \Delta S^0_{i,\,кон} - \sum_{j=1}^{m} a_j \cdot \Delta S^0_{j,\,исх} \ , \qquad (4.31)$$

де всі індекси мають такий же зміст, як і в рівнянні (4.19) для ентальпії.

Для практичних додатків цікаво одержати залежність ентропії ідеального газу від параметрів станів (*p, V* і *T).* Зі спільного розгляду рівнянь першого (4.8) і другого (4.29) початків термодинаміки треба

$$T \cdot dS = dU + \delta A \ , \qquad (4.32)$$

а з огляду на те, що $dU = c_V dT$ і $\delta A = pdV$, одержуємо

$$dS = \frac{(c_V dT)}{T} + \frac{(pdV)}{T} .$$

Ентропія може служити для оцінки рівноваги в замкнутих системах. Однак більшість металургійних агрегатів працюють в умовах теплообміну з навколишнім середовищем. Для розрахунку рівноваги у цих умовах уводиться інша функція станів, що носить назву вільної енергії і пов'язана з поняттям чиненої роботи.

Перепишемо рівняння (4.32) у такий спосіб:

$$\delta A = TdS - dU \ .$$

Для ізотермічного процесу *T* можна ввести під знак диференціала

$$\delta A = -d(U - TS) \ . \qquad (4.33)$$

Таким чином, робота при оборотному ізотермічному процесі дорівнює збитку деякої функції стану *F,* обумовленої тотожністю $F \equiv U - TS$, тобто

$$\delta A = -dF \ . \qquad (4.34)$$

Тому що при необоротних процесах робота завжди менше максимальної, то

$$\delta A < -dF \ . \qquad (4.35)$$

У процесах, що протікають при постійному об'ємі, відсутня робота розширення ($\delta A = pd = 0$), а $d \le 0$, тобто вільна енергія може або залишатися постійної (оборотний процес) або тільки зменшуватися (необоротний процес). Умовою рівноваги такої системи є мінімум F.

Більше важливими для практики є процеси при постійному тиску, при яких відбувається робота $\delta A = pd$. Тоді можна записати $d + pd \le 0$, а p увести під знак диференціала. У результаті одержуємо $d(F + p) \le 0$, де знак рівності ставиться до оборотних процесу, а знак «менше» – до необоротного.

Таким чином, уведена ще одна функція стану, обумовлена тотожністю

$$G \equiv F + pV . \tag{4.36}$$

Тому що $U + p = H$, а $F = U - TS$, то

$$G = U - TS + pV \tag{4.37}$$

або

$$G = H - T \cdot S . \tag{4.38}$$

Цим співвідношенням встановлюється зв'язок між трьома раніше введеними функціями стану H, S і U, що мають велике значення для термодинамічних розрахунків. Наприклад, переписавши його у вигляді $H = U + TS$, можна зробити висновок, що ентальпія є сума вільної G і зв'язаної TS енергії.

Величина G називається вільною енергією при постійному тиску або вільною енергією Гібса, а іноді – ізобарно-ізотермічним потенціалом. У системах при постійних p і T мимовільно можуть протікати тільки процеси, що супроводжуються зменшенням G, а умовою рівноваги є мінімум цієї функції, тобто $\Delta G = 0$. Чинена робота супроводжується збитком цієї функції, тобто

$$-\Delta G \ge A_{\text{корисна}} . \tag{4.39}$$

Для можливості використання функції G при розрахунках рівноваги, необхідно знайти її зв'язок з параметрами стану p, T и V.

4.2 Математичний опис рівноваги хімічних реакцій

Процеси, що мимовільно протікають, можуть служити джерелами роботи і супроводжуються зменшенням вільної енергії

$$-\Delta G = -\left(G_2 - G_1\right) \geq A\,. \tag{4.40}$$

Максимальна робота, що може зробити один моль ідеального газу, який розширюється при постійній температурі, дорівнює $R \cdot T \cdot ln(V_2/V_1)$ або, з огляду на те, що $p_1 \cdot V_1 = p_2 \cdot V_2$ одержуємо

$$A = RT \cdot \ln \frac{p_1}{p_2}\,. \tag{4.41}$$

Тоді

$$-\left(G_2 - G_1\right) = -\Delta G = RT \cdot \ln \frac{p_1}{p_2};$$

$$G_2 - G_1 = -RT \cdot \ln p_1 + RT \cdot \ln p_2\,.$$

Якщо в якості початку відліку прийняти стандартні умови (p_1 = 100 кПа) і відповідно змінити позначення, то одержимо

$$G = G^0 + RT \cdot \ln p\,. \tag{4.42}$$

Тобто вільна енергія моля ідеального газу при постійній температурі T визначається як його хімічною природою, що характеризується величиною G^0, так і його парціальним тиском p. При цьому залежність G^0 від температури визначається рівняннями аналогічними для H и S.

Хімічні реакції, як правило, не протікають до кінця, а припиняються при досягненні системою стану рівноваги. При постійних p і T ці стани визначається умовою $\Delta G = 0$, тобто рівністю сум G вихідних речовин і продуктів реакції.

Розглянемо умовні хімічні реакції між двома газами A и B, у результаті якої утвориться два газоподібних продукти C и D

$$mA + nB = qC + lD\,, \tag{4.43}$$

де *m, n, q, l –* стехіометричні коефіцієнти.

Парціальний тиск кожного з газів позначимо відповідно p_A, p_B, p_C і p_D. Збільшення вільної енергії визначається рівнянням $\Delta G = G_A + G_B - G_C - G_D$, де кожне з доданків можна представити співвідношенням (4.42). Тоді після підстановки одержимо

$$\Delta G = mG_A^0 + mRT \cdot \ln p_A + nG_B^0 + nRT \cdot \ln p_B - qG_C^0 - qRT \cdot \ln p_C - lG_D^0 - lRT \cdot \ln p_D\,.$$

Поєднуючи разом величини $\Delta G^0 = mG_A^0 + nG_B^0 - qG_C^0 - lG_D^0$ і члени, що містять *p,* одержуємо:

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \cdot \ln \frac{p_C^q p_D^l}{p_A^m p_B^n}\,. \tag{4.44}$$

У стані рівноваги $\Delta G = 0$, отже

$$-\Delta G^0 = RT \cdot \ln \frac{p_C^q p_D^l}{p_A^m p_B^n}\,.$$

Ліва частина цього рівняння є сума постійних величин, тому при постійній температурі відношення

$$\frac{p_C^q p_D^l}{p_A^m p_B^n} = K_p \tag{4.45}$$

є величина постійна, яка називається константою рівноваги. Тоді

$$\Delta G^0 = -RT \cdot \ln K_p\,, \text{ або } \ln K_p = -\frac{\Delta G^0}{RT}\,, \tag{4.46}$$

тобто одержуємо співвідношення для визначення константи рівноваги. При цьому рівняння (4.44) приймає вид

$$\Delta G = -RT \cdot \ln K_p + RT \cdot \ln \frac{p_C^q p_D^l}{p_A^m p_B^n} \tag{4.47}$$

і може бути використане для аналізу рівноваги напрямку хімічних реакцій. Якщо співвідношення парціальних тисків (а в загальному випадку концентрацій) реагуючих речовин таке, що обидва складових правої частини цього рівняння рівні, то $\Delta G = 0$ і реакція перебуває в рівновазі. Якщо $\Delta G < 0$, реакція повинна протікати праворуч, якщо $\Delta G > 0$, реакція протікає у зворотному напрямку убік утворення вихідних речовин. Величина ΔG служить мірами хімічної спорідненості.

Співвідношення (4.45) відповідає формулюванню закону діючих мас, який говорить, що при рівновазі відношення добутку концентрацій продуктів реакції до добутку концентрацій вихідних речовин є величина постійна при $T = const$.

Залежність константи рівноваги від температури можна одержати, зробивши диференціювання за температурою рівняння (4.46)

$$\frac{d\Delta G^0}{dT} = -RT \cdot \ln K_p - RT \cdot \frac{d \ln K_p}{dT}.$$

Підставивши результат у рівняння Гібса-Гельмгольца

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 + T d\Delta G^0 / dT, \qquad (4.48)$$

одержимо

$$-RT \cdot \ln K_p = \Delta H^0 - RT \cdot \ln K_p - RT^2 \frac{d \ln K_p}{dT},$$

$$\frac{d \ln K_p}{dT} = \frac{\Delta H^0}{RT^2}. \qquad (4.49)$$

На основі цього рівняння можна зробити висновок, що зміна константи рівноваги залежно від температури визначається знаком і величиною теплового ефекту реакції ΔH. Для екзотермічних реакцій ($\Delta H < 0$) величина K_P зменшується з ростом температури, а для ендотермічних реакцій ($\Delta H > 0$) росте, що знаходить якісне втілення в широко відомому принципі Ле-Шател'є, що фор-

мулюється в такий спосіб: якщо на систему, яка перебуває в стані рівноваги, опиняється зовнішній вплив, то в ній відбудуться зміни, що протидіють цьому. Користуючись цими принципами і співвідношенням (4.47), можна через константу рівноваги (4.45) керувати співвідношенням реагуючих речовин, тобто в остаточному підсумку, виходом продуктів реакції.

Між константами рівноваги, записаними для парціальних тисків K_p і концентрації K_c існує наступна залежність:

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n}, \qquad (4.50)$$

де Δn – збільшення числа молей газоподібних речовин. При $\Delta n = 0$ $K_p = K_c$.

Як приклад використання другого закону термодинаміки можна привести розрахунок ступеня дисоціації метану при 873 К. Відомо, що для реакції C(т) + $+ 2H_2$ (г) = CH_4 (г) величина ΔH = -88052 Дж/моль, а ентропія графіту, водню і метану рівні: 20,1; 162,76 і 236,81 Дж/(моль·К), відповідно.

Відповідно до рівняння (4.31), що відображає адитивність ентропії, маємо

$$\Delta S = 236,81 - 20,1 - 2 \cdot 162,76 = -108,8 \text{ Дж/(моль·К).}$$

Підставивши це значення в рівняння (4.38), записане в приростах, одержимо

$$\Delta G^0 = -88052 - 873 \cdot (-108,8) = 6930 \text{ Дж/моль,}$$

а з урахуванням переходу до десяткових логарифмів у рівнянні $\Delta G^0 = -RT \ln K_p$ маємо 6930 = – 2,303·8,31·873·lgK_p, звідки K_p = 0,39.

Припустимо, що парціальний тиск метану спочатку становив 100 кПа. У результаті дисоціації зі ступенем α при рівновазі $p_{CH_4} = 1 - \alpha$, а $p_{H_2} = 2\alpha$. Тому що $K_p = p_{CH_4} / p_{H_2}$, то 0,39 = $(1 - \alpha)/4\alpha^2$. Вирішуючи це рівняння, одержуємо, що ступінь дисоціації при 600 °С (873 К) дорівнює 0,67.

При розгляді наведених вище питань математичного опису металургійних процесів були зачеплені лише основні закономірності термодинаміки. При

цьому залишився осторонь цілий ряд питань, що випливають із законів термодинаміки і примикають до них. Сюди, насамперед, варто віднести: закономірності процесів у розчинах і відхилення від ідеальності, фазові рівноваги, активність компонентів у металургійних розплавах, поверхневі явища і т.д. Ці питання розглянуті в роботі [12, 13].

4.3 Моделі кінетики хімічних реакцій, масо - і теплопередачі

Математичний опис перерахованих вище фізико-хімічних процесів має велике значення при створенні динамічних моделей, що відтворюють поводження процесів у часі. Такі моделі дозволяють прогнозувати майбутній стан процесу, визначати оптимальні траєкторії його протікання, а отже, і шляхи підвищення продуктивності або економічності. При цьому відкривається також можливість автоматизації керування з використанням ЕОМ [2].

Особливості кінетики гомогенних і гетерогенних реакцій. Швидкості протікання хімічних реакцій залежать від цілого ряду факторів: концентрації реагуючих речовин, температури, тиску (якщо в реакції беруть участь газоподібні речовини), наявності каталізаторів, а у випадку гетерогенних перетворень крім того – від стану поверхні, умов тепло - і масообміну. Розглянемо у зв'язку із цим особливості кінетики гомогенних і гетерогенних реакцій. При гомогенних реакціях вихідні речовини і продукти взаємодії перебувають в одній і тій же фазі (газової або рідкої), при цьому молекули, атоми або іони можуть взаємодіяти по всьому зайнятому об'ємі. Прикладом можуть служити реакції горіння C і H_2, що входять до складу коксового (природного) газу:

$$2CO + O_2 = 2CO_2;\ 2H_2 + O_2 = 2H_2O.$$

При гетерогенних реакціях взаємодіючі речовини перебувають у різних фазах, а процес хімічного перетворення протікає на границі розділу цих фаз. Прикладом може служити реакція окислювання вуглецю в системі шлак-метал

стосовно до ванни мартенівської або електросталеплавильної печі

$$\underset{\downarrow}{(FeO)} \qquad\qquad \underset{\uparrow}{\{CO\}}$$
$$[FeO]+[C]=[Fe]+[CO].$$

Тут можна виділити, щонайменше, три стадії:

1) дифузія кисню зі шлаку у метал до місця реакції (границя розділу метал-газовий пузир, незаповнені пори на подині або поверхні шматків руди і вапна);

2) хімічна реакція між киснем і вуглецем металу на границі розділу згаданих фаз;

3) виділення газоподібного продукту реакції з металу.

Варто помітити, що при більш докладному аналізі кожна з перерахованих стадій може бути розбита ще на кілька стадій, що відображають зокрема, адсорбційно-хімічні акти на границях розділу фаз. Швидкість такої складної гетерогенної реакції лімітується найбільш повільною стадією процесу. Для умов мартенівського і електросталеплавильного процесів такою стадією є дифузія кисню зі шлаку у метал. У конвертерному процесі у зв'язку з великою інтенсивністю продувки киснем і високим ступенем дисперсності взаємодіючих фаз, що лімітують, можуть виявитися адсорбційно-хімічні акти на поверхні фаз розділу, величина якої зростає на кілька порядків у порівнянні з подовими сталеплавильними процесами.

Перш ніж продовжити опис кінетики, зупинимося на закономірностях дифузії, що має велике значення при гетерогенних процесах, тому що їхні швидкості можуть визначатися підведенням реагуючих речовин і відводом продуктів реакції.

4.3.1 Рівняння кінетики гомогенних реакцій

Швидкість реакції являє собою похідну від концентрації за часом $\upsilon = -dC/dt$.

Хімічні реакції розрізняються по ознаці молекулярності і порядку реакції.

Молекулярність визначається числом молекул, що беруть участь в елементарному акті хімічної взаємодії. За цією ознакою реакції діляться на моно-, бі- і тримолекулярні. Кожному типу хімічної реакції відповідають певні кінетичні рівняння, що виражають залежність швидкості реакції концентрації реагуючих речовин. Відповідно до закономірностей формальної кінетики, у тому числі законом діючих мас, швидкість якої-небудь реакції виду $A + 2B = AB_2$ у прямому напрямку пропорційна концентраціям реагуючих речовин і представляється рівнянням

$$\upsilon = -\frac{dC_A}{dt} = -2\frac{dC_B}{dt} = k \cdot C_A \cdot C_B^2, \qquad (4.51)$$

де k – константа швидкості, що має зміст υ при $C_A = C_B = 1$.

Порядком реакції називається сума показників ступеню, у яких концентрації входять у кінетичні рівняння. Наведена вище реакція має, отже, третій порядок. У дійсності реакції третього порядку спостерігаються рідко. Рівняння, подібні до вираження (4.51), засновані на спрощених поданнях про те, що реакції відбуваються при одночасному зіткненні такого числа молекул, які відповідають сумі стехіометричних коефіцієнтів. Більшість же реальних реакцій протікає за більш складних законах з утворенням проміжних продуктів. Тому рівняння типу (4.51) вірні тільки для елементарних реакцій, що йдуть в одну стадію, тобто по виду стехіометричного рівняння не можна визначити порядок реакцій, найчастіше його визначають експериментально. Із цією метою знаходять швидкість реакції при постійній температурі залежно від концентрації реагентів, по виду отриманої залежності (показникам ступенів при концентраціях) можна судити про порядок реакції.

Зупинимося на виді кінетичних рівнянь залежно від порядку реакції.

При реакціях нульового порядку швидкість постійна в часі

$$\upsilon = -\frac{dC}{dt} = k\,. \qquad (4.52)$$

Після інтегрування одержуємо

$$C = -kt + C_0,$$

де C_0 – постійна інтегрування, що має зміст початкової концентрації при $t_0 = 0$. Таким чином, у розглянутому випадку концентрація реагенту лінійно убуває в часі.

Реакція першого порядку схематично виражаються формулою $A \rightarrow$ Продукт реакції. Кінетичне рівняння має вигляд:

$$\upsilon = -\frac{dC}{dt} = k \cdot C, \qquad (4.53)$$

а його рішення $C_t = C_0 \cdot \exp(-k \cdot t)$ показує, що концентрація вихідного компонента зменшується в часі за експонентним законом (рис. 4.1).

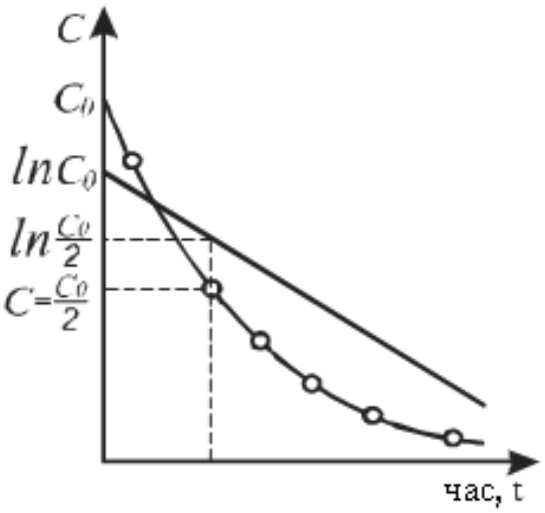


Рисунок 4.1 – Зміна концентрації в часі при реакціях першого порядку

Рішення цього рівняння можна представити і в іншому виді, більш зручному для визначення константи швидкості реакції. У результаті поділу перемінних і вибору меж інтегрування $C = C_0$ при $t = 0$ і $C = C_t$ у момент часу t

$$-\int_{\tilde{N}_0}^{\tilde{N}_t} \frac{dC}{C} = \int_0^t k dt$$

одержуємо рішення $\ln(C_0/C_t) = kt$, з якого можна побачити, що *lnC* лінійно залежить від часу. Якщо дослідні дані укладаються на пряму лінію (рис. 4.1), то це вказує на перший порядок реакції. По куту нахилу прямої визначається величина *k*.

Схема реакції другого порядку має вигляд $A + B \rightarrow$ Продукт реакції або, наприклад, *A + B = AB,* а швидкість реакції описується рівнянням

$$\upsilon = -\frac{dC}{dt} = k \cdot C_A \cdot C_B, \tag{4.54}$$

яке при однакових концентраціях приймає вид

$$\upsilon = -\frac{dC}{dt} = k \cdot C^2.$$

Після поділу змінних і інтегрування співвідношення

$$-\int_{C_0}^{C_t} \frac{dC}{C^2} = \int_0^t k dt$$

одержуємо співвідношення

$$\frac{1}{C_0} - \frac{1}{C_t} = -k \cdot t, \tag{4.55}$$

яке може бути використане для визначення *k.* Якщо початкові концентрації реагентів неоднакові і рівні відповідно C_A і C_B, а концентрація продукту в момент *t* становить C_x, то одержуємо рівняння

$$\frac{dC_x}{dt} = k \cdot (C_A - C_x) \cdot (C_B - C_x),$$

логарифмування якого дає

$$k = \frac{1}{t \cdot (C_A - C_B)} \ln \frac{C_B \cdot (C_A - C_x)}{C_A \cdot (C_B - C_x)}. \tag{4.56}$$

Всі наведені вище кінетичні рівняння відносяться до реакцій, що протікають тільки в прямому напрямку, тобто в умовах далеких від рівноваги, що може, наприклад, забезпечуватися за рахунок безперервного відводу продуктів реакції. У загальному випадку може протікати і зворотна реакція, тоді загальна швидкість для реакції виду $A + B = AB$ дорівнює

$$\upsilon = \upsilon_1 - \upsilon_2 = k_1 \cdot C_A \cdot C_B - k_2 \cdot C_{AB}. \qquad (4.57)$$

У міру витрати реагентів A и B і утворення продукту AB швидкість прямої реакції υ_1 зменшується, а υ_2 збільшується. При $\upsilon_1 = \upsilon_2$ сумарна швидкість дорівнює нулю, наступає рівновага. Тоді $k_1 \cdot C_A \cdot C_B = k_2 \cdot C_{AB}$, або

$$\frac{C_{AB}}{C_A \cdot C_B} = \frac{k_1}{k_2} = K_c, \qquad (4.58)$$

тобто константа рівноваги K_c дорівнює відношенню констант швидкостей прямої і зворотної реакції. У той же час співвідношення (4.58) є не що інше, як вираження закону діючих мас, отримане в цьому випадку через рівняння кінетики. Зупинимося тепер на питанні впливу температури на швидкість хімічних реакцій. Залежність константи швидкості реакції від температури вперше була емпірично отримана Ареніусом, а трохи пізніше знайшла теоретичне підтвердження на основі механізму активних зіткнень. У диференціальній формі вона має такий вигляд:

$$\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E}{RT^2}, \qquad (4.59)$$

де E – енергія активації.

Після інтегрування за умови, що $E \neq f(T)$, одержуємо

$$\ln k = -\frac{E}{RT} + A, \qquad (4.60)$$

де A – постійна, що має зміст логарифма константи швидкості при нескінченній температурі (k_∞).

Це співвідношення можна представити також у вигляді

$$k = k_{\infty} \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \qquad (4.61)$$

Величину E можна визначити по тангенсу кута нахилу прямої (4.60), побудованої в координатах *(1/T)–(lnk),* для чого необхідно виміряти константи швидкості при різних температурах.

Фізичний зміст енергії активації і механізм хімічних реакцій можна пояснити на основі теорії активних зіткнень.

Імовірність здійснення елементарної хімічної реакції залежить від природи реагуючих речовин (енергії зв'язків) і від температури, що підвищує загальний енергетичний рівень хаотичного руху молекул. На рис. 4.2, де E_1 і E_2 – енергії активації прямої і зворотної реакцій, видно, що в результаті екзотермічної реакції відбувається зниження внутрішньої енергії системи на величину, рівну тепловому ефекту реакції ΔU.

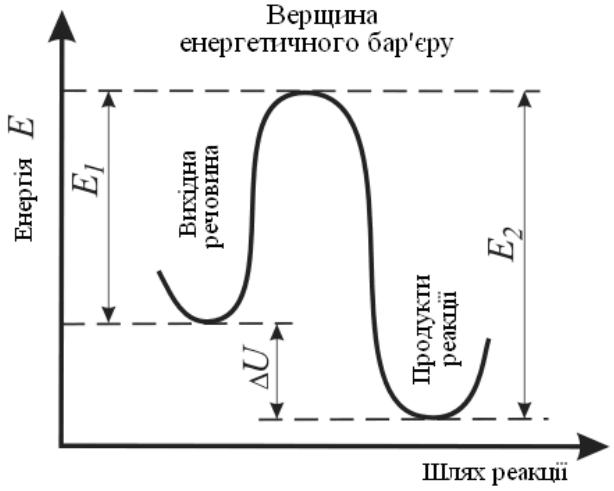


Рисунок 4.2 - Енергія активації хімічних реакцій

Однак на шляху від вихідного стану в кінцеве система повинна перейти певний енергетичний бар'єр, при цьому, чим нижче бар'єр (менше енергія активації), тим більша частка молекул у кожний даний момент виявляється здатної вступити в реакцію і тим більше високої буде швидкість реакції. Більше докла-

дний виклад молекулярної кінетики, що знайшло подальший розвиток у теорії перехідного стану, виходить за рамки даного посібника.

Розглянемо приклад моделювання кінетики хімічних реакцій на прикладі двостадійного окислювання вуглецю, що протікає в замкнутому об'ємі в умовах ідеального перемішування дрібних часток вуглецю з киснем. З певним ступенем ідеалізації допустимо, що цей процес протікає за реакціями

$$C + 0,5O_2 = CO,$$
$$CO + 0,5O_2 = CO_2.$$

За аналогією з рівнянням (4.51) і з урахуванням закону збереження речовини можна скласти наступну систему диференціальних рівнянь, що описують кінетику наведених реакцій (при цьому робимо допущення, що реакції мають перший порядок по кисню і вуглецю)

$$\frac{dC_C(t)}{dt} = -k_1 \cdot C_c(t) \cdot C_{O_2}(t);$$

$$\frac{dC_{O_2}(t)}{dt} = -0,5k_1 \cdot C_c(t) \cdot C_{O_2}(t) - 0,5k_2 \cdot C_{O_2}(t) \cdot C_{CO}(t);$$

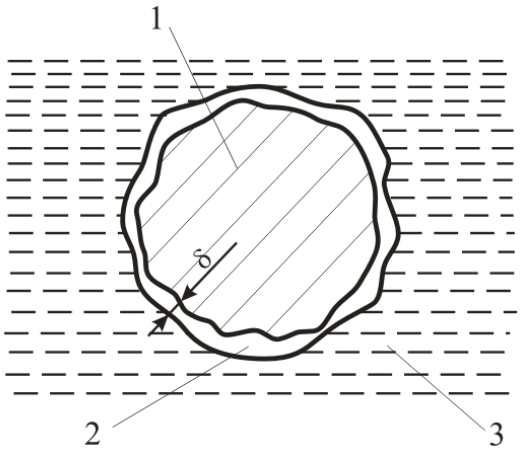
$$\frac{dC_{CO}(t)}{dt} = k_1 \cdot C_c(t) \cdot C_{O_2}(t) - k_2 \cdot C_{O_2}(t) \cdot C_{CO}(t);$$

$$\frac{dC_{CO_2}(t)}{dt} = k_2 \cdot C_{O_2}(t) \cdot C_{CO}(t).$$

Вирішивши дану систему можна визначити константи швидкостей реакцій k_1 і k_2, а також уточнювати порядок реакцій, що особливо важливо в складних випадках, коли цей порядок може бути в тому числі і дробовим.

4.3.2 Гетерогенні реакції

Розглянуті вище кінетичні закономірності стосувалися поки лише гомогенних реакцій. Зупинимося на особливостях гетерогенних процесів. Ці процеси можуть протікати на границях розділу фаз в однокомпонентних (рідина–пар і т.д.) або в багатокомпонентних (метал – шлаки – шматки вапна і т.д.) системах. У першому випадку процеси не супроводжуються змінами хімічного складу в прикордонному шарі. Взаємодія ж на поверхні розділу багатокомпонентних систем характеризується найчастіше зміною состава прикордонного шару, при цьому загальна швидкість процесу визначається швидкістю вирівнювання концентрації в прикордонному шарі, тобто швидкістю дифузії. Дифузійний прикордонний шар, являє собою тонкий шар, що прилягає до кожної фази дво- або багатокомпонентної системи (рис. 4.3).



1 – тверда речовина; 2 – дифузійний прикордонний шар; 3 – рідина
Рисунок 4.3 – Дифузійний прикордонний шар

Зі збільшенням інтенсивності перемішування зменшується товщина цього шару і, отже, зменшується вплив дифузії на швидкість усього процесу. Подібні явища спостерігаються при розчиненні шматків коксу і агломерату в доменних печах або шматків вапна в сталеплавильних агрегатах.

У системах, для яких характерно послідовне протікання хімічних і фізичних процесів, швидкість усього процесу визначається більше повільною стадією. У зв'язку із цим реакція може перебувати в кінетичній або в дифузійній об-

ласті. Якщо швидкість хімічної реакції і дифузії порівнянні, процес є складною функцією кінетичних і дифузійних явищ і вважається таким, що протікає у перехідній області. У більшості випадків гетерогенні реакції протікають через ряд стадій, найбільш характерні з яких наступні:

1) дифузія часток вихідних речовин до поверхні розділу фаз (реакційній зоні);

2) адсорбція реагентів на поверхні;

3) хімічна реакція на поверхні;

4) десорбція продуктів реакції на поверхні роздягнула фаз;

5) дифузія цих продуктів від реакційної зони всередину однієї з фаз.

Стадії 1 і 5 відносяться до дифузійних, а стадії 2-4 до кінетичних. Спостережуваний кінетичний опір гетерогенної реакції, що протікає через ряд послідовних стадій, дорівнює сумі кінетичних опорів її стадій

$$\frac{1}{\mathrm{k}_{сп}} = \frac{1}{\mathrm{k}_{к}} + \frac{1}{\mathrm{k}_{д}}, \qquad (4.62)$$

де $k_{\text{сп}}$ – константа швидкості сумарного (спостережуваного) процесу;

$k_{\text{к}}$ – константа швидкості кінетичної стадії;

$k_{\text{д}}$ – константа швидкості (коефіцієнт дифузії) дифузійної стадії.

Стадія, що має найбільший опір, є такою, що лімітує. Розглянемо основні особливості процесів у кінетичній області:

1) будь-який порядок процесу;

2) істотна залежність швидкості процесу від температури за законом $k = A \cdot \exp(-E/RT)$;

3) залежність швидкості процесу від величини поверхні розділу фаз (ступеню дисперсності);

4) відсутність впливу на швидкість процесу змін гідродинамічних і аеродинамічних умов процесу.

Перші три особливості можуть спостерігатися і у випадку знаходження процесу в перехідній області. Четверта ознака є основним експериментальним

підтвердженням знаходження процесу в кінетичній області.

Основні особливості процесів у дифузійній області:

1) процес першого порядку;

2) слабка залежність швидкості процесу від температури і від величини поверхні розділу фаз;

3) різкий вплив на швидкість процесу гідродинамічних і аеродинамічних умов процесу.

Найбільш важливою ознакою знаходження процесу в дифузійній області є перша і третя особливості.

Приклад процесу розчинення вапна в основному сталеплавильному шлаку. Це процес має місце в мартенівських, електросталеплавильних печах і конвертерах [11]. Цей процес, що є типово гетерогенним, залежить насамперед від конвекційних потоків, що розвиваються у ванні, тобто від потужності перемішування, і складається з наступних етапів: 1) підведення складових шлаків (*Fe*, *Mn* та ін.) до поверхні шматків вапна; 2) проникнення розчинників у пори шматків вапна, що полегшує перехід оксиду кальцію в рідку фазу у зв'язку з утворенням легкоплавких з'єднань; 3) відвід цих продуктів, насичених *CaO*, від поверхні шматків вапна в об'ємі шлаку. Підведення розчинників до поверхні шматків вапна і відвід *CaO,* що розчиняється, визначається закономірностями конвекційної дифузії в межах дифузійного прикордонного шару в поверхні шматків вапна. Рівняння дифузії має вигляд:

$$\upsilon_{CaO} = \beta \cdot F\left[(CaO)_{пов} - (CaO)_{осн}\right] = (D/\delta) \cdot F\Delta(CaO), \qquad (4.63)$$

де υ_{CaO} – швидкість розчинення вапна в шлаку;

β – коефіцієнт масовіддачі в шлаку;

D – коефіцієнт дифузії вапна в шлаку;

$(CaO)_{пов}$ і $(CaO)_{осн}$ – концентрації оксиду кальцію на поверхні шматків (концентрація насичення) і в основній масі шлаку.

Величина дифузійного прикордонного шару може бути описана рівнянням

$$\delta = \alpha \cdot D^{1/6} \cdot \eta^{1/6} \cdot \sqrt{x/\upsilon}\,, \qquad (4.64)$$

де *x* – величина, пропорційна розміру шматків вапна (наприклад, радіус);

υ - швидкість руху потоку;

η - динамічна в'язкість рідини;

α - коефіцієнт пропорційності.

Швидкість руху рідких фаз у сталеплавильній ванні визначається інтенсивністю барботажу ванни пузирями *CO* і струменями продувного газу *W* і в остаточному підсумку пропорційна швидкості окислювання вуглецю υ_C

$$\upsilon = f(W) = k_1 \cdot W^{2y} = k_2 \upsilon_C^{2y}\,. \qquad (4.65)$$

За експериментальним даними y = 0,5...0…0,8

Відповідно до рівняння Стокса

$$D = RT/6N_0 r\pi\eta \approx k/\eta\,,$$

або

$$\eta \approx k/D\,. \qquad (4.66)$$

Залежність коефіцієнта дифузії від температури визначається співвідношенням

$$D = A \cdot \exp(-E/RT)\,. \qquad (4.67)$$

Після відповідних перетворень рівнянь (4.63) – (4.67) маємо

$$\upsilon_{CaO} = \frac{dQ_{CaO}}{dt} = k\frac{F}{\sqrt{r}} W^y \cdot e^{-E/RT} \cdot \Delta(CaO)\,. \qquad (4.68)$$

Отримана математична модель, природно, не є єдино можливою. Наприклад, процеси в прикордонному дифузійному шарі можна описати рівняннями в

частинних похідних. При цьому можна одержати модель більше правильну за теоретичною структурою закономірностей, але в той же час більше складну і важку для перевірки експериментально у виробничих умовах. У лабораторних умовах така перевірка полегшується, але виникають додаткові проблеми з перенесенням одержуваних при цьому результатів на реальні агрегати.

4.3.3 Опис дифузії і масоперенесення

Дифузія є процес мимовільного переміщення речовини, спрямована на вирівнювання концентрацій в об'ємі. Силою дифузії, що рухає, є градієнт концентрації *dC/dx*, обумовлений зміною концентрації речовини *dC*, що доводиться на відрізок шляху *dx* у напрямку дифузії. Збільшення кількості стерпного шляхом дифузії речовини ΔQ_c пропорційно коефіцієнту дифузії *D,* градієнту концентрації, площі поперечного переріза *F* середовища, через яку переноситься речовина, і часу Δt

$$\Delta Q_c = -D\frac{dC}{dx}F\Delta t,$$

а переходячи до нескінченно малих приростів і швидкості дифузії (потоку маси через одиничну площу) $q_c = dQ_c / dt$ одержуємо рівняння

$$q_c = \frac{dQ_c}{dt} = -D\frac{dC}{dx}, \qquad (4.69)$$

яке описує стаціонарну дифузію і називається першим законом Фіка.

Для випадку системи з розподіленими параметрами, коли концентрація змінюється по всім трьох координатах, у відповідності із другим законом Фіка рівняння дифузії приймає наступний вид:

$$\frac{dC}{dt} = D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) + f_c, \qquad (4.70)$$

де f_c – щільність джерел речовини, наприклад кількість речовини, що утвориться в результаті хімічних реакцій в одиниці об'єму в одиницю часу.

Необхідно підкреслити, що рівняння (4.69) і (4.70) відносяться до молекулярного переносу в нерухомому середовищі і справедливі для ізотермічного процесу і случаю, коли дифузія даного компонента не залежить від дифузії інших компонентів.

У цих умовах залежність коефіцієнта дифузії від температури *T*, в'язкості середовища η і радіуса молекул, що дифундують, *r* визначається формулою Стокса-Ейнштейна:

$$D = \frac{RT}{6\pi N_0 \eta r}, \qquad (4.71)$$

де *R* і N_0 – газова постійна і число Авогадро, відповідно.

У більшості металургійних агрегатів, особливо сталеплавильних, переважну роль грає не молекулярна, а турбулентна дифузія, обумовлена тепловою конвекцією і роботою перемішування пузирів *CO*, що піднімаються, і струменів, що впроваджується у ванну, продувного газу.

Наприклад, значення коефіцієнта атомарної дифузії в нерухомому розплавленому залізі при 1500…1600 °С становить 10^{-8}…10^{-9} м^2/с. Величина ж коефіцієнта турбулентної дифузії в мартенівській ванні, що залежить від швидкості зневуглецювання, становить 0,0025…0,0082 м^2/с, а в конвертерному процесі 2,0...2,5 м^2/с, тобто на три порядки вище.

З урахуванням впливу конвекції рівняння дифузії приймає наступний вид:

$$q_c = -D\frac{dC}{dx} + \upsilon \cdot C, \qquad (4.72)$$

де q_c – дифузійний потік;

υ - швидкість переносу речовини, м/с.

Частіше, у випадках переважного впливу турбулентної дифузії, використовується емпіричне рівняння виду

$$q_c = \beta \cdot \Delta C, \qquad (4.73)$$

де ΔC – різниця концентрацій;

β – коефіцієнт масовіддачі.

При оцінці умов масоперенесення і можливих областей використовування наведених вище рівнянь доцільно скористатися методами теорії подоби, що, відкриває можливість узагальнень.

Насамперед варто помітити, що дифузія, в'язкість і теплопровідність є подібними процесами, що характеризують аналогічні види переносу: дифузія – перенос маси, в'язкість – перенос кількості руху, теплопровідність – перенос тепла. Коефіцієнти молекулярного переносу (в'язкість ν, дифузія D і температуропровідність α) мають однакову розмірність ($м^2/с$).

У відповідності із другою теоремою подоби можна істотно знизити розмірність задачі і підвищити спільність, якщо від первинних фізичних параметрів перейти до їхніх безрозмірних комплексів. Одним з таких широко відомих критеріїв є число Рейнольдса, що дозволяє оцінювати характер руху рідини залежно від її середньої швидкості υ, діаметра трубопроводу (потоку) і кінематичної в'язкості ν:

$$\mathrm{Re} = \frac{\upsilon \cdot d}{\nu}. \qquad (4.74)$$

Цей критерій є мірою відносини сил інерції, що характеризуються швидкістю, до сил внутрішнього тертя, що характеризуються в'язкістю. Число Рейнольдса відображає ступінь стійкості потоку стосовно зовнішніх і внутрішніх збурювань. Значення числа *Re*, при якому порушується стійкість руху рідини, називається критичним і позначається $Re_{кр}$. При $Re < Re_{кр}$ будь-які виникаючі в потоці збурювання із часом загасають і не змінюють загального ламінарного характеру плину. При $Re > Re_{кр}$ збурювання можуть мимовільно зростати, що приводить до турбулізації потоку. У дійсності різкої границі в переході від ламінарного до турбулентного руху немає, є перехідний режим, при якому в основній частині потоку переважає турбулентний режим, а в шарі, що прилягає до

стінок, можливо ламінарний рух.

При значенні $Re < 2300$ потік є ламінарним. У цій області для опису дифузії можуть використовуватися рівняння (4.69) або (4.72). Область значень $2300 < Re < 10000$ є перехідною. Тут залежно від ступеня розвитку турбулентності і наявності ламінарного шару доцільно використовувати рівняння (4.72) або (4.73). При значеннях $Re > 10000$ у результаті переважного впливу сил інерції потік стає турбулентним. У цих умовах користуватися рівняннями, у яких фігурують коефіцієнти молекулярної дифузії, неправомірно. При такому характері потоку для опису масоперенесення використовують рівняння виду (4.73), у яких коефіцієнт масовіддачі визначається або через роботу перемішування, або експериментально-статистичними методами за обмірюваній швидкості процесу і перепадам концентрацій.

4.3.4 Опис теплопередачі

При розгляді питань математичного опису дифузії і масоперенесення було підкреслено, що дифузія, в'язкість і теплопровідність є подібними процесами в змісті поводження і математичного опису. Відзначимо, що в більшості металургійних агрегатів ці процеси досить тісно взаємозалежні один з одним.

Зупинимося трохи докладніше на питаннях математичного опису теплопередачі з урахуванням аналогії і взаємозв'язку цього процесу з процесом масоперенесення [1, 2].

Маємо поле температур

$$T = f(x, y, z, t), \tag{4.75}$$

де x, y, z – координати точки в просторі;

t – час.

Розглянемо в тривимірному просторі дві ізотермічні поверхні, всі точки яких мають температури T и $T + \Delta T$ відповідно. Зміна температур у тілі спостерігається лише в напрямках, що перетинають ізотермічні поверхні, причому

найбільш різка зміна температури відбувається в напрямку нормалі *n* до ізотермічної поверхні. Вектор, довжина якого дорівнює межі відносини зміни температури *ΔT* до відстані Δ*n* між ізотермічними поверхнями по нормалі, а напрямок збігається з напрямком нормалі, називається *температурним градієнтом*:

$$\lim_{\Delta n \to 0} \frac{\Delta T}{\Delta n} = \frac{dT}{dn} = \text{grad}T\,, \tag{4.76}$$

тобто *gradT* – вектор, спрямований по нормалі до поверхні рівня і чисельно рівний швидкості зміни *T* по цьому напрямку.

Для скалярного поля *T(x, y, z)* цей вектор обчислюється по наступній формулі

$$\text{grad}T = \frac{\partial T}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial T}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial T}{\partial z}\vec{k}\,, \tag{4.77}$$

де *i, j, k* – одиничні вектори, спрямовані по координатних осях *x, y, z.*

Передача тепла в нерухомому середовищі описується законом Фур'є

$$q_T = -\lambda \cdot \text{grad}T\,, \tag{4.78}$$

де *q* – тепловий потік (кількість речовини, передана через одиницю поверхні в одиницю часу);

λ – коефіцієнт теплопровідності.

У чистому виді такий процес можна спостерігати лише у твердих тілах. У газах і рідинах на цей процес впливає руху середовища, тобто вільна і змушена конвекція. З урахуванням конвекції закон Фур'є можна представити в наступному виді:

$$q_T = -\lambda \cdot \text{grad}T + c_p \rho \upsilon T\,, \tag{4.79}$$

де c_p – теплоємність при постійному тиску;

ρ - щільність середовища;

υ – швидкість потоку.

Це рівняння, як і аналогічне рівняння (4.54) для процесу масоперенесення,

доцільно використовувати при ламінарному ($Re < 2300$) і перехідному ($2300 < Re < 10000$) режимі руху потоку.

Вище були розглянуті процеси передачі тепла усередині середовища з певними фізичними властивостями. Зупинимося на питанні теплообміну між середовищами.

Для цієї мети часто користуються емпіричним законом теплопередачі

$$q_T = \alpha \cdot \Delta T, \tag{4.80}$$

де ΔT – різниця температур;
α – коефіцієнт тепловіддачі.

Теплообмін між двома поверхнями, нагрітими до температур T_1 і T_2 при перевазі теплопередачі випромінюванням у відповідність із законом Стефана-Больцмана описується рівнянням

$$q_И = \varepsilon C_0 \left(T_1^4 - T_2^4\right), \tag{4.81}$$

де ε – наведений ступінь чорності;
C_0 – коефіцієнт випромінювання абсолютно чорного тіла.

Найчастіше передача тепла теплопровідністю, конвенцією і випромінюванням спостерігається одночасно. У цьому випадку користуються загальним коефіцієнтом тепловіддачі представляючи тепловий потік у вигляді

$$q_0 = \alpha_0 \left(T_1 - T_2\right) = \left(\alpha_c + \alpha_л\right)\left(T_1 - T_2\right), \tag{4.82}$$

де α_0 – загальний коефіцієнт тепловіддачі;
α_c і $\alpha_л$ – коефіцієнти тепловіддачі зіткненням і випромінюванням.

У ряді випадків, особливо при великої долі теплопередачі випромінюванням, кращі результати може дати рівняння $q_0 = \left(\varepsilon_C + \varepsilon\right) C_0 \left(T_1^4 - T_2^4\right)$. Вплив конвекційного теплообміну враховується тут збільшенням ступеня чорності на деяку величину ε_C. Варто помітити, що лише в деяких щодо простих випадках можна користуватися табличними значеннями зазначених коефіцієнтів. У більшості ж

реальних металургійних агрегатів ці коефіцієнти доводиться визначати експериментально-статистичними методами. Однак роль теоретичних подань і тут залишається вирішальної, тому що вони дозволяють визначити адекватну структуру математичної моделі.

4.4 Закони збереження маси та імпульсу

Використання згаданих вище законів дозволяє вирішувати ряд дуже важливих для металургії завдань, таких як вимір витрат рідин і газів, математичний опис процесів впровадження продувного газу в рідкий метал та ін.

Закон збереження маси для ізольованої системи полягає в тому, що маса m цієї системи залишається постійної протягом усього часу руху, тобто повна похідна від маси за часом дорівнює нулю

$$\frac{dm}{dt} = 0 . \tag{4.83}$$

Якщо система не ізольована і через її поверхню входить і виходить речовина (наприклад, рідина), то зміна маси цього об'єму V в одиницю часу дорівнює

$$\Delta m = \int_V \frac{d\rho}{dt} dV , \tag{4.84}$$

де ρ – щільність.

Для одержання рівняння нерозривності потоку, що є вираженням закону збереження маси, розглянемо потік вектора ρw через нерухому замкнуту поверхню F довільної форми постійного об'єму V (рис. 4.4).

У випадку нерівності рідини, що втікає, зміна маси цього об'єму дорівнює

$$\Delta m = \int_F \rho \cdot w_n dF ,$$

де w_n – проекція вектора швидкості на нормаль до площадки dF.

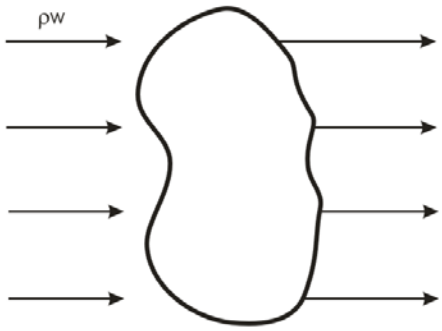


Рисунок 4.4 – Схема переносу речовини через замкнуту поверхню об'єму

Тому що при постійному об'ємі маса може змінюватися тільки за рахунок щільності рідини або газу, то можна записати

$$\Delta m = \int_F \rho \cdot w_n dF = -\int_V \frac{d\rho}{dt} dV . \qquad (4.85)$$

Позитивному значенню інтеграла по поверхні відповідає деяка кількість рідини, що випливає, при цьому інтеграл по об'ємі повинен бути негативним, тому що при зменшенні маси її щільність буде убувати. Для нестисливої рідини

$$\int_F w_n dF = 0 , \qquad (4.86)$$

тобто потік швидкості через будь-яку замкнуту поверхню дорівнює нулю.

Наприклад, для двох перетинів потоку нестисливої рідини в трубопроводі рівняння нерозривності можна записати у вигляді:

$$w_1 \cdot F_1 = w_2 \cdot F_2 . \qquad (4.87)$$

Закон збереження імпульсу (кількості руху) для неізольованої системи має вигляд:

$$\frac{d\vec{K}}{dt} = m\frac{dw}{dt} = \vec{R},$$

де $\vec{K} = m \cdot \upsilon$;

$\vec{R}$ – головний вектор зовнішніх сил, прикладених до об'єму.

Це вираження можна переписати в наступному виді

$$\frac{d\vec{K}}{dt} - \vec{R} = m\frac{d\vec{w}}{dt} - \vec{R} = 0. \qquad (4.88)$$

Закон збереження імпульсу затверджує, що сума імпульсів всіх тіл (або часток) замкнутої системи є величина постійна.

Для кінцевого об'єму рідини V з поверхнею F закон збереження імпульсу (4.88) можна записати

$$\frac{d\vec{K}}{dt} - \int_V \rho \cdot \vec{F} dV - \int_F \vec{p}_n dF = 0, \qquad (4.89)$$

де інтеграл по об'єму V є головний вектор масових зовнішніх сил, а інтеграл по поверхні F – відповідно поверхневих сил,

Зупинимося на декількох прикладах застосування цих законів, почавши з найпростішого випадку зіткнення тел.

Приклад 1. Представимо, що два непружних тіла, наприклад, дві краплі металу або шлаків, зіштовхуються один з одним під певним кутом (рис. 4.5), поєднуючись у результаті в одне тіло.

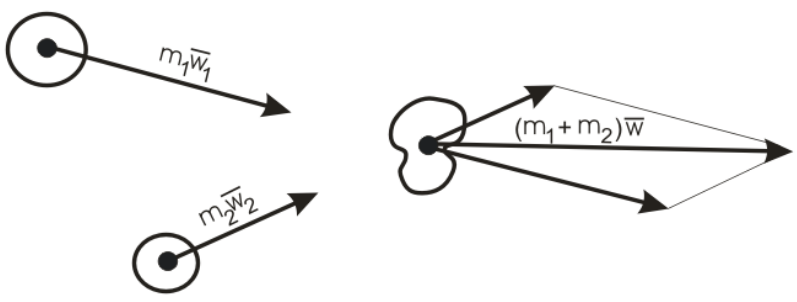


Рисунок 4.5 – Схема зіткнення тіл

Імпульси цих тіл (добуток маси на швидкість) до зустрічі були відповідно m_1w_1 і m_2w_2, а після зустрічі їхня загальна маса дорівнює $m_1 + m_2$. Позначивши швидкість тіл, що об'єдналися, *через w* на основі закону збереження імпульсу (кількості руху) одержимо

$$m_1 \cdot \overrightarrow{w_1} + m_2 \cdot \overrightarrow{w_2} = (m_1 + m_2) \cdot \overrightarrow{w}$$

звідки можна знайти швидкість злиття тіла, що утворилося в результаті,

$$\overrightarrow{w} = \frac{m_1 \cdot \overrightarrow{w_1} + m_2 \cdot \overrightarrow{w_2}}{m_1 + m_2}.$$

З огляду на векторний характер закону збереження імпульсу, імпульси тіл потрібно складати як вектори з урахуванням напрямку швидкостей (рис. 4.5).

Аналогічним шляхом можна вирішувати і більш складні завдання, наприклад зіткнення потоків часток, але для цього повинні бути відомі імовірнісні закони розподілу мас і швидкостей часток, а також імовірні кути їхньої зустрічі. Такого роду завдання доводиться вирішувати, наприклад, при струминному рафінуванні металу, а також у порошковій металургії.

Приклад 2. Як наступний приклад розглянемо цікавий для металургії питання про глибину проникнення струменя газу, що вдмухують в рідкий метал (рис. 4.6).

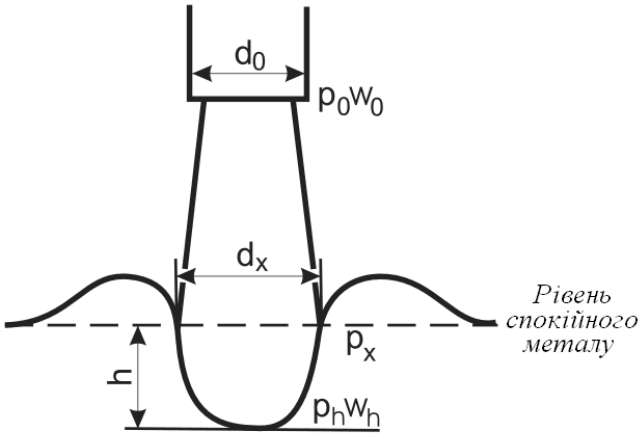


Рисунок 4.6 – Схема впровадження газового струменя в рідкий метал

Покладемо в основу відоме рівняння Бернуллі, що відображає закон збереження енергії по довжині потоку, відповідно до якого сума всіх видів енергії в будь-якому перетині струменя є величина постійна. Тоді напір на осі струменя наприкінці ділянки занурення на нескінченно малій відстані від дна лунки (без обліку втрат енергії)

$$\frac{\rho_h \cdot w_h^2}{2} + p + \rho_h \cdot g \cdot dh = const .$$

На кінцевій ділянці занурення (на дні реакційної зони) існує рівновага між осьовим тиском струменя газу і статичним тиском металу.

$$\frac{\rho_h \cdot w_h^2}{2} = \rho \cdot g \cdot h = p_h . \qquad (4.90)$$

Зв'язок між тиском струменя в точці її максимального занурення і осьовим тиском струменя на поверхню металу можна представити у вигляді:

$$p_h = n_0 \cdot p_x . \qquad (4.91)$$

Тиск по осі струменя на поверхню рідкого металу p_x дорівнює секундному імпульсу газу J_x, віднесеному до одиниці площі перетину струменя в місці її контакту з поверхнею ванни $p_x = J_x / F_x$. Ця формула отримана в припущенні, що відбитий від ванни потік впливає на величину p_x. Значення імпульсу по довжині струменя зберігається постійним, тобто $J_0 = J_X$. Тоді

$$p_x = \frac{J_x}{F_x} = \frac{J_0}{F_x} . \qquad (4.92)$$

Підставивши значення p_x у рівняння (4.91), одержимо

$$p_h = \frac{n_0 \cdot \rho_0 \cdot w_0^2 \cdot F_0}{F_x} . \qquad (4.93)$$

Дорівнюючи вираження для p_h з рівнянь (4.90) і (4.91), одержимо співвідношення

$$\rho \cdot g \cdot h = \frac{n_0 \cdot \rho_0 \cdot w_0^2 \cdot F_0}{F_x}, \tag{4.94}$$

з якого можна знайти глибину реакційної зони

$$h = \frac{n_0 \cdot \rho_0 \cdot w_0^2 \cdot F_0}{\rho \cdot g \cdot F_x}. \tag{4.95}$$

У безрозмірному виді це рівняння здобуває вид:

$$\frac{h}{d_0} = n_0 \frac{\rho_0}{\rho} \cdot \frac{w_0^2}{g \cdot d_0} \left(\frac{d_0}{d_x} \right) = n_0 \cdot A \cdot r_0 \left(\frac{d_0}{d_x} \right)^2. \tag{4.96}$$

З умови рівності J_0 і J_x можна знайти вираження для діаметра плями контакту d_x:

$$d_x = \left(\frac{w_0}{w_x} \right) d_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{1/2}. \tag{4.97}$$

Допускаючи, що $\rho_0 = \rho_x = const$, одержимо рівняння

$$d_x = \frac{w_0 \cdot d_0}{w_x}, \tag{4.98}$$

з якого можна визначити діаметр реакційної зони в місці контакту струменя з поверхнею металу [8].

Ще одним прикладом використання рівняння Бернуллі і рівняння нерозривності є вимір витрати газу або рідини в трубопроводі методам змінного перепаду тисків на пристрої, який звужується (рис. 4.7).

Відповідно до закону збереження енергії для двох перетинів *I – I* і *II – II* горизонтального трубопроводу (при допущенні відсутності втрат на тертя і теплообмін з навколишнім середовищем, а також однаковості тиску по всьому перетині) можна записати

$$p_1 + \rho \frac{w_1^2}{2} = p_2 + \rho \frac{w_2^2}{2}, \tag{4.99}$$

де p_1 і p_2 – середні статичні тиски в першому і другому перетинах;

w_1 і w_2 – середні швидкості потоків у цих перетинах.

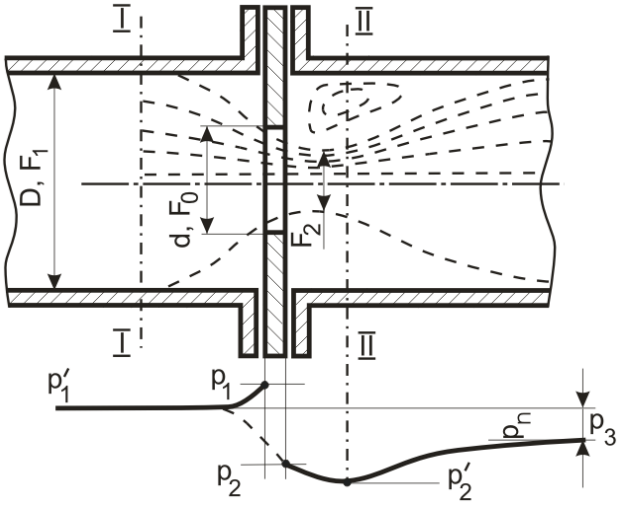


Рисунок 4.7 - Характер зміни тиску при вимірюванні витрати методом звуження потоку

Вирішуючи це рівняння разом з умовою (4.87) нерозривності струменя $w_1 \cdot F_1 = w_2 \cdot F_2$ і уводячи коефіцієнт звуження струменя $\mu = F_2/F_0$, після підстановки і перетворень одержуємо вираження для швидкості потоку в перетині *II – II*, а після множення на площу перетину пристрою, що звужує, F_0 маємо рівняння для визначення витрати рідини або газу за допомогою виміру перепаду тисків до і після звуження $\Delta p = p_1 - p_2$

$$Q = \alpha \cdot F \sqrt{\frac{2\Delta p}{\rho}}, \qquad (4.100)$$

де α – коефіцієнт витрати, який враховує зроблені вище допущення.

Цей приклад одночасно є наочним підтвердженням розглянутого в розділі *I* положення про те, що одержання інформації про причини (вимір) обов'язково супроводжується витратами енергії (ростом ентропії), тим і обумовлюється певний рівень об'єктивної випадковості. У розглянутому прикладі інформація про витрату досягається ціною неповернутих втрат тиску (потенційної енергії потоку) на тертя і завихрення p_n (мал. 4.7).

4.5 Математична модель об'єкта при можливості допущення зосередженості параметрів

Вище був розглянутий ряд фундаментальних фізичних законів і деякі приклади їхнього застосування для математичного опису окремих сторін металургійних процесів. Внаслідок складності процесів, що протікають у реальних металургійних агрегатах, дія розглянутих законів проявляється одночасно і взаємозалежно. Причому розкриття і відбиття цих взаємозв'язків представляють одну з дуже складних задач математичного опису. Нижче розглянемо комплексний, але в той же час досить простий і наочний приклад математичного опису об'єкта, у якому протікає ряд взаємозалежних процесів. Як такий об'єкт може бути взята одна з ванн сталеплавильного агрегату безперервної дії. Однак у зв'язку зі складністю цього об'єкта завдання його математичного опису будемо вирішувати послідовно, починаючи із самої грубої абстракції і поступово ускладнюючи постановку завдання. На першому рівні абстракції розглянемо як об'єкт проточну ванну (рис. 4.8), у якій V_1 і V_2 відповідно об'ємні значення припливу і стоку в одиницю часу [1, 9]. Тоді швидкість зміни об'єму ванни dV/dt з урахуванням закону збереження маси

$$\frac{dV}{dt} = V_1 - V_2 .$$

Ускладнимо постановку завдання. Представимо, що у ванну ідеального перемішування надходить розчин, що містить дві не взаємодіючих між собою речовини *A* и *B,* концентрація яких на вході C_{A1} і C_{B1}, а на виході C_{A2} і C_{B2}.

Тоді рівняння динамічного балансу для кожного компонента розчину мають вигляд

$$\frac{d(VC_{A2})}{dt} = V_1C_{A1} - V_2C_{A2},$$

$$\frac{d(VC_{B2})}{dt} = V_1C_{B1} - V_2C_{B2}.$$

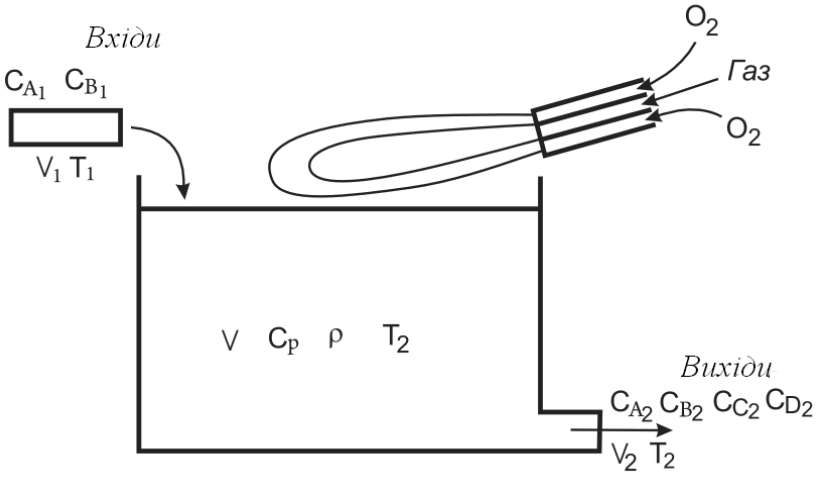


Рисунок 4.8 - Проточна ванна як об'єкт математичного опису

Ускладнюємо завдання далі. Розглянемо випадки, коли у ванні крім того протікає хімічна реакція виду $A + B = C + D$, при якій в одиницю часу витрачається по V_C молей речовин A и B і утвориться по стільки ж молей речовин C и D. Для об'єкта такого виду шляхом аналогічних міркувань одержуємо наступну систему диференціальних рівнянь

$$\frac{dV}{dt} = V_1 - V_2;$$

$$\frac{d(C_{A2})}{dt} = V_1 C_{A1} - (V_2 C_{A2} + V_C);$$

$$\frac{d(VC_{C2})}{dt} = V_C - V_2 C_{C2};$$

$$\frac{d(C_{B2})}{dt} = V_1 C_{B1} - (V_2 C_{B2} + V_C);$$

$$\frac{d(VC_{D2})}{dt} = V_C - V_2 C_{D2}.$$

Ця система є математичною моделлю об'єкта в такій постановці завдання. Спільне рішення цих рівнянь дозволяє одержати будь-які значення вихідних *параметрів* (V_2, C_{A2}, C_{B2}, C_{C2}, C_{D2}), що цікавлять нас, або швидкостей їхньої зміни для будь-якого моменту часу. Натурне дослідження такого об'єкта може бути

замінено дослідженням на математичній моделі. При цьому можуть бути отримані чисельні значення для всіх статичних і динамічних характеристик, графіки зміни вихідних величин при зміні вхідних (перехідні процеси) і т.д. На жаль, для більшості реальних об'єктів одержати аналітичним шляхом повний математичний опис досить важко, а в ряді випадків навіть неможливо. Тому часто аналітичний підхід доводиться сполучати з використанням експериментально-статистичних методів. Із труднощами такого роду зустрінемося вже на наступному етапі ускладнення наведеної вище завдання.

Розглянемо на прикладі цієї ж ванни принцип складання динамічного теплового балансу при наявності переносу речовини.

Кількість тепла, яким володіє рідина, що перебуває в ємності, дорівнює $V \cdot C_p \cdot \rho \cdot T_2$, де ρ – щільність рідини; C_p – теплоємність; T_1 – температура на вході; T_2 – температура на виході.

Кількість тепла, що надходить у ємність в одиницю часу з потоком V_1, дорівнює $V_1 \cdot C_p \cdot \rho \cdot T_1$, а часу, що йде з ємності в одиницю, з потоком V_2 дорівнює $V_2 \cdot C_p \cdot \rho \cdot T_2$.

Позначимо через Φ кількість тепла, яке одержує ванна в одиницю часу від зовнішніх джерел (наприклад, шляхом теплопередачі від факела), а через Q_x – тепло хімічних реакцій.

Тоді швидкість зміни ентальпії рідини дорівнює різниці між теплом, що підводять, і теплом, що відводять

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d\left(VC_p\rho T\right)}{dt} = V_1 \cdot C_p \cdot \rho \cdot T_1 + \Phi + Q_x - V_2 \cdot C_p \cdot \rho \cdot T_2 .$$

Якщо додати це рівняння до раніше розглянутої системи з п'яти рівнянь, то одержимо математичну модель для більше складного об'єкта, у якому разом з переносом речовини відбуваються теплообмінні процеси.

Слід зазначити, що при складанні останнього рівняння був зроблений ряд допущень, ступінь правомірності яких можна оцінити тільки стосовно до конкретного реального об'єкта. Припустимо, що описаний вище об'єкт є спрощеним

аналогом однієї з ванн подового сталеплавильного агрегату безперервної дії. Розглянемо під цим кутом зору представлене вище рівняння теплового балансу. Воно справедливо в припущенні, що втрати тепла в навколишнє середовище відсутні, а теплоємність C_p і щільність ρ не залежать від температури і хімічного складу металу. Якщо останні припущення якоюсь мірою припустимі, то перше може викликати істотну (порядку 10...15 %) помилку в тепловому балансі. При сталому тепловому режимі ця величина може прийматися постійною, у випадку ж різкої зміни співвідношення між приходом і витратою тепла помилка може бути значною, якщо не враховувати акумуляцію тепла кладкою. Таким чином, у наведене вище рівняння теплового балансу варто додати зі знаком мінус ще одну складову $Q_П$, більше докладний облік якої вимагає складання рівнянь теплопередачі, наприклад, для стаціонарного випадку, виду

$$Q_П = \lambda \cdot F\left(T_{к.в} - T_{к.н}\right),$$

де $T_{к.в}$ і $T_{к.н}$ – внутрішня і зовнішня температури футеровки;

F – площа футеровки;

λ – коефіцієнт теплопровідності.

Подальший розвиток моделі стосовно до сталеплавильного агрегату безперервної дії зажадає описи кінетики і рівноваги хімічних реакцій, що протікають у ванні, їхнього внеску в матеріальні і теплові баланси, масо- і теплопередачі зі шлаку у метал, розкриття залежності теплового потоку $Ф$ від параметрів факела, які у свою чергу залежать від витрат палива, окислювача і умов змішання.

Частина цих процесів може бути описана з використанням розглянутого вище аналітичного підходу, що природно спричинить подальше ускладнення моделі, а це можливо до цілком певних розумних меж. Крім того, при математичному описі об'єктів практично завжди залишаються такі сторони або процеси, які не піддаються однозначному детермінованому опису. Не слід також забувати, що нерідко вхідні і вихідні параметри виміряються з істотними погрішностями. У цих випадках використаються експериментально-статистичні методи,

які дозволяють виділити низькочастотні регулярні складові на тлі перешкод, оцінити величину помилок контролю, визначити ступінь адекватності моделі за експериментальним даними і т.д.

4.6 Математичний опис об'єктів з розподіленими параметрами

У розглянутому вище прикладі в припущенні ідеального перемішування ванни (наприклад, шляхом її продувки інертним газом) можна було зробити допущення, що її фізичні параметри (состав, температура та ін.) по всьому об'ємі практично однакові, тобто тут маємо справа із просторово однорідним фізичним полем. Зміна ж параметрів такого поля в часі може бути представлене як поводження характерної його точки. Такого роду об'єкти прийнятий називати об'єктами із зосередженими параметрами. Вони описуються звичайними (лінійними й нелінійними) диференціальними рівняннями.

Однак у багатьох практично важливих випадках поряд зі зміною параметрів поля в часі відбувається їхня істотна зміна також у просторі. Математичним апаратом для опису таких об'єктів, називаних об'єктами з розподіленими параметрами, є диференціальні рівняння в частинних похідних. Загальний вид такого рівняння наступний:

$$A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + a\frac{\partial u}{\partial x} + b\frac{\partial u}{\partial x} + cu = F(x, y), \qquad (4.101)$$

Залежно від знака дискримінанта $D = AC - B^2$ одержують один з наступних типів рівнянь: еліптичне ($D > 0$), параболічне ($D = 0$), гіперболічне ($D < 0$) і змішане D не змінює знак в області, обмеженої кривій $F(x, y) = 0$.

Рівняння еліптичного типу (рівняння Пуассона) має такий вигляд:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = F(x, y). \qquad (4.102)$$

При *F(x, y)* = 0 маємо окремий випадок – рівняння Лапласа.

Рівняння параболічного типу (рівняння теплопровідності і дифузії)

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = F(x,t) \tag{4.103}$$

описує зокрема нестаціонарний розподіл температури уздовж тонкого однорідного стрижня.

Рівняння гіперболічного типу (хвильове рівняння)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \tag{4.104}$$

описує зокрема поперечні коливання струни в кожному з перетинів *x* у часі.

Застосовність рівняння відповідного виду визначається, насамперед, фізичними властивостями конкретного об'єкта, а також характером впливу зовнішнього середовища (граничними умовами). У ряді випадків такі рівняння вдається одержати шляхом аналітичних міркувань. Як приклад такого підходу можна взяти вивід рівняння теплопровідності.

Розглянемо процес теплопередачі по довжині тонкого стрижня, що нагрівають з одного кінця полум'ям пальника, у припущенні, що втрати тепла в навколишнє середовище відсутні (рис. 4.9).

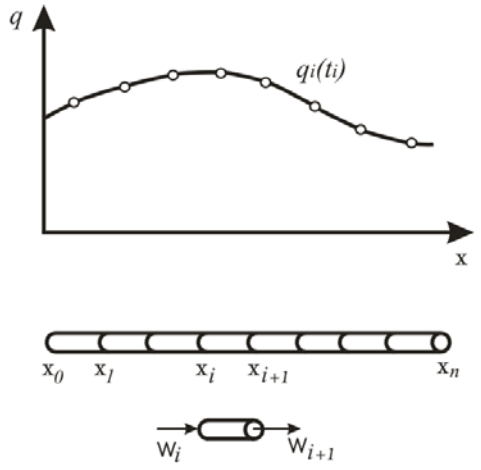


Рисунок 4.9 - Схема до виводу рівняння теплопровідності

Подумки розділимо весь стрижень по довжині на велику кількість маленьких шматочків. Відповідно до закону збереження енергії зміна кількості тепла в *i*-тому шматочку $q_i(t_j) - q_i(t_{j+i})$ за деякий проміжок часу $t_j - t_{j+1}$ визначається припливом тепла від попередні і відтоком у наступний шматочок, тобто різницею теплових потоків $w_{i+1} - w_i$ через торці елементарного циліндрика. У такий спосіб рівняння балансу тепла для *i-того* елементарного об'єму в *j*-тий момент часу

$$\left[q_i\left(t_{j+1}\right) - q_i\left(t_i\right)\right]\left(x_{i+1} - x_i\right) = -\left(w_{i+1} - w_i\right)\left(t_{j+1} - t_j\right),$$

де x_i і x_{i+1} – координати початку й кінця елементарного циліндрика.

Після нескладних перетворень одержуємо різницеве рівняння

$$\frac{q_i\left(t_{j+1}\right) - q_i\left(t_i\right)}{t_{j+1} - t_j} = -\frac{w_{i+1} - w_i}{x_{i+1} - x_i},$$
$$\left(t_{j+1} - t_j\right) \to 0, \left(x_{i+1} - x_i\right) \to 0. \tag{4.105}$$

Дорівнюючи всі ці різниці до нуля, тобто переходячи від кінцевих різниць до нескінченно малих приростів та їхніх меж, одержуємо в результаті цього граничного переходу диференціальне рівняння

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\frac{\partial w}{\partial x}, \tag{4.106}$$

відповідному рівнянню (4.105).

З огляду на, $q = \rho \cdot C_p \cdot T$, $w = \lambda\,(d / dx)$ (ρ, C_p, λ - щільність, теплоємність, коефіцієнт теплопровідності), одержуємо шукане рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho \cdot C_p \cdot T\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right), \tag{4.107}$$

яке в припущенні сталості теплофізичних параметрів ρ, C_p і λ приймає вид:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho \cdot C_p} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \tag{4.108}$$

аналогічний рівнянню (4.103), відрізняючись від нього лише відсутністю члена *F(x, t)*, що враховує крайові умови.

Рівняння (4.107) і (4.108) можуть бути використані також для опису теплопередачі через нескінченно більшу стінку певної товщини. Рівняння (4.108) описує процес нестаціонарної теплопровідності для одномірного завдання, коли неоднорідність поля проявляється тільки в одному напрямку. У випадку ж дво- і тривимірних завдань у правій частині рівняння (4.108) з'являються частки похідні по відповідних координатах.

Таким чином, як об'єкт із розподіленими параметрами був розглянутий процес теплопередачі. Внаслідок же подоби процесів теплопередачі і дифузії, що описують її рівняння по виду аналогічні рівнянням теплопровідності, що можна бачити з порівняння з наведеним раніше рівнянням дифузії (4.52)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) + f_C .$$

Вивід рівняння теплопровідності є одночасно гарною ілюстрацією тісної взаємодії фізичних і математичних методів. При постановці завдання тут використовувалися, насамперед, фізичні представлення про процес теплопередачі, у результаті чого на основі закону збереження енергії було отримане рівняння балансу тепла для елементарного об'ємі. Всі подальші етапи виводу рівняння теплопровідності з'явилися результатом чисто формальних математичних перетворень (4.105) - (4.107), що приводять до одержання кінцевого рівняння (4.108).

Питання для самоконтролю

1. Які фізико-хімічні перетворення протікають у металургійних агрегатах?
2. Чим визначається успіх створення адекватної математичної моделі для конкретного металургійного процесу (агрегату)?
3. Які дві групи завдань можна вирішувати з використанням законів термодинаміки?
4. Приведіть приклад завдання, пов'язаної зі складанням енергетичних балансів?
5. Приведіть приклад завдань, пов'язаних з визначенням характеристик рівноваги.
6. Приведіть реакцію відновлення оксиду заліза воднем.
7. При яких умовах припиняється процес відновлення оксиду заліза по реакції:
   Fe(т) + H_2(г) = Fe(т) + H_2O(г)?

8.Що треба із закону збереження енергії?
9.Що необхідно враховувати при складанні балансів для теплових явищ?
10. Чому дорівнює величина елементарної роботи δA?
11. Виразите величину елементарної роботи δA через тиск і об'єм.
12. Виразите величину елементарної роботи δA через силу і відстань.
13. Напишіть рівняння, що зв'язує тиск (*p)*, об'єм (*V*) і температуру (*T*).
14. При яких умовах будь-який газ можна вважати ідеальним?
15. Закінчите наступне вираження: « $A = \int_{V1}^{V2} pdV = \int_{V1}^{V2} \frac{nRT}{V} dV = ...$ ».
16. Чи залежить внутрішня енергія ідеального газу від об'єму?
17. Чи залежить внутрішня енергія реального газу від об'єму?
18. Якою функцією є внутрішня енергія і чим вона визначається?
19. Напишіть рівняння для визначення внутрішньої енергії?
20. Приведіть співвідношення між кількістю тепла (*q*), внутрішньої енергії (*U*) і роботою (*A*).
21. Дайте формулювання першого закону термодинаміки.
22. У що перетворюється тепло, яке підводять до системи, при ізотермічному розширенні ідеального газу?
23. На що витрачається тепло, яке підводять до системи, при ізохоричному процесі?
24. На що витрачається тепло, яке підводять до системи, при ізобаричному процесі?
25. Який параметр залишається постійним при ізотермічному процесі?
26. Який параметр залишається постійним при ізохоричному процесі?
27. Який параметр залишається постійним при ізобаричному процесі?
28. Напишіть формулу для визначення ентальпії через внутрішню енергію, тиск і обсяг.
29. Що дозволяє визначити закон Геса?
30. Дайте формулювання закону Геса.
31. Запишіть математичне формулювання закону Геса.
32. Як визначити стандартні ентальпії утворення багатьох речовин?
33. Запишіть диференціальну формулу рівняння Кірхгофа.
34. Запишіть інтегральну форму рівняння Кірхгофа.
35. Запишіть рівняння залежності теплоємності (C_P) від температури.
36. Другий закон термодинаміки.
37. Що таке ентропія?
38. Чому дорівнює зміна ентропії при протіканні хімічної реакції?
39. Залежність ентропії від температури.
40. Вільна енергія Гібса.
41. Зв'язок між енергією Гібса і роботою.
42. Константа рівноваги хімічної реакції.
43. Зв'язок між рівновагою хімічної реакції й енергією Гібса.
44. Залежність константи рівноваги від температури.
45. Гомогенні і гетерогенні хімічні реакції.
46. Рівняння для визначення швидкості хімічної реакції.
47. Молекулярність і порядок хімічної реакції.
48. Хімічні реакції нульового порядку.
49. Хімічні реакції першого порядку.
50. Хімічні реакції другого порядку.
51. Енергія активації.
52. Основні стадії гетерогенних реакцій.
53. Основні особливості процесів кінетичної області.
54. Основні особливості процесів дифузійної області.
55. Процес дифузії речовини.

5 ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧНІ МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО ОПИСУ

Найпоширенішими експериментально-статистичними методами математичного опису є регресійний аналіз (стосовно до пасивного і активного факторного експерименту), динамічний кореляційний аналіз (аналіз випадкових процесів), ідентифікація і оцінювання параметрів, у тому числі з використанням адаптивних моделей [2].

5.1 Основні характеристики випадкових величин

Випадковою величиною називається величина, що у результаті досвіду може прийняти те або інше заздалегідь невідоме значення. Прикладами можуть служити: втрати і підсмоктування повітря, ступінь засвоєння кисню, неточності зважування компонентів шихти, коливання хімічного складу сировини у зв'язку з недостатнім усередненням і т.д.

Співвідношення, що встановлює зв'язок між можливими значеннями випадкової величини і відповідними їм ймовірностями, називається *законом розподілу*, що кількісно виражається у двох формах.

Імовірність події $X < x$, *що* залежить від значення, називається *функцією розподілу випадкової величини X*:

$$F(x) = P(X < x). \qquad (5.1)$$

F(x) є не убутною функцією (рис. 5.1). Значення її при граничних значеннях аргументу рівні: $F(-\infty) = 0$ і $F(+\infty) = 1$.

Рисунок 5.1 – Крива функції розподілу

Частіше використовується інша форма закону розподілу – *щільність розподілу випадкової величини X*, що є похідною функції розподілу:

$$f(x) = F'(x). \tag{5.2}$$

Тоді імовірність знаходження величини x в інтервалі від x_1 до x_2 можна виразити через щільність розподілу:

$$P(x_1 < x < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx. \tag{5.3}$$

Щільність розподілу є позитивна функція (рис. 5.2), площа під кривою розподілу дорівнює одиниці:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1. \tag{5.4}$$

Функція розподілу може виражатися через щільність розподілу:

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x)dx. \tag{5.5}$$

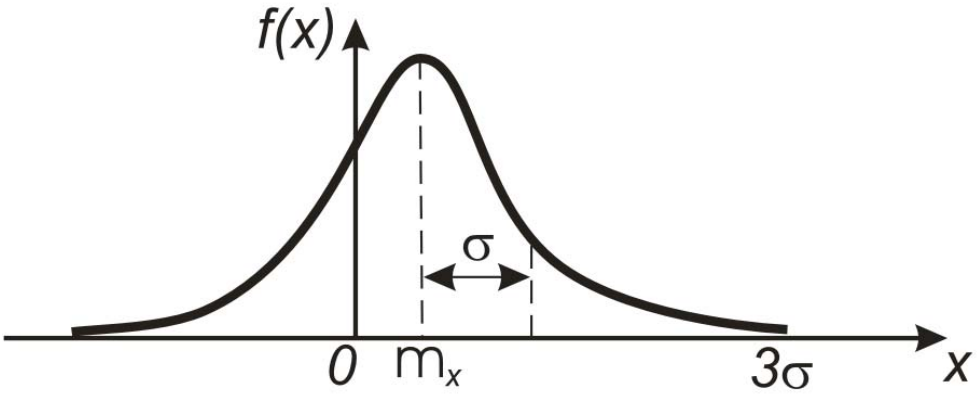


Рисунок 5.2 – Крива щільності розподілу

Для рішення більшості практичних завдань закон розподілу, тобто повна характеристика випадкової величини незручний для використання. Тому частіше застосовують числові характеристики випадкової величини, що визначають основні риси закону розподілу. Найпоширенішими з них є математичне очікування і дисперсія (або середньоквадратичне відхилення).

Математичне очікування випадкової величини визначається в такий спосіб

$$M[X] = m_x = \sum_{i=1}^{N} x_i P_i , \qquad (5.6)$$

де x_i – можливе значення випадкової величини;
P_i – імовірність цього значення.

Математичне очікування випадкової величини X звичайно оцінюється її середнім арифметичним, котре при збільшенні числа експериментів n сходиться до математичного очікування

$$m_x = \sum_{i=1}^{n} x_i / n , \qquad (5.7)$$

де x_i – спостережувані значення випадкової величини.

Важливо відзначити, що у випадку, якщо x – безупинно мінлива в часі величина (температура склепіння печі, стінки, хімічний склад продуктів горіння), то необхідно брати в якості x_i значення величини X, розділені такими інтервалами в часі, щоб їх можна було розглядати як незалежні експерименти. Практично це зводиться до урахування інерційності по відповідних каналах. Способи оцінки інерційності об'єктів будуть розглянуті нижче.

Медіана - значення випадкової величини, що відповідає середині впорядкованого за величиною ряду значень змінної. У випадку безперервної випадкової величини медіаною є така точка z, при якій

$$\int_{-\infty}^{z} f(x)\,dx = 0,5 , \qquad (5.8)$$

а, у випадку дискретної змінної

$$\sum_{x_i \le z} P(x_i) = 0,5 . \qquad (5.9)$$

Якщо загальне число n значень дискретної випадкової величини непарне, то медіана дорівнює значенню випадкової величини з індексом $i = (n + 1)/2$. При

парному числі *n* медіана дорівнює ½.

Мода – значення випадкової величини, що відповідає максимальної щільності ймовірності *f(x)* у випадку безперервної випадкової величини, або значення випадкової величини, що має максимальну ймовірність у тому випадку, коли випадкова величина дискретна.

Крім характеристик положення центра, користуються ще рядом інших характеристик, що описують розсіювання, симетрію і гостровершинність розподілу. Ці характеристики можна представити за допомогою моментів розподілу.

На практиці найчастіше застосовують моменти двох видів: початкові і центральні. *Початковим моментом* s-ного порядку дискретної випадкової величини *x* називають суму наступного виду:

$$\nu_s = \sum_{i=1}^{N} x_i^s P(x_i), \tag{5.10}$$

а у випадку безперервної випадкової величини він дорівнює

$$\nu_s = \int_{-\infty}^{\infty} x^s f(x)\,dx. \tag{5.11}$$

Таким чином, початковий момент s-ного порядку є математичне очікування s-ного ступеня випадкової величини *x:*

$$\nu_s = m_x^s. \tag{5.12}$$

Очевидно, початковий момент першого порядку випадкової величини *x* дорівнює математичному очікуванню m_x.

Центральним моментом s-ного порядку випадкової величини *x* називають математичне очікування s-ного ступеня відхилення випадкової величини *x* від її математичного очікування m_x

$$\mu_s = M(X - m_s)^s. \tag{5.13}$$

Для дискретної випадкової величини s-ний центральний момент дорівнює

$$\mu_s = \sum_{i=1}^{N} (x_i - m_x)^s P(x_i). \qquad (5.14)$$

Для безперервної випадкової величини

$$\mu_s = \int_{-\infty}^{\infty} (x - m_x)^s f(x) dx. \qquad (5.15)$$

Центральний момент другого порядку μ_2 називається дисперсією і служить мірою розсіювання.

Дисперсія визначає розсіювання випадкової величини біля її математичного очікування

$$D[X] = \sum_{i=1}^{N} (x_i - m_x)^2 P_i. \qquad (5.16)$$

Оцінка дисперсії здійснюється за формулою

$$D_x = \frac{\sum_{i=1}^{N} (x_i - m_x)^2}{n-1}, \qquad (5.17)$$

а середньоквадратичне відхилення за формулою

$$\sigma_x = \sqrt{D_x}. \qquad (5.18)$$

Як відносну характеристику розсіювання використовують *коефіцієнт варіації*, який являє собою відношення квадратичного відхилення до математичного очікування випадкової величини

$$\gamma = \frac{\sigma_x}{m_x}. \qquad (5.19)$$

Центральний момент третього порядку μ_3 використовується для числового виміру асиметрії розподілу. Якщо розподіл симетричний, то $\mu_3 = 0$. Якщо ж праве плече розподілу довше від лівого, то величина μ_3 позитивна, якщо ж, навпаки,

ліве плече довше від правого, то величина μ_3 негативна. Для того, щоб працювати з безрозмірною характеристикою, величину μ_3 ділять на σ_x^3. Отриманий показник називається коефіцієнтом асиметрії

$$Sk = \frac{\mu_3}{\mu_2^{3/2}}. \tag{5.20}$$

Як характеристику гостровершинності використовують коефіцієнт ексцесу

$$Ex = \frac{\mu_4}{\mu_2^2}. \tag{5.21}$$

Коефіцієнт кореляції характеризує ступінь лінійного зв'язку між величинами *x* і *y*, тобто тут уже маємо справу із системою випадкових величин. Оцінка коефіцієнта кореляції здійснюється за формулою

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - m_x)(y_i - m_y)}{(n-1)\sigma_x\sigma_y}. \tag{5.12}$$

Для того, щоб розглянутими характеристиками випадкових величин можна було користуватися з певною надійністю, необхідно крім зазначених оцінок обчислити для кожної з них помилки або довірчі інтервали, які залежать від ступеню розкиду, числа досвідів і заданої довірчої імовірності. Помилка для математичного очікування приблизно визначається за формулою

$$\varepsilon_{m_x} = \frac{t\sigma_x}{\sqrt{n}}, \tag{5.13}$$

де *t* – критерій Ст'юдента. Він вибирається з таблиць залежно від заданої довірчої імовірності *p* і числа експериментів *n* (наприклад, при *p* = 0,95 і *n* >20 *t* = 1,96).

У такий спосіб правдиве значення математичного очікування з імовірністю *p* знаходиться в довірчому інтервалі

$$\Delta m_x = m_x \pm \frac{t\sigma_x}{\sqrt{n}}. \tag{5.14}$$

При заданій точності розрахунку ε і надійності p цієї ж формули можна використовувати для розрахунку необхідного числа незалежних експериментів. Подібним чином визначається і помилка коефіцієнта кореляції величин X і Y

$$\varepsilon_{rxy} = \frac{t\left(1 - r_{xy}^2\right)}{\sqrt{n}}. \tag{5.15}$$

Вважається, що лінійна залежність між X і Y дійсно існує, якщо

$$\left|r_{xy}\right| - \frac{t\left(1 - r_{xy}^2\right)}{\sqrt{n}} > 0$$

або

$$\frac{\left|r_{xy}\right|\sqrt{n}}{\left(1 - r_{xy}^2\right)} > t. \tag{5.16}$$

Наприклад, при $t = 1{,}96$ залежність між досліджуваними величинами дійсно має місце, якщо

$$\frac{\left|r_{xy}\right|\sqrt{n}}{\left(1 - r_{xy}^2\right)} > 1{,}96. \tag{5.17}$$

У противному випадку існування залежності між величинами X і Y недостовірно.

Форма зв'язку між випадковими величинами визначається лінією регресії, що показує, як у середньому змінюється величина Y при зміні величини X, що характеризують умовним математичним очікуванням $m_{y/x}$ величини Y, що обчислюють за умови, що величина X прийняла певне значення. Таким чином, крива регресії Y на X є залежність умовного математичного очікування Y від відомого значення X

$$m_{y/x} = \varphi\left(x, a, b, ...\right), \tag{5.18}$$

де a, b – параметри рівняння (коефіцієнти).

Зміни випадкової величини *Y* обумовлені мінливістю стохастично пов'язаної з нею невипадкової величини *X,* а також інших факторів, що впливають на *Y*, але не залежних від *X.* Процес визначення рівняння регресії складається із двох найважливіших етапів: вибору виду рівняння, тобто завдання функції і розрахунку параметрів рівняння регресії.

Вид рівняння регресії вибирається виходячи з особливостей досліджуваної системи випадкових величин. Одним з можливих підходів при цьому є експериментальний підбор типу рівняння регресії за виглядом отриманого кореляційного поля між величинами *X* і *Y* або цілеспрямований перебір структур рівнянь і оцінка кожної з них, наприклад, за критерієм адекватності. У випадку ж, коли є певна апріорна інформація про об'єкт, більш ефективним є використання для цієї мети теоретичних подань про процеси і типи зв'язків між досліджуваними параметрами. Такий підхід особливо важливий, коли необхідно кількісний опис і визначення причинно-наслідкових зв'язків.

Наприклад, лише маючи деякі подання про теорії сталеплавильних процесів, можна робити висновок про причинно-наслідкові зв'язки для залежності швидкості зневуглецювання від витрати кисню, що вдмухує в конвертерну ванну, або здатності шлаку видаляти сірку з металу від його основності та окисненості. А виходячи з уявлень про гіперболічний характер залежності змісту кисню в металі від змісту вуглецю, можна заздалегідь припустити, що лінійне рівняння залежності швидкості зневуглецювання від інтенсивності продувки в області низьких вмістів вуглецю (менше 0,2 %) буде неадекватно, і в такий спосіб уникнути декількох етапів експериментального підбора типу рівняння.

Після вибору виду рівняння регресії виробляється розрахунок його параметрів (коефіцієнтів), для чого найчастіше використовується метод найменших квадратів, що буде розглянутий нижче.

5.2 Регресійний аналіз при пасивному і активному факторному експерименті

Завдання регресійного аналізу ставиться в такий спосіб. Для кожного *i-того* експерименту є набір вхідних параметрів x_{1i}, x_{2i}, ..., x_{ki} і відповідні їм значення вихідного параметра y_i. Таблиця дослідних даних виглядає в такий спосіб (табл. 5.1).

Необхідно визначити залежність вихідного параметра y від вхідних факторів $x_1, x_2, ..., x_k$, що для випадку лінійного зв'язку може мати такий вигляд:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + ... + b_kx_k . \qquad (5.17)$$

Завдання зводиться до того, щоб при обмірюваних під час експериментів значеннях вхідних перемінних $x_1, x_2, ..., x_k$ і вихідної перемінної y визначити оцінки коефіцієнтів рівняння регресії $b_0, b_1, b_2, \ldots$, які з певним ступенем імовірності будуть відображати вплив аргументів $x_1, x_2, ..., x_k$ на y [14].

Для визначення цих коефіцієнтів широко використовується метод найменших квадратів, ідея якого полягає в наступному.

Таблиця 5.1 – Форма подання дослідних даних

Номер експерименту	Входи			Виходи
	x_1	x_2	x_k	
1	x_{11}	x_{21}	x_{k1}	y_1
2	x_{12}	x_{22}	x_{k2}	y_2
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
N	x_{1N}	x_{2N}	x_k	y

Позначимо через $\overline{y_i}$ розрахункове значення вихідної величини, отримане по рівнянню регресії (5.17), а під y_i будемо розуміти фактичне значення вихідної перемінної, обмірюваної в *i-тому* експерименті.

Завдання зводиться до мінімізації суми квадратів відхилень $\overline{y_i}$ від y_i наступного виду:

$$S = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - \overline{y_i} \right)^2 = \min , \tag{5.18}$$

де N – число експериментів.

Підставивши в це вираження значення y з (5.17), одержуємо

$$S = \sum_{i=1}^{N} \left[y_i - \left(b_0 + b_1 x_{1i} + b_2 x_{2i} + ... \right) \right]^2 \to \min . \tag{5.19}$$

Тобто процес зводиться до знаходження таких значень коефіцієнтів b_0, b_1, b_2, ..., які давали б мінімальну розбіжність між розрахунковими і обмірюваними в експерименті значеннями вихідного параметра y.

Ця умова може бути виконана, якщо дорівняти до нуля частинні похідні вираження (5.19) за кожним із коефіцієнтів b_0, b_1, b_2, ... і вирішити спільно отриману при цьому систему так званих визначальних рівнянь виду

$$\frac{\partial S}{\partial b_0} = 0; \frac{\partial S}{\partial b_1} = 0; \frac{\partial S}{\partial b_2} = 0; ..., \tag{5.20}$$

які після диференціювання перетворюються в нормальну систему лінійних рівнянь. Наприклад, для випадку залежності від двох вхідних перемінних, центрованих щодо середніх, система приймає наступний вид:

$$\begin{aligned} b_1 \sum_{i=1}^{N} x_{1i}^2 + b_2 \sum_{i=1}^{N} x_{1i} x_{2i} &= \sum_{i=1}^{N} x_{1i} y_i , \\ b_1 \sum_{i=1}^{N} x_{1i} x_{2i} + b_2 \sum_{i=1}^{N} x_{2i}^2 &= \sum_{i=1}^{N} x_{2i} y_i . \end{aligned} \tag{5.21}$$

Шукані коефіцієнти b_1 і b_2 можуть бути отримані в результаті спільного рішення цієї системи рівнянь.

Вихідні дані, необхідні для визначення коефіцієнтів рівняння регресії (табл. 5.1) можуть бути отримані двома шляхами:

1. У результаті пасивного спостереження за процесом або явищем.
2. Шляхом постановки активного, заздалегідь спланованого експерименту.

Зупинимося коротко на кожному із цих підходів. У першому випадку дані для табл. 5.1 одержують шляхом спостереження і реєстрації в деяких моментах часу значень вхідних і вихідних перемінних. Однак навіть при пасивному спостереженні, або так називаному пасивному експерименті, потрібно скласти певний план збору вихідних даних, вибрати найбільше що істотно впливають фактори, оцінити інтервал часу, через який потрібно знімати показання приладів, і т.д.

Але найбільш характерною особливістю такого підходу є відсутність якого-небудь втручання в процес, що має ряд переваг як з погляду простоти реалізації, так і з погляду можливості виключення аварійних ситуацій на об'єкті.

Однак цей спосіб одержання експериментальних даних страждає цілим рядом великих недоліків, які зв'язані насамперед з тим, що метод найменших квадратів, покладений в основу визначення коефіцієнтів рівняння регресії, може дати роздільні незміщені (достовірні) оцінки коефіцієнтів b_0, b_1, b_2, ... лише при дотриманні певних передумов (допущень), які часто важко виконати. Найголовніші з них наступні:

1) вхідні величини $x_1, x_2, ..., x_k$ (теоретично невипадкові) повинні вимірятися з точністю, яка значно перевищує точність виміру вихідної величини y;
2) вхідні величини $x_1, x_2, ..., x_k$ не повинні корелювати, тобто статистично зв'язані між собою. Цю умову досить важко дотримати на практиці. Наприклад, з міркувань керування процесом часто потрібно одночасно погоджена зміна декількох керуючих впливів;
3) вихідний параметр y є випадкова величина, що підкоряється нормальному закону розподілу;
4) розсіювання (дисперсія) вихідного параметра y не залежить від його абсолютної величини (умова рівноточності досвідів).

Крім того, деякі з вихідних перемінних протягом усього періоду спостереження можуть коливатися в дуже вузьких межах, внаслідок чого коефіцієнти при цих змінних, як правило, виявляються незначущими, у той час як фактично виходячи з фізичних міркувань цей параметр у певних умовах впливає на вихід-

ну змінну *y*.

При такому підході дуже складно вирішується завдання введення в рівняння регресії нових змінних і відбраковування незначущих, тому що в цьому випадку потрібно заново будувати і вирішувати систему визначальних рівнянь (5.20) і систему, що випливає з неї, лінійних рівнянь типу (5.21).

Цих недоліків можна значною мірою уникнути, якщо спеціальним образом спланувати експеримент і підтримувати вхідні змінні на певних фіксованих рівнях.

Другий підхід орієнтований на активний спланований експеримент. Можна виділити два його різновиди: однофакторний і багатофакторний експеримент. У першому випадку застосовують почергове варіювання однієї з перемінних, залишаючи інші на постійним рівнях. Це так званий метод Гауса-Зейделя, при якому потрібне проведення великої кількості досвідів, що, однак не дозволяє визначити ефекти парних взаємодій і не гарантує при рішенні завдання пошуку оптимуму досягнення правдивого екстремуму.

Більше ефективним є активний багатофакторний експеримент, при якому в кожному експерименті провадиться варіювання всіма перемінними за певним планом. Це дозволяє істотно скоротити число експериментів і на основі опису локальної ділянки поверхні вибрати напрямок крутого сходження в результаті декількох етапів якого може бути досягнута околиця оптимуму з мінімальними витратами часу і засобів [13].

Для визначення рівняння регресії лінійного виду (5.17), вхідні перемінних, які будемо називати надалі факторами, що варіюють, підтримуються в цьому випадку на двох заздалегідь обраних фіксованих рівнях. Верхній рівень перемінної $x_{i,max}$ кодується через +1, нижній $x_{i,min}$ через –1. Співвідношення між натуральні кодованими змінними має вигляд

$$X_i = \frac{x_i - x_{i0}}{\Delta x_i},$$

де x_i – натуральна перемінна;

X_i – кодована перемінна, яка приймає значення +1 або –1;
x_{i0} – середній (нульовий) рівень, біля якого здійснюється варіювання;
Δx_i – інтервал (крок) варіювання стосовно x_{i0}.

Число проведених експериментів визначається з співвідношення $N = 2^k$, де k – число факторів, що варіюють. Отже, при двох факторах мінімальне число досвідів (без повторення) дорівнює 4, при трьох факторах 8 і т.д. Матриці планування для цих випадків наведені відповідно в табл. 5.2 і 5.3.

Як легко помітити, матриця так називаного повного факторного експерименту (ПФЕ) будується за принципом – ні однієї повторюваної комбінації рівнів факторів. Для того, щоб для будь-якого числа факторів будувати матрицю цілеспрямовано, а не шляхом простого перебору, можна скористатися наступним правилом. Наприклад, як видно з порівняння табл. 5.2 і 5.3, матриця експерименту 2^3 виходить шляхом повторення матриці експерименту 2^2 при нижньому (–1), а потім при верхньому (+1) значенні нового фактора x_3. Можна привести ще більш просте правило. Рівні факторів для першої перемінної варіюють у кожній наступній ситуації, для другого фактора у два рази рідше, для третього ще у два рази рідше, тобто через чотири експерименти на п'ятий і т.д. Таким чином, при введенні кожного нового фактора число експериментів подвоюється і при зростанні числа незалежних перемінних може стати досить великим. Так, наприклад, уже при шести факторах для здійснення ПФЕ потрібно 64 експерименти.

Таблиця 5.2 – Матриця планування експерименту типу 2^2

Номер експерименту	x_1	x_2	y
1	-1	-1	y_1
2	+1	-1	y_2
3	-1	+1	y_3
4	+1	+1	y_4

Для скорочення числа експериментів часто використовують дробовий факторний експеримент (ДФЕ), основна ідея якого полягає в тому, що, якщо з яких-небудь міркувань можна зневажити необхідністю визначення коефіцієнтів при деяких факторах або їхніх взаємодіях, то реалізується не вся матриця ПФЕ, а, наприклад половинна, четверта, восьма і т.д. частина повної матриці.

Таблиця 5.3 – Матриця планування експерименту типу 2^3

Номер експерименту	x_1	x_2	x_3	y	Номер експерименту	x_1	x_2	x_3	y
1	-1	-1	-1	y_1	5	-1	-1	+1	y_5
2	+1	-1	-1	y_2	6	+1	-1	+1	y_6
3	-1	+1	-1	y_3	7	-1	+1	+1	y_7
4	+1	+1	-1	y_4	8	+1	+1	+1	y_8

Цікаво відзначити, що при повному факторному експерименті є можливість визначити коефіцієнти не тільки для рівняння регресії лінійного виду (5.17)

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2,$$

але і для рівняння, що відображає взаємодії факторів, наприклад

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2, \qquad (5.22)$$

у випадку експерименту 2^2 або

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3 \qquad (5.23)$$

для експерименту 2^3 і аналогічно для більшого числа факторів.

Матриці планування при цьому доповнюються стовпцями добутків (взаємодій) факторів і приймають вид (табл. 5.4 і 5.5)

Таблиця 5.4 – Матриця планування експерименту типу 2^2 з стовпцем взаємодії

Номер експерименту	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	-1	-1	+1	y_1
2	+1	-1	-1	y_2
3	-1	+1	-1	y_3
4	+1	+1	+1	y_4

Значення кодованих змінних у стовпцях добутків виходять шляхом перемножування відповідних перемінних, наприклад, для добутку x_1x_2 перемножуються перемінних у відповідних рядках (варіантах досвідів) стовпців x_1 і x_2 і т.д.

При великій кількості факторів (більше трьох) повний факторний експеримент має значну надмірність досвідів, тому що коефіцієнти при деяких взаємодіях (особливо при потрійних і більше високих добутках) не мають фізичного змісту і є незначними.

Якщо для опису якої-небудь локальної ділянки поверхні відгуку можна обмежитися рівнянням лінійного виду, то число необхідних досвідів може бути істотно скорочено. Для цієї мети використовується ДФЕ. Якщо реалізується половинна матриця, експеримент позначається 2^{k-1}, а далі відповідно 2^{k-2}, 2^{k-3} і т.д. При цьому замість взаємодії, яким можна зневажити, уводиться новий фактор, рівні якого під час експерименту підтримуються у відповідності зі значеннями кодованих змінних стовпця добутку, що заміняться новим фактором.

Таблиця 5.5 – Матриця планування експерименту типу 2^3 зі стовпцями взаємодій

Номер експерименту	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	y_1
2	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	y_2
3	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	y_3
4	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	y_4
5	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	y_5
6	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	y_6
7	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	y_7
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_8

Наприклад, якщо в матриці ПФЕ типу 2^2 (см. табл. 5.4) можна зневажити першою взаємодією x_1x_2 і прийняти $x_1x_2=x_3$, то план експерименту, що складає із чотирьох досвідів, виявиться достатнім для визначення рівняння, що описує лі-

нійну залежність від трьох факторів $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3$.

При реалізації ПФЕ треба було б провести вісім досвідів, половина яких для рішення поставленого завдання було б надлишкової. Треба однак помітити, що при реалізації ДФЕ оцінки коефіцієнтів при лінійних членах виявляються змішаними з ефектами взаємодії, якими зневажають.

Перш ніж приступить до реалізації матриці планування необхідно вибрати для кожного фактора опорний рівень x_{i0} і інтервал варіювання Δx_i, що дозволить визначити нижнє і верхнє значення рівня кожної із всіх змінних, що варіюють.

Після того, як складена матриця планування і обрані рівні варіювання факторів можна перейти до постановки досвідів, у кожному з яких повинна бути реалізована один з рядків матриці. При цьому, як уже вказувалося вище, кодованому значенню змінної (-1) відповідає нижній рівень фактора, що варіюють, а значенню (+1) – верхній рівень.

Для усунення упередженості або суб'єктивізму дослідника, а також систематичних помилок, зв'язаних, наприклад, з розігрівом або охолодженням агрегатів і приладів під час експерименту, старінням каталізатора, експерименти проводяться не в черговості відповідному їхньому порядковому номеру в матриці планування, а у випадковому порядку, називаному порядком рандомізації. Порядок рандомізації може бути, наприклад, розіграний шляхом витаскування номерів досвідів з урни.

У результаті реалізації на об'єкті кожного з експериментів заповнюється останній стовпець матриці, тобто записуються значення вихідної величини *y,* отримані при проведенні відповідних варіантних експериментів (рядків матриці).

Як правило, кожний з варіантів експериментів потім повторюється. Число повторень залежить від конкретних умов проведення експериментів, але в остаточному підсумку визначається по ступеню розбіжності результатів для тих самих варіантів досвіду, тобто по ступеню розкиду вихідної величини *y* у кожному з рядків матриці.

Ця процедура називається перевіркою відтворюваності і здійснюється з

використанням спеціального критерію Кохрена. Необхідно підкреслити, що перевірка відтворюваності є найважливішою передумовою, лише при виконанні якої результатам досвідів і отриманим на їхній основі закономірностям можна довіряти.

Після реалізації досвідів відповідно до матриці планування і перевірки відтворюваності можна приступити до розрахунку коефіцієнтів рівняння регресії, завдяки переходу до кодованих перемінних, які приймають лише два значення (-1) (+1), і спеціальному плануванню експериментів автоматично виконується досить важлива умова статистичної незалежності факторів, що варіюють (умова ортогональності)

$$\sum_{u=1}^{N} x_{iu} x_{ju} = 0; i \neq j,$$

тобто виконується одна з найважливіших передумов регресійного аналізу. Внаслідок цього коефіцієнти рівняння регресії визначаються роздільно, незалежно друг від друга.

Наприклад, коефіцієнт b_i при *i-тому* факторі x_i:

$$b_i = \frac{\sum_{u=1}^{N} x_{iu} \overline{y_u}}{N}, \qquad (5.24)$$

де N – число варіантів експериментів у матриці планування;

x_{iu} – значення кодованої перемінної в *i-тому* рядку, *i-того* стовпця, рівне або (-1), або (+1); .

y_u – середнє значення виходу для *i-того* варіанта експерименту (рядка).

Звідси видно, що розрахунок коефіцієнта зводиться до простого алгебраїчного підсумовування порядкових середніх значень виходів зі знаками стовпця, що відповідає даному фактору, і розподілу на число варіантів досвідів. Наприклад, коефіцієнт при перемінної x_1 для рівняння (5.22) з використанням табл. 4 визначається в такий спосіб:

$$b_1 = \frac{-y_1 + y_2 - y_3 + y_4}{N}.$$

Майже аналогічно і незалежно від лінійних членів визначаються коефіцієнти при взаємодіях

$$b_{ij} = \frac{\sum_{u=1}^{N} x_{iu} x_{ju} \overline{y_u}}{N}, \qquad (5.25)$$

тобто необхідно скласти порядкові середні значення виходу з урахуванням знаків відповідного стовпця добутку. Наприклад, для добутку x_1x_2 у табл. 5.4

$$b_{12} = \frac{y_1 - y_2 - y_3 + y_4}{4}.$$

Коефіцієнт b_0 по фізичному змісті відповідає досвіду з підтримкою всіх факторів, що варіюють, на середніх (опорних) рівнях

$$b_0 = \frac{\sum_{u=1}^{N} \overline{y_u}}{N}. \qquad (5.26)$$

Більш докладно обробка результатів експериментів і статистичний аналіз рівняння регресії розглянуті на прикладі. Перш ніж перейти до нього необхідно помітити, що, незважаючи на всю принадність і більші переваги активного спланованого експерименту перед пасивним спостереженням, у його застосуванні є цілий ряд труднощів, пов'язаних з певними обмеженнями на його реалізацію.

Найважливішою умовою застосовності цього підходу є керованість процесу за кожним з факторів, що варіюють, тобто можливість незалежної зміни кожного із цих факторів і підтримки його на заданому рівні в період проведення досвіду.

Приклад активного факторного експерименту. Метою експерименту є визначення залежності швидкості нагріву металу в мартенівській печі $y(V_t)$ від величини абсолютного надлишку повітря x_1 ($V_{\Gamma}^{O_2}$) і теплового навантаження X_2 (Q_T) у період чистого кипіння [2, 13].

Вибираємо рівні варіювання факторів з міркувань можливості реалізації експериментів у межах технологічних обмежень і одержання значимих ефектів, що перевищують помилки експерименту (табл. 5.6).

Таблиця 5.6 – Рівні варіювання факторів

Рівні	Фактори	
	x_1 ($V_Г^{O_2}$), м^3/год	X_2 ($Q_Т$), МВт
Основний	$7 \cdot 10^3$	$33{,}5 \cdot 10^6$
Нижній	$4 \cdot 10^3$	$30 \cdot 10^6$
Верхній	$10 \cdot 10^3$	$37 \cdot 10^6$
Інтервал варіювання	$3 \cdot 10^3$	$3{,}5 \cdot 10^6$

Складаємо матрицю планування і карту проведення експерименту (табл. 5.7).

Таблиця 5.7 – Карта проведення експерименту

Номер експерименту	Порядок реалізації експериментів за рандомізацією (дві серії)	Матриця планування		$x_1 x_2$	Вихід y, °С/год		
		x_1	x_2		y_{u1}	y_{u2}	$\overline{y_u}$
1	2; 3	-1	-1	+1	61	87	74,0
2	3; 1	+1	-1	-1	53	45	49,0
3	4; 4	-1	+1	-1	67	77	72,0
4	1; 2	+1	+1	+1	97	89	93,0

Після складання матриці планування проводиться експеримент на обраному об'єкті дослідження (лабораторному або промисловому). Експерименти проводяться у випадковому порядку відповідно до принципу рандомізації. У нашому випадку в першій серії експериментів на мартенівській печі першим був реалізований експеримент з порядковим номером 4, у якому надлишок повітря і теплове навантаження підтримувалися на верхніх рівнях, при цьому отримана швидкість нагрівання 97 °С/год, другим реалізований експеримент номер 1, у якому обидва фактора x_1 і x_2 підтримувалися на нижніх рівнях, а швидкість на-

грівання виявилася рівною 60 °С/год, і т.д.

Таким чином, після проведення двох серій експериментів (у кожній по чотирьох експерименту з неповторюваними комбінаціями рівнів факторів) виявилися заповненими стовпці значень виходу y_{u1} і y_{u2}.

Тепер є все необхідне для обробки і статистичного аналізу результатів експерименту.

1. Розраховують порядкові середні значення

$$\bar{y}_1 = \frac{y_{u1} + y_{u2} + \ldots + y_{un}}{n}, \tag{5.27}$$

де n – число повторних експериментів.

$$\bar{y}_1 = \frac{61 + 87}{2} = 74.$$

Результати розрахунку заносять у стовпець $\bar{y}_u$ карти проведення експерименту (табл. 5.7).

2. Визначають порядкові дисперсії (дисперсії відтворюваності)

$$S_u^2 = \frac{\sum_{m=1}^{n} \left(\bar{y}_u - y_{um}\right)^2}{n-1}; \tag{5.28}$$

$$S_1^2 = \frac{(74-61)^2 + (74-87)^2}{2-1} = 338;$$

$$S_2^2 = 32; S_3^2 = 50; S_4^2 = 32.$$

Сума порядкових дисперсій

$$S_\Sigma^2 = \sum_{u=1}^{N} S_u^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + S_4^2 = 452. \tag{5.29}$$

3. Перевіряють відтворюваність експериментів за критерієм Кохрена

$$G = \frac{S^2_{u\max}}{S^2_{\Sigma}} = \frac{338}{452} = 0,75, \qquad (5.30)$$

де $S^2_{u\max}$ – максимальна з порядкових дисперсій.

Досвіди рівноточні, якщо $G < G_T$, де G_T – табличне значення критерію Кохрена, обиране залежно від N, n і рівня значимості (надійності). Для даного випадку при $N = 4$, $n = 2$, $p = 0,95$ табличне значення $G_T = 0,906$, тобто $G < G_T$. У випадку нерівноточності експериментів необхідно збільшити число повторних експериментів або підвищити точність.

4. Визначають коефіцієнти рівняння регресії за формулами (5.26), (5.28)

$$b_0 = \frac{\bar{y}_1 + \bar{y}_2 + \bar{y}_3 + \bar{y}_4}{4} = \frac{74 + 49 + 72 + 93}{4} = 72,0;$$

$$b_1 = \frac{-\bar{y}_1 + \bar{y}_2 - \bar{y}_3 + \bar{y}_4}{4} = \frac{-74 + 49 - 72 + 93}{4} = -1,0;$$

$$b_2 = \frac{-\bar{y}_1 - \bar{y}_2 + \bar{y}_3 + \bar{y}_4}{4} = \frac{-74 - 49 + 72 + 93}{4} = 10,5;$$

$$b_{12} = \frac{\bar{y}_1 - \bar{y}_2 - \bar{y}_3 + \bar{y}_4}{4} = \frac{74 - 49 - 72 + 93}{4} = 11,5.$$

5. Перевіряють значимість коефіцієнтів регресії. Для цього визначають дисперсію експерименту

$$S^2_y = \frac{\sum_{u=1}^{N}\sum_{m=1}^{n}\left(\bar{y}_u - \bar{y}_{um}\right)^2}{N(n-1)} = \frac{\sum_{u=1}^{N} S^2_u}{N} = 113, \qquad (5.31)$$

а також усереднену дисперсію експерименту з урахуванням повторних експериментів

$$S^2_{\bar{y}} = \frac{S^2_y}{n} = 56,5. \qquad (5.32)$$

Визначають дисперсію і середню квадратичну помилку коефіцієнтів регресії S_{bi}^2 і S_{bi}

$$S_{bi}^2 = \frac{S_{\bar{y}}^2}{N} = 14,1; S_{bi} = \sqrt{S_{bi}^2} = 3,75 \cdot \quad (5.33)$$

Знаходять значення довірчого інтервалу для коефіцієнтів регресії

$$\Delta b_i = \pm t \cdot S_{bi}, \quad (5.34)$$

де t – табличне значення критерію Ст'юдента, обиране залежно від числа ступенів свободи $f_2 = N \cdot (n - 1)$ і обраному рівню значимості (звичайно 0,05).

Коефіцієнт значимий, якщо його абсолютне значення більше довірчого інтервалу, тобто коефіцієнт повинен бути більше помилки його визначення, узятої з певним запасом.

У даному прикладі при $f_2 = 4 \cdot (2 - 1) = 4$ значення критерію Ст'юдента $t = 2,78$. Значення довірчого інтервалу $\Delta b_i = \pm 2,78 \cdot 3,75 = 10,4$.

Порівнюємо отримані коефіцієнти з довірчим інтервалом і робимо наступний висновок:

$b_0 = 72,0$	Значимий;	$b_2 = 10,5$	Значимий;
$b_1 = -1,0$	Незначимий;	$b_{12} = 11,5$	Значимий.

Таким чином, один з коефіцієнтів регресії b_1 виявився незначимим і, отже, остаточне рівняння регресії запишеться у вигляді

$$y = 72,0 + 10,5x_2 + 11,5x_1x_2.$$

При необхідності переходу від кодованих змінних до натуральних варто підставити в отримане рівняння відповідні співвідношення зв'язку між цими перемінними.

6. Перевіряють адекватність (придатність) моделі, тобто наскільки добре отримане рівняння описує результати експерименту в досліджуваній облас-

ті. Для цього найчастіше застосовують критерій Фішера *F*

$$F = \frac{S^2_{ад}}{S^2_{\bar{y}}}, \tag{5.35}$$

де $S^2_{\bar{y}}$ – усереднена дисперсія експерименту, яка знаходиться за формулою (5.32);

$S^2_{ад}$ – дисперсія адекватності або залишкова дисперсія;

$$S^2_{ад} = \frac{\sum_{u=1}^{N}\left(\hat{y}_u - \bar{y}_u\right)^2}{N - k - 1}, \tag{5.36}$$

де $\hat{y}_u$ – розраховані за отриманим рівнем значення виходу при значеннях кодованих змінних, відповідних кожному з рядків матриці планування;

$\bar{y}_u$ – усереднене значення виходу (параметра оптимізації), отримане при реалізації повторних експериментів для відповідного рядка (комбінації значень факторів матриці планування).

N – число варіантів експериментів (рядків) у матриці планування;

k – число факторів, що варіюють;

n– число повторних (паралельних) експериментів.

Модель можна вважати адекватною, якщо $F < F_{ТАБЛ}$. Табличне значення критерію Фішера знаходять залежно від числа ступенів свободи $f_1 = N - k - 1$ і $f_2 = N(n - 1)$, які чисельно дорівнюють знаменникам відповідних дисперсій $S^2_{ад}$ і $S^2_{\bar{y}}$, і рівня значимості (найчастіше 0,05).

У даному прикладі для визначення $S^2_{ад}$ обчислимо спочатку значення виходу, що пророкують отриманим вище рівнянням регресії:

$$\hat{y}_1 = 72{,}0 + 10{,}5(-1) + 11{,}5(-1)(-1) = 73{,}0;\ \bar{y}_1 = 74{,}0;$$

$$\hat{y}_2 = 72{,}0 + 10{,}5(-1) + 11{,}5(+1)(-1) = 50{,}0;\ \bar{y}_2 = 49{,}0;$$

$$\hat{y}_3 = 72{,}0 + 10{,}5(+1) + 11{,}5(-1)(+1) = 71{,}0;\ \bar{y}_3 = 72{,}0;$$

$$\hat{y}_4 = 72{,}0 + 10{,}5(+1) + 11{,}5(+1)(+1) = 94{,}0;\ \bar{y}_4 = 93{,}0.$$

Для зручності розрахунків $S^2_{ад}$ поруч зіставлені усереднені значення експерименту для тих же умов. У результаті маємо

$$S^2_{ад} = \frac{(73,5-74,0)^2 + (50,0-49,0)^2 + (71,0-72,0)^2 + (94,0-93,0)^2}{4-2-1} = 1,0.$$

Раніше отримане значення $S^2_{\bar{y}}$=56,5. Обчислюємо значення критерію Фішера

$$F = \frac{S^2_{ад}}{S^2_{\bar{y}}} = \frac{1,0}{56,5} = 0,02;$$

$$F_{ТАБЛ} = 7,7 \text{ при } f_1 = N - k - 1 = 4 - 2 - 1 = 1;$$

$$f_2 = N(n-1) = 4(2-1) = 4.$$

$F < F_{ТАБЛ}$, тобто є підстави зробити висновок про адекватність отриманої моделі.

5.3 Визначення оптимальних умов

Повний або дробовий факторний експеримент може використовуватися для рішення завдань оптимізації і інтерполяції.

Завдання оптимізації часто вирішується з використанням методу крутого сходження (методу Бокса-Уілсона), в основі якого лежить кроковий принцип досягнення оптимуму з рухом на кожному кроці в напрямку найбільшого зростання градієнта. На першому етапі локальні області, далекі від оптимуму, описуються за результатами факторного експерименту лінійним рівнянням регресії виду (5.17), на основі якого визначається напрямок руху за градієнтом

$$\Delta y_u = \frac{\partial y_u}{\partial x_1}\bar{i} + \frac{\partial y_u}{\partial x_2}\bar{j}, \qquad (5.37)$$

де *i, j* – одиничні вектори в напрямку координатних осей.

Практично напрямок руху залежить від знаків і величин коефіцієнтів рівняння регресії. Тому що при цій процедурі рівняння регресії застосовується для

прогнозування параметра оптимізації *y* за межами області його визначення, то для перевірки відповідності передвіщене в такий спосіб значення *y'* (уявний експеримент) порівнюється з фактичним знанням *y,* у зв'язку із чим у певних точках факторного простору реалізуються перевірочні експерименти. Більш наочно цей процес показаний на рис. 5.3.

Тут можна бачити, що в точці *4* результати реалізованого і уявного експерименту (пророкування за рівнем площини *I - I*, отриманому за результатами першої серії досвідів ПФЕ) істотно розходяться. Приймається рішення в околиці точки *4* поставити нову серію досвідів ПФЕ, за результатами якої знаходиться рівняння площини *II - II* (в окремому випадку рівняння прямої лінії) і рух до оптимуму триває далі.

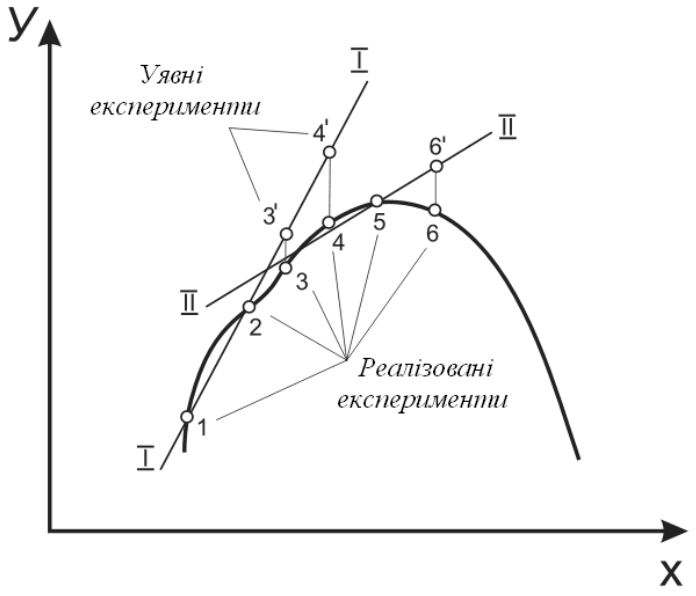


Рисунок 5.3 – Ілюстрація руху до оптимуму методом крутого сходження

В області, близької до оптимуму, коли лінійна апроксимація поверхні відгуку стає неадекватною, може бути поставлене завдання опису ділянки поверхні, близького до оптимуму із заданою точністю при мінімальному числі експериментів (завдання, що ставиться до класу інтерполяційних). Через значну кривизну поверхні в області оптимуму, як правило, потрібно підвищувати порядок полінома. Найчастіше обмежуються алгебраїчним поліномом другого порядку виду

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + \dots, \qquad (5.38)$$

для чого, природно, необхідне використання більш складних, чим ПФЕ, планів експерименту. Найбільш відомими з них є центральне композиційне, рототабельне і *D-оптимальне* планування.

5.4 Види розподілів

Функцію розподілу для опису тієї або іншої характеристики системи вибирають на підставі наявних представлень про механізм досліджуваного явища. Потім на підставі наявних експериментальних або статистичних даних роблять оцінку параметрів розподілу і на закінчення здійснюють статистичну перевірку гіпотези про адекватність обраної моделі розподілу реальному розподілу. У тому випадку, коли немає досить надійних теоретичних підстав для вибору статистичної моделі розподілу, що апроксимує, розподіл вибирають за даними оцінки параметрів розподілу з наступною перевіркою адекватності.

Вид функції розподілу переважніше вибирати на основі представлень про фізичну природу розглянутого явища, тому що в цьому випадку виключаються можливі великі погрішності при поширенні знайдених закономірностей за межі вивченого інтервалу варіювання випадкової величини. Для опису зміни тієї або іншої характеристики системи можна застосовувати безперервні і дискретні розподіли.

5.4.1 Безперервні розподіли

Нормальний розподіл

Із застосовуваних у математичній статистиці розподілів найбільше часто користуються нормальним розподілом. Широке застосування цієї моделі обумовлене тим, що відповідно до *центральної граничної теореми* розподіл середнього *n* незалежних випадкових величин, розподілених за будь-яким законом з кін-

цевими математичними очікуваннями і дисперсіями, наближається до нормального, коли число *n* спостережень у вибірці прагне до нескінченності. Розподіл вибіркового середнього прагне до нормального і при відносно невеликих *n,* якщо розподіли всіх незалежних випадкових величин не сильно відхиляються від нормального і їхньої дисперсії приблизно рівні один одному. Таким чином, якщо випадкову величину можна розглядати як результат великого числа незалежних рівновеликих впливів, тобто є підстави вважати, що вона має нормальний або гаусів розподіл.

Прикладами нормально розподілених величин можуть служити помилки виміру, результати випробування стали на міцність і ударну в'язкість, годинна продуктивність мартенівських печей, маса злитків, відлитих в однотипні виливниці та ін. Крім того, часто при дотриманні деяких (у кожному випадку своїх) умов нормальним розподілом апроксимують інші розподіли.

Нормальний розподіл визначається наступними вираженнями:

щільності

$$f(x,m,\sigma)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right], \tag{5.39}$$

інтегральної функції розподілу

$$F(x,m,\sigma)=\int_{-\infty}^{x}\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right]dz, \tag{5.40}$$

у які $-\infty < x < \infty, \quad -\infty < m < \infty, \quad \sigma > 0$,

де m - центр розподілу (його математичне очікування);

σ - стандартне відхилення, яке масштабує розсіювання.

Основні характеристики нормального розподілу:

Середнє значення: $MX = m_x$.

Дисперсія: $DX = \sigma^2$.

Третій центральний момент: $\mu_3 = 0$.

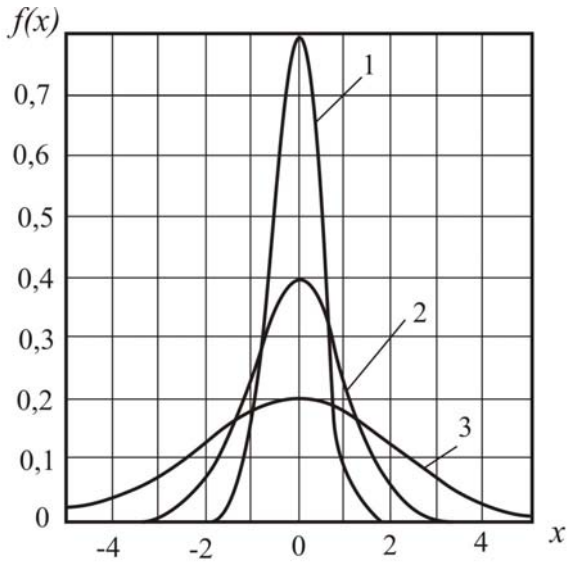
Четвертий центральний момент: $\mu_4 = 3\sigma^4$.

Коефіцієнт варіації: $\gamma = \sigma / m_x$.

Коефіцієнт асиметрії: $Sk = 0$.

Коефіцієнт ексцесу: $Ex = 3$.

На рис. 20 показані нормальні розподіли з різними значеннями σ і однаковими m.



1) σ = 0,5; 2) σ = 1,0; 3) σ = 2,0

Рисунок 5.4 – Криві функції нормального розподілу з однаковим значенням m (m = 0) і різними значеннями σ

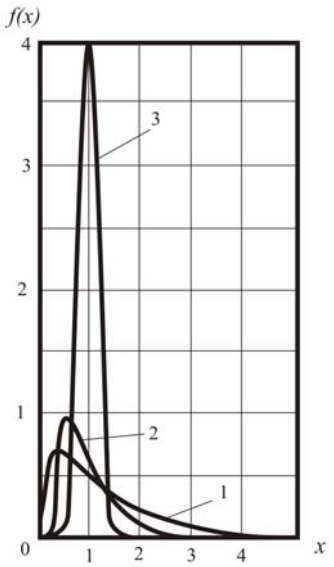
Логарифмічно нормальний розподіл

Випадкову величину x називають розподіленою *логарифмічно нормально,* якщо логарифм цієї випадкової величини розподілений нормально з параметрами m і σ.

Щільність розподілу випадкової величини x описується функцією

$$f(x,m,\sigma) = \begin{cases} \dfrac{1}{x\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\dfrac{1}{2\sigma^2}(\ln x - m)^2\right], \\ x > 0, \quad -\infty < m < \infty, \quad \sigma > 0, \quad 0 \text{ в інших випадках.} \end{cases} \tag{45}$$

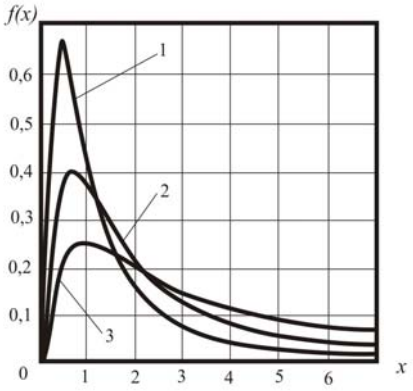
Цей розподіл має правобічну асиметрію і приймає різні форми, представлені на рис. 5.5 і 5.6, залежно від значень m і σ.



1) 1,0; 2) 0,5; 3) 0,1

Рисунок 5.5 – Логарифмічно нормальні розподіли з однаковими m = 0 і різними значеннями σ

Логарифмічно нормальний розподіл застосовують у тих випадках, коли розсіювання обумовлене множенням великої кількості невеликих помилок. Воно знаходить застосування при описі розмірів часток, що виходять у процесі дроблення породи, при випробуванні на довговічність, у біології, в економіці та в інших областях.



1) 0; 2) 0,5; 3) 1,0

Рисунок 5.6 – Логарифмічні нормальні розподіли з однаковими σ = 1 і різними значеннями m

Основні характеристики логарифмічно нормального розподілу:

Середнє значення: $m_x = \exp\left(m + \frac{\sigma^2}{2}\right)$.

Дисперсія: $\sigma_x^2 = \exp\left(2m + \sigma^2\right)\left(\exp\left(\sigma^2\right) - 1\right)$.

Мода: $x = \exp\left(m - \sigma^2\right)$.

Медіана: $x = \exp(m)$.

Гамма-розподіл

Гамма-розподілом користуються для опису випадкових величин, обмежених з однієї сторони. Щільність *гамма-розподілу* описується вираженням

$$f(x,\alpha,\lambda) = \begin{cases} \frac{\lambda^{\alpha}}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} \exp(-\lambda x), \\ x \geq 0, \quad \lambda > 0, \quad \alpha > 0, \quad 0 \text{ в інших випадках.} \end{cases}$$

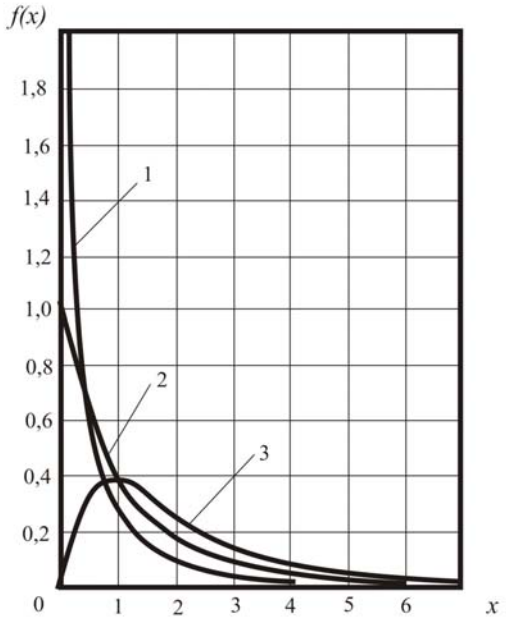
де $\Gamma(\alpha)$ – гамма-функція:

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^{\infty} x^{\alpha-1} \exp(-x)dx .$$

Коли α ціле позитивне число, то рівняння гамма-функції приймає наступний вид:

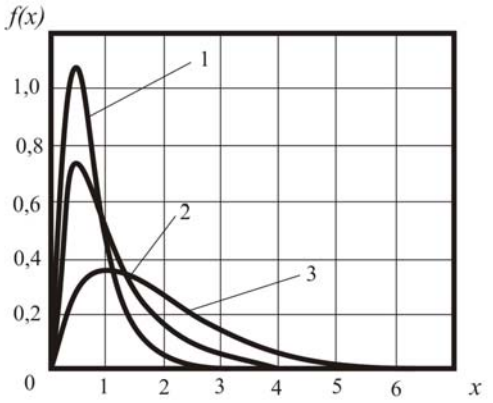
$$\Gamma(\alpha) = (\alpha - 1)! .$$

Параметр α визначає форму розподілу, а параметр λ – його масштаб (рис. 5.7 і 5.8). При $\alpha \leq 1$ графік щільності розподілу має вигляд кривої убутної функції, а при $\alpha > 1$ графік являє собою одновершинну криву з максимумом у крапці $x = (\alpha - 1)/\lambda$. Коли $\alpha = 1$, гамма-розподіл переходить в експонентний розподіл.



1) 0,5; 2) 1,0; 3) 2,0

Рисунок 5.7 – Гамма-розподілу з однаковими значеннями $\lambda = 1$ і різними значеннями α



1) 3,0; 2) 2,0; 3) 1,0

Рисунок 5.8 - Гамма-розподіл з однаковими значеннями $\alpha = 2$ і різними значеннями λ

Гамма-розподілом широко користуються як статичною моделлю для часу, необхідного для появи рівно α подій у тому випадку, коли події відбуваються незалежно друг від друга з постійною середньою інтенсивністю за одиницю часу. Наприклад, у теорії масового обслуговування при розгляді завдань, пов'язаних із тривалістю очікування в черзі клієнтів, що обслуговують. У теорії надій-

ності при визначенні тривалості безвідмовної роботи системи, що виходить із ладу, коли в ній відбудеться α незалежних часткових відмов, що мають постійну середню інтенсивність відмов λ. *При* визначенні строку витрачення запасів деталей при витраті їх партіями по α штук з постійною інтенсивністю λ в одиницю часу. Основі характеристики гамма-розподілу:

Середнє значення: $m = \frac{\alpha}{\lambda}$.

Дисперсія: $\sigma^2 = \frac{\alpha}{\lambda^2}$.

Третій центральний момент: $\mu_3 = \frac{2\alpha}{\lambda^3}$.

Четвертий центральний момент: $\mu_4 = \frac{3\alpha(\alpha+2)}{\lambda^4}$.

Коефіцієнт варіації: $\gamma = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}$.

Коефіцієнт асиметрії: $Sk = \frac{2}{\sqrt{\alpha}}$.

Коефіцієнт ексцесу: $Ex = 3 + \frac{6}{\alpha}$.

Якщо випадкова величина обмежена ліворуч не нулем, а деякою величиною *z*, то гамма-розподіл визначається трьома параметрами α, λ і *z:*

$$f(x,\alpha,\lambda,z) = \begin{cases} \frac{\lambda^{\alpha}}{\Gamma(\alpha)}(x-z)^{\alpha-1}\exp\left(-\lambda(x-z)\right), \\ x \ge z, \quad \lambda > 0, \quad \alpha > 0, \quad 0 \text{ в інших випадках.} \end{cases}$$

Коли параметр α обмежений позитивними цілими числами, гамма-розподіл називають *розподілом Ерланга.* Розподіл Ерланга знаходить застосування в теорії масового обслуговування. Якщо параметр $\alpha = 1$, то гамма-розподіл описується функцією

$$f(x,\lambda) = \begin{cases} \lambda\exp(-\lambda x), \\ x \ge 0, \quad \lambda > 0, \quad 0 \text{ при } x < 0. \end{cases}$$

і його називають *експонентним розподілом.*

Експонентний розподіл широко застосовується в теорії масового обслуговування при моделюванні тривалості проміжків часу між надходженнями вимог, коли моменти надходження вимог розподілені за законом Пуассона. У теорії надійності, де воно служить як статистична модель для часу безвідмовної роботи при постійній інтенсивності відмов, тобто коли ймовірність відмови за певний інтервал часу постійна і залежить тільки від тривалості інтервалу.

Інтегральна функція експонентного розподілу має вигляд:

$$F(x,\lambda)=\begin{cases}\lambda\int\limits_0^x \exp(-\lambda t)dt = 1-\exp(-\lambda x),\\ \\ x\ge 0, \quad 0 \text{ при } x<0.\end{cases}$$

Основні характеристики експонентного розподілу:

Середнє значення: $m=\frac{1}{\lambda}$.

Дисперсія: $\sigma^2=\frac{1}{\lambda^2}$.

Третій центральний момент: $\mu_3=\frac{2}{\lambda^3}$.

Четвертий центральний момент: $\mu_4=\frac{9}{\lambda^4}$.

Коефіцієнт варіації: $\gamma=1$.
Коефіцієнт асиметрії: $Sk=2$.
Коефіцієнт ексцесу: $Ex=9$.

Бета-розподіл

Якщо випадкова величина може приймати значення, обмежені певним інтервалом, у якості її статистичної моделі застосовують бета-розподіл. Щільність *бета-розподілу* має вигляд

$$f(x,\alpha,\beta)=\begin{cases}\frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1},\\ \\ 0\le x\le 1, \quad \alpha>0, \quad \beta>0, \quad 0 \text{ в інших випадках.}\end{cases}$$

При $\alpha = \beta$ розподіл є симетричним, а за умови $\alpha = \beta = 1$ воно рівномірне.

Бета-розподілом широко користуються в теорії ймовірностей і математичній статистиці, його застосовують як статистичну модель випадкових величин, значення яких обмежені певним інтервалом, зокрема в контролі якості продукції й у теорії надійності.

Розподіл Вейбула

У теорії надійності широко користуються розподілом Вейбула як статистичною моделлю часу безвідмовної роботи в умовах, коли ймовірність відмов міняється із часом. При інтенсивності відмов

$$h(t) = \frac{\beta}{\alpha} t^{\beta-1}$$

щільність розподілу Вейбула має вигляд

$$f(t,\alpha,\beta) = \begin{cases} \frac{\beta}{\alpha} t^{\beta-1} \exp\left(-\frac{t^{\beta}}{\alpha}\right), \\ t \geq 0, \quad \alpha > 0, \quad \beta > 0, \quad 0 \text{ в інших випадках.} \end{cases}$$

де α - параметр масштабу,

β - параметр форми.

Розподіл Вейбула переходить в експонентний розподіл при $\beta = 1$. Середнє значення і дисперсія розподілу Вейбула зв'язані наступними співвідношеннями з параметрами α і β:

$$m = \alpha^{1/\beta} \Gamma\left(1 + \frac{1}{\beta}\right), \tag{106}$$

$$\sigma^2 = \alpha^{2/\beta} \left[\Gamma\left(1 + \frac{2}{\beta}\right) - \left(\Gamma\left(1 + \frac{1}{\beta}\right) \right)^2 \right]. \tag{107}$$

5.4.2 Дискретні розподіли

Біноміальний розподіл

Біноміальним розподілом називається розподіл числа *x* появ події *A* при *n* незалежних випробуваннях, у кожному з яких імовірність появи події залишається постійної. Такі випробування називаються випробуваннями за схемою Бернуллі. Якщо ймовірність події *A* дорівнює *p,* то ймовірність протилежної події *A* дорівнює *q* = (1 -p*),* а ймовірність того, що при *n* випробуваннях подія *A* з'явиться рівно *x* раз, дорівнює

$$f(x,n,p) = \binom{n}{x} p^x (1-p)^{n-x},$$

де $x = 0, 1, \ldots, n$; $0 \le p \le 1$...

Основні характеристики біноміального розподілу:

Середнє значення: $m = np$.

Дисперсія: $\sigma^2 = np(1-p)$.

Третій центральний момент: $\mu_3 = np(1-p)(1-2p)$.

Четвертий центральний момент: $\mu_4 = np(1-p)\left(3np(1-p) - 6p(1-p) + 1\right)$.

Коефіцієнт варіації: $\gamma = \sqrt{\frac{1-p}{np}}$.

Коефіцієнт асиметрії: $Sk = \frac{1-2p}{\sqrt{np(1-p)}}$.

Коефіцієнт ексцесу: $Ex = 3 - \frac{6}{n} + \frac{1}{np(1-p)}$.

Біноміальний розподіл симетрично при $p = 0{,}5$. При $p \neq 0{,}5$ розподіл наближається до симетричного при збільшенні *n.* При великому *n* біноміальний розподіл можна апроксимувати нормальним розподілом з математичним очікуванням $m = np$ і дисперсією $\sigma^2 = np(1-p)$. Ця апроксимація дозволяє одержати задовільні результати, якщо np і $n(1 - p) > 5$.

Гіпергеометричний розподіл

Гіпергеометричний розподіл є моделлю розподілу ймовірностей наслідків при вибірці без повернення елементів з обмеженої безлічі *N* за умови, що *m* елементів цієї безлічі мають деяку властивість S. У цьому випадку ймовірність того, що випадкова вибірка без повернення обсягу *n* буде містити рівно *x* елементів із властивістю *S,* дорівнює

$$f(x,N,m,n)=\begin{cases}\dfrac{\binom{m}{x}\binom{N-m}{n-x}}{\binom{N}{n}}=\dfrac{m!}{x!(m-x)!}\dfrac{(N-m)!}{(n-x)!(N-m-n+x)!}\dfrac{(N-n)!n!}{N!}, \\ \text{при } \max(0,n+m-N)\le x\le \min(n,m);\ 0 \text{ в інших випадках.}\end{cases}$$

Цей розподіл знаходить застосування при контролі частки дефектних виробів у вибірці обсягом *n* виробів, зробленої з партії, що включає *N* виробів.

Середнє значення і дисперсія гіпергеометричного розподілу рівні:

$$m=n\frac{m}{N}=np,$$

$$\sigma^2=n\frac{N-n}{N-1}p(1-p)=\frac{mn}{N}\left(1-\frac{m}{N}\right)\left(\frac{N-n}{N-1}\right).$$

При $N\to\infty$ і незмінному *n* і $\frac{m}{N}$ гіпергеометричний розподіл сходиться до біноміального розподілу з параметрами *n* и *p* = $\frac{m}{N}$. Задовільне наближення виходить при *N* > 10 *n*.

Геометричний розподіл

При проведенні випробувань, коли можливі два результати, а саме один A_1 з імовірністю *p* і інший A_2 з імовірністю (1 - *p),* іноді виникає необхідність оцінити ймовірність того, скільки буде потрібно провести *x* незалежних досві-

дів до появи результату A_1. Ця ймовірність визначається *геометричним розподілом*

$$f(x,p)=\begin{cases} p(1-p)^{x-1}, \\ x=1,2,...; \quad 0\le p\le 1; \quad 0 \text{ в інших випадках.} \end{cases}$$

Розподіл Паскаля

Розподіл Паскаля є моделлю розподілу ймовірностей того, що до появи рівно *s* успішних наслідків при випробуванні за схемою Бернуллі необхідно зробити *x* випробувань, успішний результат у кожному з яких дорівнює *p*. Розподіл має вигляд

$$f(x,s,p)=\begin{cases} \binom{x-1}{s-1} p^s (1-p)^{x-s}, \\ \text{при } x=s,s+1,...; \quad 0\le p\le 1; \quad 0 \text{ в інших випадках.} \end{cases}$$

Розподіл Пуассона

Якщо при випробуваннях за схемою Бернуллі число випробувань *n* необмежено зростає, а математичне очікування числа появ події *A* залишається постійним і рівним λ, то ймовірність того, що в *n* випробуваннях подія *A* з'явиться рівно *x* раз, *розподілена за законом, установленому Пуассоном:*

$$f(x,\lambda)=\begin{cases} \frac{\lambda^x}{x!}\exp(-\lambda), \\ x=0,1,2...; \quad \lambda>0; \quad 0 \text{ в інших випадках.} \end{cases}$$

Значення ймовірності можна розрахувати, користуючись рекурентною формулою

$$f(x+1,\lambda) = f(x,\lambda)\left(\frac{\lambda}{x+1}\right).$$

Розподіл Пуассона широко використовується для моделювання рідких подій, що відбуваються за певний інтервал часу. Наприклад числа викликів, що надходять на телефонну станцію за певний інтервал часу протягом доби, числа дефектів на одиниці поверхні виробів, числа клієнтів, що звертаються в перукарню протягом певного періоду дня і т.д.

Основні характеристики розподілу Пуассона:

Середнє значення: $m = \lambda$.

Дисперсія: $\sigma^2 = \lambda$.

Третій центральний момент: $\mu_3 = \lambda$.

Четвертий центральний момент: $\mu_4 = \lambda(3\lambda + 1)$.

Коефіцієнт варіації: $\gamma = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}$.

Коефіцієнт асиметрії: $Sk = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}$.

Коефіцієнт ексцесу: $Ex = 3 + \frac{1}{\lambda}$.

Питання для самоконтролю

1. Поняття «випадкової величини».
2. Закон розподілу випадкової величини.
3. Функція розподілу випадкової величини.
4. Щільність розподілу випадкової величини.
5. Математичне очікування.
6. Дисперсія.
7. Коефіцієнт кореляції.
8. Рівняння регресії.
9. Завдання регресійного аналізу.
10. Коефіцієнти рівняння регресії.
11. Активні й пасивний факторний експерименти.
12. Дробовий факторний експеримент.
13. Матриця планування.
14. Визначення оптимальних умов проведення експериментів.

6 ТЕХНІЧНІ І ПРОГРАМНІ ЗАСОБИ МОДЕЛЮВАННЯ

Практична реалізація математичних моделей, що є спочатку концептуальними (уявними), природно, вимагає використання певних технічних засобів, у якості яких виступають аналогові (АОМ) або цифрові (ЦОМ) обчислювальні машини, а також гібридні комплекси, що сполучають переваги АОМ і ЦОМ. Розглянемо особливості кожного зі згаданих засобів моделювання [1].

6.1 Застосування АОМ і ЦОМ для моделювання

Зупинимося спочатку на особливостях кожного із зазначених типів ЕОМ з погляду принципу їхньої дії.

В основі АОМ, як ми вже відзначали вище, лежить принцип математичної подоби (математичного ізоморфізму), тобто вони по самій своїй природі є моделями. Структура з'єднання їхніх вирішальних блоків залежить від виду розв'язуваного завдання, а всі блоки працюють паралельно, що обумовлює їх досить високу швидкість, що значно перевищує швидкість ЦОМ. Всі величини в АОМ представляються у вигляді безупинно мінливих рівнів напруг, а погрішність рішення визначається точністю виготовлення елементів (резисторів, ємностей), що входять до складу зворотних зв'язків. Точність АОМ першого покоління – порядку декількох відсотків, другого 0,1...1%, третього 0,01...0,1%. Для більшості металургійних завдань така точність цілком прийнятна.

У ЦОМ величини представляються в цифровій формі, а цифри реалізуються у вигляді кількості імпульсів струму або напруги. Будь-які завгодно складні завдання зводяться до послідовності елементарних арифметичних операцій, які представляються у вигляді системи машинних команд (програми). При рішенні завдання в машині ці команди в певній послідовності проходять через єдиний арифметичний пристрій (для однопроцесорних ЕОМ). У зв'язку із цим при високій швидкості виконання кожної окремої елементарної операції (порядку мікросекунди) витрати машинного часу при рішенні складних завдань

(наприклад, моделювання динаміки) можуть бути досить великі. Точність ЦОМ однозначно не пов'язана з точністю виготовлення елементів (у припустимих межах) і визначається кількістю розрядів у розрядній сітці машини. Перевагою ЦОМ є можливість виконання поряд з арифметичними також логічних операцій і зберігання в пам'яті великої кількості інформації.

Розглянемо області переважного використання двох зазначених класів ЕОМ з погляду завдань моделювання.

Аналогові обчислювальні машини відкривають широкі можливості для моделювання:

1. Допомагають осмислити зв'язок між фізичною сутністю і математичним описом, це особливо характерно для методу прямої аналогії, коли кожному елементу об'єкта відповідає схожий за функціональними властивостями елемент у моделюючій установці, при цьому представляються також можливості для перевірки різних гіпотез про структуру внутрішніх зв'язків і механізми функціонування, у тому числі для випадків не повністю математично описаних завдань.

2. Полегшують перевірку коректності постановки завдання і пошук помилок, тому що модельована система може розчленовуватися на частині, для яких відоме рішення і можливе фізична інтерпретація, тобто можлива аналіз і корекція вроздріб, у ЦОМ же після арифметизації звичайно важко відновити вихідну форму для від ділових частин.

3. Перетворюють моделювання в одну зі зручних форм експерименту, у процесі якого наочність відображення інформації і оперативність зворотного зв'язку при осмислюванні результатів дозволяють досить просто реалізувати діалог між дослідником і ЕОМ.

Зупинимося на особливостях ЦОМ як засобу моделювання:

1. Зручні для рішення різноманітних розгалужених завдань із більшою кількістю логічних переходів.

2. Широко використовують для статистичної обробки дослідних даних і перевірки гіпотез про структуру, маючи в складі свого математичного забезпечення прикладні дослідницькі програми.

3. Пристосовані для реалізації алгоритмів оптимізації і ідентифікації особливо пошукових.

Таким чином, підбиваючи підсумок порівняльному аналізу можливостей двох розглянутих типів ЕОМ, можна укласти, що застосування АОМ більш доцільно для моделювання динамічних об'єктів структурної ідентифікації, а ЦОМ – для математичного опису даних експерименту і параметричної ідентифікації.

Ще більшими можливостями для моделювання володіють гібридні (аналого-цифрові) обчислювальні комплекси, які сполучають високу швидкість і фізичність АОМ із універсальністю програмного керування обчислювальним процесом, здатностями до виконання логічних дій і зберіганню більших масивів інформації, властивими ЦОМ.

До складу гібридних обчислювальних комплексів, крім аналогових і цифрових машин і системи керування, звичайно входять перетворювачі подання величин, пристрої внутрисістемного зв'язку і периферійне встаткування. Розчленовування обчислювального процесу в ході рішення завдання на окремі операції, виконувані АОМ і ЦОМ у комплексі, зменшує обсяг обчислювальних операцій, покладених на ЦОМ, що за інших рівних умов істотно підвищує загальну швидкість.

Розрізняють аналого-орієнтовані, цифро-орієнтовані і збалансовані гібридні обчислювальні комплекси. У системах першого типу ЦОМ використовується як додатковий зовнішній пристрій до АОМ, призначене для утворення складних нелінійних залежностей, запам'ятовування отриманих результатів і для здійснення програмного керування АОМ. У системах другого типу АОМ використовується як додатковий зовнішній пристрій ЦОМ, призначене для моделювання елементів реальних апаратур, багаторазового виконання невеликих підпрограм.

Завдання, які ефективно вирішуються із застосуванням гібридних обчислювальних комплексів, можна розбити на наступні основні групи:

1) моделювання в реальному масштабі часу автоматичних систем керування, що містять як аналогові, так і цифрові пристрої;

2) відтворення в реальному масштабі часу процесів, що містять високочастотні складові і перемінні, що змінюються в широкому діапазоні;
3) статистичне моделювання;
4) моделювання біологічних систем;
5) рішення рівнянь у частинних похідних; оптимізація систем керування.

Прикладом завдання першої групи може служити моделювання системи керування прокатного стану. Динаміка процесів у ньому відтворюється на аналоговій машині, а спеціалізована керуючим станом машина моделюється на універсальної ЦОМ середнього класу. Внаслідок короткочасності перехідних процесів у приводах прокатних станів, повне моделювання таких процесів у реальному масштабі часу зажадало б застосування надшвидкодіючих ЦОМ. Аналогічні завдання часто зустрічаються в системах керування військовими об'єктами.

Типовими для другої групи є завдання керування об'єктами, що рухаються, у т.ч. і завдання самонаведення, а також завдання, що виникають при створенні обчислювальної частини комплексних тренажерів. Для завдань самонаведення характерне формування траєкторії руху в процесі самого руху. Велика швидкість зміни деяких параметрів при наближенні об'єкта до мети вимагає високої швидкодії керуючої системи, що перевищує можливості сучасних ЦОМ, а великий динамічний діапазон – високої точності, важко досяжної на АОМ. При рішенні цього завдання на гібридних обчислювальних комплексах доцільно покласти відтворення рівнянь руху навколо центра ваги на аналогову частину, а рух центра ваги і кінематичних співвідношень – на цифрову частину обчислювальної системи.

До третьої групи відносяться завдання, рішення яких виходить у результаті обробки багатьох реалізацій випадкового процесу, наприклад рішення багатомірних рівнянь у частинних похідних методом Монте-Карло, рішення завдань стохастичного програмування, знаходження екстремуму функцій багатьох перемінних. Багаторазова реалізація випадкового процесу покладає на швидкодіючу АОМ, що працює в режимі багаторазового повторення рішення, а

обробка результатів, відтворення функцій на границях області, обчислення функціоналів – на ЦОМ. Крім того, ЦОМ визначає момент закінчення рахунку. Застосування гібридних обчислювальних комплексів скорочує час рішення завдань цього виду на кілька порядків у порівнянні із застосуванням тільки цифрової машини.

Аналогічний ефект досягається при використанні гібридних обчислювальних комплексів для моделювання процесів поширення збудження в біологічних системах. Специфіка цього процесу полягає в тому, що навіть у найпростіших випадках потрібно відтворювати складну нелінійну систему рівнянь у частинних похідних.

Застосування гібридних обчислювальних комплексів ефективно при рішенні нелінійних рівнянь у частинних похідних. При цьому можуть вирішуватися як завдання аналізу, так і завдання ідентифікації і оптимізації об'єктів. Прикладом завдання оптимізації може служити підбор нелінійності теплопровідного матеріалу для заданого розподілу температур; визначення геометрії літальних апаратів для одержання необхідних аеродинамічних характеристик; розподіл товщини паркого шару, що охороняє космічні кораблі від перегріву при вході в щільні шари атмосфери; розробка оптимальної системи підігріву літальних апаратів з метою запобігання їх від зледеніння при мінімальній витраті енергії на підігрів і т.п.

Поряд з новими обчислювальними можливостями в гібридних обчислювальних комплексах виникають специфічні особливості, зокрема з'являються погрішності, які в окремо працюючих ЕОМ відсутні. Первинними джерелами погрішностей є тимчасова затримка аналого-цифрового перетворювача, ЦОМ і цифро-аналогового перетворювача; помилка округлення в аналого-цифровому і цифро-аналоговому перетворювачах; помилка від неодночасної вибірки аналогових сигналів на аналого-цифровий перетворювач і неодночасну видачу цифрових сигналів на цифро-аналоговий перетворювач; помилки, пов'язані з дискретним характером видачі результатів з виходу ЦОМ.

Аналіз погрішностей гібридних обчислювальних комплексів має зна-

чення як для оцінки погрішності роботи комплексу при рішенні певного класу завдань, так і для розробки методів підвищення точності і ефективності системи. Первинні погрішності автономно працюючих АОМ і ЦОМ, що входять у гібридні обчислювальні системи, досить добре вивчені, але оцінка погрішності при рішенні за допомогою гібридного комплексу нелінійних завдань представляє ще нерозв'язану проблему.

6.2 Методи рішення і програмні оболонки для моделювання

Значне число завдань фізики і техніки приводять до диференціальних рівнянь у частинних похідних (рівняння математичної фізики). Точні рішення крайових завдань для еліптичних рівнянь вдається одержати лише в окремих випадках. Тому ці завдання вирішують в основному приблизно. Одними з найбільш універсальних і ефективних методів, що одержали в цей час широке поширення для наближеного рішення рівнянь математичної фізики, є метод кінцевих різниць (метод сіток) і метод кінцевих елементів.

Метод кінцевих різниць (*МКР*) – широковідомий і найпростіший метод інтерполяції. Метод кінцевих різниць (МКР) базується на рівняннях у диференціальній формі, при цьому диференціальні оператори заміняються кінцево-різницевими співвідношеннями різного ступеня точності. Як правило, вони будуються на ортогональних сітках (прямокутної, циліндричної і т.д.).

Суть методу полягає в наступному. Область безперервної зміни аргументів, заміняється дискретною безліччю точок (вузлів), що називається сіткою або решіткою. Замість функції безперервного аргументу розглядаються функції дискретного аргументу, визначені у вузлах сітки і називані сітковими функціями. Похідні, що входять у диференціальне рівняння і граничні умови, заміняються різницевими похідними, при цьому крайове завдання для диференціального рівняння заміняється системою лінійних або нелінійних алгебраїчних рівнянні (сіткових або різницевих рівнянь). Такі системи часто називають різницевими схемами. І ці схеми вирішуються щодо невідомої сіткової функції.

Це дозволяє факторизувати оператори і звести рішення багатомірного завдання до послідовності одномірних завдань, а значить істотно спростити і прискорити рішення загальної системи рівнянь.

До недоліків методу варто віднести погану апроксимацію границь складних областей, що не занадто принципово для рівнянь теплопровідності, але досить істотно для рівнянь гідродинаміки. Крім того, метод погано працює у випадку тонкостінних виливків, коли товщина стінок стає порівнянної із кроком сітки.

Метод кінцевих елементів (*МКЕ*) заснований на ідеї апроксимації безперервної функції (у фізичній інтерпретації – температури, тиску, переміщення і т.д.) дискретною моделлю, що будується на безлічі кусочно-безперервних функцій, визначених на кінцевому числі підобластей, називаних кінцевими елементами. Досліджувана геометрична область розбивається на елементи таким чином, щоб на кожному з них невідома функція апроксимувалася пробною функцією (як правило, поліномом). Причому ці пробні функції повинні задовольняти граничним умовам. безперервності, що збігає із граничними умовами, які накладаються самим завданням. Вибір для кожного елемента апроксимуючої функції буде визначати відповідний тип елемента.

На відміну від *МКР* у *МКЕ* обчислюються не шукані функції, а тільки коефіцієнти базисних функцій, що дозволяє одержувати рішення в будь-якій точці області і відповідно підвищує точність розрахунків. Формулювання і рішення завдання здійснюється одноманітно в області довільної форми на кінцево-елементній сітці з довільним розташуванням вузлів. При цьому є досить широкий набір форм елементів і базисних функцій.

Метод кінцевих елементів заміняє завдання відшукання функції на завдання відшукання кінцевого числа її наближених значень в окремих точках-вузлах. При цьому якщо вихідне завдання щодо функції складається з функціонального рівняння, наприклад диференціального рівняння з відповідними граничними умовами, то завдання методу кінцевих елементів щодо її значень у вузлах являють собою систему алгебраїчних рівнянь.

Зі зменшенням максимального розміру елементів збільшується число вузлів і невідомих вузлових параметрів. Разом із цим підвищується можливість більш точно задовольнити рівнянням завдання і тим самим наблизитися до шуканого рішення.

Відзначимо кілька важливих достоїнств методу кінцевих елементів:

1) Метод кінцевих елементів дозволяє побудувати зручну схему формування системи алгебраїчних рівнянь щодо вузлових значень шуканої функції. Наближена апроксимація рішення за допомогою простих поліноміальних функцій і всіх необхідних операцій виконуються на окремому типовому елементі. Потім провадиться об'єднання елементів, що приводить до необхідної системи алгебраїчних рівнянь. Такий алгоритм переходу від окремого елемента до їхнього повного набору особливо зручний для геометрично й фізично складних систем.
2) Кожне окреме алгебраїчне рівняння, отримане на основі методу кінцевих елементів, містить незначну частину вузлових невідомих від загального їхнього числа. Інакше кажучи, багато коефіцієнтів у рівняннях алгебраїчної системи дорівнюють нулю, що значно полегшує її рішення.
3) Завдання, рішення яких описується функціями, що задовольняють функціональним рівнянням, називають континуальними. На відміну від них рішення так званих дискретних завдань точно визначається кінцевим числом параметрів, що задовольняють відповідній системі алгебраїчних рівнянь. Метод кінцевих елементів, так само як і інші чисельні методи, власне кажучи приблизно заміняє континуальне завдання на дискретну. У методі кінцевих елементів вся процедура такої заміни має простий фізичний зміст. Це дозволяє більш повно уявити собі весь процес рішення завдання, уникнути багатьох можливих помилок і правильно оцінити одержувані результати.
4) Крім континуальних завдань схема методу кінцевих елементів застосовується для з'єднання елементів і формування алгебраїчних рівнянь при рішенні безпосередньо дискретних завдань. Це розширює сферу застосування методу.

Система значно складніше прийнятої в МКР, її рішення вимагає великих ресурсів пам'яті і чималого часу. Основні недоліки – необхідність у гарному генераторі кінцевих елементів, складність рівнянь і неможливість факторизації.

Нижче наведені найбільш відомі програми, які застосовують для моделювання різних фізичних процесів у різних областях.

COMSOL Multiphysics (Femlab) – пакет моделювання, що вирішує системи нелінійних диференціальних рівнянь у частинних похідних методом кінцевих елементів в одному, двох і трьох вимірах. Він дозволяє вирішувати завдання з області електромагнетизму, теорії пружності, динаміки рідин і газів і хімічної газодинаміки. *Femlab* також дає можливість вирішити завдання як у математичній постановці (у вигляді системи рівнянь) так і у фізичній (вибір фізичної моделі, наприклад моделі процесу дифузії). У так називаному фізичному режимі роботи також можна використовувати заздалегідь визначені рівняння для більшості явищ, що мають місце в науці і техніки, таких як перенос тепла і електрики, теорія пружності, дифузія, поширення хвиль і потік рідини.

ANSYS - це універсальний кінцевоелементний програмний пакет (розроблювачем якого є компанія *ANSYS Inc.*), що дозволяє вирішувати в єдиному користувальницькому середовищі широке коло завдань в областях: міцності; теплопровідності; гідрогазодинаміки; електромагнетизму; міждисциплінарного зв'язаного аналізу, що поєднує всі чотири типи; оптимізації конструкції на основі всіх вищенаведених типів аналізу.

Створений для потреб аерокосмічної промисловості, *COSMOS/Works* дозволяє вирішувати будь-які інженерні завдання. Використовуючи інтегроване рішення *SolidWorks* і *COSMOS/Works*, користувачі мають ефективне недороге рішення своїх завдань. *COSMOS/Works* має широкий спектр спеціалізованих вирішувателей, що дозволяють провести аналіз більшості завдань, які зустрічаються, для деталей і зборок: лінійний статичний аналіз; визначення власних форм і частот; розрахунок критичних сил і форм втрати стійкості; тепловий аналіз; спільний термостатичний аналіз; розрахунок зборок з використанням контактних елементів; нелінійні розрахунки; оптимізація конструкції; розраху-

нок електромагнітних завдань; визначення довговічності конструкції; розрахунок плину рідин і газів.

Програмний комплекс *FlowVision* вирішує тривимірні рівняння динаміки рідини і газу, які містять у собі закони збереження маси, імпульсу (рівняння Навьє-Стокса), рівняння стану. Для розрахунку складних рухів рідини і газу, супроводжуваних додатковими фізичними явищами, такими, як, турбулентність, горіння, контактні границі розділу і так далі, в *FlowVision* включаються додаткові рівняння, що описують ці явища. *FlowVision* використовує кінцево-об'ємний підхід для апроксимації рівнянь математичної моделі. Рівняння Навьє-Стокса вирішуються методом розщеплення по фізичних процесах.

На сьогодні у світі налічується більш десяти систем автоматизованого моделювання ливарних процесів (САМ ЛП). Фахівцям добре відома німецька програма *Magma* і американська *Procast*, у цьому ж ряді потрібно згадати американську *SolidCast*, фінську *CastCAE* і німецьку *WinCast*. Дві розробки – «*Полігон*» і *LVMFlow* – мають російське походження.

Питання для самоконтролю

1. Види обчислювальних машин.
2. Що лежить в основі аналогових обчислювальних машин?
3. Погрішність аналогових обчислювальних машин.
4. Принцип дії цифрових обчислювальних машин.
5. Погрішність цифрових обчислювальних машин.
6. Особливості АОМ.
7. Особливості ЦОМ.
8. Гібридні (аналого-цифрові) обчислювальні комплекси.
9. Види гібридних обчислювальних комплексів.
10. Завдання, які ефективно вирішуються за допомогою гібридних обчислювальних комплексів.
11. Погрішності гібридних обчислювальних комплексів.
12. Методи рішення диференціальних рівнянь у частинних похідних.
13. Метод кінцевих різниць.
14. Метод кінцевих елементів.
15. Достоїнства і недоліки методів.
16. Програмні оболонки для моделювання фізичних процесів.

7 ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ КОНКРЕТНИХ МЕТАЛУРГІЙНИХ ПРОЦЕСІВ

7.1 Синтез комбінованих моделей

При розгляді загальних методологічних питань математичного моделювання був показаний діалектичний зв'язок причинності і випадковості. Було відзначено, що, незважаючи на загальну причинну обумовленість процесів у реальних об'єктах причинність проявляється через випадковість. Причому існує певний рівень об'єктивної випадковості, розкриття якого при даному рівні розвитку науки і техніки, може виявитися недоцільним, тому що супроводжується непомірними витратами енергії (наприклад на виміри) і засобів.

Відзначене вище повинне знайти відображення при побудові математичних моделей у вигляді певного сполучення детерміністичного і стохастичного підходів. Природно, співвідношення цих підходів залежить від конкретних умов: ступеню знань про процес, його спостережуваності (можливості його виміру), призначення моделі і т.д.

Комбінована модель, що дозволяє прогнозувати значення вихідного параметра *Y,* може бути отримана як результат адитивного накладення детермінованої *D* і стохастичної *C* складових

$$Y = D + C. \qquad (7.1)$$

Стохастична складова при цьому може відігравати роль залишку, що поступово зменшується в результаті послідовного аналізу, виділення регулярних трендів і з'ясування причин.

Можливий і інший випадок – мультиплікативного сполучення цих складових, наприклад, у вигляді стохастичних коефіцієнтів при детермінованих членах або навпаки

$$Y = CD. \qquad (7.2)$$

Можливі також різні комбінації цих випадків.

Велику роль в успіху побудови моделі грає правильний вибір структури моделі, що визначає і її потенційні можливості. Помилка у виборі структури моделі як правило зводить нанівець результати оцінки чисельних значень її параметрів, що здійснюється за результатами вимірів на реальному об'єкті. Зв'язок між апріорною (накопиченої до досвіду) інформацією про структуру і апостеріорної (отриманої в результаті досвіду) інформацією про виміри показана на рис. 7.1.

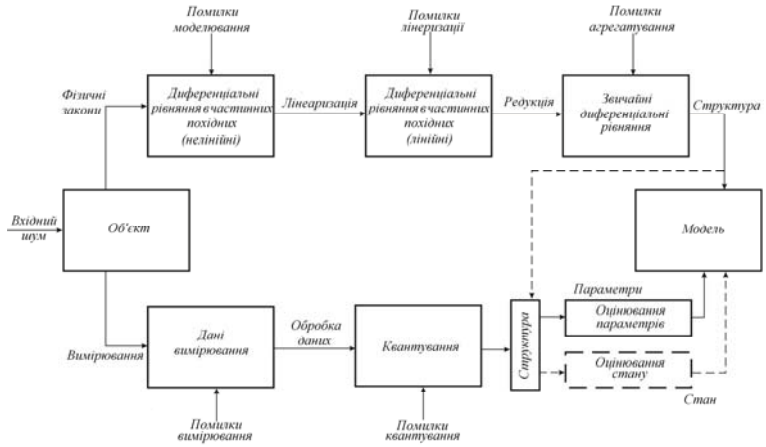


Рисунок 7.1 – Сполучення структурно-фізичного і експериментально-статичного підходів при побудові моделей

Тут можна бачити, що структура моделі формується на основі знань про фізичні закони, яким підкоряються процеси, що протікають в об'єкті. Розкриття цих законів залежить, природно, від здатностей, професіоналізму і інтуїції дослідників. Після вибору структури моделі й складання на її основі замкнутої системи рівнянь виробляється припасування параметрів (коефіцієнтів) до отриманого в результаті вимірів даним, потім здійснюється експериментальна перевірка відтворюваності моделі в режимі екстраполяції на декількох перевірочних вибірках і лише у випадку успіху цієї перевірки модель можна використати за призначенням.

При розробці комбінованих моделей варто прагнути до того, щоб число коефіцієнтів, що підбудовують, було мінімальним, останнє пов'язане з точністю завдання структури (повнотою розкриття фізичних законів). Такі моделі, маючи

більший ступінь спільності, менш чутливі до зміни умов (перенесення на інший агрегат, цех, завод, зміну сировини і т.д.). Моделі ж з великим числом коефіцієнтів, що підбудовують, граничним випадком яких є чисто регресійні рівняння, де всі коефіцієнти підбудовуються, можуть давати більш високі значення критерію адекватності на навчальній вибірці через більше число ступенів свободи при підстроюванні, але дуже чутливі до змін умов (властивостей вибірки).

Тут ми торкнулися лише самих загальних питань синтезу комбінованих (детерміновано-імовірнісних) моделей, підвівши в такий спосіб підсумок розгляду цих принципів у попередніх розділах. Практичні ж питання побудови моделей доцільно розглянути на конкретних прикладах, які наведені нижче.

7.2 Приклад складання спрощеної моделі доменної плавки

Доменна плавка відноситься до числа безперервних металургійних процесів. В основу його механізму закладений принцип протитечії, що обумовлює високу економічність теплових і масообмінних процесів, що протікають при цьому. Шихтові матеріали (в основному агломерат і кокс), завантажені на колошник доменної печі, повільно рухаються вниз (час їхнього перебування в печі 6...12 ч), а їм назустріч із досить великою швидкістю (час перебування порядку декількох секунд) піднімаються гази, що утворюються в результаті згоряння коксу біля дуттьових фурм. За цей час гази віддають більшу частину свого тепла шихтовим матеріалам і відновлюють оксиди заліза (непряме відновлення) за схемою:

$$MeO + CO = Me + CO_2;$$

$$CO_2 + C = 2CO.$$

Відновленню оксидів металу і зниженню температури плавлення матеріалів сприяє також безпосередній контакт коксу з агломератом:

$$MeO + C = Me + CO;$$

$$MeO + CO = Me + CO_2.$$

Для рівномірного розподілу газового потоку по перетину печі велике значення має газопроникність сирих матеріалів. Тому що дуття надходить у піч у периферійній області, то гази в першу чергу прагнуть підніматися уздовж стінок печі. Для вирівнювання опору газовому потоку прагнуть завантажувати піч таким чином, щоб у стін розташовувався більше товстий шар агломерату, газоопір якого більше, ніж коксу, а в центральній частині перебувало більше коксу. Розподіл матеріалів по перетину є найважливішим керуванням зверху, що діє, однак, з більшим запізнюванням, порівнянним із часом перебування шихти. Є також більш швидкодіючі керуючі впливи, спрямовані знизу. До них відносяться: розподіл дуття по фурмах, зміна вологості і температури дуття, витрати інтенсифікаторів (кисню, природного газу або мазуту), подаваних у доменну піч із метою розвитку процесів непрямого відновлення (у тому числі за рахунок водню), що приводить до підвищення продуктивності печі й зниженню витрати коксу.

Таким чином, навіть із наведеної вище короткої характеристики можна бачити, що доменна плавка є дуже складним процесом, розподіленим як у просторі, так і в часі. Математичному опису цього процесу присвячена велика кількість робіт. Через неможливість скільки-небудь повного їхнього огляду зупинимося лише на одному досить простому прикладі, зручному з погляду пояснення процесу створення моделі.

Розглянемо із цією метою розроблену на заводі Кокура (Японія) модель доменної плавки, призначену для використання в системі автоматичного керування температурним режимом печі (температурою чавуну).

Перш ніж перейти до конкретних питань побудови моделі варто згадати, що процес моделювання складається з ряду етапів. Перший з них (постановка завдання), пов'язаний з аналізом існуючих подань про процес і облік мети, коротко вже розглянутий вище.

Другий етап складається із двох ступенів: вибору структурної схеми моделі і математичного опису її блоків. При розробці структурної схеми моделі були прийняті наступні допущення, що спрощують:

1) розподіл температури і газового потоку по перетину печі рівномірне;

2) піч розділена на п'ять горизонтальних зон, у кожній з яких перебувають певні матеріали і протікають відповідні реакції;

3) згоряння палива перед фурмами повне, а непряме відновлення протікає стабільно;

4) матеріали, що перебувають у кожній зоні, залишаються незмінними;

5) ураховуються тільки основні компоненти твердої й газоподібної фаз;

6) у кожній зоні для твердої і газоподібної фаз ураховуються тільки середні температури.

Спрощено структура моделі представлена на рис. 7.2.

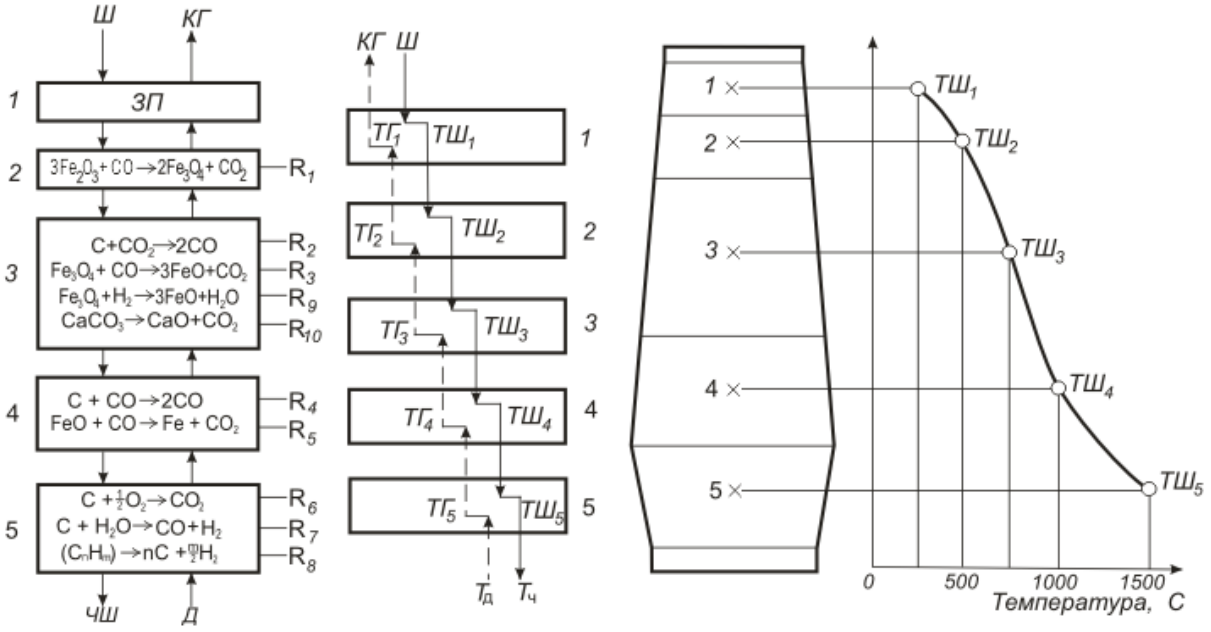


Рисунок 7.2 – Схема побудови моделі стану доменної плавки

Тут і у формулах, що нижче приводяться, прийняті наступні умовні позначки: *Ш* – шихта; *КГ* – колошниковий газ; *ЧШ* – чавун і шлаки; *Д* – дуття; *ЗП* – зона підігріву; $ТШ_1 \ldots ТШ_5$ – температура шихти по зонах; $ТГ_1 \ldots ТГ_5$ – температура газу по зонах; $i = 1, \ldots, 5$ – номера зон; $c_i^{ш}$, $c_i^{г}$ – середні питомі теплоємності шихти й газу; $Q_i^{ш}$, $Q_i^{г}$ – кількості шихти і газу, що перебувають в *i-тої* зоні ; $\upsilon_i^{ш}$, $\upsilon_i^{ш}$ – швидкості сходу шихти і газового потоку; ΔH_j – теплота реакції j; q_j – кількість тепла, одержуваного газом у результаті реакції j; α_{ci} – коефіцієнт теплопередачі в стінки печі в зоні i; α_{pi} – коефіцієнт теплопередачі між газоподібною і твердою фазами; k_c, k_p – адаптивні коефіцієнти теплопередачі; R_j – швидкість реакції j; R_{ij}^{x} – індекс швидкості реакції j у зоні i (якщо в зоні i протікає

реакція *j*, те $R_{ij}^{x} = 1$; якщо не протікає, то $R_{ij}^{x} = 0$); $P_{H_2}^{M}$ – вміст водню в мазуті; $T_Д$, $T_ч$ – температури дуття і чавуну; η_{H_2} – ступінь використання водню.

На етапі математичного опису ставиться завдання створення комбінованої (детерміновано-імовірнісної) моделі: перша частина її заснована на законах збереження речовини і енергії, друга – на експериментально-статистичних методах. Складання матеріального балансу починається з визначення швидкостей реакцій. Швидкість кожної реакції непрямого відновлення (R_1, R_3, R_5) виводиться з балансу кисню з певними допущеннями. Швидкість відновлення воднем (R_9) і витрата вуглецю (R_2, γR_4) можна вивести відповідно з балансу водню й вуглецю, при цьому приймається, що $R_2 = \gamma R_4$. Швидкості реакцій R_6, R_7, R_8 при згорянні палива перед фурмами можна визначити безпосередньо за параметрами дуття. У результаті отримана система рівнянь швидкостей реакцій

$$\left.\begin{aligned}
&R_1 = \frac{1}{3} R_{Fe_2O_3} R_5;\\
&R_2 = \gamma R_4;\\
&R_3 = \frac{1}{3} R_5 - R_9;\\
&R_4 = \frac{1}{1+\gamma}\left[(CO_2)_0 + (CO)_0 - 2(O_2)_0 - (H_2O)_5 - R_{CaCO_3} R_5\right];\\
&R_5 = \frac{2(CO_2)_0 + (CO)_0 - 2(O_2)_5 + P_{H_2}^{M}\dfrac{(\upsilon_M)}{2} - (H_2)_0}{2R_{CaCO_3} + 3R_{Fe_2O_3} + 4R_{Fe_3O_4}};\\
&R_6 = 2(O_2)_5;\\
&R_7 = (H_2O)_5;\\
&R_8 = (\upsilon_M)_5;\\
&R_9 = (H_2O)_5 + P_{H_2}^{M}\frac{(\upsilon_M)}{2} - (H_2)_0 = \left[(H_2O)_5 + P_{H_2}^{M}\frac{(\upsilon_M)}{2}\right]\eta_{H_2};\\
&R_{10} = R_{CaCO_3} R_5.
\end{aligned}\right\} \qquad (7.3)$$

За цими рівняннями можна розрахувати швидкості реакцій R_4, R_5, і R_9 відповідно до составу колошникового газу.

При визначенні швидкості сходу шихти і швидкості газового потоку, як правило, приймають, що кількість шихти і газу на виході із зони дорівнює їхній кількості на вході в зону плюс продукти реакції, тобто

$$\upsilon_i^{тв} = \upsilon_{i-1}^{тв} + \sum_{i=1}^{10} Q_{ij}^{тв} R_i , \tag{7.4}$$

$$\upsilon_i^{г} = \upsilon_{i-1}^{г} + \sum_{i=1}^{10} Q_{ij}^{г} R_i . \tag{7.5}$$

Зміна ентальпії в кожній зоні обумовлено порушенням теплового балансу, різницею між кількостями тепла на вході і виході зони, теплотою реакцій, теплообміну між твердою і газоподібною фазами, а також втрат тепла. У зв'язку із цим рівняння теплового балансу для твердої і газоподібної фаз у кожній зоні можна записати в такий спосіб:

$$\begin{aligned} \sum^{тв_i} Q_i^{тв} c_i^{тв} \frac{dT_i^{тв}}{dt} &= \sum^{тв_{i-1}} \upsilon_{i-1}^{тв} c_{i-1}^{тв} T_{i-1}^{тв} - \sum^{тв_i} \upsilon_i^{тв} c_i^{тв} T_i^{тв} + \\ &+ \sum_{i=1}^{10} R_{ij}^{x} R_j \Delta H_j \left(1 - q_j\right) + k_p \alpha_{pi} \left(T_i^{г} - T_i^{тв}\right) - k_c \alpha_{ci} \left(T_i^{тв} - T_{д}\right). \end{aligned} \tag{7.6}$$

При розрахунку теплового балансу для газоподібної фази коефіцієнт теплопередачі α_{pi} розраховується за емпіричними формулами. Ці взаємозв'язки можна представити диференціальним рівнянням наступного виду:

$$C\frac{dT}{dt} = AT - B , \tag{7.7}$$

де $T = (T_1^{тв}, \ldots, T_5^{тв}, T_1^{г}, \ldots, T_5^{г})$;

C, A – елементи матриці 10×10;

B – вектор-рядок 10×1.

Тому що при стаціонарному стані печі $dT/dt = 0$, то температури твердої і газоподібної фаз у кожній зоні можна розрахувати по вимірюваних параметрах з використанням одержуваного в цьому випадку співвідношення $T = B / A$.

Адаптивні параметри теплопередачі k_c і k_p вибираються при цьому за допомогою ітеративної процедури таким чином, щоб розрахункові температури T_1' і T_5''' збігалися з фактичною температурою колошникового газу і рідкого чавуну. Далі в процесі експериментальної перевірки і використання моделі підбудовуються за інформацією про зворотний зв'язок ще кілька параметрів, що враховують, зокрема, конкретні умови протікання реакцій R_4 і R_5 і ступінь використання, наприклад, водню η_{H_2}.

Це завдання може бути зведена до експериментального визначення залежностей у часі від згаданих вхідних факторів (тимчасових характеристик) швидкостей реакцій R_4, R_5 і температури чавуну.

Рівняння (7.3) – (7.7) являють собою прогнозуючу адаптивну модель, що становить основу алгоритму системи керування температурою чавуну. Прогнозовані за допомогою моделі значення температури чавуну з певним інтервалом випередження (наприклад 12 ч) рівняється із заданим для цього ж моменту часу. У випадку їхньої розбіжності шляхом експерименту на моделі заздалегідь вибираються значення керуючих впливів, що забезпечують виконання завдання на прогнозований момент часу. Зворотний зв'язок по відхиленню прогнозованих за допомогою моделі виходів від фактичних використається для адаптації моделі. Дослідження і експериментальна перевірка моделі показали можливість прогнозування температури чавуну з точністю порядку 5 °С, а побудована на основі цієї моделі система керування дозволила істотно знизити витрату палива.

7.3 Приклади побудови моделей подових сталеплавильних процесів

Мартенівська плавка, що представляє собою сукупність цілого ряду одночасно протікають і перебувають у тісному взаємозв'язку фізичних і хімічних процесів, є складним об'єктом для математичного опису. У цей час є велику кількість моделей мартенівського процесу, побудованих за допомогою різних підходів. Свідомо уникаючи огляду і характеристики цих моделей через обмеже-

ність обсягу даного посібника, поставимо своєю метою на деяких прикладах проілюструвати процес створення й удосконалювання моделей [10, 11].

У зв'язку із цим розглянуте нижче моделі, що не претендують на які-небудь переваги в змісті адекватності перед іншими відомими моделями, узяті як приклади лише тому, що тут є можливість простежити весь процес моделювання. Щоб надмірно не ускладнювати завдання, основну увагу приділяється опису процесу зневуглецювання.

7.3.1 Процес побудови моделі зневуглецювання на основі рівнянь дифузії

Вивчення наявних на момент створення моделі літературних даних дозволило скласти певне уявлення про механізм процесу зневуглецювання (рис. 7.3). Ухвалене рішення взяти за основу цього механізму допущення про роль, що лімітує, процесу доставки кисню до місця реакції. Далі зроблені наступні припущення.

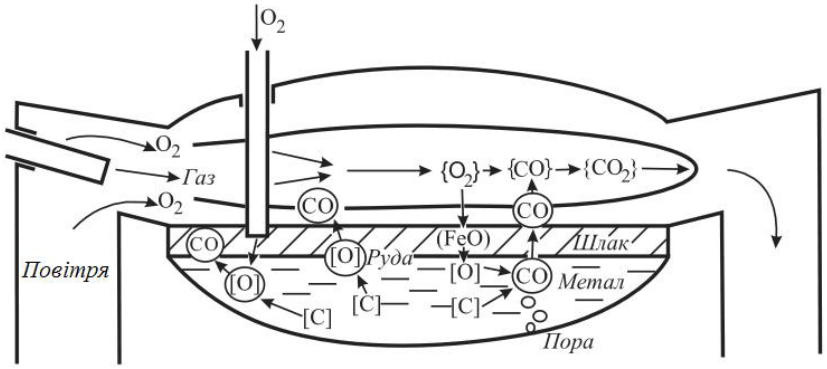


Рисунок 7.3 – Схема механізму процесу зневуглецювання в мартенівській ванні

Реакція окислювання вуглецю *[C] + {O} = {CO}* внаслідок малої розчинності оксиду вуглецю в металі може відбуватися тільки на поверхні пухирців *CO*, що зароджуються головним чином на подині, а також на поверхні шматків руди і вапняку, що плавають на границі шлак-метал. При продувці ванни киснем реакція зневуглецювання може протікати також на поверхні струменя і пухирців кисню, що впроваджуються безпосередньо у ванну.

Розглянемо випадок класичного мартенівського процесу для періоду чис-

того кипіння. У період безрудного кипіння необхідний для реакції кисень доставляється до місця протікання реакції через шар шлаків і металу шляхом дифузії. Оскільки швидкість самої хімічної реакції значно більше швидкості дифузії, то швидкість окислювання вуглецю лімітується швидкістю підведення кисню. Рушійною силою дифузійного процесу є градієнт концентрації кисню.

Таким чином, процес передачі кисню з газового середовища в метал можна розглядати як ряд дифузійних ланок, у кожному з яких кисень зустрічає більш-менш значний опір: 1) подолання границі газ-шлак; 2) дифузія кисню через шлак; 3) подолання границі шлак-метал і дифузія кисню в металі до місця реакції; 4) реакція зневуглецювання і нагромадження кисню в металі і шлаках. Кожну таку ланку у свою чергу можна представити, що вона складається з ряду елементарних ланок. Рівняння дифузійних ланок можуть бути написані на основі співвідношення, що виражає швидкість переносу речовини під впливом молекулярної і турбулентної дифузії

$$q = \beta \Delta C, \qquad (7.8)$$

де q – дифузійний потік речовини, моль/(м^2·с);

ΔC – падіння концентрації речовини в напрямку дифузії, моль/м^3;

β - константа швидкості переносу, м/с.

Так виглядає в даному прикладі перший етап моделювання – змістовна постановка завдання.

Перейдемо до другого етапу – математичному опису окремих ланок. Метою цього етапу є одержання замкнутої системи рівнянь. Основу структурної схеми моделі представленої на рис. 7.4, становлять рівняння дифузії, яким на структурній схемі відповідають блоки 1, 2, 5.

Реакція зневуглецювання, нагромадження і розподіл кисню в металі і шлаку описуються рівняннями, представленими в блоках 6, 7, 9, 9а, 8, 4.

Блоки 3, 10, 11 дозволяють замкнути систему рівнянь. Два останніх відображають закон збереження речовини (кисню і вуглецю). Розглянемо докладніше процес формування замкнутої системи рівнянь.

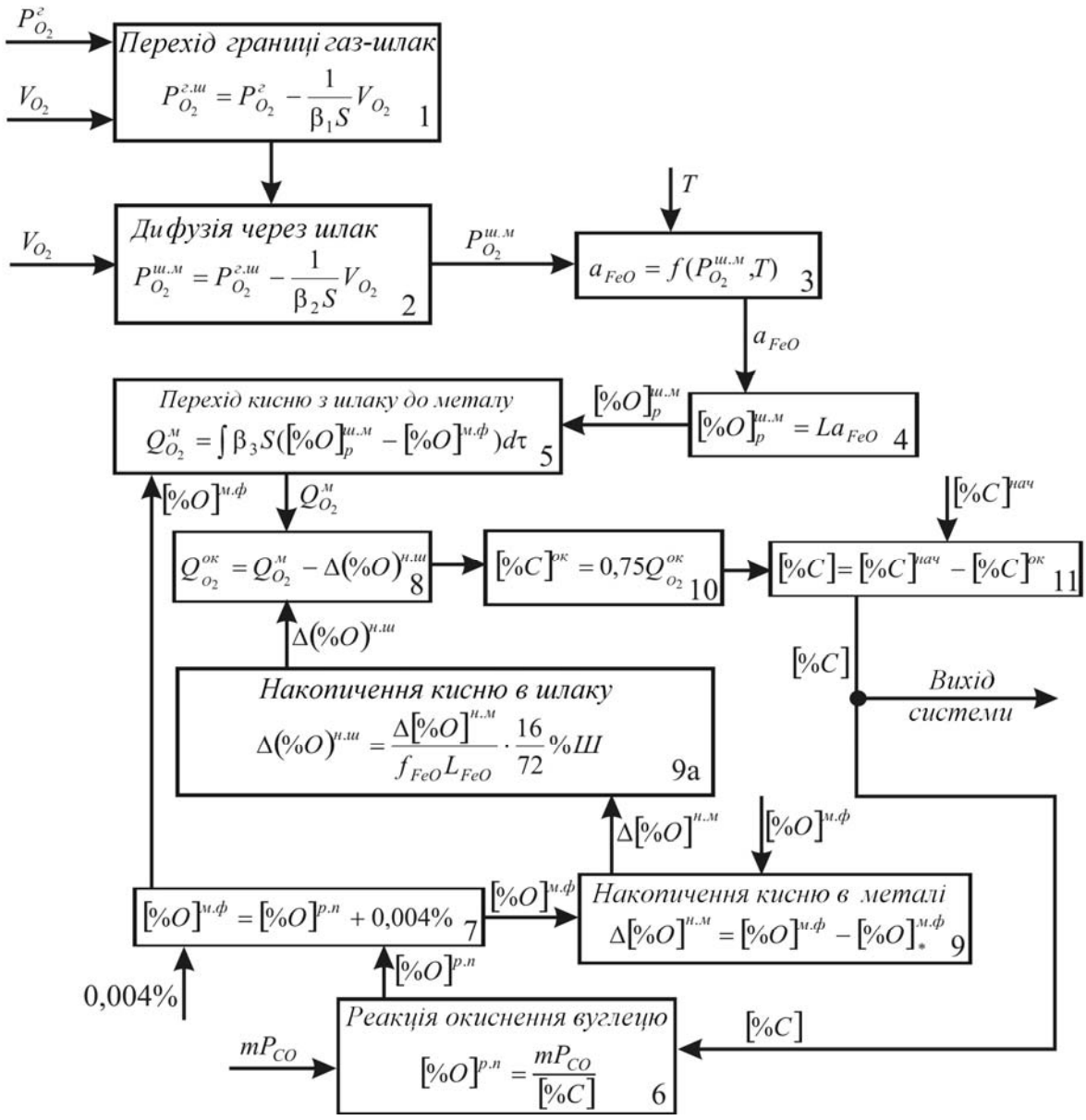


Рисунок 7.4 – Структура моделі на основі рівнянь дифузії

Перша ланка – перехід кисню через границю газ-шлак описується наступним рівнянням

$$\upsilon_{O_2} = \frac{dQ_{O_2}}{d\tau} = \beta_1 S\left(P^{г}_{o_2} - P^{г.ш}_{O_2}\right), \qquad (7.9)$$

де υ_{O_2} – швидкість підведення кисню;

Q_{O_2} – кількість кисню, підведеного до ланки за час τ;

β_1 – коефіцієнт масовіддачі на границі газ-шлаки;

S – площа дзеркала ванни;

$P^{г}_{O_2}$, $P^{г.ш}_{O_2}$ – парціальний тиск кисню відповідно в газовій фазі і рівноважне на границі шлак-метал.

Це рівняння може бути вирішене відносно $P_{O_2}^{г.ш}$ щоб потім здійснити зв'язок першої ланки з наступним

$$P_{O_2}^{г.ш} = P_{O_2}^{г} - \frac{1}{\beta_1 S} V_{O_2}. \qquad (7.10)$$

Вхідні величини $P_{O_2}^{г}$ і V_{O_2} блоку 1, що реалізує це рівняння, можна розрахувати залежно від витрати надлишкового кисню на вході в робочий простір печі V_{O_2} і кількості продуктів згоряння $W_{п.г.}$.

Друга ланка (блок 2) – дифузія кисню через шар шлаків описується аналогічним рівнянням, що відразу вирішується щодо парціального тиску кисню на границі шлаки – метал $P_{O_2}^{ш}$

$$P_{O_2}^{ш} = P_{O_2}^{г.ш} - \frac{1}{\beta_2 S} V_{O_2}, \qquad (7.11)$$

де β_2 – коефіцієнт масовіддачі.

При цьому робиться допущення, що швидкість переносу кисню V_{O_2} через границі ланок 1 і 2 однакова, тобто має місце сталий процес.

Блок 3 носить допоміжний характер і призначений для переходу від парціального тиску кисню до активності *Fe* у шлаку. Користуватися парціальними тисками зручно тільки для вираження концентрації речовин у газовій фазі (тут ця величина піддається виміру). Для шлаку і металу зручніше оперувати з активністю або з концентрацією речовини, вираженої у відсотках. Щоб одержати співвідношення для переходу від парціального тиску кисню до активності *Fe* на нижній границі шлаку, варто звернутися до реакції дисоціації *Fe*: $2Fe \leftrightarrow 2Fe + O_2$. Продовжимо опис процесу синтезу математичної моделі, звернувшись до блоку 4 (мал. 7.4). Представимо, що на виході блоку 3 отримана активність *Fe* на нижній границі шлаку. Якщо припустити, що в мартенівській ванні хімічні реакції не протікають, то концентрація кисню в металі при рівновазі зі шлаком повинна відповідати закону розподілу

$$[O]_р^{ш.м} = a_{FeO} L_{FeO} = (FeO) f_{FeO} L_{FeO}, \qquad (7.12)$$

де f_{FeO} – коефіцієнт активності *Fe*;

L_{FeO} – константа розподілу *FeO* між шлаком і металом, що залежить від температури.

У дійсності рівноваги в мартенівській ванні немає, реакція зневуглецювання протікає безупинно і кисень, що надходить, безупинно витрачається на окислювання вуглецю. Тому що швидкість хімічної реакції досить висока в порівнянні зі швидкістю дифузії, фактичний вміст кисню в металі $[O]^{м.ф}$ завжди значно менше рівноважний за розподілом $[O]_р^{ш.м}$, але трохи вище рівноважного за реакцією $[O]^{р.п.}$. Різниця концентрацій $[O]_р^{ш.м} - [O]^{м.ф}$ і є рушійною силою процесу переходу кисню зі шлаку у метал, що описується рівнянням дифузії, яке входить до складу блоку 5 моделі

$$\frac{dQ_{O_2}^{м}}{d\tau} = \beta_3 S\left([O]_р^{ш.м} - [O]^{м.ф}\right), \qquad (7.13)$$

де $Q_{O_2}^{м}$ – кількість кисню, що надходить у метал;

β_3 – коефіцієнт масовіддачі кисню зі шлаку у метал.

Далі доцільно звернутися безпосередньо до редакції окислювання вуглецю, з умови рівноваги якої можна одержати співвідношення

$$[O]^{р.п} = \frac{m P_{CO}}{[O]}, \qquad (7.14)$$

де *m* – відносно постійна величина, що мало залежить від температури і змісту вуглецю і у середньому рівна 0,0025;

P_{CO} – парціальний тиск *CO* у пухирцях, що залежить від гідростатичного тиску стовпа металу і шлаку, а також від сили поверхневого натягу, що має істотне значення лише для пухирців дуже маленького діаметра, внесок яких у швидкість окислювання вуглецю невеликий.

Для практичних розрахунків можна користуватися формулою

$$[\mathrm{O}]^{\text{р.п}} = \frac{\mathrm{m}\left(1 + \mathrm{H}_{\text{ср}}\gamma_{\text{м}}\right)}{[\mathrm{C}]}, \qquad (7.15)$$

де $H_{ср}=V_B / S_B$ – середня глибина ванни.

Фактична концентрація (%) кисню в металі $[O]^{м.ф}$ перевищує рівноважну по реакції на деяку величину $\Delta[O]$, обумовлену дифузійним опором на границі метал-пухирці CO, тобто

$$[\mathrm{O}]^{\text{м.ф}} = [\mathrm{O}]^{\text{р.п}} + \Delta[\mathrm{O}]. \qquad (7.16)$$

Для сталого стану величина $\Delta[O]$ може бути прийнята рівної 0,004 %. Залежно від умов підведення кисню, властивостей шлаку та інших факторів ця величина в окремі моменти плавки може підвищуватися.

Кількість кисню, накопиченого в шлаку, можна знайти в такий спосіб. З підвищенням вмісту кисню в металі його вміст у шлаку повинне вирости на величину, що відповідає закону розподілу (за умови незмінного перепаду концентрацій між металом і шлаками)

$$(\Delta\mathrm{FeO})^{\text{н.ш}} = \frac{\Delta[\mathrm{O}]^{\text{н.м}}}{\mathrm{f}_{\mathrm{FeO}}\mathrm{L}_{\mathrm{FeO}}}, \qquad (7.17)$$

де $\Delta[O]^{н.м}$ – кількість кисню, накопиченого в металі.

Переходячи від (FeO) у шлаку до вмісту кисню у відсотках від маси металу, одержимо

$$\Delta(\mathrm{O})^{\text{н.ш}} = \Delta(\mathrm{FeO})^{\text{н.ш}}\frac{16}{72}\cdot\frac{\text{Ш}}{100} = \frac{\Delta[\mathrm{O}]^{\text{н.щ}}}{\mathrm{f}_{\mathrm{FeO}}\mathrm{L}_{\mathrm{FeO}}}\cdot\frac{16}{72}\cdot\frac{\text{Ш}}{100} = \varepsilon\Delta[\mathrm{O}]^{\text{н.м}} \qquad (7.18)$$

або

$$\Delta(\%\mathrm{O})^{\text{н.ш}} = \varepsilon\Delta[\mathrm{O}]^{\text{н.м}}, \qquad (7.19)$$

де $\varepsilon = \frac{1}{f_{FeO} L_{FeO}} \cdot \frac{16}{72} \cdot \frac{Ш}{100}$,

Ш – кількість шлаку, % від маси металу.

При *Ш* = 6,0 %; f_{FeO} = 2,0; L_{FeO} = 0,0023 (при температурі 1600 °С) одержуємо ε = 2,9.

Таким чином, блоки 6 і 7, що реалізують рівняння (7.14) і (7.16), замикають негативний зворотний зв'язок по нагромадженню кисню в металі, а блоки 9 і 9а – по нагромадженню кисню в шлаку, що виражається в зменшенні швидкості окислювання вуглецю в міру зниження його концентрації наприкінці плавки. Це досягається за рахунок росту від'ємників у блоках 5 і 8. У блоці 5 інтегрується рівняння (7.13), а в блоці 8 визначається кількість кисню, затрачувана безпосередньо на реакцію окислювання вуглецю

$$Q_{O_2}^{ок} = Q_{O_2}^{м} - \Delta(O)^{н.ш}. \qquad (7.20)$$

Потім за стехіометричному співвідношенню розраховується кількість окисленого вуглецю

$$[C]^{ок} = \frac{12}{16} Q_{O_2}^{ок}. \qquad (7.21)$$

і, нарешті, поточний вміст вуглецю в металі

$$[\%C] = [\%C]^{нач} - [\%C]^{ок}. \qquad (7.22)$$

Таким чином, ми закінчили опис другого етапу моделювання - складання замкнутої системи рівнянь.

Наступні етапи – дослідження і експериментальна перевірка моделі. Розроблена модель дозволяє вивчати вплив на характер зневуглецювання таких факторів, як состав газової фази, вміст оксиду заліза в шлаку і його активність, зміна коефіцієнтів масовіддачі, що пов'язане із составом шлаків і температурою, перевищення фактичного вмісту кисню в металі над рівноважним по реакції, глибина ванни і т.д.

На рис. 7.5 наведений приклад дослідження на моделі залежності характеру зневуглецювання від активності *FeO* у шлаку, а на рис. 7.6 приклад експериментальної перевірки моделі.

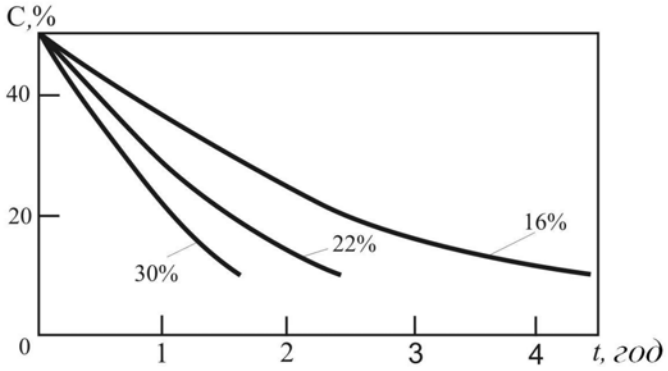


Рисунок 7.5 – Залежності зневуглецювання від активності оксиду заліза в шлаку

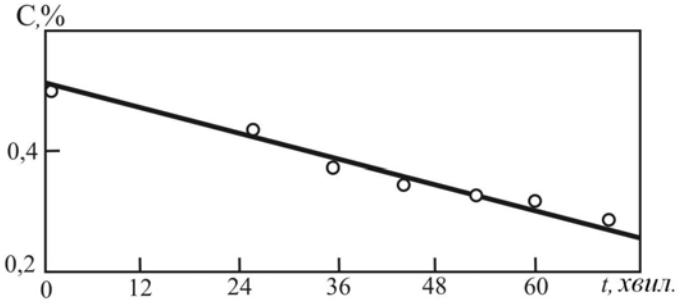


Рисунок 7.6 – Фактичний вміст вуглецю за даними експрес-аналізу промислової плавки

Розглянута модель виявилася зручною для дослідження процесу і наочного подання накопичених знань у їхньому взаємозв'язку. Використання її для цілей керування утруднено невизначеністю коефіцієнтів масовіддачі, які стають відомими тільки після кінця плавики або окремий її відрізок і істотно коливаються від плавки до плавки.

У наступному прикладі поставимо завдання побудови моделі більше прийнятної для цілей керування.

7.3.2 Побудова моделі зневуглецювання на основі закону збереження речовини

Припустимо, що мартенівська або електросталеплавильна ванна досить інтенсивно перемішується шляхом продувки її киснем і пухирцями оксиду вуглецю, що піднімаються, а процес перебуває в сталому стані. Тому розглянуту вище модель можна істотно спростити і зробити більше прийнятної для використання з метою керування за рахунок виключення з її дифузійних ланок, поклавши в основу механізму закон збереження речовини (кисню і вуглецю). У цьому випадку математичний опис моделі представляється у вигляді системи балансових рівнянь за киснем і вуглецем для газової фази й ванни мартенівської печі.

Розглянемо коротко процес синтезу структури і математичного опису блоків (другий етап моделювання) з обліком наведеної вище постановки завдання. Кількість кисню надлишкове над теоретично необхідним для зниження всіх видів палива в робочому просторі (наприклад, мартенівської) печі в одиницю часу визначається рівнянням

$$V_{изб}^{O_2} = \sum_{1}^{n} L_i - \Delta L_i - \sum_{1}^{k} l_{0j} V_{Гj}, \qquad (7.23)$$

де L_i – витрата *i-того* окислювача;

ΔL – втрати і підсмоктування повітря;

$V_{Гj}$ – витрата *j-того* палива;

l_{0j} – теоретична витрата повітря (кисню) для спалювання одиниці палива відповідного виду.

Далі може бути визначена кількість кисню, що надходить у ванну з газової фази в одиницю часу

$$V_{Г}^{O_2} = V_{изб}^{O_2} - V_{CO}^{O_2} - L_{ПГ}^{O_2}, \qquad (7.24)$$

де $V_{CO}^{O_2}$ – кількість кисню, необхідне для допалювання оксиду вуглецю, що виділяється з ванни;

$L_{ПГ}^{O_2}$ – кількість незасвоєного ванною кисню, що йде із продуктами згоряння, визначається співвідношеннями, наведеними в блоках *3* і *4* (рис. 7.7).

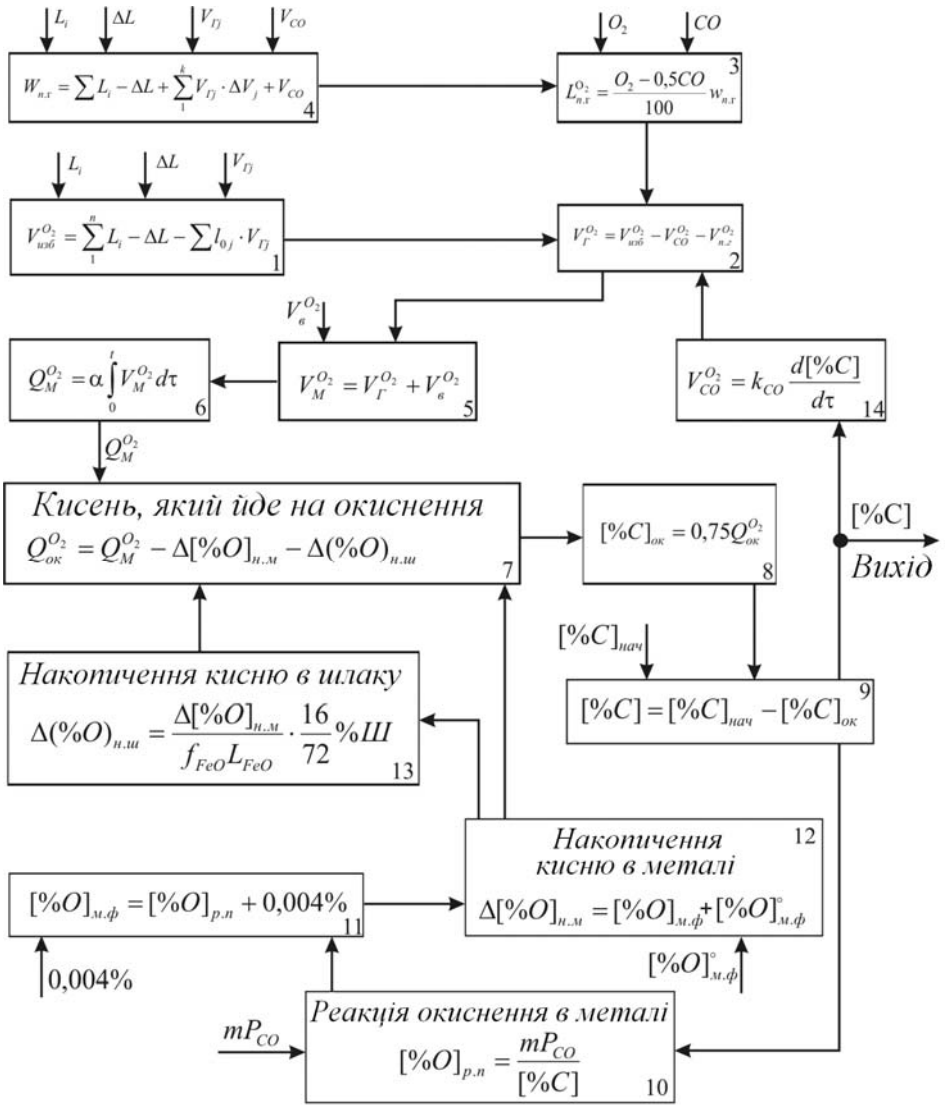


Рисунок 7.7 – Структура моделі на основі закону збереження речовини

Умовні позначки величини в блоках моделі наступні: O_2 і CO – вміст кисню і оксиду вуглецю в продуктах згоряння $W_{ПГ}$; ΔV_j – перевищення кількості продуктів згоряння над кількістю повітря, необхідного для спалювання одиниці палива; V_{CO} – кількість продуктів згоряння від спалювання CO, що виділились із ванни; $V_в^{O_2}$ – витрата кисню або повітря, що вдмухує безпосередньо у ванну. Позначення інших змінних наведені вище і у попередньому прикладі.

Блоком *5* моделі визначається кількість кисню, що надходить у метал в одиницю часу

$$V_м^{O_2} = V_г^{O_2} + V_в^{O_2}, \qquad (7.25)$$

а після інтегрування в блоці 6 – кількість кисню, що надходить у метал за певний час

$$Q_{м}^{O_2} = \alpha \int_0^T V_{м}^{O_2} d\tau, \qquad (7.26)$$

де α – коефіцієнт для переходу від розмірності кисню в кубічних метрах до розмірності у відсотках від маси металу.

У блоці 7 розраховується кількість кисню, витраченого на реакцію окислювання вуглецю

$$Q_{ок}^{O_2} = Q_{м}^{O_2} - \Delta[\%O]_{н.м} - \Delta(\%O)_{н.ш}. \qquad (7.27)$$

Кількість кисню, накопиченого в металі, описується в такий же спосіб, як і в попередній моделі.

Розглянута модель на відміну від попередньої має лише один невизначений параметр – величина втрат і підсмоктувань повітря *ΔL,* що може бути описана рівнянням регресії виду

$$\Delta L = b_1 L_{в} + b_0, \qquad (7.28)$$

де $L_{в}$ – витрата вентиляторного повітря.

Ця модель більш прийнятна для використання з метою керування, тому що в ній простіше і більш певно відображається вплив на процес зневуглецювання основних керуючих параметрів: витрат газоподібних окислювачів і палива, продувного кисню і присадок твердих окислювачів у ванну.

Разом з тим і ця модель не позбавлена деяких недоліків: описує процес у статичному стані без обліку перехідних режимів, не відображає впливу на процес зневуглецювання зміни вмісту оксидів заліза в шлаку.

Можна почати ще одну спробу вдосконалювання моделі, наприклад, за рахунок сполучення позитивних властивостей двох розглянутих вище моделей і урахування внутрішніх зворотних зв'язків. Узагальнена структурна схема такої

моделі представлена на рис. 7.8.

Наявність у цій моделі позитивного зворотного зв'язку за інтенсивності перемішування ванни пухирцями оксиду вуглецю, що виділяються, негативних зворотних зв'язків по накопиченню кисню в металі і шлаку при зниженні концентрації вуглецю, зменшенню вмісту оксидів заліза в шлаку при підвищенні швидкості зневуглецювання, що екранує дії оксиду, який виділяється з ванні, вуглецю дозволяє більш повно відбити властивості мартенівської ванни як об'єкта із саморегулюванням. За допомогою генераторів випадкових сигналів ГСС1–ГСС4 може бути відображене випадковий характер (закони розподілу) деяких параметрів, таких як втрати і підсмоктування повітря, коефіцієнти турбулентної дифузії β_1 і β_2 інерційності передачі кисню через шар шлаків T_1.

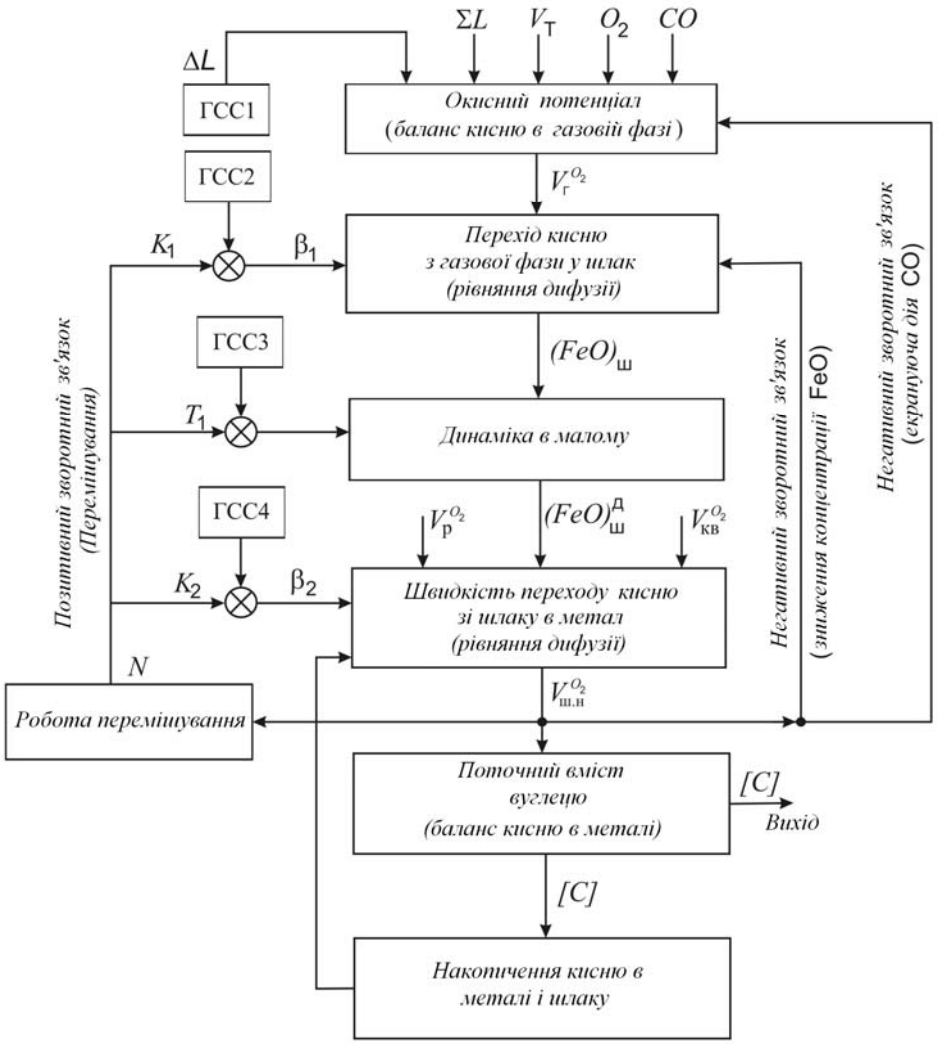


Рисунок 7.8 – Блок-схема вдосконаленої моделі процесу зневуглецювання

7.3.3 Модель процесу зневуглецювання як об'єкта з розподіленими параметрами

Повна модель об'єкта повинна складатися з моделі процесу і моделі системи, у якій він протікає. Остання складається з певного набору елементів і їхніх взаємозв'язків, тобто повна модель повинна описувати процес як у часі так і в просторі.

У багатьох випадках (і зокрема, у попередньому прикладі) через труднощі побудови повної моделі обмежуються тільки описом процесу в часі, приймаючи, що розподіл параметрів (наприклад, концентрації елементів і температури) по об'єму сталеплавильної ванни можна зневажити. Однак у ряді випадків, наприклад, при дослідженні внутрішніх механізмів складних металургійних процесів, таке допущення приводить до одержання моделі, неадекватної з погляду поставленого завдання.

У розглянутому нижче прикладі як об'єкт моделювання взятий процес зневуглецювання в тиглі. При цьому прийняті наступні припущення: процес протікає в ізотермічних умовах у системі *Fe-C-O*, реакція окислювання вуглецю протікає в умовах підвищених швидкостей підведення кисню до поверхні розплаву.

У таких умовах можливо часткове окислювання заліза, але в основному процес зневуглецювання визначається реакцією

$$C + 0,5O_2 \leftrightarrow CO\,.$$

Розподіл компонентів у розплаві (поле концентрацій) описується диференціальними рівняннями в частинних похідних параболічного типу:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_1}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(D_1 \frac{\partial Q_1}{\partial x} \right) + f_1; \\ \frac{\partial Q_2}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(D_2 \frac{\partial Q_2}{\partial x} \right) + f_2, \end{aligned} \qquad (7.29)$$

де $Q_1 = Q_1(x, t)$ і $Q_2 = Q_2(x, t)$ – розподіл концентрацій відповідно кисню і вуглецю;

D_1 і D_2 – коефіцієнти турбулентної дифузії компонентів у розплаві;

f_1 і f_2 – члени рівняння, що визначають зміну загальної кількості реагуючих речовин.

Початкові розподіли задаються в такий спосіб:

$$Q_1(x,0) = Q_1^0(x); \quad Q_2(x,0) = Q_2^0(x).$$

Граничні умови сформулюємо нижче. З умови рівноваги сил на границі розділу фаз газ-метал треба, що необхідною і достатньою умовою утворення і росту пухирця газової фази (виділення продукту реакції) є виконання нерівності

$$P_{CO} \geq P_0 + \gamma_P(l - x) + \frac{2\sigma}{R}, \tag{7.30}$$

де P_{CO} – парціальний тиск продуктів реакції;

P_0 – зовнішнє (атмосферне) тиск;

$\gamma_P(l - x)$ – феростатичний тиск стовпа металу;

x – відстань від початку координат, що перебуває на дні тигля;

l – відстань від дна тигля до поверхні металу;

σ – міжфазний поверхневий натяг;

R – радіус кривизни поверхні.

Реакція окислювання вуглецю протікає за умови

$$\frac{Q_1}{Q_2} > \frac{P_{CO}}{K_P}, \tag{7.31}$$

тобто коли добуток концентрації кисню і вуглецю перевищує рівноважне значення за реакцією (K_P – константа рівноваги реакції зневуглецювання).

Тоді шляхом нескладної підстановки із двох попередніх співвідношень одержуємо нерівність

$$K_P \frac{Q_1}{Q_2} \geq P_0 + \gamma_P(l - x) + \frac{2\sigma}{R}, \tag{7.32}$$

при виконанні якого продукти реакції повинні виділятися в газову фазу.

Швидкість зневуглецювання пропонується представляти рівнянням виду

$$\varpi = k_C S f\left(Q_1 / Q_2\right). \tag{7.33}$$

Для реакції $C + 0{,}5O_2 \rightarrow CO$ коефіцієнт k_c є константою швидкості реакції; S – площа поверхні в реакційній зоні, що може бути описана в такий спосіб:

$$S = \begin{cases} 0, \quad \text{якщо } Q_3 = 0 \quad \text{и} \quad K_P Q_1 / Q_2 < B; \\ 4\pi N\left(\dfrac{3Q_3\gamma_P}{4\pi N\gamma_{CO}} + R_н^3\right), \quad \text{якщо } Q_3 > 0 \quad \text{и} \quad K_P Q_1 / Q_2 \geq B, \end{cases} \tag{7.34}$$

де B – права частина нерівності (7.32);

γ_{CO} і γ_P – щільності оксиду вуглецю і розплаву;

N – об'ємна концентрація пухирців початкового радіуса $R_н$;

$Q_3 = Q_3(x, t)$ – розподіл концентрації оксиду вуглецю.

Швидкість підйому пухирця, на поверхні якого відбувається взаємодія вуглецю і кисню, може бути визначена з рівняння для сферичних часток

$$\upsilon = \frac{g}{9\nu}\frac{R^3 - R_н^3}{R}, \tag{7.35}$$

де R – радіус пухирця;

g – прискорення сили ваги;

ν – кінематична в'язкість;

Ця формула може використовуватися в припущенні відсутності взаємодії між окремими пузирями, що справедливо для малих розмірів пузирів.

Концентрація оксиду вуглецю Q_3 може бути представлена у вигляді

$$Q_3 = \frac{4}{3}\pi N\frac{\gamma_{CO}}{\gamma_P}\left(R^3 - R_н^3\right). \tag{7.36}$$

Для газової фази справедливе рівняння перенесення

$$\frac{\partial Q_3}{\partial t} = -\upsilon \frac{\partial Q_3}{\partial x} + f_3 . \qquad (7.37)$$

с початковими умовами $Q_3(x, 0) = Q_3^0(x)$.

Члени f_i у рівняннях (7.29) і (7.37) для одиничного об'ємі визначаються в такий спосіб:

$$f_2 = -\frac{\varpi}{\gamma_P}; \quad f_1 = \chi_2^1 f_2; \quad f_3 = -\chi_2^3,$$

де ϖ – визначається з вираження (7.33);

χ_i^j – стехіометричні коефіцієнти.

Визначимо тепер граничні умови для рівнянь (7.29) і (7.37). На нижній границі ($x = 0$)

$$\left.\frac{\partial Q_1}{\partial x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial Q_2}{\partial x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial Q_3}{\partial x}\right|_{x=0} = 0 .$$

На верхній границі ($x = 1$), де має місце реакція зневуглецювання в поверхневому шарі, граничні умови представляються у вигляді

$$D_1 \left.\frac{\partial Q_1}{\partial x}\right|_{x=l} = \frac{u - \chi_2^1 \varpi}{F\gamma_P}; \quad D_1 \left.\frac{\partial Q_2}{\partial x}\right|_{x=l} = -\frac{\varpi}{F\gamma_P},$$

де u – інтенсивність надходження кисню;

F – площа контакту струменя окислювача з поверхнею розплаву.

Гранична умова для рівняння (7.37) при ($x = l$) не потрібно. Таким чином, отримана система диференціальних рівнянь у частинних похідних

$$\begin{aligned}
\frac{\partial Q_1}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(D_1 \frac{\partial Q_1}{\partial x} \right) + f_1; \\
\frac{\partial Q_2}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(D_2 \frac{\partial Q_2}{\partial x} \right) + f_2; \qquad (7.38) \\
\frac{\partial Q_3}{\partial t} &= -\upsilon \frac{\partial Q_3}{\partial x} + f_3
\end{aligned}$$

разом із представленими вище співвідношеннями може розглядатися як модель процесу зневуглецювання металевої ванни, при інтенсивному обдуванні її поверхні киснем. Ця модель, як обмовлялося при постановці завдання, отримана з урахуванням ряду допущень, правомірність яких може бути перевірена шляхом експерименту.

При розвитку подібної моделі, наприклад, стосовно до умов мартенівського або безперервного сталеплавильного процесу подового типу виникає необхідність у її істотному ускладненні. Тут, насамперед потрібно враховувати наявність шару шлаку, а також зворотний вплив на початкові і граничні умови оксиду вуглецю, що виділяється з ванни і робить екрануючу дію на проникнення кисню і розбавляє його концентрацію над шлаком. Властивості шлаку, через які здійснюється турбулентна дифузія кисню, залежать від його состава і температури.

Не менші труднощі виникають і при побудові подібної моделі для умов конвертерної плавки: складна форма лунки, що утвориться від струменя, що впроваджується, поява великої кількості дрібних часток газу, металу, шлаку, на яких виникають міжфазні поверхні, що грають істотну (якщо не визначальну) роль у механізмі зневуглецювання, і т.д.

Незважаючи на відзначені труднощі, варто очікувати, що по мірі накопичення знань про зазначені процеси і розширення можливостей ЕОМ будуть з'являтися все більші можливості для створення моделей розглянутого класу.

7.4 Приклад побудови моделі конвертерного процесу

На рис. 7.9 представлена якісна картина механізму процесу продувки конвертерної ванни киснем зверху.

При побудові моделі заключного періоду конвертерної плавки виходили з наступних фізико-хімічних подань, отриманих у результаті аналізу літературних даних і результатів досліджень [15, 16].

У період рафінування, починаючи приблизно із середини продувки, в ос-

новному окисляються тільки вуглець і залізо. У зв'язку з великою інтенсивністю асиміляції ванною кисню і його практично повним використанням швидкості первинних реакцій

$$2[C]+[O_2]=2\{CO\}; \tag{7.39}$$

$$2[Fe]+\{O_2\}=2(FeO). \tag{7.40}$$

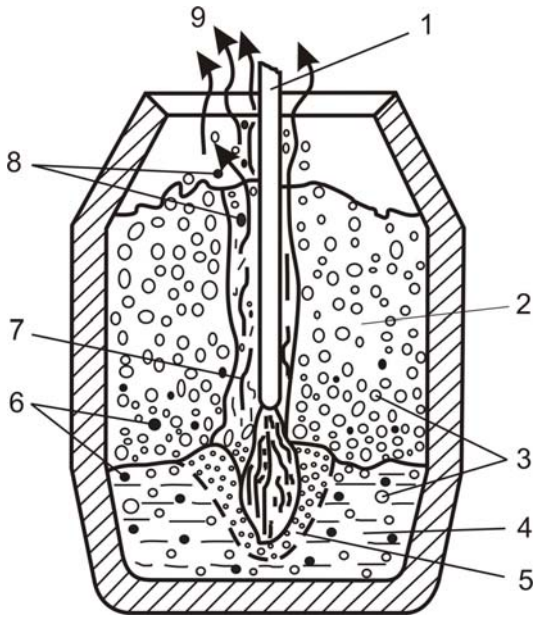
можна виразити не кінетичними рівняннями, а балансовими:

$$W_C = 2\alpha_C W_0, \tag{7.41}$$

$$W_{Fe} = 2\alpha_{Fe} W_0, \tag{7.42}$$

де W_0 – секундна витрата кисню;

α_3, α_{Fe} – об'ємні частки кисню, що витрачають на окислювання відповідно вуглецю і заліза.



1 – фурма; 2 – газошлакометалева емульсія; 3 – пузирі оксиду вуглецю; 4 – металева ванна; 5 – продукти окислювання часток металу, залученого в кисневий струмінь; 6 – краплі металу; 7– вихід потоку оксиду вуглецю з реакційної зони; 8 – бризи металу, залучені в потік вихідними з реакційної зони газами (винос); 9 – конвертерні гази

Рисунок 7.9 – Механізм процесів при продувці конвертерної ванни киснем зверху

З огляду на великі питомі потоки кисню, властиві сучасному конвертерному процесу, можна припустити, що домішки чавуну і заліза окисляються зі швидкостями, пропорційними їхнім мольним часткам у розплаві, тоді

$$\alpha_C = \alpha_0 x_C; \quad \alpha_{Fe} = \alpha_0 x_{Fe}, \tag{7.43}$$

де α_0 – загальний ступінь використання кисню;
x_C, x_{Fe} – атомні частки вуглецю і заліза в металі.

Отже, на поверхні розділу метал-газ (S_1) окисляється переважно залізо ($x_{Fe} > x_C$) з утворенням великої кількості оксидів. У той же час відносно невисокі концентрації FeO у шлаку по ходу продувки свідчать про значний розвиток вторинної (непрямої) реакції окислювання вуглецю

$$[C] + (FeO) = \{CO\} + [Fe]. \tag{7.44}$$

На границі металу з оксидною фазою (поверхня S_2). Перевищення ж фактичного змісту оксидів заліза в шлаку при продувці над рівноважним з вуглецем приводить до думки про наявність істотних кінетичних утруднень при гетерогенній реакції (7.44).

З огляду на те, що ця реакція може протікати на двох типах поверхонь, швидкість її можна виразити кінетичним рівнянням виду

$$W_C^2 = k_C^2 S_{м-ш} [C]^{n_C} (FeO)^{n_{FeO}} + k_C^2 S_{м/ш} \left[\overline{C}\right]^{n_C} (FeO)^{n_{FeO}}, \tag{7.45}$$

де k_C^2 – константа швидкості реакції (7.44);
$S_{м-ш}$ – поверхня роздягнула суцільних мас металу-шлаків;
$S_{м/ш}$ – міжфазна поверхня в дисперсній системі краплі метал-шлаки;
n, nFe – порядок реакції по C и Fe;
[C], $\left[\overline{C}\right]$, (FeO) – концентрація відповідно вуглецю у ванні, середня в краплях металу, зважених в оксидній фазі, і оксиду заліза в шлаку;
$S_2 = S_{м-ш} + S_{м/ш}$ – сумарна поверхня роздягнула метал-шлаки.

Концентрація вуглецю в краплях металу природно менше, ніж у ванні, і визначається в основному часом «життя» ($\tau_{ж}$) і розміром ($\tau_{к}$) краплі. Тому що конкретні закони розподілу краплі по цих параметрах невідомі, можна скорис-

татися усередненою на поверхні всіх крапель величиною [C], уважаючи, що вона становить певну частку від [C]; $\left[\overline{C}\right] = \theta[C]$, де $\theta < 1$. Внаслідок величезного числа крапель таке усереднення не позбавлене підстав. Тоді можна записати

$$W_C^2 = k_C^2 S_2^{экв} [C]^{n_C} (FeO)^{n_{FeO}}, \qquad (7.46)$$

де $S_2^{экв} = S_{м-ш} + \theta^{n_C} S_{м/ш}$ – еквівалентна поверхня розділу металу і шлаку.

Сумарна швидкість окислювання вуглецю

$$W_C = 2\alpha_C W_0 + k_C^2 S_2^{экв} [C]^{n_C} (FeO)^{n_{FeO}}. \qquad (7.47)$$

залежить від концентрації *FeO* у шлаку, для визначення якої можна скористатися матеріальним балансом за оксиду заліза. Припустимо, що *FeO* утвориться на поверхні S_1 зі швидкістю

$$W_{FeO}^1 = W_{Fe} = 2\alpha_{Fe} W_0 \qquad (7.48)$$

і витрачається на поверхні S_2, зі швидкістю

$$W_{FeO}^2 = W_C^2 = k_C^2 S_2^{экв} [C]^{n_C} (FeO)^{n_{FeO}}, \qquad (7.49)$$

тоді швидкість зміни її концентрації

$$W_{FeO} = 2\alpha_{Fe} W_0 - k_C^2 S_2 [C]^{n_C} (FeO)^{n_{FeO}}. \qquad (7.50)$$

Замінивши $\alpha_{Fe} = \alpha_{ПРО} - \alpha_3$; $2\alpha_{Fe0} = 2\alpha_0 W_0 - 2\alpha_C W_0$ з урахуванням вираження (7.47) рівняння (7.50) перепишемо у вигляді

$$W_{FeO} = 2\alpha_0 W_0 - W_C, \qquad (7.51)$$

де $2\alpha_0 W_0$ – сумарна швидкість асиміляції кисню ванною.

Залежність константи швидкості реакції (7.44) від температури описується рівнянням Ареніуса

$$k_C^2 = k_{C_0}^2 e^{-\frac{E}{RT}}. \qquad (7.52)$$

Швидкість нагрівання металу в першому наближенні можна виразити рівнянням

$$\frac{dT}{d\tau} = \frac{Q_p^1}{c_p^в} W_C + \frac{Q_p^2}{c_p^в} W_{FeO} - \frac{c_p^{O_2}(T-300)}{c_p^в} - k_п^T, \qquad (7.53)$$

де Q_p^1 і Q_p^2 – теплові ефекти реакції (7.39) і (7.40) при постійному тиску;

$c_p^в$ – теплоємність ванни;

$c_p^{O_2}$ – молярна теплоємність кисню;

$k_п^T$ – теплові втрати.

З огляду на гетерогенний характер реакцій у конвертерній ванні, можна думати, що хімічні реакції протікають переважно на міжфазних поверхнях, в утворенні яких більшу роль грають гідродинамічні фактори. Залежність міжфазної поверхні від інтенсивності потоку газу можна представити у вигляді

$$S_2^{экв} = k_в m_C \left(\varpi_0 - \varpi_{н.р}\right)^{n_\varpi}, \qquad (7.54)$$

де ϖ_0 – секундна витрата кисню, віднесена до одиночного сопла, число яких у фурмі дорівнює m_C;

$k_в$ – коефіцієнт пропорційності, що залежить від геометричних розмірів металевої ванни.

Передбачається при цьому, що окремі струмені не взаємодіють один з одним. Витрата кисню через одиничне сопло $\varpi_{н.р}$, що відповідає початку розбризкування металу, визначається властивостями рідини і газу, діаметром сопла d_c і висотою фурми над рівнем спокійної ванни $h_ф^{n_h}$:

$$\varpi_{н.р} = k_\varpi d_C h_ф^{n_h}. \qquad (7.55)$$

З урахуванням цієї залежності і співвідношення $\varpi_0 = W_0 / m_C$ у вираженні (7.54) одержуємо

$$S_2^{экв} = k_в m_C^{1-n_\varpi} \left(W_0 - k_\varpi m_C d_C h_ф^{n_h}\right)^{n_\varpi}. \qquad (7.56)$$

Після підстановки k_C^2 і $S_2^{экв}$ з рівнянь (7.52) і (7.56) у формулу (7.47) одержуємо систему трьох диференціальних рівнянь

$$-\frac{dN_C}{d\tau} = 2\alpha_C + k_2 m_C^{1-n_\varpi}\left(W_0 - k_\varpi m_C d_C h_\phi^{n_h}\right)e^{-\frac{E}{RT}}[C]^{n_C}(FeO)^{n_{FeO}}; \qquad (7.57)$$

$$\frac{dN_{FeO}}{d\tau} = 2\alpha_0 W_0 - W_C = W_{FeO}; \qquad (7.58)$$

$$\frac{dT}{d\tau} = k_C^T W_C + k_{FeO}^T W_{FeO} - k_0^T W_0 - k_{\boldsymbol{n}}^T = W_T, \qquad (7.59)$$

яку можна розглядати як математичну модель основних процесів конвертерної плавки.

Цікавою відмінною рисою цієї моделі є використання в ній залежності міжфазної поверхні метал-шлаки від положення фурми і інтенсивності продувки.

На основі теоретичних і експериментальних досліджень отримані наступні значення показників ступенів у рівнянні (7.57):

$$n_\varpi = 0,5; \quad n_h = 2; \quad n_C = n_{FeO} = 0,5; \quad E/R = 20000.$$

Коефіцієнти k_C^T, k_{FeO}^T, k_0^T визначаються за термодинамічними даними, k_2 і $k_{\boldsymbol{n}}^T$ – дослідні коефіцієнти.

З огляду на значення невідомих коефіцієнтів і переходячи від мольних концентрацій елементів до процентного (за масою), перепишемо систему рівнянь у наступному виді;

$$-\frac{d[C]}{d\tau} = k_1\sigma_0\upsilon_0\frac{[C]}{27+[C]} + k_2 e^{-\frac{20000}{T}}\sqrt{[C](FeO)\left(\upsilon_0 - k_h h_\phi^2\right)}; \qquad (7.60)$$

$$\frac{d(FeO)}{d\tau} = \frac{B}{\theta_{\boldsymbol{ш}}}\left[0,1\sigma_0\upsilon_0 - \left(1+\frac{m}{[C]^2}\right)\upsilon_C\right]; \qquad (7.61)$$

$$\frac{dT}{d\tau} = k_C^T \upsilon_C + k_{FeO}^T \upsilon_{FeO} - k_0^T \upsilon_0 - k_n^T, \qquad (7.62)$$

де $\theta_ш = m_ш/m$ – відносна маса шлаків;

$m/[C]^2$ – доданок, що враховує нагромадження кисню в металі;

υ_0 – питома інтенсивність дуття;

$k_h = k_\varpi m_c d_c$

Спрощена блок-схема програми, що реалізує на ЕОМ систему рівнянь (7.60)–(7.62), представлена на рис. 7.10.

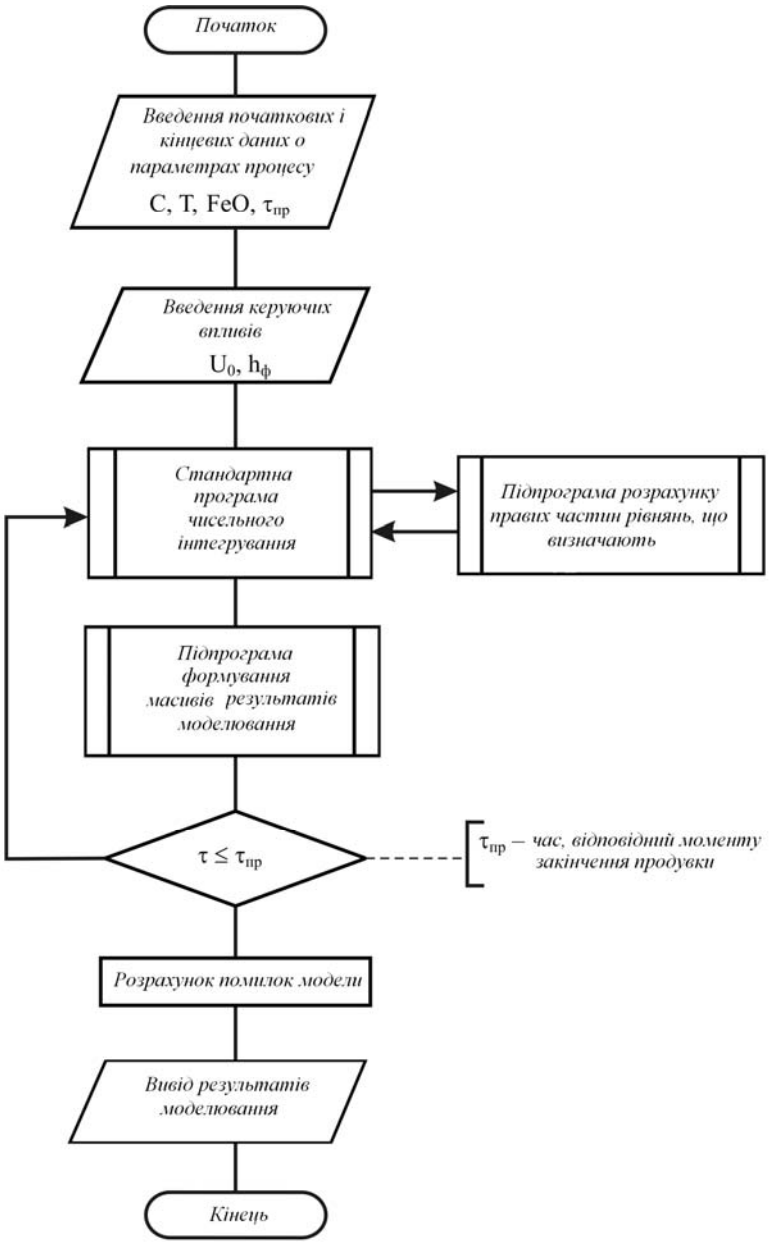


Рисунок 7.10 - Спрощена блок-схема програми реалізації на ЕОМ моделі конвертерної плавки

Розглянута модель є порівняно простою, але в той же час, як показали результати експериментальної перевірки, вона задовільно відображає основні процеси для другої половини конвертерної плавки.

7.5 Модель подачі шихти у сталеплавильні агрегати

Звичайно транспортну ситуацію записують у вигляді таблиці чисел, що вводять у пам'ять машини. Існує два способи запису транспортної моделі.

Перший спосіб називають естафетним. При використанні цього способу запису весь масив пам'яті машини розбивають на групи, кожна з яких відноситься до певної ділянки або групи шляхів. Таким чином, кожному можливому місцю розташування транспортної одиниці відповідає декілька комірок пам'яті, куди записується числовий код транспортного об'єкту, якщо останній розташований на розглянутому місці. У випадку незайнятості даного шляху вміст осередку залишається порожнім.

Числовий код транспортного об'єкту містить номер состава, вид (або тип) продукції, перевезеною составом, кількість перевезеного вантажу, призначення вантажу, а також деякі додаткові відомості (наприклад, вказівка про необхідність подачі до місця розвантаження допоміжного складу для прийому тари).

Для різних транспортних систем код транспортного об'єкту компонують із різних, але заздалегідь певних відомостей. У процесі функціонування моделі структура коду об'єкта залишається незмінної.

Реальному переміщенню составів на об'єкті відповідає в моделі переписування транспортного коду з однієї комірки пам'яті в іншу.

Спосіб зручний тим, що програма імітації пересувань транспортних одиниць порівняно проста. Досить просто здійснюється також добування з моделі інформації, що характеризує транспортний об'єкт. Однак порівняльна простота програми обробки кодів досягається ціною неощадливого використання масиву пам'яті, оскільки ємність пам'яті, виділеної для зберігання транспортних кодів, повинна бути досить великою.

Другий спосіб називають способом ковзної адреси. При користуванні цим способом запису транспортної ситуації весь масив пам'яті розбивають на групи, кожна з яких відноситься до певного транспортного об'єкта. У кожній групі записують закодовану у вигляді деякого числа адресу розташування транспортного об'єкта в цей момент часу. Крім того, там же записують службову інформацію, аналогічну тієї, що входила в транспортний код у попередньому випадку.

Переміщення состава відображається в моделі розчленовуванням транспортного коду і записом у його адресну частину іншої адреси, що відповідає новому місцю розташування состава.

Спосіб «ковзної адреси» істотно зменшує обсяг необхідної пам'яті, але в той же час ускладнює програму і збільшує час, затрачуваний машиною на моделювання процесу.

Який би спосіб запису транспортної ситуації не був прийнятий, у машині виділяється подвійний масив пам'яті: один - для відображення поточної транспортної ситуації, а інший - для запису розкладу. Це дозволяє шляхом порівняння відповідних транспортних кодів в обох масивах перевіряти виконання розкладу.

У пам'яті машини виділяють також комірку для запису шкали відповідей, що дозволяє вирішувати ситуації, при яких рух одного транспортного об'єкта затримує рух іншого. Оскільки для кожної конфліктної ситуації є тільки два результати (пропускається состав або затримується), конфлікт відображається в моделі одним двійковим розрядом.

При моделюванні процесу подачі шихти в сталеплавильні агрегати передбачається, що проміжки часу між закінченнями завалок у мартенівських печах підкоряються експонентному закону. Состави, що звільнилися від шихти, повинні бути обслужені шихтовим двором, тобто подані під навантаження і навантажені. Робляться допущення про те, що процес надходження составів під навантаження підкоряється розподіленню Пуассона з параметром k (число составів у годину) і що тривалість навантаження составів підкоряється довільному

закону розподілу з інтенсивністю обслуговування (число составів у годину). Состави навантажуються шихтою в порядку їхнього надходження.

Незважаючи на те, що в реальних умовах виробництва в шихтовому дворі одночасно під навантаженням можуть перебувати кілька составів, шихтовий двір розглядається як система, у якій під навантаженням перебуває тільки один состав, тобто як одноканальна система масового обслуговування. Це допущення обґрунтовується тим, що інтенсивність роботи шихтового двору розраховується за темпами видачі навантажених составів, а не за тривалістю навантаження одного состава.

Наведений опис ділянки подачі шихти є досить спрощеним. Реальна система характеризується неординарними потоками з післядією, відсутністю стаціонарності, складністю процесів обслуговування і великою кількістю обслуговуючих приладів. У зв'язку із цим, при побудові моделей подачі шихти в сталеплавильні агрегати варто користуватися способами, заснованими на методі статистичних випробувань.

При побудові математичної моделі виробничого процесу в пічному прольоті і шихтовому дворі мартенівського цеху були враховані наступні особливості роботи мартенівського цеху:

1) Технологічний процес здійснюється за певним циклом на декількох паралельно функціонуючих агрегатах. При роботі цих агрегатів можна виділити окремі фази, що вимагають участі допоміжних механізмів.
2) Допоміжні механізми можуть бути різних типів і їхнє число в системі обмежено. Враховується також обмеження на доступ механізмів до агрегатів залежно від умов їхньої роботи.
3) Для деяких фаз технологічного процесу необхідна сировина доставляється транспортними одиницями за певний цикл і в умовах обмеженої пропускної здатності транспортної мережі.
4) Система працює в умовах наявності випадкових збурювань, які впливають на тривалість окремих фаз процесу, структуру і якість сировини, а отже, і на час зайнятості допоміжного і транспортного обладнання.

5) З метою оптимізації роботи системи за заданим критерієм (наприклад, за продуктивністю, ритмічності роботи, завантаженню встаткування) при наявності випадкових збурювань здійснюється керування роботою перерахованих вище елементів системи. Це керування реалізує спеціальна підсистема на основі обробки оперативної інформації про стан окремих елементів.

Стратегії керування вибираються на підставі вирішального правила, що залежно від типу керуючого впливу задається або правилами переваги (пріоритету), або алгоритмом, що вирішує деяке завдання оптимізації.

Ціль системи керування мартенівським цехом полягає у виконанні добового плану виробництва, що виражається числом ковшів сталі заданого сортаменту. Для забезпечення виконання наміченого плану складається добовий графік випусків плавок, і робота всіх ділянок цеху організується так, щоб мінімізувати відхилення фактичного плину плавок від запланованого. Саме керування ходом виробничого процесу підрозділяється на «технологічне» і «організаційне». Перший тип керування припускає вибір методів інтенсифікації процесу плавки впливом на технологічні параметри процесу (зміна режиму подачі кисню, палива і т.п.). Керування «організацією» полягає у виконанні процедур організаційно-розподільного характеру (черговість подачі встаткування, вибір необхідного обслуговуючого пристрою і т.д.).

У математичній моделі мартенівського цеху відображено розглянуті нижче основні елементи виробничого процесу.

Плавка умовно розбивається на 8 періодів: заправлення I (заправлення укосів печі), завалка сипучих, заправлення II (заправлення випускного отвору), завалка лому, прогрів, плавлення, доведення і випуск. Кожний період мартенівської плавки включає як організаційні, так і технологічні роботи. Організаційна робота вимагає участі механізмів - заливальних кранів і завалочних машин, а технологічна робота протікає без втручання механізмів.

Взаємодія печей і механізмів здійснюється в такий спосіб:

1) пряма взаємодія - механізм обслуговує піч;
2) «конкуренція» - кілька печей претендують на той самий механізм;

3) взаємна перешкода - механізм під час роботи заважає просуванню інших механізмів.

Піч, готова до виконання організаційної роботи, пред'являє заявку на відповідний механізм. Якщо є механізм, вільний і здатний обслужити цю піч (може підійти до печі), то заявка виконується. У противному випадку заявка залишається в силі до того моменту, коли виявиться можливим її виконати. Якщо одночасно пред'являються заявки від декількох печей на той самий механізм, то виникає конфліктна ситуація, що дозволяє введенням пріоритетів, що дозволяють віддати перевагу в обслуговуванні одній роботі перед іншою. Пріоритети роботи являють собою власне кажучи формалізоване узагальнення тих правил, якими керуються керуючі особи в цеху при розподілі механізмів. У моделі прийняті наступні пріоритети:

$$\varepsilon_j^{м} = \begin{cases} 4 – \text{розкислення (вищий пріорітет)}, \\ 3 – \text{полірування}, \\ 2 – \text{завалка сипучих}, \\ 1 – \text{завалка лому}; \end{cases}$$

$$\varepsilon_j^{к} = \begin{cases} 3 – \text{заправлення (вищий пріорітет)}, \\ 3 – \text{злив чавуна}, \\ 2 – \text{підсипання порогів}; \end{cases}$$

де $\varepsilon_j^{м}$ – пріоритет завалочної машини, зайнятий на j-тій печі;

$\varepsilon_j^{к}$ – пріоритет заливального крана, зайнятого на j-тій печі.

Більшість робіт, здійснюваних механізмами, варто виконувати без перерви. Але процес, наприклад, завалки металобрухту можна перервати і це здійснюється, коли надходить заявка на виконання роботи з більш високим пріоритетом (наприклад, від печі, що перебуває на поліруванні). Піч, на якій робота була перервана, стає такою, що очікує. Якщо дві печі пред'являють заявки на той самий механізм для виконання робіт з рівними пріоритетами, то в першу чергу задовольняється заявка, що надійшла раніше.

Реалізація організаційної роботи в пічному прольоті пов'язана з актом керування, вибір якого повинен бути спрямований на рішення завдання оптимізації розподілу механізмів. Акти керування реалізуються наступними алгоритмами:

1) пошуку і вибору завалочної машини,
2) пошуку і вибору печі, що очікує завалочну машину,
3) пошуку і вибору заливального крана,
4) пошуку і вибору печі, що очікує заливальний кран.

Повний цикл руху мульдових составів включає навантаження їх у магнітному відділенні, розвантаження в печі (завалка лома) і зворотний рух порожніх составів. Відповідний процес формалізований у вигляді циклічної багатофазної системи масового обслуговування, у якій вимоги (состави) проходять ланцюг приладів і накопичувачів (магнітне відділення, вагарні, шихтовий цех, копровий цех і т.д.). При цьому маршрут проходження зазначених елементів для кожної вимоги міняється, загалом кажучи, від циклу до циклу. Наприклад, протягом першого циклу состав може бути занурений у магнітному відділенні, а протягом наступного циклу - у копровому цеху.

У принципі, для кожної вимоги (состава) на ділянці магнітне відділення - пічний проліт можливо існування трьох циклів, які відповідають трьом різним маршрутам руху составів - трьом типам вимог.

Для формалізації транспортної мережі і конкретних маршрутів руху составів введемо наступні три множини:

$F^1(L)$ – множина «вхідних» накопичувачів щодо приладу з номером L;

$F(L)$ – множина «вихідних» накопичувачів щодо приладу з номером L;

$G_L(a_i)$ – множина «вихідних» накопичувачів щодо приладу L, що є приймачами накопичувача a_i у відповідності зі схемою обслуговування.

Кожна вимога задається сукупністю параметрів:

$$C_s = \left(T_s^{ii}, T_s, L_s, P_s, \alpha_s, M_s^n\right),$$

де s – номер состава (s =1,2,..., n);

T_s^{ii} – момент початку обслуговування s-го состава;

T_s – момент закінчення обслуговування s-го состава;

P_s – маса s-го состава;

L_S – номер приладу або накопичувача, що містить дану вимогу;

α_s – номер печі, на яку призначений s-ий состав;

M_s^n – кількість мульд в s-ном составі, вантажених ломом типу n, де n – приймається рівною 1 для блюмової обрізі, 2 для стружки, 3 для легковагого лому, 4 для пакетів і 5 для скрапу.

Вхідною інформацією для роботи моделі ділянки магнітне відділення - грубний проліт є прибуття чергового состава з металобрухтом у магнітне відділення. Ця інформація задається наступною сукупністю параметрів:

$$B = \left(t_n, V_1, V_2, ..., V_M\right),$$

де t_n – момент прибуття состава,

M - загальне число вагонів у составі;

$V_j = \left(T_j^{ii}, T_j, P_j, n_j\right)$, $j = 1, 2, ..., M$;

j – номер вагона состава;

T_j^{ii} – момент початку розвантаження вагона;

T_j – момент закінчення розвантаження вагона;

P_j – маса металобрухту у вагоні;

n_j – тип лома у вагоні.

Момент t_n надходження состава в магнітне відділення визначається контактним графіком. Графік може порушуватися, причому відхилення від графіка мають випадковий характер.

При моделюванні використовуються наступні характеристики шихти:

P_n – маса лома типу n в одній мульді;

υ_n – швидкість навантаження одним краном мульдового состава з ломом типу n з вагонів состава (мульд/хв).

Актами організаційного керування на ділянці магнітне відділення - піч-ний проліт мартенівського цеху є:

1. Призначення составів на піч для виконання роботи - завалка лома.
2. Встановлення порядку подачі составів на різних відрізках доріг цеху.

3. Організація вантажно-розвантажувальних робіт у магнітному відділенні.

Для реалізації обслуговування на кожній фазі системи магнітне відділення - пічний проліт необхідне функціонування одного з алгоритмів, що здійснюють:

а) формування параметрів обслугованої вимоги (состава);

б) імітацію навантаження лома в мульди із состава;

в) імітацію розвантаження лома із состава в ями;

г) перегляд станів приладів (визначення робіт з обслуговування составів);

д) формування параметрів состава і імітацію початку її розвантаження;

е) призначення на печі мульдових составів.

Розглянемо принципову блок-схему алгоритму, що імітує виробничий процес і акти керування на розглянутих ділянках мартенівського цеху (рис. 44).

Моделювання здійснюється шляхом перегляду інформації про систему в моменти здійснення подій. Події в досліджуваній системі збігаються з моментами закінчення робіт на печах, робіт з обслуговування мульдових составів, а також надходження составів у магнітне відділення. Приймемо:

T_j – момент закінчення роботи на j-ій печі;

T_s – момент закінчення чергової роботи над составом;

T_B – момент прибуття состава в магнітне відділення;

T_j – момент закінчення розвантаження вагона состава в яму;

T_{max} – момент закінчення моделювання;

$T_к = \min(T_j)$.

Тоді загальну схему алгоритму, що моделює виробничий процес, можна представити в такий спосіб (рис. 7.11).

Блок 1 уводить у пам’ять ЕОМ дані про початкову ситуацію в системі. Блок 2 виконує функції «диспетчера», визначаючи найближчий момент $T = min(T_к, T_s, T_b, T_B)$ настання події і організувати взаємодії локальних моделей. Якщо $T > T_{max}$, тобто якщо найближчий момент перебуває поза інтервалом

моделювання, то функціонування моделі закінчується (блок 3), а результати видаються на друк.

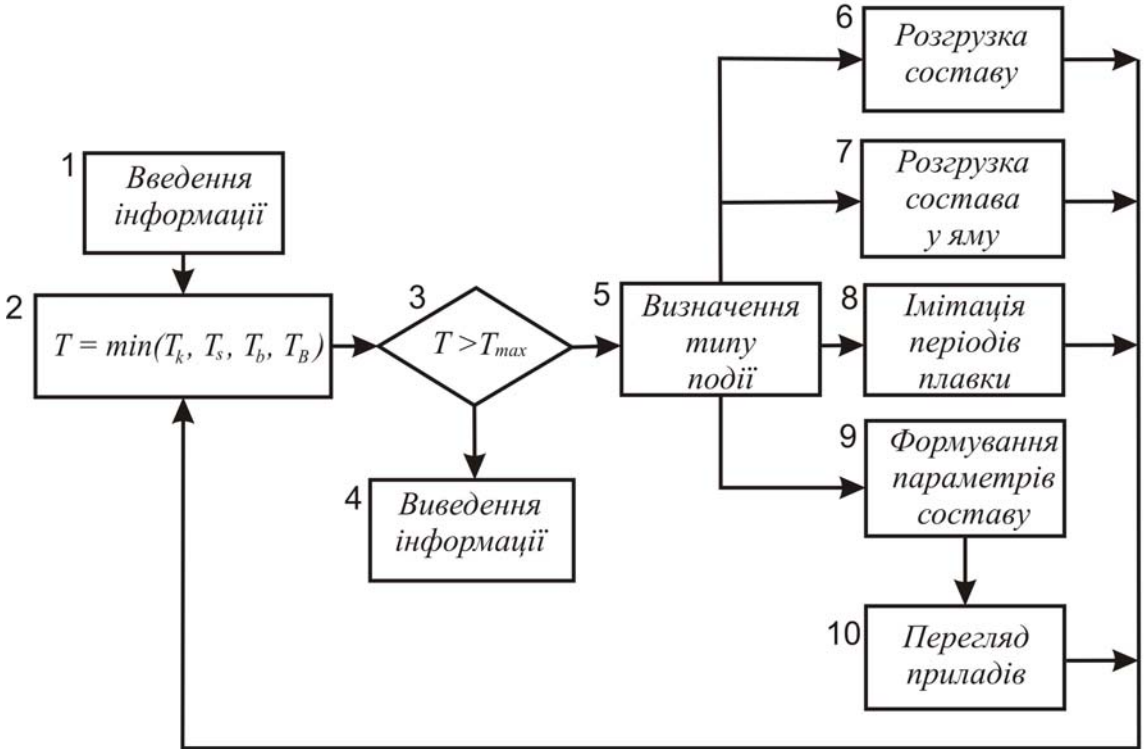


Рисунок 7.11 - Принципова блок-схема алгоритму, що моделює виробничий процес на ділянці магнітне відділення - пічний проліт мартенівського цеху

При $T \leq T_{max}$ у блоці 5 визначається, до якому із зазначених нижче типів належить подія, що наступила:

1. Прибування чергового состава (блок 6). У цьому випадку моделюються роботи з розвантаження вагонів состава в мульдові состави або в ями магнітного відділення.

2. Закінчення розвантаження вагона состава в яму (блок 7). При цьому фіксується момент закінчення розвантаження вагона в яму, маса розвантаженого лома і новий запас сировини в ямі.

3. Закінчення роботи на печі. Якщо чергова робота є організаційної, то здійснюється пошук і вибір відповідного механізму. У противному випадку методом статистичних випробувань визначається тривалість технологічної роботи. Якщо на печі закінчився період «випуск», то в блоці 8 формується звертання до алгоритму призначення составів.

4. Закінчення обслуговування мульдових составів одним із приладів. У цьому випадку формуються нові параметри мульдового состава і моделюється перехід його в наступний накопичувач.

Розглянуті тут схеми обслуговування мають наступну властивість: якщо в деякого приладу накопичувач виявиться повним, то наступний прилад припиняє свою роботу і відновляє обслуговування в момент часу, коли в накопичувачі звільниться хоча б одне місце. У силу цього закінчення обслуговування вимоги приладом може спричинити початок робіт на інших приладах. У блоці 10 імітується перегляд системи за цикл, знаходження «вільних» приладів і подача на них мульдових составів з попередніх накопичувачів. Оскільки функціонування блоку 10 може привести до «зациклення», остільки перегляд приладів завжди супроводжується контролем.

У моделі весь процес представляється як ланцюг послідовно наступаючих подій, що утворять як би «літопис» системи, що моделюється. Для того щоб відтворити роботу цієї системи, потрібно в блок вихідної інформації моделі ввести дані, що характеризують структуру цеху (число і розташування печей, механізмів, розливних площадок, мульдових составів, закони розподілу сировини, ємності накопичувачів і т.д.) і практику його роботи (характеристики металевої частини шихти, тривалість технологічних періодів, режими ведення плавок і т.д.). Чисельні значення цих даних можуть бути отримані як хронометражем, так і вивченням виробничої документації.

Математична модель мартенівського цеху у вигляді програми на ЕОМ БЕСМ-6, записаною мовою АЛГОЛ-60, дозволила імітувати роботу цеху протягом доби за 5 хвилин машинного часу.

У процесі моделювання накопичується статистична інформація про наступні параметри системи:

1) загальній кількості плавок по кожній печі за період моделювання;

2) середньої тривалості і середньому квадратичному відхиленню тривалості плавки;

3) частоті обслуговування механізмами викликів кожної печі;

4) середньому часі, протягом якого дана кількість печей очікувало механізм;

5) ступеню завантаження механізмів;

6) імовірності утворення черги з n (n =1,2,...) печей, що очікують механізм;

7) кількості і масі составів, завантажених за добу в магнітному відділенні і копровому цеху;

8) тривалості перебування составів у магнітному відділенні;

9) інтервалах часу між составами, що подаються до печей для завантаження;

10) загальному числі составів, поданих до печі для завалки;

11) довжині черг составів у різних накопичувачах.

Була пророблена значна робота із забезпечення вірогідності моделі. При проведенні першої серії експериментів на моделі ставилася мета вивчити поводження системи при варіюванні наступних параметрів і правил прийняття рішень: загального числа завалочних машин і заливальних кранів у пічному прольоті, стратегій «прикріплення» механізмів до печей, загального числа составів, що обслуговують ділянку магнітне відділення - пічний проліт, умов подачі сировини в магнітне відділення. Аналіз результатів моделювання дозволив зробити наступні виводи:

1. Видалення або додавання до діючих механізмів одного заливального крана або однієї завалочної машини практично не позначається на якості обслуговування основних агрегатів - мартенівських печей.

2. Бажано для обслуговування групи сусідніх печей мати постійно в розпорядженні окремий заливальний кран.

3. Використання будь-якого варіанта «закріплення» завалочних машин за окремими групами печей викликає збільшення затримок в обслуговуванні останніх.

4. При нормальному постачанні цеху металевою шихтою можливо зменшити число составів, що обслуговують ділянку магнітне відділення - пічний проліт.

Експерименти другої серії ставилися з метою перевірки різних варіантів вибору місця установки додаткової печі з двома ваннами. Моделювалися наступні варіанти: заміна двох крайніх печей однієї піччю з двома ваннами і кон-

сервація сусідньої з ними печі (експеримент 1), заміна двох крайніх печей однієї піччю з двома ваннами і зменшення садки сусідньої печі (експеримент 2), заміна однієї із середніх печей - однієї піччю з двома ваннами (експеримент 3). Експеримент 4 являв собою імітацію роботи цеху в існуючих умовах. Нижче приводяться результати експериментів по зміні структури цеху, у яких його продуктивність була оцінена шляхом моделювання його роботи протягом 10 діб за кожним з розглянутих варіантів.

Номер експерименту	1	2	3	4
Середньодобове виробництво стали, %	96	104	102	100

Отримане розходження в продуктивності цеху, хоча і значиме статистично, невелике внаслідок того, що моделювання проводилося без істотної зміни ресурсів сировини, якими розташовує цех у цей час.

Остання група експериментів була присвячена перевірці ефективності пропонованих алгоритмів оперативного керування.

Для перевірки ефективності алгоритму призначення составів з металевою шихтою моделювалася робота мартенівського цеху протягом 15 діб на об'єднаної шляхом динамічного стикування моделі ділянки магнітне відділення - пічний проліт. Кількість шихти, що надходила в цех при моделюванні, було таким же, як і в реальному цеху. Структура шихти варіювалася відповідно до розподілів, розрахованими на підставі статистичних даних, що характеризують роботу реального цеху. При моделюванні було встановлено, що використання пропонованого алгоритму призначення составів призводить до скорочення діапазону коливань тривалості завалок, а також до зсуву математичних очікувань середніх тривалості завалок убік менших значень. Пропонований алгоритм призначення составів за умови збереження кількості і структури лома, що надходить у цех, забезпечує в середньому скорочення тривалості завалки на малих печах на 15 хв, а на великих - на 26 хв. Якщо припустити, що це скорочення призведе до такого ж скорочення тривалості плавки, то приріст продуктивності цеху складе - 3%. Але щоб збільшити продуктивність цеху, потрібно збільшити відповідним

чином витрату сировини. У противному випадку прискорення періоду завалки призведе до виникнення простоїв. Ефективність алгоритму буде ще вище у випадку збільшення кількості лому, що надходить у цех, і поліпшення його якості.

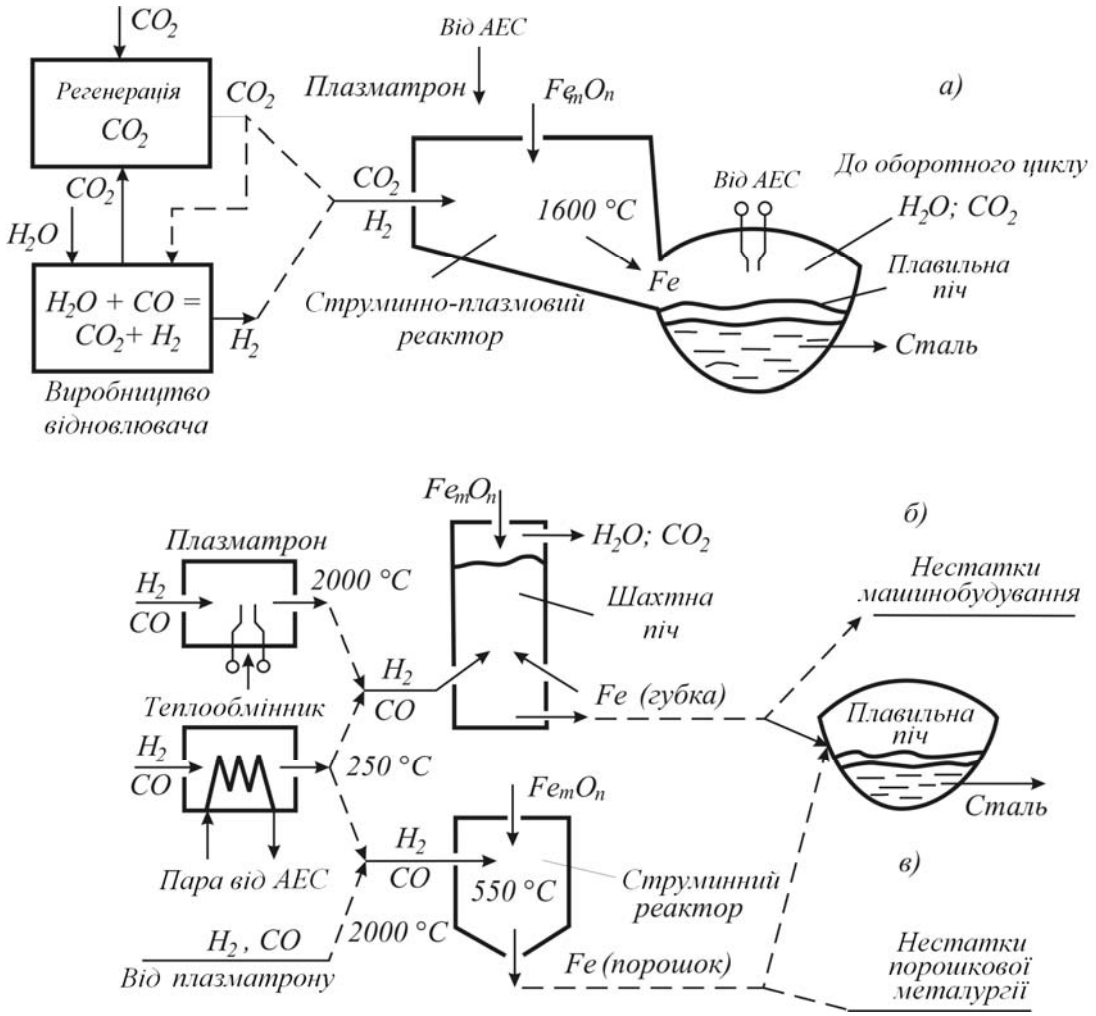
7.6 Постановка завдань створення математичних моделей використання ядерної енергії у металургії

Металургія споживає біля чверті всього викопного палива, що відноситься до непоправних ресурсів. Органічне паливо є найціннішою сировиною для хімічної промисловості, металургія ж використовує лише закладену в ньому теплову енергію (причому з досить невисоким коефіцієнтом корисної дії). Більшість же коштовних хімічних сполук практично безповоротно губиться, забруднюючи навколишнє середовище і вимагаючи створення складних і дорогих очисних споруд, а одержуваний з руди метал необхідно очищати від шкідливих домішок, що попадають у нього з палива (коксу, мазуту) [2].

Значним недоліком сучасної технології одержання заліза є багатостадійність процесу. Спочатку при добуванні заліза з руди шляхом відновлення і навуглецювання одержують напівпродукт – чавун, а на наступному переділі видаляють вуглець і шкідливі домішки (сірку, фосфор) шляхом їхнього окислювання. На обох цих переділах як відходи, що забруднюють атмосферу, викидаються оксиди вуглецю, заліза, сірчисті з'єднання, що утворяться як попутні продукти при випалюванні вуглецю. Тому що залізо в природі перебуває у вигляді оксидів Fe_mO_n, то в принципі при його добуванні варто було б одержувати і другий компонент – кисень, але таких технологічних процесів поки не існує. З появою атомної енергетики виникає думка про часткову або повну заміну коксу, наприклад шляхом введення в металургійний комплекс тепла високотемпературного ядерного реактора і використання в якості відновлювача водню, що, зокрема, може бути отриманий з води, що дозволить виключити витрату для цієї мети органічного палива.

Хоча принципово ядерний реактор може забезпечити одержання досить високих температур, властивих традиційної металургійної технології (порядку 1500…1700 °С), поки немає відповідних жароміцних матеріалів, що дозволяють вписати його безпосередньо в металургійний цикл. Знімати тепло з активної зони реактора не можна, тому що при цьому забруднюється (робиться радіоактивним) теплоносій, а існуючі металеві теплообмінники не можуть працювати при температурах вище 1000…1200 °С. Отже, застосування ядерної енергії вимагає корінної зміни технології. Для рішення цього завдання фахівцями «Тулачермет» пропонується взяти за основу реалізацію ідеї прямого (бездоменного) відновлення оксидів заліза воднем, що може виходити в промислових масштабах з води з використанням електричної (плазматроні) і тепловий (теплообмінники) енергії атомних енергетичних установок. Використання в якості відновлювача отриманого таким шляхом водню дозволяє створити екологічно чисте і практично безвідхідне виробництво, що є якісною відмінністю ядерного металургійного комплексу від традиційної технології, орієнтованої на споживання викопного палива. Пропонується три варіанти технології відновлення оксидів заліза, придатних для використання в промислових масштабах: 1) високотемпературне; 2) середньотемпературне; 3) низькотемпературне відновлення. Спрощені схеми механізму трьох перерахованих варіантів технології в складі ядерного металургійного комплексу представлені на рис. 7.12.

Високотемпературне відновлення (рис. 7.12 а) йде при температурі вище 1600 °С. У якості основного металургійного агрегату тут використовується струминно-плазмовий реактор для нагрівання відбудовного газу в сполученні із плавильною піччю. Відновлювачами можуть служити водень або його суміш із оксидом вуглецю. Струминно-плазмовий реактор дозволяє нагрівати такий газ до температури 2000…2500 °С. Оксиди заліза, що попадають у струмінь цього газу, у вигляді дрібнодробленою і збагаченої руди відновлюються, наприклад для Fe_3O_4 за реакцією $Fe_3O_4 + 4H_2 = 3Fe + 4H_2O$, і в виді дощу краплі несуться з потоком газу в плазмову плавильну піч, у якій можуть бути проведені всі операції по доведенню і легуванню.



а – високотемпературне відновлення; б – середньотемпературне відновлення; *в* – низькотемпературне відновлення

Рисунок 7.12 – Спрощена схема технології ядерного металургійного комплексу

При постановці завдання математичного опису цього процесу можна припустити, що у зв'язку з великою інтенсивністю підведення відновлювача в струминно-плазмовому реакторі і високій температурі швидкості реакцій типу наведеної вище будуть підкорятися закону діючих мас**,** а також залежати від ступеня розвитку міжфазної поверхні (ступеню дисперсності часточок рудного концентрату):

$$\frac{d[Fe]}{dt} = k_C S_{мг} [Fe_3O_4]^{n_1} \{H_2\}^{n_2},$$

де k – константа швидкості реакції, що є функцією температури;

$S_{мг}$ – площа міжфазної поверхні метал-газ;

n_1, n_2 – порядок реакції за Fe_3O_4 і H_2, що вимагає експериментального уточнення.

Поряд з описом кінетики хімічних реакцій повинні бути отримані також співвідношення, що описують перенос потоків реагуючих речовин, для чого можна використовувати закони збереження маси і кількості руху. Для складання цих рівнянь необхідно знати особливості форми і конструкції конкретного агрегату. Можна сподіватися, що в міру накопичення знань про згадані вище процесі це завдання, так само як і завдання створення досить повної математичної моделі вдасться вирішити нашим допитливим читачам. Варто підкреслити, що навіть скільки-небудь наполегливі спроби складання такої моделі дозволять краще пізнати процес і одержати його впорядковану картину.

Для розробки математичної моделі доведення і легування металу в плавильній печі як аналог можна взяти приклад математичного опису проточної ванни, а також розглянуті вище приклади опису конкретних металургійних процесів.

Повернемося тепер у постановочному порядку до другого варіанта технології ядерного металургійного комплексу.

Середньотемпературне відновлення повинне протікати при температурі 850…900 °С. У якості відновлювача також як і в попередньому варіанті може служити водень або його суміш із оксидом вуглецю. Залізо при такій температурі перебуває у твердому стані, продуктом відновлення буде губчате залізо. Більша частина газу при цій технології може бути нагріта до 250…300 °С у теплообміннику, у первинному контурі якого циркулює пара, нагріта у ядерному енергетичному реакторі, і лише приблизно одна третина газу нагрівається до 2000 °С у плазматроні. Ці два потоки відбудовного газу змішуються (рис. 7.12 б) для одержання температури 850…900 °С і подаються в шахтну піч, де відбувається відновлення оксидів заліза і утвориться залізна губка, що може або подаватися в сталеплавильну піч, або відразу використовуватися для потреб машинобудування.

Низькотемпературне відновлення (рис. 7.12 в) протікає при температурі 450…600 °С. Більша частина відбудовного газу може бути нагріта тут теплом, одержуваним у теплообміннику. Цей процес є найменш вивченим. Він протікає в кілька стадій. При температурі нижче 570 °С його стадійність описується наступними реакціями:

$$Fe_2O_3 + \frac{1}{3}H_2 \rightarrow Fe_3O_4 + \frac{1}{3}H_2O;$$

$$Fe_2O_3 + \frac{1}{3}CO \rightarrow Fe_3O_4 + \frac{1}{3}CO_2;$$

$$\frac{2}{3}Fe_3O_4 + \frac{8}{3}H_2 \rightarrow 2Fe + \frac{8}{3}H_2O;$$

$$\frac{2}{3}Fe_3O_4 + \frac{8}{3}CO \rightarrow 2Fe + \frac{8}{3}CO_2.$$

Вихідною сировиною служить тонкодисперсний порошок оксидів або хлоридів заліза, а найбільш придатним металургійним агрегатом для відновлення оксидів заліза при цьому процесі є струминний реактор або так називана вихрова камера, у якій потік газу і зваженого в ньому порошку за допомогою спеціальних равликоподібних профілів закручується з великою швидкістю. При цьому закручений у вихор газ поступово піднімається нагору, а порошок опускається вниз. Ключовими питаннями при математичному описі і проектуванні процесів у таких агрегатах є проблеми аеродинаміки, що вимагає глибоких спеціальних знань у цій області.

Зупинимося коротко ще на питанні виробництва відновлювача. У якості основного відновлювача у всіх трьох розглянутих процесах доцільно використовувати водень, що може бути отриманий двома шляхами: електролізом води або її хімічним розкладанням. Другий шлях, тобто розкладання води за реакцією $H_2O + CO = CO_2 + H_2$ з наступною регенерацією CO_2 у CO і поверненням CO у хімічний цикл, очевидно, виявиться більше економічним. Реалізація цієї реакції не викликає особливих труднощів, вона йде в присутності каталізаторів при температурі порядку 300 °С. Стадія ж регенерації CO_2 у CO вимагає рішення

ряду завдань, зв'язаних в основному із проблемою ефективного поділу суміші активних газів.

Розглянуті технологічні схеми мають важливі з погляду екології особливості: отрутний газ *CO* не викидається в атмосферу, а циркулює в замкнутому контурі; газові суміші, використовувані в технологічному процесі, не містять високомолекулярних вуглеводнів. Продуктами виробництва поряд із залізом є діоксид вуглецю і вода, які також можуть циркулювати в замкнутому контурі. Сірка, фосфор та інші шкідливі домішки можуть попадати у відновлюване залізо тільки з руди, виключається забруднення сіркою з коксу. Метал, виплавлений на первородній шихті, має досить високі фізичні і механічні характеристики.

Питання для самоконтролю

1. Комбіновані моделі.
2. Роль структури моделі.
3. Спрощена модель доменної плавки.
4. Допущення в спрощеній моделі доменної плавки.
5. Модель зневуглецювання на основі рівнянь дифузії.
6. Модель зневуглецювання на основі закону збереження речовини.
7. Подання моделі зневуглецювання як об'єкта з розподіленими параметрами.
8. Модель конвертерного процесу.
9. Моделі ядерного металургійного комплексу.
10. Високотемпературне відновлення.
11. Середньотемпературне відновлення.
12. Низькотемпературне відновлення.

ТЕСТОВІ ЗАВДАННЯ

Розділ 1

1. Сукупність взаємозалежних об'єктів називають ...

а) підсистемою
б) моделлю
в) системою
г) зв'язком

2. Об'єкти, з яких складається система, називають ...

а) підсистемами
б) елементами системи
в) зв'язками системи
г) зовнішнім середовищем

3. Через що здійснюється взаємодія, як між об'єктами системи, так і між підсистемами?

а) входи системи
б) виходи підсистеми
в) зв'язку
г) всі відповіді правильні

4. Якого порядку розрізняють зв'язку?

а) 4
б) 3
в) 2
г) 1

5. Функціонально необхідні зв'язки - це зв'язки ...

а) четвертого порядку
б) другого порядку
в) третього порядку
г) першого порядку

6. Додаткові зв'язки - це зв'язки ...

а) другого порядку
б) першого порядку
в) четвертого порядку
г) третього порядку

7. Зайві й суперечливі зв'язки - це зв'язки ...

а) четвертого порядку б) першого порядку

в) другого порядку г) третього порядку

8. Вплив зовнішнього середовища на системи проявляється через зв'язки, які називаються ...

а) входами системи б) виходами системи

в) зворотними зв'язками г) замкнутими зв'язками

9. Системи називають відкритими якщо вони ...

а) мають тільки входи б) не мають входи й виходи

в) мають тільки виходи г) мають входи й виходи

10. Системи, що змінюють свій стан у часі, називають ...

а) непостійними б) статичними

в) динамічними г) мінливими

11. Системи, які діють із метою виконання заздалегідь поставленого завдання, називають ...

а) доцільними системами б) виконавчими системами

в) керованими системами г) контролюючими системами

12. Втручання в процес функціонування системи для внесення в нього зміни називають ...

а) актом втручання б) зовнішнім впливом

в) актом контролю г) актом керування

13. Скільки розрізняють етапів процесу керування?

а) 2 б) 3

в) 5 г) 6

14. Що не є елементом керуючої системи?

а) чутливий елемент б) блок впливу

в) блок зворотного зв'язку г) контрольований параметр (стан)

15. Системи, які не є простими і відрізняються розгалуженою структурою і більшою розмаїтістю внутрішніх зв'язків, називають ...

а) дуже складними б) імовірнісними

в) статичної г) складними

16. Систему, у якій її складові частини взаємодіють точно передбаченим образом, називають ...

а) детермінованою б) динамічною

в) імовірнісною г) оптимальною

17. Характерними рисами металургійного виробництва є - ...

а) великі розміри б) складність

в) багатомірність г) всі варіанти правильні

18. Систему, прогноз станів якої можна здійснити тільки з деяким ступенем імовірності, називають ...

а) невизначеною б) детермінованою

в) непередбаченою г) імовірнісною

19. Переведення системи з даного стану в бажане з метою досягнення оптимальних значень називають ...

а) організацією системи б) управлінням системи

в) плануванням системи г) актом планування

20. Якщо блок керування не є складовою частиною тієї системи, якою він управляє, то система називається ...

а) керуючою
б) розімкнутою
в) замкнутою
г) ізольованою

21. Обов'язковим елементом замкнутої системи керування є ...

а) блок керування
б) контрольований параметр
в) зворотний зв'язок
г) датчик

22. Перший етап «технології» керування - це ...

а) підготовка об'єкта для керування
б) обробка інформації для виробітку рішень
в) збір і підготовка інформації про стан об'єкта
г) пошук об'єкта керування

23. Третій етап «технології» керування - це ...

а) видача виконавцям командної інформації
б) керування виконавцями
в) виробіток необхідних рішень
г) підготовка виконавців

24. Другий етап «технології» керування - це ...

а) аналіз вступник інформації
б) виробіток потрібних рішень
в) збір і підготовка інформації
г) переробка інформації з метою знаходження потрібних рішень

25. Зворотним зв'язком називають ...

а) зв'язок між виходом і входом системи
б) зв'язок між виходом системи й зовнішнім середовищем
в) зв'язок між входом системи й зовнішнім середовищем
г) зв'язок між входом і виходом системи й зовнішнім середовищем

26. Через зв'язки системи може передаватися -

а) матеріальний потік б) енергія

в) інформація г) всі варіанти правильні

27. Всі правила і принципи, на основі яких відбувається акт керування, називають ...

а) плануванням керування б) організацією керування

в) стратегією керування г) стратегією організацією

28. Прикладом простої детермінованої системи служить ...

а) чоловік б) арифмометр

в) соціальна організація г) ріка

29. Прикладом складної детермінованої системи служить ...

а) ЕОМ б) телефонна станція

в) система зберігання запасів г) металургійний комбінат

30. Прикладом дуже складної імовірнісної системи служить ...

а) система протиповітряної оборони

б) система регулювання теплового режиму печі

в) система статистичного контролю якості продукції

г) металургійний комбінат

Розділ 2

1. … є відбиттям істотних сторін реальної або створюваної системи, що у зручній формі представляє інформацію про цю систему.

а) зв'язок б) модель

в) організація г) керування

2. Моделювання - це...

а) відтворення характеристик об'єкта на іншому матеріальному об'єкті

б) відтворення характеристик об'єкта на іншому уявному об'єкті

в) відтворення характеристик об'єкта на іншому матеріальному або уявному об'єкті

г) всі варіанти не правильні

3. На що опирається вчений при побудові фізичної моделі об'єкта?

а) теорію б) експеримент

в) досвід г) спостереження

4. Що є словесною або математичною моделлю дійсності?

а) теорія б) експеримент

в) досвід г) спостереження

5. Якими можуть бути моделі?

а) концептуальними б) хімічними

в) фізичними г) математичними

6. Для яких цілей будуються моделі?

а) практичних б) навчальних

в) теоретичних г) наукових

7. Матеріальні моделі ділять на ...

а) образотворчі моделі б) графіки

в) таблиці г) моделі-аналоги

8. Опис системи на якій-небудь формальній мові, що дозволяє судити про деякі риси поводження цієї системи називається ...

а) концептуальною моделлю б) математичною моделлю

в) фізичною моделлю г) статичною моделлю

9. Прикладом математичною моделлю служать -

а) графік б) карта

в) граф г) скульптура

10. Якими можуть бути як матеріальні, так і математичні моделі?

а) статичними й динамічними б) постійними

в) імітації г) критичними й стійкими

11. Виберіть приклад детермінованої моделі.

а) модель черг транспорту на дорогах

б) застосування методу Монте-Карло при обчисленні інтеграла

в) закон падіння тіла в порожнечі

г) система ППО

12. По відображенню функціонування системи в часі моделі діляться на ...

а) оптимізаційні б) імітаційні

в) періодичні г) статичні і динамічні

13. У процесі моделювання беруть участь ...

а) суб'єкт і об'єкт б) суб'єкт і модель

в) суб'єкт, об'єкт, модель г) об'єкт і модель

14. Якого етапу процесу моделювання не існує?

а) підготовка моделі б) постановка завдання

в) дослідження моделі г) вибір і побудова моделі

15. Який прийом дуже важливий на першому етапі процесу моделювання?

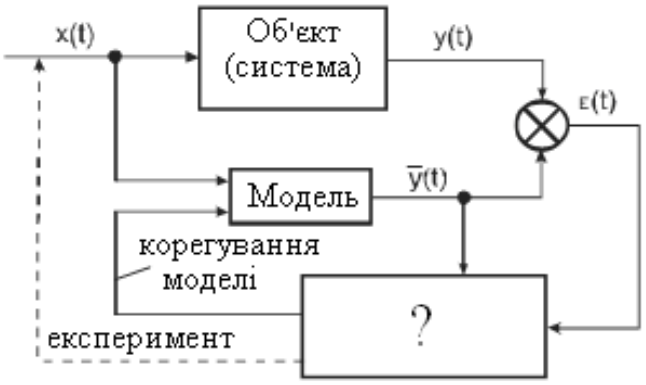
а) абстрагування б) досвід

в) інтуїція г) знання

16. На якому етапі процесу моделювання можуть бути знайдені оптимальні сполучення параметрів об'єкта?

а) першому
б) другому
в) третьому
г) четвертому

17. Що повинне бути написане в прямокутнику на малюнку замість знака питання?



а) аналізатор
б) порівняння
в) погрішність
г) суб'єкт (дослідник)

18. Доки буде здійснюватися цикл «суб'єкт - модель - об'єкт - суб'єкт»?

а) нескінченне число раз
б) задане дослідником кількість разів
в) поки отримана модель не буде перебуває в задовільній відповідності з експериментальними даними
г) поки експериментальні дані не задовольнять вимоги, задані дослідником (суб'єктом)

19. Який принцип приносить більшу користь при побудові моделі (другий етап процесу моделювання)?

а) принцип аналогій
б) принцип суперпозицій
в) принцип адекватності
г) принцип рівності

20. Які два найважливіших додаткових компоненти відрізняють модель оптимізації від моделі імітації?

а) багатомірна функція
б) регресійні умови
в) цільова функція
г) додаткові умови

Розділ 3

1. Взаємоодназначна відповідність між двома множинами яких-небудь елементів або об'єктів - це ...

а) ізоморфізм
б) поліморфізм
в) біморфізм
г) гомоморфізм

2. Повний ізоморфізм може бути тільки між ...

а) географічною картою і її фотографією
б) географічною картою і її аналітичним вираженням
в) геометричною фігурою і її фотографією
г) геометричною фігурою і її аналітичним вираженням

3. Гомоморфізм - це коли ...

а) один елемент однієї безлічі відповідає багатьом елементам другої безлічі
б) один елемент однієї безлічі відповідає одному елементу другої безлічі
в) один елемент однієї безлічі відповідає всім елементам другої безлічі
г) один елемент однієї безлічі не відповідає жодному елементу другої безлічі

4. Встановлення подібності в деяких сторонах, якостях і відносинах між нетотожними об'єктами називається ...

а) ізоморфізмом
б) рівністю
в) аналогією
г) гомоморфізмом

5. Подоба між моделлю й об'єктом може полягати в подібності ...

а) поглядів дослідників
б) фізичних характеристик
в) виконуваних функцій
г) методів дослідження

6. Змінні, які характеризують зміни стану процесу розвитку системи в часі або просторі, називаються ...

а) параметрами системи
б) параметрами розвитку
в) параметрами стану
г) параметрами процесу

7. Параметри, що характеризують елементи, з яких складається система, називають ...

а) параметрами системи
б) параметрами процесу
в) параметрами розвитку
г) параметрами стану

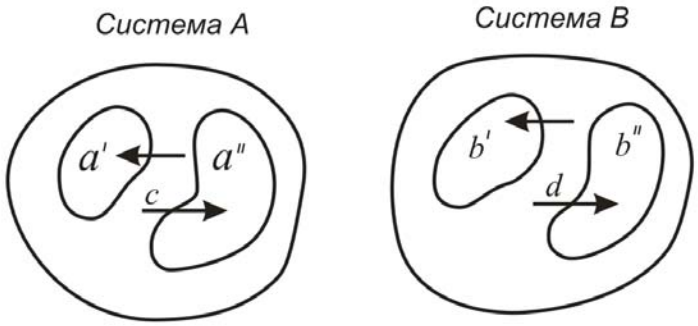
8. Явища, подібні в тім або іншому змісті, мають деякі однакові ...

а) аналогічні параметри
б) критерії процесу
в) параметричні критерії
г) критерії подоби

9. Друга теорема подоби: будь-яке повне рівняння фізичного процесу може бути представлено залежністю між ...

а) критеріями подоби
б) параметрами системи
в) подібними системами
г) параметрами процесу

9. У якому випадку складні системи *A* и *B* подібні?



а) a′ подібна a″, b′ подібна b″, c подібна d
б) a′ подібна c, b′ подібна d, a′ подібно b′
в) a′ подібна b″, b′ подібна a″, c подібна d
г) a′ подібна b′, a″ подібна b″, c подібна d

Розділ 4

1. Які дві групи завдань, важливих для металургії, можна вирішити із застосуванням законів термодинаміки?

а) складання енергетичних балансів б) визначення кількості тепла

в) швидкість реакцій г) визначення рівноваги реакцій

2. Більшість металургійних систем не є ...

а) динамічними б) відкритими

в) ізольованими г) безперервними

3. Ідеальним газом можна вважати газ при наступних умовах:

а) високому тиску і низкою температурі

б) низькому тиску і високій температурі

в) високому тиску і високій температурі

г) низькому тиску і низкою температурі

4. Внутрішня енергія ідеального газу не залежить від ...

а) тиску б) температури

в) об'єму г) температури, тиску, об'єму

5. Який параметр не враховують при складанні теплових явищ?

а) кінетичну енергію б) внутрішню енергію

в) роботу г) кількість тепла

6. Якщо q – кількість тепла, U – внутрішня енергія, A – чинена робота, то перший закон термодинаміки прийме вид:

а) $U = q + A$ б) $q = U + A$

в) $q = U - A$ г) $A = U + q$

7. При ізотермічному розширенні ідеального газу тепло, що підводиться до системи, перетвориться в ...

а) внутрішню енергію б) ентальпію

в) ентрапію г) роботу

8. При ізохоричному процесі тепло, що підводиться до системи, перетвориться в ...

а) ентрапію б) ентальпію

в) внутрішню енергію г) роботу

9. При ізобаричному процесі тепло, що підводиться до системи, перетвориться в ...

а) внутрішню енергію б) ентальпію

в) роботу г) ентрапію

10. Вираження для визначення ентальпії - ...

а) $H = U + p \cdot V$ б) $H = U - p$

в) $H = p - V$ г) $H = p + V$

11. Математичне формулювання закону Геса -

а) $\Delta H^0_{\text{реакции}} = \sum_{i=1}^{n} b_i \cdot \Delta H^0_{i,\text{исх}} - \sum_{j=1}^{m} a_j \cdot \Delta H^0_{j,\text{кон}}$

б) $\Delta H^0_{\text{реакции}} = \left(\sum_{i=1}^{n} b_i \cdot \Delta H^0_{i,\text{кон}} - \sum_{j=1}^{m} a_j \cdot \Delta H^0_{j,\text{исх}} \right) \cdot T$

в) $\Delta H^0_{\text{реакции}} = \sum_{i=1}^{n} b_i \cdot \Delta H^0_{i,\text{кон}} - \sum_{j=1}^{m} a_j \cdot \Delta H^0_{j,\text{исх}}$

г) $\Delta H^0_{\text{реакции}} = \left(\sum_{i=1}^{n} b_i \cdot \Delta H^0_{i,\text{исх}} - \sum_{j=1}^{m} a_j \cdot \Delta H^0_{j,\text{кон}} \right) \cdot T$

12. Інтегральна форма рівняння Кірхгофа -

а) $\Delta H_{T2} = \Delta H_{T1} - \int_{T1}^{T2} \Delta c_p dT$

б) $\Delta H_{T2} = \Delta H_{T1} + \int_{T1}^{T2} \Delta c_p dV$

в) $\Delta H_{V2} = \Delta H_{V1} + \int_{V1}^{V2} \Delta c_p dT$

г) $\Delta H_{T2} = \Delta H_{T1} + \int_{T1}^{T2} \Delta c_p dT$

13. Ізольована система перебуває в рівновазі, якщо ...

а) $d = 0$

б) $d < 0$

в) $d > 0$

г) $d \neq 0$

14. Вираження $H - T \cdot S = \ldots$ служить для визначення

а) внутрішньої енергії

б) енергії Гібса

в) потенційної енергії

г) внутрішньої ентальпії

15. Для екзотермічних реакцій ($\Delta H < 0$) величина константи рівноваги K_p із ростом температури …

а) збільшується

б) не змінюється

в) зменшується

г) залишається постійної

16. Для ендотермічних реакцій ($\Delta H > 0$) величина константи рівноваги K_p із ростом температури …

а) зменшується

б) залишається постійної

в) не змінюється

г) збільшується

17. По ознаці молекулярності хімічні реакції діляться на ...

а) мономолекулярні

б) полімолекулярні

в) бімолекулярні

г) тримолекулярні

18. Хімічні реакції розрізняються за ...

а) молекулярностю

б) молекулярностю і порядком реакції

в) порядком і швидкостю реакції

г) порядком реакції

19. Виберіть схему реакції першого порядку.

а) $A \rightarrow$ продукт реакції

б) $A + B \rightarrow$ продукт реакції

в) вихідні речовини $\rightarrow A$

г) $A + B \rightarrow З + Д$

20. Виберіть схему реакції другого порядку.

а) $A + B \rightarrow З + Д$

б) $A \rightarrow$ продукт реакції

в) $A + B \rightarrow$ продукт реакції

г) вихідні речовини $\rightarrow A$

21. Формула для визначення концентрації для реакцій першого порядку.

а) $C_t = (1 - C_0) \cdot (-k \cdot t)$

б) $C_t = C_0 \cdot \exp(-k \cdot t)$

в) $C_t = -C_0 \cdot \exp(k \cdot t)$

г) $C_t = C_0 / [1 - \exp(-k \cdot t)]$

22. Формула для визначення концентрації для реакцій другого порядку

а) $\frac{1 - C_0}{C_t} = -k \cdot t$

б) $\frac{1}{C_0 \cdot C_t} = -k \cdot t$

в) $\frac{1}{C_0} + \frac{1 - C_0}{C_t} = k \cdot t$

г) $\frac{1}{C_0} - \frac{1}{C_t} = -k \cdot t$

23. Якщо зміна гідродинамічних і аеродинамічних умов протікання реакції не впливає на її швидкість, то реакція перебуває в ...

а) дифузійної області

б) кінетичної області

в) перехідної області

г) застійної області

24. Якщо зміна гідродинамічних і аеродинамічних умов протікання реакції істотно впливає на її швидкість, то реакція перебуває в ...

а) застійної області

б) перехідної області

в) кінетичної області

г) дифузійної області

25. Дифузія - це ...

а) процес мимовільного переміщення речовини, спрямована на вирівнювання концентрації в обсязі речовини

б) процес мимовільного переміщення речовини, спрямована на вирівнювання концентрації на границі роздягнула

в) процес примусового переміщення речовини, спрямована на вирівнювання концентрації на границі роздягнула

г) процес примусового переміщення речовини, спрямована на вирівнювання концентрації в обсязі речовини

26. Перший закон Фіка описує ...

а) нестаціонарну дифузію

б) конвекційну дифузію

в) змішану дифузію

г) стаціонарну дифузію

27. Закон Фур'є для опису передачі тепла в нерухомому середовищі -

а) $q_T = \alpha \cdot \Delta T$

б) $q_T = -\lambda \cdot \mathrm{grad}T + c_p \rho \upsilon T$

в) $q_T = -\lambda \cdot \mathrm{grad}T$

г) $q_И = \varepsilon C_0 \left(T_1^4 - T_2^4\right)$

28. Передача тепла випромінювання (закон Стефана-Больцмана) -

а) $q_0 = \left(\alpha_к + \alpha_л\right)\left(T_1 - T_2\right)$

б) $q_T = -\lambda \cdot \mathrm{grad}T$

в) $q_0 = \alpha_0 \left(T_1 - T_2\right)$

г) $q_И = \varepsilon C_0 \left(T_1^4 - T_2^4\right)$

29. Закон збереження маси виражається рівнянням ...

а) $\frac{dm}{dt} > 0$

б) $\frac{dm}{dt} = 0$

в) $\frac{dm}{dt} < 0$

г) $\frac{dm}{dt} \neq 0$

30. Закон збереження імпульсу - сума імпульсів всіх тіл замкнутої системи ...

а) змінюється згодом

б) залежить від маси тіл

в) залишається постійної

г) залежить від швидкості руху системи

Розділ 5

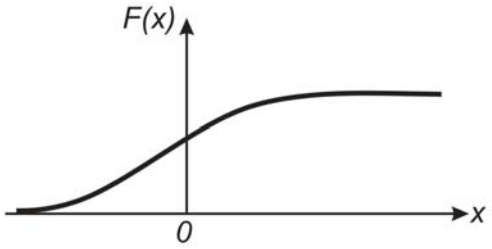
1. Величину, що у результаті досвіду може прийняти невідоме значення, називають

а) невизначеною
б) закономірною
в) випадковою
г) розрахунковою

2. Виберіть дві форми, що виражають закон розподілу випадкової величини.

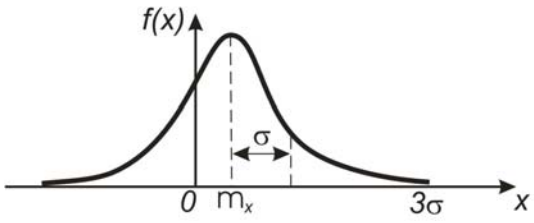
а) функція розподілу випадкової величини
б) щільність функції випадкової величини
в) функція щільності випадкової величини
г) щільність розподілу випадкової величини

3. Крива якої функції наведена на малюнку?



а) щільності функції
б) функції розподілу
в) щільності розподілу
г) функції щільності

4. Крива якої функції наведена на малюнку?



а) функції щільності
б) щільності функції
в) функції розподілу
г) щільності розподілу

5. При збільшенні числа досвідів середнє арифметичне сходиться к...

а) математичному очікуванню б) дисперсії

в) середньоквадратичному відхиленню г) кореляції

6. Розсіювання випадкової величини біля її математичного очікування визначає ...

а) закон розподілу б) кореляція

в) дисперсія г) коефіцієнт кореляції

7. Завдання регресійного аналізу зводиться до знаходження ...

а) коефіцієнтів кореляції б) коефіцієнтів очікування

в) коефіцієнтів дисперсії г) коефіцієнтів регресії

8. Який метод широко застосовується в регресійному аналізі при знаходженні шуканих коефіцієнтів?

а) метод Монте-Карло б) метод найменших квадратів

в) метод апроксимації г) метод суперпозицій

9. При повному факторному експерименті кількість проведених досвідів визначається по рівнянню $N = 2^k$, де k – це …

а) кількість коефіцієнтів регресії б) число рівнів варіювання

в) кількість рівнянь регресії г) число факторів, що варіюють

10. Активний багатофакторний експеримент дозволяє ...

а) скоротити кількість коефіцієнтів регресії

б) розрахувати коефіцієнти регресії

в) істотно скоротити число досвідів

г) оптимізувати умови проведення досвідів

Розділ 6

1. Висока швидкодія аналогових обчислювальних машин обумовлене тим, що ...

а) всі блоки працюють паралельно б) більшим обсягом оперативної пам'яті

в) високою частотою імпульсів г) всі блоки працюють послідовно

2. Достоїнством цифрових обчислювальних машин крім виконання арифметичних операцій і можливості зберігання великої кількості інформації є ...

а) швидкість виконання операцій б) мобільність пристроїв

в) наявність програмного забезпечення г) виконання логічних операцій

3. Застосування аналогових обчислювальних машин доцільно для ...

а) статистичної обробки результатів б) моделювання динамічних об'єктів

в) моделювання статичних процесів г) параметричної ідентифікації

4. На скільки основних груп можна розбити завдання, які ефективно вирішуються гібридними обчислювальними комплексами?

а) 3 б) 4

в) 5 г) 2

5. Виберіть два методи, які ефективно застосовуються для рішення рівнянь математичної фізики.

а) метод різницевих елементів б) метод кінцевих сум

в) метод кінцевих різниць г) метод кінцевих елементів

6. Основний недолік методу МКР - це ...

а) погана апроксимація границь складної форми

б) низька точність розрахунків

в) можливість рішення багатомірного завдання шляхом послідовного рішення одномірних завдань

г) необхідність завдання граничних умов

7. На відміну від методу кінцевих різниць метод кінцевих елементів вимагає ...

а) завдання початкових умов б) більших ресурсів пам'яті

в) завдання граничних умов г) більше часу для рішення

8. У методі МКЕ розглянута область ...

а) заміняється сіткою б) розбивається на граничні умови

в) розбивається на кінцеві елементи г) заміняється аналітичним рівнянням

9. У яких обчислювальних машинах погрішність рішення в першу чергу визначається точністю виготовлення її елементів?

а) цифрових б) аналогових

в) гібридних г) у всіх

10. У яких гібридних обчислювальних комплексах ЦОМ використається як додатковий зовнішній пристрій до АОМ?

а) цифро-цифро-орієнтовані гібридні обчислювальні комплекси

б) імітаційні гібридні обчислювальні комплекси

в) збалансовані гібридні обчислювальні комплекси

г) аналого-аналого-орієнтовані гібридні обчислювальні комплекси

ЗАВДАННЯ ДО САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ

Студентові для самостійної роботи з дисципліни «Моделювання металургійних процесів в металургії» необхідно вирішити наступні завдання:

1) моделювання матеріальних потоків;
2) розрахунок складу шихти для виплавки заданого сплаву;
3) регресивний аналіз;
4) моделювання розливання металу.

Виконання студентом перерахованих завдань дозволить йому оволодіти необхідним переліком знань та умінь, передбачених даною дисципліною, а також здобуття відповідних навичок. Запропоновані завдання охоплюють і кольорову, і чорну металургію.

Для виконання кожного з практичного завдання студент повинен знати: метод і зміст завдання, порядок його виконання; основні теоретичні положення з відповідної теми та їх застосування до розв'язування поставленого завдання; алгоритм розв'язування. При виконанні завдань студент повинен вміти користуватися будь-якою мовою програмування (Pascal, Basic, C++ та ін.) або математичним пакетом (MathLab, MathCad), вміти будувати блок-схеми і алгоритм процесу, перекладати алгоритм рішення на обрану мову програмування, вміти по результатам розрахунків складати звіт з виконання усіх вимог до оформлення.

Завдання 1. Моделювання матеріальних потоків чотирьох схем розгалужених процесів отримання глинозему [17, 18]:

1 схема – виробництво за способом Байера;

2 схема – виробництво глинозему з бокситів способом спікання;

3 схема – виробництво глинозему за способом Байер-спікання, паралельний варіант;

4 схема – виробництво глинозему за способом Байер-спікання, послідовний варіант.

Для визначення матеріальних коефіцієнтів необхідно розглянути інтегра-

льний матеріальний баланс на кожній стадії. Початкові значення вектора входів вибираються з аналізу схеми процесів виробництва глинозему для одиничної продуктивності. Продуктивність процесу для індивідуальних завдань вказана в табл.1.

Таблиця 1 – Вихідні дані до індивідуальних завдань

Номер варіанта	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
Продуктивність, т	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55	60	65	70	75	80

Приклад вирішення завдання наведено у розділі 2, стор. 28

Завдання 2. Розрахунок складу шихти для виплавки заданого сплаву [19]. Варіант індивідуального завдання, компоненти шихти і марки сплавів наведені у табл. 2, 3 і 4, відповідно.

Таблиця 2 – Вихідні дані до індивідуальних завдань

Варіант	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
Марка сплаву	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15

Пояснення до виконання завдання. Хімічний склад сплаву, що виплавляється, заданий векторами виходу $Y\{y_1, y_2, y_3, \ldots, y_M\}$. Для отримання цього сплаву використовується N компонентів шихтових матеріалів, для яких відомий хімічний склад. Якщо відносна кількість компоненту шихти з номером i узяти x_i, тоді хімічний склад сплаву можна визначити:

$$y_i = \sum_{i=1}^{N} B_{ij} \cdot x_i, \qquad (2.1)$$

де y_i - відносний вміст в сплаві хімічного елементу з номером j;

X_i - відносний вміст в шихті компоненту з номером i;

B_{ij} - відносний вміст в компоненті шихти з номером і хімічного елементу з номером j.

У (2.1) *i* змінюється від 1 до *N* (кількість компонентів в шихті), а *j* - від 1 до *M* (кількість хімічних елементів в сплаві).

На значення вектора входу (x) накладається обмеження у вигляді

$$\sum_{i=1}^{N} x_i = 1. \qquad (2.2)$$

В процесі плавки шихти можлива зміна її хімічного складу за рахунок чаду, тому величину в (2.1) необхідно обчислювати з урахуванням поправки

$$y_i^{ш} = \frac{y_i}{1 - z_i}, \qquad (2.3)$$

де z_i - величина чаду і-того хімічного елементу.

Основним завданням при розрахунку шихти є визначення вектора, тобто ввизначення відносного вмісту в шихті кожного компоненту з тим, щоб одержати сплав необхідного складу *y* з урахуванням чаду *z*.

Для визначення необхідно вирішити (2.1) з обліком (2.2) і (2.3). Модель (2.1) є системою рівнянь, алгебри, для *N* невідомих, що складається з *M* рівнянь ($M \geq N$).

Рішення таких систем рівнянь здійснюється наближеними методами. Для цього необхідно (2.1) привести до стандартного вигляду, при якому число рівнянь рівне числу невідомих. В цьому випадку (2.1) перетвориться до вигляду

$$y_i = \sum_{i=1}^{N} A_{ij} \cdot x_i, \qquad (2.4)$$

де $y_i = \sum_{i=1}^{M} B_{ij} \cdot B_j$, $A_{ij} = \sum_{\alpha=1}^{M} B_{i\alpha} \cdot B_{j\alpha}$.

Рішення системи (2.4), що містить *N* невідомих x_i (i = 1, N) и M, може здійснюватися будь-яким методом (методом Гауса, методом ітерацій і т.п.).

Таблиця 3 – Компоненти шихти

Компоненти шихти	Mg	Si	Mn	Zn	Fe	Cu	Ti	Al	Домішки	Всього
1. Лом 1	0,4	5,0	0,1	0,5	0,5	2,0	0	90,5	1,0	100
2. Лом 2	0,8	0,7	0,2	0,3	0,7	4,8	0,7	91,4	0,4	100
3. Лом 3	1,8	0,7	0,1	0,3	0,7	4,9	0	92,0	0,5	100
4. Лом 4	0,6	13,0	0,1	0,5	1,5	1,5	0,15	82,0	0,6	100
5. Лом 5	0,8	8,0	0,2	0,6	1,6	6,0	0	82,5	0,3	100
6 Лом 6	6,8	0,8	0,2	0,2	0,5	0,2	0	91,1	0,2	100
Угар	0,04	0,02	0,01	0,05	0,01	0,01	0,01	0,02	0,01	0,18

Таблиця 4 – Марки сплавів для індивідуальних завдань

№ з/п	Mg	Si	Mn	Zn	Fe	Cu	Ti	Al	Домішки	Разом	Марка сплаву
1	0,40	5,00	0,10	2,00	0,50	0,50	0	90,50	1,00	100	АК5М
2	0,50	6,00	0,60	0,40	1,00	3,20	0	87,00	1,30	100	АК5М2
3	0,20	7,00	0,20	1,00	0,60	2,50	0,15	87,90	0,45	100	АК5М3
4	0,30	7,00	0,60	0,50	1,00	1,50	0	85,20	1,41	100	АК7У
5	0,35	7,00	0,60	0,50	1,00	1,50	0	85,15	3,60	100	АК7П
6	0,40	5,00	0,40	0,40	0,80	7,00	0	85,50	0,50	100	АК-4
7	1,05	12,0	0,20	0,20	0,70	1,15	0,01	83,50	1,20	100	АК12ММН
8	0,30	7,00	3,50	0,50	0,80	1,00	0	84,20	2,40	100	АК-9
9	3,50	5,50	0,40	0,40	0,80	7,00	0	81,90	0,50	100	АК6М7
10	0,40	7,25	0,40	1,00	0,80	1,50	0,20	87,70	0,75	100	АК7М
11	0,50	4,00	0,40	2,00	1,10	4,25	0,10	88,15	0,10	100	АК4МУ
12	0,50	9,25	0,35	0	0,30	1,75	0,10	87,30	0,80	100	АК9М2
13	0,03	4,55	0,55	0,01	0,01	2,30	0	82,47	2,90	100	АК4М2Ц6
14	0,40	7,00	0,40	0,50	1,00	2,20	0	86,90	1,60	100	АК7М2
15	0,40	7,00	0,40	0,30	1,00	2,25	0	88,30	0,35	100	АК7М2П

Завдання 3. Регресійний аналіз [19]. Побудувати регресійну модель залежності твердості робочого слою у крупних валків прокатних станів із легованого чавуна з кулястим графітом від наступних факторів: діаметр валка (X1), вміст вуглецю (X2), вміст кремнію (X3), вміст марганцю (X4), вміст нікелю (X5) (табл. 5). Модель побудувати у вигляді наступного рівняння:

$$Y = b1 \cdot X1 + b2 \cdot X2 + b3 \cdot X3 + b4 \cdot X4 + b5 \cdot X5 + b6 \cdot X6.$$

Приклад вирішення завдання наведено у розділі 5, стор. 129.

Таблиця 5 – Вихідні дані до розрахунку

№ з/п	Діаметр, см (X1)	C, % (X2)	Si, % (X3)	Mn, % (X4)	Ni, % (X5)	Y, од. Шору
1	45	3,6	0,84	0,61	3,68	76
2	45	3,57	1,10	0,55	3,70	77
3	45	3,75	0,85	0,60	3,44	75
4	40	3,64	0,80	0,62	3,48	79
5	40	3,75	0,99	0,58	3,15	68
6	40	3,15	1,28	0,65	3,75	81
7	40	3,95	0,86	0,71	3,43	79
8	40	3,65	0,97	0,61	3,54	76
9	40	3,91	1,12	0,75	3,54	78
10	40	3,75	0,98	0,69	3,90	81
11	40	3,43	0,89	0,67	3,87	68
12	40	3,89	1,23	0,64	3,36	83
13	40	3,69	1,20	0,84	3,94	77
14	45	3,50	1,15	0,79	3,86	78
15	45	3,33	0,75	0,47	3,90	82
16	45	3,79	0,76	0,62	3,60	81
17	45	3,78	0,67	0,45	3,26	68
18	45	3,35	0,56	0,42	3,13	66
19	45	3,98	1,32	0,67	3,87	82
20	50	3,12	1,28	0,32	3,98	79
21	50	3,70	1,10	0,79	3,56	73
22	50	3,67	1,05	0,78	3,67	83
23	50	3,98	1,34	0,15	3,15	76
24	55	3,46	0,83	0,35	3,47	76
25	55	3,56	1,12	0,54	3,56	78
26	55	3,01	0,13	0,78	3,98	83
27	55	3,20	0,98	0,40	3,18	68
28	60	3,56	0,65	0,65	3,43	78
29	60	3,78	0,73	0,54	3,34	79
30	60	3,42	0,81	0,63	3,51	84

Завдання 4. Дана виробнича ділянка, що складається з печей для плавки, кранів, розливних канав з достатньою кількістю кристалізаторів і з достатньою кількістю вагонеток для вивозу злитків [19]. Відомо час випуску металу з печі, час розливання металу, час охолоджування і кристалізації злитка, час вантаження злитка і час вивозу злитків у вагонетках (табл. 6).

Таблиця 6 – Індивідуальні завдання до моделювання розливання металу

№ з/п	Кількість печей, шт.	Кількість кранів, шт.	Кількість розливних канав, шт.	Час випуску металу з печі, год.	Час розливання металу, год.	Час охолоджування і кристалізації злитка, год.	Час вантаження злитка, год.	Час вивозу злитків, год.
1	2	3	3	0,5	1,0	6	2	0,1
2	3	1	4	0,4	1,1	5	4	0,2
3	4	2	5	0,1	1,5	4	2	0,3
4	5	1	2	0,3	0,8	3	4	0,4
5	1	2	1	0,2	0,9	7	2	0,5
6	6	3	5	0,4	1,0	8	4	0,4
7	7	3	4	0,6	1,4	9	2	0,3
8	8	2	3	0,7	1,6	11	4	0,2
9	9	1	2	0,8	1,3	10	2	0,1
10	10	1	1	0,9	1,2	12	4	0,2
11	2	1	1	0,5	1,7	6	2	0,4
12	4	2	2	0,4	1,5	5	4	0,5
13	6	2	3	0,9	1,6	4	2	0,1
14	8	2	4	0,8	1,8	11	4	0,3
15	9	3	5	0,3	0,9	10	2	0,5
16	7	3	5	0,7	0,7	8	1	0,3
17	5	2	5	0,2	1,5	7	3	0,2
18	3	1	4	0,1	1,0	9	1	0,1
19	1	2	4	0,6	0,1	3	3	0,4
20	1	3	4	0,4	1,4	5	1	0,1
21	10	3	3	0,5	1,9	4	3	0,2
22	9	2	3	0,8	1,3	6	1	0,3
23	8	1	2	0,7	0,9	8	3	0,5
24	7	2	1	0,8	1,1	11	1	0,4
25	5	2	2	0,9	1,0	10	3	0,3
26	6	3	2	0,2	1,4	12	1	0,2
27	4	3	1	0,4	0,8	10	3	0,1
28	3	3	3	0,6	0,7	6	1	0,5
29	1	2	3	0,3	1,1	8	3	0,4
30	2	2	4	0,1	1,5	7	1	0,6

Пояснення до виконання завдання. Закон розподілу тривалості плавки в печі – рівномірний на інтервалі від T_1 до T_2:

$$f(T_{1i}) = \begin{cases} \dfrac{1}{T_2 - T_1}, & T_{1i} \in [T_1, T_2] \\ 0, & T_{1i} < T_1, \\ & T_{1i} > T_2 \end{cases}.$$

Закон розподілу часу звільнення крана - експонентний:

$$f(T_{2i}) = \begin{cases} \lambda_2 e^{-\lambda_2 T}, & T_{2i} \geq 0 \\ 0, & T_{2i} < 0 \end{cases},$$

де λ_2 – параметр розподілу, $\lambda_2 = 0{,}3$.

Закон розподілу часу звільнення канави, що розливає, - експонентний

$$f(T_{3i}) = \begin{cases} \lambda_3 e^{-\lambda_3 T}, & T_{3i} \geq 0 \\ 0, & T_{3i} < 0 \end{cases},$$

де λ_3 – параметр розподілу, $\lambda_3 = 0{,}1$.

Час випуску металу з печі, час розливання металу, час охолодження ы кристалізації злитка, час навантажування злитка, час вивозу злитків у вагонетках, кількість печей, кількість кранів і кількість канав, що розливає, - згідно з завданням.

Закон розподілу виражається наступною формулою:

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x_i} f(x)\,dx = z$$

де z - має рівномірний розподіл на відрізку [1;0].

Випадкова величина x_i визначається з рішення рівняння для випадкового

числа z, що вибирається генератором випадкових чисел. Для випадкової величини з рівномірним розподілом на відрізку $[T_1; T_2]$ використовуються формули:

$$\int_{-\infty}^{T_i} \frac{1}{T_2 - T_1} dT = \frac{T_i}{T_2 - T_1} = z,$$

$$T_{1i} = z \cdot (T_2 - T_1).$$

Для випадкової величини з експонентним розподілом застосовуються наступні співвідношення:

$$\int_{-\infty}^{T_i} \lambda e^{-\lambda T} dT = 1 - e^{-\lambda T} = z,$$

$$T_{2i} = -\frac{1}{\lambda_2} \ln(1 - z) = -\frac{1}{\lambda_2} \ln z,$$

$$T_{3i} = -\frac{1}{\lambda_3} \ln(1 - z) = -\frac{1}{\lambda_3} \ln z$$

Рішення поставленого завдання реалізується методом статичних випробувань. У цьому методі розігруються всі випадкові величини, задаються дискретні значення і проводиться перший експеримент. Потім знову розігруються всі випадкові величини, і проводиться другий експеримент. Такий цикл повторюється доти, поки не одержимо результати, що задовольняють необхідної точності.

ПРЕДМЕТНИЙ ПОКАЖЧИК

A

ANSYS, 148

C

COMSOL Multiphysics, 148

F

FlowVision, 149

S

SolidWorks, 148

А

Акт керування, 8
Аналогія, 41
АОМ, 140

В

Випадкова величина, 113
Виходи системи, 7
Відновлення
  високотемпературне, 201
  низькотемпературне, 203
  середньотемпературне, 203
Вільна енергія, 67
Властивості металургійного виробництва
  диференціяція, 20
  інтеграція, 20
  симетрія і асиметрія, 20
  цілістність, 20
Входи системи, 7

Г

Гетерогенні реакції, 73
Гомогенні реакції, 73
Гомоморфізм, 41

Д

Дисперсія, 115
Дифузія, 86
Другий закон термодинаміки, 62

Е

Експеримент
  багатофакторний, 122
  однофакторний, 122
Елементи, 6
Енергія Гібса, 67

З

Закон Геса, 59
Закон збереження імпульсу, 94
Закон збереження маси, 93
Закон необхідної розмаїтості, 12
Закон розподілу, 113
Закон Стефана-Больцмана, 92
Закрита система, 7
Зворотний зв'язок, 7
  негативний, 11
  позитивний, 11
Зв'язки
  другого порядку, 6
  першого порядку, 6
  третього порядку, 6
Зовнішнє середовище, 7

І

Ізобарно-ізотермічний потенціал, 67
Ізоморфізм, 41

К

Керування, 15
Коефіцієнт кореляції, 116
Константа рівноваги, 69

М

Математична модель, 26
Математичне очікування, 115
Метод Бокса-Уілсона, 137
Метод Гауса-Зейделя, 123
Метод кінцевих елементів, 146

Метод кінцевих різниць, 145
Метод крутого сходження, 137
Моделі імітації, 27
Моделі оптимізації, 27
Модель
  абстрактна, 26
  матеріальна, 26
Модель, 25
Моделювання, 24
Молекулярність, 74

П

Перший закон термодинаміки, 56
Порядок реакції, 75
Принцип зворотного зв'язку, 11
Принцип ієрархії керування, 14
Принцип керування впливом на
  головний фактор, 11
Процес моделювання, 31
Процес структуризації, 13

Р

Регресійний аналіз, 119
Рівняння Кірхгофу, 61
Рух системи, 7

С

Система, 5
  детермінована, 17
  динамічна, 7
  доцільна, 8
  імовірнісна, 17
  керуюча, 9
  статична, 7
Система керування
  замкнута, 10
  розімкнута, 10
Системи
  прості, 16
  складні, 17
Стан системи, 7

Т

Температурний градієнт, 90
Теореми подоби
  друга, 45
  перша, 43
  третя, 48

Ф

Формула Стокса-Ейнштейна, 87
Функції зв'язку, 15
Функції планування, 15
Функція розподілу випадкової
  величини, 113

Ц

ЦОМ, 140

Ч

Число Рейнольдса, 88

Щ

Щільність розподілу випадкової
  величини, 113

ЛІТЕРАТУРА

1. Максимов Ю.Н., Рожков И.М., Саакян М.А. Математическое моделирование металлургических процессов. – М.: Металлургия, 1976. – 288 с.
2. Цымбал В.П. Математическое моделирование металлургических процессов. – М.: Металлургия, 1986. – 240с.
3. Эйкхоф П. Основы идентификации систем управления. – М.: Мир, 1975. – 683 с.
4. Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов / Хартман К., Лецкий Э., Шеффер В. и др. – М.: Мир, 1977. – 552 с.
5. Налимов В.В. Теория эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 208 с.
6. Проблемы кибернетики / Парин В.В., Бирюков Б.В., Геллер Е.С. и др. – М.: Знание, 1969. – 176 с.
7. Управление. Информация. Интеллект / Под ред. Берга Л.И. – М.: Мысль, 1976. – 333 с.
8. Бусленко Н.П., Калашников В.В., Коваленко И.Н. Лекции по теории сложных систем. – М.: Советское радио, 1973. – 440 с.
9. Веников В.А. Теория подобия и моделирования: Учебное пособие для вузов. 2-е изд. – М.: Высшая школа, 1976. – 480 с.
10. Явойский В.И., Дорофеев Г.А. Повх И.Л. Теория продувки сталеплавильной ванны. – М.: Металлургия, 1979. – 496 с.
11. Френкс Р. Математическое моделирование в химической технологии. – М.: Химия, 1971. – 272 с.
12. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 1976. – 279 с.
13. Сургучев Г.Д. Математическое моделирование сталеплавильных процессов. – М.: Металлургия, 1978. – 224 с.
14. Явойский В.И. Теория процессов производства стали. – М.: Металлургия, 1967. – 792 с.
15. Баптизманский В.И. Теория кислородно-конвертерного процесса. – М.: Ме-

таллургия, 1975. – 374 с.

16. Рожков И.М., Травин О.В., Туркенич Д.И. Математические модели конвертерного процесса. – М.: Металлургия, 1978. – 183 с.
17. Методические указания по дисциплине «Моделирование и оптимизация технологических систем» для студентов специальностей 7.090402 – МЦМ, 7.090401 – МЧМ, 7.090409 – ОТ / Скачков В.А., Никитин Г.Ф. – Запорожье: ЗГИА, 2002. – 105 с.
18. Саморянова Л.Б., Лайнер А.И. Технологические расчеты в производстве глинозема. – М.: Металлургия, 1988. – 230 с.
19. Моделювання металургійних процесів: Методичні вказівки до контрольних робіт для студентів ЗДІА денної форми навчання спеціальностей 7.090401 «Металургія чорних металів», 7.090402 «Металургія кольорових металів» / Скачков В.О., Карпенко Г.В. – Запоріжжя: ЗДІА, 2006. – 40 с.