

Національна Академія наук України
Інститут проблем моделювання в енергетиці

На правах рукопису
УДК 001.573:681.3.06

Земляк Євгеній Михайлович

Система комп'ютерного моделювання
неперервних хіміко-технологічних процесів та об'єктів

05.13.02 - математичне моделювання
у наукових дослідженнях

Автореферат
дисертації на здобуття вченого ступеня
доктора технічних наук

Київ - 1996

Дисертація є рукопис.

Робота виконана у Національному технічному університеті України
"Київський політехнічний інститут"

Науковий консультант - доктор технічних наук, професор
СТАТЮХА Геннадій Олексійович

Офіційні опоненти:

- доктор технічних наук, професор
ПОГОРСЬКИЙ Сергій Дем'янович

- доктор технічних наук, професор
МОЛЧАНОВ Олександр Артемійович

- доктор технічних наук, професор
ТАРАПОН Олександр Григорович

Провідна організація - Інститут кібернетики НАН України

Захист відбудеться "13" червня 1996 року
о _____ годині на засіданні спеціалізованої ради Д 01.91.01
Інституту проблем моделювання в енергетиці Національної Академії
наук України за адресою: 252164, Київ, вул. Генерала Наумова, 15.

З дисертацією можна ознайомитись в науковій бібліотеці інституту.

Автореферат розісланий "25" квітня 1996 року.

Вчений секретар спеціалізованої
вченої ради, к.т.н.

Сем

СЕМАГИНА Е.П.

ЛНБ України ім.В.Стефаніка



00754402 (M)

АНОТАЦІЯ

Метою роботи є створення інтегрованої моделювальної системи, що може розв'язувати основні задачі моделювання у процесах дослідження, проектування та автоматизації складних об'єктів і систем хімічної технології переважно неперервного типу на основі використання та розвитку прогресивної інформаційної технології, що забезпечує комплексне розв'язування задач широким колом непрограмуваних користувачів.

Для досягнення поставленої мети в роботі розв'язані наступні задачі:

- розроблено структуру та організацію функціонування інтегрованої системи автоматизованого моделювання, яка орієнтована на процеси та об'єкти хімічної технології;
- розроблено лінгвістичне забезпечення моделювальної системи, що відрізняється непроцедурністю, проблемною орієнтацією, лапідарністю, непедаантичністю, поліваріантністю, раціональним поєднанням пакетного та інтерактивного режимів взаємодії;
- розроблено алгоритм імітаційного моделювання об'єктів та систем хімічної технології на основі уявлень сіток Петрі, мішаних алгоритмів планування та обчислень, який задовольняє суперечливим вимогам з одного боку - інтерактивного керування експериментом з можливістю його оперативної корекції, та з другого - вимогам високої швидкості ведення розрахунків;
- досліджено типову форму критерію ідентифікації динамічних моделей та запропоновано регуляризовану форму, яка забезпечує коректність розв'язання задачі ідентифікації;
- розроблено комбінований алгоритм ідентифікації нелінійних за параметрами математичних моделей на основі методів пошуку та найменших квадратів;
- для методу пошуку запропоновано, теоретично обґрунтовано та практично апробовано модифікацію методу безумовної мінімізації функцій багатьох змінних, яка відрізняється невеликою трудомісткістю поряд з відносно високою швидкістю збіжності;
- запропоновано розв'язання задачі мінімізації похибки чисельних оцінок похідних, що підвищує надійність методів оптимізації, які використовують похідні функції цілі;
- з метою підвищення точності та швидкості одержання результатів, порівняно з чисельними прототипами, запропоновано чисельно-аналітичну модифікацію групи багатокрокових методів

- інтегрування систем звичайних диференціальних рівнянь;
- розроблені модельні уявлення деяких типових елементів регулювання хіміко-технологічних об'єктів з загавванням;
 - розроблено програмний продукт, що забезпечує розв'язування основних задач моделювання непрограмуваними користувачами.

Автор захищає:

1. Методологічні аспекти комплексного розв'язування задач моделювання хіміко-технологічних процесів та об'єктів на основі розроблених інструментальних програмних засобів та імітаційних моделей.
2. Реалізацію структури і дисципліни функціонування інтегрованої моделюючої системи, що забезпечує інтерактивний режим розв'язку прямих та інверсних задач моделювання для типових хіміко-технологічних процесів і об'єктів.
3. Лінгвістичні засоби опису моделей процесів та об'єктів, що досліджуються, алгоритми їх синтаксичного аналізу, трансляції і розрахунків на основі комбінованої технології планування і реалізації обчислень.
4. Розрахунок стану хіміко-технологічних процесів та об'єктів при розв'язанні прямої задачі моделювання на основі процедури узгодженого застосування стандартних і модифікованих методів розв'язання лінійних та нелінійних систем алгебраїчних і звичайних диференціальних рівнянь.
5. Комбінований алгоритм параметричної ідентифікації математичних моделей хіміко-технологічних процесів і об'єктів, де шукані параметри пов'язані між собою чи входять нелінійно, який базується на розробленій модифікації метода безумовної мінімізації функцій багатьох змінних.
6. Модельні уявлення типових елементів регулювання багатомірних хіміко-технологічних об'єктів з загавванням.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність роботи. Моделювання як метод дослідження та основа ефективних технологій проектування та автоматизації складних об'єктів, процесів та явищ все ширше використовується в різноманітних областях знань (включаючи гуманітар-

ні) та галузях промисловості. Проте, чим ширше коло та більш різноманітний спектр проблем, що вирішуються за допомогою моделювання, тим більші абсолютне значення та частка витрат (часових, матеріальних, трудових) цього апарату у загальних ресурсах, які витрачаються на розв'язування за його допомогою різноманітних наукових та технічних задач. Спроба заощадити на використанні методів моделювання у процесах дослідження та розробки нових перспективних технологій часто призводить до одержання малоефективних рішень, дискредитації прогресивних ідей, а іноді і до більш тяжких наслідків: аварій та катастроф, які, в свою чергу, є результатом недостатнього вивчення, прогнозованості та надійності технологічних систем та автоматизованих комплексів, що експлуатуються.

Ефективними інструментами розв'язування задач моделювання, здатними істотно скоротити витрати, є моделюючі системи. Проте, досить важко знайти такі з них, котрі задовольняли би багаточисельним вимогам конкретних користувачів. До основних недоліків існуючих систем моделювання слід віднести, насамперед, вузькість класу задач, що розв'язуються, трудність або неможливість відтворення за допомогою цих систем умов імітаційних експериментів, близьких до реальних, недостатню проблемну орієнтацію, низький ступінь інтегрованості, високі вимоги до рівня професіоналізму користувачів, низьку оперативність та мобільність, незадовільні ергономічні властивості. У зв'язку з цим, безперечно актуальною постає задача створення інтегрованої моделюючої системи як ефективного інструменту розв'язування наукоємних задач моделювання широким колом інженерно-технічних працівників з різними рівнями кваліфікації та базовою освітою, системи, яка б поєднувала в собі можливості універсальних та проблемно-орієнтованих систем (враховувала би специфіку об'єктів хімічної технології) та мала б високі ергономічні характеристики.

Методи дослідження. Для розв'язання сформульованих задач в роботі використовуються методи та підходи математичного та системного аналізу, математичного моделювання, ідентифікації, оптимізації, математичної лінгвістики, математичної статистики, теорії алгоритмів, теорії автоматичного керування, а також чисельні методи розв'язування рівнянь та систем.

Наукова новизна. Розроблено архітектуру і дисципліну функціонування інтегрованої моделюючої системи, які забезпечують розв'язування задач моделювання в різних постановках, в тому числі можливість одержання, максимально наближених до реальних, умов реалізації імітаційних експериментів, що поєднується з оперативністю керування та високими ергономічними властивостями. Розроблено проблемно орієнтовані мови програмування, що включають принципово нові елементи формування, контролю та трансформації завдань, такі що істотно підвищують ефективність та спрощують розв'язування задач моделювання. Розроблено алгоритм комбінованого планування процесу обчислення, який використовує мішані обчислення та уявлення топологічних структур у вигляді сіток Петрі, котрі створюються системою на стадії трансляції та загрузки імітаційних програм автоматично, і на якому базується система імітаційного моделювання. Для використання в процедурах імітації запропоновано та апробовано чисельно-аналітичну модифікацію групи багатокрокових методів розв'язування систем звичайних диференціальних рівнянь. Запропоновано та досліджено критерій ідентифікації динамічних математичних моделей, який забезпечує стійкість процедури в широкому діапазоні параметрів, що оцінюються. Розроблено, теоретично обґрунтовано та практично апробовано модифікацію методу безумовної мінімізації функцій багатьох змінних, який покладено в основу процедури ідентифікації нелінійних за шуканими параметрами математичних моделей. Запропоновано розв'язання задачі мінімізації похибки чисельних оцінок похідних, яке підвищує надійність методів оптимізації, що використовують похідні. Запропоновано спосіб та алгоритм ідентифікації нелінійних за параметрами математичних моделей, який оснований на процедурі групування різнотипових регресорів та комбінованому використанні метода пошуку та лінійного метода найменших квадратів. Розроблені модельні уявлення елементів регулювання для поширених типових багатомірних об'єктів хімічної технології з загашванням.

Практична цінність. Результати досліджень лягли в основу створеної програмної системи моделювання STAR. Розроблено її версію для СМ ЕОМ та ІВМ-сумісних персональних комп'ютерів, які забезпечують можливість розв'язання основних науко-

емних задач моделювання у прямій та оберненій постановках у процесах дослідження, автоматизації та проектування неперервних хіміко-технологічних об'єктів та процесів широким колом непрограмуваних користувачів. Програмний комплекс активно використовується в учбовому процесі вищої школи та може застосовуватися також у складі навчальних та тренажерних систем.

Реалізація результатів роботи. Програмний комплекс в цілому та його окремі відносно автономні підсистеми оформлено як закінчені програмні продукти, які реалізуються на комерційній основі за договірними цінами. Різні версії та підсистеми комплексу впроваджені та використовуються в дослідницьких та дослідно-конструкторських роботах цілого ряду підприємств та установ (НДО "Хімавтоматика", філіал НДІ ХП у м. Шостка, Київське ПКБ АСУ, ВНДПІМ м.Тула, НДО "Будматеріали", НДО "Спектр", Видачовський ЦКЗ, ВО "Сигнал" м. Челябінськ та ін.). На основі матеріалів дисертаційної роботи розроблено курс лекцій з автоматизованого моделювання, а також організовано лабораторні практикуми ряду учбових дисциплін для студентів хіміко-технологічного факультету Київського політехнічного інституту. Матеріали дисертаційної роботи увійшли у два підготовлених учбових посібника.

Апробація роботи. Основні результати роботи докладалися та обговорювалися на наступних науково-технічних конференціях, семінарах та нарадах: "Проблеми математического, программного и информационного обеспечения АСУ технологическими процессами" (Чернівці, 1979 р.), "Интегрированные автоматизированные системы проектирования объектов химической технологии" (Київ, 1983 р.), "Методы кибернетики химико-технологических процессов" (Москва, 1984 р.), "Математическое моделирование сложных химико-технологических систем" (Одеса, 1985 р., Казань, 1988 р.), "Математические методы в химии" (Грозный, 1985 р., Новочеркаськ, 1989 р., Тула, 1993 р.), "Прикладная информатика автоматизированных систем проектирования, управления, программированной эксплуатации" (Калінінград, 1985 р.), "Автоматизация и роботизация в химической промышленности" (Тамбов, 1986 р., 1988 р.), "Современные методы и средства автоматизации и механизации химических производств" (Київ, 1987 р.), "Математическое моделирование,

системний аналіз і оптимізація хіміко-технологічних процесів, енерго-технологічних і теплоенергетических апаратів і систем" (Бердянськ 1988 р.), "Повищення ефективності, совершенствование процесов и апаратов хіміческих производств" (Львів, 1988 р.), "САПР и АСУ ТП в хіміческой промышленности" (Черкаси, 1986 р., 1987 р., 1989 р., 1991 р.), "Проблеми техногенно-екологіческой безпеки" (Київ, 1994 р.), "Комп'ютерні технології в організації і проведенні учбового процесу в технічному ВУЗі" (Київ, 1995 р.), "Симпозиум по екологіческой хімії" (Кишинів, 1995 р.), а також на наукових семінарах Київського політехнічного інституту 1980 - 1995 р.р. Версія розробленої системи експонувалася у 1988 р. на ВДНГ України і була відзначена медаллю та дипломом.

Публікації. За темою дисертації опубліковано 50 робіт.

Структура та обсяг роботи. Дисертаційна робота складається із вступу, шости розділів, закінчення та списку літератури загальним обсягом 398 с. (у тому числі 41 малюнок, 14 таблиць, бібліографія із 220 назв).

У вступі обгрунтовано актуальність обраної теми дисертаційної роботи, стисло відображено її основний зміст, а також виділено положення, які автор виносить до захисту.

У першому розділі роботи розглядаються методологічні аспекти моделювання. Аналізуються різновидності моделей хімічних та хіміко-технологічних процесів і методів розв'язування задач моделювання. Особливу увагу звернено на метод імітаційного моделювання як ефективний інструмент розв'язування задач багатоваріантного дослідження об'єктів, що проектується, без їх побудови, існуючих об'єктів без втручання в їх роботу та, нарешті, прогнозування "живучості" і поведінки об'єктів у аварійних ситуаціях без ризику їх зруйнування. Далі аналізуються та класифікуються існуючі системи та мови моделювання. На основі проведеного аналізу багатаспектної проблеми розробки систем моделювання формулюється змістовна постановка задачі створення інтегрованої інструментальної моделюючої системи, що відповідає необхідній проблемній орієнтації та заданим властивостям.

У другому розділі міститься опис структури розробленої моделюючої системи та її функціональних можливостей. Розгля-

даються принципи організації та основи побудови і функціонування алгоритмів основних компонентів моделювальної системи. Розробляються процедури синтаксичного контролю текстів програм моделювання, комбінованої трансляції та мішаних обчислень, які дозволяють поєднувати відносно високу ефективність розрахунків з можливістю оперативного втручання та корекції завантаженої для виконання моделі без її повторної трансляції.

В третьому розділі розглядається проблема розв'язання задачі відновлення математичних моделей об'єктів на основі даних про їх стан. Аналізується коректність постановки та розв'язання задачі ідентифікації динамічних моделей. Пропонується та обґрунтовується спосіб розв'язання задачі на основі ефективною модифікації градієнтного метода мінімізації. Розробляється та обґрунтовується алгоритм ідентифікації математичних моделей, що базується на розпізнаванні та сортуванні адитивних складових та використанні для розв'язання задачі комбінації методів пошуку (для параметрів, відносно яких модель нелінійна, або пов'язаних між собою) та лінійного метода найменших квадратів (для параметрів, що лишилися).

Четвертий розділ присвячено проблемі розв'язання прямої задачі моделювання, а саме задачі відтворення стану об'єкта моделювання на основі існуючої моделі. Розробляється чисельно-аналітична модифікація групи багатокрокових методів інтегрування систем звичайних диференціальних рівнянь, що мають підвищену точність розв'язку порівняно з чисельними прототипами. Розглянуто модельні уявлення та алгоритми реалізації типових та оригінальних елементів систем керування хіміко-технологічними об'єктами з загалом. На основі розглянутих методів та алгоритмів розробляється дисципліна функціонування універсального імітатора об'єктів моделювання.

Опису розробленого лінгвістичного забезпечення присвячено п'ятий розділ роботи. В ньому розглянуто інтерактивні засоби взаємодії з моделювальною системою, а також мова програмування імітаційних моделей. Засоби діалогової взаємодії, розраховані на користувачів з різними рівнями кваліфікації, забезпечують можливість адаптації до них із збереженням високих ергономічних властивостей. Можливості мови програмування імітаційних моделей дозволяють непрофесійним програмі-

стам легко створювати програми моделювання складних об'єктів, процесів та розв'язання інших прикладних задач.

У жостому розділі розглядаються деякі приклади застосування моделювальної системи, які демонструють її основні функціональні можливості. Поряд з широко розповсюдженими звичайними постановками математичних задач, серед прикладів розглянуто також задачі з різноманітних проблемних галузей (насамперед, хімічна технологія). Наведені приклади ілюструють нові підходи та технологічні прийоми розв'язання задач, а також виявляють доцільність та ефективність застосування розробленої системи для розв'язання задач не тільки в галузі хімічної технології, але й в інших областях природознавства і гуманітарних сферах (економіка, екологія, медицина та ін.).

У закінченні приведено стислі висновки, які характеризують результати, отримані в роботі.

О С Н О В Н И Й З М І С Т Р О Б О Т И

Дисертаційна робота присвячена проблемі створення інтегрованої моделювальної системи, яка забезпечує ефективне розв'язання основних наукоємних задач моделювання, для класу неперервних об'єктів і процесів хімічної технології (та споріднених, за математичним описом, явиць), включаючи автоматизовані комплекси, у процесах їх дослідження, проектування та модернізації фахівцями з різними рівнями базової освіти та кваліфікації.

Моделювання як методологія дослідження та проектування у своїх різноманітних виявах широко та давно використовується у самих різних областях знань, діяльності та виробничої сфери (часто неявно та неусвідомлено). Все різноманіття задач моделювання зводиться до основних двох типів – прямих та обернених задач моделювання. Пряма задача моделювання зводиться до розрахунку стану об'єкта, що моделюється, на основі знань про його модель та умови взаємодії з навколишнім середовищем. Обернена (або інверсна) задача моделювання найчастіше полягає у відновленні моделі об'єкту на основі знань про його стан та характеристик взаємодії з навколишнім сере-

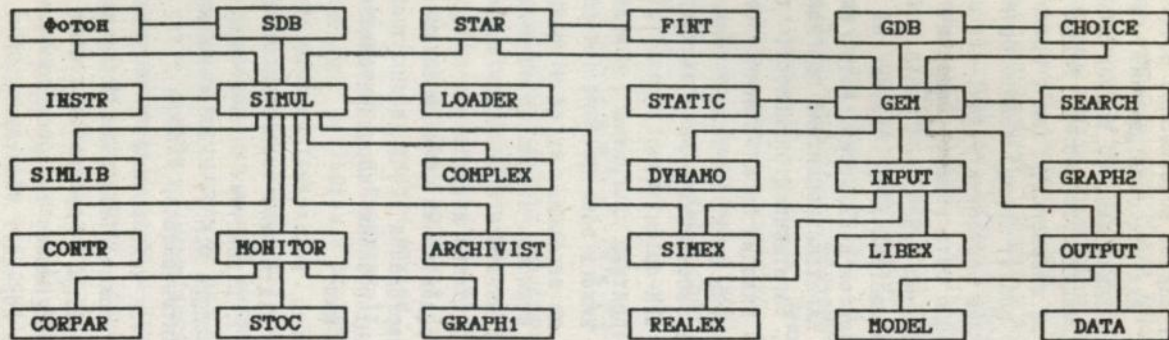
довищем. Розв'язання прямої задачі моделювання часто називають (особливо, якщо мова йде про дослідження) імітацією, оберненою – ідентифікацією. Зазначимо, що в практичному відношенні цінність має комплексне розв'язання задачі моделювання, а саме розв'язання як оберненої, так і прямої задачі, хоча та чи інша з них (або обидві зразу) можуть бути присутні неявно у постановках більш загальних задач. Із цього випливає доцільність створення інтегрованої моделювальної системи, яка забезпечить розв'язання задач двох типів.

Інтегрована моделювоча система STAR (System of Testing and Research), яка є продуктом досліджень, котрі виконані у дисертації, являє собою багатокomпонентний програмний комплекс, який завдяки своїй багатofункціональності та системному характеру має досить складну організаційну структуру. На малюнку зображено спрощену схему взаємодії базових функціональних елементів, які забезпечують розв'язання основних задач моделювання в межах IBM-орієнтованої версії STAR.

На організаційну структуру програмного комплексу серйозний відбиток наклали вимоги забезпечення інтерактивного режиму взаємодії з ним на високому ергономічному рівні з одного боку і з другого – відносно висока обчислювальна трудомісткість задач, що розв'язуються моделювальною системою. Подолання цих суперечних обставин досягається дискретизацією функціонування основних трудомістких обчислювальних процесів та організацією режимів чергування (очікування вводу інформації) у дисципліні функціонування керуваних цими процесами моніторів системи моделювання.

Програмне забезпечення моделювальної системи складається із трьох основних частин: підсистеми імітаційного моделювання (головний модуль SIMUL); підсистеми відновлення математичних моделей (головний модуль GEM); підсистеми оперативних розрахунків (формульний інтерпретатор FINT).

Підсистема імітаційного моделювання призначена для комплексного розв'язування задач імітаційного моделювання і складається зі слідуючих модулів (призначення яких збігається з найменуванням): оперативного інструктування користувачів (INSTR); створення та корекції текстів програм імітаційного моделювання на проблемно-орієнтованій мові (на базі іс-



Спрощена функціональна структура програмних засобів системи STAR

нущих символічних редакторів, наприклад Фотону); бібліотекаря імітаційних моделей, що дозволяє створювати та коректувати довільним способом бібліотеку імітаційних моделей (SIMLIB); завантажувача (транслятора) імітаційних моделей, що реалізує переклад програм імітаційного моделювання з проблемної мови у внутрішню уявлення комп'ютера (LOADER); синтезатора комплексних імітаційних моделей, що дозволяє утворювати складені об'єкти дослідження (COMPLEX); синтезатора параметрів регуляторів, що забезпечує розрахунок параметрів настроювання типових регуляторів (CONTR); монітора керування імітаційними експериментами, що організує режим інтерактивної взаємодії з користувачами та запуск імітатора (MONITOR); універсального імітатора технологічних об'єктів та систем керування, що виконує розрахунки у відповідності з відтрансльованими за допомогою LOADER моделями (STOC); коректувальника імітаційних моделей, що дозволяє здійснювати оперативне коректування режимів моделювання та параметрів моделей без їх перетрансляції (CORPAR); архіватора імітаційних експериментів, що забезпечує можливість збереження результатів багатьох експериментів та відновлення перерваних експериментів без їх повного повтору (ARCHIVIST); модуля відображення графічної інформації, що дозволяє одержувати кольорові графічні образи реалізованих експериментів (GRAPHI); бази даних підсистеми імітаційного моделювання (SDB).

Підсистема відновлення математичних моделей призначена для планування та обробки експериментів з ціллю отримання математичних моделей неперервних об'єктів, процесів і явищ, що досліджуються. Підсистема складається зі наступних основних модулів: планувальника експериментів на базі бібліотеки квазіоптимальних планів (CHOICE); ідентифікатора статичних математичних моделей, що забезпечує отримання різноманітних форм моделей з довільно входятьими до них шуканими параметрами (STATIC); ідентифікатора динамічних математичних моделей, що дозволяє отримати довільні форми математичних моделей зі зосередженими параметрами (DYNAMO); ідентифікатора структур математичних моделей, що дозволяє здійснювати перебір моделей на обраному базисі в автоматичному режимі або під керуванням користувачів (SEARCH); процесора вводу

вхідних даних різного типу (INPUT), що забезпечує введення типових планів експериментів (LIBEX), даних довільних експериментів (REALEX), даних імітаційних експериментів (SIMEX); процесора виводу інформації (OUTPUT), що забезпечує графічне відображення результатів ідентифікації (GRAPH2), автоматичне перетворення видів математичних моделей та їх виведення (MODEL), виведення чисельних даних у табличній формі (DATA); бази даних підсистеми відновлення математичних моделей (GDB).

Всі лінгвістичні засоби, що надаються користувачам у межах моделюючої системи STAR, орієнтовані на непрограмуючих фахівців. Це досягається менш-орієнтованою системою побудови діалогів, та проблемною орієнтацією непроцедурної (такої, що припускає довільну чергу використання операторів) мови програмування імітаційних моделей (МПІМ). Непроцедурна форма зображення програми зручна для більшості непрограмуючих користувачів або початківців. У МПІМ передбачаються засоби побудови процедур, тобто фрагментів програми зі строгою послідовністю операторів, що виконуються, якщо користувачі потребують побудови певних, відомих їм алгоритмів обчислень. Побудова послідовності обчислень непроцедурних програм забезпечується засобами трансляції (LOADER) та виконання (STOC) програм моделювання. Оператори МПІМ мають певні припуски в побудові синтаксичних конструкцій, що виражається у англійсько- та російськомовних формах написання всіх ключових слів, у повних та скорочених форматах їх написання (припускається однозначне розпізнавання типів операторів), у достатньо вільному використанні розділових знаків (що забезпечує збереження змісту та однозначну дешифрацію параметрів). Форма запису арифметичних виразів у МПІМ традиційна, близька до природної. Крім традиційних функцій, що широко використовуються більшістю мов програмування, в арифметичних виразах МПІМ можуть застосовуватися динамічні функції, значення яких визначаються значеннями їх аргументів та їх поточним станом на деякому інтервалі часу (в початковий момент часу початковими умовами). Їх набір (див. табл. 1), визначаючи в значній мірі проблемну орієнтацію мови, є типовим для задач певного класу (залежно від призначення системи). Крім того, за бажанням користувачів його можна розширити, що може скоректу-

Види динамічних функцій

Форма запису	Змістовний еквівалент
MULT(X1,U1)	$Y(t)=U1*X(t)$
LATE(X1,U1)	$Y(t)=X(t-U1)$
INTEG(X1,U1)	$Y'(t)=U1*X(t)$
STEP(X1,U1,U2)	$U1*Y'(t)+Y(t)=U2*X(t)$
DOST(X1,U1,U2)	$U1*U1*Y''(t)+2*U1*Y'(t)+Y(t)=U2*X(t)$
OSCIL(X1,U1,U2,U3)	$U1*Y''(t)+U2*Y'(t)+Y(t)=U3*X(t)$
DIFF(X1,U1)	$Y(t)=U1*X'(t)$
REDIF(X1,U1,U2)	$U1*Y'(t)+Y(t)=U2*X'(t)$
LIMIT(X1,U1,U2,U3)	$Y(t)=U1*X(t)$; при $U2 < U1*X(t) < U3$
	$Y(t)=U2$; при $U1*X(t) \leq U2$
	$Y(t)=U3$; при $U1*X(t) \geq U3$
LOOP(X1,U1,U2)	Симетричний люфт; U1 - коефіцієнт підсилення; U2 - позитивна складова люфту
RAND(U1)	$Y(t)=f(U1)$; f - випадкова функція з нормальном щільністю імовірності та нульовим математичним очікуванням; U1 - середньоквадратичне відхилення
PREG(X1,U1)	$\Delta Y(j)=-U1*\Delta X(j)$
IREG(X1,U1,U2)	$\Delta Y(j)=U1*[U2-X(j)]$
PIREG(X1,U1,U2,U3)	$\Delta Y(j)=U1*(-\Delta X(j)+U2*[U3-X(j)])$
PDREG(X1,U1,U2)	$\Delta Y(j)=U1*(-\Delta X(j)+U2*[\Delta X(j-1)-\Delta X(j)])$
PIDRG(X1,U1,U2,U3,U4)	$\Delta Y(j)=U1*(-\Delta X(j)+U2*[U4-X(j)]+U3*[\Delta X(j-1)-\Delta X(j)])$

вати або уточнити проблемну орієнтацію мови. За допомогою динамічних функцій легко реалізуються математичні моделі типу (1-20) та інші поширені модельні форми. До складу МПІМ входять (див. табл.2) традиційні оператори та спеціальні засоби ефективного керування модельним часом, а також активацію та пасивацію елементів структур об'єктів, які дозволяють створювати лапідарні програми моделювання прямо- та протиточних обмінних, неперервних та періодичних фізико-хімічних процесів, дуже розповсюджених в хімічній технології.

Засоби трансляції та виконання реалізованих на МПІМ програм базуються на комбінації принципів компіляції та інтерпретації. Застосування одного, будь-якого з них в класичному вигляді в межах моделюючої системи не забезпечує одержання програмного продукту з всіма задовільними характеристиками, в умовах надто протилежних вимог до нього. Система мішаних обчислень, яку реалізовано в межах моделюючого комплексу, зберігає можливість корекції оброблених транслятором та загружених на виконання програм у термінах вхідної мови програмування при відносно високій швидкості їх виконання (порівняно з інтерпретуваним режимом). З метою додаткового підвищення швидкості виконання програм, реалізованих на МПІМ у межах системи STAR, їх синтаксичний контроль провадиться на попередній стадії у процедурі каталогізації програм та занесення їх до бібліотеки імітаційних моделей (SDB), в яку заносяться тільки синтаксично коректні програми.

Значна увага в роботі приділяється математичним формам зображення моделей, організації людино-машинного інтерфейсу та обробки завдань. Доцільним вважається комбінування можливостей операторної (системної) та блочної (модульної) форм зображення математичних моделей в межах моделюючої системи, а також мішана (компілятивно-інтерпретувача) дисципліна обробки завдань, яка забезпечує поєднання можливостей оперативного втручання з відносно високою швидкістю обчислень. Обґрунтовано достатність класу математичних моделей, які представлені мішаними системами звичайних диференціальних (можливо з загальним аргументом) та алгебраїчних рівнянь лінійного і нелінійного видів, можливо з різними логічними умовами, для зображення об'єктів та процесів заданої сім'ї.

Основні типи операторів МПІМ

Тип оператора	Коротке призначення оператора
Найменування	Надання змістовних імен моделям та змінним
Присвоєння	Розрахунки арифметичних виразів та надання змінним значень
Розподілу	Розподіл програм (моделей) на секції
Інтервалу	Завдання інтервала (кроку) реєстрації інформації при здійсненні моделювання
Масштабу	Завдання режиму моделювання (реального, прискореного, уповільненого)
Таймера	Завдання діапазона, напрямку та режиму інтегрування математичних моделей
Точності	Завдання інтервала (кроку) інтегрування математичних моделей
Друку	Завдання списків та періодів друку змінних
Виводу	Завдання списків виводу поточних значень змінних у файли на магнітні носії
Уводу	Завдання списків та режимів вводу поточних значень змінних з файлів на магнітних носіях
Умови	Завдання умов вибору операторів розрахунків та присвоєння значень змінним
Процедури	Завдання форми розрахунків та визову алгоритмічних частин моделей
Періоду	Імперативне планування розрахункового процесу
Перемикання	Інтеррогативне планування розрахункового процесу
Відладки	Завдання режиму розширеного друку інформації при відладці програм
Коментарів	Супроводження програм (моделей) пояснювальними записами

Лінійна математична модель об'єкта в операторній формі може бути зображена у вигляді:

$$X' = A * X + B * U ; \quad (1)$$

$$Y = C * X + D * U ; \quad (2)$$

нелінійна припустима форма має вид:

$$X' = F (X, U) ; \quad (3)$$

$$Y = G (X, Y, U) ; \quad (4)$$

де: A, B, C, D - матриці коефіцієнтів; F, G - вектори функція; U, X, Y - вектори вхідних змінних, стану та виходу (залежність від часу для спрощення запису опущено).

Блочна (модульна) форма зображення математичних моделей, описується у вигляді набору типових лінійних динамічних ланок, що найчастіше використовуються:

$$x(t) = u(t - t_z) ; \quad (5)$$

$$x(t) = k * u(t) ; \quad (6)$$

$$x'(t) = k * u(t) ; \quad (7)$$

$$x(t) = k * u'(t) ; \quad (8)$$

$$T * x'(t) + x(t) = k * u(t) ; \quad (9)$$

$$T * x'(t) + x(t) = k * u'(t) ; \quad (10)$$

$$T * T * x''(t) + 2 * T * x'(t) + x(t) = k * u(t) ; \quad (11)$$

$$T^2 * x''(t) + T_1 * x'(t) + x(t) = k * u(t) ; \quad (12)$$

де t_z , k, T, T_1 , T_2 - параметри ланок; t - час.

Крім того, часто для зображення нестационарних та нелінійних об'єктів використовуються динамічні ланки із змінними у часі коефіцієнтами, а також типові нелінійні елементи (що відповідають явищам насичення, люфта, гістерезису та ін.). При формуванні модельних уявлень типових поширених регуляторів використовується опис цифрового ПІД-регулятора:

$$z(t) = k_r [e(t) + 1/T_z \int e(s) ds + T_d e'(t)] ; \quad (13)$$

де $e(t)$ - відхилення стану об'єкта від завдання;

$z(t)$ - керуючий вплив ; k_r , T_z , T_d - параметри налаштування регулятора.

Характерними елементами математичних моделей розглянутих об'єктів є ланки загашвання, тому що загашвання властиве природі технологічних об'єктів хімічного профілю (через присутність в них великої кількості різних трубопроводів) та принципово присутнє в автоматизованих на базі ЕОМ технологічних комплексах у вигляді часу, що використовується на пере-

дачу та переробку інформації. Для об'єктів з загашванням в дисертації розв'язуються задачі мінімізації об'ємів збереження інформації та синтезу різних елементів систем керування як традиційного, так і нестандартного типів. Для об'єктів, природа яких описується явищем "відбитої хвилі", синтезовано пропорційний регулятор з еталонною моделлю, який забезпечує стійкість контуру регулювання та якість перехідних процесів. Треба відмітити, що такі об'єкти дуже часто зустрічаються в хімії та енергетиці і являють собою технологічні системи з потужними зворотними зв'язками і чималими транспортними загашваннями (наприклад, ректифікаційні колони, багатосекційні теплообмінники та ін), апроксимовані паралельно з'єднаними типовими динамічними ланками з загашванням (можливо з різними за знаком коефіцієнтами підсилення). Синтез систем керування для таких об'єктів на базі типових регуляторів, як правило, не дає задовільних результатів тому, що отримані контури регулювання або нестійкі, або низької якості. Основні залежності синтезованого регулятора мають вид:

$$\Delta U_n = \left\{ y^* - y_n - \sum_{i=1}^n \left[\sum_{l=1}^L V_{ie} + R_i \left(\sum_{l=1}^{m_i-1} \sum_{j=1}^L U_{ije} + \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^{m_i-1} U_{ije} \right) \right] \right\} / \left(\sum_{i=1}^n R_i \sum_{l=1}^L S_{ie} \right); \quad (14)$$

де

$$U_{ije} = \theta_i^{lj} \Delta U_{n-m_i+j}; \quad V_{ie} = \theta_i^l \Delta X_{i,n}; \quad S_{ie} = \theta_i^{l-m_i};$$

$$R_i = k_i (1 - \theta_i); \quad \theta_i = \exp(-\Delta t / T_i); \quad m_i = \text{entier}(t_{zi} / \Delta t + 0.5);$$

y^*, y_n - заданий та поточний стан вихідної змінної об'єкту; T_i, t_{zi} - стала часу та час загашвання i -тої паралельної ланки; ΔU_n - поточний приріст значення керувачого впливу; n - число паралельних ланок, які описують об'єкт з "відбитою хвилею"; L - об'єм вибірки даних, що використовується.

Для покращання якості та підвищення ефективності систем керування, що синтезуються, для об'єктів з загашванням розроблено способи та алгоритми компенсації збурень, які можуть бути виміряні та перехресних керувань (для багатовимірних зв'язних об'єктів). Для аперіодичних ланок з самовирівнюванням основні залежності мають вид:

$$\Delta U_{i,n}^{(1)} = a \Delta U_{i,n-1}^{(1)} + b \Delta U_{2,n-m}; \quad (15)$$

$$\Delta U_{i,n}^{(2)} = c \Delta U_{2,n-m}; \quad (16)$$

$$\Delta U_{i,n} = \Delta U_{i,n}^{(1)} + \Delta U_{i,n}^{(2)}; \quad (17)$$

$$a = \exp(-\Delta t/T_2); \quad (18)$$

$$b = -k_2 \cdot (T_2 - T_1) \cdot (1-a) / (k_1 \cdot T_2); \quad (19)$$

$$c = -k_2 \cdot T_1 / (k_1 \cdot T_2); \quad (20)$$

$$m = \text{entier} [(t_2 - t_1) / \Delta t + 0.5]; \quad (21)$$

де $k_1, k_2, T_1, T_2, t_1, t_2$ - коефіцієнти підсилення, сталі часу, часи загашвання по каналах регулювання та збурення; $\Delta U_{2,n-m}$ - значення збурення, що вимірюється (m тактів тому назад); $\Delta U_{i,n}$ - значення компенсуючого впливу.

Для випадків, коли час загашвання по каналу регулювання більше часу загашвання по каналу збурення ($t_1 > t_2$), повна компенсація неможлива. Однак, є змога синтезувати оптимальний компенсатор (мінімізуючий інтеграл квадрату відхилу), який в найбільшій мірі розв'язує задачу інваріантного керування. При цьому основні залежності компенсатора (15 - 21) зберігаються, m вважається рівним нулю, а замість T_1 використовується параметр T , який ітераційно обчислюється на основі залежності:

$$T = (t_1 - t_2) / \ln(4 \cdot T / 3 \cdot (T + T_1) \cdot [1 + T_1 / (T + T_1)] + (t_1 - t_2) / 3 / (T + T_1)) \quad (22)$$

Зауважимо, що лінійні моделі як у операторній, так і в блочній формах являють, як правило, лише лінеаризацію більш складних, типових для хімічних об'єктів, нелінійних залежностей в околі деякої точки, тому їх ідентифікація та використання часто реалізуються у приростах (відхилах) до поточних дійсних значень, а не в істинних дійсних (натуральних) значеннях. В межах розробленої моделювчої системи передбачено ведення розрахунків в обох варіантах.

Звернемо увагу, що для типових елементів (9, 11) можна легко знайти аналітичні розв'язки, якщо припустити сталими коефіцієнти та вхідні змінні на проміжку інтегрування:

$$x(t) = x_0 \cdot E + k \cdot u \cdot (1 - E); \quad (23)$$

$$x(t) = E \cdot [x_0 \cdot (1 + t/T) + x_0' \cdot t] + k \cdot u \cdot [1 - E \cdot (1 + t/T)]; \quad (24)$$

де $E = \exp(-t/T)$; x_0, x_0' - початкові умови по змінній та похідній.

Рекурентні формули для використання Y_x у процедурах інтегрування приймають вид:

$$x(i) = x(i-1)*E0 + k*u(i-1)*(1-E0); \quad (25)$$

$$x(i) = E0*[x(i-1)*(1+\Delta t/T)+x'(i-1)*\Delta t] + k*u(i-1)*[1-E0*(1+\Delta t/T)]; \quad (26)$$

де $E0 = \exp(-\Delta t/T)$; Δt - крок інтегрування.

У другому випадку похідна розраховується за формулою:

$$x'(i) = E0*(x'(i-1)*(1-\Delta t/T) - [x(i-1)-k*u(i-1)]*\Delta t/(T*\Delta t)). \quad (27)$$

Операторні форми запису математичних моделей (1, 3) можуть бути легко трансформовані у наступні неявно блочні, такі, що мають ланки типу (9), форми:

$$\text{diag}(T)*X' + E*X = N*X + R*U; \quad (28)$$

$$\text{diag}(T)*X' + E*X = H(X,U); \quad (29)$$

де T - діагональна матриця коефіцієнтів; E - одинична матриця; N, R - матриці, що отримуються з умов:

$$A = T1*(N-E); \quad B = T1*R; \quad T1 - \text{обернена матриця } T;$$

$$H - \text{вектор функцій: } H(X,U) = T*F(X,U) + E*X.$$

Математичні моделі (28, 29) відповідають блочним моделям (9), тільки записані у векторній формі; отже для них можна побудувати алгоритми мішаного чисельно-аналітичного інтегрування, використовуючи формули (23, 24). Суть методики полягає в тому, що всередині кожного інтервалу дискретизації прогноз зміни вектора стану розраховується на основі точного аналітичного розв'язку системи диференціальних рівнянь (у припущенні сталості правих частин всередині інтервалу дискретизації). Апроксимація правих частин диференціальних рівнянь на кінцях інтервалів дискретизації здійснюється у відповідності з розрахунковими залежностями чисельних методів інтегрування (наприклад, Зйлера, Адамса та ін.), які використовуються, що дозволяє отримати групу модифікованих методів підвищеної точності або швидкості (за рахунок збільшення кроку дискретизації), порівняно з чисельними прототипами. Додаткове підвищення точності при застосуванні цієї процедури досягається відповідним плануванням процесу обчислень при якому, аналогічно розрахунку блочних моделей, забезпечується використання i -тих значень вхідних змінних для виділених блоків, замість $(i-1)$ -их на поточному кроці, тобто використанням частково неявної схеми інтегрування (за виключенням місць розриву контурів).

Деякі розрахункові залежності запропонованої методики мають наступний вид:

для метода Ейлера:

$$x(1) = x(1-1) * E0 + h(1-1) * (1-E0); \quad (30)$$

для явного метода Адамса 3-го порядку:

$$x(1) = x(1-1) * E0 + [23 * h(1-1) - 16 * h(1-2) + 5 * h(1-3)] * (1-E0) / 12; \quad (31)$$

для неявного метода Адамса 4-го порядку:

$$x(1) = x(1-1) * E0 + [9 * h(1) + 19 * h(1-1) - 5 * h(1-2) + h(1-3)] * (1-E0) / 24; \quad (32)$$

де $h(1)$ - значення правих частин перетворених диференціальних рівнянь типу (28, 29).

Типові методи чисельного інтегрування в сукупності з наведеними математичними залежностями та розробленою процедурою інтегрування систем диференціальних рівнянь, доповнені ітераційними методами розв'язування систем алгебраїчних рівнянь, являють собою основу розв'язання прямої задачі моделювання для об'єктів заданого класу.

Універсальна система імітаційного моделювання, що базується на використанні розглянутих залежностей, реалізує розрахунок математичних моделей об'єктів з довільною топологічною структурою. В основу алгоритму розрахунків математичних моделей покладено їх автоматичне перетворення з проблемно орієнтованої мови (яка розроблена у межах моделювальної системи) на уявлення у вигляді узагальнених сіток Петрі, розрахунок яких забезпечується засобами універсального імітатора моделювальної системи. Технологію розрахунку, яку було розроблено для моделей в блочній формі, узагальнено на моделі в операторній формі, що дозволило підвищити точність інтегрування за рахунок реалізації частково неявних процедур.

Для того, щоб описати алгоритми розрахунку об'єкта довільної топологічної структури у фіксованій точці шкали часу (на одному кроці інтегрування) введемо наступні позначення:

\bar{P}^o - множина позицій сітки;

$M(\bar{P}), M(p)$ - векторний та позиційний (скалярний) маркери;

\bar{P} - множина позицій, що розраховані, позиційний маркер яких $M(p_i) \equiv 2$;

\bar{P}^* - множина позицій p_i^* , для яких розрахунок є можли-

вим, а позиційний маркер $M(p_i^*) \equiv 1$;

\bar{V} - множина дуг переходів;

\bar{V}^* - множина збуджених дуг переходів;

$\bar{I}(P)$ - множина дуг переходів, які від'ємно-інцидентні позиції P ;

$\bar{\alpha}(P)$ - множина дуг переходів, які додатньо-інцидентні позиції P .

Використовуючи наведені позначення, початковий стан (нульовий крок) алгоритму буде мати наступний вигляд:

$$\bar{P}_0 = \{p_i: i=1, k; \bar{I}(p_i) = \emptyset; \forall p_i \in \bar{P}^0\};$$

$$M(\bar{P}_0) = 2;$$

$$\bar{V}_0^* = \bar{D}(\bar{P}_0);$$

$$\bar{P}_0^* = \{p_{0,i}^*: i=1, m; \bar{I}(p_{0,i}^*) \subset \bar{V}_0^*; \forall p_{0,i}^* \in \bar{P}^0\};$$

$$M(\bar{P}_0^*) = 1;$$

$$M(\bar{P}^0 \setminus (\bar{P}_0 \cup \bar{P}_0^*)) = 0.$$

Довільний j -тий крок алгоритму:

$$\bar{P}_j = \bar{P}_{j-1} \cup p_{j-1,1}^*;$$

$$M(p_{j-1,1}^*) = 2;$$

$$\bar{V}_j^* = (\bar{V}_{j-1}^* \cup \bar{D}(p_{j-1,1}^*)) \setminus \bar{I}(p_{j-1,1}^*);$$

$$\bar{P}_j^* = (\bar{P}_{j-1}^* \setminus p_{j-1,1}^*) \cup \bar{T}_j;$$

$$\bar{T}_j = \{t_{j,i}: i=1, l; \bar{I}_j(t_{j,i}) \subset \bar{V}_j^* \setminus \bar{V}_{j-1}^*; \forall t_{j,i} \in \bar{P}^0\};$$

$$M(\bar{T}_j) = 1.$$

Алгоритм закінчує роботу коли виконаються умови:

$$\bar{P} \equiv \bar{P}^0;$$

$$M(\bar{P}) \equiv 2;$$

$$\bar{V}^* \equiv \emptyset.$$

Оскільки всі три умови виконуються одночасово достатньо контролювати одну з них (будь-яку).

Задача відновлення математичної моделі об'єкта дослідження може бути віднесена до класу обернених задач і найчастіше зводиться до задачі мінімізації функціоналу помилок, який дозволяє порівняти розрахункові значення вектора стану об'єкта, що підлягає ідентифікації, з експериментальними. В роботі розглядаються та досліджуються типові форми функціоналів помилок. Аналізується форма гіперповерхні типового функціоналу помилок на множині параметрів динамічних моделей, які ідентифікуються. Установлюється можлива некоректність постановки задачі ідентифікації параметрів динамічних

моделей. Пропонується регуляризована форма критерію ідентифікації, яка забезпечує стійкість та єдинність розв'язку задачі. Критерій ідентифікації у дискретному зображенні на 1-тому кроці алгоритму пошуку мінімуму має наступний вид:

$$J_i = G_i + \alpha_i \sum_{k=1}^{\ell} \rho_k (P_{k,i} - P_k^0)^2; \quad (33)$$

$$G_i = \begin{cases} J_{k,i} \sum_{j=1}^m \exp(P_{j,i} - P_j^*); \exists P_{j,i}: P_{j,i} > P_j^*; \\ \sum_{k=1}^m (y_{k,t} - \hat{y}_{k,t})^2; \iff \forall P_{j,i}: P_{j,i} \leq P_j^*; \end{cases} \quad (34)$$

де P_k^0 , P_k^* , $P_{k,t}$ - початкове, крайове та поточне значення параметрів, що підлягають ідентифікації; ρ_k - ваговий коефіцієнт; ℓ - вимірність вектора параметрів, що підлягають ідентифікації; α_i - параметр регуляризації ($\alpha_i \rightarrow 0$ при $i \rightarrow \infty$); - останнє значення функціоналу J , з непорушеними крайовими умовами за параметрами.

З метою мінімізації функціоналу помилок запропоновано метод, базова залежність якого має вид:

$$P_{i+1} = P_i - \beta_i r_i J'_i; \quad (35)$$

де $r_i = \text{diag}[J''_{ii} (J''_{ii})^{-1}]$ - діагональна матриця радіусів кривини функції, що мінімізується, у координатних напрямках; β_i - деяка послідовність скалярів, кожен з яких обирається з умови мінімуму цільової функції у вибраному напрямку спуску.

Для методу (35) у дисертації доказано теореми про збіжність та швидкість його збіжності до точки мінімуму цільової функції.

На основі базової процедури (35) розроблено ефективний двохпараметричний метод мінімізації (прототип методу Кентрелла-Міля):

$$P_{i+1} = P_i - \beta_i r_i J'_i + \gamma_i \Delta P_{i-m}; \quad (36)$$

де $\Delta P_{i-m} = (P_i - P_{i-m})$ - приріст вектора незалежних змінних на m попередніх кроках ($\Delta P_0 = 0$); β_i , γ_i - скаляри, вибір яких дає змогу отримати комбінований фактичний напрям спуску; m - число врахованих кроків (емпірично встановлюється пропорційним до значення есзуву на останньому кроці алгоритму мінімізації).

З метою підвищення ефективності та забезпечення надійності процедури мінімізації запропоновано метод мінімізації похибки чисельної оцінки похідних функції. Ідея методу поля-

гає у зіставленні значень оцінок похідних, припускаючи лінійність прогнозу функції на інтервалі дискретності та її прогнозу по дузі кола. Оптимальні значення приростів незалежних змінних, що забезпечують мінімізацію сумарної похибки чисельних оцінок похідних, яка в свою чергу зумовлена нелінійністю функції (методична похибка) та скінченністю розрядної сітки ЕОМ (похибка заокруглення) без врахування перехідної похибки початкових даних, можуть бути обчислені за допомогою наступних залежностей (в скалярній формі):

$$\Delta P_{12} = (M_{12} - J' \cdot L) \cdot (J'')^{-1}; \quad (37)$$

$$M_{12} = \{L^k J^{\pm k} L N [L(N^2 - L^2)]^{0.5}\} [L^2 (J')^2 + N^2]^{-1}; \quad (38)$$

$$L = 1 + (J')^2; \quad (39)$$

$$N = L + |J \cdot J''| \cdot 2^{-q}; \quad (40)$$

де q - довжина розрядної сітки 30М (для більшості сучасних комп'ютерів $q = 22 - 23$ двійкових розрядів).

Умови існування оптимальних значень приростів:

$$|J \cdot J''| > 1 + (J')^2; \quad (41)$$

$$|J \cdot J''| < [1 + (J')^2] \cdot 2^{2q}. \quad (42)$$

Перевірка розробленого метода мінімізації на серії тестових функцій та контрольних прикладів показала високу ефективність, надійність та придатність для використання у пошукових процедурах ідентифікації.

Відзначимо, що дуже розповсюджені математичні моделі, для яких є змога поділити множину шуканих параметрів на дві основні групи; відносно першої з них залежність, що відновлюється - лінійна, відносно другої - нелінійна. Таким чином, основа математичної моделі може являти собою комбінації виразів (1.3) та в дискретній формі для скалярного випадку мати вид:

$$X_i = \sum_{j=1}^{k_1} X_{i-j} P_j + \sum_{j=k_1+1}^{k_2} F_{j-k_1}(u) P_j + \sum_{j=1}^{k_3} R_j(u, X_{i-j}, P) P_{j+k_2} + \sum_{j=1}^{n-k_3} S(u, X_{i-j}, P) \quad (43)$$

Проведення ідентифікації усіх параметрів математичної моделі тільки пошуковим методом недоцільно, тому що метод потребує високих витрат на обчислення. У зв'язку з цим розроблено комбіновану процедуру ідентифікації, яка базується на поєднанні лінійного метода найменших квадратів (ЛМК) з пошуковим методом. У комбінованому алгоритмі процедура ЛМК буде базуватися на векторному рівнянні виду:

$P = [(F + X + R)^* \cdot (F + X + R)]^{-1} \cdot (F + X + R)^* \cdot (X - S); \quad (44)$
 де X - вектор стану вимірності $(m - k)$;

- F - матриця статичних складавчих вимірністю $[(m - k) \cdot n]$;
 X - матриця динамічних складавчих вимірністю $[(m - k) \cdot n]$;
 R - матриця складавчих з параметрами, що нелінійно входять до моделі чи пов'язані між собою, вимірністю $[(m - k) \cdot n]$;
 S - вектор складавчих, що не містять шуканих параметрів, які лінійно входять до моделі, вимірністю $(m - k)$.

У випадку розв'язування задачі множинної регресії, а саме ідентифікації математичних моделей у вигляді систем рівнянь типу (43), в рівнянні (44) P і $(X - S)$ з векторів трансформуються у матриці. Відмітимо, що розглянутим способом можна ідентифікувати і математичні моделі, до яких входять пов'язані між собою (взаємозалежні) шукані параметри.

У дисертації доведено, що запропонована комбінована процедура ідентифікації, яка базується на залежностях (35-42) та (44), збігається до розв'язку, що забезпечує мінімізацію критерію ідентифікації (33).

Значна увага в роботі приділяється розв'язанню практичних задач хімічної технології, які демонструють деякі можливості розробленої моделюючої системи. Так, у дисертації наведені приклади моделювання різних типів хімічних реакторів та процесів, що протікають у них, тепло- та масообмінних апаратів в автономному режимі та сумісно з системами керування. Крім явищ суто хімічної технології у дисертації містяться результати моделювання процесів суттєво іншої природи, але зі спорідненим математичним описом, такі як: біологічні, екологічні та економічні. Розглянуті приклади підтверджують ефективність та доцільність застосування розробленої системи для розв'язування не тільки технічних, але й гуманітарних задач.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

В роботі розглянута та вирішена проблема створення інтегрованої моделюючої системи як ефективного інструмента дослідження та автоматизації складних хіміко-технологіч-

них об'єктів, переважно неперервного типу. Деякі особливості розробленої моделювчої системи:

- можливість розв'язування прямих та обернених задач моделювання;
- орієнтація на непрограмуваних користувачів (близькість до природних форм відображення та вводу інформації, непедаантичність лінгвістичних засобів, двомовний тезаурус, непроцедурність та лапідарність лінгвістичних засобів, засоби інструктування та подавання допомоги);
- інтерактивний режим керування процесом розв'язування задач;
- можливість планування експериментальних досліджень на основі бібліотеки квазіоптимальних планів;
- можливість відображення математичних моделей у дійсних (природних) значеннях та у приростах (відхилах);
- можливість ідентифікації статичних та динамічних математичних моделей;
- можливість ідентифікації математичних моделей з незалежними та з пов'язаними між собою шуканими параметрами, які входять лінійно чи нелінійно;
- автоматичне розпізнавання видів параметрів, що ідентифікуються, та вибір методів розв'язування задач ідентифікації;
- автоматичне перетворення форм відображення математичних моделей;
- структурна ідентифікація в автоматичному (на обраному базисі) режимі та режимі діалогу;
- можливість відображення моделей у системному (операторному) та у модульному (блочному) вигляді;
- можливість корекції моделі та впливу на її стан безпосередньо у процесі імітації;
- можливість зміни точності та масштабу розв'язування задач в процесі імітації;
- автоматична ліквідація паразитних розрахунків в імітаційних моделях;
- автоматична реалізація ітераційного процесу для забезпечення розв'язування алгебраїчних рівнянь, що входять до складу математичних моделей;
- можливість простого відображення та реалізації імітаційних моделей періодичних процесів;

- можливість програмної реструктуризації імітаційних моделей;
- можливість автоматичної зміни напрямку інтегрування та розв'язування деяких крайових задач;
- можливість архівування та відновлення імітаційних експериментів;
- можливість розширення мови моделювання.

Властивості та досвід застосування розробленої системи дозволяють говорити про можливість її використання для розв'язування задач не тільки в галузі хімічної технології, але й в інших областях природознавства та гуманітарних сферах.

Основні результати роботи :

1. На основі зіставлення класифікаційних систем та сповивчих властивостей існуючих програмних продуктів, сформульовано вимоги до інтегрованої моделювальної системи, орієнтованої на хіміко-технологічні процеси і об'єкти, яка відповідає принципам комплексності розв'язання основних задач моделювання, природності у спілкуванні з некваліфікованими користувачами та поліваріантності умов реалізації імітаційних експериментів. Відпрацьована методика комплексного розв'язку задач моделювання класу хіміко-технологічних об'єктів і процесів на основі інтегрованої системи моделювання.

2. Розроблені структура і дисципліна функціонування інтегрованої моделювальної системи, які орієнтовані на різні класи обчислювальних засобів і операційних систем і підтримують ефективну технологію одержання моделей, реалізації експериментів і інтерактивного керування процесом розв'язку задач, при забезпеченні оперативності і комфортності спілкування з користувачами. Створено декілька програмних версій моделювальної системи, які відрізняються набором функціональних можливостей, що ураховують специфіку обчислювальних комплексів різних класів та містять додаткові сервісні засоби для автоматизації різних видів та етапів робіт по створенню, відладці, валідації і забезпеченню збереження моделей та інших програмно-інформаційних компонентів.

3. Розроблені лінгвістичні засоби відображення типових хіміко-технологічних процесів і об'єктів, які дозволяють поєднувати різні форми уявлення їх математичних моделей (блоково-модульні; операторні чи системні; в дійсних, тобто на-

туральних значеннях; в приростах, тобто відхилах; у вигляді диференційних рівнянь; у вигляді алгебраїчних рівнянь; з залежностями лінійного типу; з залежностями нелінійного типу; з елементами логіки і алгоритмічними блоками). Запропонована процедура синтаксичного контролю коректності уявлення математичних моделей в межах створеної моделюючої системи на основі аналізу структури дерев, які задовольняють структурам операторів, що використані для відображення моделей.

4. Розроблена мішана система трансляції і завантаження завдань на моделювання, яка основана на раціональному поєднанні принципів компіляції і інтерпретації програм і забезпечує (при відносно високій швидкості розрахунків на основі універсального налагоджуваного імітатора) можливість оперативної корекції параметрів моделей і режиму моделювання у термінах початкової мови їх опису, адаптованої до непрограмуєчих користувачів. В основу процедури трансляції покладено алгоритм перетворення операторів опису структур математичних моделей в форму узагальнених сіток Петрі. Винесення процедури синтаксичного контролю модельних уявлень на попередній етап з формуванням бібліотеки коректних моделей дозволило підняти оперативність процедури обробки завдань.

5. Розроблено алгоритм універсального налагоджуваного імітатора, який передбачає можливість комбінації автоматичної синхронізації розрахунків структур моделей з імперативним і інтеррогативним плануванням синхронізації подій, що дозволяє моделювати не тільки неперервні, а і періодичні процеси і об'єкти. З метою піднесення точності ведення розрахунків і поліпшення оперативних властивостей системи моделювання типові схеми інтегрування диференційних рівнянь доповнені спеціально розробленої чисельно-аналітичної модифікацією групи багатокрокових методів.

6. Створено спеціалізований імітатор систем керування, призначений для функціонування у складі об'єктно-орієнтованої версії моделюючої системи, який містить, крім традиційних алгоритмів регулювання, спеціально розроблені модельні уявлення і алгоритми розрахунку регулятора з еталонною моделлю та компенсаторів збурень, що вимірюється, і перехресних зв'язків для розповсюджених в хімічній техно-

логі багатомірних аперіодичних об'єктів з загашванням.

7. Для розв'язування задачі відновлення математичних моделей на основі експериментальних даних запропоновано та реалізовано комбінований алгоритм ідентифікації нелінійних за шуканими параметрами математичних моделей на основі лінійного методу найменших квадратів (ЛМК) та методу пошуку, що істотно зменшує час ідентифікації, порівняно з чисто пошуковими процедурами та розширює клас моделей, що підлягають ідентифікації, порівняно з ЛМК.

8. Пошукова процедура ідентифікації математичних моделей базується на розробленій, теоретично обґрунтованій, практично апробованій модифікації методу мінімізації Ньютон, котра продемонструвала високу надійність одержання результатів і оснований на евристичних міркуваннях обліку кривини функцій, що мінімізуються та на мінімізації похибки чисельних оцінок похідних, і ураховує напрямки пошуку на декількох кроках процесу мінімізації.

9. Моделююча система та її окремі компоненти являють собою закінчені програмні продукти, які неодноразово використовувалися при розв'язуванні технологічних, дослідницьких і проектних задач в різних установах, закладах і на промислових підприємствах, демонструючи при цьому високу ефективність та зручність в експлуатації. На базі матеріалів моделюючої системи підготовлено два учбових посібники для студентів та аспірантів, а також фахівців, зацікавлених проблемами автоматизованого моделювання. На основі розробленої моделюючої системи на хіміко-технологічному факультеті Київського політехнічного інституту організовано курс лекцій з автоматизованого моделювання, а також лабораторні практикуми з ряду дисциплін. Одна з версій моделюючої системи експонувалась на ВДНГ України, де була відзначена медаллю та дипломом.

За матеріалами дисертації опубліковано понад 50 друкованих робіт. Основні з них:

1. Земляк Е.М., Статыха Г.А. Автоматизированное моделирование непрерывных и периодических процессов и систем. - Киев: УМК ВО, 1992. - 142 с.

2. Земляк Е.М. Примеры построения подсистемы автоматизированного проектирования АСУ ТП. - В кн.: Статуха Г.А. Автоматизированное проектирование химико-технологических систем. Киев: Вища школа, 1989, с. 374-384.

3. Пащенко А.А., Сербин В.П., Земляк Е.М. Математическая модель стеклоцементной композиции. - ДАН УССР. Физико-математические и технические науки. 1982, N 4, с.81-84.

4. Земляк Е.М. Метод безусловной минимизации функции многих переменных. - Химическая промышленность. Сер. Автоматизация химических производств. М.: НИИТЭХИМ, 1981, N1, с.33-37.

5. Земляк Е.М., Медведев Р.Б. Идентификация динамических характеристик химико-технологических систем одного типа. - Химическая промышленность. Сер. Автоматизация химических производств. М.: НИИТЭХИМ, 1981, N 4, с.14-16.

6. Мясникова Е.А., Земляк Е.М., Токарчук В.В. Процесс декарбонизации в крупнодисперсных сырьевых смесях. - Химическая технология, 1984, N 4, с.50-51.

7. Медведев Р.Б., Статуха Г.А., Земляк Е.М. Программная система ведения оперативных расчетов на СМ ЭВМ. - Управляющие системы и машины, 1985, N 3, с.83-85.

8. Земляк Е.М. Программный редактор символьной информации для СМ ЭВМ. - Управляющие системы и машины, 1985, N4, с.72-74.

9. Земляк Е.М., Медведев Р.Б. Система оперативной отладки Фортран-программ на СМ ЭВМ. - Управляющие системы и машины, 1986, N 4, с.37-39.

10. Земляк Е.М. Интерпретирующая система. - Химическая промышленность. Сер. Автоматизация химических производств. М.: НИИТЭХИМ, 1987, N 10, с.1-5.

11. Земляк Е.М., Статуха Г.А. Программный комплекс автоматизации исследования алгоритмов управления одного класса. - Управляющие системы и машины, 1987, N 2, с.33-37.

12. Карасева В.А., Земляк Е.М., Статуха Г.А. Система управления реляционной базой данных СМ ЭВМ с операционными системами АСПО. - Управляющие системы и машины, 1988, N5, с.53-58.

13. Земляк Е.М. О минимизации погрешности численных оценок производных при расчетах на ЭВМ. - Химическая промышленность. Сер. Автоматизация химических производств. М.: НИИТЭХИМ, 1990, N 3, с.1-5.

14. Земляк Е.М. Безопасность промышленных предприятий в модельных представлениях. - Охрана труда, 1994, № 6, с. 2-4.
15. Медведев Р.Б., Земляк Е.М. Разработка имитационных моделей химико-технологических установок. - Химическое машиностроение. Респ. научн.-техн. сб., 1983, № 37, с.110-112.
16. Муравьев А.И., Земляк Е.М., Медведев Р.Б. О синтезе алгоритма управления установками низкотемпературного разделения газовых смесей. - Химическое машиностроение и технология. Вестник КПИ, 1979, № 16, с.79-82.
17. Брус А.В., Земляк Е.М., Статыха Г.А. Диалоговая автоматизированная система планирования и обработки экспериментов ПЛАН.-Деп.ВИНИТИ, 02.01.1989, №91, ук.№5(211), б/о 834.
18. Муравьев А.И., Земляк Е.М., Бутовец Л.И., Клименко Т.П. Программный модуль управления динамикой одного класса сложных объектов. - В кн.: Проблемы математического, программного и информационного обеспечения АСУ ТП. Тез. докл. Всесоюзн. научн.-техн. конф., Черновцы, 1979, ч.1, с.78-79.
19. Земляк Е.М., Медведев Р.Б. Программные средства имитационного моделирования и отработки алгоритмов управления химико-технологическими процессами. - В кн.: Методы кибернетики химико-технологических процессов. Стендовые доклады. Тез. докл. Всесоюзн. научн. конф., Москва, 1984, с.273.
20. Земляк Е.М., Карасева В.А., Медведев Р.Б. О реализации параллельной работы с базой данных системы управления. - В кн.: Математические методы в химии. Тез. докл. Всесоюзн. конф., Грозный, 1985, с.211-212.
21. Земляк Е.М., Карасева В.А. Программный имитатор динамики функционирования ХТС. - В кн.: Математическое моделирование сложных химико-технологических систем. Тез. докл. Всесоюзн. научн. конф., Одесса, 1985, ч.2, с.131.
22. Системные средства программного комплекса моделирования и исследования АСУ ТП / В.А.Карасева, Е.М.Земляк, Р.Б.Медведев, А.В.Баранов. - Там же, с.132.
23. Земляк Е.М., Карасева В.А., Статыха Г.А. Комплекс имитационного моделирования, исследования и автоматизированного проектирования системы управления одного типа. - В кн.: Автоматизация и роботизация в химической промышленности. Тез. докл. Всесоюзн. конф., Тамбов, 1986, с.201-203.

24. Земляк Е.М. Система имитационного моделирования алгоритмов управления технологическими процессами. В кн.: САПР и АСУ ТП в химической промышленности. Тез. докл. научн.-техн. семинара, Черкассы, 1987, с.6-7.

25. Карасева В.А., Земляк Е.М., Статыха Г.А. Система управления реляционной базой данных СМ ЭВМ.-Там же, с.23-24.

26. Брус А.В., Деменкова О.В., Земляк Е.М. Инструментальный комплекс автоматизированной разработки систем управления ХТП непрерывного типа.- В кн.: Автоматизация и роботизация в химической промышленности. Тез. докл. Всесоюзн. конф., Тамбов, 1988, с.188-189.

27. Земляк Е.М., Карасева В.А., Медведев Р.Б. Принципы построения программного тренажера операторов автоматизированного ХТК. - Там же, с.286-288.

28. Программный комплекс автоматизированного моделирования компьютерных систем управления ХТП / А.В.Брус, Е.М.Земляк, В.А.Карасева, Г.А.Статыха. - В кн.: Математическое моделирование сложных химико-технологических систем. Тез. докл. Всесоюзн. научн. конф., Казань, 1988, с.188.

29. Брус А.В., Земляк Е.М. Автоматизированная система синтеза математических моделей химико-технологических объектов. - В кн.: Повышение эффективности, совершенствование процессов и аппаратов химических производств. Тез. докл. Респ. конф., Львов, 1988, ч.2, с.64.

30. Брус А.В., Земляк Е.М., Статыха Г.А. Автоматизированная система идентификации математических моделей объектов управления. - В кн.: САПР и АСУ ТП в химической промышленности. Тез. докл. научн.-техн. семинара, Черкассы, 1989, с.49.

31. Программный комплекс автоматизации процесса разработки систем управления непрерывными ХТП/ А.В.Брус, О.В.Деменкова, Е.М.Земляк и др. - Там же с. 58-59.

32. Земляк Е.М. Метод минимизации погрешности численной оценки производных при решении задач оптимизации и расчета ХТС. - В кн.: Математические методы в химии. Тез. докл. Всесоюзн. конф., Новочеркасск, 1989, с.101.

33. Земляк Е.М. Язык имитационного моделирования объектов и систем управления. - В кн.: САПР и АСУ ТП в хим. промышленности. Тез. докл. научн.-техн. конф., Черкассы, 1991, с.45-46.

34. Земляк Е.М., Карасева В.А., Деменкова О.В., Мирошниченко Е.Ю. Программный решатель задач моделирования. - В кн. Математические методы в химии. Тез. докл. Всеросс. конф., Тула, 1993, с. 90.

35. Земляк Е.М. Комбинированная процедура идентификации математических моделей. - Там же, с. 161.

36. Земляк Е.М. Численно-аналитический метод решения систем дифференциальных уравнений. - Там же, с. 11.

Особистий внесок автору у зміст зазначених вище робіт:

- методологічні аспекти моделювання та реалізація структури і дисципліни функціонування інтегрованої моделювочної системи /1, 2, 11, 19, 21, 22, 23, 24, 26, 27, 28, 31, 34/;
- лінгвістичні засоби опису моделей, алгоритми їх аналізу, трансляції і розрахунків /7, 8, 9, 10, 12, 25, 33/;
- методики та алгоритми розрахунку стану хіміко-технологічних процесів та об'єктів /1, 18, 21, 23, 24, 26, 36/;
- підходи, методи та алгоритми розв'язування задач мінімізації та ідентифікації /4, 5, 13, 15, 17, 29, 30, 32, 35/;
- модельні уявлення хіміко-технологічних об'єктів та елементів систем керування /3, 6, 14, 15, 16, 17, 18/;
- інформаційно-програмне забезпечення моделювочих засобів /1, 7, 10, 12, 20, 22, 25/.

Zemlyak E.M. Computer-aided system for simulation of continuous chemical technological processes and objects. Doctor of technical science thesis on speciality 05.13.02 - mathematical modelling in scientific research. Kiev Polytechnic Institute, Kiev, 1996. Thesis information was published in more than 50 publications, which contain development of structure and discipline of functioning of integrated simulation system, development of lingual software, algorithms of control, transformation and calculation of mathematical models, research of efficiency of used criteria, methods, their modifying, development of algorithms for solution of simulation problems in direct and inverse form, used of development soft-ware on representative number of real simulation and modelling tasks.

Земляк Е.М. Система компьютерного моделирования непрерывных химико-технологических процессов и объектов. Диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 05.13.02 – математическое моделирование в научных исследованиях. Киевский политехнический институт, Киев, 1998 г. Материалы диссертации опубликованы более, чем в 50 работах и содержат разработку структуры и дисциплины функционирования интегрированной системы моделирования, разработку лингвистического обеспечения, алгоритмов контроля, преобразования и расчета математических моделей, исследование эффективности применяемых критериев, методов, их модификацию, разработку алгоритмов, обеспечивающих решение основных задач моделирования в прямой и обратной постановках, апробацию разработанного математического и программного обеспечения на представительной выборке реальных задач моделирования.

Ключові слова: моделювання, моделі процесів, імітація, ідентифікація, система, алгоритми, хімічна технологія, лінгвістика, математичне забезпечення, оптимізація, чисельні методи.

Земляк

Підл. до друку 5.04.96. Формат 60×84/16. Папір 80г/м. Друк. офс.
Друк. офс. Умовн. друк. арк. 1,9. Обл.-вид. арк. 1,4. Тир. 120.
Зам. 6-1286.

Київська книжкова друкарня наукової книги. Київ, Б. Хмельницького, 19.

AB 34.631