

**Информационно – коммуникационные и химические технологии**

МРНТИ 27.35.51

<https://doi.org/10.58805/kazutb.v.3.16-24>**КРИТЕРИЙ УПРАВЛЯЕМОСТИ ХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА****Мазакова А.Т., Шаймерден Б.О., Сейлхан Б.Ж., Мазаков Т.Ж.,  
Джомартова Ш.А.**Казахский национальный университет имени аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан,  
[aigerym97@mail.ru](mailto:aigerym97@mail.ru)

**Аннотация.** Современный этап развития нашей цивилизации характеризуется, прежде всего, беспрецедентным ростом мощности и распространенности компьютерной техники, и, вслед за этим, проникновением информатики во все сферы человеческой деятельности. Роботы, всевозможные устройства и компьютерные программы, оснащенные искусственным интеллектом, который уже в ближайшее время превзойдет по своим возможностям человеческий, начинают играть доминирующую роль не только в быту и промышленном производстве, но и в научных исследованиях.

Процессы информатизации быстро проникают и в химию. Этому особенно способствует то, что на протяжении многих лет химия развивалась как преимущественно эмпирическая наука, и потому в ней накоплено огромное количество экспериментальных данных, проведение глубокого анализа которых уже невозможно без применения средств современной информатики.

В данной статье исследована проблема управляемости химического реактора. Актуальность исследуемой в статье состоит также в том, что математическое моделирование позволяет заменить дорогостоящие и небезопасные технологические процессы.

В статье на основе применения интервальной математики получен критерий управляемости химического реактора, который реализован в виде программы.

**Ключевые слова.** интервальная математика, кинетика, математическая модель, управляемость, химическая реакция.

**ХИМИЯЛЫҚ РЕАКТОРДЫҢ БАСҚАРЫЛУ КРИТЕРИЙ****Мазақова А.Т., Шаймерден Б.О., Сейлхан Б.Ж., Мазақов Т.Ж.,  
Джомартова Ш.А.**Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан, [aigerym97@mail.ru](mailto:aigerym97@mail.ru)

**Андатпа.** Біздің өркениеттің қазіргі даму кезеңі, ең алдымен, компьютерлік технологияның күші мен таралуының бұрын-соңды болмаған өсуімен, содан кейін информатиканың адам қызметінің барлық салаларына енуімен сипатталады. Жасанды интеллектпен жабдықталған роботтар, әр түрлі құрылғылар мен компьютерлік бағдарламалар өз мүмкіндіктері бойынша жақын арада адам мүмкіндіктерінен асып түседі, тек күнделікті өмірде және өнеркәсіптік өндірісте ғана емес, ғылыми зерттеулерде де басым рөл атқара бастады.

Ақпараттандыру процестері химияға тез енеді. Бұған әсіресе химияның жылдар бойы басым эмпирикалық ғылым ретінде дамып келе жатқандығы, сондықтан оның терең талдауы қазіргі информатиканы қолданбай мүмкін болмайтын орасан зор тәжірибелік деректердің жинақталуы ықпал етеді.

Бұл мақалада химиялық реактордың басқару мүмкіндігінің мәселесі қарастырылады.

Мақалада зерттелген мақаланың өзектілігі математикалық модельдеу қымбат және қауіпті технологиялық процестерді ауыстыруға мүмкіндік беретіндігінде.

Мақалада интервалдық математиканы қолдану негізінде бағдарлама түрінде жүзеге асырылатын химиялық реактордың басқарылатын критерий алынған.

**Түйін сөздер:** интервалдық математика, кинетика, математикалық модель, басқарылатын, химиялық реакция.

## CONTROLLABILITY CRITERION FOR A CHEMICAL REAKTOR

Mazakova A.T., Shaimerden B.O., Seylkhan B.Zh., Mazakov T.Zh.,  
Jomartova Sh.A.

Al-Farabi Kazakh National University, Almaty city, Kazakhstan,  
[aigerym97@mail.ru](mailto:aigerym97@mail.ru)

**Abstract.** The current stage of development of our civilization is characterized, first of all, by an unprecedented increase in the power and prevalence of computer technology, and, following this, the penetration of computer science into all spheres of human activity. Robots, all kinds of devices and computer programs equipped with artificial intelligence, which will soon surpass human capabilities in their capabilities, are beginning to play a dominant role not only in everyday life and industrial production, but also in scientific research.

Informatization processes quickly penetrate into chemistry. This is especially facilitated by the fact that over the years chemistry has developed as a predominantly empirical science, and therefore it has accumulated a huge amount of experimental data, a deep analysis of which is no longer possible without the use of modern informatics.

In this article, the problem of controllability of a chemical reactor is investigated.

The relevance of the article studied in the article also lies in the fact that mathematical modeling makes it possible to replace expensive and unsafe technological processes. In the article, based on the use of interval mathematics, a criterion for the controllability of a chemical reactor is obtained, which is implemented in the form of a program.

**Keywords.** interval mathematics, kinetics, mathematical model, controllability, chemical reaction.

**Введение.** Работа посвящается математическому моделированию химических процессов, описываемых нелинейными обыкновенными дифференциальными уравнениями. Этими уравнениями описывается широкий класс процессов – горение, поли-

меризация, гетерогенный анализ и т.д. Все они характеризуются сложной динамикой.

За последние годы получила широкое развитие теория математического управления химическими процессами и реакторами. Применение математического мо-

делирования позволяет сократить сроки разработки новых процессов, реакторов, катализаторов, найти области устойчивых и неустойчивых режимов работы реакторов, а также оптимальные параметры управления химическими процессами [1].

При построении математической модели реального химического процесса применяются обыкновенные дифференциальные уравнения для описания систем с сосредоточенными параметрами (например, реакторов идеального смешения) или уравнения с частными производными для описания систем с распределенными параметрами (например, кинетики химических реакций и процесса массопереноса за счет диффузии реагирующих веществ) [2].

В круг проблем качественной теории этих уравнений входят, в частности, вопросы о корректности постановки задачи, о характере поведения решений в целом по времени, о их стабилизации, об устойчивости и управляемости решений, о параметрической зависимости и т.д.

**Методы и постановка задачи.** В статье рассматривается математическая модель химической реакции, протекающей в смеси трех веществ [3-4]:

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -[K_1(u) + K_2(u) + K_3(u)]x_1, \\ \frac{dx_2}{dt} &= K_1(u)x_1 - K_4(u)x_2, \\ \frac{dx_3}{dt} &= K_4(u)x_2 - K_5(u)x_3, \quad 0 \leq t \leq T. \end{aligned} \quad (1)$$

где использованы следующие обозначения:

$t_0 = 0$  – момент времени, соответствующий началу химической реакции;

$T$  – контактное время реакции (или момент окончания реакции);

$u(t)$  – значение абсолютной температуры в рабочей области химического реактора в момент времени  $t$ ;

$x_1(t)$  – концентрация исходного вещества (сырья) в момент времени  $t$ ;

$x_2(t)$  – концентрация промежуточного продукта в момент времени  $t$ ;

$x_3(t)$  – концентрация конечного продукта в момент времени  $t$ ;

$K_i(u), i = \overline{1,5}$  – интенсивности реакций, зависящие от температуры;

$u_{\max}$  – максимально возможная температура в реакторе, определяемая технологическими характеристиками реактора или условием каталитической устойчивости протекающей реакции.

В данной модели предполагается, что кинетические постоянные скорости реакции  $K_i, i = \overline{1,5}$  подчиняются закону

$$K_i(u) = C_i e^{\frac{E_i}{R} \left[ \frac{1}{658} - \frac{1}{u} \right]}$$

$i = \overline{1,5}$ , частотные коэффициенты

$C_i, i = \overline{1,5}$  и энергии активации  $E_i, i = \overline{1,5}$ , согласно [6], имеют значения

$$C_1 = 1,02, \quad C_2 = 0,93, \quad C_3 = 0,386, \quad C_4 = 3,28, \quad C_5 = 0,084, \\ E_1 = 16000, \quad E_2 = 14000, \quad E_3 = 15000, \quad C_4 = 10000, \quad E_5 = 15000,$$

универсальная газовая постоянная имеет значение  $R = 1.9865$ .

Задавая определенный температурный режим протекания реакции, можно влиять на скорость ее протекания и на количество получаемого в результате нее конечного продукта. Таким образом, температура реакции может выступать в качестве управления. В дальнейшем будем считать, что температура изменяется со временем, и будем обозначать ее через  $u(t)$ . Следует отметить, что каков бы ни был химический реактор, абсолютная температура в нем не может опускаться ниже 0 градусов, и повышать-

ся выше некоторого значения, которое для каждого реактора определяется его технологическими характеристиками.

Таким образом, задача управления химическим реактором состоит в нахождении оптимального температурного режима протекания реакции и оптимального контактного времени, которые обеспечивают наибольшую производительность химического реактора.

В момент начала реакции в реакторе отсутствуют промежуточный продукт и конечный продукт, т.е. их концентрации равны нулю. Концентрация же исходного сырья, напротив, максимальна и равна 1. Таким образом, начальные условия имеют вид

$$x_1(0) = 1, \quad x_2(0) = 0, \quad x_3(0) = 0 \quad (2)$$

Как уже отмечалось, температура в рабочей области реактора не может быть отрицательной и превосходить некоторого предельного значения. Таким образом, имеем ограничения на значения управления

$$0 \leq u(t) \leq u_{\max}, \quad \forall t \in [0, T] \quad (3)$$

Предельно возможное значение температуры в рабочей области реактора, выбранное из условий каталитической устойчивости реакции, равно  $u_{\max} = 823$ .

В работе [5] рассмотрена задача выбора оптимального управления химическим реактором. Однако, актуальной остается задача определения управляемости химическим реактором, т.е. существует ли управление  $u(t)$ , удовлетворяющее условию (3), и переводящее систему из состояния (2) в желаемое состояние

$$\begin{aligned} x_1(t+h) &= \text{SubIn}(x_1(t), h * \text{MultIn}(\text{FunInt}([\text{AddIn}(\text{AddIn}(K_1(u), K_2(u), K_3(u(t)))], x_1(t))), \\ x_2(t+h) &= \text{AddIn}(x_2(t), h * \text{SubIn}([\text{MultIn}(K_1(u), x_1(t)), \text{MultIn}(K_4(u), x_2(t))]), \\ x_3(t+h) &= \text{AddIn}(x_3(t), h * [\text{SubIn}(\text{MultIn}(K_4(u), x_2(t)), \text{MultIn}(K_5(u), x_3(t))]), \quad 0 \leq t \leq h. \end{aligned} \quad (7)$$

$$x_1(T) = \bar{X}_1, \quad x_2(T) = \bar{X}_2, \quad x_3(T) = \bar{X}_3 \quad (4)$$

за фиксированное время  $T$ .

**Обсуждение и результаты. Численное решение задач при конкретных исходных данных.** Для решения поставленной задачи применим интервальную математику, введенную в работе [4]. В работе [6] на основе применение интервальной математики получен критерий управляемости нестационарных линейных систем. Однако, рассматриваемая в данной работе система является нелинейной, что значительно усложняет проблему исследования.

Перепишем систему (1) в интегральной форме

$$\begin{aligned} x_1(t) &= x_1(0) - \int_0^t [K_1(u) + K_2(u) + K_3(u)]x_1 dt, \\ x_2(t) &= x_2(0) + \int_0^t [K_1(u)x_1 - K_4(u)x_2] dt, \\ x_3(t) &= x_3(0) + \int [K_4(u)x_2 - K_5(u)x_3] dt, \quad 0 \leq t \leq T. \end{aligned} \quad (5)$$

Дискретизируем систему уравнений (5) с шагом  $h$ : заменим интегралы в правой части (5) рядами

$$\begin{aligned} x_1(t+h) &= x_1(t) - h[K_1(u(t)) + K_2(u(t)) + K_3(u(t))]x_1(t), \\ x_2(t+h) &= x_2(t) + h[K_1(u(t))x_1(t) - K_4(u(t))x_2(t)], \\ x_3(t+h) &= x_3(t) + h[K_4(u(t))x_2(t) - K_5(u(t))x_3(t)], \quad 0 \leq t \leq h. \end{aligned} \quad (6)$$

Пусть представляет  $u$  собой интервал. Обозначим через  $u = (u_{\max}/2, u_{\max}/2)$  – центр интервала  $u = u_{\max}/2$  – (первое число) и радиусом  $u_{\epsilon} = u_{\max}/2$  [7]. Подставляя вместо  $u(t)$  интервал  $(u, u_{\epsilon})$  и применяя к (6) интервальную математику, получим

где  $u$  – представляет собой интервальный вектор управления и, соответственно вектора состояния являются интервальными, все операции в формуле (6) – SubIn, AddIn, MultIn – определены по правилам, определенным в работе [8]. Функция  $FuncInt(u)$  также определена по правилам вычисления нелинейных интервальных функций [8]. Вычисляя по интервальным формулам (7) по времени от 0 до  $T$ , получим при  $t = T$  интервальный вектор, который обозначим через  $y_T = (x_1(T), x_2(T), x_3(T))$ .

Составим  $x = (\bar{X}_1, \bar{X}_2, \bar{X}_3)$ , в котором элементы имеют заданные значения (4).

**Теорема.** Для того чтобы система (1)-(3) была управляемой достаточно, чтобы вектор  $\bar{x}$  принадлежал интервальному вектору  $y_T$ .

Для численного моделирования на языке Delphi [9-10] разработана программа, реализующая вычисления предложенного критерия управляемости и арифметические операции интервального вычисления.

Численные расчеты показали, что за время  $T = 1$  система (1) при выполнении ограничений (3) может быть переведена из начального состояния (2) в следующие состояния:

$$\bar{X}_1 \in (0.086, 0.090), \bar{X}_2 \in (0.059, 0.063), \\ \bar{X}_3 \in (0.323, 0.325)$$

**Выводы.** В статье исследована математическая модель химического реактора, описываемого нелинейными обыкновенными дифференциальными уравнениями.

На основе применения интервальной математики получен критерий управляемости, который реализован в виде программы с использованием библиотеки интервальных функций [8].

Практическая ценность программы состоит в том, что разработанные в ней технология и алгоритмы позволяют решить проблему управляемости объектов различной природы и могут быть применены для исследования электроэнергетических, робототехнических систем и т.д.

*Работа выполнена за счет средств программно-целевого финансирования научных исследований на 2021-2022 годы по проекту IRN OR11465437 «Development of the national electronic data bank on the scientific zoological collection of the Republic of Kazakhstan, ensuring their effective use in science and education».*

## Литература

1. Слинько М.Г. Моделирование химических реакторов. – Новосибирск: Наука. Сибирское отделение, 1996. – 96 с.
2. Акрамов Т.А. Качественный анализ эволюционных уравнений, описывающих химические процессы // Автореф. доктор. диссер. по спец. 05.13.16, Новосибирск: 1997. – 33 с.
3. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. – М.: Химия, 1976. – 464 с.
4. Кафаров В.В., Глебов С.А. Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высшая школа, 1991 – 429 с.
5. Айсагалиев С.А., Кабидолданова А.А., Оспанова М.К. К теории оптимального управления химическим реактором // Известия НАН РК. Серия физико-математическая. – 2003/ – № 5. – С.53-61.

6. Мазакон Т.Ж., Джомартова Ш.А. Применение интервального анализа в практических вычислениях //Выч.технологии. – 2002. –№ 7. – С.6.
7. Мазакон Т.Ж., Жанабаев Е.З., Джомартова Ш.А. Критерий управляемости нестационарных линейных систем //Вестник МОН-НАН РК. – 2003. – № 1. – С. 5.
8. Свидетельство о государственной регистрации прав на объект авторского права №7576 от 17 января 2020 «Библиотека интервальных функций» (программа для ЭВМ), авторы: Зиятбекова Г.З., Мазакон А.Т., Мазакон Т.Ж., Джомартова Ш.А., Карымсакова Н.Т., Амирханов Б.С., Жолмагамбетова Б.Р.
9. Фленов М.Е. Библия Delphi. – Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2014. – 688 с.
10. Культин Н.Б. Основы программирования в Turbo Delphi. – Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2012. – 384 с.

### References

1. Slinko M.G. Simulation of chemical reactors. – Novosibirsk: Science. Siberian branch, 1996. – 96 p.
2. Akramov T.A. Qualitative analysis of evolutionary equations describing chemical processes // Avtoref. doctoral dissertation according to special 13/05/16, Novosibirsk: 1997. – 33 p.
3. Kafarov V.V. Methods of cybernetics in chemistry and chemical technology. – M.: Chemistry, 1976. – 464 p.
4. Kafarov V.V., Glebov S.A. Mathematical modeling of the main processes of chemical production. – M.: Higher School, 1991 – 429 p.
5. Aisagaliev S.A., Kabiloldanova A.A., Ospanova M.K. On the theory of optimal control of a chemical reactor // Izvestiya NAS RK. Physico-mathematical series. – 2003. – No. 5. – P.53-61.
6. Mazakov T.Zh., Jomartova Sh.A. Application of interval analysis in practical calculations // Computational technologies. – 2002. – No. 7. – P.6.
7. Mazakov T.Zh., Zhanabaev E.Z., Jomartova Sh.A. Controllability criterion for non-stationary linear systems // Bulletin of the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan. – 2003. – No. 1. – P. 5.
8. Certificate of state registration of rights to the object of copyright No. 7576 dated January 17, 2020 “Library of interval functions” (computer program), authors: Ziyatbekova G.Z., Mazakova A.T., Mazakov T.Zh., Jomartova Sh .A., Karymsakova N.T., Amirkhanov B.S., Zholmagambetova B.R.
9. Flenov M.E. Delphi Bible. – St. Petersburg: BHV-Petersburg, 2014. – 688 p.
10. Kultin N.B. Basics of programming in Turbo Delphi. – St. Petersburg: BHV-Petersburg, 2012. – 384 p.