

Интеллектуальные моделирующие комплексы технологических процессов в атомной энергетике

А.А. Быков, О.Б. Громов, Л.А. Карпюк, Е.М. Максимов, П.И. Михеев, С.О. Травин, Д.В. Утробин

Аннотация. В статье рассматриваются методы разработки интеллектуальных моделирующих комплексов технологических процессов на примере химико-технологических процессов (ХТП) в атомной энергетике. Предложен подход к созданию интерфейса для решения задач математического моделирования ХТП. Предложены методы формирования и настройки баз знаний производственных процессов на основе интеллектуального анализа данных. Представлена структура интеллектуального анализатора для моделирующих комплексов технологических процессов с применением прогнозирующих моделей процесса, настраиваемых в реальном времени с использованием знаний.

Ключевые слова: управление и автоматизация производства, химико-технологические процессы, атомная промышленность, интеллектуальная информационная система, программно-аппаратный комплекс, структура интеллектуального анализатора и идентификатора, интерфейс для решения задач математического моделирования.

Введение

Моделирующие комплексы технологических процессов в условиях функционирования на производстве современных средств автоматизации и информационных технологий могут быть использованы с различными целями: на стадии проектирования производственных установок, в качестве тренажеров для технологического персонала и обучающих систем для студентов профильного образования. Однако наибольший интерес такие программно-аппаратные комплексы представляют для систем автоматизированного управления технологическими процессами [1]. В этом случае они играют роль идентификатора и предоставляют возможность формировать в режиме реального времени прогнозирующие модели для параметров процесса.

Особенно эффективной представляется разработка программно-аппаратных комплексов

моделирования и оптимизации, относящихся к классу систем поддержки принятия решений (СППР), основанных на знаниях (knowledge based system) [2]. Основным атрибутом таких систем является способность накопления и использования знаний (формализованных посылок, выводов, закономерностей, относящихся к исследуемому объекту), а также формирования рекомендаций по управлению в режиме реального хода процесса. По сравнению с применяемыми сегодня на производстве СППР, системы такого типа обретают способность корректировать управление в зависимости от особенностей текущей производственной ситуации. Это может быть формализовано как введение в вектор состояния системы компонент, вычисляемых с использованием текущих знаний. Такой подход позволяет учитывать, в том числе, изменения, которые невозможно было предвидеть и поэтому – предусмотреть в изначальной структуре модели. Интеллектуальность модели предподре-

деляет гибкость в управлении. Применение в управлении прогнозирующих моделей, использующих пополняемую в темпе процесса базу знаний, предоставляет неоценимые возможности с точки зрения диагностики технологического оборудования и контроля приближения режима к критическим границам, в частности, к границе устойчивости объекта.

При рассмотрении вопросов создания математического обеспечения для решения прямых задач химической кинетики обычно основное внимание уделяется подбору алгоритмов и аспектам численного интегрирования систем дифференциальных уравнений. В то же время нельзя не отметить ряд трудностей, возникающих при создании интерфейса для ввода данных исходной задачи. Для используемых сегодня моделирующих систем характерно наличие интерфейса, который не только требует от пользователя знания более или менее специализированного системного языка сверхвысокого уровня, но и допускает введение неточных, искаженных, ошибочных или даже внутренне противоречивых уравнений, не соответствующих химическому механизму процессов, протекающих в моделируемой системе. Так, несложная задача ввода правых частей уравнений химической кинетики в случае недостаточно проработанного интерфейса ввода превращается в труднопреодолимое препятствие. То же самое можно сказать и о задании начальных (граничных) условий и, тем более, - о вводе ограничений, задаваемых неравенствами (например, если известна оценка сверху или снизу для диапазона значений константы скорости какой-либо из стадий). Поэтому разработка конструктивных методов создания интерфейсов представляет особый интерес для пользователей.

Программно-аппаратный комплекс моделирования и оптимизации ХТП атомной энергетике как интеллектуальная информационная система

Специалисты в области разработки интеллектуальных систем управления сегодня делают основной акцент на развитие направлений

искусственного интеллекта, связанных с моделированием. Современный этап разработки интеллектуальных систем управления в значительной степени ориентирован на разработку систем с интеллектуальным интерфейсом: от самообучающихся, адаптивных, – до гибридных систем искусственного интеллекта, объединяющих возможности нейронных сетей и моделей представления знаний [3].

В настоящей статье представлен метод создания программно-аппаратного моделирующего комплекса, представляющего собой информационно-управляющую систему с прогнозирующей моделью, основанной на знаниях, с интерактивным интерфейсом, учитывающим не только характеристики моделируемых процессов, но и особенности текущей производственной ситуации.

Структура интеллектуального анализатора для моделирующих комплексов производственных процессов

Процесс создания математической модели технологического процесса рассмотрим на примере химико-технологических процессов в атомной энергетике. Моделирование должно обеспечивать не только достаточно точное описание физико-химических свойств реагентов, участвующих в процессе, но и адекватно отражать конкретику протекающей реакции и технологической установки и максимально возможным образом использовать всю имеющуюся априорную информацию.

Например, необходимо учитывать все ограничения и особенности, определяемые как технологическим регламентом, так и экспертными мнениями.

В качестве *эксперта*, анализирующего ситуацию, выступает лицо, принимающее решения. В этом качестве могут выступать как оператор технологической установки, так и менеджеры более высоких звеньев, просчитывающие, например, экономику процессов с целью прогнозирования и т.п. Их мнение учитывается посредством интерактивного интерфейса. Возможен вариант, когда эксперт предлагает опорный вариант решения задачи.

Далее начинается работа *интеллектуального анализатора* текущей ситуации с варьированием отдельных параметров с целью оптимизации модели.

Интеллектуальный анализ, являющийся основой поддержки принятия решений, реализует взаимодействие Идентификатора и Базы знаний (БЗ).

Предлагаемый метод разработки систем моделирования технологических процессов химического производства является интеллектуальным в силу трех признаков:

- построение модели процесса определенных технологических знаний;
- привлечение экспертных знаний для оптимизации модели;
- формализация экспертных знаний посредством нечеткого моделирования.

В общем случае модель процесса используется для анализа, прогнозирования и управления (либо поддержки принятия решений) [5-6].

Процесс вычисления осуществляется в блоке «Вычислитель». Блок состоит из Парсера, осуществляющего синтаксический и семантический анализ сформированной математической модели и Сольвера. В моделирующем комплексе могут быть реализованы различные схемы, позволяющие получать решения уравнений / систем уравнений.

Получаемое решение проверяется на пригодность посредством *сравнения с результатом эксперимента или с реальным выходом объекта*. На этом этапе осуществляется дополнительная настройка параметров уравнений.

«Вычислитель», «Сравнение с реальным выходом» и «Настройка параметров уравнений» образуют блок «Идентификатор».

Использование дополнительной априорной информации для построения модели и интеллектуальный анализ архивов технологических данных

В *Базе знаний* содержится ряд библиотек, накапливающих «производственный опыт»: синхронизированные во времени входы и соответствующие им выходы; уравнения для известных физико-химических процессов; архивы

настроенных моделей; архивы формализованных ситуаций – «закодированные» признаки и характеристики текущего состояния.

Такие нетривиальные библиотеки требуются как для экспертного анализа, так и для функционирования интеллектуальных алгоритмов, моделирующих процесс принятия решений человеком-оператором. С помощью таких алгоритмов можно осуществлять аналитические операции, которые реальному оператору, анализирующему ситуацию, могут оказаться сложны, либо он не сможет учесть все факторы, неявно влияющие на ход процесса, т.е. не моделируемую внутреннюю динамику процесса.

В последнем случае хорошо зарекомендовал себя метод интеллектуального анализа данных, получивший название «ассоциативного поиска». Метод использует для анализа и прогноза достаточное количество *аналогов* – ситуаций, близких в соответствии с определенным критерием к текущей ситуации [4].

В результате интеллектуального анализа экспертом (либо алгоритмом) набора данных, составляющих текущее состояние, он выдает рекомендацию по «управлению».

В данном контексте под управлением понимаем корректировку математической модели процесса перед непосредственным вычислением значений параметров процесса.

Схема анализа и/или управления с помощью интеллектуальной системы моделирования

Если корректировку модели осуществлять не нужно, данное приложение ограничивается анализом различных вариантов имитационного моделирования, сравнением различных вариантов и выбором приемлемого [7], а также сценарным прогнозированием (Рис. 1).

Идентификатор

Рассмотрим более детально схему идентификатора (Рис. 2). На вход идентификатора поступают различные элементы формализованного описания как самого процесса, так и его текущего состояния.

К описанию процесса относятся: его физико-химические признаки, позволяющие описать

процесс с помощью известных математических моделей и химических уравнений. Выбор конкретного описания процесса осуществляется из Библиотеки моделей, содержащейся в Базе технологических знаний. К этому же классу относится учет отдельных данных технической документации, в частности, технологического регламента, что позволяет ввести все необходимые ограничения.

Описание текущего состояния

Схема транспортных потоков, формируемая пользователем системы с помощью интерактивного интерфейса, позволяет конкретизировать описание моделируемого процесса в виде дифференциальных либо разностных уравнений. Это же относится (для химико-технологических процессов) к перечню химических компонентов, начальным значения их концентраций и ряду других параметров, характеризующих данный моделируемый процесс.

Конкретизирует задачу введение замечаний эксперта (технолога, оператора технологической установки и т.п.) по текущей ситуации. Эти замечания также вводятся интерактивно в виде выбора из предлагаемого набора ситуаций

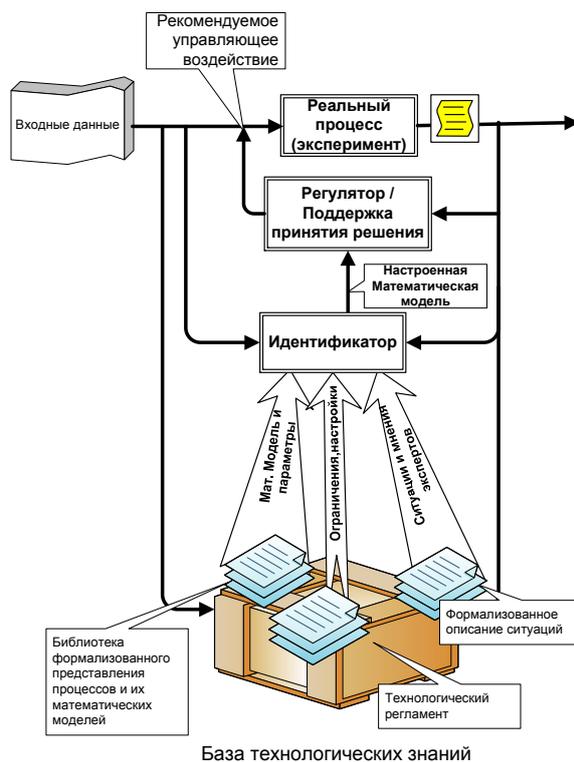


Рис. 1. Структура системы анализа и/или управления на основе интеллектуальной системы моделирования

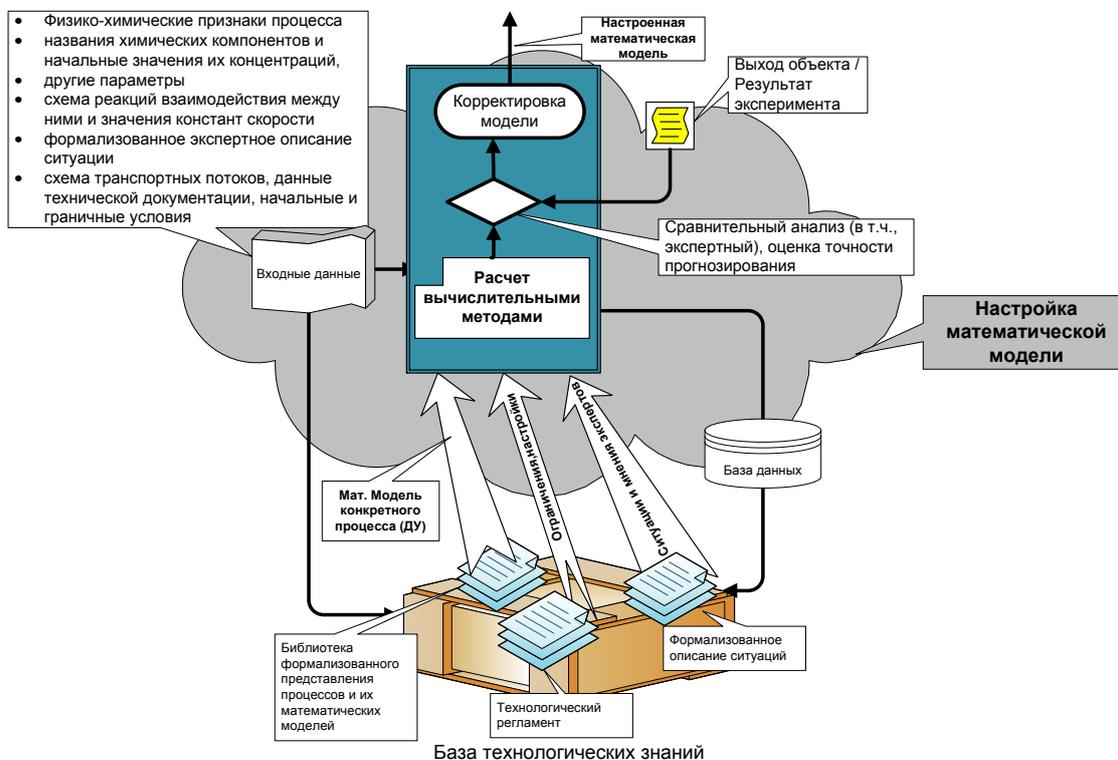


Рис. 2. Идентификатор

с возможной детальной конкретизацией значений отдельных параметров. Набор ситуаций содержится в соответствующей библиотеке базы знаний.

Далее замечания эксперта могут быть обработаны в системе (формализованы) с последующим учетом при настройке модели. Формализация осуществляется на основе нечетких производственных правил, которые также содержатся в БЗ.

В идентификаторе осуществляются следующие операции:

- формирование математической модели конкретного процесса на основе схемы транспортных потоков и задания ограничений и начальных условий;
- корректировка модели с учетом описания текущего состояния;
- расчет процесса по созданной модели дифференциальных уравнений; данная операция включает в себя решение систем дифференциальных уравнений с помощью известных вычислительных методов;
- сравнение с результатами эксперимента (псевдо-эксперимента) и корректировка модели;
- занесение ситуации и результатов моделирования в БЗ с целью ее дальнейшего обучения.

Описание разработки структуры базы знаний

Знания, извлекаемых из технологического архива, основаны на применении интеллектуального анализа данных. Эффективным методом является кластеризация данных. База знаний пополняется и корректируется в темпе технологического процесса [8]. Основными элементами структуры базы для формирования и хранения знаний, интерпретируемых как закономерности, характеризующие технологический процесс (ТП), являются следующие.

– **База реального функционирования ТП** содержит наборы значений входов и соответствующих им выходов (готовая продукция, побочная продукция, отходы) по данным мониторинга – из архива.

– **Блок оценки результатов** – формализованные значения оценок экспертов (например, с помощью нечетких моделей) и оценок, получа-

емых с помощью интеллектуальных алгоритмов идентификации в соответствии с выбранными критериями.

– **База технологических регламентов** содержит (в формализованном виде):

- методы производства;
- технические средства;
- технологические нормативы:
 - условия осуществления технологического процесса;
 - операции;
 - правила выполнения операций в различных ситуациях;
 - реальный порядок осуществления технологического процесса;
 - правила ведения режима;
 - параметры режима:
 - температуры;
 - давления;
 - расходы;
 - скорости реакций;
 - ...;
 - последовательности ведения режима.

Формализованные индикаторы нештатных ситуаций и характеризующие их параметры, наборы параметров, характеризующих особенности протекания процесса, например, для процессов производства ядерного топлива:

- тепловой эффект реакции;
- значение изменения энтальпии;
- изменение числа молей газообразных реагентов;
- оценка изменения энтальпии реакции с температурой
- теплоемкости;
- оценка температуры смены знака свободной энергии;
- вычисленное распределение температур по реактору;
- температура, при которой достигается нулевое значение свободной энергии;
- учет влияния пространственных и временных факторов;
-

– **База формализованных экспертных оценок ситуаций**, содержащая комментарии экспертов в виде правил нечеткого вывода.

– **База библиотек формализованного представления процессов и их математических моделей** - наборы уравнений, соответствующие элементам схем транспортных потоков.

– **База данных реального функционирования технологического процесса** - данные технологического оборудования): фактические расходы в данный момент времени технологических параметров: расходы давления, температуры и т.д.; в данной базе отражаются также возможные отклонения от штатных ситуаций (набор шаблонов), дополнительные ограничения.

– **База построенных математических моделей процессов** - архив построенных моделей.

– **Архив уточненных моделей** с использованием дополнительной априорной информации из Базы знаний.

– **Архив настроенных моделей** посредством идентификатора.

Поведение Базы знаний как класса информационной системы

Интеллектуальный анализ качества построенных моделей, являющийся основой поддержки принятия решений, определяется результатом взаимодействия Идентификатора и Базы знаний.

При этом *эксперт* может предложить опорный вариант решения задачи и, возможно, вводит дополнительные ограничения, связанные с оценкой ситуации по оперативным данным. Далее возможно в интерактивном режиме варьирование отдельных параметров, с последующей проверкой критериев эффективности на стадии идентификации.

В моделирующей системе предусмотрен другой способ формирования решения о корректировке модели, основанный на применении интеллектуальных алгоритмов идентификации и прогнозирования.

Они называются алгоритмами ассоциативного поиска и реализуют моделирование процесса принятия решений на основе извлечения и интеллектуального анализа знаний, содержащихся в Базе данных.

По сути, алгоритм фиксирует формализованную ситуацию (которая характеризуется текущим значением вектора состояния, вектора

входа и возможных дополнительных ограничений), и сравнивает ее с набором формализованных ситуаций из архива по выбранному критерию (*метод аналогов*). В общем случае задача формулируется в терминах логики предикатов. Общие знания, используемые для нахождения решений, называют *механизмом вывода решений* (выводом логических заключений).

Системы в этом случае выполняют функцию экспертов и обладают *компетентностью* (искусственно воспроизводят компетентность экспертов). Применение такого алгоритма может дать существенно более эффективный результат по сравнению с экспертной системой, особенно для сложных задач.

Возможна реализация гибридного метода – с одновременным использованием экспертных рекомендаций и результатов работы алгоритма ассоциативного поиска решений.

База знаний и заложенный в систему механизм вывода решений составляют ядро любой интеллектуальной информационно-управляющей системы. Эти компоненты определяют две основные интеллектуальные характеристики системы: способность хранить знания о чем-то и умение оперировать этими знаниями.

Механизм вывода решений представляет обоснование, прогнозирование и подтверждение своих заключения и рекомендации.

В данном моделирующем комплексе используют два метода логического вывода: а) прямой логический вывод – для поиска решений просматривается база знаний; б) обратный логический вывод – система выдвигает гипотезу, а затем проверяет с помощью элементов базы знаний для возможного опровержения или поддержки.

Чтобы реализовать *объяснение*, система способна преобразовать экспертные эвристические правила в цепочку рассуждений, которая покажет, как начальное множество данных и утверждений, а также набор эвристических или иных правил приводят систему к данному заключению.

Оценка ситуаций, складывающихся во внешней среде, а также необходимость оценки развития событий в результате принятия решения, т.е. определение и прогнозирование наиболее важных свойств процесса на основе интерпретации имеющихся данных, является

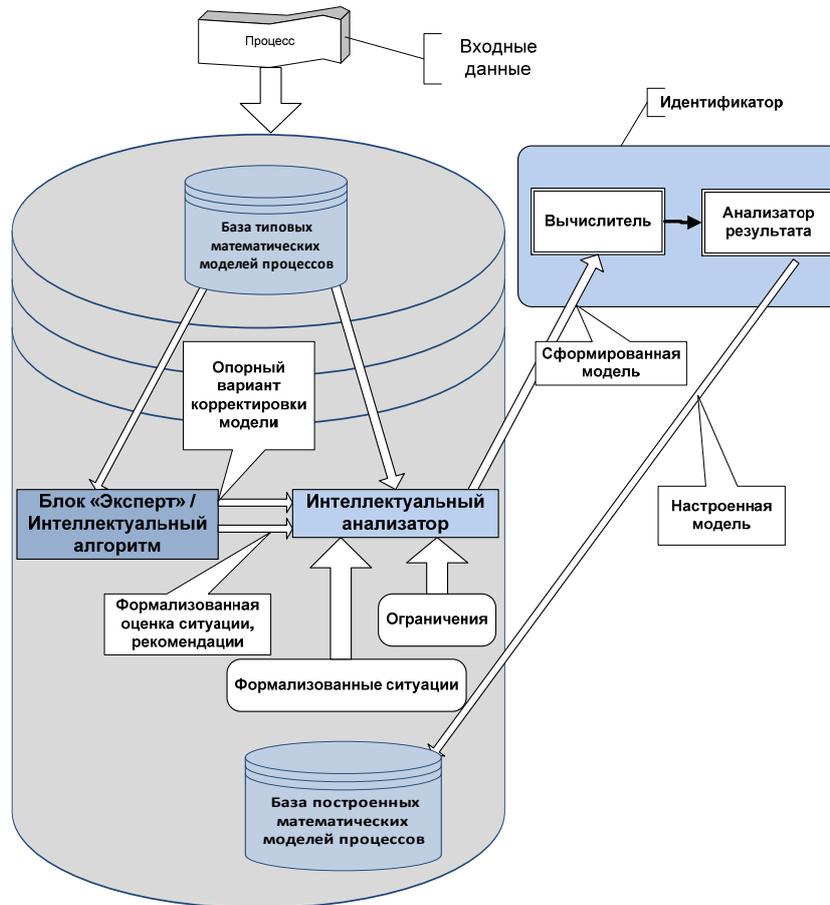


Рис.3. База знаний в интеллектуальной системе моделирования технологических процессов

важнейшей операцией системы. На основании этих оценок и прогнозов вырабатываются обоснованные рекомендации по ведению технологического процесса.

Система содержит также интеллектуальный редактор базы знаний и обладает способностью к обучению, т. е. умением:

- приобретать новые знания;
- расширять базу знаний;
- корректировать знания в соответствии с изменяющимися условиями и ситуацией;
- пополнять не только архивы входов, настроенных моделей и результатов, но и формализованные значения различных производственных ситуаций.

Благодаря возможности использования интеллектуальных алгоритмов идентификации, система обладает способностью к формированию *метазнаний* (такие системы получили название *мудрых*):

- формулировать и излагать основные правила, которые обобщают опыт;
- принимать к сведению допустимые уровни риска и «действовать по обстоятельствам», например, запрашивать мнение нескольких экспертов (либо эксперта и интеллектуального алгоритма), применять многоуровневые формальные модели к данным на выходе или комбинировать их.

В данном комплексе используют эвристический подход (в отличие от логического формального) к представлению знаний. Эвристический (когнитивный) подход ориентируется на эвристическое моделирование.

При моделировании технологических процессов в качестве средства типизации используется графическое представление, которое отражает процедуру моделирования как систему, позволяя разложить эту сложную процедуру на отдельные составляющие и представить алго-

ритм моделирования в виде композиции шаблонов объектов, их взаимодействию, кооперации и воздействию на систему.

Уделяется первоочередное внимание тому, чтобы процедура была реализуемой, а генерируемая и настраиваемая модель – оптимальной в смысле выбранного критерия с учетом ситуативного контекста.

Анализ контекста (состояния процесса, дополнительных технологических признаков и ограничений и т.п.) осуществляется на основе анализа и учета в модели формализованной экспертной информации. Реализация такой процедуры проводится с использованием средств нечеткого моделирования.

Реализовать указанное графическое представление процедуры моделирования, на наш взгляд, целесообразно на основе методологии SADT (Методология структурного анализа и проектирования (Structured Analysis and Design Technique)).

Методология SADT является основой семейства методологий моделирования IDEF (Integration Definition for Function Modeling). В данном комплексе методологии моделирования реализуются средствами языка UML.

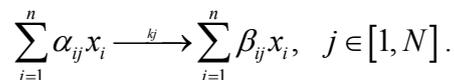
Интерфейс для решения задач математического моделирования

Формализм прямой задачи химической кинетики достаточно прост, но необходимо сделать интерфейс ввода схемы механизма химической реакции и стартовых значений предельно простым, ясным и дружелюбным для пользователя, чтобы в дальнейшем исключить возможность ошибок и/или неправильного толкования составленной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ).

Функционирование системы на временном интервале $[t_0, t_k]$ характеризуется вектором состояния (концентраций) $x \in \mathcal{R}^n$ и задается отображением $C: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^n$, определяющим вектор – функцию развития во времени начального состояния, при начальных условиях $x(t_0) \in x_0$.

Химическая система, содержащая вещества $x_i, i \in [1, n]$ (включая промежуточные неста-

бильные) в общем случае описывается набором N химических уравнений (стадий):



Для обратимых (или квазиравновесных) реакций отдельно учитываются прямая и обратная стадии. Значения стехиометрических коэффициентов α_{ij} участия i -го вещества в j -ой реакции (и, аналогично, β_{ij} – для продуктов реакции) *a priori* считаются равными молекулярности стадии по данной компоненте и, тем самым, являются натуральными числами в диапазоне от 1 до 3. В случае, если компонента не участвует в какой-то стадии, ее стехиометрические коэффициенты обращаются в нуль. В любом случае, предельное количество реагентов, как в левой, так и в правой части химического уравнения не должно превышать трех, что соответствует реальному существованию элементарных актов не выше третьего порядка:

$$(\forall j) \Rightarrow 1 \leq \sum_{i=1}^n \alpha_{ij} \leq 3 \quad 0 \leq \sum_{i=1}^n \beta_{ij} \leq 3$$

Различие в нижних пределах сумм стехиометрических коэффициентов для исходных реагентов (1) и продуктов реакции (0) связано с тем, что нет смысла рассматривать процессы «самозарождения» материи из отсутствующих компонентов, тогда как превращение веществ в ходе распада в «ничто» просто соответствует отсутствию интереса исследователя к судьбе конечных продуктов.

В подавляющем большинстве имеющихся пакетов моделирования отображение ограничено классом систем (ОДУ) в форме Коши:

$$\dot{x} = f(x(t))$$

с правой частью, даваемой законом действующих масс (для j -ой стадии):

$$w_j = k_j \prod_{i=1}^n (x_i)^{\alpha_{ij}}, \quad j \in [1, N]$$

или для m -го компонента:

$$\dot{x}_m = - \sum_{j=1}^N k_j \cdot (\alpha_{mj} - \beta_{mj}) \cdot \prod_{i=1}^n (x_i)^{\alpha_{ij}}.$$

В компактной форме система ОДУ может быть представлена в виде:

$$\dot{x} = \Gamma^T w$$

здесь Γ – результирующая стехиометрическая матрица:

$$\gamma_{ij} = \beta_{mj} - \alpha_{mj}$$

Обычно при разработке программ имитационного моделирования кинетических систем подчинение правой части СОДУ закону действующих масс игнорируется, и вместо этого используется гораздо более мягкий критерий Липшица. В то же время, использование закона действующих масс не только облегчает ввод данных исключая ошибки, но и дает возможность вычисления якобианов в явном виде, что в разы сокращает время работы интеграторов, использующих неявные схемы, т.е. неразрешенные относительно \dot{x}_i :

$$J_{mj} = \frac{\partial \dot{x}_m}{\partial x_j} = - \sum_{j=1}^N k_j \cdot (\alpha_{mj} - \beta_{mj}) \cdot \alpha_{lj} \prod_{i=1}^n (x_i)^{\alpha_{ij}-1}.$$

Тем самым, выбор полиномов степени не выше третьей, соответствующих закону действия масс, в качестве базисного набора и основного продукта для входного интерфейса оправдан не только с точки зрения надежности и удобства пользователя, но и позволяет эффективно улучшить работу интеграторов.

Алгоритм работы интерфейса ввода выглядит следующим образом.

1) Задание списка идентификаторов всех веществ, включая промежуточные, в удобной нотации. Это могут быть привычные химические формулы (типа H_2SO_4 , H_2O_2 , UF_6 , HF), или удобные мнемонические названия на понятном пользователю языке (типа «серная кислота», «Hydrogen peroxide», «Uranium hexafluoride»), или осмысленные идентификаторы произвольного вида. Единственным ограничением является то, что идентификатор не может начинаться с цифры. Декларация всех значимых веществ на самой ранней стадии позволяет избежать случайных опечаток и гарантирует от появления «двойников».

2) Задание начальных концентраций. В подавляющем большинстве случаев ненулевые значения имеют концентрации двух-трех исходных веществ. Для продуктов реакции и активных ин-

термедиатов по умолчанию подставляются нулевые концентрации, что, впрочем, может быть легко отредактировано пользователем.

3) Составляется полная схема (механизм) взаимодействия реагентов в стандартной для химической кинетики нотации (например, $H_2O_2 + Fe^{2+} \rightarrow OH^- + Fe^{3+}$ для реактива Фентона; здесь в составе продуктов реакции «опущен» ион гидроксония, как не влияющий на дальнейшее взаимодействие реагентов, однако если пользователя интересуют более тонкие эффекты, связанные с изменением pH среды, он имеет возможность включить его в состав продуктов реакции).

Важно, что выбор участников в схеме производится строго по списку, задекларированному в п.1. Естественным ограничением является также то, что ни среди реагентов, ни среди продуктов элементарного акта общее количество участвующих частиц не может превышать трех, что вытекает из требований формальной кинетики. Любые более сложные взаимодействия должны конструироваться с помощью создания промежуточных комплексов, что не составляет труда, но зато гарантирует от использования физически бессмысленных числовых параметров.

4) По умолчанию все введенные реакции имеют нулевые константы скорости. До начала расчета необходимо подставить справочные или предполагаемые значения. Если какие-либо из стадий оставлены с нулевыми константами, их присутствие не повлияет на результаты расчета (в том числе и на затраченное интегратором время). Удалить реакции с нулевыми скоростями никогда не поздно, однако в ряде случаев имеет смысл резервировать их с целью последующего усложнения и уточнения модели.

Одной из первых реально работающих программных систем, основанных на перечисленных принципах, была система, созданная в Институте химической физики РАН [9]. Может показаться, что добровольный отказ от систем с более сложным видом правых частей, в том числе явно содержащих зависимость от времени, снижает функциональные возможности системы, однако это не так. Действительно, в ряде случаев для имитационного моделирования гибридных систем [10] (например, содержащих

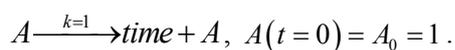
химическую часть и управляющие воздействия программируемых клапанов) требуется задание явных функций от времени.

В монографии [11] применительно к языку LISMA (язык инструментальных средств) говорится: «Программное обеспечение нового приложения – задач химической кинетики со своими особенностями входного формата данных – потребовало минимальных затрат исходной спецификации входного языка».

Покажем, что инструментальный комплекс, ориентированный на интерфейс решения чисто химических задач, с помощью набора несложных приемов, основанных на использовании быстрореагирующего «псевдовещества» (при необходимости - нескольких) может столь же просто моделировать любые дифференциальные уравнения с произвольной правой частью. Фактически речь идет о создании вспомогательного инструментария генерации элементарных функций с помощью чисто химико-кинетических приемов. Арсенал химической кинетики позволяет сделать это.

«В настоящее время имеются такого типа программы, но они, как правило, ориентированы на конкретные численные методы. Некоторые из указанных программ труднодоступны и в ряде случаев требуют дополнительного программирования со стороны предметного пользователя. Этим обусловлена актуальность задач разработки математического и программного обеспечения для решения задач химической кинетики методом компьютерного моделирования» [11].

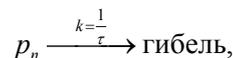
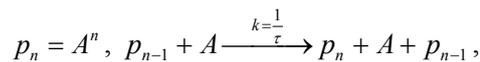
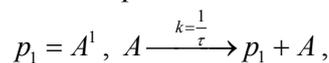
Предлагается схема моделирования на основе несложной формализации. Первый шаг – это введение в рассмотрение «псевдовещества», концентрация которого будет тождественна времени. Такое «псевдовещество» конструируется с помощью реакции:



Обратим внимание, что «генератор времени» A присутствует и в левой, и в правой частях уравнения. В вариантах дальнейшего использования времени в других кинетических уравнениях следует придерживаться этого же правила.

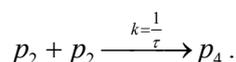
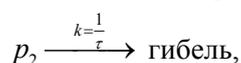
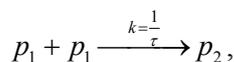
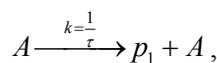
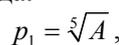
Все дальнейшие манипуляции могут проводиться как с псевдовременем $time$, так и с любыми другими веществами или псевдовеществами.

Произвольная степенная зависимость от $A = x_i$ или $A = time$ может быть получена с помощью цепочки равновесий:



Псевдовещества будут иметь концентрации, равные соответствующей степени для всех значений моментов времени, превышающих τ .

Дробные степени вида $1/2$, $1/3$, $1/4$ и т.д. могут быть получены аналогично. Например, цепочка квазиравновесий p_1 (не имеющих физического смысла) даст для вещества зависимость вида:



Можно показать, что с помощью обычных реакций нулевого, первого и второго порядка легко генерируются такие функции, как линейная функция, экспонента, гипербола.

Несколько особняком стоят такие функции, как логарифм и синус, однако и они могут быть воспроизведены с помощью таких систем, как брюсселятор и каталитическое превращение с квадратичной гибелью катализатора.

На Рис. 4 представлены исходное и конечное состояние гидродинамической модели перетока жидкостей. Предполагается, что отверстие находится на высоте 20% от верхнего края большего сосуда, соотношение площадей сечения 2:1, скорость истечения дается законом Бернулли:

$$\frac{dh_1}{dt} = -\theta \sqrt{g(h - h_0)} = -1/2 \frac{dh_2}{dt}$$

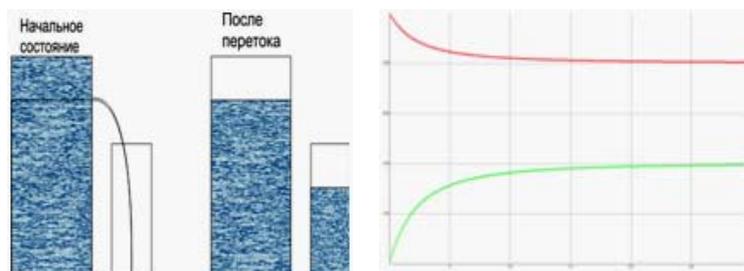


Рис.4. Исходное и конечное состояние гидродинамической модели перетока жидкостей

Заключение

Применение интеллектуальных алгоритмов идентификации в системах управления технологическими процессами и поддержки принятия решений позволяет настраивать в реальном времени модели технологических процессов с помощью априорной информации, представляемой на основе формализованных комментариев экспертов и формализованного учета дополнительной информации, характеризующей текущую технологическую ситуацию (расширение вектора состояния). Учет и интеллектуальный анализ априорной информации повышает эффективность моделей в системах поддержки принятия решений и системах автоматизированного управления.

Литература

1. Vasilyev, Stanislav N.; Novikov, Dmitry; Bakhtadze, Natalia, Intelligent Control of Industrial Processes // Proceedings of the 7th IFAC Conference on Manufacturing Modelling, Management, and Control, 2013. Saint Petersburg, Russia, June 19-21. IFAC Proceedings Volumes. Series Title: Manufacturing Modelling, Management, and Control, v. 7, Part 1. P.49-57. ISBN: 978-3-902823-35-9.
2. Struss, P. A Conceptualization and General Architecture of Intelligent Decision Support Systems. Proceedings of the 19th International Congress on Modelling and Simulation. Modelling and Simulation Society of Australia and New Zealand, 2011, P. 2282-2288. ISBN: 978-0-9872143-1-7.
3. Павлов С.Н. Системы искусственного интеллекта. Томск: «Эль Конент», 2011. 176 с.
4. Bakhtadze, Natalya N., Lototsky, Vladimir A., Maximov, Evgeny M. (2012). Associative Search Method in System Identification // Pr. of 14th International Conference on Automatic Control, Modelling & Simulation (ACMOS '12). Saint Malo & Mont Saint-Michel, France.
5. Qin, S. Joe, Badgwell, Thomas A. A survey of industrial model predictive control technology // Control Engineering Practice. 2003, No 11. P. 733-764.
6. Kern A.G. Summiting with multivariable predictive control //Hydrocarbon Processing, 2007.
7. Люгер Дж.Ф. Искусственный интеллект: стратегии и методы решения сложных проблем. М.: "Вильямс", 2003.
8. Гаврилова Т.А., Хорошевский В.Ф. Базы знаний интеллектуальных систем / СПб: Питер, 2000.
9. Брин Э.Ф., Травин С.О. Моделирование механизмов химических реакций // Хим. физика. 1991. Т. 10. № 6. С. 830-837.
10. Шорников Ю.В., Абденов А.Ж. Инструментально-ориентированный анализ жестких динамических, гибридных и распределенных систем явными методами // ИММОД-2007: материалы 4 всерос. науч. конф. по имитационному моделированию. – СПб., 2007. – С. 352-357.
11. Новиков Е.А., Шорников Ю.В. Компьютерное моделирование жестких гибридных систем. – Новосибирск. 2012. – 381 с.

Быков Андрей Александрович Начальник лаборатории «Химия фторидов» в АО «ВНИИХТ». Окончил ОГУ им. И.И. Мечникова в 2010 году. Область научных интересов: химия редких, рассеянных и радиоактивных элементов, фторидные технологии, моделирование химико-технологических процессов. E-mail: bykovaal@gmail.com

Громов Олег Борисович Начальник отделения «Ядерные материалы» в АО «ВНИИХТ». Окончил РХТУ им. Д.И. Менделеева в 1979 году. Кандидат технических наук. Область научных интересов: химия и технология урана, фторидные технологии, математическое моделирование химико-технологических процессов, экология. E-mail: ollgromov@mail.ru

Карпюк Леонид Александрович Генеральный директор ГНЦ «ВНИИНМ им. академика А.А. Бочвара». Окончил МГУ им. М.В. Ломоносова в 2005 году. Кандидат химических наук. Область научных интересов: топливо для ядерной энергетики, конструкционные и функциональные материалы, метрологические средства измерений стандартных образцов. E-mail: LAKarpyuk@bochvar.ru

Максимов Евгений Михайлович Старший научный сотрудник в ФГБУН «ИПУ им. Трапезникова». Окончил МИЭМ в 1973 году. Кандидат технических наук. Область научных интересов: идентификация систем, адаптивное управление, интеллектуальный анализ данных, базы данных. E-mail: maxfone@ipu.ru.

Михеев Петр Иванович Старший преподаватель в ФГБОУ «МГТУ им. Н.Э. Баумана». Окончил МВТУ им. Н.Э. Баумана в 1982 году. Область научных интересов: автоматизация технологических процессов, атомная энергетика, экология. E-mail: petr_miheev@mail.ru.

Травин Сергей Олегович Инженер-исследователь кафедры конструирования приборов и аппаратов в НИЯУ «МИФИ» и главный научный сотрудник в лаборатории «Химия фторидов» в АО «ВНИИХТ». Окончил МФТИ в 1976 году. Кандидат химических наук, доктор экономических наук, профессор. Область научных интересов: химическая кинетика, окислительно-восстановительный катализ, металлы переменной валентности, математическое моделирование, программное обеспечение ЭВМ, распределения Ципфа-Мандельброта. E-mail: travinso@yandex.ru.

Утробин Дмитрий Владимирович Начальник лаборатории по химико-технологическому сопровождению разделительно-сублиматного комплекса ГНЦ «ВНИИНМ им. академика А.А. Бочвара». Окончил ТПУ им. С.М. Кирова в 1988 году. Кандидат химических наук. Область научных интересов: химия и технология урана, фторидные технологии, топливо для ядерной энергетики, конструкционные и функциональные материалы. E-mail: udv65@mail.ru

Intellectual modeling systems of technological processes in the nuclear energy

A.A. Bykov, O.B. Gromov, L.A. Karpyuk, E.M. Maksimov, P.I. Mikheev, S.O. Travin, D.V. Utrobin

Abstract. In this paper are discussed the methods for developing intellectual systems modeling processes on the example of chemical-engineering processes (CTP) in the nuclear industry. Showed approach to creating an interface for solving problems of mathematical modeling of the CTP. It offered methods of formation and configuration of knowledge bases of production processes, based on data mining. It presented structure of intelligent analyzer for simulating complex processes with application of predictive process models, that can be configured in real time with the use of knowledge.

Keywords: control and automation of chemical processes, nuclear industry, intellection and information systems, software and hardware, the intellectual structure of the analyzer and the identifier, the interface for solving problems of mathematical modeling.

Andrey A. Bykov Head of laboratory "Chemistry of fluoride" in JSC "VNIИHT". Graduated in 2010 Mechnikov Odessa State University. Research interests: chemistry of rare, absent-minded and radioactive elements, fluoride technologies, modeling of chemical-technological processes. E-mail: bykovaal@gmail.com

Dr. Oleg B. Gromov Chief department "Nuclear materials" in JSC "VNIИHT". Graduated in 1979 Mendeleev Russian Chemical Technological University. Research interests: chemistry and technology of uranium, fluoride technologies, mathematical modeling of chemical-engineering processes, ecology. E-mail: ollgromov@mail.ru

Dr. Leonid A. Karpyuk General director of the State Scientific Center "Bochvar's VNIINM". Graduated in 2005 Lomonosov Moscow State University. Research interests: fuel for the nuclear power industry, structural and functional materials, metrological measuring instruments standard samples. E-mail: LAKarpyuk@bochvar.ru.

Dr. Eugene M. Maksimov Senior Researcher in Trapeznikov Institute of Control Sciences. Graduated in 1973 Moscow Institute of Electronics and Mathematics. Research interests: system identification, adaptive control, data mining, database. E-mail: maxfone@ipu.ru.

Peter I. Mikheev Senior lecturer in Bauman MVTU. Graduated in 1982 Bauman MVTU. Research interests: process automation, atomic energy, ecology. E-mail: petr_miheev@mail.ru.

Ph. Dr. and Prof. Sergey O. Travin Research engineer equipment design departments and units in the National Research Nuclear University "MEPhI" and chief researcher at the laboratory "Chemistry of fluoride" in JSC "VNIИHT". Graduated in 1976 MIPT. Research interests: chemical kinetics, redox catalysis, the metals of variable valence, mathematical modeling, computer software, Zipf-Mandelbrot. E-mail: travinso@yandex.ru.

Dr. Dmitry V. Utrobin Head of Laboratory for chemical-technological support separation-sublimation complex in Center "Bochvar's VNIINM". He graduated in 1988 Kirov TPU. Research interests: chemistry and technology of uranium, fluoride technologies, the fuel for nuclear power engineering, structural and functional materials. E-mail: udv65@mail.ru