

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт космических и информационных технологий

институт

Информационные системы

кафедра

УТВЕРЖДАЮ

Зав. кафедрой ИС

_____ Виденин С. А.

подпись инициалы, фамилия

« ____ » _____ 2017 г.

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

09.03.01 «Информатика и вычислительная техника»

Разработка программного комплекса для анализа критических явлений в
химических реакторах

Руководитель _____

подпись, дата

Л.С. Троценко

инициалы, фамилия

Выпускник _____

подпись, дата

В.В. Мальцев

инициалы, фамилия

Нормоконтролер _____

подпись, дата

Л.С. Троценко

инициалы, фамилия

Красноярск 2017

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа по теме «Разработка программного комплекса для анализа критических явлений в химических реакторах» содержит 43 страницы текстового документа, 13 рисунков, 7 использованных источников.

Объект исследования: химическая кинетика.

Предмет исследования: параметрический анализ.

Основная цель настоящей работы - разработка программно-математического комплекса для анализа критических явлений в химических реакторах. Для достижения указанной цели в работе поставлены следующие задачи.

а) Построить алгоритм численного решения задач параметрического анализа.

б) Реализовать программное обеспечение для проведения всех этапов параметрического анализа.

Основная идея заключается в применении численных и программных методов для проведения параметрического анализа моделей вида «реакция + диффузия». Последовательное применение необходимого комплекса численных методов и программных алгоритмов позволяет провести построение параметрических зависимостей, которые невозможно получить с помощью аналитических выкладок.

В работе используются численные методы как для проведения параметрического анализа, так и для интегрирования систем дифференциальных уравнений.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
1 Теоретическая часть	6
1.1 Классификация реакторов.....	6
1.2 Скорость реакции.....	6
1.3 Молекулярности реакции и обратимость стадий.....	8
1.4 Критические эффекты.....	9
1.5 Математические модели.....	10
2 Параметрический анализ осциллирующих моделей.....	11
2.1 Схема параметрического анализа.....	11
2.2 Бифуркационные кривые.....	13
2.3 Простейшие каталитические осцилляторы.....	15
2.4 Автокаталитический осциллятор.....	19
3 Программная реализация.....	22
3.1 Основные понятия ООП.....	22
3.2 Интегрированная среда программирования Delphi	24
3.3 Программный комплекс для анализа критических явлений в химических реакторах.....	27
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	42
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ.....	43

ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день сложно представить современную химическую промышленность без повсеместного применения математического моделирования. Пожалуй, наиболее активно такое моделирование применяется в исследованиях химической кинетики.

В настоящее время широко изучены модели, отражающие поведение реакции с диффузией в одномерном или, в меньшей степени, двумерном пространстве. Анализ поведения химических реакций с диффузией в объёме полностью отсутствует.

Применение параметрического анализа позволяет алгоритмизировать большую часть исследования модели, избавив тем самым исследователя от кропотливого труда и сосредоточив его внимание на самой модели, а не на аналитических выкладках и численных решениях.

Объект исследований - концентрация промежуточных веществ в объёме твердотельных катализаторов.

Предметом исследований являются особенности протекания каталитических процессов, описываемых математическими моделями «реакция + диффузия», в объёме катализатора.

Основная цель настоящей работы - разработка программно-математического комплекса для анализа критических явлений в химических реакторах. Для достижения указанной цели в работе поставлены следующие задачи.

а) Построить алгоритмы численного решения задач параметрического анализа.

б) Реализовать программное обеспечение для проведения всех этапов параметрического анализа.

Основная идея заключается в применении численных и программных методов для проведения параметрического анализа моделей вида «реакция + диффузия». Последовательное применение необходимого комплекса численных методов и программных алгоритмов позволяет провести построение параметрических зависимостей, которые невозможно получить с помощью аналитических выкладок.

1 Теоретическая часть

1.1 Классификация реакторов

В газовых системах взаимодействие происходит во всем объеме реактора, в конденсированных средах реакция ограничена объемом раствора (гомогенные системы) или поверхностью раздела фаз (гетерогенные системы). Возникает понятие реакционного пространства, т.е. того объема, в котором протекает превращение.

При проведении опытов в закрытом сосуде или в проточной, открытой системе возможны градиенты концентрации, связанные с процессами диффузии, наличием перепада давления в узкой трубке, разогревом или охлаждением системы за счет тепла, выделяющегося или поглощающегося в ходе эксперимента. Эти изменения могут быть функциями времени или геометрии реактора. Одновременное решение для такой многопараметрической задачи сложно или просто невозможно. Поэтому в реальных исследованиях пытаются частично или полностью устранить градиенты массы и температуры. Это позволяет провести классификацию различных режимов проведения кинетических опытов.

1.2 Скорость реакции

Скорость превращения: изменение степени полноты реакции или химической переменной во времени: dx/dt моль/с. В начале реакции x равно нулю. Тогда нет необходимости учитывать стехиометрические коэффициенты и химическая переменная всегда положительна. При таком

определении изменение объема в ходе реакции не влияет на расчеты. Существует понятие скорости реакции (удельной скорости превращения).

Такую скорость обычно обозначают как v , что представляется не вполне удобным, так как аналогичный символ используется при расчетах скорости подачи вещества в проточный реактор, при постоянном объеме.

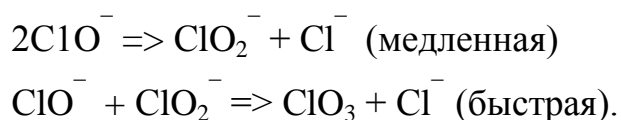
Отметим, что скорость реакции возможно определить так только при постоянной и известной стехиометрии, причем в данном случае некоторую роль может играть изменение объема. Величину dx/dt обозначают также как \dot{x} скорость изменения концентрации вещества, причем для исходного реагента это будет скорость расходования, а для продукта - скорость получения. Можно также использовать r_p - скорость, определяемая по изменению давления и т.п., указывая в виде индекса параметр, по которому производится расчет (поверхностные концентрации, объемные). Значения v и r могут различаться по абсолютной величине и будут равны только при стехиометрическом коэффициенте равном 1.

Скорость химической реакции можно получить графическим дифференцированием кривой зависимости концентрации реагирующего вещества или продукта превращения от времени (кинетической кривой). Ее значение задается наклоном касательной к экспериментальной кривой.

Скорость химической реакции в соответствии с формой записи имеет размерность моль/(л·с), а размерность константы скорости зависит от значений показателей степени, в которых концентрации реагентов входят в кинетическое уравнение (порядка по каждому веществу). Абсолютная величина константы скорости зависит от способа выражения концентрации и времени.

1.3 Молекулярности реакции и обратимость стадий

Введем понятие - молекулярности реакции, под которой будем понимать число молекул каждого из веществ, участвующих в превращении. Очевидно, что молекулярность реакции равна сумме молекулярностей по каждому из компонентов. Для простых реакций порядок и молекулярность совпадают и значение это, как правило, не превышает 3. В сложных реакциях порядок и молекулярность обычно не совпадают. Так очевидно, что реакция $3\text{KClO} \Rightarrow \text{KClO}_3 + 2\text{KCl}$ сложная и ее можно представить как двух стадийную:



Каждая простая реакция в этой схеме бимолекулярна.

Для дальнейшего анализа кинетических зависимостей нам понадобятся понятия обратимой и необратимой реакций. Из термодинамических соображений следует, что любая реакция должна проходить в обоих направлениях - образование продуктов и их превращение в исходные соединения. Однако, в случае больших значений констант равновесия количество исходных веществ в равновесии ничтожно мало и зачастую не может быть экспериментально определено. В соответствии с точностью используемого метода анализа мы можем перестать замечать исходные вещества в реакционной среде при разных значениях их начальных концентраций. В таких случаях можно говорить о том, что реакция прошла полностью, т.е. она необратима. Несмотря на условность понятия необратимая реакция, такой прием позволяет

упростить математические преобразования и широко используется в химической кинетике.

1.4 Критические эффекты

Любая математическая модель содержит параметры, которые имеют разный физико-химический смысл и могут меняться в различных пределах. Для нелинейных систем это может привести к критическим эффектам - потере устойчивости стационарного состояния, резкому переходу стационарной скорости от одного значения к другому, срыву из стационарного состояния в автоколебаниях и т.п. Современная качественная теория дифференциальных уравнений и вычислительная математика дают соответствующие средства анализа уравнений с параметрами. Программа параметрического анализа, как правило, включает в себя исследование числа и типа устойчивости ст.с., зависимостей их от параметров, построение параметрических портретов системы (разбиение плоскостей различных параметров бифуркационными кривыми на области однотипного динамического поведения). Построение временных зависимостей путем численного интегрирования системы.

В этой работе схема параметрического анализа реализована на выделенном классе базовых нелинейных моделей химической кинетики (в основном каталитических реакций). Использование специфики задачи позволило в ряде случаев уравнения кривых локальных бифуркаций (кривых кратности и нейтральности ст.с.) выписать в явном виде, избежав тяжелую в вычислительном плане процедуру решения систем нелинейных уравнений.

1.5 Математические модели

Сложное поведение химических реакций во времени описывается с помощью нестационарных кинетических моделей, которые имеют вид:

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} f(x, k),$$

где: \dot{x} - вектор концентраций реагентов, k - вектор параметров.

Как правило, эти модели представляют собой системы обыкновенных дифференциальных уравнений с нелинейной правой частью, которая не содержит времени t в явном виде. Используемые обычно модели основаны на различных физико-химических предположениях. В частности, таких как предположение зависимости констант скоростей поверхностных реакций от степени покрытия поверхности реагирующими веществами.

2 Параметрический анализ осциллирующих моделей

2.1 Схема параметрического анализа

Нестационарная кинетическая модель имеет вид:

$$\dot{x}_i = f_i(x, k), \quad i = 1, \dots, n \quad (1.1)$$

В качестве k выступают константы скорости элементарных реакций, которые зависят от температуры, давления и некоторых других величин. Первым шагом в исследовании модели (1.1) является определение стационарных точек.

Стационарные состояния

Ст.с. являются решениями системы:

$$f_i(x, k) = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (1.2)$$

которую удобно (если это возможно) с помощью элементарных преобразований свести к одному уравнению:

$$P(x_i, k) = Q(x_i, k) \quad (1.3)$$

Пересечение P и Q являются стационарными значениями x_i . Пересечение может быть одно или несколько, это означает, что система (1.2) имеет одно или несколько стационарных значений.

Устойчивость стационарных состояний

Вторым шагом исследования системы (1.1) является определение характера особых точек. Для этого рассматривают отклонения от ст.с., определяемые по собственным значениям матрицы Якоби.

$$\xi = A \cdot \xi_j \quad (1.4)$$

Если все собственные значения матрицы Якоби различны и имеют отличные от нуля действительные части, то стационарная точка является простой.

Параметрические зависимости

Одним из важных этапов исследования модели (1.1) является анализ зависимостей ст.с. от различных параметров системы. В общем случае эта задача связана с решением систем с параметрами.

Одной из особенностей математических моделей химической кинетики является то, что параметры входят в правые части уравнений линейным образом. Использование этого свойства в ряде случаев позволяет представить уравнение стационарности

$$G(x_i, k_m) = P(x_i, k_m) - Q(x_i, k_m) = 0 \quad (1.5)$$

в виде:

$$k_m g_1(x_i) = g_2(x_i),$$

откуда получаем:

$$k_m = k_m(x_i) = g_2(x_i) / g_1(x_i), \quad m = 1, 2, \dots \quad (1.6)$$

Таким образом, можно получить функцию, обратную искомой параметрической зависимости $x_i(k_m)$. Если $k_m(x_i)$ задана в табличном или графическом виде, то для любого фиксированного k_m легко найти x_i .

2.2 Бифуркационные кривые

Следующим этапом параметрического анализа является построение бифуркационных кривых: кривой кратности ст.с. $L_\Delta: \Delta=0$ и кривой нейтральности $L_\sigma: \sigma=0$. Опишем процедуру построения этих кривых для системы второго порядка. В этом случае характеристическое уравнение имеет вид:

$$\lambda^2 + \sigma \cdot \lambda + \Delta = 0,$$

где: $\sigma = -(a_{11} + a_{22}), \quad \Delta = a_{11} \cdot a_{22} - a_{12} \cdot a_{21}$

Выделим из множества параметров два параметра k_m и k_p построим линии L_Δ и L_σ в плоскости этих параметров.

Граница области множественности L_Δ определяется как решение системы уравнений:

$$G(x_i, k_m, k_p) = 0, \quad \Delta(x_i, k_m, k_p) = 0 \quad (1.7)$$

Подставляя (1.6) во второе уравнение (1.7) получаем:

$$k_p = \varphi_1(x_i)$$

Таким образом, кривая кратности ст.с. L_{Δ} в плоскости параметров (k_m, k_p) выписана в параметрическом виде:

$$\begin{aligned}k_p &= \varphi_1(x_i) \\k_m &= \psi(x_i, \varphi_2(x_i))\end{aligned}\tag{1.8}$$

где: x_i - рассматривается как параметр.

Функции φ и ψ легко могут быть найдены в явном виде в силу линейности $G(x_i, k_m, k_p)$ и $\Delta(x_i, \psi(x_k, k_p))$, относительно k_m и k_p .

Для построения линии нейтральности L_{σ} уравнение стационарности (1.5) нужно дополнить условием:

$$\sigma(x_i, k_m, k_p) = 0\tag{1.9}$$

Получаем параметрическое задание кривой L_{σ} :

$$\begin{aligned}k_p &= \varphi_2(x_i) \\k_m &= \varphi(x_i, \varphi_2(x_i))\end{aligned}\tag{1.10}$$

Анализ взаимного расположения линий L_{Δ} и L_{σ} позволяет выделить в плоскости параметров области с различным динамическим поведением системы. В общем случае для получения такого разбиения необходимо многократно численно решать нелинейную систему (1.2). Использование специфики задач химической кинетики (линейный характер зависимостей правых частей уравнений от констант скоростей реакций) позволяет

избежать этой трудоемкой процедуры, и выписать уравнения бифуркационных кривых в явном виде.

Фазовые портреты

Для получения более полной информации о возможных состояниях системы (1.2) необходимо исследовать фазовые портреты, отвечающие каждой из полученных областей параметрической плоскости.

Построение фазового портрета при некотором фиксированном наборе параметров осуществляется с помощью интегрирования системы (1.2) при различных начальных данных.

2.3 Простейшие каталитические осцилляторы

Механизм I. Рассматриваемая схема имеет вид:



В работе показано, что данный механизм, кинетическая модель которого удовлетворяет закону действия масс без дополнительных предположений, в определенной области параметров имеет автоколебательные режимы, при этом дан лишь один набор параметров, при котором система имеет автоколебания. Проведем более детальный параметрический анализ соответствующей математической модели:

$$\dot{x}_1 = k_1 z - k_{-1} x_1 - k_2 x_1 + k_{-2} x_2 - 2k_3 x_1^2 x_2 = P$$

$$\begin{aligned}
\dot{x}_2 &= k_2x_1 - k_{-2}x_2 - k_3x_1^2x_2 = Q \\
\dot{x}_3 &= k_4z - k_{-4}x_3 = R \\
z &= 1 - x_1 - x_2 - x_3,
\end{aligned}
\tag{2.12}$$

которая представляет собой систему трех обыкновенных дифференциальных уравнений с нелинейными правыми частями.

Процедура исследования модели (2.12) аналогична описанной в пункте 2.1 - 2.2, поэтому остановимся только на основных результатах.

Ст.с. являются решениями системы алгебраических уравнений $P=Q=R=0$, которая легко сводится к одному уравнению:

$$\begin{aligned}
&(k_{-2} + k_3x_1^2)(k_4 + k_{-4})(k_1(1 - x_1) - k_{-1}x_1) - (k_4 + k_{-4}) \cdot \\
&\cdot (k_1 + 3k_3x_1^2)k_2x_1 + k_1k_4(k_2x_1 - (1 - x_1)(k_{-2} + k_3x_1^2))=0
\end{aligned}
\tag{2.13}$$

Так же как и для трехстадийных механизмов ст.с. зависят не от абсолютной величины констант k_4, k_{-4} , а от их отношения, поэтому всюду далее предполагается, что $k_4/k_{-4} = \text{const}$. Разрешая уравнение (2.13) относительно каждого из имеющихся параметров, мы получаем обратные к искомым параметрическим зависимостям $x(k_i)$.

$$\begin{aligned}
k_1 &= \frac{(k_{-1}k_{-2}x + k_3x^3(3k_2 + k_{-1}))(k_4 + k_{-4})}{k_{-4}((k_{-2} + k_3x^2)(1 - x) - k_2x)} \\
k_{-1} &= \frac{k_{-4}k_1((k_{-2} + k_3x^2)(1 - x) - k_2) - 3k_2k_3x^3(k_4 + k_{-4})}{(k_4 + k_{-4})(k_3x^3 + k_{-2}x)} \\
k_2 &= \frac{k_{-4}k_1(k_{-2} + k_3x^2)(1 - x) - k_{-1}(k_{-2}x + k_3x^3)(k_4 + k_{-4})}{3k_3x^3(k_4 + k_{-4}) + k_1k_{-4}x}
\end{aligned}$$

Анализ устойчивости ст.с. приводит к характеристическому уравнению

$$\lambda^3 + \sigma \cdot \lambda^2 + \delta \cdot \lambda + \Delta = 0$$

где $\sigma = -\text{tr } A$, $\delta = A_{11} + A_{22} + A_{33}$, $\Delta = -\det A$, $A = \|a_{ij}\|$ ($i, j=1, 2, 3$) - матрица соответствующей линеаризованной системы в ст. с, A_{ij} ($i=1, 2, 3$) - главные миноры матрицы A с элементами:

$$\begin{aligned} a_{11} &= -k_1 - k_{-1} - k_2 - 4k_3 x_1 x_2 \\ a_{12} &= -k_1 + k_{-2} - 2k_3 x_1^2 \\ a_{13} &= -k_1 \\ a_{21} &= k_2 - 2k_3 x_1 x_2 \\ a_{22} &= -k_{-2} - k_3 x_1^2 \\ a_{23} &= 0 \\ a_{31} &= -k_1 \\ a_{32} &= -k_4 \\ a_{33} &= -k_4 - k_{-4} \end{aligned} \tag{2.14}$$

Характер устойчивости ст.с. определяется соотношением δ , σ , Δ . Но так как $\sigma > 0$ (2.14), то в данном случае при $\Delta < 0$ ст.с. будет неустойчивым, при $\Delta > 0$ необходимым и достаточным условием неустойчивости ст.с. является неравенство $\delta < 0$. Когда $\delta > 0$, ст.с. устойчиво (при $\Delta > 0$), значит $\delta = 0$ отвечает бифуркационным значениям параметров.

Линия кратности ст. с L_{Δ} , является решением системы уравнений

$$P = Q = R = \Delta = 0 \tag{2.15}$$

Подобным образом построена кривая кратности ст.с. в плоскости параметров (k_{-1}, k_1) .

Действуя аналогично описанному выше, нетрудно получить кривую нейтральности L_δ , которая находится путем решения системы четырех уравнений.

$$P = Q = R = \delta = 0 \quad (2.16)$$

Буферная стадия $X_1 \rightleftharpoons X_3$. Заменяем в механизме (2.11) четвертую стадию реакцией: $X_1 \rightleftharpoons X_3$.



Данной схеме отвечает нестационарная кинетическая модель:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= k_1z - k_{-1}x_1 - k_2x_1 + k_{-2}x_2 - 2k_3x_1^2x_2 - k_4x_1 + k_{-4}x_3 = P \\ \dot{x}_2 &= k_2x_1 - k_{-2}x_2 - k_3x_1^2x_2 = Q \\ \dot{x}_3 &= k_4x_1 - k_{-4}x_3 = R \\ z &= 1 - x_1 - x_2 - x_3 \end{aligned} \quad (2.18)$$

В этой серии механизмов была проанализирована еще одна схема реакций, имеющая в качестве буферной стадию вида $X_2 \rightleftharpoons X_3$

Соответствующая ей математическая модель выглядит так:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= k_1z - k_{-1}x_1 - k_2x_1 + k_{-2}x_2 - 2k_3x_1^2x_2 \\ \dot{x}_2 &= k_2x_1 - k_{-2}x_2 - k_3x_1^2x_2 - k_4x_1 + k_{-4}x_3 \\ \dot{x}_3 &= k_4x_2 - k_{-4}x_3 \end{aligned} \quad (2.19)$$

$$z = 1 - x_1 - x_2 - x_3$$

По схеме, описанной выше, найдены ст.с., исследована их устойчивость, параметрические зависимости и бифуркационные кривые выписаны в явном виде в плоскостях различных параметров, построены фазовые портреты и временные зависимости.

В отличие от предыдущих, для данной схемы не удалось найти автоколебаний.

2.4 Автокаталический осциллятор

Рассматривается серия автокаталических механизмов, различающихся видом третьей стадии. Эта стадия как и выше названа буферной, так как вещество Y фигурирует только в ней и для существования в системе автоколебаний она должна быть достаточно медленной по сравнению с остальными. Для каждого из механизмов построены различные бифуркационные кривые и параметрические зависимости, а также проанализировано влияние вида «буферной» стадии на характеристики автоколебаний.

Осциллятор с буферной стадией $2Z \rightleftharpoons 2Y$. Рассмотрим следующую схему превращений:

- 1) $Z \rightleftharpoons X$
 - 2) $X + 2Z \Rightarrow 3Z$
 - 3) $2Z \rightleftharpoons 2Y$
- (2.20)

Эта схема характерна для механизмов автокаталитических реакций. Первые две стадии представляют собой простейший каталитический триггер. Очевидно, такая схема не может описывать автоколебаний, поэтому стадии 1), 2) дополнены буферной стадией 3).

Совокупности стадий (2.26) отвечает нестационарная кинетическая модель вида:

$$\begin{aligned} \dot{z} &= -k_1z + k_{-1}x + k_2xz^2 - 2k_3z^2 + 2k_{-3}y^2 = P(z, y) \\ \dot{y} &= 2k_3z^2 - 2k_{-3}y^2 = Q(z, y), \end{aligned} \quad (2.21)$$

где: $x = 1 - y - z$, y, z - концентрации веществ X, Y, Z соответственно, $k_i > 0$ - константы скоростей реакций в стадиях 1) -3).

Уравнения (2.21) представляют собой систему двух обыкновенных дифференциальных уравнений, содержащих в качестве параметров k_i . Нелинейность системы обусловлена нелинейностью стадий 2) - 3). Функции $P(z, y)$ и $Q(z, y)$ определены в области S, задаваемой неравенствами:

$$S = \{(z, y): z \geq 0, y \geq 0, z + y \leq 1\} \quad (2.22)$$

Ст.с. системы (2.21) определяются как решение системы двух нелинейных алгебраических уравнений: $P(z, y) = Q(z, y) = 0$, которую можно записать в виде:

$$\begin{aligned} y &= \frac{k_{-1}(1-z) - k_1z + k_2z^2(1-z)}{k_{-1} + k_2z^2} = f(x) \\ y &= z \cdot \left(\frac{k_3}{k_{-3}}\right)^{\frac{1}{2}} = g(z) \end{aligned} \quad (2.23)$$

Без ограничения общности можно принять $k_2=1$. Ст.с. являются точками пересечения кривой $f(z)$ и прямой $g(z)$. Эти ст. состояния зависят лишь от отношения констант $k_3, k_{\cdot 3}$, а не от их абсолютной величины. Поэтому, всюду далее, говоря об изменении k_3 , будем иметь в виду, что $k_3/k_{\cdot 3} = \text{const}$.

Анализ устойчивости проводится по стандартной схеме.

Графиками $L_{\Delta}: \Delta = 0$ и $L_{\sigma}: \sigma = 0$ плоскость параметров разбивается на шесть областей аналогично предыдущему.

Варьирование параметра k_3 не изменяет области кратности ст.с.. Область же, ограничения линии нейтральности L_{Δ} уменьшается при увеличении k_3 , что характерно и для предыдущих моделей.

Исследована зависимость амплитуды и периода колебаний от параметра k_3 : обе характеристики уменьшаются при увеличении k_3 .

3 Программная реализация

3.1. Основные понятия ООП.

Объектно-ориентированное программирование - это методология программирования, которая основана на представлении программы в виде совокупности объектов, каждый из которых является реализацией определенного класса (типа данных особого вида), а классы образуют иерархию, основанную на принципах наследования. При этом объект характеризуется как совокупностью всех своих свойств и их текущих значений, так и совокупностью допустимых для данного объекта действий.

Несмотря на то что в различных литературных источниках делается акцент на те или иные особенности внедрения и применения ООП, три основных (базовых) его понятия остаются неизменными:

- а) инкапсуляция (Encapsulation);
- б) наследование (Inheritance);
- в) полиморфизм (Polymorphism).

Эти понятия лежат в основе ООП.

При процедурном подходе к программированию требуется описать каждый шаг, каждое действие алгоритма для достижения конечного результата. При объектно-ориентированном подходе право решать, как отреагировать и что сделать в ответ на поступивший вызов, остается за объектом. Для этого достаточно в стандартной форме поставить перед ним задачу и получить ответ.

Объект состоит из частей: имени, состояния (переменных состояния), методов (операций).

Можно дать обобщающее определение: объект ООП - это совокупность переменных состояния и связанных с ними методов (операций), которые определяют, как объект взаимодействует с окружающим миром.

Методы объекта - это процедуры и функции, объявление которых включено в описание объекта и которые выполняют действия. Возможность управлять состояниями объекта посредством вызова методов в итоге и определяет поведение объекта. Эту совокупность методов часто называют интерфейсом объекта.

Инкапсуляция - это механизм, который объединяет данные и методы, манипулирующие этими данными, и защищает и то и другое от внешнего вмешательства или неправильного использования. Когда методы и данные объединяются таким способом, создается объект.

Применяя инкапсуляцию, мы защищаем данные, принадлежащие объекту, от возможных ошибок, которые могут возникнуть при прямом доступе к этим данным. Кроме того, применение этого механизма очень часто помогает локализовать возможные ошибки в коде программы, что намного упрощает процесс их поиска и исправления. Можно сказать, что под инкапсуляцией подразумевается сокрытие данных, т. е. их защита. Применение инкапсуляции ведет к снижению эффективности доступа к элементам объекта, что обусловлено необходимостью вызова методов для изменения его внутренних элементов (переменных). Однако при современном уровне развития вычислительной техники эти потери в эффективности не играют существенной роли.

Наследование - это процесс, посредством которого один объект может наследовать свойства другого объекта и добавлять к ним черты,

характерные только для него. В итоге создается иерархия объектных типов, где поля данных и методов «предков» автоматически являются и полями данных и методов «потомков».

Смысл и универсальность наследования заключается в том, что не надо каждый раз заново (с нуля) описывать новый объект, а можно указать «родителя» (базовый класс) и описать отличительные особенности нового класса. В результате новый объект будет обладать всеми свойствами «родительского» класса и своими собственными отличительными особенностями.

Полиморфизм - это свойство, которое позволяет одно и то же имя использовать для решения нескольких технически разных задач. Полиморфизм подразумевает такое определение методов в иерархии типов, при котором метод с одним именем может применяться к различным родственным объектам. В общем виде концепцией полиморфизма является идея «один интерфейс - множество методов», т.е. полиморфизм помогает снижать сложность программ, разрешая использование одного интерфейса для единого класса действий. При этом выбор конкретного действия в зависимости от ситуации возлагается на компилятор.

3.2 Интегрированная среда программирования Delphi

История и назначение Delphi. Delphi - интегрированная среда программирования, разработанная фирмой Borland, является результатом развития языка ТурбоПаскаль, который, в свою очередь, является результатом развития языка Паскаль. Изначально Паскаль был полностью процедурным языком. ТурбоПаскаль, начиная с версии 5.5, обладает

средствами объектно-ориентированного программирования. Языком программирования в Delphi является объектно-ориентированный язык Object Pascal, в основу которого положены конструкции ТурбоПаскаля версии 7.0. В России Borland Delphi появился в конце 1993 г. и сразу же завоевал широкую популярность.

Среда программирования Delphi позволяет сравнительно легко и быстро создавать приложения операционной системы Windows, поэтому она получила название RAD (Rapid Application Development - среда быстрой разработки приложений).

Процесс разработки в Delphi предельно упрощен. И в первую очередь это относится к созданию интерфейса, на которое обычно приходится порядка 80 % времени разработки программы. Программисту необходимо просто поместить необходимые компоненты в окне Windows (в Delphi оно называется формой) и настроить их свойства с помощью специального инструмента - Object Inspector. С помощью данного инструмента можно связать события этих компонентов (нажатие кнопки, выбор мышью элемента в списке и т.д.) с процедурой обработки, и простое приложение готово. Причем разработчик имеет в своем распоряжении необходимые средства отладки (вплоть до пошагового выполнения команд процессора), удобную контекстную справочную систему, средства коллективной работы над проектом и т.д.

Delphi позволяет создавать распределенные Internet- и Intranet-приложения, используя для доступа к данным Borland DataBase Engine.

Язык Delphi Pascal (ранее - Object Pascal), используемый в Delphi, постоянно расширяется и дополняется компанией Borland, в полной мере поддерживая все требования, предъявляемые к объектно-ориентированному

языку программирования. Как в строго типизированном языке, классы поддерживают только простое наследование, но зато интерфейсы могут иметь сразу несколько «предков». К числу особенностей языка следует отнести поддержку обработки исключительных ситуаций (exceptions), а также перегрузку методов и подпрограмм (overload). Имеются также открытые массивы, варианты и вариантные массивы, позволяющие размещать в памяти любые структуры данных.

В Delphi можно создавать свои собственные компоненты, импортировать их, а также разрабатывать шаблоны проектов и мастеров, создающих заготовки проектов. Delphi предоставляет разработчику интерфейс для связи приложений (или внешних программ) с интегрированной оболочкой Delphi (IDE).

Компонент Delphi - это функциональный элемент, обладающий набором свойств, определяющих его внешний вид и состояние, а также набором методов и событий, определяющих его поведение. Концепция использования компонентов при разработке программ напрямую связана с методологией объектно-ориентированного программирования. В данном случае с помощью компонентов происходит визуализация объектов, т.е. отображаются стандартные диалоговые окна, кнопки, списки и др. При этом каждый компонент предполагает собственный набор действий.

Все компоненты Delphi являются производными от класса TComponent, в котором инкапсулированы самые общие свойства и методы компонентов.

3.3 Программный комплекс для анализа критических явлений в химических реакторах

Стартовое окно программы предлагает выбор модели автокаталитического осциллятора, различающихся буферными стадиями (Рисунок 1).

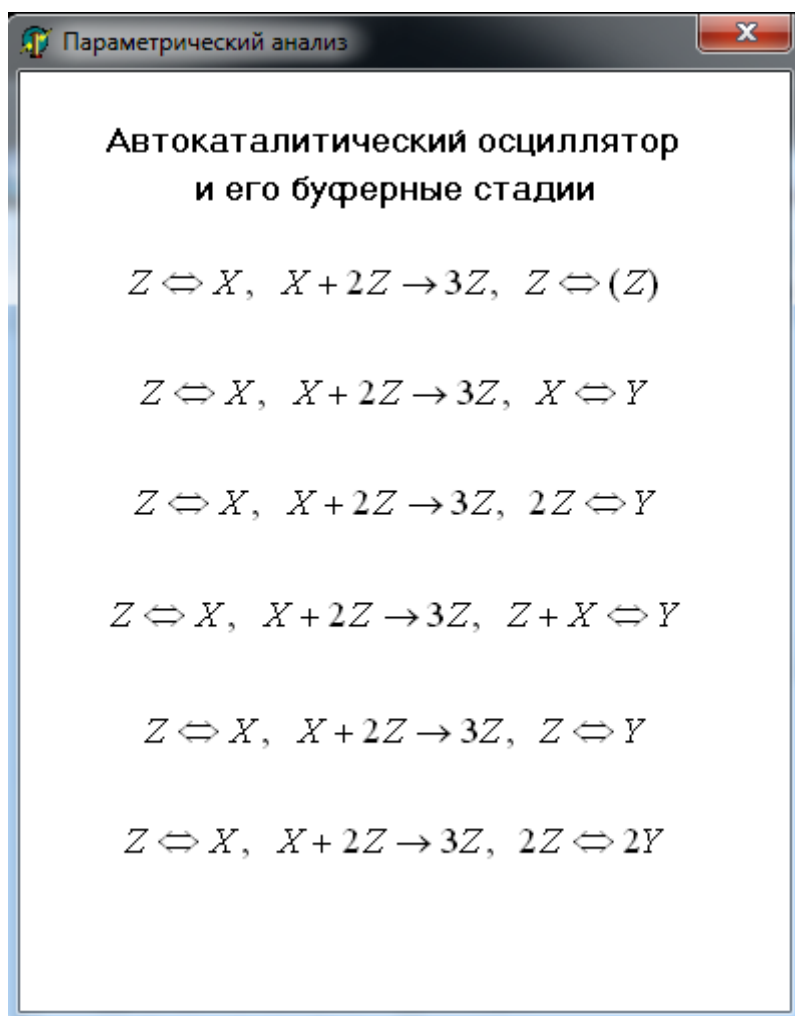


Рисунок 1 - Стартовое окно

С помощью данной программы можно провести полный параметрический анализ предложенных моделей, показанных в виде пунктов меню (Рисунок 2).

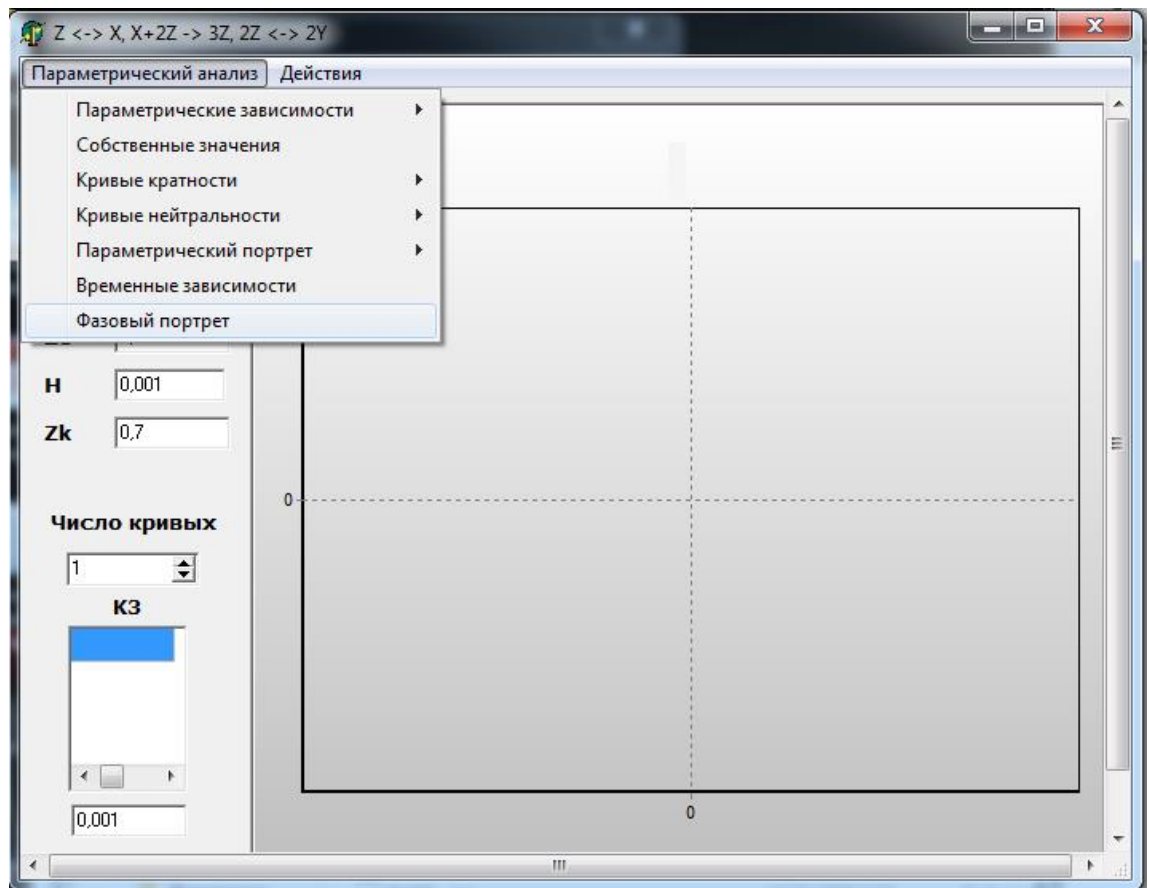


Рисунок 2 – Схема параметрического анализа

Верхний колонтитул программы содержит структурную схему выбранной модели и кнопки управления. Главное меню программы содержит основные функции, соответствующие этапу параметрического анализа. С помощью объектов «label», пользователь может менять нормируемые коэффициенты или исправить стандартные, внесенные в программу. Так же с помощью поля «select» можно задавать количество кривых.

Результат работы программы представляется в числовом виде, визуализируется в графическом виде и при необходимости может сохраняться в файле.

Рассмотрим работу на примере.

На первом шаге получаем функции, обратной к параметрическим зависимостям.

Находим зависимости $k_1(z)$, $k_{-1}(z)$:

$$k_1 = \frac{(k_{-1} + k_2 z^2)(k_{-3}(1 - z) - k_3 z^2)}{k_{-3} z}$$

$$k_{-1} = \frac{k_1 k_{-3} z - k_2 z^2 (k_{-3}(1 - z) - k_3 z^2)}{k_{-3}(1 - z) - k_3 z^2}$$

В сплывающем меню выбираем необходимый параметр, который будет варьироваться (Рисунок 3).

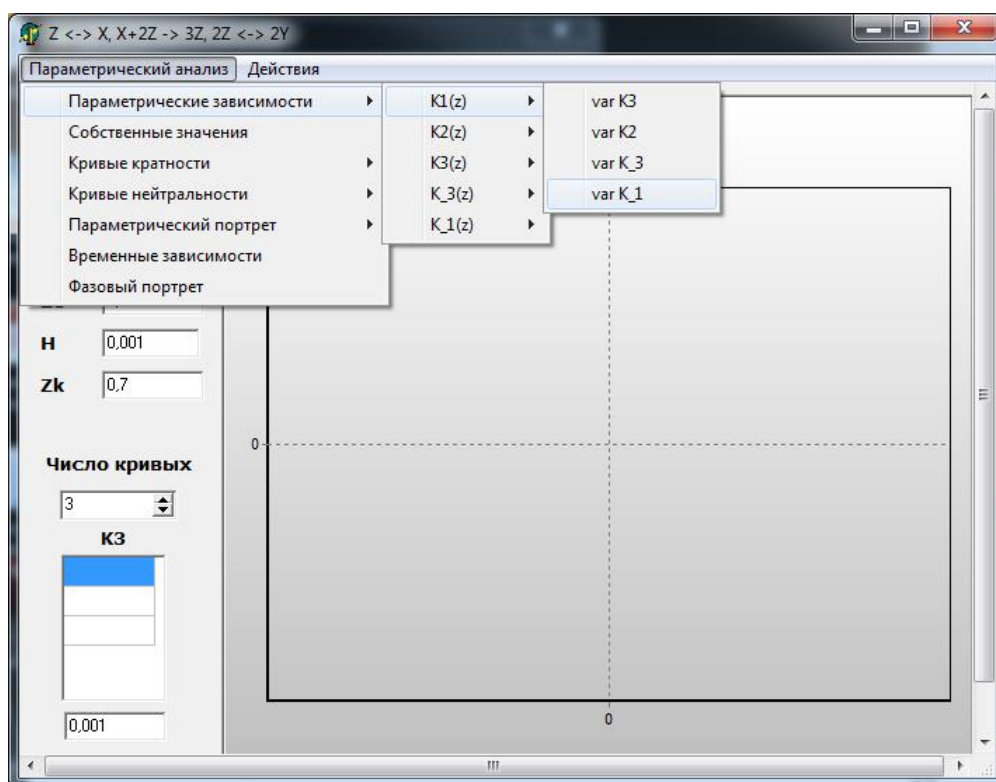


Рисунок 3 – Навигационное меню

Количество кривых ставим 3 и строим параметрические зависимости k_1 от z .

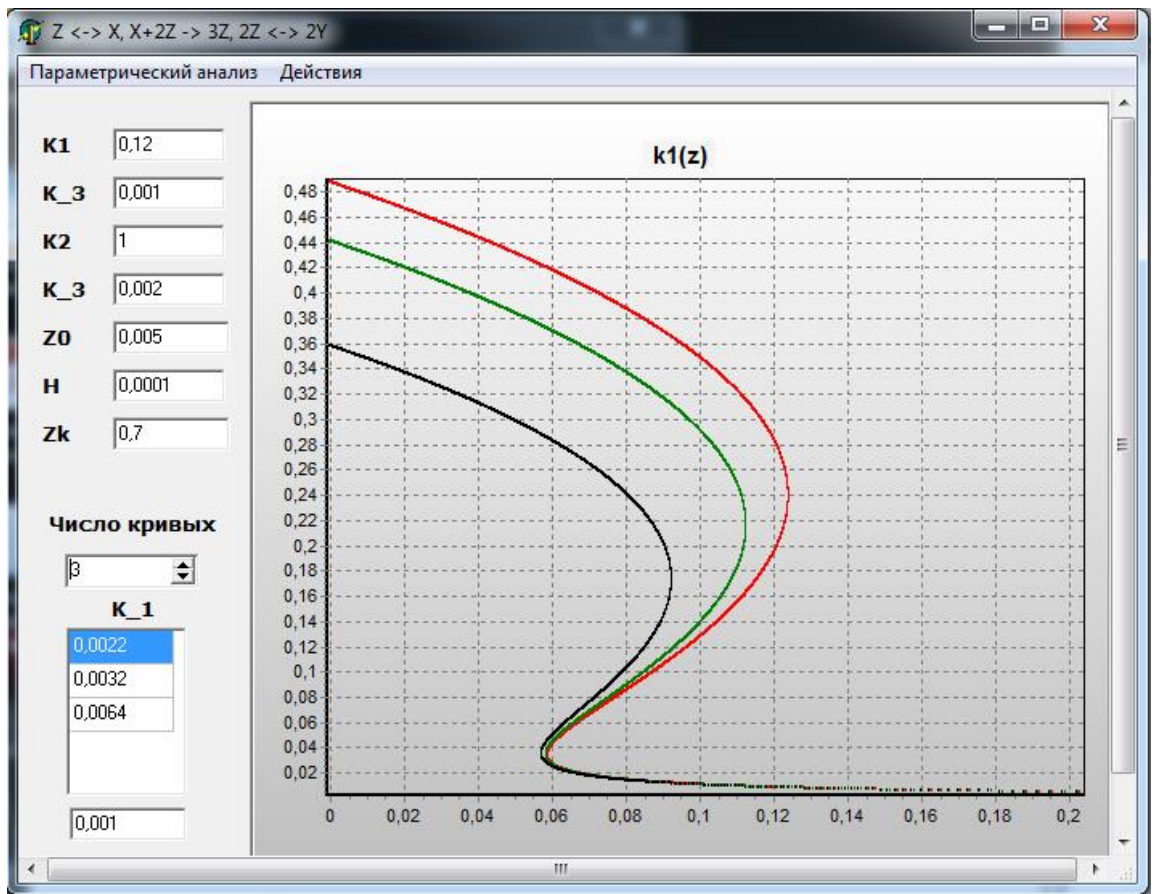


Рисунок 4 - Параметрические зависимости k_1 от z

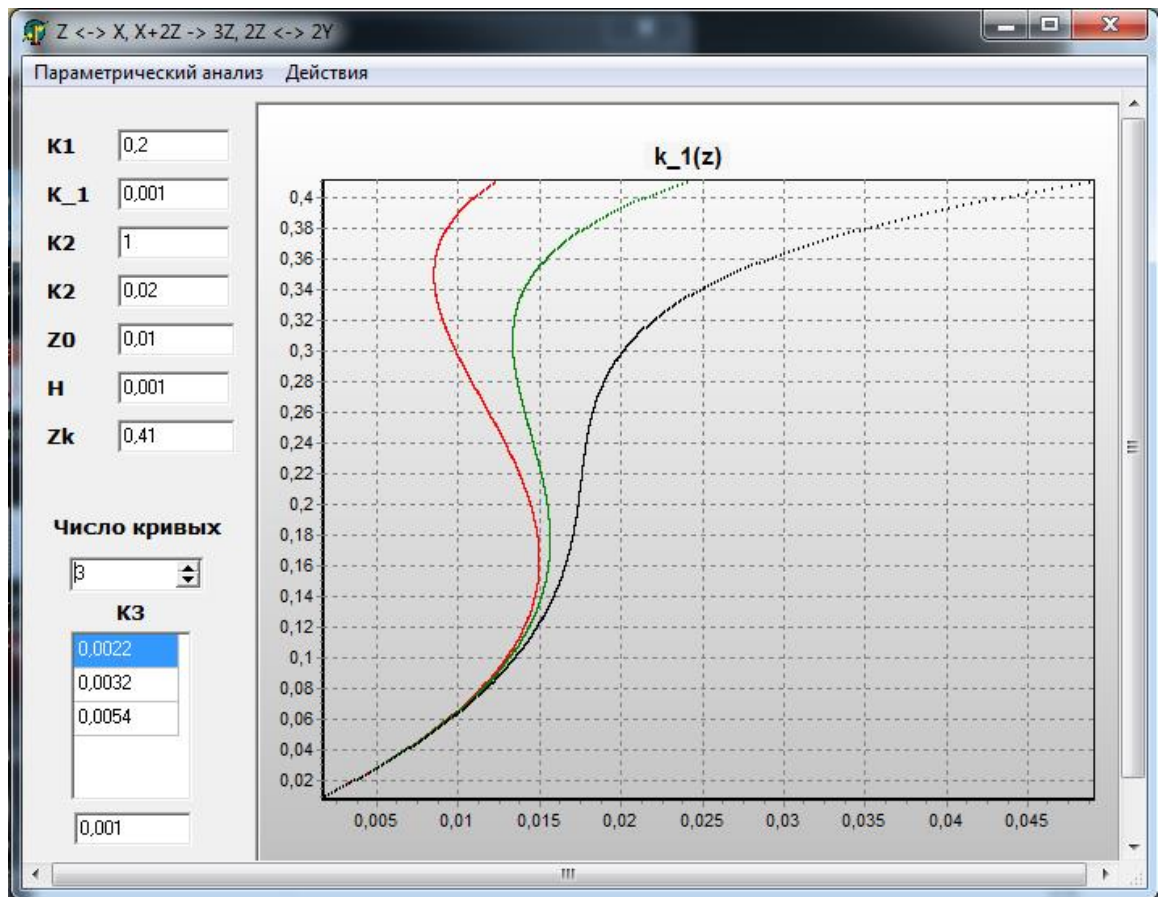


Рисунок 5 - Параметрические зависимости k_1 от z

Следующим шагом будет построение бифуркационных кривых: кривой кратности, кривой нейтральности.

Кривая кратности записывается

$$k_1 = \frac{(k_{-1} + k_2 z^2)(1 - z) - (k_3/k_{-3})^{\frac{1}{2}}(k_{-1}z + k_2 z^3)}{z}$$

$$k_2 = \frac{4k_2 k_{-3} y z^2 (z(k_3/k_{-3})^{\frac{1}{2}} + 2(1 - x - y) - 4k_2 k_3 z^4)}{4k_{-3} y (1 - z(k_3/k_{-3})^{\frac{1}{2}}) + 4k_3 z^2}$$

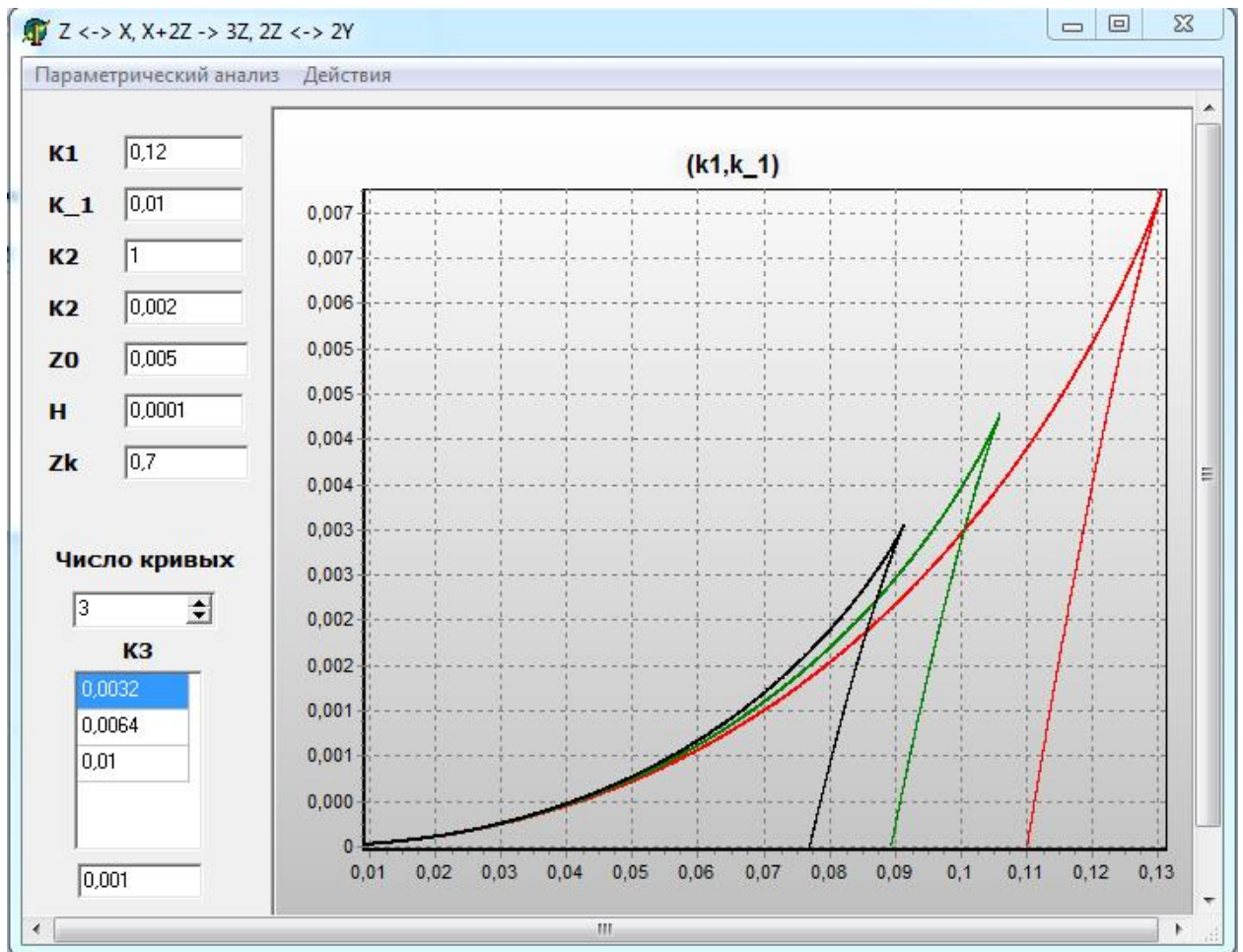


Рисунок 6 - Кривая кратности k_1, k_1

При решении этой системы:

$$F(z, k_1, k_{-1}) = 0$$

$$\sigma(z, k_1, k_{-1}) = 0$$

получаем выражения для построения линии нейтральности.

$$k_1 = \frac{(k_{-1} + k_2 z^2)(1 - z) - (k_3 / k_{-3})^{\frac{1}{2}} (k_{-1} z + k_2 z^3)}{z}$$

$$k_{-1} = \frac{k_2(1 - z(k_3/k_{-3})^{\frac{1}{2}} - 2(1 - x - y) - 1) - 4z(k_3z + k_{-3}y)}{z(k_3/k_{-3})^{\frac{1}{2}} - 1}$$

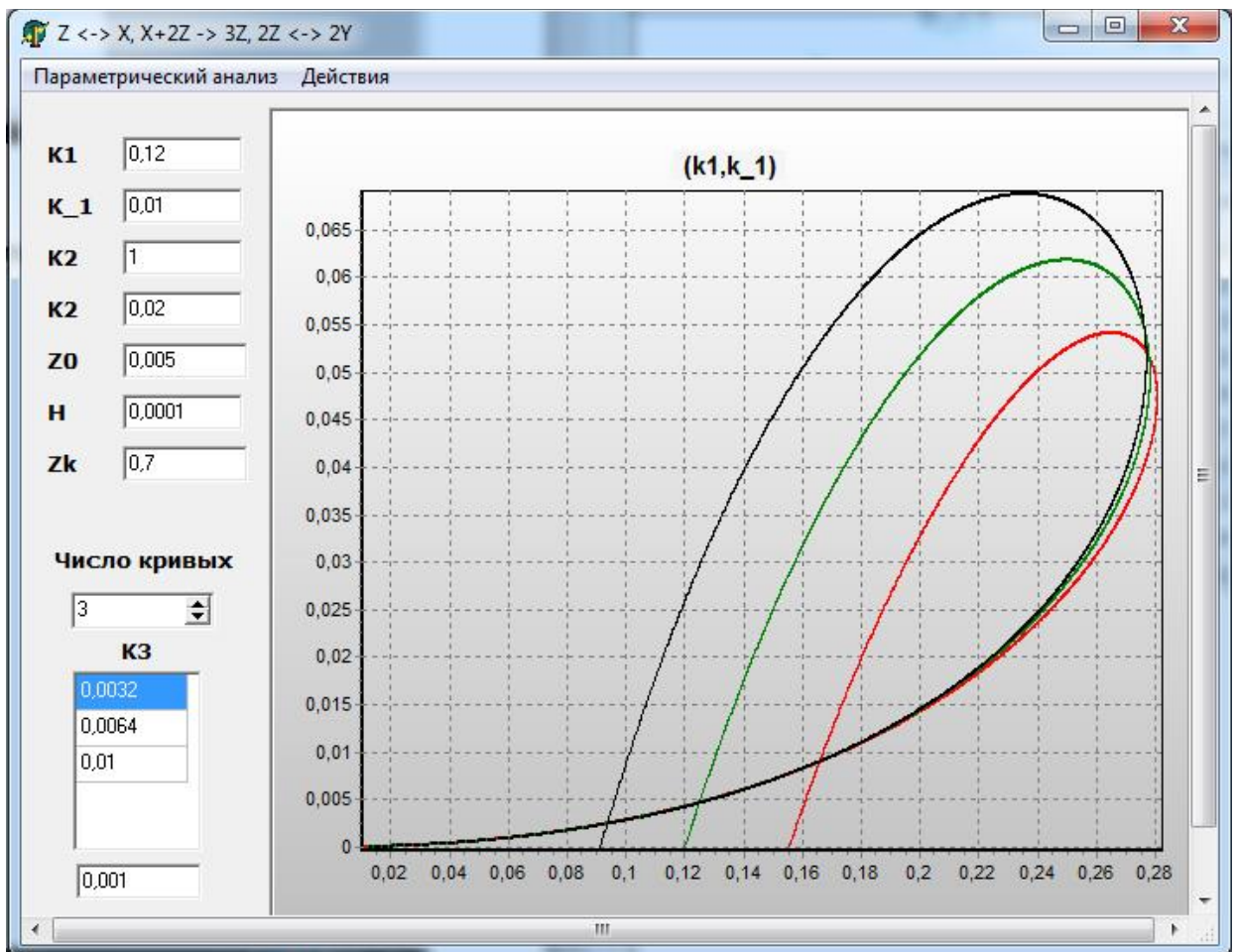


Рисунок 7 - Кривая нейтральности k_1, k_{-1}

Взаимное расположение бифуркационных кривых для одинаковых коэффициентов, построенная в одной плоскости, называется параметрическим портретом, с помощью которого можно определить области существования ст. с. и их тип (Рисунок 8).

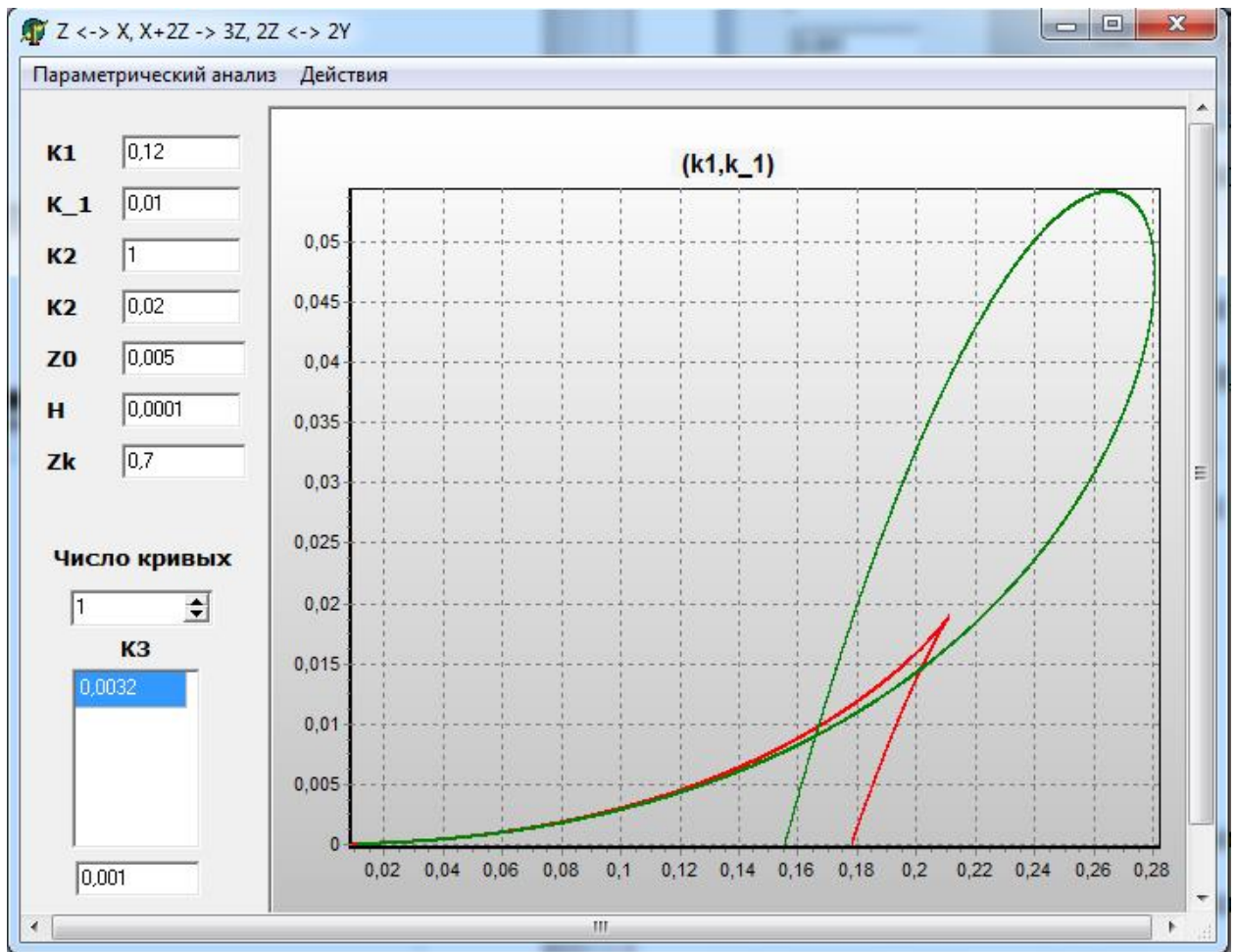


Рисунок 8 - Параметрический портрет k_1, k_{-1}

Последним шагом параметрического анализа будет построение временных зависимостей, с помощью выбора соответствующих пунктов меню можно построить графическое представление изменения концентрации выбранного вещества с течением времени. На рисунке 9 показано изменение концентрации вещества 2, которое имеет вид незатухающих колебаний.

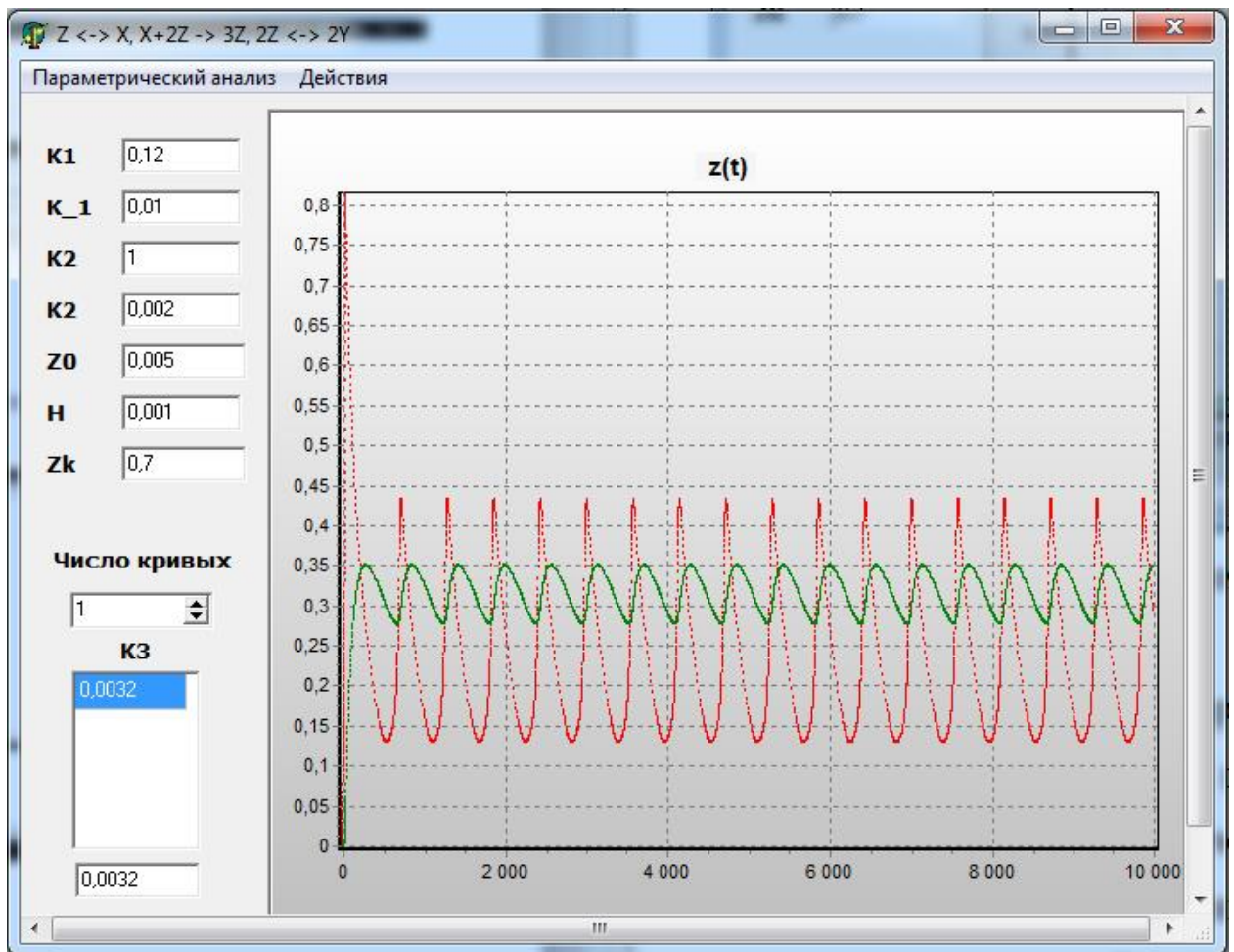


Рисунок 9 - Временные зависимости

Рассмотрим механизм, дополненный «буферной» стадией $X \rightleftharpoons Y$. Схему параметрического анализа проведем аналогично, построим параметрические зависимости (Рисунок 10, 11).

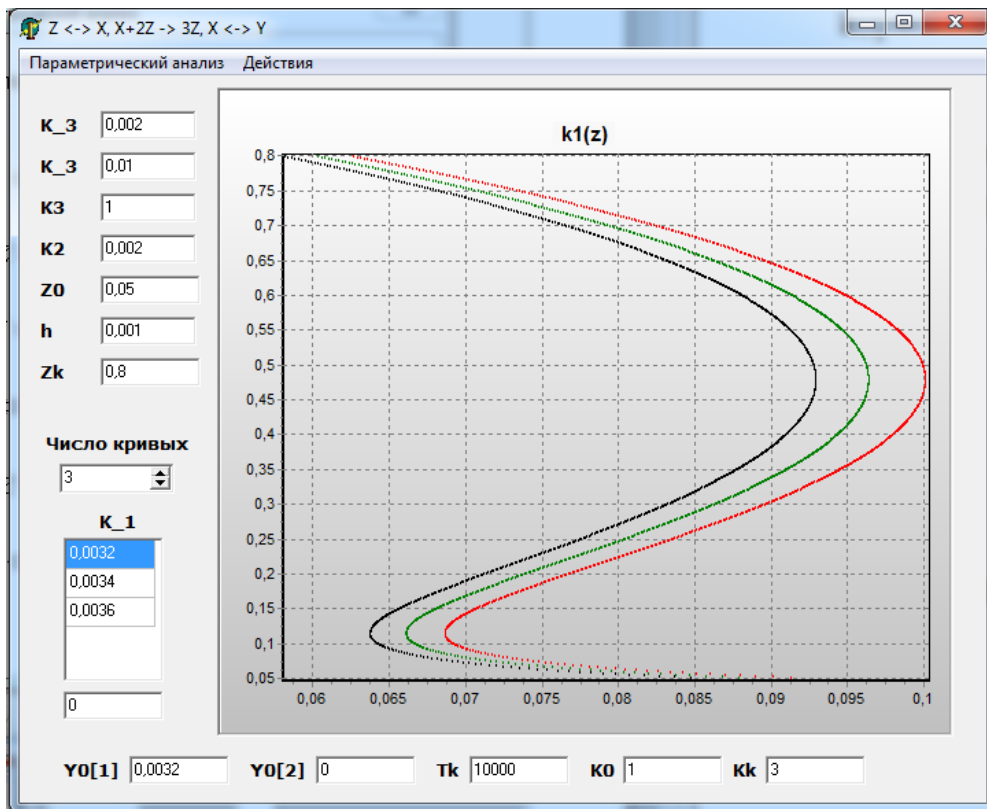


Рисунок 10 - Параметрические зависимости k_1 от z

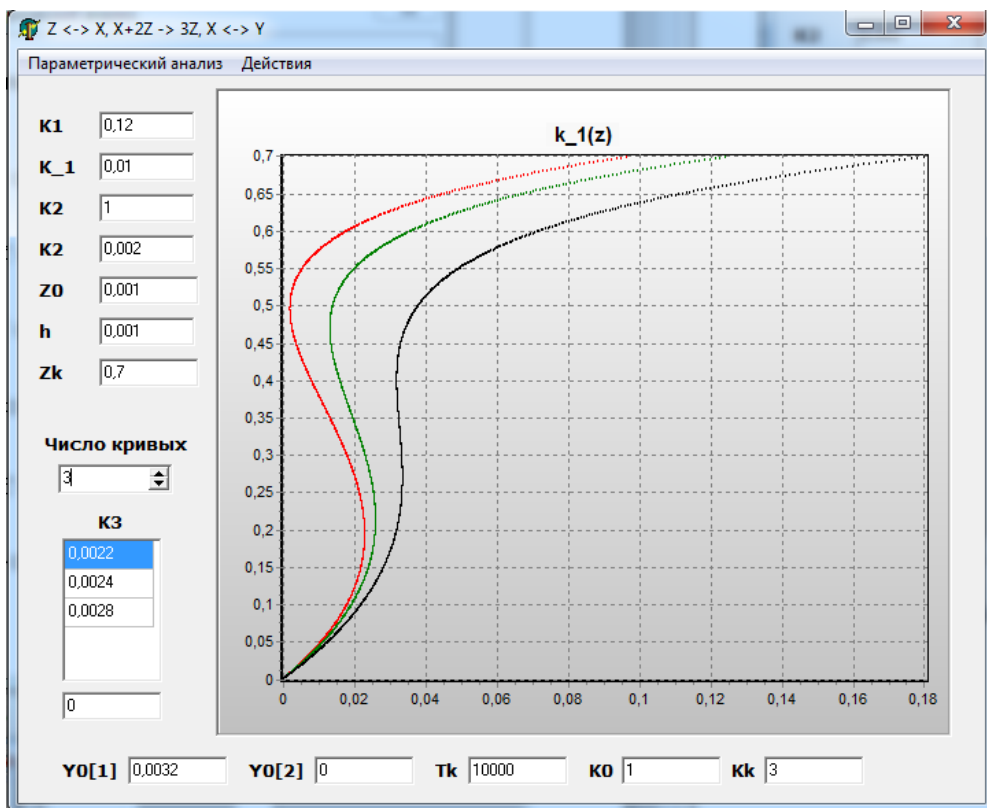


Рисунок 11 - Параметрические зависимости k_1 от z

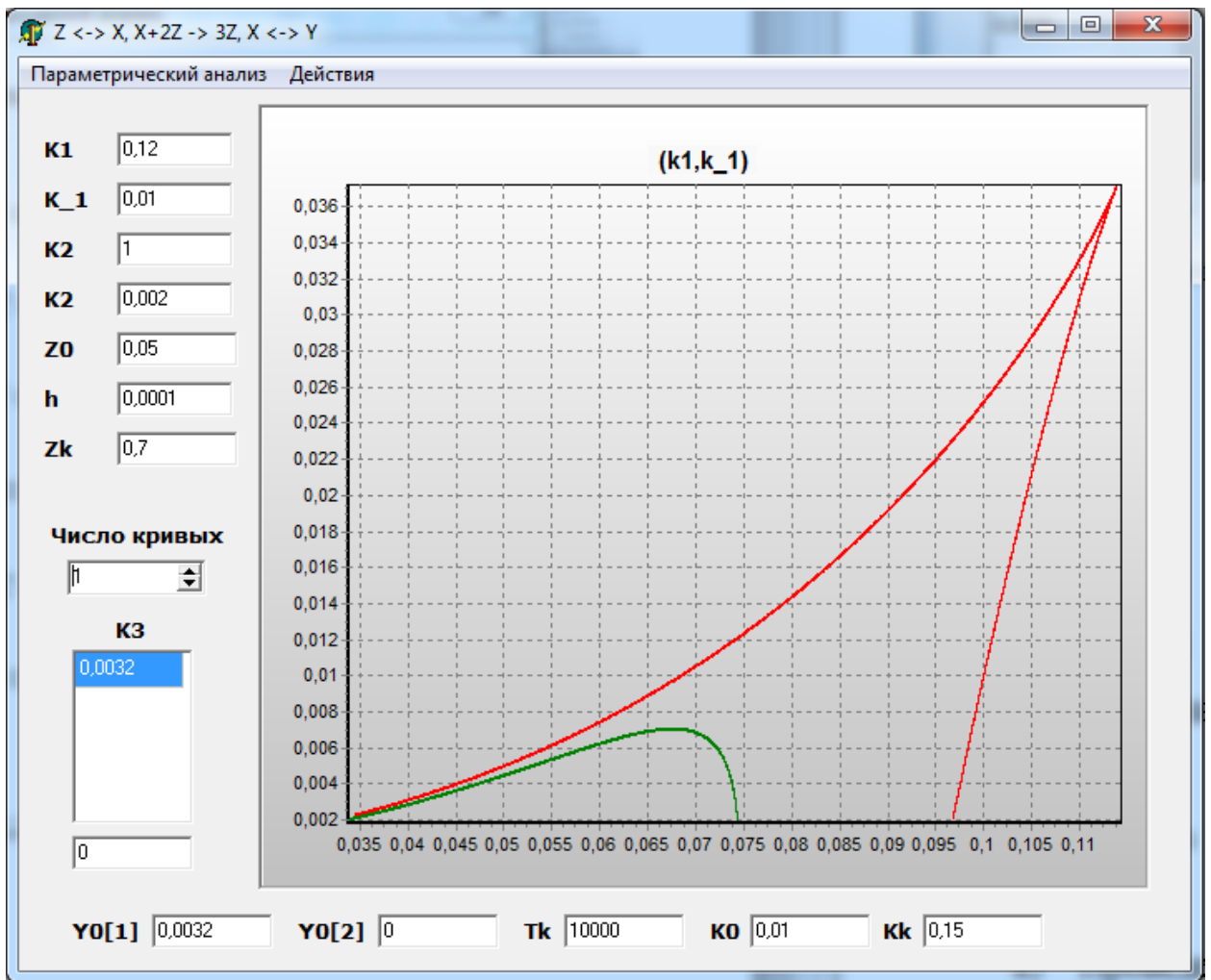


Рисунок 12 - Параметрический портрет $k_1, k_{.1}$

На рисунке 12 приведен параметрический портрет коэффициентов $k_1, k_{.1}$, для указанной выше схемы, по внешнему виду которого можно сделать вывод о отсутствии единственного неустойчивого ст.с., что гарантировало бы наличием колебаний в схеме. В нем мы можем убедиться при построении временных зависимостей для данного механизма.

Временные зависимости приведены на рисунке 13.

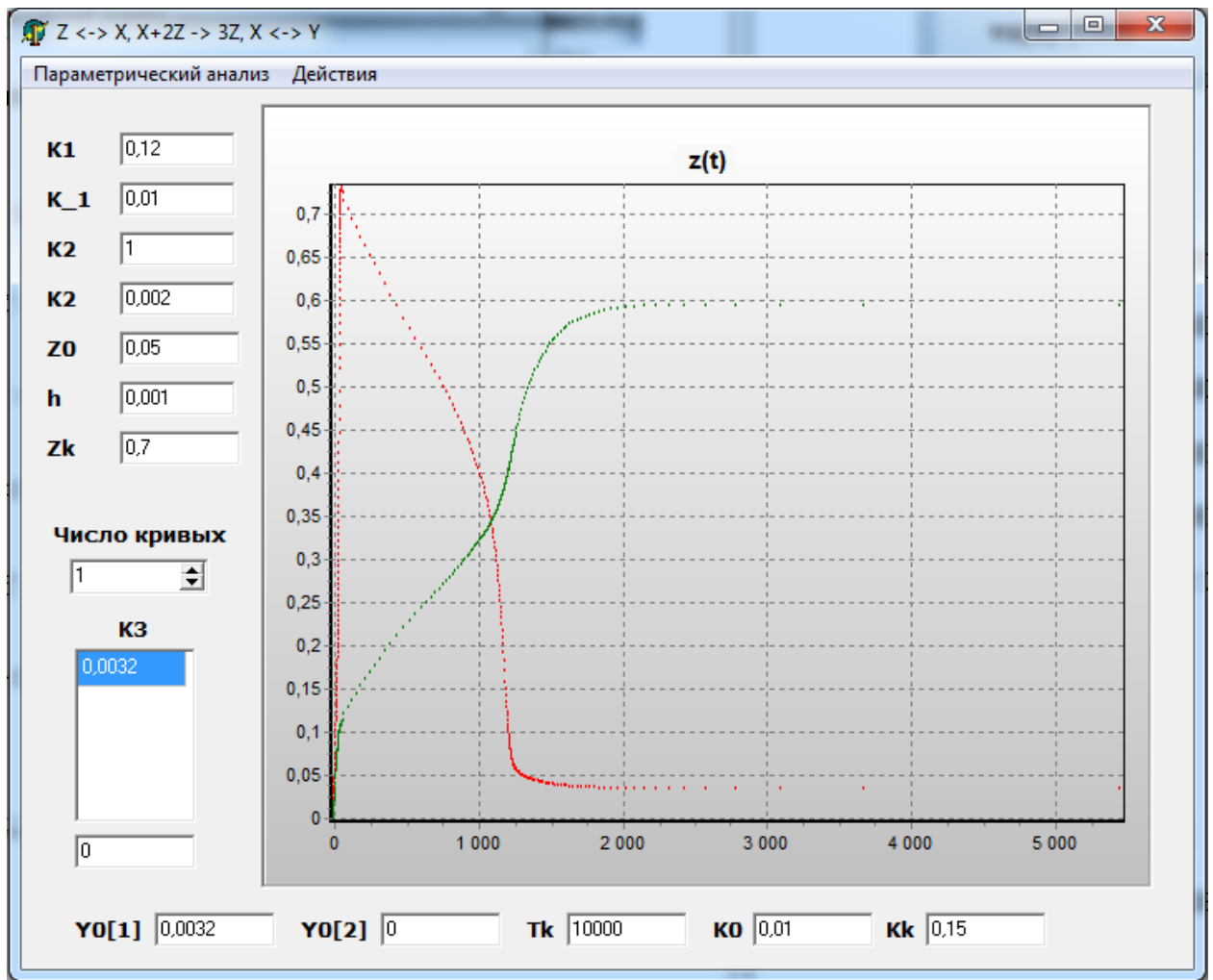


Рисунок 13 - Временные зависимости

Исследована зависимость области множественности ст.с. от параметров k_3 , k_2 , k_2 . При уменьшении k_3 область уменьшается, сдвигаясь при этом вправо вдоль оси k_1 . Уменьшение константы k_2 также приводит к уменьшению размеров области, но сдвигает ее влево по оси k_1 . И, наконец, уменьшение k_2 не столько уменьшает область, сколько сдвигает ее влево.

Аналогичным образом были построены и исследованы кривые кратности в других плоскостях параметров. Так, варьирование параметров k_1 , k_2 , k_2 показало, что область, ограниченная линией L_Δ в плоскости (k_1, k_4) уменьшается при росте k_2 и увеличивается с ростом k_1 . Увеличение же k_2 приводит к уменьшению области множественности ст. с в плоскости (k_4, k_1) .

Выше было отмечено, что в модели колебания отсутствуют. Значит, плоскость параметров разбивается лишь на две области: с одним устойчивым ст.с. и с тремя ст.с., два из которых устойчивы, среднее - неустойчиво (седло).

Итак, в данном разделе показано, что уже простые механизмы без автокатализа позволяют описать большое разнообразие динамического поведения каталитических реакций. Во всех рассмотренных моделях особо выделялся случай единственного неустойчивого ст.с. Однако, это не означает, что колебания существуют только при этом условии. Они были найдены и при трех неустойчивых ст.с.

Сравнительный анализ моделей показал, что в зависимости от буферной стадии, схема может иметь или не иметь автоколебаний, выявил механизмы, обладающие наибольшей областью в параметрическом пространстве, где колебания существуют.

Варьирование параметра k_3 показало, что область единственных неустойчивых ст.с. уменьшается при росте k_3 .

Используя специфику рассмотренной математической модели, в явном виде в плоскости параметров (k_1, k_1) получены бифуркационные кривые.

Анализ их взаимного расположения, позволяет дать классификацию ст.с.

Временные зависимости. Поведение системы во времени носит характер релаксационных колебаний при достаточно малых k_3 , k_3 .

Исследована зависимость периода и амплитуды колебаний от параметра k_3 . Увеличение k_3 приводит к уменьшению, как амплитуды, так и периода колебаний. Амплитуда колебаний может быть априори оценена из

графиков изоклин (функций $f(z)$ и $g(z)$). Для этого нужно найти точки локальных экстремумов функции $f(z)$. Амплитуда равна разности координат этих точек.

Сравнительный анализ областей, ограниченных кривыми L_{Δ} и L_{σ} , для разных механизмов с различными буферными стадиями показывает, что в плоскости параметров (k_1, k_{-1}) наибольшей областью этих параметров, где существует единственное и неустойчивое ст.с. (а значит и автоколебания), обладает механизмы со стадией $2Z \Leftrightarrow 2Y$. В этом смысле наименьшей вероятностью возникновения незатухающих осцилляций характеризуется схема реакции с буферной стадией $X \Leftrightarrow Y$.

Это вряд ли является общим результатом, так как в других плоскостях параметров соотношение размеров указанных областей может быть другим.

Общим же свойством построенных кривых является то, что при изменении параметров k_3, k_{-3} ($k_3/k_{-3} = \text{const}$) область множественности ст.с. не меняется, а область L_{σ} , с ростом k_3, k_{-3} уменьшается, исчезая при определенных значениях k_3, k_{-3} , и она максимальна при стремлении k_3, k_{-3} к нулю. Однако, заметим, что при $k_3=k_{-3}=0$ (стадия 3 отсутствует) автоколебаний нет.

При сколь угодно малых $k_3, k_{-3} > 0$ система характеризуется сколь угодно большим периодом колебаний. Их частота задается величиной k_3, k_{-3} . Нижняя же граница периода колебаний определяется уже набором других параметров.

Приведенные модели могут служить основой при построении более реалистических моделей; результаты исследования позволяют получить априорные оценки сложной динамики каталитических процессов.

Сравнительный анализ моделей показал, что в зависимости от

буферной стадии, схема может иметь или не иметь автоколебаний, выявил механизмы, обладающие наибольшей областью в параметрическом пространстве, где колебания существуют.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе сформировали следующие цели: разработали технологию параметрического анализа кинетических моделей каталитических систем, допускающих множественность ст.с. и автоколебаний в кинетической области. Эта цель определила основные задачи работы:

а) Проведение параметрического анализа базовых, простейших моделей.

б) Проанализировать влияние диффузионной стадии.

в) Построить и проанализировать математические модели проточного каталитического реактора, основанных на базе различных механизмов.

Созданный программно-математический комплекс должен позволить значительно лучше изучить модели вида «реакция + диффузия», а его гибкая архитектура и открытость протокола взаимодействия элементов системы расширить область применения данного продукта на другие сферы математического моделирования.

Данная работа позволяет обратить внимание исследователей в области химической кинетики на возможность применения численных алгоритмов не только для конечного решения построенной модели, но и для исследования самих динамических систем, избавляя тем самым от кропотливого труда выведения аналитических формул.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Адамчук, А.С. Математические методы и модели исследования операций (краткий курс): учебное пособие / А.С. Адамчук, С.Р. Амироков, А.М. Кравцов. – Ставрополь: СКФУ, 2014. – 163 с.
2. Быков, В.И. Моделирование критических явлений в химической кинетике : учебное пособие / В.И. Быков. – Москва: КомКнига, 2012. – 328 с.
3. Быков, В.И. Нелинейные модели химической кинетики: учебное пособие / В.И. Быков, С.Б. Цыбенова. – Москва: Красанд, 2014. – 400 с.
4. МакГрат, Майк. Программирование на С для начинающих: учебное пособие / Майк МакГрат. – Москва: Эксмо, 2016. – 192с.
5. Орлов, С.А. Теория и практика языков программирования: учебник для вузов / С.А. Орлов. – Санкт-Петербург: Питер, 2013. – 688 с.
6. Семакин, И.Г. Основы алгоритмизации и программирования: учебник / И.Г. Семакин, А.П. Шестаков. – Москва: Издательский центр «Академия», 2012. – 400с.
7. Учебное пособие по химии для студентов нехимических направлений. Химическая энергетика и кинетика. Электрохимия / В.А. Кузурман [и др.]. – Владимир : Изд-во ВлГУ, 2012. – 92 с.

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт космических и информационных технологий

институт

Информационные системы

кафедра

УТВЕРЖДАЮ

Зав. кафедрой ИС

_____ Виденин С. А.

подпись инициалы, фамилия

«__» _____ 2017 г.

ЗАДАНИЕ
НА ВЫПУСКНУЮ КВАЛИФИКАЦИОННУЮ РАБОТУ
в форме бакалаврской работы

Студент: Мальцев Владимир Викторович.

Группа: ЗКИ12-07Б-1 Направление: 09.03.01 «Информатика и вычислительная техника».

Тема выпускной квалификационной работы: «Разработка программного комплекса для анализа критических явлений в химических реакторах».

Утверждена приказом по университету № 2904/с от 7.03.2017.

Руководитель ВКР: Л.С. Троценко, доцент кафедры «Информационные системы» ИКИТ СФУ.

Исходные данные для ВКР: список требований к разрабатываемой системе, методические указания научного руководителя.

Перечень разделов ВКР: введение, теоретическая часть, параметрический анализ осциллирующих моделей, программная реализация, заключение.

Перечень графического или иллюстрированного материала с указанием основных чертежей, плакатов, слайдов: презентация, выполненная в Microsoft Office PowerPoint 2010.

Руководитель ВКР

_____ Л.С. Троценко
(подпись)

Задание принял к исполнению

_____ В.В. Мальцев
(подпись)

« 29 » марта 2017г.