

## Определение состава сжигаемого газа методом ограничений как задачи интерпретации модели

А. И. Брунеткин, В. О. Давыдов, А. В. Бутенко, А. П. Лысюк, А. В. Бондаренко

*Запропоновано метод розв'язання задачі визначення невідомого складу газоподібного вуглеводневого палива в процесі його спалювання в режимі реального часу. Задача визначається як зворотна, некоректно поставлена. Спосіб виміру технологічних параметрів дозволяє її деталізувати як складну задачу інтерпретації.*

*Для вирішення цієї задачі обраний метод «бібліотеки» (підбору), який є найбільш універсальним. Для його реалізації розроблено метод формування бібліотеки у вигляді робочого тривимірного масиву. Вихідні дані для кожного рішення прямої задачі в сформованому масиві представлені у вигляді одного числа. Для цього використаний позиційний принцип запису десяткових чисел.*

*При формуванні робочого масиву використаний метод зіставлення коефіцієнта надлишку окиснювача і співвідношення об'ємних витрат окиснювача і пального. Це дозволило використовувати результати розв'язання прямої задачі визначення температури продуктів згоряння для розв'язання оберненої задачі по визначенню цього складу за виміряною температурою.*

*Розроблено метод пошуку рішення серед елементів робочого масиву на основі результатів технологічних вимірів температури продуктів згоряння палива, що спалюється і відношення об'ємних витрат окиснювача і пального.*

*Показано відсутність похибок, що вносяться до рішення алгоритмом запропонованого методу. При моделюванні точних технологічних вимірів похибки обумовлені дискретизацією вихідних даних при вирішенні прямої задачі. Визначено вплив точності вимірювань технологічних параметрів на похибку визначення складу пального. Вона не перевищує допустимої для інженерних розрахунків величини.*

*Запропонований метод розрахунку може дозволити використовувати в керованому режимі в енергетиці і в хімічній промисловості великий обсяг вуглеводневих горючих газів, які вважаються відходами. Їх енергетичний еквівалент порівняємо з енергетичними потребами Африканського континенту*

*Ключові слова: склад палива, зворотна задача, складне завдання інтерпретації, метод обмежень*

### 1. Введение

В научных, производственных, бизнес кругах сложилось понимание необходимости срочного повышения энергоэффективности действующих производств. Это может обеспечить снижение стоимости энергетических ресурсов в стоимости выпускаемой продукции и является одним из путей повышения ее

конкурентоспособности. Так, во многих случаях повышение энергоэффективности понимается буквально как снижение потребления энергоресурсов на единицу выпускаемой продукции. В этом случае повышение энергоэффективности требует совершенствования технологии как производства энергии, так и технологии ее использования. Как следствие, нужны существенные капитальные вложения. Срок внедрения такого оборудования значителен.

Другой путь снижения стоимости энергоресурсов в себестоимости выпускаемой продукции. Необходимо рассмотреть возможность уменьшения энергоемкости производства. Это возможно без повышения энергоэффективности и значительных финансовых затрат за счет снижения стоимости используемых энергоресурсов на существующем энергооборудовании и при действующих технологиях. Речь идет о горючих веществах различного вида, которые образуются в качестве отходов существующих видов производств или могут быть получены при переработке отходов. В качестве примера можно привести газы, образующиеся при коксохимическом, нефтеперерабатывающем производстве, доменные газы, продукты дегазации шахт, попутные газы нефтедобычи, пиролизные газы переработки отходов и др.

Для использования таких энергоресурсов в производстве их должно быть достаточное количество. Газы различного состава должны быть собраны в единый коллектор. И здесь возникает одна из проблем. Состав смеси неизвестен, и более того, переменен с течением времени. Это затрудняет или даже исключает возможность ее использования без оперативного определения состава. Таким образом, определение состава газовой смеси в режиме реального времени является актуальным.

## **2. Анализ литературных данных и постановка проблемы**

Одной из основных составляющих частей попутных газов является метан. При полном сжигании некоторого объема метана образуется эквивалентный объем углекислого газа. По утверждению Межправительственной группы экспертов по изменению климата ООН (IPCC) [1], парниковая активность метана в расчете на 100 лет в 28 раза сильнее, чем у углекислого газа того же объема. В 20-летней перспективе эта величина еще больше – в 84 раза. По этой причине для снижения экологической нагрузки не используемые в практических целях попутные газы стараются сжигать в факельных устройствах.

На основе оценок Всемирного банка [2] в 2017 году таким способом нейтрализовано 141 млрд кубических метров газа. По оценкам [3], его рациональное использование позволило бы обеспечить в течении года африканский континент электроэнергией. С другой стороны, стоимость этого газа может составлять около 30 млрд. долл. США, что соответствует четверти потребления газа в США или 30 % в Европейском Союзе ежегодно. Помимо сжигания часть газов выбрасывается просто в атмосферу (дегазация шахт, свалочные газы, отходы животноводства и др.). Приведенные данные свидетельствуют о значимости проблемы рационального использования

попутных газов. При этом кроме экономических задач большую роль играют и вопросы экологии.

К настоящему моменту сложилось несколько направлений организации процесса оптимального сжигания газа неизвестного состава.

*Экстремальные регуляторы.* Для всех их видов общий недостаток определяется самим видом экстремальной характеристики. При приближении к точке экстремума уменьшается (вплоть до нуля) градиент измеряемого параметра. Это относится и к случаю определения максимальной температуры в камере сгорания (топке) [4], и к случаю определения максимальной температуры теплоносителя [5]. Такое же свойство функции проявляется и при определении минимальной (нулевой) концентрации окиси углерода (CO) при минимальной концентрации кислорода в дымовых газах [6]. С учетом наличия порога чувствительности и погрешностей систем измерения в точке экстремума возникают максимальные погрешности определения искомого сигнала. Шумы измерительных каналов также оказывают негативное влияние на точность определения искомого сигнала. Как следствие, в точке экстремума наблюдается максимальная погрешность измерения.

Недостатки существенно затрудняют, а во многих случаях исключают возможность использования экстремальных регуляторов при использовании топлива переменного состава.

*Газовые анализаторы.* Другим направлением обеспечения оптимальных параметров организации процесса сжигания или химического преобразования углеводородных газов неизвестного переменного состава является определение их компонентов. В этом случае появляется возможность организации процессов не имеющих экстремальных энергетических характеристик. В качестве примера можно привести печи безокислительного нагрева [8] или реакторы органического синтеза.

При анализе смесей газов с целью установления их качественного и количественного состава различают химические, физико-химические и физические методы. Существенные преимущества физико-химических и физических методов перед химическими – быстрота выполнения, возможность автоматизации анализа – обусловили их более широкое распространение. В настоящее время наиболее широкое применение находят методы газовой хроматографии [9]. Основными недостатками этих приборов является последовательное (не одновременное) измерение различных компонентов газа, длительное время анализа, а также трудности, возникающие при обнаружении некоторых компонентов.

В последнее время обсуждается разработка газоанализаторов, основанных на использовании спонтанной рамановской спектроскопии (spontaneous Raman spectroscopy). С появлением небольших, надежных лазерных источников и высокочувствительных многоканальных фотоприемников создание такого инструмента стало рассматриваться в прикладном плане [10], хотя до настоящего времени находится на стадии лабораторных разработок. Кроме того, такие устройства требуют высококвалифицированного обслуживания.

*Определение приведенной формулы смеси.* Большая часть расчетов параметров процессов горения (химического превращения) выполняется на основе методов химической кинетики для отдельного вещества [11]. Для возможности использования такого подхода при рассмотрении процесса горения смеси газов должны определяться ее энтальпия и брутто-формула. В [12] предложен метод определения такой формулы при сжигании используемой смеси. В основу положено измерение температуры продуктов сгорания (ПС) и расходов неизвестного газообразного горючего и воздуха. Предусматривается прохождение процесса идентификации состава непрерывно в режиме реального времени.

Сформулированная задача является обратной. На основании замеров технологических параметров проводится определение состава сжигаемого горючего. В [12] показано, что решение этой задачи существует и единственно. Но попытка найти решение показала его неустойчивость. Таким образом, сформулированная задача, как и большинство обратных задач, является некорректно поставленной.

Не существует единого метода решения всего многообразия обратных некорректно поставленных задач. Каждый их вид требует индивидуального подхода и несет существенную эвристическую составляющую. Это затрудняет или даже исключает использование существующих методов решения в автоматическом устройстве определения брутто-формулы горючего переменного состава. Кроме того, состав горючего может многократно изменяться в течении малого промежутка времени. Это влечет необходимость оперативного многократного получения решения задачи. Как следствие, возникает необходимость в разработке нового метода решения.

### **3. Цель и задачи исследования**

Целью исследования является решение задачи определения состава сжигаемого газа методом ограничений как задачи интерпретации модели определения состава сжигаемого горючего. Это позволит рационально использовать горючие газы и их смеси произвольного и переменного состава с технологической, энергетической и экологической позиций.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

- обосновать выбор метода решения обратной некорректно поставленной задачи;
- разработать способ заполнения библиотеки решений прямой задачи в виде рабочего трехмерного массива в рамках выбранного метода решения сложной задачи интерпретации как разновидности обратной некорректно поставленной задачи;
- разработать метод поиска решения сложной задачи интерпретации на базе использования данных рабочего трехмерного массива;
- определить величину погрешности, вносимую в решение при использовании разработанного метода;
- определить влияние погрешности измерений технологических параметров на точность определения состава горючего.

#### 4. Метод решения задачи

##### 4. 1. Обоснование выбора метода решения

Для решения обратной задачи прежде всего надо уметь решать прямую.

При решении прямой задачи в качестве одного из исходных данных задается коэффициент избытка окислителя  $\alpha$ . Но при расчетах используется иная величина:

$$\chi = \alpha \cdot \chi_0, \quad (1)$$

где  $\chi$  – мольный коэффициент соотношения компонентов;  $\chi_0$  – мольный стехиометрический коэффициент соотношения компонентов.

В любой модели переменные величины делятся на исходные данные и результаты расчета. К группе исходных относятся величины, определение которых возможно априори (лат. a priori). В рассмотренной модели таковым являются коэффициент избытка окислителя, определяемый только при известном составе горючего и окислителя. В качестве результатов выступают парциальные давления веществ в смеси ПС и их температура. Проявляется определенное возможное направление расчета, «детектирование» решения.

Сделаем допущение. Будем рассматривать альтернативные виды горючих, находящиеся в газообразном состоянии. При рассмотрении горючего и окислителя в качестве идеальных газов, величина  $\chi$  может быть определена исходя из равенства мольных объемов любых газов:

$$\chi = \dot{V}_{ox} / \dot{V}_f. \quad (2)$$

Здесь  $\dot{V}_{ox}$  – объемный расход окислителя (воздуха);  $\dot{V}_f$  – объемный расход горючего. Другими словами, величина  $\chi$  (1) может быть определена исходя из технологических замеров расходов без фиксации химического состава горючего и окислителя. На этом свойстве строится модель для решения задачи определения состава сжигаемого топлива на основе технологических замеров температуры ПС и объемных расходов горючего и окислителя (обратная задача).

При учете ряда факторов необходимость «детектирования» решения может быть исключена. К ним можно отнести ограничение заранее известного перечня химических элементов в брутто-формуле топлива  $C_{b_C} H_{b_H} O_{b_O} N_{b_N}$  [12]. Кроме того, это обеспечивает использование замеренной величины температуры  $T$  ПС и величины мольного коэффициента соотношения компонентов  $\chi$  в виде соотношения замеренных объемных расходов окислителя и горючего (2).

Теперь в перечень вычисляемых величин, наряду с парциальными давлениями веществ в ПС, можно включить одну из величин количества атомов в брутто-формуле топлива, например,  $b_H$ . Ее место в исходных данных займет замеренная температура ПС. Назовем такую модель обратной в отличие от исходной. Применение такого подхода для описания других величин,  $b_C$ ,  $b_O$ ,  $b_N$ ,  $I_t$

– энтальпии топлива, позволяет записать модель для определения состава топлива в процессе его сжигания.

Будем считать, что состав горючего остается постоянным в течение некоторого времени (парирование нарушения такого условия будет рассмотрено ниже). Это обуславливает неизменность значений искомых величин  $b_C$ ,  $b_H$ ,  $b_O$ ,  $b_N$ ,  $I_t$  в течение времени их определения. Задается некоторое соотношение горючего и окислителя с замером их объемных расходов ( $\dot{V}_{ox}^1$  и  $\dot{V}_f^1$ ). Замеряется температура ПС  $T^1$  при их сжигании. Эти данные служат основой для записи части модели в виде комплекта уравнений (в рассматриваемом случае – 13), обеспечивающих определение 12 парциальных давлений  $P_j^1$  и одной из искомых величин, например  $b_C$ . Далее производится несколько изменений соотношения объемных расходов ( $\dot{V}_{ox}^i$  и  $\dot{V}_f^i$ ). Для каждого из них замеряется температура ПС –  $T^i$ . Полученные данные служат основой для записи еще нескольких комплектов уравнений, необходимых для нахождения оставшихся искомых величин –  $b_H$ ,  $b_O$ ,  $b_N$ ,  $I_t$ . При этом определяется и соответствующее количество комплектов парциальных давлений  $P_j^i$  ПС. Таким образом, в рассматриваемом случае будет записана система уравнений, состоящая из 5 комплектов по 13 уравнений (всего 65) для определения 5 искомых величин и 5-ти групп парциальных давлений. Каждая группа соответствует различным соотношениям объемных расходов горючего и окислителя.

В литературе описано несколько способов решения прямой задачи – определения температуры продуктов сгорания при известном составе топлива. Многие из них используются при решении частных вариантов. В [13] изложен наиболее универсальный подход. Решение ищется относительно логарифмов искомых величин. Это позволяет сгладить влияние большой разницы (в 12–15 порядков) между парциальными давлениями веществ в ПС. Для решения системы нелинейный алгебраических уравнений используется метод Ньютона-Рафсона. Возникающая в ряде случаев неустойчивость решения преодолевается введением коэффициента нижней релаксации не ниже 0,5.

Полученная выше описанным способом система уравнений в несколько раз больше, чем используемые в [13]. Но используемые в ней уравнения имеют подобный вид. Попытка применения к ней аналогичного подхода при решении приводит к неустойчивости при любых условиях. Анализ показал, что причиной неустойчивости может быть плохая обусловленность системы линеаризованных уравнений, получаемая в ходе решения. Это свойственно обратным некорректным задачам, но не является обязательным.

Для конкретизации причины неустойчивости метод из [13] был применен для решения аналогичной обратной задачи, описываемой моделью меньшей размерности. За основу были взяты описанные выше 13 уравнений, которые могут использоваться для определения одной любой из искомых величин, например  $b_H$ . В результате получено сходящееся решение на тех же условиях, что и в [13]. На основании этого можно предположить, что причина неустойчивости обусловлена не решением данной обратной задачи.

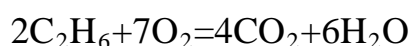
Термин "обратная задача" часто применяют и для описания «сложной задачи интерпретации». Одним из ее признаков является измерение не одновременно, а независимо друг от друга, некоторого числа параметров. Этому определению соответствует рассматриваемая задача и описывающая ее модель. Для ее решения наиболее общим, но громоздким, является метод «библиотеки» (подбора). В его рамках для «заполнения» многократно решается прямая задача при различных сочетаниях исходных данных. В качестве решения из библиотеки прямых решений выбирается элемент, наиболее близко соответствующий выполненным измерениям. Такой процесс решения предполагает преодоление математических трудностей. Как и для любых некорректных задач, необходимым элементом является введение дополнительной априорной информации об искомом объекте и решении. Успех решения зависит от качества и количества полученной из эксперимента информации и от способа её обработки. Неклассическое решение связано с изменением представления о самой модели. В этом случае модель включает и априорную информацию о возможном характере предполагаемого решения, по крайней мере уменьшающую информационную неопределённость, и алгоритм обработки информации, то есть получения "решения". Исходя из этих положений разработан метод решения задачи определения состава топлива.

#### **4. 2. Способ заполнения библиотеки решений прямой задачи в виде рабочего трехмерного массива**

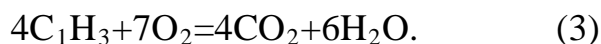
На подготовительной стадии определения брутто-формулы топлива заполнение библиотеки решений прямой задачи должно происходить при варьировании 6 величин. К ним относятся возможное количество атомов соответствующих элементов в брутто-формуле топлива ( $b_C$ ,  $b_H$ ,  $b_O$ ,  $b_N$ ), возможная величины коэффициента избытка окислителя  $\alpha$  и возможная величины энтальпии топлива  $I_f$ .

Количество интервалов может быть любым. Для определенности примем 100, что позволит отследить изменение каждой из величин  $b_C$ ,  $b_H$ ,  $b_O$ ,  $b_N$ , например в интервале 0,05...4,95 с шагом 0,05, величины  $\alpha$  – в интервале 0,025...2,5 с шагом 0,025. Это потребует  $(100)^6=10^{12}$  решений прямой задачи с фиксацией всех результатов. На этом этапе возможно сокращение мерности задачи.

Если азот (N) в состав топлива вносится только из воздуха, то величина  $b_N$  из списка варьируемых исключается, и количественно будет определяться через коэффициент избытка окислителя  $\alpha$ . Далее, в соответствии с [14] количество переменных в задаче может быть уменьшено за счет их нормирования. Для организации оптимального, или более широко, контролируемого процесса сжигания топлива, нет необходимости даже в знании его брутто-формулы. Достаточно определить соотношение количества входящих в него атомов химических элементов. Например, стехиометрический процесс горения этана (и любого другого вещества) может быть организован как на основе его полной формулы, так и при нормированном количестве атомов:



или



Здесь нормирование выполнено по количеству атомов углерода. В брутто-формуле количество атомов не обязательно должно быть целыми числами. Нормирование может быть выполнено по любому химическому элементу. В рассматриваемой задаче нормируем по углероду. Количество атомов углерода будет постоянным и равным 1. В этом случае брутто-формула определяется в виде:

$$C_1H_{(b_H/b_C)}O_{(b_O/b_C)}N_{(b_N/b_C)} \text{ или } C_1H_{d_H}O_{d_O}N_{d_N} \quad (4)$$

В результате количество решений прямой задачи снижается до  $(100)^4=10^8$  реализаций.

На следующем этапе представленным методом осуществляется преобразование полученных результатов в форму, удобную для использования при поиске решения на основе выполненных технологических измерениях температуры ПС и объемных расходов горючего и окислителя:

1. Основную долю в объеме результатов расчета при решении прямой задачи составляют парциальные давления газов в смеси ПС. В процессе определения состава исходного топлива участия не принимают и в результирующей библиотеке результатов решения прямой задачи не отображаются.

2. Путем варьирования  $d_H$ ,  $d_O$ ,  $d_N$  и из (4) для каждой реализации решения прямой задачи задается определенный состав горючего. На основании этого для каждого случая может быть определен мольный стехиометрический коэффициент соотношения компонентов  $\chi_0$ . С учетом (1), (2) изменение величины коэффициента избытка окислителя  $\alpha$  пересчитывается в изменение отношения измеряемых технологических параметров  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$ .

3. При всех возможных сочетаниях исходных данных  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$  ( $\alpha$ ),  $d_H$ ,  $d_O$ ,  $d_N$  и  $I_t$ , возникающих при варьировании их величин, реализуется попытка решения прямой задачи определения температуры ПС. В ряде случаев рассматриваемое соотношение состава топлива и его энтальпии является несовместимыми. Такие варианты расчетов исключаются из рассмотрения.

4. Для остальных (успешных) реализаций решения прямой задачи совокупность исходных данных  $d_H$ ,  $d_O$ ,  $d_N$  и  $I_t$  записывается в виде одного числа на основе позиционного принципа представления десятичных чисел. Для этого сначала данные записываются в нормированном виде. Например:

$$\bar{d}_H = \frac{d_H - d_H^l}{d_H^r - d_H^l} \cdot 100. \quad (5)$$

Здесь  $d_H$  – количество атомов водорода в рассматриваемой реализации прямой задачи;  $d_H^l$ ,  $d_H^r$  – левая и правая границы рассматриваемого интервала



изменения величины количества атомов водорода при решении прямой задачи. В рассматриваемом случае множитель «100» соответствует количеству шагов изменения  $d_H$ . Его величина обусловлена лишь выбранным диапазоном (0...4,95) и шагом (0,05) изменения. В результате  $\bar{d}_H \in [00...99]$ . Аналогичным образом преобразуются  $d_O$ ,  $d_N$  и  $I_t$  с получением соответствующих величин  $\bar{d}_O$ ,  $\bar{d}_N$  и  $\bar{I}_t$ , значения которых также изменяются в таком же или подобном интервале. Полученные значения объединяются в одно число «E» путем установки на соответствующие его разряды (рис. 1). Установим для определенности в первые два разряда значение  $\bar{I}_t$ . Хотя порядок формирования этого числа может быть любым другим. В итоге образуются комплексы, в которых каждой паре значений результатов решения прямой задачи ( $T$  и  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$ ) соответствует одно число с упакованными значениями соответствующих им исходных данных;

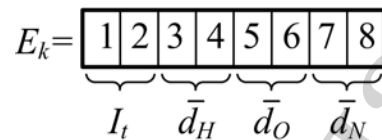


Рис. 1. Схема позиционного представления в виде единого числа нормированных значений исходных данных

5. Структурируются результаты расчета ( $T$  и  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$ ). С этой целью определяются их  $\max [T^r, (\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f)^r]$  и  $\min [T^l, (\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f)^l]$  значения. Диапазоны их изменения разбиваются на некоторое количество интервалов. Количество интервалов и, соответственно, величина шага изменения каждой величины соотносится с доступной технологической точностью измерения величин ( $T$  и  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$ ) в процессе сжигания топлива.

6. Используя результаты решения ( $T$  и  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$ ) прямой задачи и соответствующие им исходные данные, сведенные в единое число «E», формируется трехмерный массив (рис. 2). Плоскость  $T - \dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$  разбивается на ячейки со сторонами:

$$\Delta T = \frac{T^r - T^l}{N}; \quad \Delta V = \frac{(\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f)^r - (\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f)^l}{M}. \quad (6)$$

Здесь  $N$ ,  $M$  – количество элементов (интервалов) по соответствующим осям. Границы ячеек определяются из соотношений:

$$T_i^l = T^l + \Delta T \cdot (i - 1); \quad T_i^r = T^r + \Delta T \cdot i; \quad i \in [0, N]. \quad (7)$$

$$(\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f)_j^l = (\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f)^l + \Delta V \cdot (j - 1);$$

$$(\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f)_j^r = (\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f)^r + \Delta V \cdot j; \quad j \in [0, M], \quad (8)$$

где  $i, j$  – номера ячеек по осям  $T$  и  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$  соответственно.

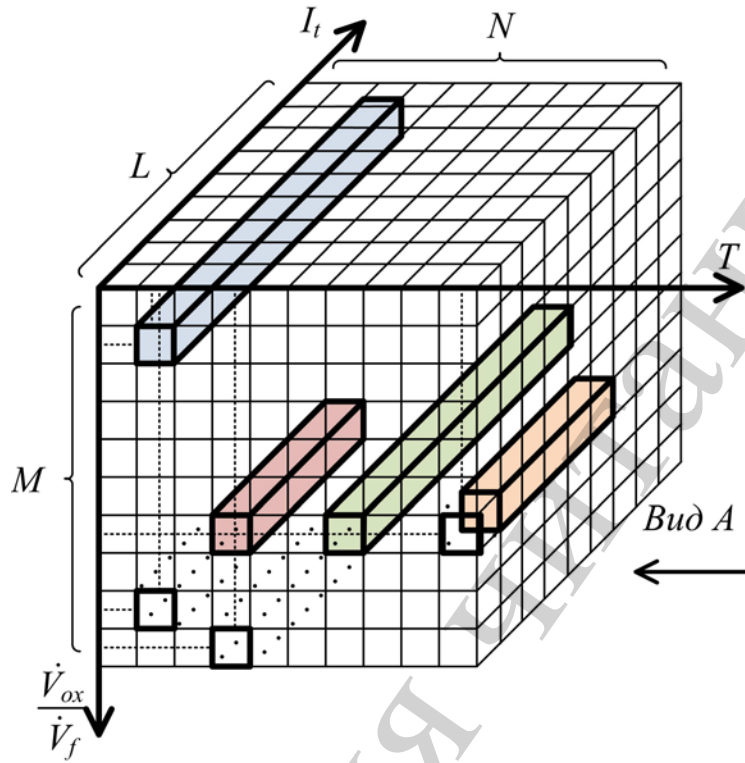


Рис. 2. Схема формирования структурированного рабочего трехмерного массива на основе исходных данных и результатов решения прямой задачи

7. Каждой ячейке ставится в соответствие вектор размерности  $L$  (рис. 2), элементами которого являются числа « $E$ ». Величина числа определяется значением в первом (старшем) разряде. В рассматриваемом случае значения в первых разрядах определяются величиной энтальпии. Поэтому ось векторов обозначена как ось энталь  $P_z = f(v)$  и  $I_t$ . Шаг изменения величины элементов вектора определяется таким же образом (6), как и для  $T$  или  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$ :

$$\Delta I_t = \frac{I_t^r - I_t^l}{L}, \quad (9)$$

а диапазон изменения энтальпий, соответствующий каждому элементу вектора, определяется из соотношений, аналогичных (7) или (8):

$$(I_t^l)_k = I_t^l + \Delta I_t \cdot (k - 1); \quad (I_t^r)_k = I_t^r + \Delta I_t \cdot k; \quad k \in [0, L]. \quad (10)$$

Здесь  $I_t^l$ ,  $I_t^r$  – минимальное и максимальное значения энтальпий из рассматриваемого диапазона их изменения при решении прямой задачи;  $\Delta I_t$  – шаг изменения энтальпии;  $L$  – количество элементов, на которое разбивается рассматриваемый интервал изменения энтальпии. Величина  $L$ , так же, как и  $M$ ,  $N$ , определяется исследователем с учетом необходимой точности рассмотрения соответствующих величин. Примем, например, что в (6)  $N=100$  и  $M=100$ . В этом случае на плоскости  $T - \dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$  формируется  $10^4$  ячеек. При количестве реализаций решения прямой задачи  $10^8$  каждой ячейке могут соответствовать результаты  $\sim 10^8/10^4=10^4$  решений. Аналогичное количество связанных с этими решениями чисел « $E_k$ » размещаются в элементах соответствующих векторов.

8. В элементах вектора размещаются значения « $E_k$ », которые находятся в соответствующих им границах:

$$E_k \in [(I_t^l)_k, (I_t^r)_k]. \quad (11)$$

Некоторые элементы векторов оказываются незаполненными т. к. не все комбинации состава топлива ( $\bar{d}_H$ ,  $\bar{d}_O$ ,  $\bar{d}_N$ ) могут быть реализованы при рассматриваемом перечне величин энтальпий  $I_t$ . Элементы векторов упорядочены в порядке возрастания. Поэтому значения чисел « $E_k$ » в рамках каждого вектора также упорядочены в порядке возрастания. Примеры заполнения некоторых векторов приведены на рис. 2 и отмечены цветом.

Таким образом, на основе предварительного решения комплекса прямых задач и обработки результатов расчетов сформирован рабочий трехмерный массив. Величины из массива могут быть использованы при определении состава различных топлив. Важно, чтобы их брутто-формула состояла из химических элементов, использованных при формировании рабочего массива. При этом некоторые элементы могут отсутствовать. Например, рассматриваемый массив может служить основой для определения состава как кислородсодержащих, так и безкислородных углеводородов, при горении их в воздухе и в кислороде (без азота).

#### **4. 3. Метод поиска решения сложной задачи интерпретации на базе использования данных рабочего трехмерного массива**

Метод определения состава топлива с использованием сформированного рабочего трехмерного массива реализуется следующим образом:

1. Изменяя и фиксируя величину отношения объемных расходов окислителя и горючего  $(\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f)_i$  замеряется температура ПС  $T_i$  для каждого случая. Количество таких изменений и измерений определяется количеством определяемых величин. Так в случае топлива вида (4) необходимо определить 4 величины ( $\bar{d}_H$ ,  $\bar{d}_O$ ,  $\bar{d}_N$ ,  $I_t$ ) и, соответственно, выполнить 4 комплекта измерений.

2. В соответствии с этими измерениями на плоскости  $T - \dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$  рабочего трехмерного массива определяются 4 ячейки (выделены штриховыми линиями

рис. 2) и связанные с ними вектора (выделены цветом). Данные из остальных векторов на данном шаге работы не используются. Элементами векторов являются числа  $E_k$ . В каждом векторе в  $E_k$  записаны все возможные комбинации определяемых величин ( $\bar{d}_H$ ,  $\bar{d}_O$ ,  $\bar{d}_N$ ,  $I_t$ ), которые обеспечивают температуру  $T_i$  при  $(\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f)_i$  соответствующей ячейки.

3. Выбранные вектора проецируются на плоскость  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f - I_t$  (вид А, рис. 2), точнее на ось  $I_t$ . Возможное положение векторов отображено на рис. 3 и выделено цветом.

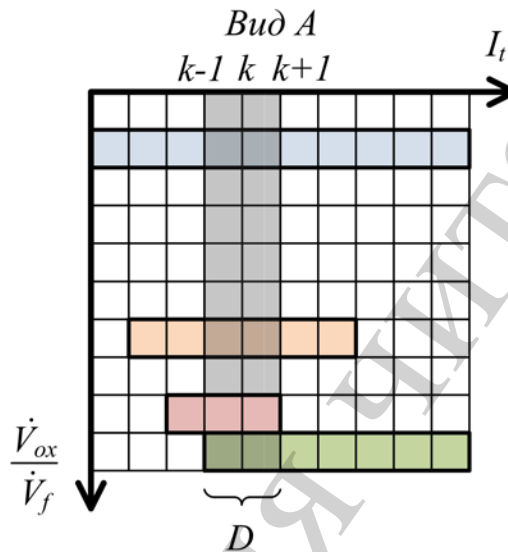


Рис. 3. Пример проекции выбранных векторов

4. При всех соотношениях изменения объемных расходов состав и энтальпия определяемого топлива остаются постоянными. Следовательно, должны быть одинаковыми и соответствующие им величины чисел  $E_k$  во всех рассматриваемых векторах. На этом основании выделяются такие элементы, что отображено областью  $D$  на рис. 3. В реальной ситуации эта область может занимать более чем 2 интервала. Все остальные элементы рассматриваемых векторов в дальнейших преобразованиях не участвуют. В старших разрядах чисел  $E_k$  отображаются значения энтальпий топлива. Следовательно, в каждом интервале ( $k-1 \leftrightarrow k$  и  $k \leftrightarrow k+1$ ) в элементах векторов располагаются комплекты исходных данных (числа  $E_k$ ) с одинаковыми энтальпиями. Точнее энтальпии находятся в интервалах  $(I_t)_{k-1} \leftrightarrow (I_t)_k$  и  $(I_t)_k \leftrightarrow (I_t)_{k+1}$ , обусловленных точность их определения.

5. Все выделенные числа (область  $D$ , рис. 3) перестраиваются в стековом порядке. Значение из старших разрядов (рис. 1) переносится в конец числа. В старшие разряды переносятся значения следующей определяемой величины (рис. 4).

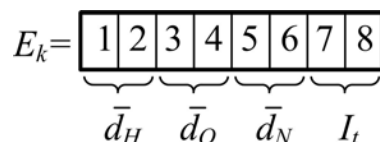


Рис. 4. Схема позиционного представления в виде единого числа нормированных значений исходных данных после их перестройки

В рамках рассматриваемых векторов оставшиеся (перестроенные) числа сортируются, например, в возрастающем порядке. В результате образуется схема расположения оставшихся чисел, подобная приведенной на рис. 3.

6. Повторяются действия с пункта 4 пока не будут использованы все величины из списка определяемых ( $I_t$ ,  $\bar{d}_H$ ,  $\bar{d}_O$ ,  $\bar{d}_N$ ). В отличие от первого исполнения, происходит выделение числа не с одинаковой энтальпией  $I_t$ , а с величиной из старших разрядов числа  $E_k$  в рассматриваемый момент. Так, при втором проходе это  $\bar{d}_H$ , при третьем –  $\bar{d}_O$  и т. д. При каждом проходе количество оставшихся чисел  $E_k$  уменьшается. В конечном итоге остается одно. В нем сосредоточены исходные данные, соответствующие всем замеренным  $T_i$  при заданных  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$ . Это и является решением.

## 5. Примеры решения задач определения состава топлива

### 5.1. Имитация технологических замеров без учета приборных погрешностей

Работоспособность предложенного метода проверена на примере определения заведомо известного состава метана ( $\text{CH}_4$ ), пропана ( $\text{C}_3\text{H}_8$ ) и этилового спирта ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ). Для метана рациональная, брутто-формула и приведенная брутто-формула совпадают. Для пропана совпадают рациональная и брутто-формулы. Приведенная брутто-формула имеет вид  $\text{CH}_{8/3}$  или  $\text{CH}_{2,(6)}$ . Для спирта брутто-формула и приведенная брутто-формула имеют вид  $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$  и  $\text{CH}_3\text{O}_{0,5}$  соответственно. Рассматривался пример сжигания этих веществ в кислороде. Это позволяет использовать для поиска состава топлива брутто-формулу вида:

$$\text{CH}_{\bar{d}_H} \text{O}_{\bar{d}_O}. \quad (12)$$

Такой выбор для проверки работоспособности метода вызван следующими причинами:

– использование воздуха в качестве окислителя не вносит в процесс горения принципиальных особенностей по сравнению с использованием кислорода. При этом отсутствие азота делает проверку работоспособности метода менее громоздкой;

– выбор спирта в качестве горючего обусловлен наличием справочных данных [15] по процессу его горения в кислороде ( $\alpha$ ,  $T$ , состав ПС). Это обеспечивает контроль достоверности результатов решения прямой задачи при формировании рабочего трехмерного массива;

– выполнение требования нахождения горючего в газообразном состоянии для спирта обеспечивается рассмотрением случая нахождения его в парообразном состоянии и соответствующей этому энтальпии.

Исходные данные в виде технологических замеров имитировались результатами решения прямой задачи для соответствующих веществ. Рассматривается два варианта задания исходных данных:

1. Имитация технологических замеров без учета приборных погрешностей. Целью является проверка принципиальной работоспособности предложенного метода. Совпадение или отклонение определенных составов горючих от заданных будет определять погрешность работы метода.

2. Имитация технологических замеров с возможной погрешностью измерений. Целью является оценка влияния погрешности измерений на точность определения состава горючего.

Вариант задания исходных данных не влияет на порядок формирования рабочего трехмерного массива. Были приняты следующие диапазоны изменения исходных данных:

– в (12):

$$\exists \bar{d}_H \in [0...4,95]: (\bar{d}_H)_i = \Delta d \cdot (i - 1) \quad \Delta d = 0,05 \quad \forall i \in [1...100];$$

$$\exists \bar{d}_O \in [0...4,95]: (\bar{d}_O)_i = \Delta d \cdot (i - 1) \quad \Delta d = 0,05 \quad \forall i \in [1...100]. \quad (13)$$

– коэффициент избытка окислителя  $\alpha$ :

$$\exists \alpha \in [0,025...2,5]: \alpha_j = 0,025 + \Delta \alpha \cdot (j - 1) \quad \Delta \alpha = 0,025 \quad \forall j \in [1...100]. \quad (14)$$

– энтальпия топлива  $I_t$ :

$$\begin{aligned} \exists I_t \in [-13500...8800] \frac{\text{кДж}}{\text{кг}}: (I_t)_i &= -13500 + \Delta I_t \cdot (i - 1) \\ \Delta I_t &= 100 \quad \forall i \in [1...224]. \end{aligned} \quad (15)$$

В результате выполнено  $2,24 \cdot 10^8$  решений прямой задачи. На это было затрачено несколько часов при работе распространенного бытового персонального компьютера. Для всех комбинаций исходных данных рассчитаны температуры ПС и пересчитаны коэффициенты избытка окислителя  $\alpha$  в отношении объемных расходов окислителя и горючего  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$ . Часть комбинаций исходных данных оказались несовместимыми. Это было выявлено в ходе решений. После удаления таких комбинаций был сформирован рабочий массив. При использовании величин в десятичном виде для его размещения потребовалось  $\sim 2,7$  ГБт памяти. После перевода в бинарный вид объем уменьшился до 1,2 ГБт. Необходимые ресурсы имеются на всех распространенных персональных компьютерах.

Использование предлагаемого метода при определении состава топлива позволило для рассматриваемых веществ (метан, пропан, этиловый спирт) получить точное в рамках модели решение. Погрешность обусловлена степенью дискретизации исходных данных.

В последнем случае наличие диапазона вместо конкретной величины объясняется, а величина погрешности определяется шагом дискретизацией данных  $\Delta d$  (13) при формировании чисел  $E_k$  рабочего трехмерного массива.

## 5. 2. Имитация технологических замеров с наложением погрешности измерений

Исходные данные в виде технологических замеров имитировались результатами решения прямой задачи для метана и пропана. Задавались различные значения коэффициента избытка окислителя  $\alpha$  как большего, так и меньшего 1. Для них рассчитывались температуры  $T$  ПС и на основании (1), (2) величины отношения  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$ . Полученные значения, как и в предыдущем разделе, принимались в качестве «точных» исходных данных. Исходные данные для решения обратной задачи идентификации получены из «точных» путем их изменения в обе стороны на  $\pm 1\%$ . Решения ищались при всех возможных комбинациях максимального отклонения исходных данных от «точных» значений.

При тестовом «точном» определении состава метана найденное количество атомов водорода всегда было однозначно равно 4 или определялось двумя величинами: 3,95 и 4. Диапазон неоднозначности в последнем случае обусловлен шагом дискретизации (13) этой величины при решении прямой задачи.

В рассматриваемом случае в качестве решения выступают диапазоны возможных значений определяемых величин. Не во всех случаях имеется возможность найти общий диапазон для всех вариантов расчетов. Для повышения точности решения использовалось увеличенное по сравнению с теоретически необходимым количество замеров технологических параметров. В качестве решения выбирался диапазон (рис. 3) с наибольшим количеством совпадений среди всех замеров технологических параметров. Таким образом в качестве решения рассматривается наиболее вероятное значение определяемой величины.

В результате решения получены диапазоны возможных значений количества атомов водорода в нормированных брутто-формулах и коэффициента избытка окислителя  $\alpha$  при записи стехиометрической реакции горения:

– для метана

$$\text{CH}_{3,7} \div \text{CH}_{4,1} \text{ (точное значение } \text{CH}_4 \text{)}, \quad (16)$$

– для пропана

$$\text{CH}_{2,5} \div \text{CH}_{2,75} \text{ (точное значение } \text{CH}_{2,(6)} \text{)}, \quad (17)$$

– для метана

$$\alpha \in [0,96...1,01]; \text{ для пропана } \alpha \in [0,98...1,01]. \quad (18)$$

Диапазон изменения  $\alpha$  (18) получен путем сравнения количества молей кислорода в соответствующей стехиометрической реакции при граничных и точных значениях количества атомов водорода в соответствующих веществах.

## **6. Обсуждение результатов решения задачи определения состава сжигаемого газа методом ограничений**

Предлагаемый метод решения может быть применен при ряде допущений:

- топливо, состав которого определяется, должно находиться в газообразном состоянии;
- свойства газообразных горючего и окислителя подчиняются уравнению состояния идеального газа;
- состав горючего в процессе нескольких технологических измерений температуры ПС и его объемных расходов не должен изменяться.

Первые два допущения для инженерных расчетов можно считать не строгими и выполнимыми при любом составе топлива. Рассматриваемый метод предлагается использовать при определении переменного состава горючего. Поэтому возможность выполнения третьего допущения необходимо рассмотреть дополнительно.

На первом этапе должно быть выполнено необходимое количество технологических замеров для начала определения состава горючего. Например три комплекта  $T$  и  $\dot{V}_{ox}/\dot{V}_f$  {1, 2 и 3}. На их основе определяется первый состав горючего. Для следующего расчета достаточно выполнить только один замер {4} и в качестве исходных данных использовать {2, 3 и 4} замеры. Все дальнейшие расчеты выполняются в такой же последовательности после одного очередного замера комплекта данных. При этом после каждого расчета найденный состав горючего сравнивается результатами предыдущего шага. Из совпадения результатов следует отсутствие изменения состава горючего на текущем шаге измерений. В противном случае необходимо отказаться от использования результатов предыдущих измерений. Выполнить три комплекта измерений и рассчитать новый состав горючего как на первом этапе. Далее по той же схеме. Таким образом может быть выявлен момент изменения состава горючего.

Измерение трех комплектов данных на первом этапе расчета приведено только в качестве примера. Количество измерений может быть любым исходя из необходимости.

Количество вычислительных ресурсов (внешняя память) и времени решения  $10^8$  вариантов прямых задач, затраченных при формировании рабочего трехмерного массива для тестовой задачи, значительно (раздел 5.1). При этом в состав брутто-формулы горючего могло входить только три химических элемента: С, Н и О. Добавление каждого следующего элемента лавинообразно увеличивает количество решений прямой задачи. Следует рассмотреть границы применимости предлагаемого метода решения.



В качестве газов, состав которых определяется, в подавляющем большинстве случаев выступают органические соединения. Их состав может быть определен с помощью шести элементов. Кроме трех рассмотренных выше следует учесть азот (N), серу (S), фосфор (P). Все исходные данные, определяющие возможный состав определенного газа, представляются в виде одного числа нормированных значений исходных данных (рис. 1). Поэтому увеличение количества учитываемых химических элементов (с трех до шести) всего лишь в два раза увеличит длину этих чисел. При их представлении в бинарном виде потребный объем внешней памяти также вырастет, но не будет превосходить 2,4 ГБт.

В гораздо большей степени увеличивается количество решений прямой задачи. Положим, что диапазон возможного количества атомов дополнительно вводимых элементов аналогичен (13). Учет в брутто-формуле горючего каждого следующего химического элемента увеличивает количество решений в 100 раз. При этом растет и количество уравнений в модели, что увеличивает длительность отдельных решений. При рассмотрении этой проблемы следует учесть:

- фосфор (P) редко встречается в горючих газах и без особого ущерба может быть исключен из расчетов;

- количество азота (N) и серы (S) в брутто-формуле горючего существенно меньше количества других учитываемых элементов. Диапазон их возможного изменения может быть уменьшен по сравнению с (13) при сохранении того же шага дискретизации.

В результате количество решений и, соответственно, затраченное время, все равно существенно возрастает, но не столь катастрофически, как представлялось изначально.

Аппаратное обеспечение также влияет на скорость вычислений. Даже распространенные современные персональные компьютеры имеют скорость вычислений на порядок больше, чем использовалась при решении тестовой задачи. Кроме того, решение прямой задачи может выполняться на нескольких компьютерах одновременно. Кардинально вопрос может быть решен путем аренды времени работы суперкомпьютера в сети.

Решение всего комплекса прямых задач и заполнение рабочего массива выполняется на предварительном этапе один раз. В общем случае нет ограничений по времени. Работа может продолжаться и 10 суток и 100 суток.

Решение искомой обратной задачи происходит на основе сформированного рабочего массива при использовании обычного персонального компьютера и занимает несколько секунд.

## **7. Выводы**

1. Определен общий тип задачи как обратной некорректно поставленной и выделен ее более узкий класс сложной задачи интерпретации. Для ее решения выбран метод библиотеки (подбора).

2. Для заполнения библиотеки разработан метод структурированного и компактно размещения результатов решения прямых задач. В его рамках:

– предложен метод преобразования коэффициента избытка окислителя  $\alpha$  как исходного данного для прямой задачи в отношении объемных расходов окислителя и горючего. Полученная величина используется в качестве измеряемого технологического параметра при решении обратной задачи определения состава топлива;

– предложен метод преобразования остальных исходных данных прямой задачи (количество атомов химических элементов в брутто-формуле и энтальпии топлива) в одно число, которое формируется на основе позиционного принципа записи десятичных чисел.

3. Разработан метод поиска решения сложной задачи интерпретации из данных сформированного рабочего трехмерного массива путем применения ограничений и последовательного выделения областей совпадения данных. Такой подход позволяет на каждом шаге многократно уменьшать объем анализируемых величин и за ограниченное количество шагов оставить единственный результат, соответствующий искомому решению. В этом заключается отличие предлагаемого метода от используемого ранее метода прямого перебора данных библиотеки.

4. Показано отсутствие погрешностей, которые вносятся в решение алгоритмом предлагаемого метода. При моделировании точных технологических замеров погрешности обусловлены только дискретизацией исходных данных при решении прямой задачи.

5. Определено влияние точности измерений технологических параметров на погрешность определения состава горючего. Величина погрешности не превосходит допустимой для инженерных расчетов величины (<5 %).

### Литература

1. IPCC, 2014: Climate Change 2014: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. URL: [https://www.ipcc.ch/site/assets/uploads/2018/05/SYR\\_AR5\\_FINAL\\_full\\_wcover.pdf](https://www.ipcc.ch/site/assets/uploads/2018/05/SYR_AR5_FINAL_full_wcover.pdf)
2. New Satellite Data Reveals Progress: Global Gas Flaring Declined in 2017. 2018. URL: <https://www.worldbank.org/en/news/press-release/2018/07/17/new-satellite-data-reveals-progress-global-gas-flaring-declined-in-2017>
3. Eman A. E. Gas flaring in industry: an overview // Petroleum & Coal. 2015. Vol. 57, Issue 5. P. 532–555. URL: <http://large.stanford.edu/courses/2016/ph240/miller1/docs/emam.pdf>
4. Zhenhai D., Lianyun S. Design of Temperature Controller for Heating Furnace in Oil Field // Physics Procedia. 2012. Vol. 24. P. 2083–2088. doi: <https://doi.org/10.1016/j.phpro.2012.02.305>
5. Способ автоматической оптимизации процесса сжигания топлива переменного состава: Пат. № 2647940 RF. МПК F23C 1/02, F23C 1/08 / Ларионов В. М., Ваньков Ю. В., Сайфуллин Э. Р., Назарычев С. А., Малахов А. О. № 2017116036/06; заявл. 04.05.2017; опубл. 21.03.2018, Бюл. № 9. 23 с.

6. Pitel' J., Mižáková J., Hošovský A. Biomass Combustion Control and Stabilization Using Low-Cost Sensors // *Advances in Mechanical Engineering*. 2013. Vol. 5. P. 685157. doi: <https://doi.org/10.1155/2013/685157>
7. Boilers Optimal Control for Maximum Load Change Rate / Elshafei M., Habib M. A., Al-Zaharnah I., Nemitallah M. A. // *Journal of Energy Resources Technology*. 2014. Vol. 136, Issue 3. P. 031301. doi: <https://doi.org/10.1115/1.4027563>
8. Morales S. A., Barragan D. R., Kafarov V. 3D CFD Simulation of Combustion in Furnaces Using Mixture Gases with Variable Composition // *Chemical Engineering Transactions*. 2018. Vol. 70. P. 121–126. doi: <http://doi.org/10.3303/CET1870021>
9. Raman gas analyzer for determining the composition of natural gas / Buldakov M. A., Korolev B. V., Matrosov I. I., Petrov D. V., Tikhomirov A. A. // *Journal of Applied Spectroscopy*. 2013. Vol. 80, Issue 1. P. 124–128. doi: <https://doi.org/10.1007/s10812-013-9731-6>
10. Development of an Analyzer System for Real-time Fuel Gas Characterization in Gas Turbine Power Plants / Schorsch S., Kiefer J., Steuer S., Seeger T., Leipertz A., Gonschorek S. et. al. // *Chemie Ingenieur Technik*. 2011. Vol. 83, Issue 3. P. 247–253. doi: <https://doi.org/10.1002/cite.201000095>
11. Methane combustion kinetic rate constants determination: an ill-posed inverse problem analysis / Ferreira B. D. L., Paulo J. M., Braga J. P., Sebastião R. C. O., Pujatti F. J. P. // *Química Nova*. 2013. Vol. 36, Issue 2. P. 262–266. doi: <https://doi.org/10.1590/s0100-40422013000200011>
12. Брунеткин А. И., Максимов М. В. Метод определения состава горючих газов при их сжигании // *Науковий вісник Національного гірничого університету*. 2015. № 5. С. 83–90. URL: [http://nbuv.gov.ua/UJRN/Nvngu\\_2015\\_5\\_16](http://nbuv.gov.ua/UJRN/Nvngu_2015_5_16)
13. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: справочник. Т. 1: Методы расчета / ред. В. П. Глушко. М.: ВИНТИ, 1971. 266 с.
14. Maksymov M. V., Brunetkin O. I., Maksymova O. B. Application of a Special Method of Nondimensionization in the Solution of Nonlinear Dynamics Problems. *Control Systems: Theory and Applications. Series in Automation, Control and Robotics*. Chap. 5. Gistrup, 2018. P. 97–144.
15. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: справочник. Т. 3: Топлива на основе кислорода и воздуха / ред. В. П. Глушко. М.: ВИНТИ, 1973. 624 с.