

DOI: <https://doi.org/10.33216/1998-7927-2023-277-1-48-54>

УДК 681.5.015

МАТЕМАТИЧНЕ ВІДОБРАЖЕННЯ РОБОТИ ТРЬОХПОЛОЧНОГО ГАЗОВОГО РЕАКТОРА У ВИРОБНИЦТВІ АМІАКУ

Купіна О.А.

MATHEMATICAL REPRESENTATION WORKS OF THE THREE-SHELF GAS REACTOR IN AMMONIA PRODUCTION

Kupina O.A.

Для досягнення високої ефективності оптимізації та керування складними технологічними об'єктами, використання комбінованої математичної моделі є ключовим аспектом. Цей підхід дозволяє використовувати переваги обох підходів: експериментально-статистичного та детермінованого, забезпечуючи високу адекватність, легку адаптацію та широкий діапазон застосування.

В даній роботі запропоновано такий підхід для розробки математичної моделі та оптимізації керування складним технологічним об'єктом - трьохполичним газовим реактором виробництва аміаку. Першим етапом розроблення моделі є створення детермінованої моделі, яка дозволяє оцінити критеріальну функцію та виділити область глобального екстремуму. Незважаючи на її невисоку точність, детермінована модель дозволяє оцінити різні варіанти параметрів технологічного процесу та визначити на кшталт, що змінити для покращення роботи об'єкта.

Другий етап полягає в адаптації моделі на основі експериментальних даних, з використанням імовірнісних методів. Це дозволяє отримати більш точну модель з урахуванням всіх впливів, що впливають на об'єкт. Адекватна модель повинна враховувати нелінійність залежностей вихідних параметрів процесу від вхідних, що може призвести до складних математичних рівнянь для опису об'єкту керування. У випадку, коли використовують наближені розв'язки, далі можуть бути проведені різноманітні аналізи і перевірки, щоб оцінити точність цих розв'язків і їхню придатність для використання у конкретній ситуації. Зокрема, можуть бути проведені такі аналізи:

- порівняння наближеного розв'язку з точним розв'язком (якщо такий відомий) для визначення похибки;
- проведення чутливого аналізу для оцінки впливу зміни параметрів на результати розв'язку;

- проведення аналізу стійкості для визначення, наскільки невеликі зміни в початкових умовах або параметрах впливають на результати розв'язку;

- проведення верифікації для визначення, чи задовольняє наближений розв'язок рівнянням фізики, які моделюються;

- проведення валідації для перевірки, наскільки точно наближений розв'язок відображає експериментальні дані або спостереження.

В результаті такого аналізу може бути встановлено, чи підходять наближені розв'язки для використання у практичних застосуваннях або чи потрібно використовувати більш точні методи розв'язування.

Ключові слова: математична модель, трьохполичний газовий реактор, виробництво аміаку, оптимальні параметри процесу, синтез-газ, байбаси. оптимізація, детермінована модель.

Вступ. Підтримка ефективних параметрів роботи великих безперервних виробництв є однією з ключових задач для забезпечення їх прибутковості. В хімічній промисловості широко застосовуються багатополочні реактори, де для досягнення необхідних параметрів процесу в заданих областях реакційного обсягу потрібне управління ходом хімічної реакції. Наприклад, важливо забезпечувати максимальний ступінь конверсії вихідних компонентів зворотньої реакції, контролюючи оптимальний профіль температур по висоті реактора. Проте, процес у реакторі є складним, оскільки наближається до моделі ідеального витиснення, яка передбачає наявність градієнтів параметрів уздовж просторової координати. Це особливо актуально для

виробництв метанолу, аміаку та інших хімічних продуктів. На рис.1 зображено схематично багатополочний газовий реактор із вбудованим теплообмінником для зручності розуміння.

Постановка проблеми.

Задача оптимального керування газовим трьохполочним реактором полягає у забезпеченні максимального ступеня конверсії та максимальної концентрації цільового компонента шляхом оптимізації перерозподілу циркуляційного синтез-газу.

Мета статті. Метою даної роботи є розробка математичної моделі трьохполочного газового реактора, що дозволить провести оптимізацію роботи цього пристрою.

Аналіз досліджень і публікацій. Результати досліджень. З точки зору керування, дані реактори є складними об'єктами, які характеризуються більшою кількістю параметрів, що обурюють, і множинними внутрішніми зв'язками. Реактор працює в такий спосіб. Циркуляційний газ із температурою порядку 333°C на вході колони розділяється на два потоки (дільник Д1): основний хід, який через вбудований

теплообмінник ТО, де він нагрівається теплом газів, що відходять, до температури порядку 430°C , подається на першу полицю реактора П1; і холодний байпас, який, у свою чергу, ділиться на три потоки (дільник Д2) і призначений для підтримки температури на полках реактора П1 - П3 діапазоні $510 - 530^{\circ}\text{C}$. На полках реактора протікає екзотермічна реакція синтезу аміаку. З виходу третьої полиці газ подається у вбудований теплообмінник ТО, де віддає своє тепло газу, що надходить у колону. [3]

Інформаційно-логічна схема трьохполочного газового реактора наведена на рис.2.

Умовимося називати вихідними параметрами параметри системи, які характеризують її стан і підтримка значень яких є метою системи регулювання. Регулюючі параметри – параметри, за допомогою яких ведеться регулювання (витрати матеріальних і енергетичних потоків). параметри, що обурюють, – параметри, які впливають на вихідні параметри, але не можуть бути регулюючими. [2]

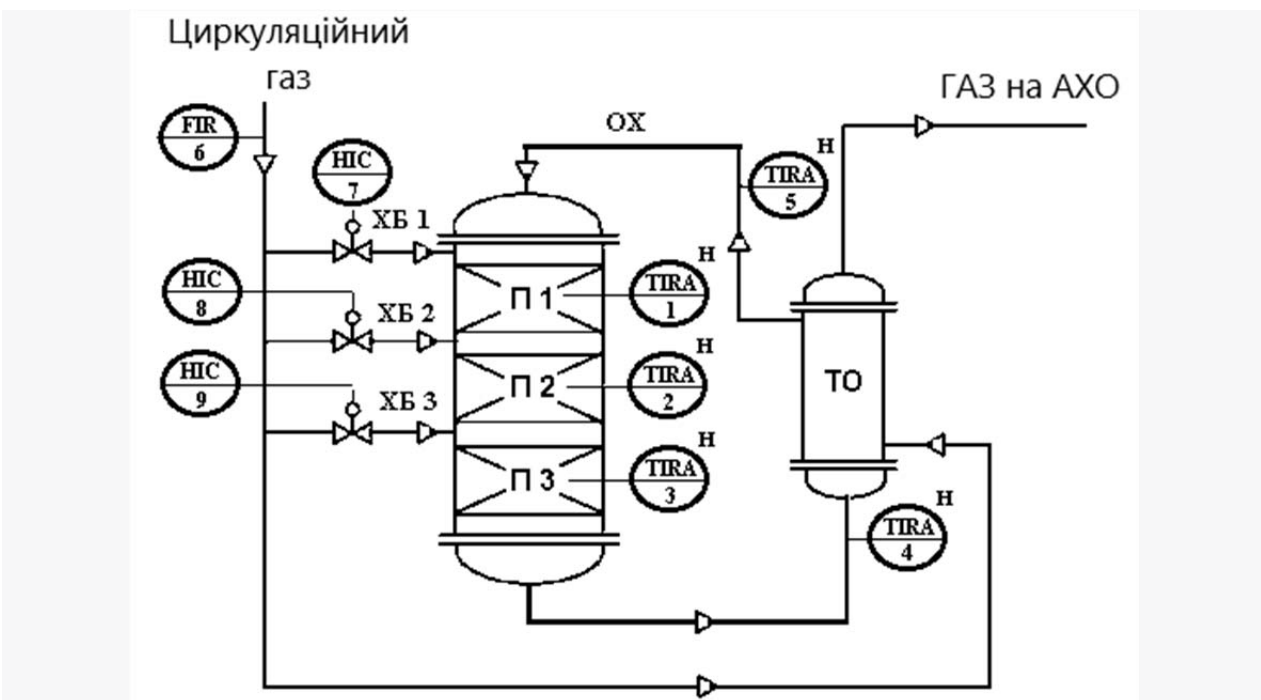


Рис.1. Схема багатополочного газового реактора із вбудованим теплообмінником: ТО – теплообмінник; П1, П2, П3 – перша, друга й третя полиці з каталізатором; ОХ - потік основного ходу синтез-газу; ХБ1, ХБ2, ХБ3 – потоки холодних байпасов синтез-газу на відповідні полиці реактора; АХО – аміачно-холодильне відділення; TIRA 1-6 - прилади контролю температури; FIR - 7 – прилад контролю витрати синтез-газу; НІС 8-10 – панелі дистанційного керування електричними засувками

Аналіз технологічного процесу, що відбувається в трьохполичному газовому реакторі, як об'єкту керування показує, що технологічний об'єкт має дві вихідні координати: концентрацію цільового продукту Q_3 на виході з реактора й температуру T_3' газу на виході реактора після теплообмінника ТО. Для даного об'єкта температурний режим по висоті газового реактора однозначно визначає концентрацію цільового компонента на його виході, а, отже, і температуру T_3 , яка визначає температури T_0 і T_3' . Виходячи з того, що з достатнім ступенем точності об'єкт можна розглядати як замкнену термодинамічну систему, величина концентрації Q_3 однозначно визначає температури T_3 , і, відповідно, T_0 і T_3' . Тому регулювання або стабілізація температури T_3' не має в цьому випадку особливого змісту. Особливістю даного об'єкта є те, що для регулювання одного параметра – концентрації цільового компонента Q_3 використовуються три регулюючі параметри – подачі холодних байпасів циркуляційного газу на полки з каталізатором. До параметрів, що обурюють, ставляться витрата циркуляційного газу $F_{ц.г.}$, його температура $T_{н.г.}$ і концентрація цільового компонента на вході реактора Q_0 . Тиск циркуляційного газу P можна віднести до координат, що обурюють, тому що, по-перше, це параметр стабілізується компресором синтез-газу, по-друге, при ступені конверсії синтез-газу в готовий продукт порядку 10% зменшення тиску за рахунок реакції становить приблизно 5%. Отже, при зміні ступеня конверсії в межах 8...12% тиск зміниться в межах 4...6%, що укладається

в погрішність вимірювального каналу тиску. [2].

Задача оптимального керування газовим трьохполичним реактором полягає у забезпеченні максимального ступеня конверсії та максимальної концентрації цільового компонента шляхом оптимізації перерозподілу циркуляційного синтез-газу. Для досягнення цієї мети пропонується розробити математичну модель та розв'язати оптимізаційну задачу.

На першому етапі розробляється детермінована модель, яка, незважаючи на її невисоку точність, дозволяє оцінити вид критеріальної функції в широкому діапазоні зміни аргументів та виділити область глобального екстремуму. Проте залежності вихідних параметрів процесу від вхідних є нелінійними, що призводить до збільшення ступеня рівнянь, які описують об'єкт керування. Використання рівнянь високих порядків ускладнює процес оптимізації та знижує точність розробленої моделі.

На другому етапі розроблюється адаптована модель на основі експериментальних даних, отриманих з об'єкта керування, за допомогою імовірнісних методів. Це дозволяє врахувати всі обурюючі впливи та забезпечити точність моделювання параметрів.

Для дослідження першої полиці реактора складається рівняння матеріального та теплового балансів. Це дозволяє аналізувати процес перетворення реагентів на продукти та визначати теплову енергію, яка виділяється чи поглинається під час реакції.

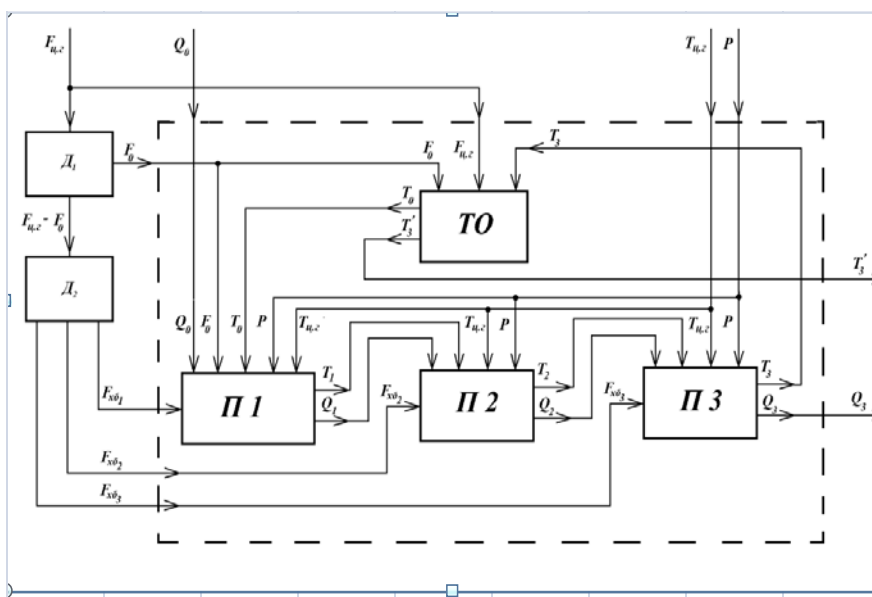


Рис.2. Інформаційно-логічна схема трьохполичного газового реактора із вбудованим теплообмінником: Д1, Д2 – математичні оператори розподілу потоку

$$\begin{cases} F_{x\delta 1}c_1T_{x\delta 1} + F_0c_1T_0 + r\rho_1V_1K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_1}\right)\frac{P}{P_0} \\ (Q_1 - Q_0) = (F_0 + F_{x\delta 1})c_1T_1 \\ F_{x\delta 1}Q_0 + F_0Q_0 + \rho_1V_1K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_1}\right)\frac{P}{P_0} \\ (Q_1 - Q_0) = (F_0 + F_{x\delta 1})Q_1 \end{cases}, \quad (1)$$

де $F_{x\delta 1}$ і F_0 – витрати холодного байпасу й основного ходу на першу полицю, $кг/з$;

$T_{x\delta 1}$ і T_0 – температури холодного байпасу й основного ходу на вході першої полиці, $К$;

c_1 – теплоємність газової суміші, $Дж/(кг \cdot К)$;

r – питома теплота реакції, $Дж/кг$;

ρ_1 – щільність газового потоку, $кг/м^3$;

V_1 – реакційний обсяг, $м^3$;

E – енергія активації, $Дж/моль$;

K – константа швидкості реакції, $1/з$;

P і P_0 – поточний і номінальний тиск процесу, $Па$;

T_1 – температура на першій полиці, $К$;

Q_0 і Q_1 – концентрація цільового компонента на вході й виході полки, $мас. частки$.

Система рівнянь (1) являє собою статичну математичну модель першої полиці газового реактора.

Аналогічним образом складемо матеріальний і тепловий баланси другий і третьої полиць реактора (у рівняннях (2) і (3) індекси 2 і 3 укажуть на нумерацію полиці реактору).

$$\begin{cases} (F_{x\delta 1} + F_0)c_1T_1 + F_{x\delta 2}c_1T_{x\delta 2} + r\rho_2V_2K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_2}\right)\frac{P}{P_0} \\ (Q_2 - Q_1) = (F_0 + F_{x\delta 1} + F_{x\delta 2})c_2T_2 \\ F_{x\delta 2}Q_0 + (F_0 + F_{x\delta 1})Q_1 + \rho_2V_2K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_2}\right)\frac{P}{P_0}(Q_2 - Q_1) \\ = (F_0 + F_{x\delta 1} + F_{x\delta 2})Q_2 \\ (F_{x\delta 2} + F_{x\delta 1} + F_0)c_2T_2 + F_{x\delta 3}c_1T_{x\delta 3} + r\rho_3V_3K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_3}\right)\frac{P}{P_0}(Q_3 - Q_2) = (F_0 + F_{x\delta 1} + F_{x\delta 2} + F_{x\delta 3}) \\ c_3T_3F_{x\delta 3}Q_0 + (F_0 + F_{x\delta 1} + F_2)Q_2 + \rho_3V_3K_0 \\ \exp\left(-\frac{E}{RT_3}\right)\frac{P}{P_0}(Q_3 - Q_2) = \\ (F_0 + F_{x\delta 1} + F_{x\delta 2} + F_{x\delta 3})Q_3 \end{cases} \quad (2)$$

Математичну модель вбудованого теплообмінника складемо на основі його теплового балансу

$$F_0c_1(T_0 - T_{цз}) = F_{цз}c_3(T_3 - T'_3), \quad (4)$$

де T'_3 – температура газової суміші на виході ТЕ, $ДО$;

$F_{цз} = F_0 + F_{x\delta 1} + F_{x\delta 2} + F_{x\delta 3}$ – витрата циркуляційного газу, $кг/з$.

Рівняння (1) – (4) утворюють систему рівнянь. Розв'язок даної системи може бути презентовано у вигляді

$$Q_3 = f(F_{x\delta 1}, F_{x\delta 2}, F_{x\delta 3}, F_0, F_{цз}, T_{цз}, Q_0, P). \quad (5)$$

Рівняння (5) є математичною моделлю трьохполочного реактора.

Аналізуючи математичну модель, було виявлено, що деякі змінні не можуть бути визначені без додаткових рівнянь. Для цього було запропоновано проведення тестових впливів на об'єкт керування, які передбачатимуть зміну витрат одного з холодних байпасів на фіксовану величину. Це дозволить створити додаткові рівняння, які допоможуть визначити невідомі змінні. Для успішної реалізації тестів необхідно забезпечити стабільність витрат холодних байпасів, які не підлягають зміні в умовах тесту. Завдяки цим тестам буде можливо скласти ще три рівняння, що покращить точність та достовірність отриманих результатів.

Аналізуючи математичну модель, було виявлено, що деякі змінні не можуть бути визначені без додаткових рівнянь. Для цього було запропоновано проведення тестових впливів на об'єкт керування, які передбачатимуть зміну витрат одного з холодних байпасів на фіксовану величину. Це дозволить створити додаткові рівняння, які допоможуть визначити невідомі змінні. Для успішної реалізації тестів необхідно забезпечити стабільність витрат холодних байпасів, які не підлягають зміні в умовах тесту. Завдяки цим тестам буде можливо скласти ще три рівняння, що покращить точність та достовірність отриманих результатів.

$$Q'_3 = f_1\left(F_{x\delta 1} + \Delta_1, F_{x\delta 2}, F_{x\delta 3}, (F_0 - \Delta_1), F_{цз}, T_{цз}, Q_0, P\right). \quad (6)$$

$$Q''_3 = f_2\left(F_{x\delta 1}, (F_{x\delta 2} + \Delta_1), F_{x\delta 3}, (F_0 - \Delta_1), F_{цз}, T_{цз}, Q_0, P\right). \quad (7)$$

$$Q_3^n = f_3 \left(F_{x\bar{b}1}, F_{x\bar{b}2}, (F_{x\bar{b}3} + \Delta_1), (F_0 - \Delta_1), \right. \\ \left. F_{u_2}, T_{u_2}, Q_0, P \right). \quad (8)$$

Спільний розв'язок рівнянь (5) – (8) можна представити у вигляді

$$a_4 Q_3^4 + a_3 Q_3^3 + a_2 Q_3^2 + a_1 Q_3 + a_0 = \varphi_1(F_{x\bar{b}1}) + \\ \varphi_2(F_{x\bar{b}2}) + \varphi_3(F_{x\bar{b}3}) + \varphi_{12}(F_{x\bar{b}1}, F_{x\bar{b}2}) + \varphi_{13}(F_{x\bar{b}1}, F_{x\bar{b}3}) + \\ + \varphi_{23}(F_{x\bar{b}2}, F_{x\bar{b}3}) + \varphi_{123} \\ (F_{x\bar{b}1}, F_{x\bar{b}2}, F_{x\bar{b}3}) + \Omega(F_{u_2}, T_{u_2}, Q_0, P) \quad (9)$$

Рівняння (9) є математичною моделлю трьохполочного реактора із вбудованим теплообмінником. У даному рівнянні значення функції $\Omega(F_{u_2}, T_{u_2}, Q_0, P)$ залежить від параметрів збурювання. Зважаючи на те, що дані параметри доступні для виміру, їх значення можуть бути обмірювані й підставлені в рівняння (9). Крім того, об'єкт є досить інерційним, а параметри збурювання протягом тривалого часу залишаються постійними [5].

У цій роботі розглядається використання системи керування з математичною моделлю для контролю процесу синтезу продукту з синтез-газу. До складу системи входять два значення концентрації продукту на виході реактора: одне з них вимірюється, а інше розраховується з математичної моделі. Якщо розраховане значення відрізняється від вимірюваного на задану величину, то коефіцієнти моделі коригуються шляхом обчислення коефіцієнтів a_4, a_3, a_2, a_1 і a_0 .

Основне завдання системи керування полягає в коригуванні коефіцієнтів математичної моделі, вирішенні оптимізаційної задачі та стабілізації витрат холодних байпасів за розрахованими значеннями. Оптимізаційна задача полягає в пошуку оптимальних значень витрат холодних байпасів, які забезпечать максимальну ступінь конверсії синтез-газу в цільовий продукт у визначених умовах

Висновок. У процесі розробки роботи був запропонований підхід до створення математичної моделі для оптимізації та керування складним технологічним об'єктом. Цей підхід був реалізований шляхом комбінування експериментально-статистичного та детермінованого методів для отримання високої адекватності моделі, а також забезпечення легкої адаптуваності та широкого діапазону застосування. Важливими аспектами при оптимізації та ке-

руванні складними технологічними об'єктами є саме ці характеристики моделі.

Для підтвердження ефективності запропонованого підходу була розроблена модель трьохполочного газового реактора для виробництва аміаку. За допомогою отриманих результатів були розроблені програми для впровадження алгоритмів у систему автоматизованого керування технологічним процесом виробництва аміаку.

Використання запропонованої системи дозволить звужити діапазон параметрів технологічного процесу біля оптимального значення, що призведе до зменшення витрат та підвищення ефективності виробництва. Таким чином, реалізація цієї системи може принести реальний економічний ефект.

Література

1. Амелин А.Г. Общая химическая технология [Текст] / А.Г.Амелин, А.М.Кутепов – М.: Химия, 1977. – 324 с.
2. Абдалхамид, Д. Адаптація мат моделі реактора синтезу метанолу / Д. Абдалхамид, М. Г. Лорія, А. Б. Целищев, П. Й. Елисеєв, И. И. Захаров // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – Т. 6, № 3 (66). – 2013. – С. 4–7.
3. Стенцель Й.І. Автоматизація технологічних процесів хімічних виробництв: Підручник [Текст] / Й.І. Стенцель, О.В. Поркуян - Луганськ: вид-во Східноукр. нац. ун-ту ім. В. Даля, 2010. – 300 с.
4. Математичне моделювання технологічних об'єктів [Текст] : Підручник / О.Б.Целіщев, П.Й.Єлісеєв, М.Г.Лорія, І.І.Захаров – Луганськ. Вид-во Східноукр. нац. унів. ім. В. Даля, 2011. – 421 с.
5. Принципы математического [моделирования](#) химико-технологических систем [Текст] / В.В.Кафаров, В.Л.Перов, В.П.Мешалкин и др.– М.: [Химия](#), 1974. - 344 с.
6. Абдалхамид, Д. Система екстремального управління многополочным реактором с моделью / Д. Абдалхамид, М. Г. Лорія, А. Б. Целищев, П. И. Елисеєв // Вісник СХУ. – № 15 (186), Ч. 2. – 2012– С. 152–156.
7. Абдалхамід Д. Динамічна модель газового реактора / Д.Абдалхамід, М.Г.Лорія, О.Б.Целіщев, П.Й.Єлісеєв // ВОТТП. - №4. – 2013. – с. 31-35.
8. Абдалхамид Д. Разработка комбинированной модели для задач оптимизации / Абдалхамид Д., Лорія М.Г., Целищев А.Б., Єлисеєв П.Й. // Наука и техника. - №3. – 2014. – с. 23 – 28.
9. Банди Б. Методы [оптимизации](#). Вводный курс[Текст] / Б.Банди. Пер. с англ. - М.: Радио и связь, 1988. – 128с.

10. Второй фронт ХТС. The Chemical Journal, Сентябрь 2002, с.50-54
11. Spatial Self-Organization in One Process of Chemical Technology [Text] : International Conference on Differential Equations and Dynamical Systems., 1-4 August 1997. Canada. Waterloo : 1997. - P. 166.
12. Thermal Spots in an Industrial Packed Bed Catalytic Reactor [Text] : Year 2000 International Conference on Dynamical Systems and Differential Equations (ICDSDE) Abstracts Book. USA, Kennesaw, 2000. - P.81.
13. Fuzzy Modeling for Control [Text] : Kluwer, 1998. - P. 122.
14. Driankov, D. Palm R. Advances in Fuzzy Control [Text] / D.Driankov, R.Palm // Physica-Verlag. Heidelberg. Germany - 1988. P. 129-137.
15. Pedrycz, W. An Introduction to Fuzzy Sets: Analysis and Design. [Text] / W.Pedrycz, F.Gomide // MIT Press. Hardcover. - 1998. №2. - P. 24-41.
16. Seraya O.V., Demin D.A. Linear regression analysis of a small sample of fuzzy input data (2012) Journal of Automation and Information Sciences, 44 (7), pp. 34-48.
9. . Bandi B, (1988). Metody optimizations. Propaedeutics: Trudged. with angl. of M.: of Radio and connection, 128p.
10. Second front of KHTS. The Chemical Journal, September 2002, p.50-54
11. Shumikhin A.G., Ostrovsky A.S.(1997). Spatial Self-Organization in One Process of Chemical Technology // International Conference on Differential Equations and Dynamical Systems. Canada, Waterloo, 1-4 August, p. 166.
12. Ostrovsky A. S., (2000), Thermal Spots in an Industrial Packed Bed Catalytic Reactor // Year 2000 International Conference on Dynamical Systems and Differential Equations (ICDSDE) Abstracts Book. USA, Kennesaw, p.81.
13. Babuska. R. (1998) Fuzzy Modeling for Control. Kluwer.
14. Driankov D., Palm R., (1998) Advances in Fuzzy Control. Physica-Verlag. Heidelberg. Germany,.
15. Pedrycz W., Gomide F., (1998).An Introduction to Fuzzy Sets: Analysis and Design. MIT Press. Hardcover.
16. Seraya, O.V., Demin, D.A. Linear regression analysis of a small sample of fuzzy input data (2012) Journal of Automation and Information Sciences, 44 (7), pp. 34-48.

References

1. Amelin A. G., General chemical technology. (1977). Moscow, USSR:Higher school, 448c.
2. Abdalhamid D. Dinamichna modelgazovogo reaktora / D. Abdalhamid, M. G.Loriya, A. B.Tselishev, P. I.Eliseev // VOTTP. - №4. - 2013. - s. 31-35.
3. Stentsel Y. I., (2010). *Avtomatyzatsiia tekhnologichnykh protsesiv khimichnykh vyrobnytstv, Pidruchnyk* [Automation of technological processes of chemical production, Textbook], Luhansk, vyd-vo Skhidnoukr. nats. uh-tu im. V. Dalia, , 300 p.
4. Tselishchev O. B. (2011), *Matematychni modelyuvannia tekhnologichnykh obektiv* [Mathematical modeling of technological objects], Luhansk. Vyd-vo Skhidnoukr. nats. uh-tu im. V. Dalia, 421 p.
5. Kafarov V. V., (1974).Principles of mathematical design of the chemical-technological systems. Moscow, USSR:Chemistry, 344 p.
6. Abdalhamid D. Sistema ekstremalnogo upraleniya mnogopolochnym reaktorom s modely. / D. Abdalhamid, , M. G. Loriya, A. B.Tselishev, , P. I. Eliseev, // Visnik SNU, № 15 (186), Part 2, - (2012). - 152–156 s.
7. Abdalhamid D. Adaptatsiya matematichnoi modeli reaktora sintezu metanolu. Eastern-European Journal of enterprise technologies / D. Abdalhamid, M. G. Loriya, A. B. Tselishev, P. I.Eliseev, I. I. Zaharov // Vostochno-Evropeiskii gurnal peredovih tehnologii. – T. 6, № 3 (66). – 2013. – s. 4–7.
8. Abdalhamid D. Razrabotka kombinirovanoi modeli dlya zadach optimizacii / D.Abdalhamid, M.G. Loriya, A.B.Tselishev, P.I. Eliseev // nauka I tehnika. - №3. – 2014. – s. 23 – 28.

Kupina O.A., Mathematical reflection of the work of a three-shelf gas reactor in the production of ammonia

To achieve high efficiency of optimization and control of complex technological objects, the use of a combined mathematical model is a key aspect. This approach allows you to take advantage of both approaches: experimental-statistical and deterministic, providing high adequacy, easy adaptation and a wide range of applications.

In this paper, such an approach is proposed for developing a mathematical model and optimizing the control of a complex technological object - a three-shelf gas reactor for ammonia production. The first step in the development of the model is the creation of a deterministic model that allows one to evaluate the criterion function and identify the area of the global extremum. Despite its low accuracy, the deterministic model allows you to evaluate various options for the process parameters and determine what to change to improve the operation of the object.

The second stage is to adapt the model based on experimental data using probabilistic methods. This allows you to get a more accurate model, taking into account all the impacts affecting the object. An adequate model should take into account the nonlinearity of the dependence of the initial process parameters on the input ones, which can lead to complex mathematical equations for describing the control object.

Where approximate solutions are used, various analyzes and checks can then be carried out to evaluate

the accuracy of these solutions and their suitability for use in a particular situation. In particular, the following analyzes can be carried out:

- *comparison of the approximate solution with the exact decoupling (if known) to determine the error;*
- *conducting a sensitive analysis to assess the impact of changing parameters on the solution results;*
- *performing a robustness analysis to determine how small changes in initial conditions or parameters affect the outcome of a solution;*
- *carrying out verification to determine whether the approximate solution satisfies the modeled equations of physics;*
- *carrying out validation to check how accurately the approximate solution reflects the experimental data or observation.*

As a result of such an analysis, it can be established whether approximate solutions are suitable for use in practical applications or whether more accurate solution methods should be used.

Keywords: *mathematical model, three-shelf gas reactor, ammonia production, optimal process parameters, synthesis gas, bullshit optimization, deterministic model.*

Купіна О.А. – аспірант кафедри «Комп'ютерно-інтегрованих систем управління» Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля,
e-mail: kupina@snu.edu.ua

Стаття подана 19.01.2023.