

Л.Г. Русина, Ю.В. Грибкова
Череповецкий государственный университет

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

В статье рассматривается процесс полимеризации 9-винилкарбазола. Предложен механизм химической реакции, включающий образование комплекса между мономером и инициатором с последующей диссоциацией. Химические реакции полимеризации описаны жесткой системой обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с начальными условиями. Численное решение системы (ОДУ) кинетики сложных химических реакций при начальных условиях позволило получить значения концентраций всех компонентов как функций времени на всем протяжении реакции.

Процесс полимеризации, химическая реакция, концентрация, математическое моделирование, жесткая система уравнений, численные методы, сходимость, пограничный слой.

The article deals with the process of polymerization of 9-vinylcarbazole. In the article a reaction mechanism involving the formation of a complex between the monomer and initiator, followed by dissociation, is proposed. The chemical polymerization reaction is described as rigid system of ordinary differential equations with initial conditions. The numerical solution of differential equations of the kinetics of complex chemical reactions with the initial conditions yielded values of the concentrations of all the components as a function of time throughout the reaction.

Process of polymerization, reaction, concentration, mathematical modeling, the rigid system of equations, numerical methods, convergence, boundary layer.

Введение

Полимеры – основные продукты химической промышленности. Повышенный интерес к структуре и свойствам поли-9-винилкарбазола (ПВК) объясняется возможностью создания на его основе фотопроводящих материалов. Фотопроводящие материалы на основе ПВК используются в электрографии, голографии, фототермопластической (ФТП) – записи информации.

ПВК с высокой температурой размягчения можно получить полимеризацией 9-винилкарбазола (ВК) с металлоорганическими соединениями алюминия при температуре 60–80 °С. Однако ПВК с достаточно высокой температурой размягчения получают и при комнатных температурах, если используют в качестве инициатора диэтилалюминий хлорид (ДЭАХ).

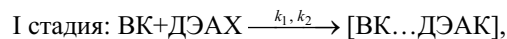
В работе рассмотрен процесс полимеризации 9-винилкарбазола с ДЭАХ, протекающий в две стадии, предложен механизм химической реакции, включающий образование комплекса между мономером и инициатором с последующей его диссоциацией, а также разработана математическая модель для определения оптимальных концентраций химических веществ. Полимеризация на первой стадии характеризуется высокой скоростью и протекает в короткий промежуток времени ($t \in [0; 1]$). Кроме того, анализ начальных скоростей на первой стадии полимеризации показал, что они пропорциональны исходной концентрации инициатора (ДЭАХ) и квадрату исходной концентрации мономера (ВК).

При математическом описании процесса полимеризации получена «жесткая» система обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с начальными условиями. Для исследования характерного поведения решений «жестких» задач наряду с классическими методами (Эйлера, Адамса-Моултона) использовался численный метод Гира. Проведены численные эксперименты на ПК. На основании результатов чис-

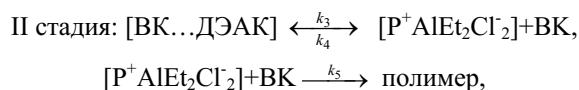
ленных расчетов можно получить количественную картину изменения концентраций химических веществ реакции полимеризации с течением времени.

Основная часть

Процесс полимеризации 9-винилкарбазола с ДЭАХ протекает в две стадии.



где ВК- 9-винилкарбазол, $[\text{ВК} \dots \text{ДЭАК}]$ – сложный комплекс.



где $[\text{P}^+ \text{AlEt}_2 \text{Cl}_2^-]$ – сложное соединение.

Данные химические реакции описываются системой дифференциальных уравнений следующего вида:

$$\begin{cases} \frac{dc_1}{dt} = -k_1 c_1 c_2 - k_5 c_1 c_4 \\ \frac{dc_2}{dt} = -k_1 c_1 c_2 \\ \frac{dc_3}{dt} = k_1 c_2 c_1 - k_3 c_3 + k_4 c_4 \\ \frac{dc_4}{dt} = -k_5 c_4 c_1 + k_3 c_3 - k_4 c_4 \\ \frac{dc_5}{dt} = k_5 c_1 c_4 \end{cases} \quad (1)$$

с начальными условиями:

$$\begin{aligned} c_1(0) &= c_1^0, \quad c_2(0) = c_2^0, \quad c_3(0) = c_3^0, \\ c_4(0) &= c_4^0, \quad c_5(0) = c_5^0, \end{aligned} \quad (2)$$

где $c_1(t)$, $c_2(t)$, $c_3(t)$, $c_4(t)$, $c_5(t)$ – концентрации химических веществ: ВК, ДЭАХ, [ВК...ДЭАК], $[P^+AlEt_2Cl_2]$, полимера, k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 – кинетические параметры полимеризации ВК с ДЭАХ в растворе хлороформа на I-й стадии. Значения кинетических параметров постоянны в ходе реакции полимеризации и представлены в табл. 1. Также приведены начальные концентрации для решения системы (1)–(2).

Таблица 1

Значения кинетических параметров и начальные концентрации

k_1	$1,86 \cdot 10^3 \text{ сек}^{-1}$	c_1^0	0,02218 моль/л
k_2	0 сек ⁻¹	c_2^0	$3,71428 \cdot 10^{-3}$ моль/л
k_3	$1,83 \cdot 10^{-2} \text{ сек}^{-1}$	c_3^0	0 моль/л
k_4	15 сек ⁻¹	c_4^0	0 моль/л
k_5	31,14 сек ⁻¹	c_5^0	0 моль/л

Система дифференциальных уравнений (1) описывает термодинамические гомогенные реакции полимеризации в закрытой системе. Покажем, что система (1) с начальными условиями (2) действительно «жесткая». Для этого построим матрицу Якоби, найдем корни характеристического уравнения, используя начальные данные в табл. 1:

$$|A - \lambda E| = \begin{vmatrix} -k_1 c_2 - \lambda & -k_1 c_1 & 0 & -k_5 c_1 & 0 \\ -k_1 c_2 & -k_1 c_1 - \lambda & 0 & 0 & 0 \\ k_1 c_2 & k_1 c_1 & -k_3 - \lambda & k_4 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 & -k_4 - k_5 c_1 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_5 c_1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (3)$$

Расписывая по элементам последней строки определителя и приводя подобные члены, получим:

$$\lambda^2 \cdot \left[-\lambda^3 - \lambda^2 (k_3 + k_4 + k_5 \cdot c_1 + k_1 \cdot (c_1 + c_2)) - \lambda (k_1 \cdot k_4 \cdot (c_1 + c_2) + k_5 \cdot c_1 \cdot k_3 + k_5 k_3 k_1 \cdot (c_1 + c_2) + k_1 \cdot k_3 \cdot (c_1 + c_2)) - k_3 k_5 k_1 c_1 c_2 - k_1 k_3 k_5 c_1 \cdot (c_1 + c_2) \right] = 0. \quad (4)$$

Используя данные табл. 1:

$$c_1 = c_1^0 = 0,02218, \quad c_2 = c_2^0 = 3,71428 \cdot 10^{-3} \approx 0,0037.$$

Тогда

$$a = k_1 \cdot (c_1 + c_2) = 48,17384,$$

$$b = k_3 + k_4 + k_5 c_1 = 15,708(985),$$

$$p = k_3 k_5 c_1 = 0,0126(39),$$

$$q = k_1 \cdot c_2 + a = 55,08253,$$

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 0,$$

и уравнение (4) преобразуется к следующему виду:

$$-\lambda^3 - (a + b) \cdot \lambda^2 - (a \cdot b + p) \lambda - pq = 0 \quad (5)$$

$$\text{или } f(\lambda) = -\lambda^3 - 63,8829\lambda^2 - 756,77\lambda - 0,6962 = 0.$$

Находим корни уравнения (5). Так как $f(0) < 0$ и $f(-1) > 0$, то на $[-1; 0]$ существует, по крайней мере, один корень. В силу того, что $f'(0)$, $f'(-1)$ не меняет знака, корень единственный. Находим его, используя метод дихотомии.

Получаем $\lambda_3 = -0,0019$. Оставшиеся два корня определяем из квадратного уравнения, которое получается при делении уравнения (5) на $\lambda + 0,0019$. Нетрудно вычислить, что $\lambda_4 = -47,7997$, $\lambda_5 = -15,7033$.

Находим коэффициент «жесткости» по формуле [3], [4]:

$$\mu(t) = \frac{\max_{i=1,m} \text{Re}(-\lambda_i)}{\min_{i=1,m} \text{Re}(-\lambda_i)} \approx 25157,737 \gg 1.$$

Таким образом, установили, что полученная система ОДУ (1)–(2) – «жесткая».

Найти аналитическое решение задачи (1)–(2) сложно, поэтому основным инструментом исследования указанной системы является численный эксперимент.

В процессе вычислительного эксперимента была исследована численно устойчивость решения задачи (1) с начальными условиями (2). Показано, что решение задачи (1)–(2) устойчиво по Ляпунову (с изменением начальных данных численное решение практически не меняется).

Численное интегрирование системы (1)–(2) было проведено разными методами:

- явным методом Эйлера (I),
- неявным методом Адамса-Моултона (II),
- неустойчивым методом Адамса (III) [2],
- методом Гира (IV).

Отметим, что явный метод Эйлера имеет первый порядок точности, а устойчивый метод Адамса-Моултона с итерациями дает на каждом шаге погрешность аппроксимации дифференциального уравнения разностным порядком $O(\tau^2)$, где $\tau = \frac{t}{N}$, N – число узлов на сетке, t – время протекания химической реакции ($t = 1$), τ – шаг интегрирования [1].

Использование неустойчивого метода (III) и классических методов (I), (II) первого и второго порядка точности накладывает жесткие ограничения на шаг интегрирования ($\tau < 0,1$). Действительно, попытка увеличить шаг интегрирования ($\tau \geq 0,1$) приводит к значительным изменениям в численном решении дифференциальных уравнений, к «взрыву погрешностей» (наблюдаем резкие скачки в решении). Результаты численных расчетов методами (I), (II), (III) при $\tau = 0,1$ и $t = 1$ приведены в табл. 2.

С целью выбора наиболее оптимального численного метода из перечисленных, интегрирование проводилось с различными шагами ($\tau = 0,00005$;

$\tau = 0,0001$; $\tau = 0,1$) и точностью ($\varepsilon = 0,00001$; $\varepsilon = 0,001$; $\varepsilon = 0,01$). Результаты численных исследований задачи (1)–(2) методами (I), (II), (III), (IV) в различные моменты времени представлены в табл. 3.

Как видно из табл. 2 полученные результаты для методов (I), (II), (III) не соответствуют известным экспериментальным закономерностям процесса полимеризации при $\tau = 0,1$, $\varepsilon = 0,01$ и $t = 1$. Соответствие химическим закономерностям наблюдается

только при использовании метода Гира с автоматическим контролем погрешности вычислений и шага интегрирования [5].

Поэтому для решения системы дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями (2) применялся метод Гира. Результаты решений по методу Гира представлены на рис. 1–5 в виде кривых изменения концентраций с течением времени.

Таблица 2

Численное решение задачи (1)–(2) методами (I), (II), (III) при $\tau = 0,1$ и $t = 1$

τ – шаг ε – точность	$c_1(t)$ $c_2(t)$ $c_3(t)$ $c_4(t)$ $c_5(t)$	I	II	III
$\tau = 0,1$ $\varepsilon = 0,01$	$c_1(t)$	$-1,517700 \cdot 10$	$1,847772 \cdot 10^{-2}$	$-1,517901 \cdot 10$
	$c_2(t)$	$-1,519600 \cdot 10$	$1,477000 \cdot 10^{-23}$	$-1,519600 \cdot 10$
	$c_3(t)$	$3,693386 \cdot 10^{-3}$	$3,693411 \cdot 10^{-3}$	$3,693344 \cdot 10^{-3}$
	$c_4(t)$	$5,709212 \cdot 10^{-4}$	$4,339672 \cdot 10^{-6}$	$4,779212 \cdot 10^{-4}$
	$c_5(t)$	$-6,920500 \cdot 10^{-6}$	$2,238801 \cdot 10^{-6}$	$-6,920500 \cdot 10^{-6}$

Таблица 3

Численное решение задачи (1)–(2) методами (I), (II), (III), (IV)

τ – шаг ε – точность	$c_1(t)$ $c_2(t)$ $c_3(t)$ $c_4(t)$ $c_5(t)$	I	II	III	IV	t – время, с
1	2	3	4	5	6	7
$\tau = 0,0001$ $\varepsilon = 0,00001$	$c_1(t)$	$2,121124 \cdot 10^{-2}$	$2,121134 \cdot 10^{-2}$	$2,121127 \cdot 10^{-2}$	$2,121125 \cdot 10^{-2}$	0,01
	$c_2(t)$	$3,644735 \cdot 10^{-3}$	$3,644736 \cdot 10^{-3}$	$3,645275 \cdot 10^{-3}$	$3,640641 \cdot 10^{-3}$	
	$c_3(t)$	$1,526428 \cdot 10^{-5}$	$1,526427 \cdot 10^{-5}$	$6,105714 \cdot 10^{-6}$	$7,642611 \cdot 10^{-6}$	
	$c_4(t)$	0	0	0	0	
	$c_5(t)$	0	0	0	0	
$\tau = 0,0001$ $\varepsilon = 0,00001$	$c_1(t)$	$1,905347 \cdot 10^{-2}$	$1,905349 \cdot 10^{-2}$	$1,905333 \cdot 10^{-2}$	$1,905343 \cdot 10^{-2}$	0,04
	$c_2(t)$	$2,544521 \cdot 10^{-3}$	$2,512231 \cdot 10^{-3}$	$2,512223 \cdot 10^{-3}$	$2,544321 \cdot 10^{-3}$	
	$c_3(t)$	$2,913442 \cdot 10^{-3}$	$2,906745 \cdot 10^{-3}$	$2,873455 \cdot 10^{-3}$	$2,912112 \cdot 10^{-3}$	
	$c_4(t)$	$1,726154 \cdot 10^{-6}$	$1,678987 \cdot 10^{-6}$	$1,623456 \cdot 10^{-6}$	$1,721101 \cdot 10^{-6}$	
	$c_5(t)$	$2,216740 \cdot 10^{-8}$	$3,675432 \cdot 10^{-8}$	$3,895623 \cdot 10^{-8}$	$1,211340 \cdot 10^{-8}$	
$\tau = 0,0001$ $\varepsilon = 0,00001$	$c_1(t)$	$1,882033 \cdot 10^{-2}$	$1,882046 \cdot 10^{-2}$	$1,876335 \cdot 10^{-2}$	$1,885345 \cdot 10^{-2}$	0,06
	$c_2(t)$	$2,830435 \cdot 10^{-3}$	$2,796745 \cdot 10^{-3}$	$2,811456 \cdot 10^{-3}$	$2,821341 \cdot 10^{-3}$	
	$c_3(t)$	$3,384509 \cdot 10^{-3}$	$3,364533 \cdot 10^{-3}$	$3,367331 \cdot 10^{-3}$	$3,352244 \cdot 10^{-3}$	
	$c_4(t)$	$2,580976 \cdot 10^{-6}$	$2,595677 \cdot 10^{-6}$	$2,569087 \cdot 10^{-6}$	$2,560829 \cdot 10^{-6}$	
	$c_5(t)$	$3,000155 \cdot 10^{-8}$	$3,001134 \cdot 10^{-8}$	$3,004522 \cdot 10^{-8}$	$3,000121 \cdot 10^{-8}$	
$\tau = 0,0001$ $\varepsilon = 0,00001$	$c_1(t)$	$1,912443 \cdot 10^{-2}$	$1,912442 \cdot 10^{-2}$	$1,912433 \cdot 10^{-2}$	$1,912427 \cdot 10^{-2}$	0,09
	$c_2(t)$	$2,900556 \cdot 10^{-4}$	$2,912785 \cdot 10^{-4}$	$2,911237 \cdot 10^{-4}$	$2,911234 \cdot 10^{-4}$	
	$c_3(t)$	$3,410145 \cdot 10^{-3}$	$3,423432 \cdot 10^{-3}$	$3,423124 \cdot 10^{-3}$	$3,420120 \cdot 10^{-3}$	
	$c_4(t)$	$2,786543 \cdot 10^{-6}$	$2,682985 \cdot 10^{-6}$	$2,982905 \cdot 10^{-6}$	$2,682905 \cdot 10^{-6}$	
	$c_5(t)$	$6,765603 \cdot 10^{-8}$	$6,876543 \cdot 10^{-8}$	$6,805765 \cdot 10^{-8}$	$6,805634 \cdot 10^{-8}$	

1	2	3	4	5	6	7
$\tau = 0,0001$ $\varepsilon = 0,00001$	$c_1(t)$	$1,891222 \cdot 10^{-2}$	$1,891225 \cdot 10^{-2}$	$1,891223 \cdot 10^{-2}$	$1,891225 \cdot 10^{-2}$	0,1
	$c_2(t)$	$2,511245 \cdot 10^{-4}$	$2,523231 \cdot 10^{-4}$	$2,501322 \cdot 10^{-4}$	$2,511234 \cdot 10^{-4}$	
	$c_3(t)$	$3,424476 \cdot 10^{-3}$	$3,428806 \cdot 10^{-3}$	$3,426986 \cdot 10^{-3}$	$3,428976 \cdot 10^{-3}$	
	$c_4(t)$	$3,072736 \cdot 10^{-6}$	$3,174831 \cdot 10^{-6}$	$3,256707 \cdot 10^{-6}$	$3,072832 \cdot 10^{-6}$	
	$c_5(t)$	$9,544321 \cdot 10^{-8}$	$8,785656 \cdot 10^{-8}$	$8,322765 \cdot 10^{-8}$	$8,322112 \cdot 10^{-8}$	
$\tau = 0,0001$ $\varepsilon = 0,01$	$c_1(t)$	$1,843733 \cdot 10^{-2}$	$1,843791 \cdot 10^{-2}$	$1,843706 \cdot 10^{-2}$	$1,843701 \cdot 10^{-2}$	0,4
	$c_2(t)$	$5,002259 \cdot 10^{-5}$	$5,023442 \cdot 10^{-5}$	$5,013467 \cdot 10^{-5}$	$5,023451 \cdot 10^{-5}$	
	$c_3(t)$	$3,694885 \cdot 10^{-3}$	$3,694895 \cdot 10^{-3}$	$3,696552 \cdot 10^{-3}$	$3,705701 \cdot 10^{-3}$	
	$c_4(t)$	$4,326716 \cdot 10^{-6}$	$4,326716 \cdot 10^{-6}$	$4,012032 \cdot 10^{-6}$	$4,354310 \cdot 10^{-6}$	
	$c_5(t)$	$7,754671 \cdot 10^{-7}$	$7,754671 \cdot 10^{-7}$	$2,874661 \cdot 10^{-7}$	$2,076301 \cdot 10^{-6}$	
$\tau = 0,0001$ $\varepsilon = 0,00001$	$c_1(t)$	$1,842227 \cdot 10^{-2}$	$1,842245 \cdot 10^{-2}$	$1,842234 \cdot 10^{-2}$	$1,842238 \cdot 10^{-2}$	0,8
	$c_2(t)$	$3,359530 \cdot 10^{-15}$	$3,359530 \cdot 10^{-15}$	$3,216016 \cdot 10^{-9}$	$0,703731 \cdot 10^{-22}$	
	$c_3(t)$	$3,693885 \cdot 10^{-3}$	$3,693885 \cdot 10^{-3}$	$3,694895 \cdot 10^{-3}$	$3,703811 \cdot 10^{-3}$	
	$c_4(t)$	$4,340211 \cdot 10^{-6}$	$4,340211 \cdot 10^{-6}$	$4,326716 \cdot 10^{-6}$	$4,354810 \cdot 10^{-6}$	
	$c_5(t)$	$1,774057 \cdot 10^{-6}$	$1,774057 \cdot 10^{-6}$	$7,754671 \cdot 10^{-7}$	$3,073120 \cdot 10^{-6}$	
$\tau = 0,0001$ $\varepsilon = 0,00001$	$c_1(t)$	$1,841917 \cdot 10^{-2}$	$1,841922 \cdot 10^{-2}$	$1,841931 \cdot 10^{-2}$	$1,841911 \cdot 10^{-2}$	1.0
	$c_2(t)$	$3,434632 \cdot 10^{-18}$	$3,539059 \cdot 10^{-18}$	$1,028088 \cdot 10^{-10}$	$0,455941 \cdot 10^{-23}$	
	$c_3(t)$	$3,693386 \cdot 10^{-3}$	$3,693386 \cdot 10^{-3}$	$3,694637 \cdot 10^{-3}$	$3,703502 \cdot 10^{-3}$	
	$c_4(t)$	$4,359656 \cdot 10^{-6}$	$4,369656 \cdot 10^{-6}$	$4,338027 \cdot 10^{-6}$	$4,354913 \cdot 10^{-6}$	
	$c_5(t)$	$2,273501 \cdot 10^{-6}$	$2,273500 \cdot 10^{-6}$	$1,024852 \cdot 10^{-6}$	$3,272501 \cdot 10^{-6}$	

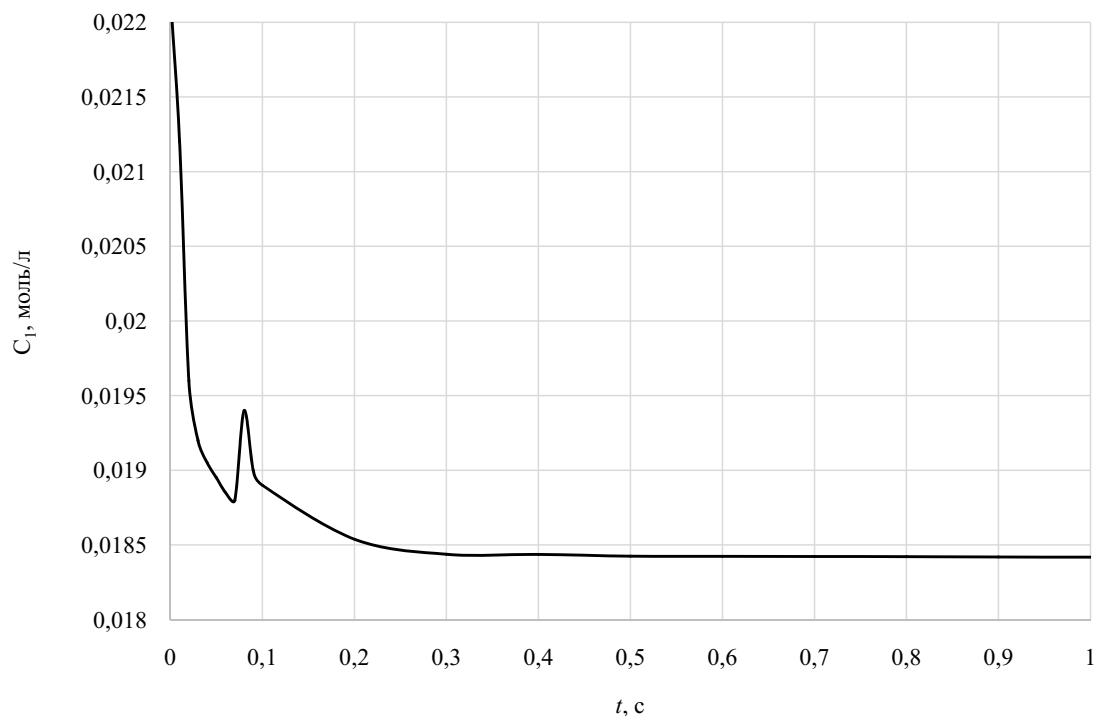
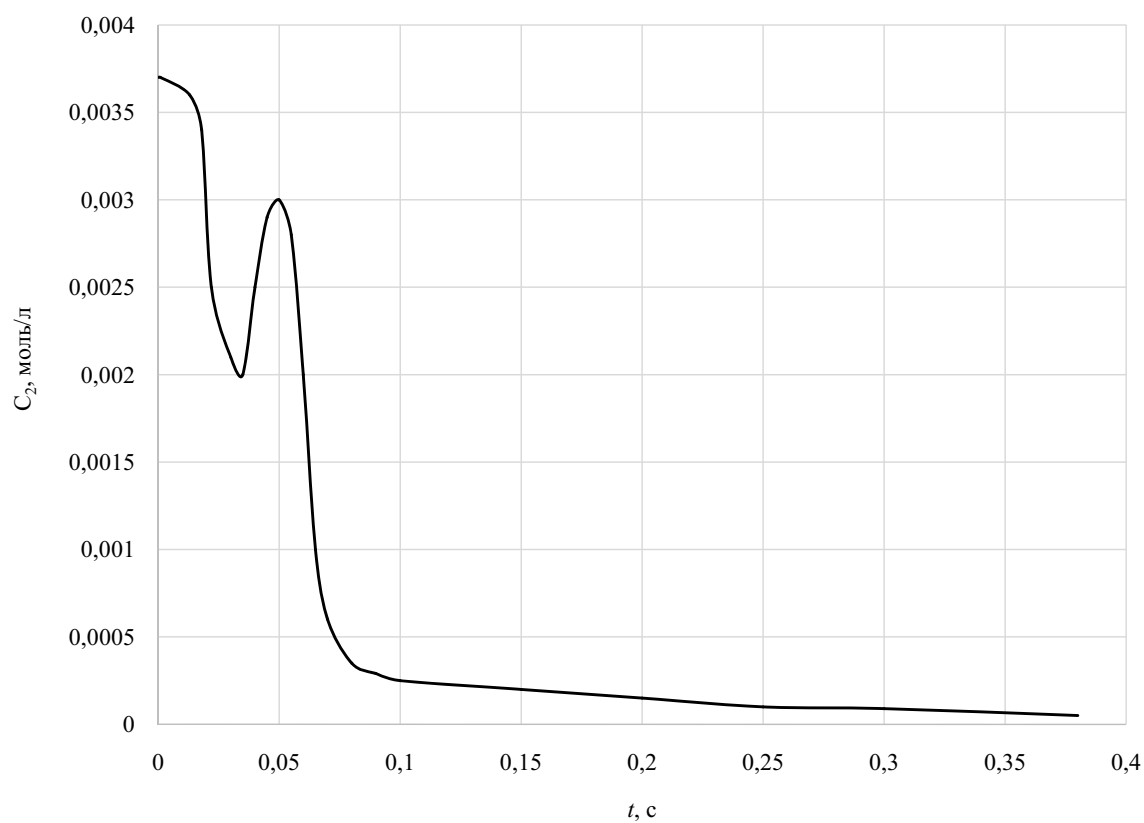
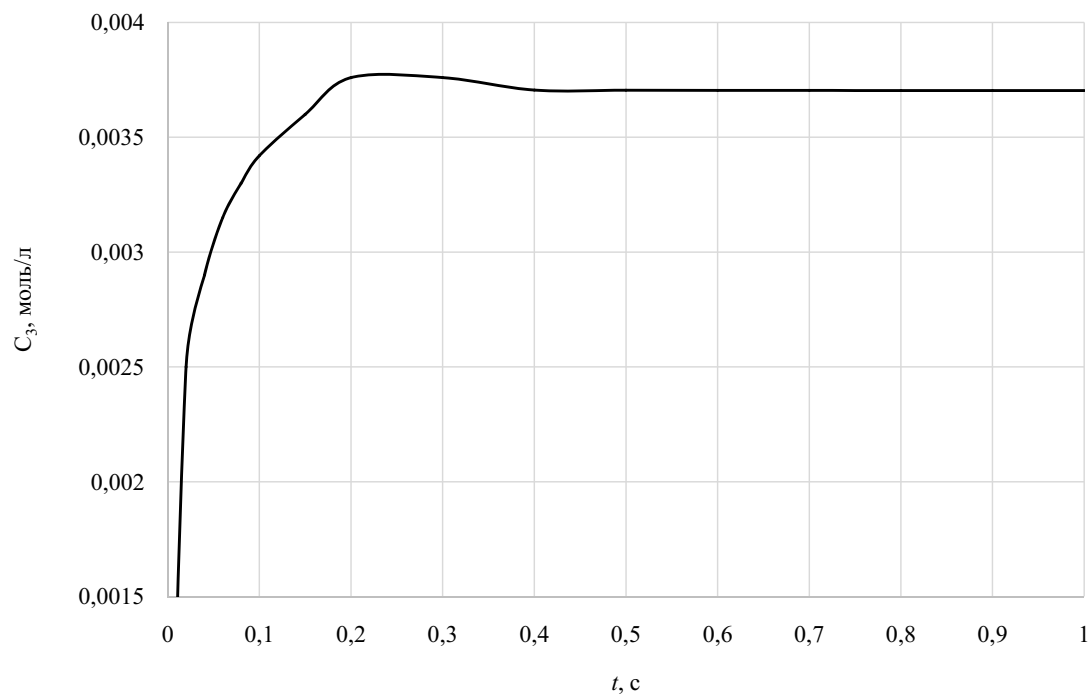


Рис. 1. Изменение концентрации C_1 с течением времени

Рис. 2. Изменение концентрации C_2 с течением времениРис. 3. Изменение концентрации C_3 с течением времени

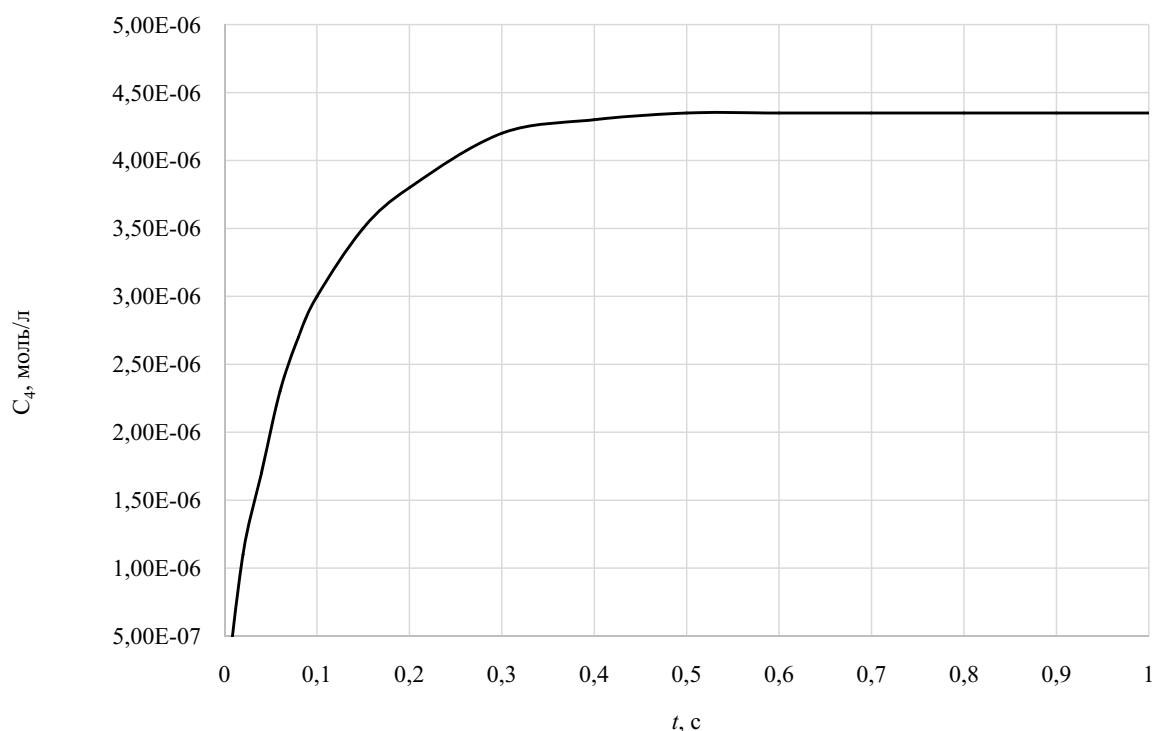


Рис. 4. Изменение концентрации C_4 с течением времени

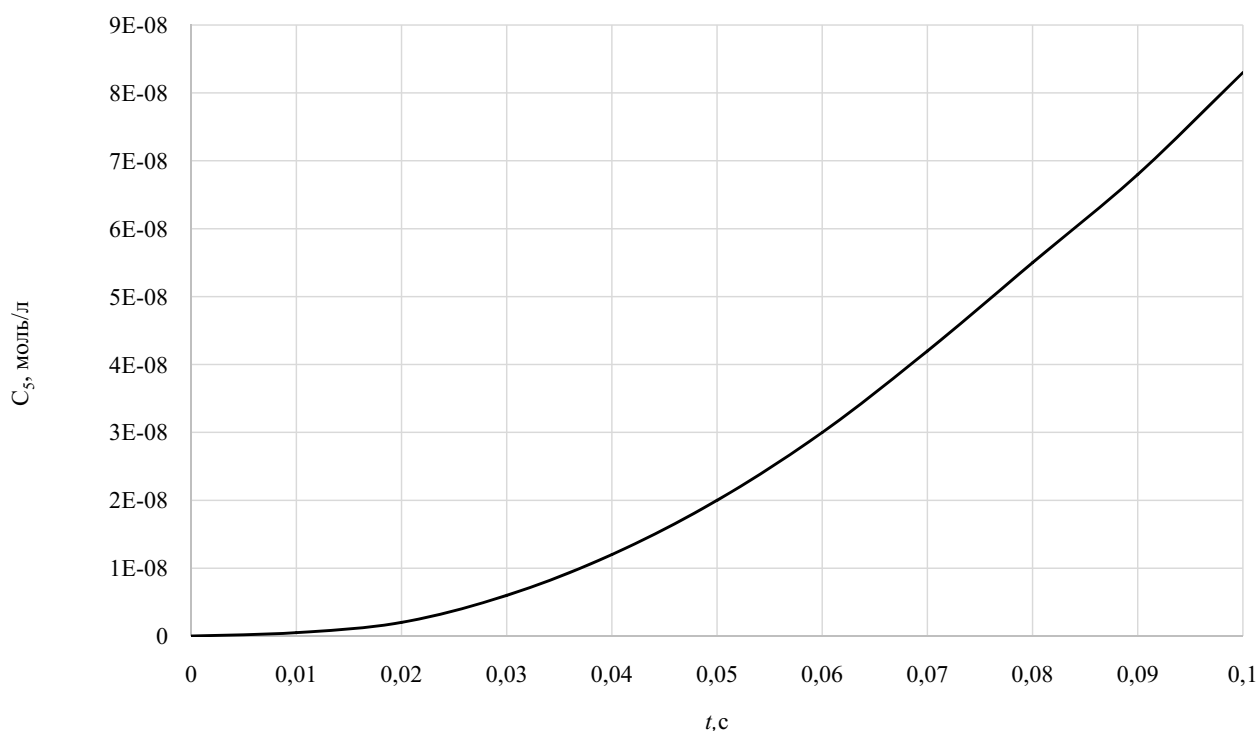


Рис. 5. Изменение концентрации C_5 с течением времени

Полученные результаты по методу Гира имеют следующие закономерности: (c_1 – убывает до $t = 0,04$, затем наблюдается скачок до $t = 0,1$ и функция медленно убывает до $t = 1$; c_2 – имеет скачкообразный характер при $t \in [0; 0,056]$, затем функция убывает до $t = 1$; C_3 – возрастает до $t = 0,25$ и от $t = 0,25$ до $t = 1$ – убывает; c_4 , c_5 – монотонно возрастают).

Заметим, что в решениях c_1 , c_2 наблюдается наличие пограничного слоя. Его продолжительность составляет примерно 0,04 (на шаг интегрирования накладывается условие $\tau < 0,04$). Такое же неравенство получается из условия устойчивости, т.е. $\tau < \frac{2}{|\lambda_{\max}|} = \frac{2}{48,17062} \approx 0,04152$. Следовательно, только при $\tau < 0,04$ наблюдается сходимость реше-

ния к одним и тем же предельным значениям при $t = 1$.

Присутствие пограничного слоя в решениях c_1 , c_2 говорит о том, что эти компоненты представляют оптимальные концентрации активных веществ реакции полимеризации, являющихся промежуточными в ходе реакции, а c_3 , c_4 , c_5 – концентрации менее активных веществ. Таким образом, существенный вклад в решение вносят первая и вторая компоненты.

Выводы

Рассмотрена схема полимеризации 9-винилкарбазола под действием ДЭАХ, в которой использованы две стадии.

Построена математическая модель данных химических реакций в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями (2).

Проведено исследование системы (1)–(2) на «жесткость».

Изучены методы решения «жестких» систем. Задача (1)–(2) была решена следующими численными методами: явным методом Эйлера, неявным методом Адамса-Моултона, неустойчивым методом Адамса, методом Гира.

Полученные результаты позволяют сделать заключение о том, что применение метода Гира с автоматическим контролем погрешности вычислений и шага интегрирования при интегрировании «жестких» систем является наиболее рациональным при изучении поведения концентраций химических веществ. В

реакции полимеризации участвуют химически активные вещества (ВК, ДЭАХ), так и менее активные вещества ([ВК...ДЭАК], $[P^+AlEt_2Cl^-_2]$, полимер).

Литература

1. Арнольд В.И. Обыкновенные дифференциальные уравнения. М., 1975.
2. Арушанян О.Б., Залёткин С.Ф. Численное решение дифференциальных уравнений на фортране. М., 1990.
3. Иванов В. В. Методы вычислений на ЭВМ. Киев, 1986.
4. Ракитский Ю.В., Устинов С.М., Черноуцкий И.Г. Численные методы решения жестких систем. М., 1979.
5. Gear C. W. The automatic integration of ordinary differential equation. Communication of the ACM, 1971, Vol. 14, №3.

References

1. Arnol'd V.I. *Obyknovennyye differentsial'nye uravneniya* [Ordinary Differential Equations]. Moscow, 1975.
2. Arushanian O.B., Zaliotkin S.F. *Chislennoye reshenie differentsial'nykh uravnenii na fortrane* [The numerical solution of differential equations in FORTRAN]. Moscow, 1990.
3. Ivanov V.V. *Metody vychislenii na EVM* [Methods of computer calculations]. Kiev, 1986.
4. Rakitskii Yu.V., Ustinov S. M., Chernoruckii I. G. *Chislennyye metody resheniya zhestkikh sistem* [Numerical methods for solving rigid systems]. Moscow, 1979.
5. Gear C.W. The automatic integration of ordinary differential equation. Communication of the ACM, 1971, Vol. 14, №3.

УДК 621.311

Л.А. Семенова

Оренбургский государственный университет

МНОГОКРИТЕРИАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ РАЗВИТИЯ СИСТЕМ ЭЛЕКТРОСНАБЖЕНИЯ В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

Представлена методика многокритериального анализа моделей развития систем электроснабжения в условиях неопределенности. Обоснована система критериев оценки моделей развития, отражающая экономический, технический и архитектурно-градостроительный аспекты и разработаны их математические модели с учетом неопределенности электропотребления и возможной реконструкции системы электроснабжения в случае дефицита мощности. Приведена IDEF0-диаграмма разработанной и реализованной в программном комплексе методики многокритериального анализа моделей развития систем электроснабжения.

Система электроснабжения, многокритериальный анализ, система критериев, неопределенность.

A method of multi-criteria analysis of power systems development models in the face of uncertainty was presented. Criteria for evaluation of models were given. The system reflects the economic, technical, architectural and town planning aspects. Mathematical models of criteria were developed taking into consideration the uncertainty of power consumption and possible reconstruction of the power supply system due to power shortages. IDEF0-diagram is developed and implemented in the software package method of multi-criteria analysis of development models of power supply systems.

Power system, multi-criteria analysis, system of criteria, uncertainty.

Введение

При управлении развитием электроэнергетических систем, а также систем электроснабжения (СЭС) необходимо учитывать мнения различных

заинтересованных сторон, следовательно, оценивать проектные варианты по нескольким критериям.

Многокритериальность постановки задачи выбора модели развития СЭС обуславливает наличие не-