

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

ПРИНЦИПЫ ПРИМЕНЕНИЯ ПАКЕТОВ КОМПЬЮТЕРНОЙ МАТЕМАТИКИ

Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин

www.e.lanbook.com



**ЭБС
ЛАНЬ®
ЛАНЬ**

Т. Н. ГАРТМАН, Д. В. КЛУШИН

МОДЕЛИРОВАНИЕ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ
ПРИНЦИПЫ ПРИМЕНЕНИЯ ПАКЕТОВ
КОМПЬЮТЕРНОЙ МАТЕМАТИКИ

ДОПУЩЕНО

*Федеральным учебно-методическим объединением
по укрупненной группе специальностей
и направлений подготовки «Химические технологии»
в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений,
обучающихся по направлению подготовки «Химическая технология»*



САНКТ-ПЕТЕРБУРГ
МОСКВА
КРАСНОДАР
2020

УДК 66
ББК 35я73

Г 21 Гартман Т. Н. Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики : учебное пособие / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. — Санкт-Петербург : Лань, 2020. — 404 с. : ил. — (Учебники для вузов. Специальная литература). — Текст : непосредственный.

ISBN 978-5-8114-3900-3

В книге на примере пакета MATLAB рассмотрены основные аспекты применения современных пакетов компьютерной математики для моделирования химико-технологических процессов. Приведено описание интерпретируемого языка программирования MATLAB и на различных примерах проиллюстрированы его функциональные возможности. С использованием решателей (solvers) пакета MATLAB представлены программные коды решения многочисленных задач вычислительной математики и задач разработки компьютерных моделей химико-технологических процессов. Проанализированы возможности применения рассмотренных решателей MATLAB для решения типовых задач вычислительной математики численными методами.

Книга предназначена для изучения методов применения пакетов компьютерной математики, в частности пакета MATLAB, для технологических расчетов, математического моделирования и оптимизации при проектировании и управлении химико-технологическими процессами. Рекомендуется в качестве учебного пособия студентам и магистрам, обучающимся по направлениям подготовки и специальностям, входящим в УГСН «Химия», «Химические технологии», а также может быть полезна аспирантам, инженерам-химикам-технологам, занимающимся расчетами и расчетными исследованиями технологических процессов.

УДК 66
ББК 35я73

Рецензенты:

В. М. АРИСТОВ — доктор физико-математических наук, профессор Российского химико-технологического университета им. Д. И. Менделеева;
А. В. ТИМОШЕНКО — доктор технических наук, профессор кафедры химии и технологии основного органического синтеза, проректор по учебной работе МИРЭА — Российского технологического университета.

Обложка
П. И. ПОЛЯКОВА

© Издательство «Лань», 2020
© Т. Н. Гартман,
Д. В. Клушин, 2020
© Издательство «Лань»,
художественное оформление, 2020

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Глава 1. Краткая характеристика современных пакетов компьютерной математики	6
1.1. Пакеты компьютерной математики, их разновидности и основные функциональные элементы.....	6
1.2. Применение численных методов вычислительной математики при компьютерном моделировании химико-технологических процессов.....	11
1.2.1. Пакет компьютерной математики MATLAB и применение его решателей для реализации численных методов вычислительной математики.....	14
Глава 2. Основы программирования на интерпретируемом языке пакета MATLAB	23
2.1. Интегрированная среда MATLAB и работа в ней.....	23
2.2. Представление (описание, декларирование) переменных с использованием оператора присвоения.....	25
2.2.1. Оператор создания числового массива с равномерным распределением элементов "inspace".....	26
2.2.2. Оператор двоеточие (:) для создания числового массива с равномерным распределением элементов	27
2.2.3. Оператор "format" для фиксации определенного числа цифр после десятичной точки в случае изображения числовой константы.....	27
2.2.4. Операторы преобразования целых и вещественных переменных в символьные "int2str" и "num2str"	28
2.3. Оператор присваивания «=»	29
2.3.1. Применение стандартных функций MATLAB к одномерным массивам.....	30
2.3.2. Применение стандартных функций MATLAB к двумерным массивам	32
2.3.3. Элементарные стандартные математические и собственные функции MATLAB.....	34
2.3.4. Создание собственной элементарной функции с использованием стандартной функции MATLAB "inline"	36
2.3.5. Арифметические операции	37
2.3.6. Логические операции.....	39
2.3.7. Совместное выполнение арифметических и логических операций	41
2.4. Оператор условного перехода "if"	42
2.5. Оператор выбора "switch".....	44
2.6. Оператор цикла "for"	46
2.7. Оператор цикла "while"	47
2.8. Построение двумерных (плоских) графиков с использованием функции "plot"	49
2.8.1. Построение одной или нескольких функций на одном графике	49

2.8.2. Построение нескольких графиков в разных окнах с использованием функции “figure”	54
2.8.3. Построение нескольких графиков в одном окне с использованием функции “subplot”	55
2.9. Построение трехмерных (объемных) графиков с использованием функций “mesh”, “surf”, “meshc” и “surfc”	56
2.10. Разработка компьютерных программ в интегрированной среде MATLAB	61
2.10.1. Создание программ в Командном окне (Command Window)	62
2.10.2. Создание программ с <i>m</i> -файлами	67
2.10.3. 1. Программы со скриптами и функциями без параметров	69
2.10.4. 2. Программа с внешней функцией с параметрами и функцией “global”	75
2.10.5. 3. Программа с внешней функцией с параметрами и функцией “varargin”	79
2.10.6. 4. Программа с внешней функцией с параметрами и функцией “feval”	82
2.10.7. 5. Программа с внутренней функцией с параметрами	85
2.10.8. 6. Программа с функцией “inline”	87
2.10.9. 7. Стандартное оформление программы с <i>m</i> -скриптом в качестве основной управляющей программы и отдельными файлами для ввода информации (DATA.m) и отчета о результатах вычислений (REPORT.m)	89
2.10.10. 8. Программа с решателем MATLAB “roots”	93
2.10.11. 9. Программа стандартная с отчетом в текстовом файле	99
2.10.12. 10. Программа с визуальным Windows-интерфейсом GUI	106
Глава 3. Применение решателей пакета MATLAB для реализации численных методов вычислительной математики при моделировании химико-технологических процессов	165
3.1. Вычисление производных и интегралов	166
3.1.1. Вычисление производных с применением метода разделенных разностей	166
3.1.2. Вычисление интегралов с применением решателей “trapz” и “quad”	170
3.2. Решение нелинейных уравнений	174
3.2.1. Решение алгебраических полиномиальных уравнений с применением решателя “roots”	176
3.2.2. Решение трансцендентного уравнения с применением решателя “fzero”	178
3.2.3. Определение температуры кипения и мольных объемов жидкой и паровой фаз индивидуального вещества при различных давлениях в условиях парожидкостного равновесия	182
3.3. Решение систем уравнений	192
3.3.1. Решение СЛАУ с применением функций “det”, “inv” и решателя “linsolve”	193

3.3.2. Применение решателя “fsolve” для решения системы нелинейных уравнений.....	203
3.3.3. Моделирование стационарного режима процесса химического превращения с линейной кинетической зависимостью скоростей стадий от концентраций веществ в изотермическом проточном реакторе с мешалкой путем решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) при изменяющемся времени пребывания реакционного потока в реакторе	210
3.3.4. Моделирование стационарного режима процесса химического превращения с линейной кинетической зависимостью скоростей стадий реакции от концентрации веществ в изотермическом проточном реакторе путем решения системы нелинейных уравнений при изменяющемся реакционном объеме	216
3.3.5. Моделирование стационарного режима процесса химического превращения с нелинейной кинетической зависимостью скоростей стадий реакций от концентраций веществ в изотермическом проточном реакторе путем решения системы нелинейных уравнений при изменяющемся времени пребывания в реакторе.....	220
3.3.6. Моделирование стационарного режима процесса химического превращения с нелинейной кинетической зависимостью скоростей стадий реакций от концентрации веществ в изотермическом проточном реакторе путем решения системы нелинейных уравнений при изменяющемся реакционном объеме	225
3.4. Решение систем дифференциальных уравнений.....	229
3.4.1. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений	229
3.4.2. Решение дифференциальных уравнений с частными производными методом конечных разностей	258
3.5. Решение оптимизационных задач	279
3.5.1. Общая процедура решения оптимизационных задач.....	281
3.5.2. Решение задач одномерной оптимизации	288
3.5.3. Решение задач многомерной оптимизации	294
Приложение. Результаты компьютерного моделирования химико-технологических процессов. (Программные коды файлов приведены в главе 3).....	375
Таблица П.1. Результаты определения равновесных температур и мольных объемов жидкой и паровой фаз по уравнению состояния SRK при различных давлениях	375
Таблица П.2. Результаты моделирования стационарного режима изотермического реактора идеального перемешивания со стехиометрической схемой реакции $A \rightarrow P \rightarrow S$ при изменении времени пребывания в аппарате.....	376
Таблица П.3. Результаты моделирования стационарного режима изотермического реактора идеального перемешивания со стехиометрической схемой реакции $A \rightarrow P \rightarrow S$ для различных реакционных объемов.....	377

Таблица П.4. Результат моделирования стационарного режима изотермического реактора идеального перемешивания со стехиометрической схемой реакции $A \rightarrow 2P \rightarrow S$ с нелинейной кинетической зависимостью скоростей стадий от концентраций веществ в реакторе идеального перемешивания при изменении времени пребывания реакционного потока в реакторе	379
Таблица П.5. Результаты моделирования стационарного режима химического превращения в изотермическом реакторе идеального перемешивания со стехиометрической схемой реакции $A \rightarrow 2P \rightarrow S$ с нелинейной кинетической зависимостью скоростей стадий от концентрации веществ для различных реакционных объемов	380
Таблица П.6. Результаты моделирования процесса химического превращения в изотермическом периодическом реакторе идеального перемешивания со стехиометрической схемой реакции $A \rightarrow 2P \rightarrow S$	381
Таблица П.7. Результаты моделирования распределения профиля температур в цилиндрическом металлическом стержне с внешним источником тепла путем решения СДУЧП параболического типа Фурье — Кирхгофа	382
Таблица П.8. Результаты определения оптимального времени пребывания реакционной смеси в изотермическом проточном реакторе с мешалкой, в котором протекает реакция $A \rightarrow P \rightarrow S$	384
Таблица П.9. Результаты определения оптимальной температуры в изотермическом проточном реакторе с мешалкой	385
Таблица П.10. Результаты определения оптимальной температуры и оптимального времени пребывания в изотермическом проточном трубчатом реакторе	386
Таблица П.11. Результаты расчета кинетических коэффициентов химической реакции $A \xrightarrow{k_1} P \xrightarrow{k_2} S$ по опытным данным в периодическом реакторе при постоянной температуре	388
Таблица П.12. Результаты определения четырех коэффициентов уравнения $P = \exp(a(1)*T^3 + a(2)*T^2 + a(3)*T + a(4))$ с применением решателя “polyfit”	389
Таблица П.13. Результаты определения коэффициентов уравнения Антуана методом линейной регрессии	390
Таблица П.14. Результаты определения коэффициентов уравнения Антуана методом нелинейной регрессии с применением решателя “lsqcurvefit”	392
Таблица П.15. Результаты расчета равновесного состава реакции синтеза аммиака при $T = 450^\circ\text{C}$ и $P = 600$ атм	393

Таблица П.16. Результаты расчета равновесного состава двух одновременно протекающих реакций получения водорода из метана и водяного пара	394
Литература.....	396