

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 |