

Учреждение образования
«БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

А. И. Юсевич

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

**Учебно-методическое пособие по одноименной дисциплине
для студентов специальности 1-48 01 02 «Химическая
технология органических веществ, материалов и изделий»
специализаций 1-48 01 02 01 «Технология основного
органического и нефтехимического синтеза»,
1-48 01 02 03 «Технология лакокрасочных материалов»,
1-48 01 02 04 «Технология пластических масс»**

Минск 2013

УДК 66.011(075.8)
ББК 35я73
Ю89

Рассмотрено и рекомендовано редакционно-издательским советом университета

Рецензенты:

кандидат физико-математических наук,
директор ОАО «Завод горного воска» *В. В. Мулярчик*;
кандидат химических наук, доцент кафедры химии, технологии
электрохимических производств и материалов электронной
техники БГТУ *Н. В. Богомазова*

Юсевич, А. И.

Ю89 Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов : учеб.-метод. пособие по одноименной дисциплине для студентов специальности 1-48 01 02 «Химическая технология органических веществ, материалов и изделий» специализаций 1-48 01 02 01 «Технология основного органического и нефтехимического синтеза», 1-48 01 02 03 «Технология лакокрасочных материалов», 1-48 01 02 04 «Технология пластических масс» / А. И. Юсевич. – Минск : БГТУ, 2013. – 135 с.

Рассмотрены методы анализа и расчета химико-технологических систем, моделирования типовых технологических аппаратов и оптимизации химико-технологических процессов с применением программного пакета Mathcad. Пособие направлено на развитие у студентов умений и навыков практического использования компьютерной техники и прикладного программного обеспечения при решении реальных задач, стоящих перед инженером-химиком-технологом.

УДК 66.011(075.8)
ББК 35я73

© УО «Белорусский государственный
технологический университет», 2013
© Юсевич А. И., 2013

ВВЕДЕНИЕ

.....
.....
.....

Химико-технологический процесс (ХТП) – это преобразование исходного сырья в целевые продукты путем физико-химической или механохимической обработки в последовательности аппаратов, составляющих химико-технологическую систему.

Химико-технологическая система (ХТС) представляет собой совокупность взаимосвязанных технологическими потоками и действующих как одно целое аппаратов, в которых осуществляются в определенной последовательности технологические операции. Целью функционирования ХТС является выпуск химической продукции установленного вида, заданного качества и количества путем переработки определенного вида сырья.

Условия процесса, позволяющие производить заданное количество продукта требуемого качества при минимальных затратах, называются оптимальными. Поиск оптимальных условий – оптимизация – осуществляется как на стадии проектирования ХТС, так и во время оперативного управления ХТП. При оптимизации используются математические модели, описывающие закономерности химико-технологических процессов и позволяющие предсказывать их результат.

Среди разнообразных математических задач, связанных с разработкой новых и совершенствованием существующих ХТС, следует особо выделить задачи синтеза, анализа и оптимизации.

Задача синтеза ХТС в общем случае формулируется следующим образом. Заданы элементы, из которых может быть построена система, а также сырье и целевые продукты. Требуется разработать структуру ХТС для реализации технологического процесса, т. е. необходимо выбрать элементы из числа имеющихся; установить связи между ними; определить конструктивные и технологические параметры элементов ХТС.

Задача синтеза обычно многовариантна, поскольку одни и те же значения выходных параметров ХТС могут быть обеспечены при различной структуре системы и разных режимах функционирования ее элементов. Задача синтеза имеет определенные особенности при проектировании новой и реконструкции существующей ХТС. Так, при создании новой ХТС обычно имеется много возможностей выбора элементов и связей между ними. При реконструкции ХТС приходится сохранять все или часть ее элементов, а также все или часть связей между элементами.

Задачи анализа ХТС подразделяются на анализ структуры и качества функционирования.

Цель анализа структуры ХТС – выявление ее структурных особенностей и нахождение последовательности расчета элементов, а цель анализа качества функционирования ХТС – получение количественных оценок ее основных свойств: чувствительности, надежности, устойчивости и т. д.

Задача оптимизации ХТС является комплексной. Она включает в себя как оптимизацию структуры, так и оптимизацию режимов функционирования элементов. Цель оптимизации – обеспечение наиболее высоких технико-экономических показателей ХТС.

Следует отметить связь, которая существует между задачами оптимизации, синтеза и анализа. Действительно, при создании нового производства выполняется синтез нескольких альтернативных вариантов ХТС, анализируются их технико-экономические показатели, происходит поиск окончательного оптимального варианта.

Для решения этих задач широко используются различные методы расчета ХТС. Под расчетом ХТС будем понимать определение параметров состояния технологических потоков в стационарном режиме функционирования системы.

С учетом высокого уровня сложности современных технологических процессов успешное решение указанных выше задач в кратчайшие сроки возможно только с привлечением ЭВМ и систем автоматизированного проектирования (САПР), в основе которых лежит метод математического моделирования. Следует отметить, однако, что САПР в большинстве своем являются сложными узкоспециализированными и к тому же дорогостоящими системами, требующими от пользователя высокой квалификации и большого опыта работы. С другой стороны, самые разнообразные задачи химической технологии можно решать с помощью доступных и универсальных математических программных пакетов, одним из ярких представителей которых является Mathcad.

1. АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ И ОПТИМИЗАЦИЯ СТРАТЕГИИ РАСЧЕТА ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Любая ХТС как объект исследования имеет определенную технологическую структуру. *Технологическая структура, или технологическая топология, ХТС* – это строение и внутренняя форма организации системы, отражающая состав элементов (т. е. их число, конструкционный тип и технологическое назначение) и особенности взаимосвязей между элементами.

Технологическую топологию ХТС отображают, используя разнообразные схемы: чаще всего технологические и операторные.

Технологическая схема ХТС – это такой чертеж, на котором каждый элемент системы представлен в виде стандартного графического изображения, а технологические связи даны в виде направленных линий (рис. 1.1), а также приведены краткие сведения о химических формулах, составах технологических потоков и некоторые сведения о свойствах веществ, участвующих в химико-технологическом процессе.

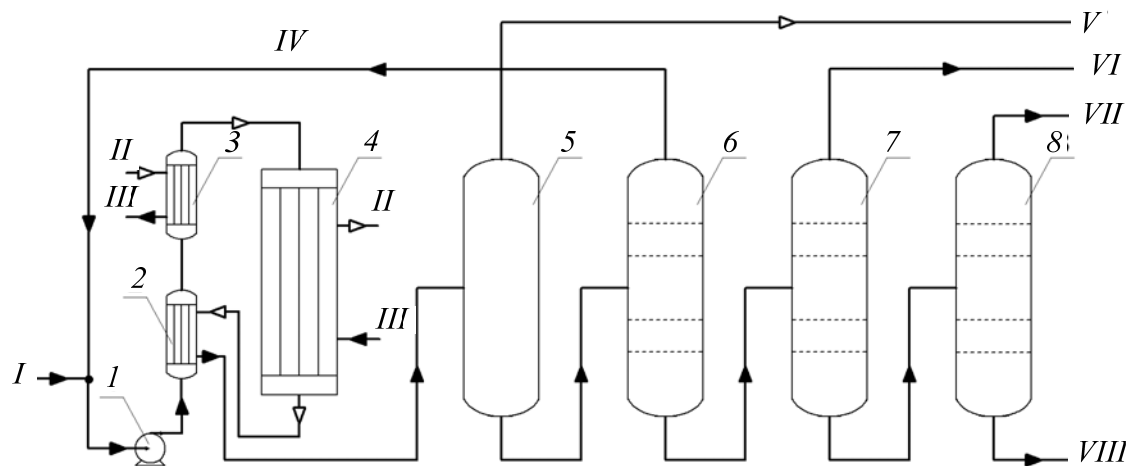


Рис. 1.1. Технологическая схема процесса олигомеризации пропан-пропиленовой фракции на твердом фосфорно-кислотном катализаторе:

- I* – насос; *2* – рекуперативный теплообменник; *3* – подогреватель;
- 4* – кожухотрубчатый реактор; *5* – депропанизатор; *6* – колонна выделения димеров; *7* – колонна выделения тримеров; *8* – колонна выделения тетрамеров пропилена; *I* – пропан-пропиленовая фракция; *II* – водяной пар;
- III* – водяной конденсат; *IV* – димеры пропилена; *V* – пропан; *VI* – тримеры пропилена; *VII* – тетрамеры пропилена; *VIII* – тяжелый остаток

Операторная схема ХТС – это такой чертеж, на котором каждый элемент изображают в виде одного или совокупности типовых технологических операторов (ТТО), а взаимосвязи между ТТО и технологические соединения между элементами показывают направленными линиями. Операторная схема ХТС дает первоначальное представление о физико-химической сущности всех химико-технологических процессов системы (рис. 1.2).

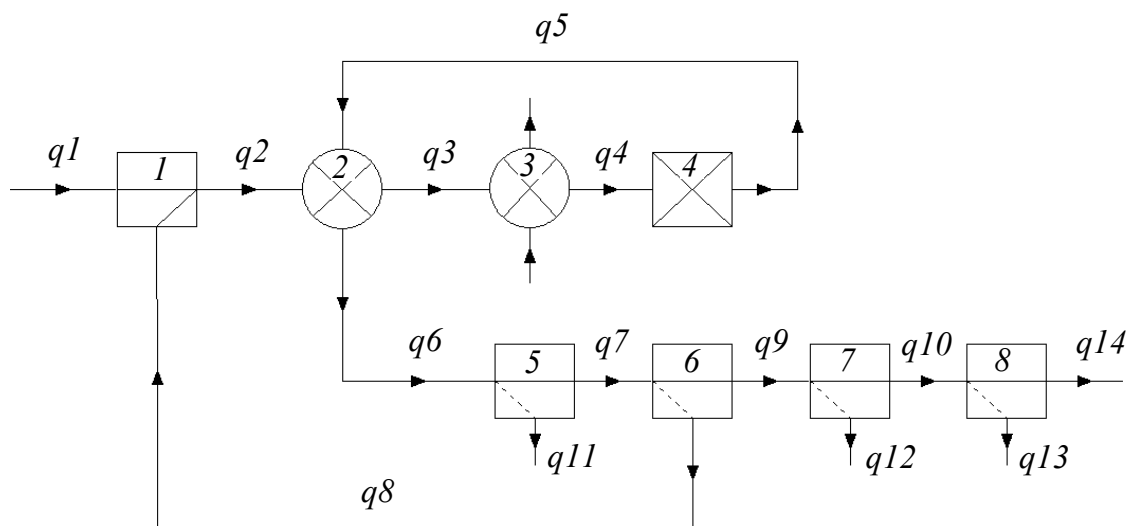


Рис. 1.2. Операторная схема процесса олигомеризации пропан-пропиленовой фракции на твердом фосфорно-кислотном катализаторе:
 1 – смеситель потоков; 2 – рекуперативный теплообменник; 3 – подогреватель;
 4 – реактор; 5 – депропанизатор; 6 – колонна выделения димеров; 7 – колонна выделения тримеров; 8 – колонна выделения тетрамеров пропилена

Типы технологических связей, характерные для технологической топологии ХТС, приведены на рис. 1.3.

В зависимости от типа технологических связей в структуре ХТС выделяют однонаправленные (разомкнутые) и встречно-направленные (замкнутые) ХТС. **Однонаправленные, или ациклические, ХТС** – это системы, содержащие однонаправленные технологические связи: последовательные, параллельные и последовательно-обводные.

Встречно-направленные, или контурные, ХТС – это системы, содержащие обратные технологические связи. Такие ХТС могут быть одноконтурными и многоконтурными.

Одноконтурные ХТС в своей структуре содержат один простой контур (рис. 1.4, а). Простой контур представляет собой замкнутую совокупность элементов ХТС, при обходе которой в направлении технологических потоков никакой элемент, кроме начального, дважды не повторяется.

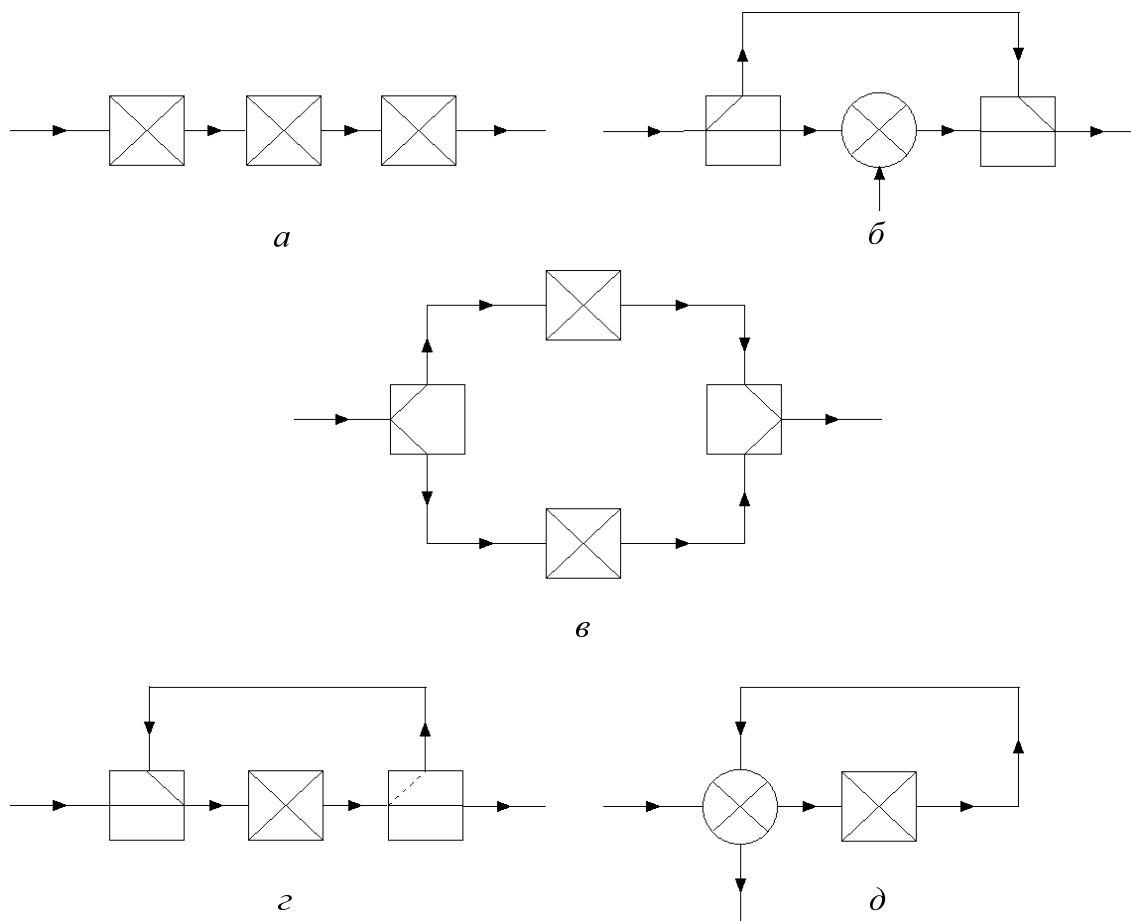


Рис. 1.3. Типы технологических связей:
а – последовательная; *б* – последовательно-обводная; *в* – параллельная;
г – обратная по потоку вещества; *д* – обратная по потоку энергии

Многоконтурные ХТС могут быть упорядоченными и взаимосвязанными. *Упорядоченные многоконтурные ХТС* содержат в своей структуре произвольное число упорядоченно расположенных в определенном направлении одноконтурных подсистем (рис. 1.4, *б*).

Взаимосвязанные многоконтурные ХТС имеют в своей структуре различное число произвольно взаимосвязанных одноконтурных подсистем, содержащих общие элементы, которые принадлежат одновременно нескольким различным подсистемам (рис. 1.4, *в, г*).

В общем случае технологическая топология *ХТС* может содержать произвольную комбинацию различных однонаправленных и встречно-направленных технологических связей.

Тип технологических связей существенно влияет на технологические и технико-экономические показатели эффективности функционирования *ХТС*, на свойства *ХТС*, а также определяет порядок и способ расчета *ХТС*.

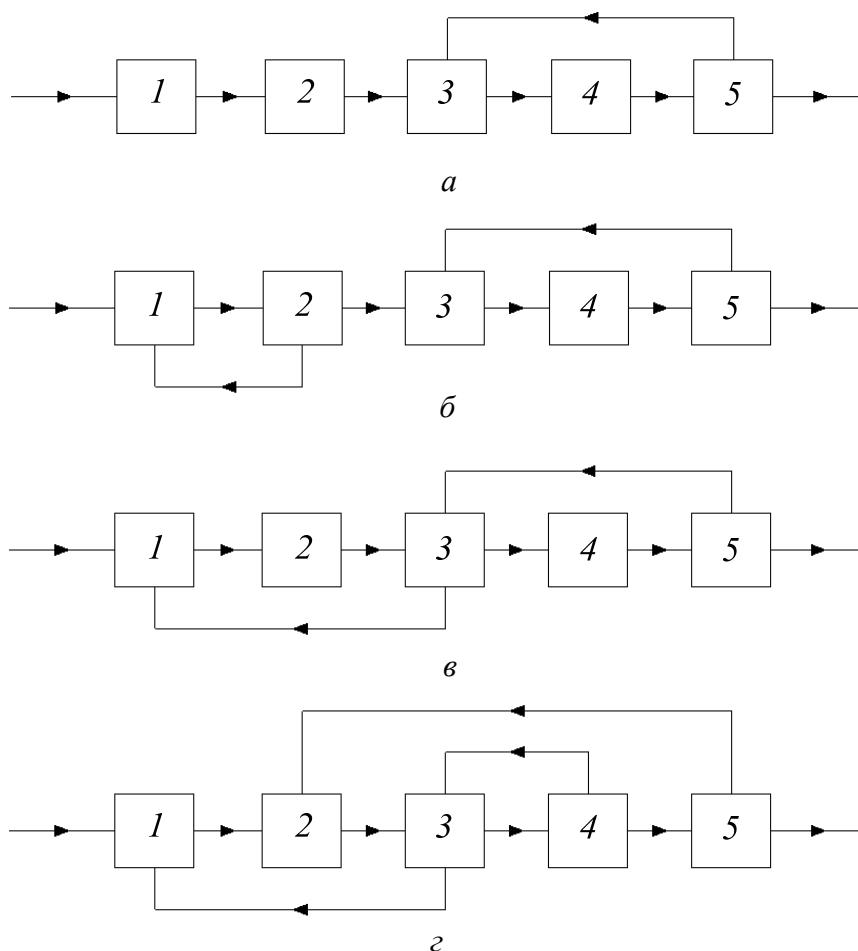


Рис. 1.4. Контурные химико-технологические системы:
a – одноконтурная; *б* – упорядоченная многоконтурная;
в, г – взаимосвязанные многоконтурные

Большая сложность технологической топологии современных ХТС, их многомерность по числу составляющих элементов, высокая степень параметрического взаимовлияния элементов обуславливают возникновение при решении задачи анализа ХТС ряда трудностей методологического и вычислительного характера, которые могут быть преодолены с применением аппарата теории графов. Например, для разработки алгоритмов оптимальной стратегии расчета ХТС при технологически направленном способе анализа сложных многоконтурных ХТС применяют параметрические потоковые графы.

Параметрические потоковые графы (ППГ) – топологические модели ХТС, отображающие преобразование элементами ХТС параметров физических потоков системы. Вершины ППГ отображают технологические операторы ХТС, а также точки стыковки технологических трубопроводов, источники и стоки физических потоков ХТС. Дуги ППГ

соответствуют физическим потокам ХТС. На рис. 1.5 представлен ППГ операторной схемы ХТС, приведенной на рис. 1.2 (см. на с. 6).

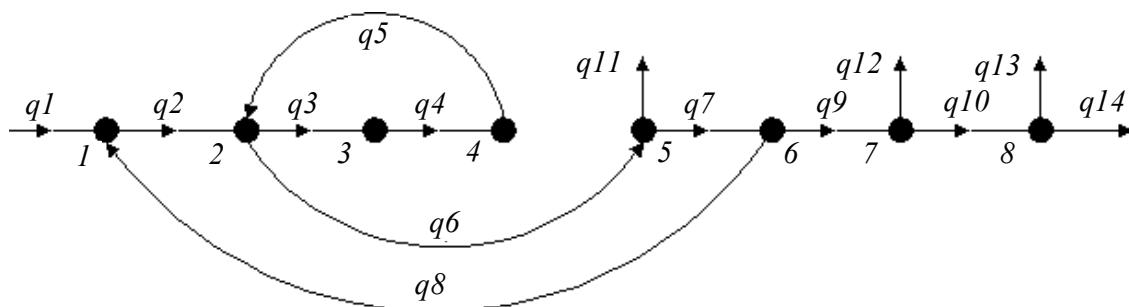


Рис. 1.5. Параметрический потоковый граф процесса олигомеризации пропан-пропиленовой фракции

Структурный анализ ППГ позволяет выбрать особые дуги ППГ, соответствующие множеству разрываемых технологических потоков. Разрыв особых дуг в структуре исходного многоконтурного ППГ данной ХТС превращает этот многоконтурный ППГ в эквивалентный ациклический ППГ, который может быть упорядочен по слоям вершин (т. е. для которого может быть определена упорядоченная последовательность расчета математических моделей отдельных элементов ХТС, соответствующих вершинам ППГ).

Задача структурного анализа многоконтурного ППГ, отображающего сложную встречно-направленную (замкнутую) ХТС, формулируется следующим образом. Дан исходный многоконтурный ППГ, который содержит l разнопараметрических дуг $Q = (q_1, q_2, \dots, q_l)$ и m простых контуров (L_1, L_2, \dots, L_m) . Необходимо определить множество особых дуг $Q^* = (q_1, q_2, \dots, q_p)$, $Q^* \subset Q$ с минимальной суммой параметричностей π :

$$\sum_{i=1}^p \pi_i = \min, \quad (1.1)$$

которые разрывают все m простых контуров в исходном ППГ. Очевидно, что если все дуги исходного ППГ имеют одинаковую параметричность, то отыскивается *минимальное множество особых (разрываемых) дуг*, т. е. (1.1) переписывается следующим образом:

$$p = \min. \quad (1.2)$$

Анализ химико-технологической системы с использованием ППГ включает следующие этапы:

– декомпозиция сложной многоконтурной ХТС на строго соподчиненные элементарные и взаимосвязанные контурные подсистемы,

между которыми существуют только однонаправленные технологические потоки. Здесь под элементарными подсистемами ХТС будем понимать отдельные элементы ХТС (отдельные вершины ППГ) и одноконтурные подсистемы ХТС. Иными словами, на первом этапе выявляют комплексы в графе и определяют предварительную последовательность расчета ХТС;

– идентификация одноконтурных подсистем в составе взаимосвязанных контурных подсистем (т. е. в составе комплексов);

– определение множества особых (разрываемых) технологических потоков, для которого выполняется условие (1.1) или (1.2) в зависимости от того, имеют ли все технологические потоки системы одинаковую или разную параметричность;

– упорядочение по слоям вершин эквивалентного ациклического ППГ, образовавшегося после разрыва особых технологических потоков, т. е. определение окончательной последовательности расчета разомкнутой ХТС.

1.1. Алгоритм выделения комплексов в ХТС

Выделение строго соподчиненных элементарных подсистем и комплексов в сложной многоконтурной ХТС базируется на анализе свойств матрицы смежности. В общем случае декомпозицию ХТС проводят в такой последовательности:

1) составляют матрицу смежности ППГ. *Матрица смежности* \mathbf{A} некоторого графа – это квадратная матрица, размерность которой совпадает с числом вершин n графа, строки и столбцы соответствуют вершинам графа, а элементы принимают значения

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если есть дуга из } i\text{-й вершины в } j\text{-ю,} \\ 0, & \text{если нет дуги из } i\text{-й вершины в } j\text{-ю;} \end{cases} \quad (1.3)$$

2) вычисляют *матрицу путей* \mathbf{C} графа:

$$\mathbf{C} = \bigcup_{s=1}^n \mathbf{A}^s. \quad (1.4)$$

При возведении матрицы \mathbf{A} в степень применяют обычные правила перемножения матриц, однако значения элементов матриц определяют, используя операции булевой алгебры (логическое сложение и логическое умножение);

3) получают *матрицу бикомпонентов* \mathbf{D} графа, элементы которой

$$d_{ij} = c_{ij}c_{ji}, \quad (1.5)$$

где c_{ij} – элемент матрицы \mathbf{C} ;

4) анализируют матрицу бикомпонентов и разбивают набор вершин графа на N групп (K_1, \dots, K_N), имея в виду, что вершины i и j входят в одну группу при выполнении следующих условий:

- $d_{ij} = d_{ji} = 1$ (симметричность);
- если $d_{ik} = 1$ и $d_{kj} = 1$, то $d_{ij} = 1$ (транзитивность).

Группы вершин K_b , состоящие более чем из одной вершины, являются комплексами. После идентификации всех K_1, \dots, K_Z отдельных вершин и комплексов в исходном многоконтурном ППГ можно построить эквивалентный ациклический ППГ, вершины которого соответствуют как отдельным вершинам, так и комплексам исходного ППГ.

Выделение комплексов в графе с применением Mathcad продемонстрируем на примере графа, изображенного на рис. 1.5 (см. на с. 9). Основы работы в Mathcad рассмотрены в приложении.

```

ORIGIN := 1 - задаем нижнюю границу индексации элементов матриц

```

$$\mathbf{A} := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{- составляем матрицу смежности ППГ}$$

```

n := rows(A)    i := 1..n    j := 1..n

```

$$\mathbf{C} := \sum_i \mathbf{A}^i \quad \mathbf{C}_{i,j} := \text{if}(\mathbf{C}_{i,j} > 0, 1, 0) \quad \text{- вычисляем матрицу путей ППГ}$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{Просмотр значений элементов матрицы C}$$

$D := \overrightarrow{(C \cdot C^T)}$ - вычисляем матрицу бикомпонентов ППГ

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Просмотр значений элементов матрицы **D**
(в рамку взята область матрицы, соответствующая
единственному комплексу в анализируемом графе)

Таким образом, в исследуемом ППГ присутствует один комплекс, включающий вершины с номерами 1, 2, 3, 4 и 5, т. е. $K_1 = (1, 2, 3, 4, 5)$.

Следует обратить внимание, что при вычислении в Mathcad матрицы путей **C** мы складывали матрицы A^i обычным образом, а затем заменили ненулевые элементы результирующей матрицы на единичные, так как нам важно знать, равен нулю или нет элемент c_{ij} . Кроме того, для осуществления поэлементных операций над матрицами была применена операция векторизации $\overrightarrow{(f(x))}$, которая вызывается сочетанием клавиш **Ctrl + -**.

После выделения комплексов в исходном многоконтурном ППГ составляют эквивалентный ациклический ППГ, в котором комплексы заменены псевдовершинами, и определяют предварительную последовательность расчета элементов ХТС.

1.2. Алгоритм идентификации одноконтурных подсистем в ХТС

Каждой простой контурной подсистеме в многоконтурной ХТС соответствует простой контур ППГ этой системы. Каждый такой контур должен быть идентифицирован совокупностью вершин и дуг графа.

Рассмотрим *многошаговый алгоритм* идентификации одноконтурных подсистем, который базируется на анализе структурной матрицы графа.

Структурная матрица S ориентированного графа с числом вершин n и числом дуг l – это матрица порядка $(n \times l)$, строки которой соответствуют вершинам, а столбцы – дугам графа. Элементы этой матрицы определяются следующим образом:

$$s_{ij} = \begin{cases} -1, & \text{если } j\text{-я дуга выходит из } i\text{-й вершины;} \\ +1, & \text{если } j\text{-я дуга входит в } i\text{-ю вершину;} \\ 0, & \text{если } j\text{-я дуга не относится к } i\text{-й вершине.} \end{cases} \quad (1.6)$$

По структурной матрице строится прадереве с корнем, отображающее все пути в ППГ длиной λ . Вершина – корень прадерева – это, как правило, входная вершина графа, соответствующая элементу ХТС, в который подается исходное сырье. Построение каждой из ветвей прадерева начинается с вершины-корня и заканчивается висячей вершиной (т. е. первой повторяющейся вершиной в последовательности вершин, представляющей собой ветвь прадерева). Очевидно, что каждая висячая вершина принадлежит элементарному контуру ППГ.

Алгоритм построения прадерева состоит из следующих операций:

1) для вершины r ($r \in [1; n]$) некоторой i -й ветви прадерева (на первом шаге $r = k$, где k – вершина-корень прадерева) выявляются номера всех выходящих дуг j ($j \in [1; l]$), т. е. отыскиваются элементы матрицы $s_{rj} = -1$; если найдена единственная выходящая дуга, то переходят к пункту 2, если определено m выходящих дуг, то переходят к пункту 3;

2) для найденной выходной дуги выявляется вершина t , в которую эта дуга входит, т. е. отыскивается элемент матрицы $s_{mj} = 1$; далее переходят к пункту 4;

3) i -я ветвь прадерева разделяется на m ветвей; для каждой ветви выполняется пункт 2;

4) вершина t проверяется на выполнение ряда условий:

– если $t = 0$ (т. е. дуга выходит во внешнюю среду), то ветвь обрывается;

– если t повторяется в i -й последовательности вершин (т. е. является висячей вершиной), то фиксируется контур;

– в ином случае осуществляется переприсвоение $r := t$, и возвращаются к пункту 1 на следующий шаг.

Необходимо отметить, что описанный алгоритм идентификации контуров не единственный (существует, например, ряд алгоритмов,

основанных на анализе свойств матрицы смежности), однако он, в отличие от других, позволяет сразу получить список контуров, записанный как по вершинам, так и по дугам, что очень удобно для последующего определения оптимально-разрывающего множества дуг.

Следует учитывать, что общее число висячих вершин прадерава может быть больше числа простых контуров ППГ, так как разные висячие вершины прадерава могут соответствовать одному и тому же простому контуру. Поэтому из списка контуров необходимо удалить повторяющиеся.

В соответствии с описанным алгоритмом идентифицируем контуры в графе на рис. 1.5 (см. на с. 9).

ORIGIN:= 0 - задаем нижнюю границу индексации элементов матриц

Структурная матрица ППГ: номера строк соответствуют номерам вершин (нулевая строка - внешняя среда), номера столбцов соответствуют номерам дуг:

S :=

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1
1	0	1	-1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
2	0	0	1	-1	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	-1	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	-1	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	0	-1	0	0
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	-1	-1

Подпрограмма выделения контуров в графе:

```
Contours(S) := (k m n z) ← (-1 1 1 0)
                a ← (0 1)T
                contour_num ← 0
                branch1,1 ←  $\frac{1}{100}$ 
                W ← ST
                while  $\sum a > 0$ 
```

```

k ← k + 2
n ← n + z + m - 1
(z m) ← (0 1)
for i ∈ 1..n
  if ai = 1
    z ← z + m - 1
    arc_num ← match(-1, W⟨branchk,i100⟩)
    m ← length(arc_num)
    branchk+1,i ← arc_num0
    branchk+2,i ←  $\frac{\text{match}(1, S^{\langle\text{branch}_{k+1,i}\rangle})_0}{100}$ 
    ai ← if(branchk+2,i = 0, 0, 1)
    if ai = 1
      v ← match(branchk+2,i, branch⟨i⟩)
      if length(v) > 1
        ai ← 0
        contour_num ← stack(contour_num, i)
    for j ∈ n + z + 1..n + z + m - 1
      branch⟨j⟩ ← branch⟨i⟩
      branchk+1,j ← arc_numj-n-z
      branchk+2,j ←  $\frac{\text{match}(1, S^{\langle\text{branch}_{k+1,j}\rangle})_0}{100}$ 
      aj ← if(branchk+2,j = 0, 0, 1)
      if aj = 1
        v ← match(branchk+2,j, branch⟨j⟩)
        if length(v) > 1
          aj ← 0
          contour_num ← stack(contour_num, j)
    for i ∈ 1..last(contour_num)
      contour_list⟨i-1⟩ ← branch⟨contour_num⟩
contour_listT

```

if m > 1

Список контуров по вершинам и дугам:

Contours (S) =		0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
	0	0	0.01	2	0.02	3	0.03	4	0.04	5	0.02
	1	0	0.01	2	0.02	6	0.05	7	0.06	8	0.01

Полученную матрицу **Contours(S)** следует трактовать таким образом:

- 1) число строк матрицы соответствует числу контуров ППГ;
- 2) в нечетных столбцах записаны номера вершин r в формате $r \times 10^{-2}$ (для удобства идентификации);
- 3) в четных столбцах указаны номера дуг j ;
- 4) каждая строка представляет собой запись пути в графе через последовательность указанных вершин, соединенных между собой указанными дугами, т. е. контур – это *последовательность вершин*, начинающаяся и заканчивающаяся одной и той же вершиной, либо *последовательность дуг*, заключенных между двумя повторяющимися вершинами.

Таким образом, в анализируемом графе присутствуют два элементарных контура:

номер контура	запись по вершинам	запись по дугам
0	2-3-4-2	3-4-5
1	1-2-5-6-7-1	2-6-7-8

При создании подпрограммы выделения контуров в Mathcad использованы программные операторы, доступные из меню «Программирование» Математической палитры. В частности, нами были задействованы операторы циклов **while** и **for**, а также условный оператор **if** (назначение операторов очевидно, так как они полностью соответствуют аналогичным операторам из других распространенных языков программирования). Программные операторы, функции и выражения объединены в программный модуль с помощью оператора **Add Line**. Расширение области подпрограммы фиксируется удлинением вертикальной черты программных блоков или их древовидным расширением, т. е. в принципе можно создавать сколь угодно большие программы. Присваивание внутри программного модуля осуществляется оператором локального действия \leftarrow (**Shift** + []).

1.3. Алгоритм определения оптимального множества разрываемых технологических потоков

После идентификации контуров составляют *матрицу контуров* ППГ (K), число строк которой равно числу контуров, число столбцов равно числу дуг, а элементы равны:

$$k_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } j\text{-я дуга входит в } i\text{-й контур;} \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (1.7)$$

Очевидно, что число единиц в столбце матрицы равно числу контуров, в которые входит соответствующая дуга. Число контуров, в которые входит дуга, называется *контурной степенью* дуги. Если параметричности всех дуг одинаковы, то предпочтительной для разрыва является дуга с наибольшей контурной степенью. Если несколько дуг имеют одинаковую контурную степень, то вопрос о целесообразности разрыва той или иной дуги решается исходя из технологических соображений (например, при наличии информации о приближенных значениях параметров какого-нибудь потока этот поток разрывать предпочтительнее).

При разрыве определенного потока размыкается контур, в который этот поток входил, поэтому соответствующие строка и столбец матрицы контуров исключаются из рассмотрения, а контурные степени оставшихся дуг пересчитываются. Процесс продолжается до тех пор, пока в матрице не останутся лишь дуги с нулевыми контурными степенями.

Пример определения оптимального множества разрываемых дуг представлен ниже.

Исходная матрица контуров графа, изображенного на рис. 1.7:

$$K :=$$

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
0	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	1	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0

Подпрограмма определения оптимального множества разрываемых дуг:

$g(x, y) := 0$

Special(K, w) := $\left| \begin{array}{l} \text{for } i \in 1.. \text{cols}(K) - 1 \\ f_i \leftarrow \sum K^{(i)} \end{array} \right.$

```

F ← ∑ f
L ← KT
list ← 0
while F > 0
  favour ← match(max(f), f)
  a ← favour0
  for i ∈ 0..last(favour)           if length(favour) > 1
    a ← wmatch(favouri, w)0 on error a
  list ← stack(list, a)
  for i ∈ 0..max(f) - 1
    Lmatch(1, K(a))i ← matrix(length(f), 1, g)
  K ← LT
  for i ∈ 1..cols(K) - 1
    fi ← ∑ K(i)
  F ← ∑ f
  for i ∈ 1..last(list)
    special_arcsi-1 ← listi
special_arcsT

```

$w_0 := 2$ - задаем номер дуги, которую при прочих равных условиях следует разорвать в первую очередь, исходя из технологических соображений (если таких дуг несколько, то w задается как вектор; если такие дуги отсутствуют, то $w_0 := 0$)

Special(K, w) = (2 3) - обращаемся к подпрограмме, находим оптимальное множество разрываемых дуг

Как видно из примера, для того чтобы преобразовать замкнутый граф, представленный на рис. 1.5 (см. на с. 9), в эквивалентный разомкнутый, необходимо разорвать вторую и третью дуги. Разомкнутый граф соответствует разомкнутой ХТС, для которой можно определить последовательность расчета.

1.4. Алгоритм определения последовательности расчета разомкнутой ХТС

Определение последовательности расчета элементов ХТС является завершающим этапом анализа структуры сложной контурной ХТС. К этому моменту указанная замкнутая ХТС должна быть преобразована в разомкнутую. На рис. 1.6 показан эквивалентный ациклический ППГ, полученный путем разрыва второй и третьей дуг в графе на рис. 1.5.

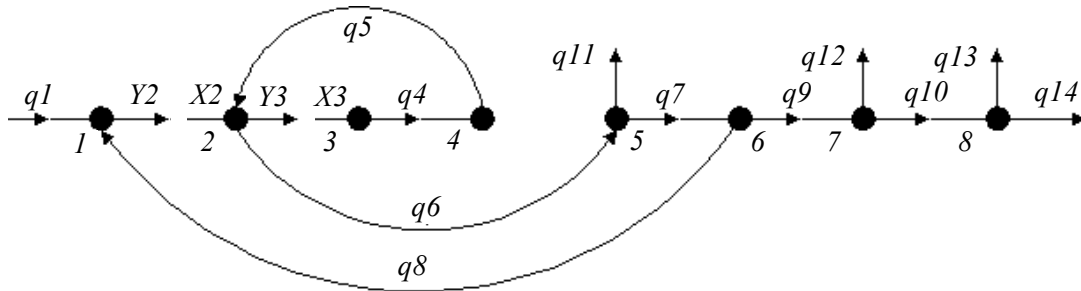


Рис. 1.6. Эквивалентный ациклический ППГ процесса олигомеризации пропан-пропиленовой фракции

Последовательность расчета разомкнутой ХТС определяют так:

- 1) составляют матрицу смежности ациклического ППГ;
- 2) в матрице смежности отыскивают столбец, содержащий только нулевые элементы. Найденный столбец соответствует вершине графа, в которую не входит ни одна дуга из вершин, для которых не известны выходные параметры, – номер этой вершины заносят в упорядоченную последовательность расчета;
- 3) найденный столбец и строку того же номера исключают из матрицы смежности и, если в матрице смежности остались столбцы, возвращаются к пункту 2.

Определим упорядоченную последовательность расчета ХТС олигомеризации пропан-пропиленовой фракции на фосфорно-кислотном катализаторе.

$A := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	<p>- составляем матрицу смежности эквивалентного ациклического ППГ</p> <p>$g_0(x, y) := 0$ - задаем нулевую функцию (используется в подпрограмме)</p> <p>$g_1(x, y) := 1$ - задаем единичную функцию (используется в подпрограмме)</p>
---	--

Подпрограмма определения упорядоченной последовательности расчета ХТС (как функция пользователя):

```

Order(A) :=
  i ← 1
  while i ≤ cols(A)
    n ← cols(A)
    j ← 1
    while j ≤ n
      if  $\sum A^{(j)} = 0$ 
        orderi ← j
        B ← AT
        B(j) ← matrix(cols(A), 1, g0)
        A ← BT
        A(j) ← matrix(cols(A), 1, g1)
        n ← j
      j ← j + 1
    i ← i + 1
  orderT

```

Order(A) = (3 4 2 5 6 1 7 8) - обращаемся к подпрограмме, находим упорядоченную последовательность расчета ХТС

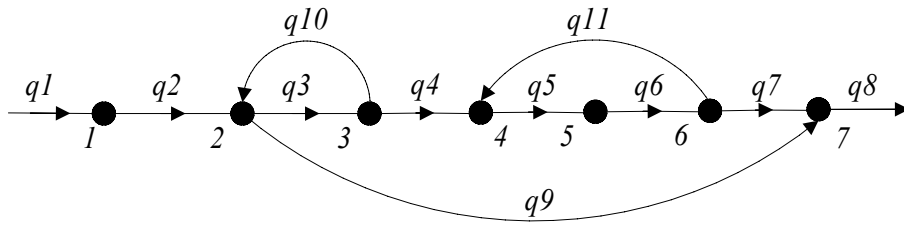
Как видно из примера, ХТС олигомеризации пропан-пропиленовой фракции необходимо рассчитывать в такой последовательности: 3, 4, 2, 5, 6, 1, 7, 8 (порядковые номера элементов на операторной схеме).

Следует, однако, отметить, что прежде, чем приступить к расчету ХТС в соответствии с упорядоченной последовательностью, необходимо определить параметры состояния разорванных технологических потоков. Подробно этот вопрос рассмотрен в разделе 4.

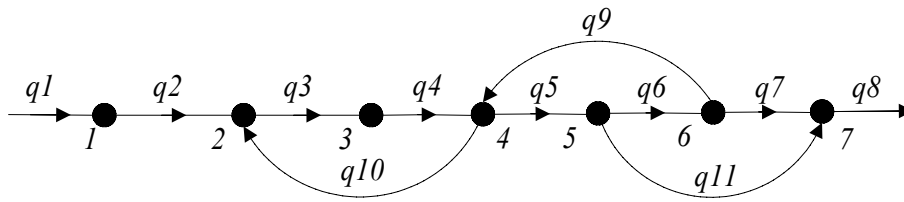
Задания для самостоятельного выполнения

Осуществить анализ структуры и установить последовательность расчета ХТС, представленных следующими параметрическими потоковыми графами (параметричности всех дуг принять одинаковыми, если не указано иное):

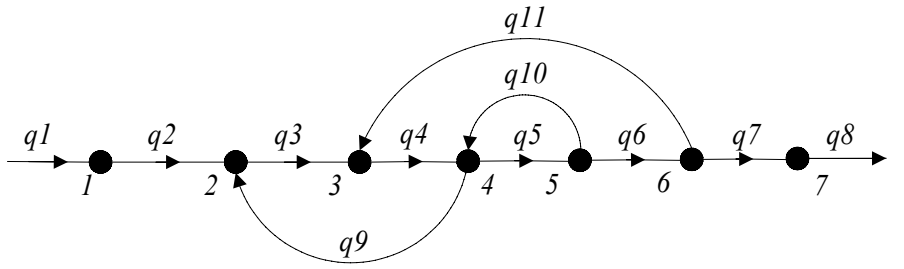
1)



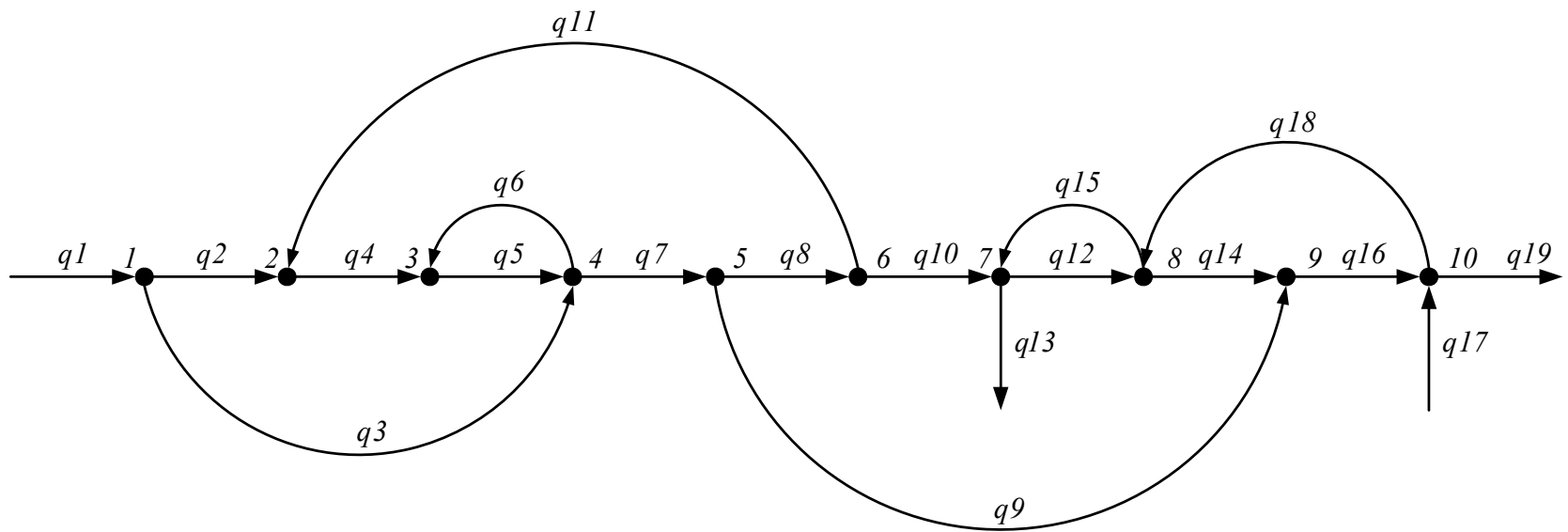
2)



3)



4)



Наименование потока	$q1$	$q2$	$q3$	$q4$	$q5$	$q6$	$q7$	$q8$	$q9$	$q10$	$q11$	$q12$	$q13$	$q14$	$q15$	$q16$	$q17$	$q18$	$q19$
Параметричность потока	4	3	2	6	7	5	4	4	4	4	4	6	2	4	2	6	5	5	6

2. ПОСТРОЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

.....
.....
.....

Для того чтобы рассчитать химико-технологическую систему, необходимо располагать математическими моделями всех составляющих ее элементов.

Метод математического моделирования основан на том, что реальный процесс, протекающий в объекте математического моделирования, представляет собой сочетание различных явлений, подчиненных закономерностям, и может быть описан математическими соотношениями. Изучение этих явлений, их описание на языке математики позволяет при последующем объединении уравнений в единую систему получить математическое описание исследуемого объекта.

Математическое моделирование позволяет прогнозировать поведение объектов в неизвестных ситуациях, изучать многие характеристики проектируемых процессов, оценивать различные варианты аппаратного оформления, а также использовать математические методы оптимизации для отыскания оптимальных режимов эксплуатации ХТС.

Различают детерминированные и статистические модели. Математическое описание *детерминированной модели* представляет собой совокупность уравнений, определяющих взаимосвязь входных и выходных переменных состояния объекта моделирования с учетом его конструктивных и режимных параметров. К их числу относятся уравнения, отражающие общие физические закономерности (например, законы сохранения массы и энергии), уравнения, описывающие отдельные элементарные процессы, которые протекают в объекте моделирования (например, химические превращения, массообмен), и т. п. Кроме того, в состав математического описания могут входить эмпирические и полуэмпирические зависимости между различными переменными в процессе, если строгая теоретическая форма этих зависимостей неизвестна.

При отсутствии информации о характере процессов, протекающих в объекте моделирования, иногда используются *статистические модели*, представляющие собой систему эмпирических зависимостей, полученных в результате статистического обследования

действующего объекта. Математическое описание в этом случае имеет вид корреляционных или регрессионных соотношений между входными и выходными параметрами процесса. Такие описания обычно не отражают индивидуальных особенностей объекта моделирования, поэтому, в отличие от детерминированных моделей, не обладают прогностической силой и используются лишь для интерполяции свойств объекта внутри исследованной области значений входных параметров.

Рассмотрим математические модели некоторых типовых элементов ХТС.

2.1. Детерминированные математические модели химических реакторов

При составлении математического описания химических реакторов их наиболее часто классифицируют по следующим признакам.

В зависимости от *принципа действия* различают реакторы периодического и непрерывного действия. **Реакторы периодического действия** одновременно загружают всеми видами исходных веществ и через определенное время, необходимое для достижения заданной степени завершенности процесса, выгружают реакционную смесь, содержащую продукты реакции. Процесс функционирования таких реакторов представляет собой периодически повторяющиеся циклы. Каждый цикл состоит из трех стадий: загрузка в реактор исходных веществ, проведение химического процесса, выгрузка продуктовой смеси. Реакторы периодического действия используют преимущественно в малотоннажных и многоассортиментных промышленных производствах, а также при переработке дорогостоящих исходных веществ.

Реакторы непрерывного действия – это проточные аппараты с непрерывным питанием исходными веществами или их смесью и непрерывным удалением продуктовой смеси. Химический процесс в реакционной смеси осуществляется лишь во время ее пребывания в реакторе. Обычно отдельные элементы потока реакционной смеси имеют различное время пребывания в реакторе, зависящее от гидродинамической обстановки внутри аппарата. Дисперсия распределения времени пребывания элементов потока внутри аппарата определяется степенью отклонения реальной структуры потока от идеальной. Реакторы непрерывного действия получили широкое распространение почти во всех крупнотоннажных химических производствах.

По *конструкции* реакторы условно разделяют исходя из отношения высоты (длины) реакторов H к их диаметрам D . При этом различают *емкостные* ($H/D \approx 1-2$), *трубчатые* ($H/D > 10$) и *колонные* ($H/D \approx 3-10$) *аппараты*.

В соответствии с *тепловым режимом* выделяют изотермические, адиабатические и политропические реакторы.

Изотермические реакторы имеют одинаковую и постоянную температуру во всех точках реакционного пространства. За исключением процессов, протекающих с незначительным тепловым эффектом, это достигается интенсивным теплообменом через теплообменную поверхность. В результате вся теплота, выделяемая или поглощаемая в ходе процесса, соответственно отводится от реакционной смеси или подводится к ней.

В *адиабатических реакторах* единственными путями подвода или отвода теплоты являются входящие и выходящие потоки реакционной смеси. Другие виды теплообмена вследствие хорошей теплоизоляции аппарата отсутствуют. Температура в таких реакторах растет или падает в зависимости от теплового эффекта осуществляемой реакции.

В *политропических реакторах* существует частичный теплообмен с окружающей средой – тепловой режим этих аппаратов является промежуточным между изотермическим и адиабатическим.

Основой математического описания химических реакторов являются уравнения, выражающие законы сохранения массы и энергии при протекании процесса в данном аппарате. Закон сохранения массы отражают уравнения общего и покомпонентных материальных балансов, закон сохранения энергии записывают в виде уравнений балансов основных форм энергии – тепловой и кинетической.

В тех случаях, когда значения физических величин одинаковы во всем объеме реакционного пространства, уравнения балансов можно записать для аппарата в целом. Если же они различны в разных точках реакционного пространства – уравнения балансов составляют для элементарного объема реактора; последующее интегрирование составленных уравнений позволяет определить поля физических величин в реакторе. Обычно поля масс компонентов рассчитывают по уравнениям материального баланса, температурное поле – по уравнению теплового баланса, поле давлений – по уравнению баланса кинетической энергии. Поскольку обычно изменение давления в реакторе незначительно, поле давлений вычисляют сравнительно редко.

Структура балансовых уравнений определяется структурой потока в аппарате, наиболее полное математическое описание которой

может быть получено на основе уравнений гидродинамики. Однако решение уравнений гидродинамики пока является очень сложной и часто неразрешимой вычислительной задачей, а уравнения гидродинамики двухфазных газожидкостных потоков еще не выведены в общем виде из-за отсутствия возможности задания граничных условий на нестационарной поверхности контакта фаз.

Во многих случаях структуру потока можно представить *моделями идеального смешения, идеального вытеснения, диффузионной, ячеечной* или их комбинациями. Уравнения математического описания этих моделей имеют точные аналитические или приближенные численные решения и позволяют достаточно достоверно отразить характер движения потоков.

При таком общем подходе в состав математического описания химического реактора входят балансовые уравнения, структура которых соответствует принятой модели структуры потока в аппарате. Эти уравнения характеризуют распределение в потоке параметров его состояния, таких как концентрации компонентов, температура, давление, расход.

При формировании математического описания необходимо учитывать, что изменение параметров состояния потока в каждой его точке обусловлено не только движением потока через аппарат (т. е. гидродинамикой), но и протеканием в нем различных процессов, среди которых в химических реакторах наибольшую роль играют химическое превращение, теплообмен и массообмен. Поэтому балансовые уравнения кроме гидродинамических составляющих должны содержать составляющие, имеющие смысл источников или стоков вещества и теплоты.

2.1.1. Математическая модель реактора полного смешения периодического действия

Под *реактором полного смешения периодического действия* будем понимать систему, гидродинамический режим внутри которой близок к модели идеального смешения, замкнутую по потокам вещества, но имеющую теплообмен с окружающей средой. Для такого реактора в общей структуре балансовых уравнений отсутствует гидродинамическая составляющая, и процесс протекает в нестационарном режиме при изменении во времени параметров состояния и свойств реакционной среды (рис. 2.1).

В случае, если теплообмен с окружающей средой осуществляется через стенку (т. е. реактор имеет рубашку и (или) змеевик), а объем реакционной массы не изменяется, математическая модель реактора имеет следующий вид:

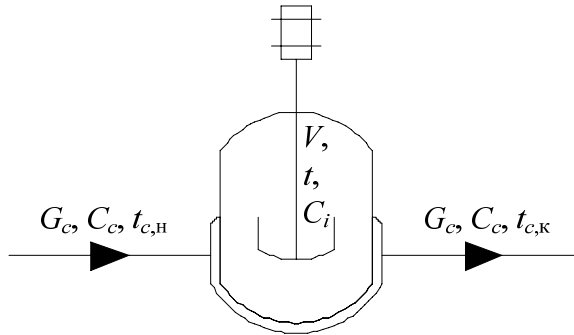


Рис. 2.1. Реактор полного смешения периодического действия

– уравнение покомпонентных материальных балансов

$$\frac{dC_i}{d\tau} = \sum_{j=1}^m (\pm v_{ji} r_j), \quad (2.1)$$

где C_i – молярная концентрация i -го компонента реакционной массы [количество вещества/объем]; τ – время реакции, с, мин, ч; v_{ji} – стехиометрический коэффициент i -го вещества в j -й реакции (знак «+» ставится, если i -е вещество образуется по j -й реакции, знак «-» – в противном случае); r_j – инвариантная скорость j -й реакции, [количество вещества/(объем×время)]; m – число одновременно протекающих в реакторе реакций;

– уравнение теплового баланса при использовании теплоносителя, изменяющего агрегатное состояние (кипящего либо конденсирующегося)

$$\frac{dt}{d\tau} = \frac{V \sum_{j=1}^m (\pm q_j r_j)}{V \sum_{i=1}^n (C_i C M_i) + G C_G} - \frac{K F (t - t_c)}{V \sum_{i=1}^n (C_i C M_i) + G C_G}, \quad (2.2)$$

где t – температура реакционной массы, °С; V – реакционный объем, л, м³; q_j – абсолютное значение теплового эффекта j -й реакции, [энергия/количество вещества] (знак «+» ставится, если j -я реакция экзотермическая, знак «-» – в противном случае); $C M_i$ – молярная теплоемкость i -го компонента реакционной массы, [энергия/(количество вещества×градус)]; G – масса материала, из которого изготовлен реактор, кг, т; C_G – удельная теплоемкость материала реактора, [энергия/(масса×градус)]; K – коэффициент теплопередачи между реакционной массой и теплоносителем, [энергия/(время×площадь×градус)];

F – площадь поверхности теплообмена, м^2 ; t_c – температура кипения (конденсации) теплоносителя, $^{\circ}\text{C}$;

– уравнения теплового баланса при использовании теплоносителя, не изменяющего агрегатное состояние

$$\frac{dt}{d\tau} = \frac{V \sum_{j=1}^m (\pm q_j r_j)}{V \sum_{i=1}^n (C_i C M_i) + G C_G} - \frac{KF \left(t - \frac{t_{c,н} + t_{c,к}}{2} \right)}{V \sum_{i=1}^n (C_i C M_i) + G C_G}, \quad (2.3)$$

$$KF \left(t - \frac{t_{c,н} + t_{c,к}}{2} \right) = G_c C_c (t_{c,к} - t_{c,н}), \quad (2.4)$$

где $t_{c,н}$ и $t_{c,к}$ – начальная и конечная температуры теплоносителя соответственно, $^{\circ}\text{C}$; G_c – массовый расход теплоносителя, [масса/время]; C_c – средняя удельная теплоемкость теплоносителя, [энергия/(масса \times градус)].

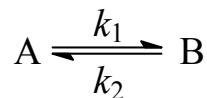
При отсутствии теплообмена с окружающей средой уравнение теплового баланса примет вид

$$\frac{dt}{d\tau} = \frac{V \sum_{j=1}^m (\pm q_j r_j)}{V \sum_{i=1}^n (C_i C M_i) + G C_G}. \quad (2.5)$$

При составлении и решении уравнений (2.1)–(2.5) следует учитывать, что скорости химических реакций и теплоемкости веществ являются функциями температуры.

Если тепловые эффекты реакций невелики, либо химические превращения протекают в среде кипящего растворителя, возможно установление изотермического режима в реакторе. В этом случае для его математического описания достаточно составить лишь уравнения материального баланса (2.1).

Пример. В реакторе периодического действия проходит реакция



Тепловой эффект реакции $\Delta H_{r,293} = -58\,360$ кДж/кмоль вещества А; константа скорости $k_1 = 3,8 \cdot 10^5 \exp\left(\frac{-45\,800}{RT}\right)$, с^{-1} ; константа равнове-

сия $K_{r,293} = 7,395$; начальные концентрации веществ $CA0 = 1$ кмоль/м³, $CB0 = 0$, концентрация инертного вещества (растворителя) $CD0 = 17,5$ кмоль/м³; теплоемкости веществ, [кДж/(кмоль · К)]: $CMA = 74$, $CMB = 68$, $CMD = 61$ (не являются функцией температуры). Начальная температура реакционной смеси $t0 = 20^\circ\text{C}$. Объем реактора $V = 0,8$ м³. Время реакции $\tau = 200$ с. Теплота отводится за счет холодной воды (начальная температура $t_{c,н} = 5^\circ\text{C}$, расход $G_c = 1,2$ кг/с, удельная теплоемкость $C_c = 4,19$ кДж/(кг · К)). Площадь поверхности теплообмена $F = 2,1$ м². Коэффициент теплопередачи $K = 360$ Вт/(м² · К). Масса реактора $G = 500$ кг, удельная теплоемкость материала реактора $C_G = 0,5$ кДж/(кг · К).

Определить концентрацию вещества В в реакционной смеси и температуру реакционной смеси в конце процесса.

Решение. Реактор работает в политропическом режиме, поэтому в соответствии с уравнениями (2.1), (2.3), (2.4) математическая модель реактора будет иметь вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dCA}{d\tau} = -r_1 + r_2, \\ \frac{dCB}{d\tau} = r_1 - r_2, \\ \frac{dt}{d\tau} = \frac{V\Delta H(r_2 - r_1)}{V(CA \cdot CMA + CB \cdot CMB + CD0 \cdot CMD) + GC_G} - \\ \frac{KF \left(t - \frac{t_{c,н} + t_{c,к}}{2} \right)}{V(CA \cdot CMA + CB \cdot CMB + CD0 \cdot CMD) + GC_G}, \\ KF \left(t - \frac{t_{c,н} + t_{c,к}}{2} \right) = G_c C_c (t_{c,к} - t_{c,н}) \end{array} \right.$$

при следующих начальных условиях: $CA(0) = CA0$, $CB(0) = CB0$, $t(0) = t0$; $t_{c,к}(0)$ находится из уравнения

$$KF \left(t0 - \frac{t_{c,н} + t_{c,к}}{2} \right) = G_c C_c (t_{c,к} - t_{c,н}).$$

||| **Исходные данные для расчета:**

$$||| \Delta H_{r,293} := -58360 \cdot 10^3 \quad K_{r,293} := 7.395 \quad R := 8.314$$

$$k1(t) := 3.8 \cdot 10^5 \cdot \exp\left[\frac{-45800}{R \cdot (t + 273)}\right]$$

$$CA0 := 1 \quad CB0 := 0 \quad CD0 := 17.5 \quad t0 := 20 \quad \tau0 := 0 \quad \tau1 := 200$$

$$CMA := 74 \cdot 10^3 \quad CMB := 68 \cdot 10^3 \quad CMD := 61 \cdot 10^3$$

$$V := 0.8 \quad G := 500 \quad CG := 0.5 \cdot 10^3 \quad F := 2.1 \quad K := 360$$

$$Gc := 1.2 \quad Cc := 4.19 \cdot 10^3 \quad tcn := 5$$

Вспомогательные функции:

1) тепловой эффект реакции как функция температуры

$$\Delta H(t) := \Delta Hr_{293} + (CMB - CMA) \cdot (t - t0)$$

2) константа равновесия как функция температуры

$$Kr(t) := Kr_{293} \cdot \exp\left[\frac{-\Delta H(t)}{R \cdot 10^3} \cdot \left(\frac{1}{t + 273} - \frac{1}{t0 + 273}\right)\right]$$

3) скорость прямой реакции как функция температуры и концентраций реагирующих веществ

$$r1(CA, CB, t) := k1(t) \cdot CA$$

4) скорость обратной реакции как функция температуры и концентраций реагирующих веществ

$$r2(CA, CB, t) := \frac{k1(t)}{Kr(t)} \cdot CB$$

Нахождение температуры теплоносителя на выходе из реактора в начальный момент времени:

$$tck0 := 1 \quad \text{Given}$$

$$K \cdot F \cdot \left(t0 - \frac{tcn + tck0}{2}\right) = Gc \cdot Cc \cdot (tck0 - tcn)$$

$$tck0 := \text{Find}(tck0) \quad tck0 = 7.098$$

**Решение системы дифференциальных уравнений
покомпонентных материальных и теплового балансов реактора:**

Given

$$\frac{d}{d\tau} CA(\tau) = -r1(CA(\tau), CB(\tau), t(\tau)) + r2(CA(\tau), CB(\tau), t(\tau))$$

$$\frac{d}{d\tau} CB(\tau) = r1(CA(\tau), CB(\tau), t(\tau)) - r2(CA(\tau), CB(\tau), t(\tau))$$

$$\frac{d}{d\tau} t(\tau) = \frac{V \cdot \Delta H(t(\tau)) \cdot (r2(CA(\tau), CB(\tau), t(\tau)) - r1(CA(\tau), CB(\tau), t(\tau)))}{V \cdot (CA(\tau) \cdot CMA + CB(\tau) \cdot CMB + CD0 \cdot CMD) + G \cdot CG} -$$

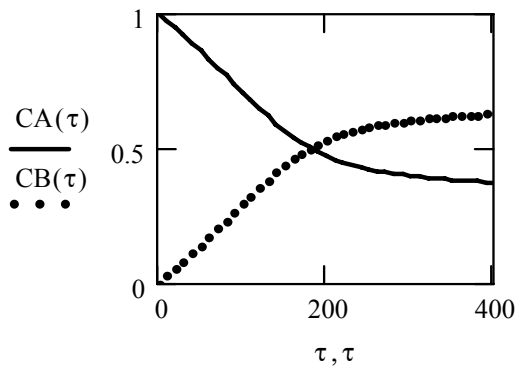
$$K \cdot F \cdot \left(t(\tau) - \frac{tcn + tck(\tau)}{2} \right) \\ - \frac{K \cdot F \cdot \left(t(\tau) - \frac{tcn + tck(\tau)}{2} \right)}{V \cdot (CA(\tau) \cdot CMA + CB(\tau) \cdot CMB + CD0 \cdot CMD) + G \cdot CG}$$

$$K \cdot F \cdot \left(t(\tau) - \frac{tcn + tck(\tau)}{2} \right) = Gc \cdot Cc \cdot (tck(\tau) - tcn)$$

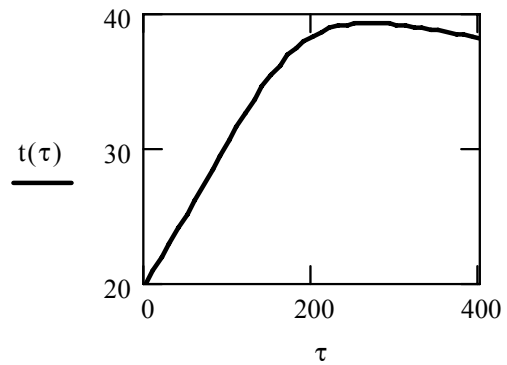
$$CA(\tau_0) = CA0 \quad CB(\tau_0) = CB0 \quad t(\tau_0) = t0 \quad tck(\tau_0) = tck0$$

$$\begin{pmatrix} CA \\ CB \\ t \\ tck \end{pmatrix} := \text{Odesolve} \left[\begin{pmatrix} CA \\ CB \\ t \\ tck \end{pmatrix}, \tau, 400 \right]$$

Зависимости концентраций
реагирующих веществ
от времени реакции



Зависимость температуры
реакционной смеси
от времени реакции



Температура реакционной смеси в конце процесса: $t(\tau_1) = 38.3 \text{ C}$

Концентрация вещества В
в реакционной смеси в конце процесса: $C_B(\tau_1) = 0.5 \frac{\text{кмоль}}{\text{м}^3}$

В рассмотренном примере продемонстрирован метод решения систем дифференциальных уравнений с использованием функции

Odesolve([Vf], x, b, [step]),

которая возвращает функцию (или вектор функций **Vf**) переменной **x**, являющуюся(щийся) решением ОДУ (или системы ОДУ) при заданных начальных условиях. **Vf** требуется лишь в том случае, когда решается система дифференциальных уравнений, для определения очередности вывода искоемых функций. **b** задает конечную точку интервала интегрирования, подразумевая, что начальная точка – нулевая. **step** (задается, если необходимо) – число шагов.

Указанная функция реализует метод Рунге-Кутты с фиксированным шагом, причем результатом решения сразу являются функции, интерполирующие табличные значения.

Следует обратить внимание на то, что в приведенном примере выражение для $dt/d\tau$ записано в двух строках лишь потому, что в силу своей громоздкости оно не вмещается на страницу целиком. Однако в Mathcad его следует вводить целиком в одну строку без каких-либо пропусков.

2.1.2. Математическая модель проточного реактора полного смешения

Проточный реактор полного смешения – это открытая система, имеющая теплообмен с окружающей средой, в которой гидродинамический режим близок к модели идеального смешения. Математическая модель такого реактора основана на допущении о безградиентности – отсутствии градиента параметров состояния и свойств реакционного потока во всем объеме реакционного пространства в любой момент времени. Принятие такого допущения об идеальной однородности потока справедливо в условиях высокой интенсивности перемешивания реакционной среды в емкостных аппаратах с соотношением $H/D \approx 1$ (рис. 2.2).

Для политропического реактора математическая модель представляет собой следующую совокупность уравнений:

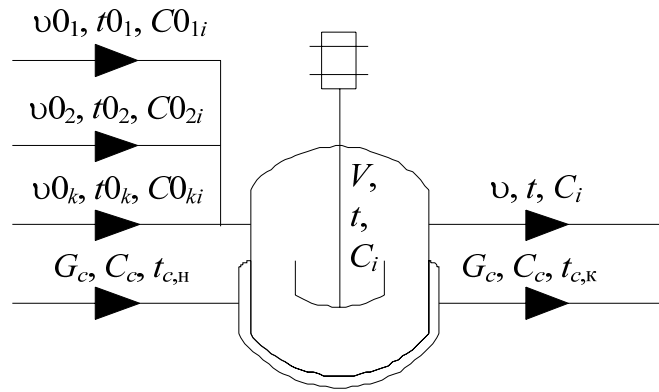


Рис. 2.2. Проточный реактор полного смешения

– уравнение общего материального баланса

$$\sum_{k=1}^p (v_0_k \rho_0_k) = v \rho, \quad (2.6)$$

где v_0_k – объемный расход k -го входного потока, [объем/время];
 ρ_0_k – плотность k -го входного потока, [масса/объем]; p – число входных потоков; v – объемный расход выходного потока, [объем/время];
 ρ – плотность выходного потока, [масса/объем];

– уравнение покомпонентных материальных балансов

$$\sum_{k=1}^p (v_0_k C_0_{ki}) - v C_i = V \sum_{j=1}^m (\pm v_{ji} r_j), \quad (2.7)$$

где C_0_{ki} – концентрация i -го вещества в k -м входном потоке, [количество вещества/объем]; C_i – концентрация i -го вещества в реакторе и на выходе из него, [количество вещества/объем]; при стехиометрическом коэффициенте знак «+» ставится, если i -е вещество расходуется по j -й реакции, знак «-» – в противном случае;

– уравнение теплового баланса при использовании теплоносителя, изменяющего агрегатное состояние

$$\sum_{k=1}^p \left[v_0_k t_0_k \sum_{i=1}^n (C_0_{ki} C M_i) \right] + V \sum_{j=1}^m (\pm q_j r_j) = v t \sum_{i=1}^n (C_i C M_i) + K F (t - t_c), \quad (2.8)$$

где t_0_k – температура k -го входного потока, °С; t – температура реакционной смеси в реакторе и на выходе из него, °С; при тепловом эффекте реакции знак «+» ставится, если j -я реакция экзотермическая, знак «-» – в противном случае;

– уравнение теплового баланса при использовании теплоносителя, не изменяющего агрегатное состояние

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^p \left[\nu_0 t_0 \sum_{i=1}^n (C_{0_{ki}} C M_i) \right] + V \sum_{j=1}^m (\pm q_j r_j) = \\ = \nu t \sum_{i=1}^n (C_i C M_i) + KF \left(t - \frac{t_{c,H} + t_{c,K}}{2} \right). \end{aligned} \quad (2.9)$$

В случае адиабатического реактора уравнение теплового баланса переписывается в виде

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^p \left[\nu_0 t_0 \sum_{i=1}^n (C_{0_{ki}} C M_i) \right] + V \sum_{j=1}^m (\pm q_j r_j) = \\ = \nu t \sum_{i=1}^n (C_i C M_i). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Если исходные реагенты подаются при температуре процесса, а тепловой эффект химических реакций полностью компенсируется теплообменом с теплоносителем (или окружающей средой), либо реакции протекают в среде кипящего растворителя, для математического описания реактора достаточно составить систему уравнений (2.6), (2.7).

Пример. Определить производительность реактора, описанного в примере к пункту 2.1.1, если он будет работать в непрерывном режиме и в нем будет протекать та же система реакций. Смесь поступает в реактор при температуре $t_0 = 20^\circ\text{C}$, время пребывания $\tau = 200$ с.

Решение. Реактор работает в политропических условиях, причем в него поступает лишь один входной поток. При допущении, что плотность реакционной смеси не изменяется значительно в ходе процесса, математическая модель реактора будет иметь вид

$$\begin{cases} \nu(CA_0 - CA) = V(r_1 - r_2), \\ \nu(CB_0 - CB) = V(r_2 - r_1), \\ \nu t_0(CA_0 \cdot CMA + CB_0 \cdot CMB + CD_0 \cdot CMD) + V\Delta H(r_2 - r_1) = \\ = \nu t(CA \cdot CMA + CB \cdot CMB + CD_0 \cdot CMD) + KF \left(t - \frac{t_{c,H} + t_{c,K}}{2} \right), \\ KF \left(t - \frac{t_{c,H} + t_{c,K}}{2} \right) = G_c C_c (t_{c,K} - t_{c,H}). \end{cases}$$

При расчете будем использовать исходные данные и вспомогательные функции, заданные в примере расчета периодического реактора в пункте 2.1.1.

$$\tau := 200 \text{ с} \quad v := \frac{V}{\tau} \quad v = 4 \times 10^{-3} \frac{\text{м}^3}{\text{с}} \quad \text{- определяем объемный расход реакционной смеси}$$

Решение системы алгебраических уравнений покомпонентных материальных и теплового балансов реактора:

$CA := 0.5$ $CB := 0.5$ $t := 20$ $tck := 10$ - задаем начальные приближения искомых переменных

Given

$$v \cdot (CA_0 - CA) = V \cdot (r_1(CA, CB, t) - r_2(CA, CB, t))$$

$$v \cdot (CB_0 - CB) = V \cdot (r_2(CA, CB, t) - r_1(CA, CB, t))$$

$$v \cdot t_0 \cdot (CA_0 \cdot CMA + CB_0 \cdot CMB + CD_0 \cdot CMD) + V \cdot \Delta H(t) \cdot (r_2(CA, CB, t) - r_1(CA, CB, t)) = \blacksquare$$

$$\blacksquare = v \cdot t \cdot (CA \cdot CMA + CB \cdot CMB + CD_0 \cdot CMD) + K \cdot F \cdot \left(t - \frac{t_{cn} + t_{ck}}{2} \right)$$

$$K \cdot F \cdot \left(t - \frac{t_{cn} + t_{ck}}{2} \right) = G_c \cdot C_c \cdot (t_{ck} - t_{cn})$$

$$\begin{pmatrix} CA \\ CB \\ t \\ tck \end{pmatrix} := \text{Find}(CA, CB, t, tck)$$

$$\begin{pmatrix} CA \\ CB \\ t \\ tck \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.544 \\ 0.456 \\ 38.327 \\ 9.661 \end{pmatrix}$$

Производительность реактора по веществу В:

$$v \cdot CB \cdot 10^3 = 1.825 \frac{\text{моль}}{\text{с}}$$

2.1.3. Математическая модель проточного реактора полного вытеснения

Проточный реактор полного вытеснения – это открытая система, имеющая теплообмен с окружающей средой, в которой гидродинамический режим близок к модели идеального вытеснения. Эта модель основана на следующих допущениях:

1) реакционная смесь идеально перемешана в сечении, перпендикулярном движению потока (т. е. состав и температура в сечении одинаковы);

2) перемешивание в направлении движения потока (продольное перемешивание) отсутствует.

Первое допущение справедливо в условиях высоких скоростей потока ($Re > 10^4$); второе – выполняется при условии, что высота (длина) реактора значительно больше его диаметра ($H/D > 20$), либо в случае, когда поток движется через слой зернистого материала.

Принятым допущениям удовлетворяют такие промышленные реакторы, как пустотелый трубчатый (рис. 2.3, *а*), кожухотрубчатый со стационарным слоем гетерогенного катализатора в трубах (рис. 2.3, *б*), колонного типа со стационарным слоем гетерогенного катализатора (рис. 2.3, *в*).

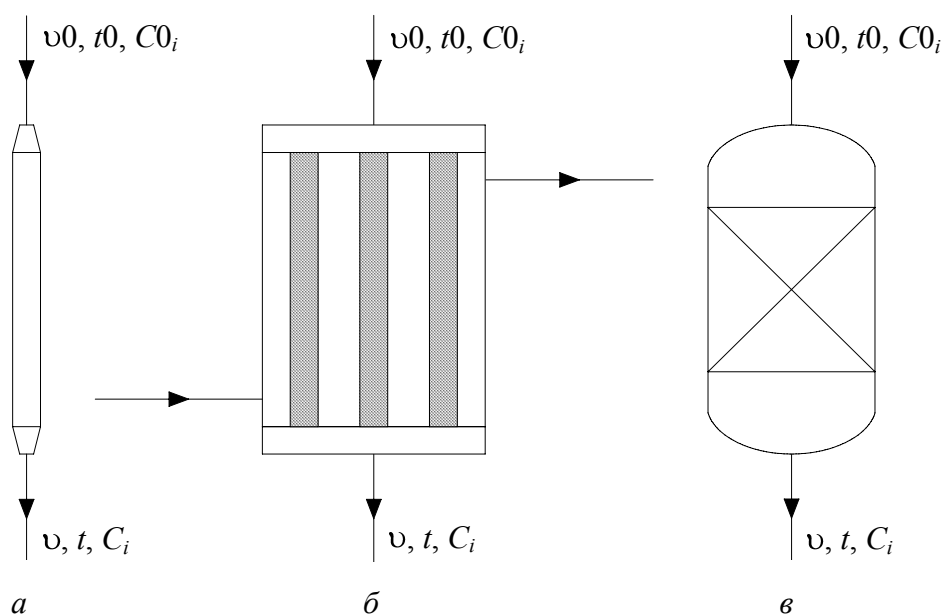


Рис. 2.3. Типы проточных реакторов полного вытеснения:
а – пустотелый трубчатый; *б* – кожухотрубчатый;
в – колонного типа

Поскольку значения параметров состояния и свойств изменяются по длине реактора, его математическое описание составляется для элементарного объема реакционного пространства $dV = Sdx$, где S – площадь поперечного сечения потока.

Рассмотрим проточный реактор полного вытеснения, в котором протекают химические превращения *в жидкой фазе*. В этом случае можно принять, что объемный расход реакционной массы не изменяется по длине реактора ($v_0 = v = \text{const}$), и система уравнений материального и теплового балансов (МТБ) с учетом химической кинетики будет иметь следующий вид:

– уравнение покомпонентных материальных балансов

$$\frac{dC_i}{dV} = \frac{1}{\nu} \sum_{j=1}^m \pm \nu_{ji} r_j, \quad (2.11)$$

где при стехиометрическом коэффициенте знак «+» ставится, если i -е вещество образуется по j -й реакции, знак «-» – в противном случае;

– уравнение теплового баланса для политропического реактора при использовании теплоносителя, изменяющего агрегатное состояние (рис. 2.3, б: $t_{c,н} = t_{c,к} = t_c = \text{const}$), либо при существенных теплопотерях в окружающую среду (рис. 2.3, а, в: t_c – температура окружающей среды)

$$\frac{dt}{dV} = \frac{\sum_{j=1}^m (\pm q_j r_j)}{\nu \sum_{i=1}^n (C_i C M_i)} - \frac{4K(t - t_c)}{\nu d_{\text{вн}} \sum_{i=1}^n (C_i C M_i)}, \quad (2.12)$$

где $d_{\text{вн}}$ – внутренний диаметр реактора (труб реактора), м; при тепловом эффекте реакции знак «+» ставится, если j -я реакция экзотермическая, знак «-» – в противном случае;

– уравнение теплового баланса для политропического реактора при использовании теплоносителя, не изменяющего агрегатное состояние (рис. 2.3, б), должно быть дополнено уравнением, описывающим изменение температуры теплоносителя

$$\frac{dt_c}{dV} = \frac{4K(t - t_c)}{d_{\text{вн}} G_c C_c}, \quad (2.13)$$

– уравнение теплового баланса для адиабатического реактора

$$\frac{dt}{dV} = \frac{\sum_{j=1}^m (\pm q_j r_j)}{\nu \sum_{i=1}^n (C_i C M_i)}. \quad (2.14)$$

В случае, если в реакторе соблюдается изотермический тепловой режим, математическое описание ограничивается уравнениями материального баланса (2.11).

Представленная математическая модель может быть использована и для описания газофазного процесса, если он протекает в изотермическом режиме, без изменения общего числа молей компонентов реакционной смеси, а потеря давления на преодоление гидравлических

сопротивлений при прохождении смеси через реактор пренебрежительно мала по сравнению с общим давлением в системе.

Однако для большинства газофазных процессов, протекающих в проточном реакторе полного вытеснения, приходится учитывать изменение объемного расхода потока по длине аппарата, обусловленное изменением температуры, давления и (или) числа газовых молей реакционной смеси при движении через аппарат. Взаимосвязь между указанными параметрами состояния газового потока при относительно невысоких давлениях (до 1 МПа) с удовлетворительной точностью описывается уравнением Менделеева – Клапейрона.

С учетом вышесказанного математическую модель реактора вытеснения для газофазных процессов в общем виде можно представить так:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_i}{dV} = \frac{1}{v} \sum_{j=1}^m \pm v_{ji} r_j - \frac{C_i}{v} \frac{dv}{dV}, \\ \frac{dv}{dV} = \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)_{C_\Sigma, P} \frac{dt}{dV} + \left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_{C_\Sigma, t} \frac{dP}{dV} + \left(\frac{\partial v}{\partial C_\Sigma} \right)_{t, P} \frac{dC_\Sigma}{dV}, \\ \frac{dP}{dV} = \frac{-\lambda v^2}{2d_{\text{BH}} S^3} \sum_{i=1}^n (C_i M_i), \\ \frac{dt}{dV} = \frac{\sum_{j=1}^m (\pm q_j r_j)}{v \sum_{i=1}^n (C_i C M_i)} - \frac{\pi d_{\text{BH}} n_{\text{TP}} K (t - t_c)}{v \sum_{i=1}^n (C_i C M_i)}, \end{array} \right. \quad (2.15)$$

где $\left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)_{C_\Sigma, P} = \frac{v R C_\Sigma}{P};$ (2.16)

$$\left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_{C_\Sigma, t} = -\frac{v R C_\Sigma (t + 273)}{P^2};$$
 (2.17)

$$\left(\frac{\partial v}{\partial C_\Sigma} \right)_{t, P} = \frac{v R (t + 273)}{P};$$
 (2.18)

P – общее давление, Па; $C_\Sigma = \sum_{i=1}^n C_i$, моль/м³; λ – коэффициент трения;

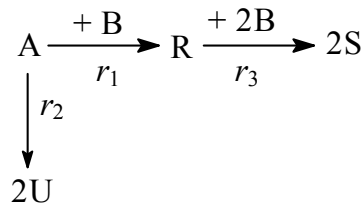
M_i – молярная масса i -го компонента реакционной смеси, кг/моль;
 $R = 8,31$ Дж/(моль · К) – универсальная газовая постоянная.

В справочной литературе скорости газофазных химических реакций часто выражены через *парциальные давления* реагирующих веществ, однако кинетические уравнения в такой форме не всегда пригодны для составления математических моделей реакторов. Поэтому целесообразно осуществлять переход от парциальных давлений (p_i) реагирующих веществ к их концентрациям (C_i) по формуле

$$p_i = C_i R (t + 273). \quad (2.19)$$

Расчет реакторов полного вытеснения поясним на следующих примерах.

Пример А. В проточном реакторе полного вытеснения адиабатического типа протекает система жидкофазных реакций



скорости которых описываются формальной кинетикой. Кинетические и термодинамические параметры реакций представлены в табл. 2.1.

Начальные концентрации веществ $CA0 = 1$ кмоль/м³, $CB0 = 0,5$ кмоль/м³, $CU0 = CR0 = CS0 = 0$, концентрация инертного вещества (растворителя) $CD0 = 15$ кмоль/м³; теплоемкости веществ, [кДж/(кмоль · К)]: $CMA = 74$, $CMB = 68$, $CMU = 70$, $CMR = 78$, $CMS = 85$, $CMD = 61$ (не являются функцией температуры). Начальная температура реакционной смеси $t0 = 40^\circ\text{C}$. Объемный расход реакционной смеси $v = 0,5$ м³/с.

Таблица 2.1

Кинетические и термодинамические параметры реакций

Номер реакции	k_0 , кмоль ⁽¹⁻ⁿ⁾ · с ⁻¹	E , кДж/кмоль	ΔH_{293} , кДж/кмоль
1	10^8	49 860	-45 000
2	10^7	53 240	52 500
3	10^9	64 790	-64 000

Определить объем реактора, при котором достигается максимальная концентрация вещества R в реакционной смеси.

Решение. В соответствии с уравнениями (2.11) и (2.14) математическая модель реактора будет иметь вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dCA}{dV} = \frac{1}{v}(-r_1 - r_2), \\ \frac{dCB}{dV} = \frac{1}{v}(-r_1 - 2r_3), \\ \frac{dCU}{dV} = \frac{2r_2}{v}, \\ \frac{dCR}{dV} = \frac{1}{v}(r_1 - r_3), \\ \frac{dCS}{dV} = \frac{2r_3}{v}, \\ \frac{dt}{dV} = \\ = \frac{-\Delta H_1 r_1 - \Delta H_2 r_2 - \Delta H_3 r_3}{v(CA \cdot CMA + CB \cdot CMB + CU \cdot CMU + CR \cdot CMR + CS \cdot CMS + CD0 \cdot CMD)} \end{array} \right.$$

при следующих начальных условиях:

$$\left\{ \begin{array}{l} CA(0) = CA0, \\ CB(0) = CB0, \\ CU(0) = CU0, \\ CR(0) = CR0, \\ CS(0) = CS0, \\ t(0) = t0. \end{array} \right.$$

Исходные данные для расчета:

$$\Delta H1_{293} := -45000 \quad \Delta H2_{293} := 52500 \quad \Delta H3_{293} := -64000$$

$$k01 := 10^8 \quad k02 := 10^7 \quad k03 := 10^9 \quad R := 8.314$$

$$E1 := 49860 \quad E2 := 53240 \quad E3 := 64790$$

$$CA0 := 1 \quad CB0 := 1.5 \quad CD0 := 15 \quad CU0 := 0 \quad CR0 := 0 \quad CS0 := 0 \quad t0 := 40$$

$$CMA := 74 \quad CMB := 68 \quad CMD := 61 \quad CMU := 70 \quad CMR := 78 \quad CMS := 85$$

$$v := 0.5$$

Вспомогательные функции:

1) тепловые эффекты реакций как функции температуры

$$\Delta H1(t) := \Delta H1_{293} + (CMR - CMA - CMB) \cdot (t - 20)$$

$$\Delta H2(t) := \Delta H2_{293} + (2 \cdot CMU - CMA) \cdot (t - 20)$$

$$\Delta H3(t) := \Delta H3_{293} + (2 \cdot CMS - CMR - 2 \cdot CMB) \cdot (t - 20)$$

2) скорости реакций как функции температуры и концентраций реагирующих веществ

$$r1(CA, CB, t) := k01 \cdot \exp\left[\frac{-E1}{R \cdot (t + 273)}\right] \cdot CA \cdot CB$$

$$r2(CA, t) := k02 \cdot \exp\left[\frac{-E2}{R \cdot (t + 273)}\right] \cdot CA$$

$$r3(CR, CB, t) := k03 \cdot \exp\left[\frac{-E3}{R \cdot (t + 273)}\right] \cdot CR \cdot CB^2$$

**Решение системы дифференциальных уравнений
покомпонентных материальных и теплового балансов реактора:**

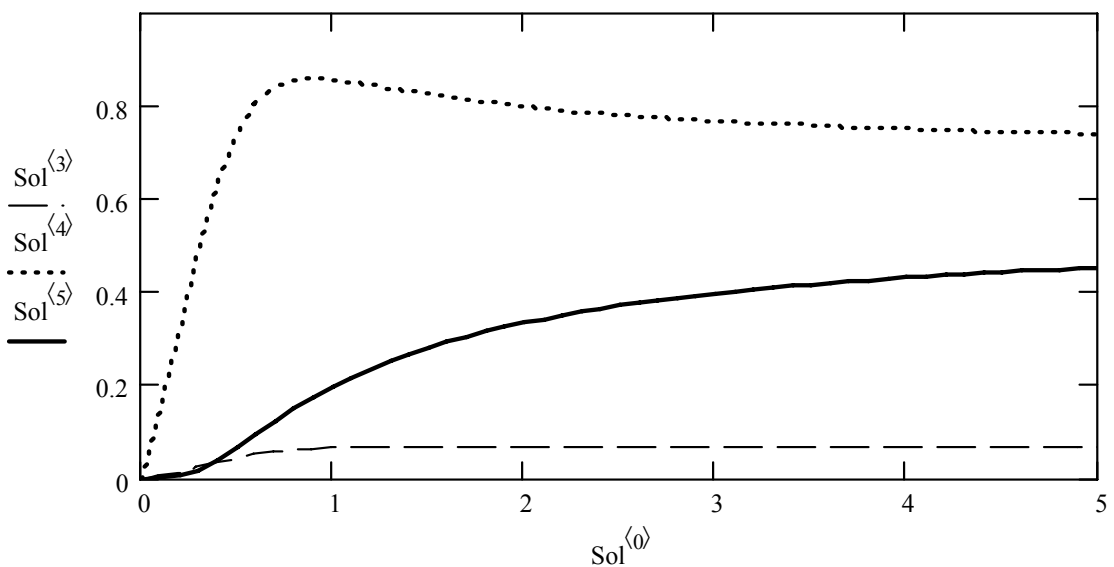
$$\text{Init} := \begin{pmatrix} CA0 \\ CB0 \\ CU0 \\ CR0 \\ CS0 \\ t0 \end{pmatrix} \quad \text{- задаем вектор начальных условий}$$

$$D(V, Y) := \begin{bmatrix} \frac{1}{v} \cdot (-r1(Y_0, Y_1, Y_5) - r2(Y_0, Y_5)) \\ \frac{1}{v} \cdot (-r1(Y_0, Y_1, Y_5) - 2 \cdot r3(Y_3, Y_1, Y_5)) \\ \frac{2 \cdot r2(Y_0, Y_5)}{v} \\ \frac{1}{v} \cdot (r1(Y_0, Y_1, Y_5) - r3(Y_3, Y_1, Y_5)) \\ \frac{2 \cdot r3(Y_3, Y_1, Y_5)}{v} \\ \frac{-\Delta H1(Y_5) \cdot r1(Y_0, Y_1, Y_5) + \Delta H2(Y_5) \cdot r2(Y_0, Y_5) - \Delta H3(Y_5) \cdot r3(Y_3, Y_1, Y_5)}{v \cdot (Y_0 \cdot CMA + Y_1 \cdot CMB + Y_2 \cdot CMU + Y_3 \cdot CMR + Y_4 \cdot CMS + CD0 \cdot CMD)} \end{bmatrix}$$

Заданный выше символьный вектор D(V,Y) содержит правые части дифференциальных уравнений, входящих в математическую модель реактора, причем $Y_0=CA$, $Y_1=CB$, $Y_2=CU$, $Y_3=CR$, $Y_4=CS$, $Y_5=t$

`Sol := rkfixed(Init, 0, 100, 1000, D)` - решаем систему ДУ при $V=[0,100]$

Результаты решения: функции концентраций продуктов от объема реактора: $Sol^{(3)}=CU$, $Sol^{(4)}=CR$, $Sol^{(5)}=CS$, $Sol^{(0)}=V$



Аппроксимация кубическим сплайном зависимости концентрации вещества R (CR) от объема реактора (V):

$$CR(V) := \text{interp}(\text{cspline}(\text{Sol}^{(0)}, \text{Sol}^{(4)}), \text{Sol}^{(0)}, \text{Sol}^{(4)}, V)$$

Нахождение объема реактора, на выходе из которого наблюдается максимальная концентрация вещества R:

$V := 1$ - задаем начальное приближение искомого объема

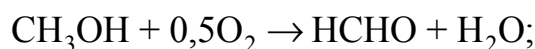
$$V_{\text{optim}} := \text{root}\left(\frac{d}{dV}CR(V), V\right) \quad V_{\text{optim}} = 0.891 \text{ м}^3 - \text{искомый объем реактора}$$

Как видно из примера, для нахождения требуемого объема реактора пришлось исследовать на экстремум функциональную зависимость концентрации вещества R от объема реактора. Для этого таблично заданную функцию, полученную в результате решения дифференциального уравнения, аппроксимировали кубическим сплайном, затем производную интерполяционной функции приравняли к нулю и решили полученное уравнение.

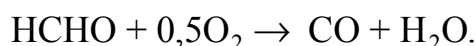
Пример Б. Окислительная конверсия метанола в формальдегид протекает в газовой фазе в реакторе трубчатого типа на железомолибденовом катализаторе. Число труб $n_{\text{тр}} = 2000$ шт., внутренний диаметр труб $d_{\text{вн}} = 20$ мм. Окислителем служит кислород воздуха. Реакционное тепло снимается за счет подачи в межтрубное пространство реактора водяного конденсата с выработкой технологического пара.

На поверхности катализатора протекают две следующие основные реакции:

1) окисление метанола в формальдегид



2) окисление формальдегида до оксида углерода



Кинетика реакций описывается с помощью следующих уравнений:

$$r_1 = \frac{k_1 C_{\text{CH}_3\text{OH}}}{1 + b_1 C_{\text{CH}_3\text{OH}} + b_2 C_{\text{H}_2\text{O}}},$$

$$r_2 = \frac{k_2 C_{\text{НСНО}}}{1 + b_3 C_{\text{СН}_3\text{ОН}} + b_4 C_{\text{H}_2\text{O}}},$$

где константы скорости $k_1 = 5,827 \cdot 10^6 \exp\left(\frac{-77\ 500}{RT}\right)$,

$$k_2 = 3,896 \cdot 10^5 \exp\left(\frac{-15\ 100}{RT}\right),$$

адсорбционные коэффициенты $b_1 = 2,04 \exp\left(\frac{325}{T}\right)$,

$$b_2 = 3,65 \cdot 10^{-4} \exp\left(\frac{4400}{T}\right),$$

$$b_3 = 1,13 \cdot 10^{-5} \exp\left(\frac{6400}{T}\right),$$

$$b_4 = 3,94 \cdot 10^4 \exp\left(\frac{4150}{T}\right).$$

Размерность величин скоростей реакций, получаемых по приведенным кинетическим уравнениям, – ммоль/(м² · с). Площадь поверхности катализатора $S_k = 3,9 \text{ м}^2/\text{г}$. Насыпная плотность катализатора $\rho_k = 1150 \text{ кг/м}^3$.

Объемная скорость подачи спиртовоздушной смеси $v_0 = 0,93 \text{ м}^3/\text{с}$; линейная скорость $w_0 = 0,4 \text{ м/с}$.

Концентрация метилового спирта на входе в реактор $x = 8 \text{ об. \%}$, водяных паров – $x_{\text{H}_2\text{O}} = 0,5 \text{ об. \%}$.

Начальная температура реакционной смеси $t_0 = 180^\circ\text{C}$.

Давление на входе в реактор $P_0 = 0,5 \text{ МПа}$; коэффициент трения $\lambda = 1$.

Коэффициент теплопередачи $K = 300 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$.

Температура кипящего водяного конденсата $t_c = 160^\circ\text{C}$.

Изучить зависимости объемного расхода, температуры реакционной смеси и концентраций реагентов от объема реактора. Определить объем реакционного пространства, обеспечивающий максимальный выход формальдегида.

Р е ш е н и е . Математическая модель реактора составляется в соответствии с (2.15):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_{\text{CH}_3\text{OH}}}{dV} = \frac{1}{v} \left(-\rho_k S_k r_1 - C_{\text{CH}_3\text{OH}} \frac{dv}{dV} \right), \\ \frac{dC_{\text{O}_2}}{dV} = \frac{1}{v} \left(-0,5\rho_k S_k r_1 - 0,5\rho_k S_k r_2 - C_{\text{O}_2} \frac{dv}{dV} \right), \\ \frac{dC_{\text{HCHO}}}{dV} = \frac{1}{v} \left(\rho_k S_k r_1 - \rho_k S_k r_2 - C_{\text{HCHO}} \frac{dv}{dV} \right), \\ \frac{dC_{\text{CO}}}{dV} = \frac{1}{v} \left(\rho_k S_k r_2 - C_{\text{CO}} \frac{dv}{dV} \right), \\ \frac{dC_{\text{H}_2\text{O}}}{dV} = \frac{1}{v} \left(\rho_k S_k r_1 + \rho_k S_k r_2 - C_{\text{H}_2\text{O}} \frac{dv}{dV} \right), \\ \frac{dC_{\text{N}_2}}{dV} = -\frac{C_{\text{N}_2}}{v} \frac{dv}{dV}, \\ \frac{dv}{dV} = \frac{vRC_\Sigma}{P} \frac{dt}{dV} - \frac{vRC_\Sigma(t+273)}{P^2} \frac{dP}{dV} + \frac{vR(t+273)}{P} \frac{dC_\Sigma}{dV}, \\ \frac{dP}{dV} = \frac{-\lambda v^2}{2d_{\text{BH}} S^3} \sum_{i=1}^n (C_i M_i), \\ \frac{dt}{dV} = \frac{-\Delta H_1 \rho_k S_k r_1 - \Delta H_2 \rho_k S_k r_2}{v \sum_{i=1}^n (C_i C M_i)} - \frac{\pi d_{\text{BH}} n_{\text{TP}} K (t - t_c)}{v \sum_{i=1}^n (C_i C M_i)} \end{array} \right.$$

и дополняется начальными условиями.

Исходные данные для расчета:

$$v_0 := 0.93 \quad w_0 := 0.4 \quad t_0 := 180 \quad P_0 := 0.5 \cdot 10^6 \quad x := 0.08 \quad x_{\text{H}_2\text{O}} := 0.005 \quad \underline{R} := 8.314$$

$$S_k := 3.9 \cdot 10^3 \quad \rho_k := 1150 \quad d_{\text{vH}} := 20 \cdot 10^{-3} \quad n_{\text{TP}} := 2000 \quad \lambda := 1 \quad \underline{K} := 300 \quad t_c := 160$$

$$C_{01} := \frac{10^3 \cdot x \cdot P_0}{R \cdot (t_0 + 273)} \quad C_{01} = 1.062 \times 10^4 \quad \frac{\text{ммоль}}{\text{м}^3} \quad \text{- начальная концентрация 1-го компонента (метанола)}$$

$$C_{02} := \frac{10^3 \cdot (1 - x - x_{\text{H}_2\text{O}}) \cdot 0.21 \cdot P_0}{R \cdot (t_0 + 273)}$$

$$C_{02} = 2.551 \times 10^4 \quad \frac{\text{ммоль}}{\text{м}^3} \quad \text{- начальная концентрация 2-го компонента (кислорода)}$$

$$C03 := 0 \frac{\text{ММОЛЬ}}{\text{М}^3} \quad \text{- начальная концентрация 3-го компонента (формальдегида)}$$

$$C04 := 0 \frac{\text{ММОЛЬ}}{\text{М}^3} \quad \text{- начальная концентрация 4-го компонента (оксида углерода)}$$

$$C05 := \frac{10^3 \cdot x_{\text{H}_2\text{O}} \cdot P_0}{R \cdot (t_0 + 273)} \quad C05 = 663.792 \frac{\text{ММОЛЬ}}{\text{М}^3} \quad \text{- начальная концентрация 5-го компонента (воды)}$$

$$C06 := \frac{10^3 \cdot (1 - x - x_{\text{H}_2\text{O}}) \cdot 0.79 \cdot P_0}{R \cdot (t_0 + 273)}$$

$$C06 = 9.596 \times 10^4 \frac{\text{ММОЛЬ}}{\text{М}^3} \quad \text{- начальная концентрация 6-го компонента (азота)}$$

Кинетические данные:

$$k1(t) := 5.827 \cdot 10^6 \cdot \exp\left[\frac{-77500}{R \cdot (t + 273)}\right] \quad k2(t) := 3.896 \cdot 10^5 \cdot \exp\left[\frac{-15100}{R \cdot (t + 273)}\right]$$

$$b1(t) := 2.04 \cdot \exp\left(\frac{325}{t + 273}\right) \quad b2(t) := 3.65 \cdot 10^{-4} \cdot \exp\left(\frac{4400}{t + 273}\right)$$

$$b3(t) := 1.13 \cdot 10^{-5} \cdot \exp\left(\frac{6400}{t + 273}\right) \quad b4(t) := 3.94 \cdot 10^4 \cdot \exp\left(\frac{4150}{t + 273}\right)$$

$$r1(C1, C5, t) := \frac{k1(t) \cdot C1}{1 + b1(t) \cdot C1 + b2(t) \cdot C5} \quad r2(C1, C3, C5, t) := \frac{k2(t) \cdot C3}{1 + b3(t) \cdot C1 + b4(t) \cdot C5}$$

Справочные данные:

1) молярные массы компонентов, кг/ммоль

$$M1 := 32 \cdot 10^{-6} \quad M2 := 32 \cdot 10^{-6} \quad M3 := 30 \cdot 10^{-6} \quad M4 := 28 \cdot 10^{-6} \quad M5 := 18 \cdot 10^{-6} \quad M6 := 28 \cdot 10^{-6}$$

2) молярные теплоемкости компонентов, Дж/(ммоль*К)

$$CM1(t) := 10^{-3} \cdot \left[-10.5 + 182 \cdot \frac{t + 273}{1000} + (-111.6) \cdot \left(\frac{t + 273}{1000}\right)^2 + 28.8 \cdot \left(\frac{t + 273}{1000}\right)^3 + 0.83 \cdot \left(\frac{t + 273}{1000}\right)^{-2} \right]$$

$$CM2(t) := 10^{-3} \cdot \left[20.5 + 26.7 \cdot \frac{t + 273}{1000} + (-15.6) \cdot \left(\frac{t + 273}{1000}\right)^2 + 3.1 \cdot \left(\frac{t + 273}{1000}\right)^3 + 0.2 \cdot \left(\frac{t + 273}{1000}\right)^{-2} \right]$$

$$CM3(t) := 10^{-3} \cdot \left[5.8 + 89.8 \cdot \frac{t + 273}{1000} + (-40.1) \cdot \left(\frac{t + 273}{1000}\right)^2 + 5.7 \cdot \left(\frac{t + 273}{1000}\right)^3 + 0.55 \cdot \left(\frac{t + 273}{1000}\right)^{-2} \right]$$

$$CM4(t) := 10^{-3} \cdot \left[28.1 + (-3.3) \cdot \frac{t + 273}{1000} + 16.1 \cdot \left(\frac{t + 273}{1000} \right)^2 + (-7.8) \cdot \left(\frac{t + 273}{1000} \right)^3 + 0.07 \cdot \left(\frac{t + 273}{1000} \right)^{-2} \right]$$

$$CM5(t) := 10^{-3} \cdot \left[30.2 + 6.7 \cdot \frac{t + 273}{1000} + 6.5 \cdot \left(\frac{t + 273}{1000} \right)^2 + (-2.3) \cdot \left(\frac{t + 273}{1000} \right)^3 + 0.08 \cdot \left(\frac{t + 273}{1000} \right)^{-2} \right]$$

$$CM6(t) := 10^{-3} \cdot \left[31.0 + (-12.4) \cdot \frac{t + 273}{1000} + 24.7 \cdot \left(\frac{t + 273}{1000} \right)^2 + (-10.5) \cdot \left(\frac{t + 273}{1000} \right)^3 \right]$$

3) тепловые эффекты реакций, Дж/ммоль

$$\Delta H1(t) := -148.4 + (CM3(t) + CM5(t) - CM1(t) - 0.5 \cdot CM2(t)) \cdot (t - 25)$$

$$\Delta H2(t) := -243.7 + (CM4(t) + CM5(t) - CM3(t) - 0.5 \cdot CM2(t)) \cdot (t - 25)$$

Вспомогательные функции:

$$dC1(C1, C5, t, v) := \frac{-\rho_k \cdot S_k \cdot r1(C1, C5, t)}{v}$$

$$dC2(C1, C3, C5, t, v) := \frac{-0.5 \cdot \rho_k \cdot S_k \cdot r1(C1, C5, t) - 0.5 \cdot \rho_k \cdot S_k \cdot r2(C1, C3, C5, t)}{v}$$

$$dC3(C1, C3, C5, t, v) := \frac{\rho_k \cdot S_k \cdot r1(C1, C5, t) - \rho_k \cdot S_k \cdot r2(C1, C3, C5, t)}{v}$$

$$dC4(C1, C3, C5, t, v) := \frac{\rho_k \cdot S_k \cdot r2(C1, C3, C5, t)}{v}$$

$$dC5(C1, C3, C5, t, v) := \frac{\rho_k \cdot S_k \cdot r1(C1, C5, t) + \rho_k \cdot S_k \cdot r2(C1, C3, C5, t)}{v}$$

$$\frac{dt(C1, C2, C3, C4, C5, C6, t, v)}{v} := \frac{\rho_k \cdot S_k \cdot (-\Delta H1(t) \cdot r1(C1, C5, t) - \Delta H2(t) \cdot r2(C1, C3, C5, t)) - ntr \cdot \pi \cdot dvn \cdot K \cdot (t - tc)}{v \cdot (C1 \cdot CM1(t) + C2 \cdot CM2(t) + C3 \cdot CM3(t) + C4 \cdot CM4(t) + C5 \cdot CM5(t) + C6 \cdot CM6(t))}$$

$$dP(C1, C2, C3, C4, C5, C6, v) := \frac{-\lambda \cdot v^2 \cdot w0^3}{2 \cdot dvn \cdot v0^3} \cdot (C1 \cdot M1 + C2 \cdot M2 + C3 \cdot M3 + C4 \cdot M4 + C5 \cdot M5 + C6 \cdot M6)$$

$$dv(C1, C2, C3, C4, C5, C6, t, v, P) := \frac{v \cdot R \cdot 10^{-3} \cdot (C1 + C2 + C3 + C4 + C5 + C6)}{P} \cdot dt(C1, C2, C3, C4, C5, C6, t, v) - \blacksquare$$

$$\blacksquare - \frac{v \cdot R \cdot 10^{-3} \cdot (C1 + C2 + C3 + C4 + C5 + C6) \cdot (t + 273)}{P^2} \cdot dP(C1, C2, C3, C4, C5, C6, v) + \blacksquare$$

$$\blacksquare + \frac{v \cdot R \cdot 10^{-3} \cdot (t + 273)}{P} \cdot (dC1(C1, C5, t, v) + dC2(C1, C3, C5, t, v) + dC3(C1, C3, C5, t, v)) + \blacksquare$$

$$\blacksquare + \frac{v \cdot R \cdot 10^{-3} \cdot (t + 273)}{P} \cdot (dC4(C1, C3, C5, t, v) + dC5(C1, C3, C5, t, v))$$

**Решение системы дифференциальных уравнений
математической модели реактора:**

Given

$$\frac{d}{dV}C1(V) = dC1(C1(V), C5(V), t(V), v(V)) - \frac{C1(V)}{v(V)} \cdot dv(C1(V), C2(V), C3(V), C4(V), C5(V), C6(V), t(V), v(V), P(V))$$

$$\frac{d}{dV}C2(V) = dC2(C1(V), C3(V), C5(V), t(V), v(V)) - \frac{C2(V)}{v(V)} \cdot dv(C1(V), C2(V), C3(V), C4(V), C5(V), C6(V), t(V), v(V), P(V))$$

$$\frac{d}{dV}C3(V) = dC3(C1(V), C3(V), C5(V), t(V), v(V)) - \frac{C3(V)}{v(V)} \cdot dv(C1(V), C2(V), C3(V), C4(V), C5(V), C6(V), t(V), v(V), P(V))$$

$$\frac{d}{dV}C4(V) = dC4(C1(V), C3(V), C5(V), t(V), v(V)) - \frac{C4(V)}{v(V)} \cdot dv(C1(V), C2(V), C3(V), C4(V), C5(V), C6(V), t(V), v(V), P(V))$$

$$\frac{d}{dV}C5(V) = dC5(C1(V), C3(V), C5(V), t(V), v(V)) - \frac{C5(V)}{v(V)} \cdot dv(C1(V), C2(V), C3(V), C4(V), C5(V), C6(V), t(V), v(V), P(V))$$

$$\frac{d}{dV}C6(V) = \frac{-C6(V)}{v(V)} \cdot dv(C1(V), C2(V), C3(V), C4(V), C5(V), C6(V), t(V), v(V), P(V))$$

$$\frac{d}{dV}t(V) = dt(C1(V), C2(V), C3(V), C4(V), C5(V), C6(V), t(V), v(V))$$

$$\frac{d}{dV}P(V) = dP(C1(V), C2(V), C3(V), C4(V), C5(V), C6(V), v(V))$$

$$\frac{d}{dV}v(V) = dv(C1(V), C2(V), C3(V), C4(V), C5(V), C6(V), t(V), v(V), P(V))$$

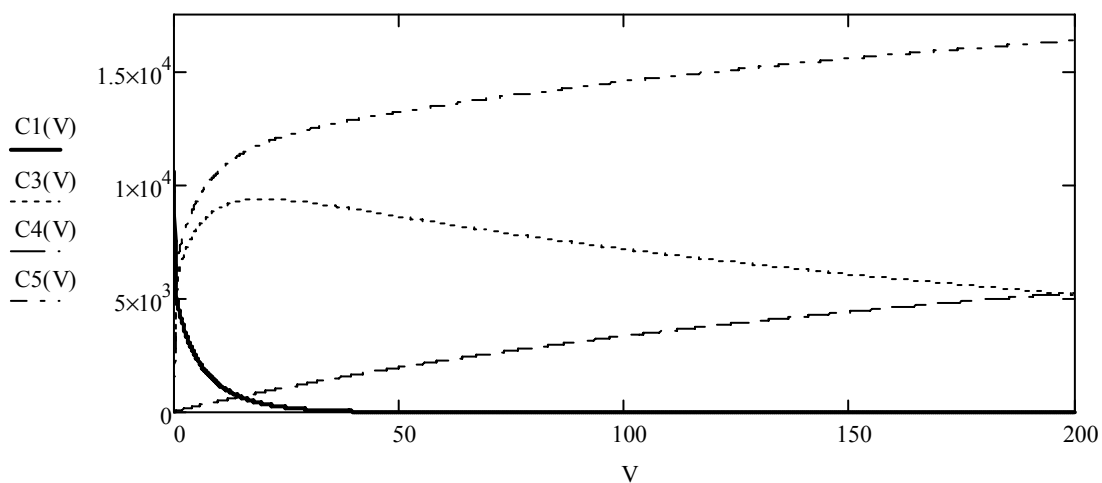
$$C1(0) = C01 \quad C2(0) = C02 \quad C3(0) = C03 \quad C4(0) = C04$$

$$C5(0) = C05 \quad C6(0) = C06 \quad t(0) = t0 \quad P(0) = P0 \quad v(0) = v0$$

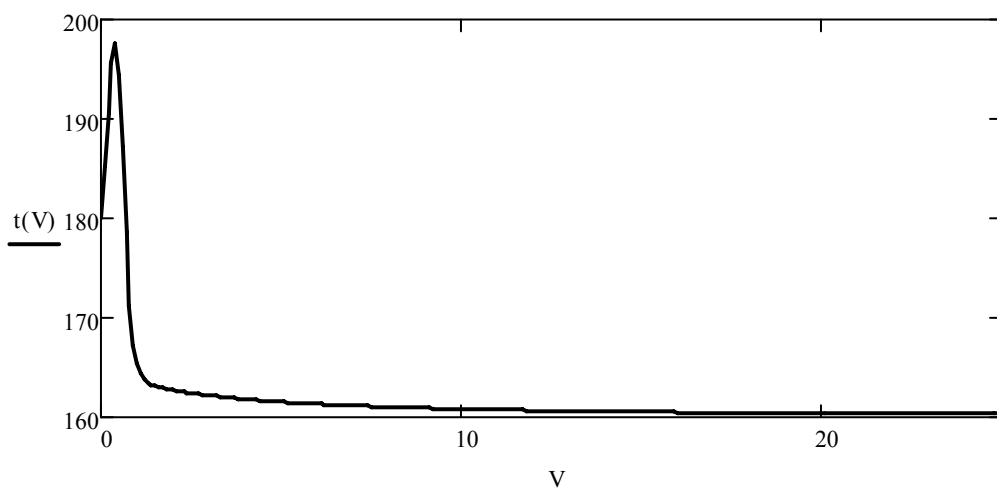
- начальные условия
задаются непосредственно
в блоке решения

$$\begin{pmatrix} C1 \\ C2 \\ C3 \\ C4 \\ C5 \\ C6 \\ t \\ P \\ v \end{pmatrix} := \text{Odesolve} \left[\begin{pmatrix} C1 \\ C2 \\ C3 \\ C4 \\ C5 \\ C6 \\ t \\ P \\ v \end{pmatrix}, V, 200, 1000 \right]$$

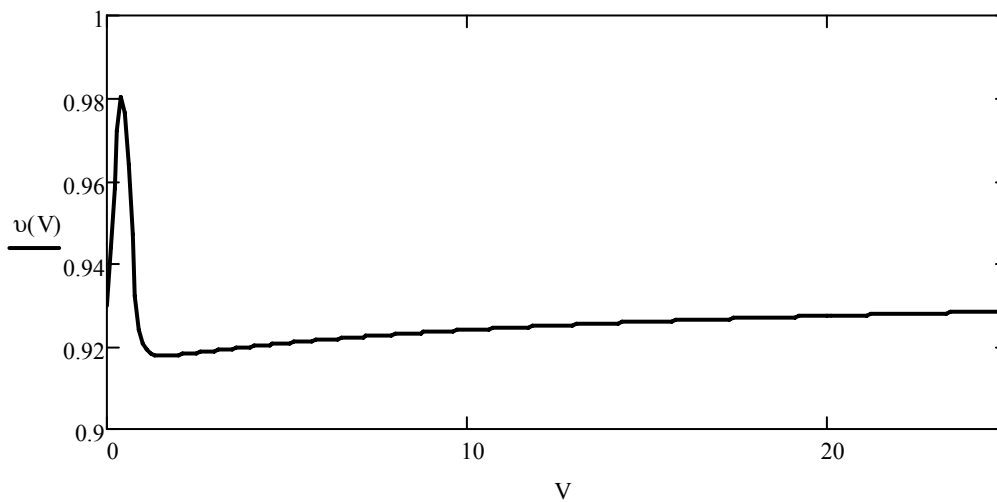
Зависимости концентраций реагентов и продуктов от объема реактора



Профиль температуры реакционной смеси по объему реактора



Профиль объемного расхода реакционной смеси по объему реактора



Нахождение объема реактора, обеспечивающего максимальный выход формальдегида:

$V := 1$ - задаем начальное приближение искомого объема

$$V_{\text{optim}} := \text{root} \left[\frac{d}{dV} (C_3(V) \cdot v(V)), V \right] \quad V_{\text{optim}} = 20.5 \text{ м}^3 \quad - \text{искомый объем реактора}$$

Как видно из примера, при изменяющемся объемном расходе реакционной смеси критерием максимального выхода продукта является не максимум его концентрации в выходном потоке, а максимум произведения концентрации вещества на объемный расход потока, т. е. при поиске оптимального объема реактора оценивается абсолютное значение количества получаемого продукта.

2.2. Математическая модель смесителя потоков

При составлении математического описания смесителя потоков (рис. 2.4) воспользуемся следующими допущениями:

- 1) структура потока в аппарате соответствует режиму идеального смешения;
- 2) режим смешения в аппарате – установившийся;
- 3) внутри аппарата отсутствуют источники и стоки вещества и теплоты;
- 4) число смешиваемых потоков $n = 2$; при необходимости смешения большего числа потоков в схему можно включить несколько последовательно соединенных смесителей;
- 5) теплоемкости компонентов i -го потока рассчитываются при температуре этого потока.

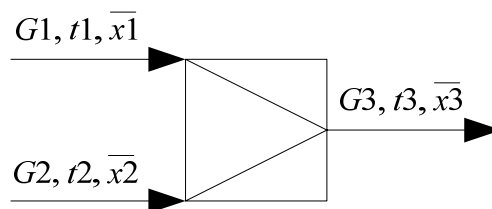


Рис. 2.4. Смеситель потоков:

G_1, G_2, G_3 – массовые расходы потоков, кг/ч; t_1, t_2, t_3 – температуры потоков, °С;
 $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3$ – векторы массовых долей компонентов потоков

Математическое описание смесителя потоков включает следующие уравнения:

– уравнение общего материального баланса

$$G_3 = G_1 + G_2; \quad (2.20)$$

– уравнения покомпонентных материальных балансов, из которых могут быть выражены концентрации компонентов в выходном потоке

$$x_{3i} = \frac{G_1 x_{1i} + G_2 x_{2i}}{G_3}; \quad (2.21)$$

– уравнение теплового баланса

$$G_3 H_3(t) = G_1 H_1(t) + G_2 H_2(t), \quad (2.22)$$

где $H_1(t)$, $H_2(t)$, $H_3(t)$ – энтальпии потоков (кДж/кг), представленные как функции температуры.

Энтальпия потока рассчитывается по правилу аддитивности:

$$H(t) = \sum_{i=1}^n H_i(t) x_i, \quad (2.23)$$

где $H_i(t)$, x_i – энтальпия и массовая доля i -го компонента потока соответственно.

Энтальпия вещества вычисляется по уравнению

$$H_i(t) = Cp_i^{\text{ж}} t_{\text{кип}} + r_{\text{исп}} + \int_{t_{\text{кип}}}^t Cp_i^{\text{г}}(t) dt, \quad (2.24)$$

где $Cp_i^{\text{ж}}$ – средняя удельная теплоемкость жидкости, кДж/(кг · К); $t_{\text{кип}}$ – температура кипения, °С; $r_{\text{исп}}$ – теплота испарения, кДж/кг; $Cp_i^{\text{г}}(t)$ – температурная зависимость удельной теплоемкости газа, кДж/(кг · К).

Температурная зависимость удельной теплоемкости вещества в газообразном состоянии часто аппроксимируется полиномиальным уравнением

$$Cp_i^{\text{г}}(t) = a_i + b_i t + d_i t^2 + f_i t^3, \quad (2.25)$$

где a_i , b_i , d_i , f_i – эмпирические коэффициенты, приведенные в справочной литературе.

Путем решения системы уравнений (2.23)–(2.25) находится температура потока на выходе из смесителя.

Математическая модель смесителя потоков в Mathcad может быть представлена следующим образом.

```

Mixer(q1, q2, n) :=
  q3_{n+1} ← q1_{n+1} + q2_{n+1}
  for i ∈ 1..n
    q3_i ← (q1_{n+1} · q1_i + q2_{n+1} · q2_i) / q3_{n+1}
  t3 ← 1
  q3_{n+2} ← 1
  q3_{n+2} ← root[q3_{n+1} · H(t3, q3) - (q1_{n+1} · H(q1_{n+2}, q1) + q2_{n+1} · H(q2_{n+2}, q2)), t3]
  q3

```

Здесь n – число компонентов, входящих в состав потока; q_1, q_2, q_3 – векторы параметров состояния входных и выходного потоков соответственно.

Первые n элементов вектора параметров состояния – это массовые доли компонентов, $(n+1)$ -й элемент – массовый расход, $(n+2)$ -й элемент – температура потока. $H(t, q)$ – энтальпия потока как функция его температуры и состава.

2.3. Математическая модель рекуперативного теплообменника

При построении математического описания теплообменника (рис. 2.5) допустим, что:

- 1) рассматривается кожухотрубчатый теплообменник в стационарном режиме;
- 2) теплопередача не сопровождается изменением агрегатного состояния теплоносителей;
- 3) потери теплоты не учитываются;
- 4) схема движения теплоносителей противоточная;
- 5) коэффициенты теплоотдачи в трубном и межтрубном пространствах, а также теплоемкости потоков рассчитываются при начальных температурах теплоносителей;
- б) теплоноситель, отдающий теплоту (горячий поток), направляется в трубы, а теплоноситель, воспринимающий теплоту (холодный поток), – в межтрубное пространство.

Поскольку теплообменник не изменяет расходов и состава материальных потоков, то $G_{Г,К} = G_{Г,Н}$, $G_{Х,К} = G_{Х,Н}$, $x_{Г,К} = x_{Г,Н}$, $x_{Х,К} = x_{Х,Н}$.

Математическая модель теплообменника должна включать уравнения для вычисления выходных температур теплоносителей. Они могут быть выведены из уравнений теплового баланса

$$G_{\Gamma,Н} C_{p,\Gamma} (t_{\Gamma,Н} - t_{\Gamma,К}) = G_{x,Н} C_{p,x} (t_{x,К} - t_{x,Н}) \quad (2.26)$$

и теплопередачи

$$G_{\Gamma,Н} C_{p,\Gamma} (t_{\Gamma,Н} - t_{\Gamma,К}) = KF \frac{(t_{\Gamma,Н} - t_{x,К}) - (t_{\Gamma,К} - t_{x,Н})}{\ln \left(\frac{t_{\Gamma,Н} - t_{x,К}}{t_{\Gamma,К} - t_{x,Н}} \right)}. \quad (2.27)$$

Здесь $C_{p,\Gamma}$, $C_{p,x}$ – удельные теплоемкости горячего и холодного теплоносителя соответственно; K – коэффициент теплопередачи; F – поверхность теплообмена.

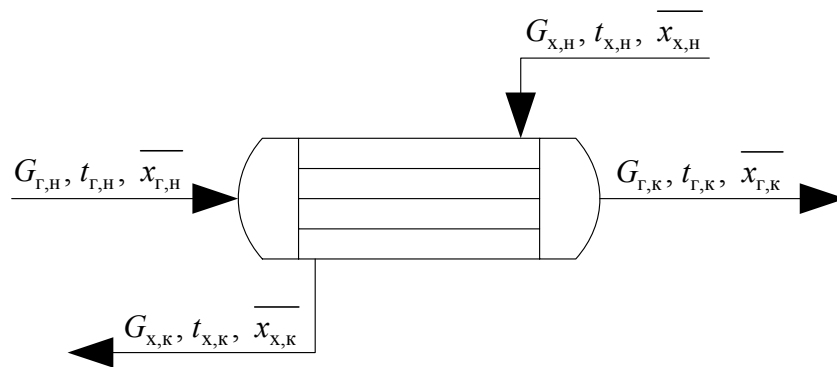


Рис. 2.5. Кожухотрубчатый теплообменник:
 G , t , \bar{x} – массовый расход, температура и вектор массовых долей
 компонентов потока теплоносителя соответственно;
 «Г» – горячий теплоноситель; «Х» – холодный теплоноситель;
 «Н» – начальное состояние теплоносителя;
 «К» – конечное состояние теплоносителя

Окончательно получим:

$$t_{\Gamma,К} = t_{\Gamma,Н} - \frac{t_{x,К} - t_{x,Н}}{N}, \quad N = \frac{G_{\Gamma,Н} C_{p,\Gamma}}{G_{x,Н} C_{p,x}}; \quad (2.28)$$

$$t_{x,К} = t_{x,Н} + (t_{\Gamma,Н} - t_{x,Н}) N \frac{\exp(M(1-N)) - 1}{\exp(M(1-N)) - N}, \quad (2.29)$$

$$M = \frac{KF}{G_{\Gamma,Н} C_{p,\Gamma}}.$$

2.4. Математическая модель тарельчатой ректификационной колонны

Процесс ректификации является одним из наиболее распространенных процессов разделения смесей в химической технологии. По определению, *процессом ректификации* называется термический способ разделения смесей путем многократного испарения и конденсации смеси, сопровождающихся тепло- и массообменом. Таким образом, процесс ректификации включает взаимосвязанные явления тепло- и массопередачи.

Математическое описание ректификационной колонны в общем случае включает следующие зависимости: уравнения материального баланса колонны и каждой тарелки по каждому из компонентов разделяемой смеси; уравнения теплового баланса колонны и каждой из тарелок; соотношения для расчета фазового равновесия; соотношения, описывающие кинетику массообмена на тарелках колонны; уравнения, описывающие куб и конденсатор. Указанная система уравнений нелинейна, поэтому для ее решения необходимо использовать итерационные методы.

Для упрощения математического описания ректификационной колонны принимаются следующие допущения:

– мольные потоки пара и жидкости постоянны по высоте колонны в силу того, что мольные теплоты испарения компонентов смеси близки между собой;

– питание поступает в колонну в жидкой фазе при температуре кипения;

– разделяемая смесь подчиняется законам идеальных растворов, и равновесие рассчитывается по относительным летучестям отдельных компонентов. Относительной летучестью (α) двух компонентов смеси называется отношение давления насыщенного пара более низкокипящего (легколетучего) компонента (P_1) к давлению насыщенного пара более высококипящего компонента (P_2) при той же температуре:

$$\alpha = \frac{P_1}{P_2}. \quad (2.30)$$

Величину относительной летучести можно найти по формуле (2.30) с удовлетворительной точностью до давлений порядка 0,6 МПа;

– относительные летучести компонентов не изменяются по высоте колонны;

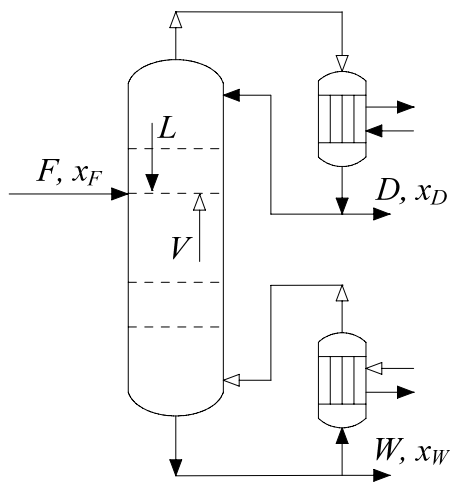


Рис. 2.6. Схема потоков в ректификационной колонне

– тарелки имеют постоянную эффективность;

– для создания парового потока применяется кипятильник полного испарения;

– для создания флегмы используется полный конденсатор.

В наиболее простом случае разделения бинарной смеси математическое описание колонны состоит из уравнения общего материального баланса колонны, уравнений материального баланса для произвольного сечения колонны по легколетучему компоненту и уравнения, описывающего парожидкостное равновесие.

Следует отметить, что многие случаи многокомпонентной ректификации можно свести к бинарной путем отнесения всех компонентов смеси к двум условным компонентам с усредненными свойствами.

Для тарельчатой колонны бинарной ректификации (рис. 2.6) составим программу расчета следующих выходных параметров: x_D – мольная доля легколетучего компонента в дистилляте; W – количество кубового продукта, моль/ч; x_W – мольная доля легколетучего компонента в кубе; если известно: F – количество питания, моль/ч; x_F – мольная доля легколетучего компонента в питании; D – количество дистиллята, моль/ч; R – флегмовое число; α – коэффициент относительной летучести; E – эффективность работы тарелки по Мерффри; N – число тарелок. Тарелки пронумерованы снизу вверх.

Для решения системы уравнений математического описания можно воспользоваться следующим алгоритмом:

1) по уравнениям общего материального баланса рассчитываются количество кубового продукта

$$W = F - D \quad (2.31)$$

и количество пара в колонне

$$V = D(R + 1); \quad (2.32)$$

2) задается начальное значение концентрации легколетучего компонента в кубе колонны, равное, например, его концентрации в питании;

3) находится равновесное значение концентрации легколетучего компонента в паровой фазе по уравнению

$$y_i^* = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} \quad (i = 1, 2, \dots, N); \quad (2.33)$$

4) определяется состав пара, покидающего i -ю тарелку, по следующей формуле:

$$y_i = (1 - E)y_{i-1} + Ey_i^* \quad (i = 1, 2, \dots, N); \quad (2.34)$$

5) по уравнениям материального баланса для произвольного сечения колонны вычисляется концентрация легколетучего компонента на вышерасположенной тарелке

$$x_{i+1} = \begin{cases} \frac{Vy_i + Wx_W}{L + F} & (x_i \leq x_F), \\ \frac{Vy_i + Wx_W - Fx_F}{L} & (x_i > x_F). \end{cases} \quad (2.35)$$

Пункты 3–5 повторяются для тарелок с номерами от 1 до N ;

6) для $i = N$ находится функция невязок

$$f(x_W) = \frac{|Dy_D + Wx_W - Fx_F|}{Fx_F} 100\%; \quad (2.36)$$

7) если $f(x_W) \leq \text{err}$ (err – погрешность вычислений), то расчет заканчивается, в противном случае концентрация легколетучего компонента в кубе колонны уточняется с использованием метода простой итерации по уравнению

$$x_W = \frac{Fx_F - Dy_D}{W}, \quad (2.37)$$

и расчет повторяется с пункта 3 при новом значении x_W .

Реализация указанного алгоритма в виде подпрограммы в Mathcad представлена ниже.

Пример. Рассчитать параметры выходных потоков ректификационной колонны со следующими исходными данными: количество тарелок $N = 15$; количество питания $F = 11$ моль/ч; концентрация легколетучего компонента в питании $x_F = 0,7$; количество дистиллята $D = 7$ моль/ч; флегмовое число $R = 1,4$; эффективность тарелок $E = 0,35$; коэффициент относительной летучести $\alpha = 6$; точность расчета $\text{err} = 0,1\%$.

Подпрограмма расчета бинарной ректификации:

$$\text{column}(N, E, \alpha, R, D, F, x_F, \text{err}) := \left\{ \begin{array}{l} W \leftarrow F - D \\ V \leftarrow D \cdot (R + 1) \\ L \leftarrow V - D \\ (x_1 \ y_N) \leftarrow (x_F \ 0.9) \\ \text{while } \frac{|D \cdot y_N + W \cdot x_1 - F \cdot x_F|}{F \cdot x_F} \cdot 100 > \text{err} \\ \left\{ \begin{array}{l} x_1 \leftarrow \frac{F \cdot x_F - D \cdot y_N}{W} \\ y_0 \leftarrow x_1 \\ \text{for } i \in 1..N \\ \left\{ \begin{array}{l} y_i \leftarrow (1 - E) \cdot y_{i-1} + E \cdot \frac{\alpha \cdot x_i}{1 + (\alpha - 1) \cdot x_i} \\ x_{i+1} \leftarrow \text{if} \left(x_i \leq x_F, \frac{V \cdot y_i + W \cdot x_1}{L + F}, \frac{V \cdot y_i + W \cdot x_1 - F \cdot x_F}{L} \right) \end{array} \right. \end{array} \right. \\ (D \ y_N \ W \ x_1)^T \end{array} \right.$$

Исходные данные для расчета:

$$N := 15 \quad F := 11 \quad x_F := 0.7 \quad D := 7 \quad R := 1.4$$

$$E := 0.35 \quad \alpha := 6 \quad \text{err} := 0.1$$

Расчет выходных переменных ректификационной колонны:

$$\begin{pmatrix} x_D \\ W \\ x_W \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \text{column}(N, E, \alpha, R, D, F, x_F, \text{err})_1 \\ \text{column}(N, E, \alpha, R, D, F, x_F, \text{err})_2 \\ \text{column}(N, E, \alpha, R, D, F, x_F, \text{err})_3 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} x_D \\ W \\ x_W \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.986 \\ 4 \\ 0.2 \end{pmatrix}$$

Представленная модель позволяет рассчитать составы выходных потоков колонны бинарной ректификации.

Температуры выходных потоков подбираются таким образом, чтобы удовлетворялись следующие равенства:

– для жидкого потока, выходящего с низа колонны

$$x_1 P_1 + (1 - x_1) P_2 = \Pi; \quad (2.38)$$

– для парового потока, выходящего с верха колонны

$$\frac{y_N}{P_1} + \frac{1 - y_N}{P_2} = \frac{1}{P}, \quad (2.39)$$

где x_1 – мольная доля легколетучего компонента в жидкости, стекающей с нижней тарелки ректификационной колонны; y_N – мольная доля легколетучего компонента в паровом потоке, покидающем верхнюю тарелку ректификационной колонны; P – общее давление в системе.

В явном виде температуры в уравнениях (2.38) и (2.39) не фигурируют, однако давления насыщенных паров компонентов P_1 и P_2 являются ее функциями и при заданной температуре принимают вполне определенные значения.

📌 Задания для самостоятельного выполнения

1. Для проведения жидкофазной реакции $2A \leftrightarrow R + S$ можно использовать либо единичный реактор смешения, либо каскад реакторов с объемом каждого реактора, равным 5% от объема единичного реактора. Объемная скорость потока составляет $3,6 \text{ м}^3/\text{ч}$, а начальная концентрация вещества A – $40 \text{ моль}/\text{м}^3$. Константа скорости прямой реакции $k = 0,9 \text{ м}^3 \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{ч}^{-1}$, а константа равновесия $K_c = 16$.

Каков должен быть объем единичного реактора или сколько необходимо взять реакторов в каскаде для достижения степени превращения, равной 85% от ее равновесного значения?

2. В трубчатом реакторе, работающем в изотермическом режиме идеального вытеснения, без изменения реакционного объема проводится реакция $A \leftrightarrow B$. Требуется определить время пребывания, необходимое для того, чтобы получить степень превращения, составляющую 70% от равновесной степени превращения. Начальные концентрации реагентов: $CA0 > 0$, $CB0 = 0$. Константы скоростей реакций определяются уравнениями: для прямой реакции $k_1 = 1,5 \cdot 10^{-3} \exp(-15\,200 / RT)$, для обратной реакции $k_2 = 2,2 \cdot 10^{-3} \exp(-23\,600 / RT) \text{ мин}^{-1}$.

3. Дана реакция $A + B \rightarrow C + D$. Требуется получить степень превращения $x_A = 0,845$ при следующих условиях: тепловой эффект реакции $\Delta H_{r,298}^0 = -42\,350 \text{ кДж}/(\text{кмоль вещества } A)$, константа скорости $k = 6,52 \cdot 10^5 \exp(-42\,300 / RT) \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{с})$; концентрации исходных

веществ $CA0 = 1,4$ кмоль/м³, $CB0 = CA0$, концентрация инертного вещества $CR0 = 15,2$ кмоль/м³, концентрация продуктов реакции при $\tau = 0$ $CC0 = CB0 = 0$. Теплоемкости веществ, кДж/(кмоль · К): $CpA = 88$, $CpB = 84$, $CpC = 72$, $CpD = 76$, $CpR = 83$. Считать, что теплоемкости не зависят от температуры. Температура исходной смеси $t0 = 20^\circ\text{C}$. Объемный расход реакционной смеси $v = 1,75 \cdot 10^{-3}$ м³/с.

Определить требуемый объем реактора вытеснения, работающего в адиабатических условиях.

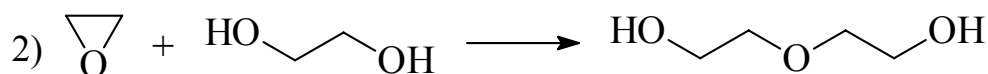
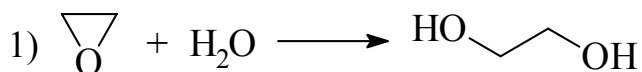
4. Разработать физико-химические математические модели элементов ХТС производства гликолей. Исходные данные для моделирования представлены ниже.

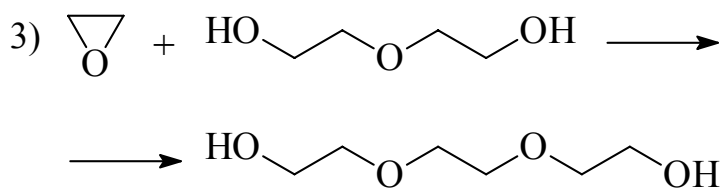
Химизм процесса. Гликоли относятся к многотоннажным продуктам основного органического синтеза. Наиболее важным представителем гликолей является этиленгликоль. Он находит применение в качестве антифриза, растворителя, исходного вещества для синтеза полиэфирных смол и волокон. Ди- и триэтиленгликоль также используются в промышленности как осушители газов, селективные экстрагенты ароматических углеводородов из катализаторов риформинга, смазочные средства, гидравлические жидкости, а также в производстве полиэфирных смол и пластификаторов.

Основной промышленный метод получения указанных гликолей – гидратация оксида этилена. Этиленгликоль можно получать некаталитической гидратацией оксида этилена при мольном отношении вода : оксид этилена – (16–20) : 1, температуре 190–200°C, давлении ~2 МПа. Гидролизат, представляющий собой разбавленный водный раствор гликолей, концентрируют отгонкой воды и подвергают ректификации. Селективность превращения оксида этилена составляет: в этиленгликоль – 82–86%; в диэтиленгликоль – 12–14%; в триэтиленгликоль – 2–3%.

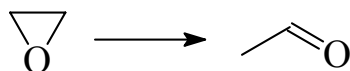
Введение кислотного катализатора (0,5–1,0 мас. % H₂SO₄) позволяет снизить температуру гидратации до 50–100°C. Полученный разбавленный раствор этиленгликоля нейтрализуют, отгоняют воду и затем вакуумной дистилляцией удаляют остатки воды и разделяют гликоли.

Реакционная схема процесса гидратации оксида этилена включает следующие основные реакции:





Кроме того, возможно протекание побочной реакции с образованием ацетальдегида:



Скорости приведенных химических реакций подчиняются закону действующих масс. Константы скоростей, а также тепловые эффекты реакций представлены в табл. 2.2.

Таблица 2.2

Кинетические и термодинамические параметры химических реакций процесса получения гликолей

Реакция	k_0 , кмоль ^{$\Sigma n-1$} /[(м ³) ^{$\Sigma n-1$} · с]	E , кДж/кмоль		ΔH_{298}^0 , кДж/кмоль
		некаталитическая	каталитическая	
1	$2,45 \cdot 10^5$	87 713	70 170	-95 920
2	$4,90 \cdot 10^5$	87 713	70 170	-128 900
3	$4,90 \cdot 10^5$	87 713	70 170	-101 200
4	$3,0 \cdot 10^5$	100 000	80 000	-111 700

Температурная зависимость теплоемкости веществ, принимающих участие в реакциях, описывается уравнением регрессии

$$C_p = a + bt + ct^2 + dt^3 + et^4 + ft^5, \quad (2.40)$$

где C_p – удельная теплоемкость вещества, кДж/(кг · °С); t – температура, °С. В табл. 2.3 приведены значения эмпирических коэффициентов a, b, c, d, e, f при давлении 2 МПа.

В табл. 2.4 (см. на с. 64) указаны значения плотностей веществ при разных температурах.

Технология процесса. На рис. 2.7 (см. на с. 65) представлена технологическая схема процесса. Оксид этилена (поток $q1$), свежая вода (поток $q2$), содержащая в случае необходимости каталитическое количество серной кислоты, и рециркулирующая вода (поток $q3$) смешиваются в заданном соотношении. Полученный водный раствор оксида этилена (ОЭ) подается в теплообменник 1 и далее в реактор 2, где

протекает гидратация. Гидролизат представляет собой 15–20%-ный раствор гликолей в воде. Часть воды испаряется при дросселировании давления до атмосферного. Пары воды и низкокипящих примесей (ацетальдегида, непрореагировавшего ОЭ) отделяются от жидкости в сепараторе 3. Водно-гликолевая смесь из сепаратора после добавления раствора гидроксида натрия до $\text{pH} = 8$ поступает на выпаривание воды в многокорпусную вакуум-выпарную установку 4, работающую при ступенчатом понижении давления. Образующийся вторичный пар после рекуперации тепла и конденсации рециркулирует в реактор. Этиленгликоль-сырец, содержащий 80% гликолей и 20% воды, поступает на вакуумную ректификацию.

Верхний погон колонны 5 (30 практических тарелок, остаточное давление 1,3 кПа), представляющий собой воду с примесью этиленгликоля, возвращается на реакцию. Дистиллят колонны 6 (30 практических тарелок, остаточное давление 0,5 кПа) представляет собой технически чистый (98–99%-ный) этиленгликоль (ЭГ). В качестве попутных продуктов получают диэтиленгликоль (ДЭГ, верхний погон колонны 7) и триэтиленгликоль (ТЭГ), выделяемый разгонкой кубового остатка колонны 7.

Моделирование смесителя потоков. Используя законы сохранения массы и энергии, разработать математическое описание и построить математическую модель смесителя для приготовления водного раствора оксида этилена, подаваемого в теплообменник 1. Используя математическую модель, определить параметры состояния потока $q4$, выходящего из смесителя. Параметры входных потоков представлены в табл. 2.5 (см. на с. 66).

Моделирование теплообменника. Разработать математическое описание и построить математическую модель теплообменника 1 на основе уравнений теплового баланса и теплопередачи. Тепловые потери пренебречь. Принять $K = 102 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot ^\circ\text{C})$, $F = 60 \text{ м}^2$. Параметры потока $q4$ взять из предыдущего расчета. Температуру потока $q6$ принять равной 140°C . Используя математическую модель, определить параметры состояния выходных потоков. Для оценки состава потока $q6$ допустить, что оксид этилена расходуется в реакторе полностью с указанной в литературе селективностью (см. химизм процесса).

Моделирование химических реакторов. При разработке математических моделей химических реакторов использовать законы сохранения массы, энергии, химической кинетики и стехиометрии с учетом структуры потоков в аппарате.

Таблица 2.3

**Параметры регрессионных зависимостей вида (2.40) удельной теплоемкости веществ
от температуры при давлении 2 МПа**

Вещество	Диапазон температур, °С	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>	<i>f</i>
Вода	10–210	4,0532895	0,0115522	–0,0002689	$2,541 \cdot 10^{-6}$	$-1,023 \cdot 10^{-8}$	$1,542 \cdot 10^{-11}$
Оксид этилена	10–110	1,9694109	0,004155	$-5,57 \cdot 10^{-6}$	$1,74 \cdot 10^{-7}$	0	0
Этиленгликоль	10–210	2,486862	0,0049308	$1,53 \cdot 10^{-6}$	$1,07 \cdot 10^{-8}$	0	0
Диэтиленгликоль	10–210	2,0186436	0,0042997	$1,081 \cdot 10^{-6}$	$4,515 \cdot 10^{-9}$	0	0
Триэтиленгликоль	10–210	2,2572351	0,0045283	$1,16 \cdot 10^{-6}$	$6,33 \cdot 10^{-9}$	0	0
Ацетальдегид	10–120	2,1903348	0,0042301	$-1,585 \cdot 10^{-5}$	$2,73 \cdot 10^{-7}$	0	0

Таблица 2.4

Плотности веществ при разных температурах

Температура, °С	Плотность, кг/м ³					
	воды	ОЭ	ЭГ	ДЭГ	ТЭГ	ацетальдегида
10	1019,0542	886,92731	1123,3858	1125,3358	1134,059	787,11047
20	1011,6422	873,31517	1116,1427	1118,3546	1126,3772	774,48103
30	1004,1462	859,38498	1108,8449	1111,3113	1118,6663	761,55258
40	996,56002	845,09275	1101,4869	1104,2017	1110,9199	748,28358
50	988,87711	830,38579	1094,0631	1097,0222	1103,132	734,6241
60	981,09026	815,1999	1086,5683	1089,7689	1095,2972	720,51312
70	973,19162	799,45521	1078,9968	1082,4383	1087,4103	705,87429
80	965,17247	783,04962	1071,3429	1075,0264	1079,4662	690,60933
90	957,02316	765,84827	1063,6005	1067,5291	1071,4597	674,58719
100	948,73284	747,66605	1055,763	1059,9424	1063,3857	657,6257
110	940,28931	728,23729	1047,8235	1052,2618	1055,2387	639,45931
120	931,67876	–	1039,7744	1044,4825	1047,0131	619,67867
130	922,88547	–	1031,6073	1036,5995	1038,7029	–
140	913,89146	–	1023,3132	1028,6073	1030,3019	–
150	904,67606	–	1014,8821	1020,5	1021,8033	–
160	895,21531	–	1006,3029	1012,2713	1013,2	–
170	885,48129	–	997,56328	1003,9142	1004,4846	–
180	875,44107	–	988,64944	995,4209	995,64884	–
190	865,0554	–	979,54592	986,78323	986,68421	–
200	854,27684	–	970,23524	977,99209	977,58154	–
210	843,04708	–	960,69754	969,03721	968,33106	–

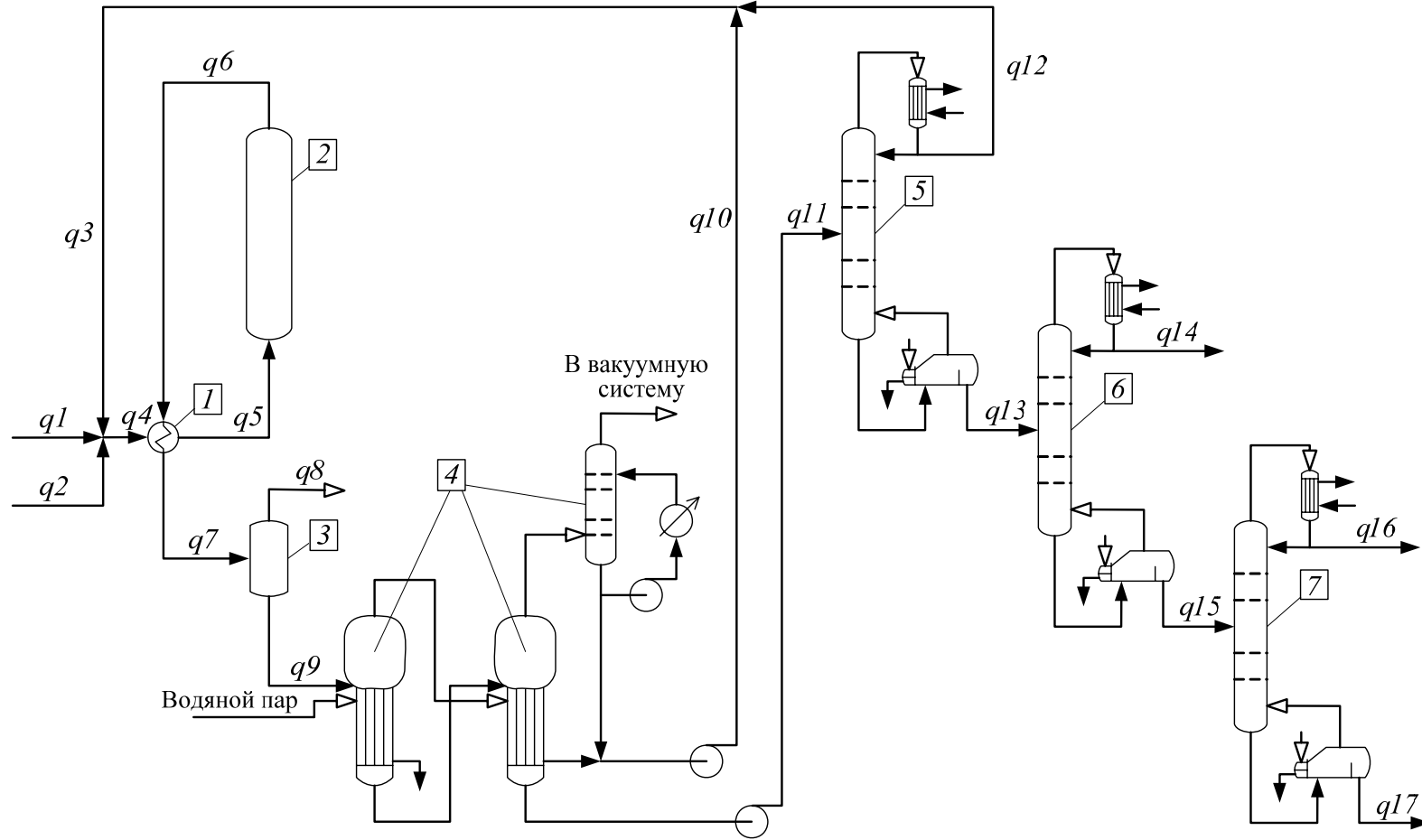


Рис. 2.7. Технологическая схема процесса получения гликолей:
 1 – теплообменник; 2 – реактор; 3 – сепаратор; 4 – выпарная установка; 5, 6, 7 – ректификационные колонны

Таблица 2.5

Параметры состояния входных потоков смесителя

Параметр	Значение параметра для потока		
	$q1$	$q2$	$q3$
Массовый расход, кг/ч	2 115	1 441	12 780
Температура, °С	15	25	50
Давление, МПа	2,0	2,0	2,0
Содержание компонентов, мас. %:			
– воды	0	100	99,2
– ОЭ	100	0	0
– ЭГ	0	0	0,8
– ДЭГ	0	0	0
– ТЭГ	0	0	0
– ацетальдегида	0	0	0

Проточный реактор полного смешения. Разработать математическую модель и рассчитать объем реактора, необходимый для достижения 98%-ной степени конверсии оксида этилена. Тепловой режим принять адиабатическим. Найти параметры состояния выходного потока. Определить выход этиленгликоля в процентах от теоретического.

Каскад реакторов полного смешения. Разработать математическую модель и рассчитать количество реакторов смешения в каскаде, необходимое для достижения 98%-ной степени конверсии оксида этилена. Объем каждого реактора в каскаде принять равным 5% от объема реактора, определенного в предыдущем расчете. Тепловой режим – адиабатический. Определить параметры состояния выходного потока. Оценить выход этиленгликоля в процентах от теоретического.

Проточный реактор полного вытеснения. Разработать математическую модель и рассчитать профили концентраций и температуры по длине (объему) реактора, работающего в адиабатическом режиме. Диаметр реактора принять равным 1 м. Определить объем реактора, необходимый для достижения 98%-ной степени конверсии оксида этилена, в случаях адиабатического и изотермического тепловых режимов. Установить параметры состояния выходного потока и выход этиленгликоля в процентах от теоретического в обоих тепловых режимах.

3. ПОСТРОЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ЭЛЕМЕНТОВ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ И ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

.....
.....
.....

Разработка экспериментально-статистических моделей элементов ХТС неразрывно связана с изучением свойств объекта моделирования посредством эксперимента. Эксперимент может проводиться непосредственно на реальном объекте, на его физической (лабораторной, пилотной) модели либо на детерминированной математической модели (последний вид эксперимента называется численным). При проведении эксперимента варьируют значения входных переменных, т. е. параметров, определяющих состояние объекта, и регистрируют соответствующие значения выходных переменных, т. е. параметров, характеризующих состояние объекта. Таким образом получают набор экспериментальных данных – таблично заданную функцию какой-либо выходной переменной от множества входных переменных.

3.1. Оценка воспроизводимости результатов эксперимента

Прежде чем приступить к эксперименту, необходимо убедиться в том, что опыты воспроизводимы. Для этой цели проводят несколько серий параллельных опытов в рассматриваемой области изменения влияющих факторов. Результаты этих опытов сводятся в табл. 3.1.

Для каждой серии параллельных опытов рассчитывают среднее арифметическое значение функции отклика:

$$\bar{y}_j = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k y_{ji} \quad (j = 1, 2, \dots, N), \quad (3.1)$$

где k – число параллельных опытов, проведенных при одинаковых условиях. Обычно N и k берут от 2 до 4.

Эксперимент для оценки воспроизводимости опытов

Номер серии опытов	Результаты параллельных опытов				\bar{y}_j	S_j^2
1	y_{11}	y_{12}	...	y_{1k}	\bar{y}_1	S_1^2
2	y_{21}	y_{22}	...	y_{2k}	\bar{y}_2	S_2^2
3	y_{31}	y_{32}	...	y_{3k}	\bar{y}_3	S_3^2
...
j	y_{j1}	y_{j2}	...	y_{jk}	\bar{y}_j	S_j^2
...
N	y_{N1}	y_{N2}	...	y_{Nk}	\bar{y}_N	S_N^2

Затем вычисляют оценку дисперсии для каждой серии параллельных опытов:

$$S_j^2 = \frac{1}{k-1} \sum_{i=1}^k (y_{ji} - \bar{y}_j)^2. \quad (3.2)$$

Для проверки воспроизводимости опытов находят отношение наибольшей из оценок дисперсий к сумме всех оценок дисперсий:

$$G_p = \frac{\max S_j^2}{\sum_{j=1}^N S_j^2}. \quad (3.3)$$

Эта величина называется расчетным значением критерия Кохрена.

Значения критерия Кохрена приведены в справочных таблицах. Они соответствуют доверительной вероятности $\alpha = 0,95$, с которой принимается гипотеза о воспроизводимости опытов.

Для нахождения G необходимо знать общее количество оценок дисперсий N и число степеней свободы f , связанных с каждой из них, причем $f = k - 1$.

Если выполняется условие $G_p \leq G$, то опыты считаются воспроизводимыми, а оценки дисперсий – однородными.

Если опыты невоспроизводимы, то можно попытаться достигнуть воспроизводимости выявлением и устранением источников нестабильности эксперимента, а также использованием более точных методов и средств измерений.

Наконец, если никакими способами невозможно достигнуть воспроизводимости, то математические методы планирования к такому эксперименту применять нельзя.

При дальнейшей обработке экспериментальных данных используют усредненную величину оценок однородных дисперсий серий параллельных опытов, называемую оценкой дисперсии воспроизводимости:

$$S_y^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N S_j^2. \quad (3.4)$$

С ней связано число степеней свободы $f = N(k - 1)$.

3.2. Планирование эксперимента

При выполнении условия воспроизводимости результатов каждого опыта, входящего в экспериментальное исследование, математическая модель тем точнее будет описывать свойства исследуемого объекта, чем на большее число экспериментальных данных она будет опираться. Поэтому при осуществлении так называемого *пассивного многофакторного эксперимента* стремятся получить значения функции отклика при всех возможных неповторяющихся комбинациях входных переменных, которые, в свою очередь, варьируются на максимально возможном, с точки зрения здравого смысла, числе уровней. Однако за высокую точность моделей, получаемых таким способом, приходится платить большими затратами времени и ресурсов. Поэтому в большинстве случаев целесообразно прибегать к так называемому *активному эксперименту*, который за счет использования статистических методов планирования исследований и обработки результатов позволяет получать модели заданной точности при минимальном числе опытов. Среди множества методов планирования эксперимента наибольшее распространение получили *полный и дробный факторные эксперименты, ортогональный и ротатабельный центральные композиционные планы, симплексный метод* и некоторые другие.

Набор экспериментальных данных, полученный в результате проведения эксперимента, обрабатывают с помощью методов математической статистики, подбирая эмпирическую формулу, наилучшим образом описывающую экспериментальную функцию – это и есть искомая статистическая математическая модель. Вид аппроксимирующей формулы может быть любым, однако наиболее часто для описания экспериментальных данных используют полином n -й степени, т. е. получают модель в виде уравнения регрессии:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^m b_i x_i + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j + \dots + \sum_{i=1}^m b_{ii} x_i^n. \quad (3.5)$$

Обусловлено это тем, что полиномом можно описать кривые и поверхности произвольной сложности, а коэффициенты полинома вычисляются достаточно просто.

3.2.1. Полный факторный эксперимент

Уравнения регрессии, получаемые с помощью полного факторного эксперимента (ПФЭ), имеют следующий вид:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_n x_n + b_{12} x_1 x_2 + \dots + b_{(n-1)n} x_{(n-1)} x_n, \quad (3.6)$$

где y – выходной параметр (функция отклика); b_0 – свободный член уравнения регрессии; b_1, b_2, \dots, b_n – коэффициенты при линейных членах уравнения регрессии; $b_{12}, \dots, b_{(n-1)n}$ – коэффициенты парных взаимодействий; x_1, x_2, \dots, x_n – входные переменные (факторы).

Общее число опытов ПФЭ определяют по формуле $N = 2^n$, где n – число входных переменных (факторов).

План реализации опытов принято называть матрицей планирования. Она может быть составлена в размерных значениях соответствующих уровней факторов (этот вариант матрицы планирования необходим при постановке экспериментальных исследований) или в безразмерных кодированных значениях переменных (этот вариант матрицы используется, главным образом, для расчетов коэффициентов уравнения регрессии). Для перехода к кодированным переменным служит формула

$$X_i = \frac{x_i - x_{0,i}}{\Delta x_i} \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (3.7)$$

где X_i, x_i – значение фактора в кодированных и размерных переменных соответственно; $x_{0,i}$ – значение фактора на базовом уровне; Δx_i – интервал варьирования по данному фактору.

Выбор интервалов варьирования и базовых уровней факторов является сложной задачей, определяющей в ряде случаев результаты исследований. На практике обычно интервал варьирования принимают в размере 20–50% от значения фактора на нулевом (базовом) уровне. В качестве базового уровня фактора часто выбирают его значение в отработанном режиме функционирования технологического процесса или системы.

Матрица ПФЭ для трех факторов с учетом парных взаимодействий кодированных переменных приведена в табл. 3.2. Такой вариант плана называется расширенной матрицей.

Таблица 3.2

Расширенная матрица полного трехфакторного эксперимента

Номер опыта	Факторы			Парные взаимодействия			Функция отклика
	X_1	X_2	X_3	X_1X_2	X_2X_3	X_1X_3	
1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	y_1
2	+1	-1	-1	-1	+1	-1	y_2
3	-1	+1	-1	-1	-1	+1	y_3
4	+1	+1	-1	+1	-1	-1	y_4
5	-1	-1	+1	+1	-1	-1	y_5
6	+1	-1	+1	-1	-1	+1	y_6
7	-1	+1	+1	-1	+1	-1	y_7
8	+1	+1	+1	+1	+1	+	y_8

Основные принципы построения матриц ПФЭ следующие:

- уровни варьирования первого фактора чередуются от опыта к опыту;
- частота смены уровней варьирования каждого последующего фактора вдвое меньше, чем у предыдущего.

Для удобства вычислений коэффициентов регрессии все факторы в ходе полного факторного эксперимента варьируют на двух уровнях, соответствующих значениям кодированных переменных +1 и -1.

Таким образом, *полным факторным экспериментом* называется система опытов, содержащая все возможные неповторяющиеся комбинации уровней варьирования факторов.

Одним из недостатков ПФЭ является то, что с увеличением числа факторов, рассматриваемых исследователем, резко возрастает число опытов. Причем число это значительно превосходит число определяемых коэффициентов уравнения регрессии.

Идея дробного факторного эксперимента (ДФЭ) состоит в сокращении числа опытов ПФЭ, но при стремлении к сохранению матрицей планирования свойства ортогональности. Эта идея реализуется следующим образом: некоторые из взаимодействий факторов признаются незначимыми в той или иной области факторного пространства, что и позволяет использовать соответствующий столбец расширенной матрицы планирования ПФЭ для оценки влияния дополнительного фактора.

Общее число опытов ДФЭ определяется по формуле $N = 2^{n-c}$, где n – общее число факторов; c – число факторов, приравненных к произведениям.

3.2.2. Центральный композиционный план эксперимента

Тогда, когда зависимости между выходными и входными параметрами элемента ХТС носят явный нелинейный характер, для нахождения коэффициентов уравнения регрессии не могут быть использованы планы первого порядка (например, ПФЭ). Для получения математического описания объекта в этом случае используют планы второго порядка. Описание элемента ХТС получают в виде полиномиального уравнения второго порядка:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^m b_i x_i + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^m b_{ii} x_i^2. \quad (3.8)$$

Для нахождения коэффициентов этого полинома необходим эксперимент, в котором каждый фактор варьировался бы не менее чем на трех уровнях.

Структура плана второго порядка, предназначенного для определения коэффициентов квадратичной модели (3.8), имеет существенное значение. Дело в том, что исследователь обращается к планам второго порядка обычно после того, как ему не удалось получить адекватной модели в результате реализации ПФЭ, т. е. плана первого порядка. При этом, естественно, возникает желание сохранить и в дальнейшем использовать результаты эксперимента, выполненного на предыдущем этапе исследований.

С учетом этих соображений разработаны так называемые композиционные планы второго порядка. Структура этих планов представляет собой композицию из плана первого порядка и некоторого числа добавочных опытов в так называемых «звездных точках». Кроме того, один или несколько опытов проводятся в центре плана. Благодаря своей структуре такие планы экспериментов называются *центральными композиционными* (ЦКП).

Матрица двухфакторного композиционного плана второго порядка представлена в табл. 3.3.

Общее число опытов ЦКП рассчитывают по формуле

$$N = N_{\text{я}} + N_{\text{зв}} + N_0, \quad (3.9)$$

где $N_{\text{я}}$ – число опытов в ядре плана; $N_{\text{зв}}$ – число опытов в звездных точках; N_0 – число центральных опытов.

Очевидно, что $N_{\text{зв}} = 2n$, иными словами, вдвое превышает число факторов.

Из структуры ЦКП следует, что каждый фактор варьируется на пяти уровнях: $-\alpha$, -1 , 0 , $+1$, $+\alpha$.

Матрица двухфакторного композиционного плана второго порядка

Номер опыта	Фрагмент плана	X_1	X_2	X_1X_2	y
1	Ядро	+1	+1	+1	y_1
2		-1	+1	-1	y_2
3		+1	-1	-1	y_3
4		-1	-1	+1	y_4
5	Звездные точки	$+\alpha$	0	0	y_5
6		$-\alpha$	0	0	y_6
7		0	$+\alpha$	0	y_7
8		0	$-\alpha$	0	y_8
9	Центр	0	0	0	y_9

Координаты опытов в «звездных точках» определяются путем решения следующего уравнения:

$$4\alpha^4 + 4\alpha^2 N_{\text{я}} - N_{\text{я}}(N_{\text{зв}} + N_0) = 0. \quad (3.10)$$

3.3. Определение параметров и оценка адекватности экспериментально-статистической модели

Для определения параметров экспериментально-статистической модели (вычисления коэффициентов аппроксимирующего полинома) используют метод наименьших квадратов:

$$\sum_{j=1}^N \left[\bar{y}_j - (b_0 + b_1 x_{1j} + b_2 x_{2j} + \dots + b_{k-1} x_{(m-1)j}^n + b_k x_{mj}^n) \right]^2 = \min, \quad (3.11)$$

где \bar{y}_j – среднее значение функции отклика в j -й серии параллельных опытов ($j = [1, N]$, здесь N – число серий параллельных опытов); x_{ij} – значение i -й входной переменной в j -м опыте ($i = [1, m]$, где m – число входных переменных); b_l – искомые коэффициенты полинома ($l = [0, k]$, здесь k – число учитываемых линейных, парных, квадратичных и т. д. эффектов); n – степень полинома.

Реализация метода наименьших квадратов в матричной форме имеет вид

$$\mathbf{B} = (\mathbf{X}^T \cdot \mathbf{X})^{-1} \cdot (\mathbf{X}^T \cdot \mathbf{Y}), \quad (3.12)$$

где \mathbf{B} – вектор-столбец коэффициентов полинома; \mathbf{X} – расширенная матрица планирования; \mathbf{Y} – вектор-столбец значений функции отклика.

После нахождения коэффициентов аппроксимирующего полинома необходимо проверить их на значимость и незначимые коэффициенты отбросить. Проверка осуществляется с помощью критерия Стьюдента и заключается в сопоставлении отношений дисперсий, полученных при вычислении функции отклика с зануленными оцениваемыми коэффициентами полинома, к дисперсии, полученной со всеми коэффициентами, и критического значения критерия Стьюдента:

$$T_{кр} = 1,8749 \cdot \exp\left(\frac{1,81972}{k-1}\right), \quad (3.13)$$

где k – число коэффициентов модели. Если отношение дисперсий для какого-нибудь коэффициента модели окажется меньше, чем $T_{кр}$, то этот коэффициент следует приравнять к нулю, а значения остальных пересчитать.

Далее оценивают достоверность аппроксимации экспериментальных данных полученным уравнением регрессии, т. е. проверяют модель на адекватность. Проверку адекватности осуществляют с помощью критерия Фишера, расчетное значение которого определяют по формуле

$$F_p = \frac{\max(S_{ад}^2, S_y^2)}{\min(S_{ад}^2, S_y^2)}, \quad (3.14)$$

где $S_{ад}^2$ – оценка дисперсии адекватности; S_y^2 – оценка дисперсии воспроизводимости;

$$S_{ад}^2 = \frac{1}{N-B} \sum_{j=1}^N (y_j^э - y_j^р)^2, \quad (3.15)$$

где B – число значимых коэффициентов уравнения регрессии; $y_j^э$, $y_j^р$ – соответственно экспериментальное и расчетное значение функции отклика в j -м опыте.

Расчетное значение критерия Фишера сравнивают с табулированным значением критерия Фишера (F). Если неравенство $F_p \leq F$ верно, то уравнение регрессии считают адекватным.

В случае, когда статистическая математическая модель аппроксимирует данные, полученные путем численного эксперимента на детерминированной модели объекта, статистический анализ полученных

уравнений не производят, а о качестве аппроксимации судят по значениям относительной погрешности в точках плана.

Пример. Требуется получить регрессионные модели, описывающие работу реактора окисления метанола, рассчитанного в пункте 2.1.3 в примере Б (см. на с. 43–51).

Решение. Процессы, протекающие в реакторе окисления метанола, – нелинейные, поэтому попытаемся описать работу реактора с помощью квадратичных уравнений регрессии. Для выполнения поставленной задачи необходимо провести численный эксперимент на детерминированной математической модели реактора, разработанной в пункте 2.1.3. Поскольку требуется получить нелинейные модели, эксперимент будем осуществлять на основе ортогонального центрального композиционного плана: ядро плана – дробный факторный эксперимент, в центре плана – один опыт.

В качестве входных переменных (влияющих факторов) выберем: общий массовый расход реакционной смеси (G), температуру на входе в реактор (t_0), а также начальные концентрации метанола (w_1), кислорода (w_2), формальдегида (w_3), оксида углерода (w_4), воды (w_5), выраженные в массовых долях (всего семь факторов). Выходными переменными (функциями отклика) являются: выходные концентрации метанола (Y_1), кислорода (Y_2), формальдегида (Y_3), оксида углерода (Y_4), воды (Y_5), выраженные в массовых долях, а также температура реакционной смеси на выходе из реактора (Y_6), т. е. математическая модель реактора будет состоять из шести регрессионных уравнений.

Значения базовых уровней и интервалов варьирования входных переменных подберем таким образом, чтобы исследовать весь диапазон устойчивой работы реактора (для этого необходимо предварительно обобщить опыт эксплуатации подобных реакторов либо провести исследования на детерминированной модели реактора).

Значения входных переменных на базовом уровне и интервалы варьирования:

$$w_1 \equiv 0.088 \quad w_2 \equiv 0.212 \quad w_3 \equiv 0.01 \quad w_4 \equiv 0.01 \quad w_5 \equiv 0.01 \quad G \equiv 3.8 \frac{\text{кг}}{\text{с}} \quad t_0 \equiv 175 \text{ C}$$

$$x_0 \equiv (w_1 \quad w_2 \quad w_3 \quad w_4 \quad w_5 \quad G \quad t_0)^T \quad \text{- задаем вектор базовых уровней}$$

$$\Delta x \equiv (0.1 \cdot w_1 \quad 0.1 \cdot w_2 \quad 0.55 \cdot w_3 \quad 0.55 \cdot w_4 \quad 0.55 \cdot w_5 \quad 0.1 \cdot G \quad 0.07 \cdot t_0)^T \quad \text{- задаем вектор интервалов варьирования}$$

Разработка плана эксперимента

Подпрограмма, генерирующая план эксперимента на базе ОЦКП:

```

f(x, y) ≡ 1   OCCP(x0, Δx, c) ≡
| n ← length (x0)
| (Nя Nзв) ← (2n-c 2 · n)
| N ← Nя + Nзв + 1
| α ← 1
| α ← root[4 · α4 + 4 · α2 · Nя - Nя · (Nзв + 1), α]
| X(0) ← matrix(N, 1, f)
| for j ∈ 1.. n - c
|   for i ∈ 0.. Nя - 1
|     floor( $\frac{i}{2^{j-1}}$ )
|     Xi,j ← (-1)
| k ← n - c + 1
| for i ∈ 1.. n - c - 1
|   for j ∈ i + 1.. n - c
|     if k ≤ n
|       | X(k) ← (X(i) · X(j))
|       | k ← k + 1
| for j ∈ 1.. n
|   | X2·j-2+Nя, j ← α
|   | X2·j-1+Nя, j ← -α
x ← X
for j ∈ 1.. n
  x(j) ← X(j) · Δxj-1 + x0j-1
( $\begin{pmatrix} X \\ x \end{pmatrix}$ )

```

$c \equiv 3$ - задаем число факторов, приравненных к произведениям

$X \equiv \text{OCCP}(x_0, \Delta x, c)_0$ - генерируем матрицы планирования,
обращаясь к подпрограмме

$x \equiv \text{OCCP}(x_0, \Delta x, c)_1$

Матрица планирования эксперимента, выраженная в кодированных переменных

Номер опыта	w_1	w_2	w_3	w_4	w_5	G	t_0	
	0	1	2	3	4	5	6	7
0	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	-1	1	1	1	-1	-1	-1
2	1	1	-1	1	1	-1	1	1
3	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
4	1	1	1	-1	1	1	-1	1
5	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
6	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1
7	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1
8	1	1	1	1	-1	1	1	-1
9	1	-1	1	1	-1	-1	-1	1
10	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1
11	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1
12	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1
13	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1
14	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
15	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
16	1	1.771	0	0	0	0	0	0
17	1	-1.771	0	0	0	0	0	0
18	1	0	1.771	0	0	0	0	0
19	1	0	-1.771	0	0	0	0	0
20	1	0	0	1.771	0	0	0	0
21	1	0	0	-1.771	0	0	0	0
22	1	0	0	0	1.771	0	0	0
23	1	0	0	0	-1.771	0	0	0
24	1	0	0	0	0	1.771	0	0
25	1	0	0	0	0	-1.771	0	0
26	1	0	0	0	0	0	1.771	0
27	1	0	0	0	0	0	-1.771	0
28	1	0	0	0	0	0	0	1.771
29	1	0	0	0	0	0	0	-1.771
30	1	0	0	0	0	0	0	0

X =

Матрица планирования эксперимента, выраженная в размерных переменных

Номер опыта	w_1	w_2	w_3	w_4	w_5	G	t_0	
	0	1	2	3	4	5	6	7
0	1	0.097	0.233	0.016	0.016	0.016	4.18	187.25
1	1	0.079	0.233	0.016	0.016	$4.5 \cdot 10^{-3}$	3.42	162.75
2	1	0.097	0.191	0.016	0.016	$4.5 \cdot 10^{-3}$	4.18	187.25
3	1	0.079	0.191	0.016	0.016	0.016	3.42	162.75
4	1	0.097	0.233	$4.5 \cdot 10^{-3}$	0.016	0.016	3.42	187.25
5	1	0.079	0.233	$4.5 \cdot 10^{-3}$	0.016	$4.5 \cdot 10^{-3}$	4.18	162.75
6	1	0.097	0.191	$4.5 \cdot 10^{-3}$	0.016	$4.5 \cdot 10^{-3}$	3.42	187.25
7	1	0.079	0.191	$4.5 \cdot 10^{-3}$	0.016	0.016	4.18	162.75
8	1	0.097	0.233	0.016	$4.5 \cdot 10^{-3}$	0.016	4.18	162.75
9	1	0.079	0.233	0.016	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	3.42	187.25
10	1	0.097	0.191	0.016	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	4.18	162.75
11	1	0.079	0.191	0.016	$4.5 \cdot 10^{-3}$	0.016	3.42	187.25
12	1	0.097	0.233	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	0.016	3.42	162.75
13	1	0.079	0.233	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	4.18	187.25
14	1	0.097	0.191	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	3.42	162.75
15	1	0.079	0.191	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	0.016	4.18	187.25
16	1	0.104	0.212	0.01	0.01	0.01	3.8	175
17	1	0.072	0.212	0.01	0.01	0.01	3.8	175
18	1	0.088	0.25	0.01	0.01	0.01	3.8	175
19	1	0.088	0.174	0.01	0.01	0.01	3.8	175
20	1	0.088	0.212	0.02	0.01	0.01	3.8	175
21	1	0.088	0.212	$2.609 \cdot 10^{-4}$	0.01	0.01	3.8	175
22	1	0.088	0.212	0.01	0.02	0.01	3.8	175
23	1	0.088	0.212	0.01	$2.609 \cdot 10^{-4}$	0.01	3.8	175
24	1	0.088	0.212	0.01	0.01	0.02	3.8	175
25	1	0.088	0.212	0.01	0.01	$2.609 \cdot 10^{-4}$	3.8	175
26	1	0.088	0.212	0.01	0.01	0.01	4.473	175
27	1	0.088	0.212	0.01	0.01	0.01	3.127	175
28	1	0.088	0.212	0.01	0.01	0.01	3.8	196.692
29	1	0.088	0.212	0.01	0.01	0.01	3.8	153.308
30	1	0.088	0.212	0.01	0.01	0.01	3.8	175

Экспериментальные значения функций отклика в точках плана

$Y_1 :=$	0	$Y_2 :=$	0	$Y_3 :=$	0	$Y_4 :=$	0	$Y_5 :=$	0	$Y_6 :=$	0
0	0.021	0	0.212	0	0.092	0	0.021	0	0.068	0	160.9
1	0.0059	1	0.174	1	0.07	1	0.019	1	0.044	1	160.5
2	0.015	2	0.161	2	0.097	2	0.023	2	0.06	2	160.8
3	0.0094	3	0.138	3	0.068	3	0.018	3	0.051	3	160.6
4	0.013	4	0.171	4	0.069	4	0.017	4	0.058	4	160.7
5	0.01	5	0.215	5	0.072	5	0.021	5	0.051	5	160.6
6	0.0091	6	0.13	6	0.072	6	0.018	6	0.051	6	160.6
7	0.015	7	0.172	7	0.069	7	0.02	7	0.059	7	160.7
8	0.022	8	0.212	8	0.092	8	0.0091	8	0.067	8	160.9
9	0.0055	9	0.174	9	0.07	9	0.0094	9	0.044	9	160.5
10	0.016	10	0.161	10	0.096	10	0.011	10	0.059	10	160.8
11	0.009	11	0.138	11	0.068	11	0.0081	11	0.052	11	160.6
12	0.014	12	0.171	12	0.069	12	0.0074	12	0.057	12	160.7
13	0.0095	13	0.215	13	0.073	13	0.0095	13	0.052	13	160.6
14	0.0097	14	0.13	14	0.072	14	0.0085	14	0.05	14	160.6
15	0.015	15	0.172	15	0.069	15	0.0082	15	0.06	15	160.7
16	0.017	16	0.166	16	0.086	16	0.014	16	0.061	16	160.8
17	0.0081	17	0.177	17	0.066	17	0.014	17	0.049	17	160.5
18	0.012	18	0.209	18	0.076	18	0.014	18	0.055	18	160.7
19	0.012	19	0.134	19	0.076	19	0.014	19	0.055	19	160.7
20	0.012	20	0.171	20	0.085	20	0.015	20	0.056	20	160.7
21	0.012	21	0.172	21	0.067	21	0.013	21	0.055	21	160.7
22	0.012	22	0.172	22	0.076	22	0.024	22	0.055	22	160.7
23	0.012	23	0.172	23	0.076	23	0.0045	23	0.055	23	160.7
24	0.017	24	0.174	24	0.073	24	0.013	24	0.062	24	160.7
25	0.0082	25	0.169	25	0.078	25	0.016	25	0.049	25	160.6
26	0.018	26	0.204	26	0.087	26	0.016	26	0.063	26	160.8
27	0.0074	27	0.14	27	0.065	27	0.012	27	0.047	27	160.5
28	0.011	28	0.171	28	0.078	28	0.014	28	0.056	28	160.6
29	0.013	29	0.172	29	0.076	29	0.014	29	0.055	29	160.7
30	0.012	30	0.172	30	0.076	30	0.014	30	0.055	30	160.7

$$x^{(8)} := \overrightarrow{\left[\left(x^{(1)} \right)^2 \right]} \quad x^{(9)} := \overrightarrow{\left[\left(x^{(2)} \right)^2 \right]} \quad x^{(10)} := \overrightarrow{\left[\left(x^{(3)} \right)^2 \right]}$$

$$x^{(11)} := \overrightarrow{\left[\left(x^{(5)} \right)^2 \right]} \quad x^{(12)} := \overrightarrow{\left[\left(x^{(6)} \right)^2 \right]}$$

- формируем расширенную матрицу планирования, включая в нее квадратичные эффекты некоторых факторов

Нахождение коэффициентов регрессионных моделей:

$$i := 1..5 \quad B_i := (x^T \cdot x)^{-1} \cdot (x^T \cdot Y_i)$$

Значения коэффициентов регрессионных моделей

$B_1 =$	0	-0.0137	$B_2 =$	0	-0.19749	$B_3 =$	0	-0.0595	$B_4 =$	0	-0.0048	$B_5 =$	0	-0.0558
	1	-0.0227		1	-0.212		1	0.7089		1	-0.0004		1	0.5507
	2	0.03861		2	1.06478		2	-0.001		2	-0.0072		2	0.0608
	3	0.09289		3	-0.02198		3	0.9839		3	0.0991		3	0.0102
	4	-0.01861		4	$5.5 \cdot 10^{-14}$		4	$5 \cdot 10^{-15}$		4	0.9823		4	0.0082
	5	0.33323		5	0.326		5	-0.1739		5	-0.2386		5	0.6246
	6	-0.00246		6	0.04304		6	0.0171		6	0.0026		6	0.015
	7	-0.00003		7	-0.00001		7	0		7	0		7	0
	8	1.76243		8	-0.80967		8	-0.102		8	0.0567		8	-0.8607
	9	-0.07774		9	-0.13951		9	-0.0176		9	0.0098		9	-0.1483
	10	-1.15504		10	-2.07276		10	-0.261		10	0.1451		10	3.0682
	11	5.11804		11	-2.07276		11	-5.5325		11	5.4166		11	3.0682
	12	0.00136		12	0.00067		12	-0.0001		12	0		12	-0.0005

Проверка качества аппроксимации экспериментальных данных полученными регрессионными моделями:

1) рассчитываем значения функций отклика в точках плана

$$j := 0..30 \quad y_{j,i} := (B_i)^T \cdot (x^T)^{\langle j \rangle}$$

2) вычисляем средние относительные погрешности моделей

$$\varepsilon_i := \text{mean} \left(\left| \frac{y^{\langle j \rangle} - Y_i}{Y_i} \right| \right) \cdot 100$$

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3.27 \\ 0.723 \\ 0.542 \\ 2.784 \\ 0.421 \end{pmatrix}$$

Окончательный вид статистической модели реактора:

1) задаем вектор параметров состояния входного потока

$$x := (w_1 \ w_2 \ w_3 \ w_4 \ w_5 \ G \ t0)^T$$

2) задаем модель в виде,
пригодном для использования в расчете ХТС

$$y(x) := \begin{bmatrix} (B_1)_0 + \sum_{i=1}^7 [(B_1)_i \cdot x_{i-1}] + \sum_{i=8}^{10} [(B_1)_i \cdot (x_{i-8})^2] + \sum_{i=11}^{12} [(B_1)_i \cdot (x_{i-7})^2] \\ (B_2)_0 + \sum_{i=1}^7 [(B_2)_i \cdot x_{i-1}] + \sum_{i=8}^{10} [(B_2)_i \cdot (x_{i-8})^2] + \sum_{i=11}^{12} [(B_2)_i \cdot (x_{i-7})^2] \\ (B_3)_0 + \sum_{i=1}^7 [(B_3)_i \cdot x_{i-1}] + \sum_{i=8}^{10} [(B_3)_i \cdot (x_{i-8})^2] + \sum_{i=11}^{12} [(B_3)_i \cdot (x_{i-7})^2] \\ (B_4)_0 + \sum_{i=1}^7 [(B_4)_i \cdot x_{i-1}] + \sum_{i=8}^{10} [(B_4)_i \cdot (x_{i-8})^2] + \sum_{i=11}^{12} [(B_4)_i \cdot (x_{i-7})^2] \\ (B_5)_0 + \sum_{i=1}^7 [(B_5)_i \cdot x_{i-1}] + \sum_{i=8}^{10} [(B_5)_i \cdot (x_{i-8})^2] + \sum_{i=11}^{12} [(B_5)_i \cdot (x_{i-7})^2] \end{bmatrix}$$

Если проанализировать значения функций отклика, полученные в результате проведения эксперимента, то можно увидеть, что температура реакционной смеси на выходе из реактора (Y_6) практически не изменяется при переходе от опыта к опыту, т. е. она не зависит от значений входных переменных в исследованной области факторного пространства и, следовательно, не требует регрессионного уравнения. Поэтому число искомых регрессионных уравнений сократилось до пяти.

Качество аппроксимации экспериментальных данных полученными регрессионными уравнениями оценивали по величине средней относительной погрешности (ϵ). Как видно из приведенных в примере данных, относительная ошибка расчета выходных концентраций не превышает 5%, что позволяет говорить об удовлетворительном качестве аппроксимации и пригодности полученных моделей для описания работы реактора.

3.4. Оптимизация ХТП методом крутого восхождения

Выше были изучены методы построения экспериментально-статистических моделей в виде уравнений регрессии. Здесь мы рассмотрим

вопрос о том, как использовать эти модели для оптимизации процессов или свойств многокомпонентных систем.

Следует иметь в виду, что качество процесса обычно характеризуется несколькими функциями отклика. Однако обычно невозможно найти такое сочетание значений влияющих факторов, при котором одновременно достигаются экстремумы всех интересующих экспериментатора функций отклика. Например, максимальная производительность оборудования и минимальная себестоимость продукции обычно достигаются при различных технологических режимах.

Важно отметить, что как влияющие факторы, так и функции отклика могут изменяться только в определенных пределах. Так, концентрации реагентов не могут быть отрицательными, температура и давление в аппарате не могут превышать безопасных пределов, себестоимость продукции должна быть не выше плановой и т. п. Следовательно, оптимизацию процессов, как правило, осуществляют в условиях ограничений на влияющие факторы и функции отклика.

Величина, характеризующая уровень оптимизации процесса, называется критерием оптимальности. В частном случае критерием оптимальности может быть одна из функций отклика, характеризующих процесс.

Оптимизация процесса представляет собой целенаправленный поиск значений влияющих факторов, при которых достигается экстремум критерия оптимальности (с учетом ограничений, наложенных на все влияющие факторы и функции отклика).

Д. Бокс и К. Уилсон предложили использовать для оптимизации результаты полного факторного эксперимента. Сущность такой оптимизации состоит в следующем.

Пусть, например, критерием оптимальности служит функция отклика y , представленная в виде (3.6). Один из влияющих факторов принимают за базовый и для него вычисляют произведение соответствующего коэффициента регрессии на шаг варьирования. Например, для первого фактора это произведение имеет вид $b_1\Delta x_1$.

Затем для базового фактора выбирают шаг движения Δx_1^* , с которым будет осуществляться оптимизация. Обычно $\Delta x_1^* \leq \Delta x_1$.

После этого вычисляют отношение

$$\gamma = \frac{\Delta x_1^*}{b_1\Delta x_1}. \quad (3.16)$$

Для всех остальных факторов шаги движения к оптимальным значениям рассчитывают по следующей формуле:

$$\Delta x_i^* = \gamma b_i \Delta x_i. \quad (3.17)$$

Движение к оптимуму начинают из центра плана, который использовался для получения математического описания функции отклика. Значения факторов на каждом новом шаге находят путем прибавления Δx_i^* к соответствующим предыдущим значениям. Так осуществляется оптимизация по методу *крутого восхождения*.

Если же ищется минимум функции y , то новые значения факторов находят из предыдущих путем вычитания Δx_i^* . Такой способ оптимизации называют методом *наискорейшего спуска*.

Движение к оптимуму прекращают в следующих случаях:

- 1) значения (одного или нескольких) факторов или функций отклика вышли за границы допустимых значений;
- 2) достигнут экстремум критерия оптимальности y .

В первом случае на этом оптимизация заканчивается, а во втором – в области экстремума функции y ищут ее новое математическое описание, используя полный факторный эксперимент. Если удастся получить адекватное описание этой функции в виде (3.6), то продолжают оптимизацию методом крутого восхождения. Очевидно, оптимум, найденный в результате первого крутого восхождения, был локальным.

Если же в области оптимума не удастся получить адекватного уравнения регрессии вида (3.6), то переходят к планированию эксперимента для получения математического описания функции y в виде многочлена второй степени (3.8). Полученную в результате нелинейную функцию исследуют на экстремум.

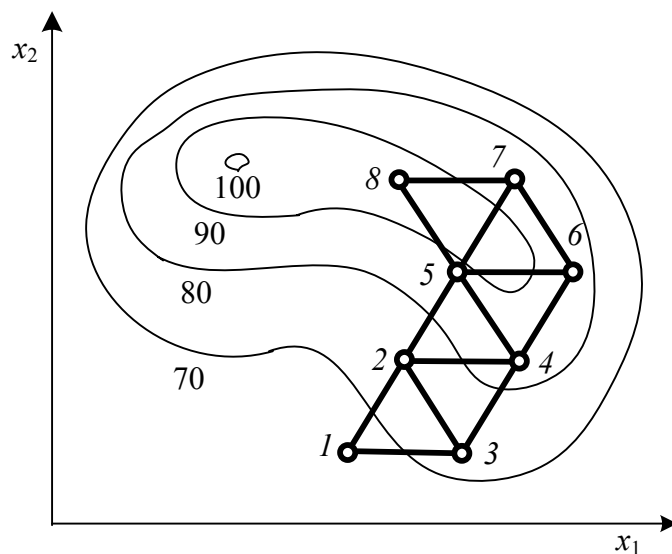
3.5. Оптимизация ХТП симплексным методом

Симплексом называется правильный многогранник, имеющий $(n + 1)$ вершину, где n – число факторов, влияющих на процесс. Так, если факторов два, то симплексом является правильный треугольник. Сущность *симплексного метода* оптимизации иллюстрирует рисунок.

Начальная серия опытов соответствует вершинам исходного симплекса (точки 1, 2 и 3). Условия этих первых опытов берутся из области значений факторов, соответствующих наиболее благоприятным из известных режимов оптимизируемого процесса.

Сравнивая между собой результаты опытов в точках 1, 2 и 3, находят среди них самый «плохой» с точки зрения выбранного критерия оптимальности. Пусть, например, самым «неудачным» оказался

опыт в точке 1. Этот опыт исключают из рассмотрения, а вместо него в состав симплекса вводят опыт в точке 4, которая симметрична точке 1 относительно противоположной стороны треугольника, соединяющей точки 2 и 3.



Оптимизация симплексным методом

Далее сравнивают между собой результаты опытов в вершинах нового симплекса, отбрасывают самый «неудачный» из них и переносят соответствующую вершину симплекса в точку 5. Затем рассмотренная процедура повторяется в течение всего процесса оптимизации.

Если достигнут экстремум критерия оптимальности, то дальнейшее движение симплекса прекращается. Это значит, что новый шаг возвращает исследователя в предыдущую точку факторного пространства.

Следует иметь в виду, что симплексный метод так же, как и метод крутого восхождения, является локальным методом поиска экстремума. Если существует несколько экстремумов критерия оптимальности, то этот метод позволяет найти тот из них, который расположен ближе к точкам исходного симплекса. Поэтому, если есть подозрение о существовании нескольких экстремумов критерия оптимальности, то нужно осуществить их поиск, каждый раз начиная оптимизацию из новой области факторного пространства. Затем следует сравнить между собой найденные оптимальные условия и из всех вариантов выбрать наилучший.

При оптимизации необходимо принимать во внимание ограничения, наложенные на влияющие факторы и функции отклика.

Важно отметить, что при пользовании симплексным методом не обязательно дублировать опыты. Дело в том, что ошибка в отдельном опыте может только несколько замедлить оптимизацию. Если же последующие опыты выполняются безупречно, то движение к оптимуму продолжается.

Матрица опытов исходного симплекса в кодированных переменных приведена в табл. 3.4. Символом «0» обозначены координаты центра плана, т. е. основной уровень.

Таблица 3.4

Матрица исходного симплекса

Номер опыта	X_1	X_2	...	X_{n-1}	X_n	Функция отклика
1	k_1	k_2	...	k_{n-1}	k_n	y_1
2	$-R_1$	k_2	...	k_{n-1}	k_n	y_2
3	0	$-R_2$...	k_{n-1}	k_n	y_3
...
$n-1$	0	0	...	k_{n-1}	k_n	y_{n-1}
n	0	0	...	$-R_{n-1}$	k_n	y_n
$n+1$	0	0	...	0	$-R_n$	y_{n+1}

Величины, входящие в эту таблицу, рассчитываются по следующим формулам:

$$k_i = \sqrt{\frac{1}{2i(i+1)}}; \quad (3.18)$$

$$R_i = ik_i, \quad (3.19)$$

где i – номер фактора в матрице планирования.

Опыты, представленные в табл. 3.4, соответствуют вершинам симплекса, сторона которого равна единице, а центр совпадает с началом координат (в кодированных переменных).

Очевидно, наибольшее количество опытов придется ставить в начале эксперимента. Затем на каждом шаге оптимизаций выполняется только один опыт.

Приступая к оптимизации, необходимо с помощью табл. 3.4 рассчитать матрицу исходной серии опытов в физических переменных, пользуясь формулой

$$x_i = x_{0,i} + \Delta x_i X_i, \quad (3.20)$$

где применены те же обозначения, что и в формуле (3.7). В дальнейшем все операции производятся только с физическими переменными.

Условия каждого нового опыта рассчитываются по формуле

$$x_i = \frac{2}{n} \left(\sum_{j=1}^{n+1} x_{ji} - x_i^* \right) - x_i^*, \quad (3.21)$$

где n – число факторов в матрице планирования; j – номер опыта; i – номер фактора; x_i – значение i -го фактора в самом «неудачном» опыте предыдущего симплекса.

Следует отметить, что на любом шаге оптимизации, осуществляемой симплексным методом, можно включить в программу исследований новый фактор, который до тех пор не принимался во внимание, но оставался на постоянном уровне. При этом значения всех ранее рассматриваемых факторов вычисляются по формуле

$$x_i = \frac{1}{n+1} \sum_{j=1}^{n+1} x_{ji}, \quad (3.22)$$

где $i = 1, 2, \dots, n$, т. е. являются средними арифметическими значениями соответствующих координат предыдущего симплекса.

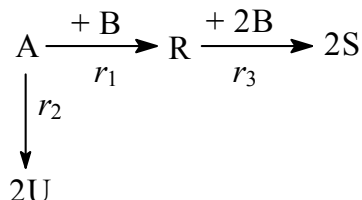
Значение вновь вводимого фактора определяется по формуле

$$x_{n+1} = x_{0,n+1} + \Delta x_{n+1} (R_{n+1} + k_{n+1}), \quad (3.23)$$

где $x_{0,n+1}$ – основной уровень этого фактора; Δx_{n+1} – выбранный шаг варьирования для данного фактора; R_{n+1} , k_{n+1} – величины, рассчитываемые по формулам (3.19) и (3.18). Отметим, что добавление нового фактора в состав полного факторного эксперимента сопровождается увеличением количества опытов вдвое. В этом смысле симплексный метод имеет очевидное преимущество.

📌 Задания для самостоятельного выполнения

В проточном реакторе полного вытеснения адиабатического типа объемом $V = 1 \text{ м}^3$ протекает система жидкофазных реакций



скорости которых описываются формальной кинетикой. Константы скоростей реакций: $k_{01} = 10^8 \text{ кмоль}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, $E_1 = 49\ 860 \text{ кДж/кмоль}$;

$k_{02} = 10^7 \text{ кмоль}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$, $E_2 = 53\,240 \text{ кДж/кмоль}$; $k_{03} = 10^9 \text{ с}^{-1}$, $E_3 = 64\,790 \text{ кДж/кмоль}$. Тепловые эффекты реакций: $\Delta H_{293,1} = -45\,000 \text{ кДж/кмоль}$; $\Delta H_{293,2} = 52\,500 \text{ кДж/кмоль}$; $\Delta H_{293,3} = -64\,000 \text{ кДж/кмоль}$.

Начальные концентрации веществ $CA0 = 1 \text{ кмоль/м}^3$, $CB0 = 0,5 \text{ кмоль/м}^3$, $CU0 = CR0 = CS0 = 0$, концентрация инертного вещества (растворителя) $CD0 = 15 \text{ кмоль/м}^3$; теплоемкости веществ, $[\text{кДж}/(\text{кмоль} \cdot \text{К})]$: $CMA = 74$, $CMB = 68$, $CMU = 70$, $CMR = 78$, $CMS = 85$, $CMD = 61$ (не являются функцией температуры). Начальная температура реакционной смеси $t_0 = 40^\circ\text{C}$. Объемный расход реакционной смеси $v = 0,5 \text{ м}^3/\text{с}$.

Используя физико-химическую модель реактора (см. пример А в пункте 2.1.3 на с. 39–43), максимизировать выход из него вещества R методами крутого восхождения и симплексным. В качестве влияющих факторов выбрать температуру реакционной смеси на входе в реактор, ее объемный расход и начальную концентрацию вещества В.

4. РАСЧЕТ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Расчет разомкнутой ХТС декомпозиционным методом представляет собой совокупность расчетов отдельных элементов ХТС по их математическим моделям в упорядоченной последовательности, установленной в результате анализа структуры ХТС (подробно анализ структуры ХТС был рассмотрен в разделе 1).

В случае, если ХТС замкнутая, т. е. содержит контурные подсистемы, ее преобразуют в разомкнутую путем разрыва обратных связей. Прежде чем приступить к расчету полученной ациклической ХТС, следует найти параметры состояния разорванных потоков, составив и решив систему нелинейных уравнений вида

$$\begin{cases} \mathbf{X}_1 = \varphi_1(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \mathbf{X}_j, \mathbf{X}_N), \\ \mathbf{X}_2 = \varphi_2(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \mathbf{X}_j, \mathbf{X}_N), \\ \mathbf{X}_j = \varphi_j(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \mathbf{X}_j, \mathbf{X}_N), \\ \mathbf{X}_N = \varphi_N(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \mathbf{X}_j, \mathbf{X}_N), \end{cases}$$

где \mathbf{X}_j – вектор параметров состояния j -го разорванного потока ($j = 1, 2, \dots, N$); N – число разорванных потоков.

После нахождения параметров разорванных потоков осуществляют расчет ХТС, переходя от элемента к элементу в соответствии с установленной упорядоченной последовательностью.

Сказанное поясним на примере расчета ХТС окислительной конверсии метилового спирта на железо-молибденовом катализаторе. Технологическая схема процесса показана на рис. 4.1.

В реактор 2 подается предварительно нагретая в печи 1 до 180°C спиртовоздушная смесь, содержащая 7–8 об. % метанола. Реакционный газ направляется в двухсекционный теплообменник 3, где охлаждается до 40–45°C, после чего поступает в куб абсорбционной колонны 4. Орошение колонны осуществляется деминерализованной водой. Примерно одна треть газов после абсорбера с температурой 20–30°C отправляется на дожигание СО и следов формальдегида и сбрасывается. Две трети газов смешиваются со свежим воздухом и подаются

газодувкой 5 через теплообменник и печь в реактор. Метанол при помощи форсунок впрыскивается в подогретую воздушную смесь. Реакционное тепло отводится из реактора кипящим конденсатом.

Необходимо рассчитать ХТС производительностью 25 000 т/год 37%-ного формалина, если годовой фонд рабочего времени составляет 8000 ч, а расходный коэффициент метанола в расчете на чистый формальдегид равен 1,21.

Топологическая модель ХТС представлена на рис. 4.2, соответствующий ей параметрический потоковый граф – на рис. 4.3. Исходные данные для расчета сведены в табл. 4.1 и 4.2.

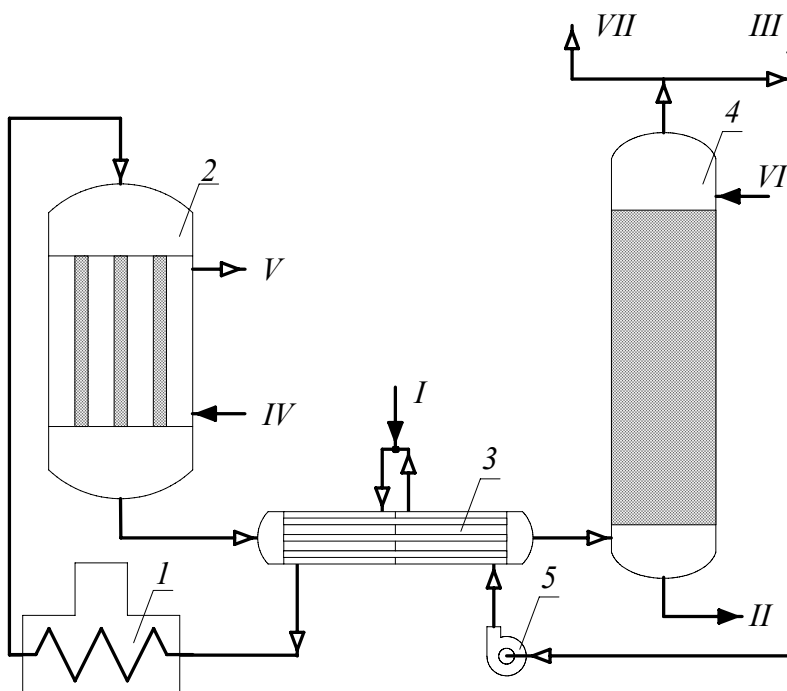


Рис. 4.1. Технологическая схема процесса окислительной конверсии метанола: I – печь; 2 – реактор; 3 – теплообменник; 4 – абсорбер; 5 – газодувка; I – метанол; II – формалин; III – воздух; IV, VI – конденсат; V – пар; VII – отходящие газы

Таблица 4.1

Параметры входных потоков

Поток	Описание	Параметры состояния*						
		w_1	w_2	w_3	w_4	w_5	G	t
$q1$	Свежий воздух	0	0,233	0	0	0,005	1,365	17
$q4$	Жидкий метанол	1	0	0	0	0	0,388	17
$q11$	Абсорбент (вода)	0	0	0	0	1	0,270	17

* w_i – массовая доля i -го компонента (1 – метанол; 2 – кислород; 3 – формальдегид; 4 – CO; 5 – вода); G – массовый расход потока, кг/с; t – температура потока, °C.

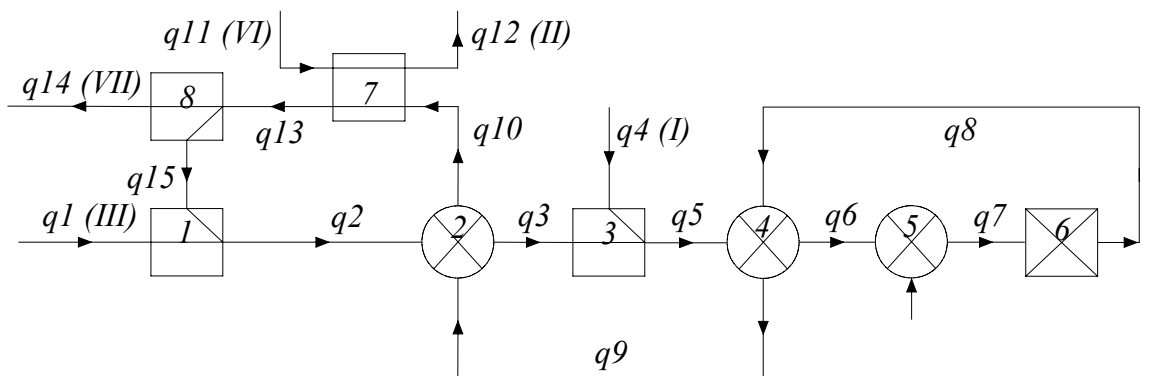


Рис. 4.2. Топологическая модель ХТС окислительной конверсии метанола:
 1, 3 – смесители; 2, 4 – recuperативные теплообменники;
 5 – печь; 6 – реактор; 7 – абсорбер;
 8 – делитель потока

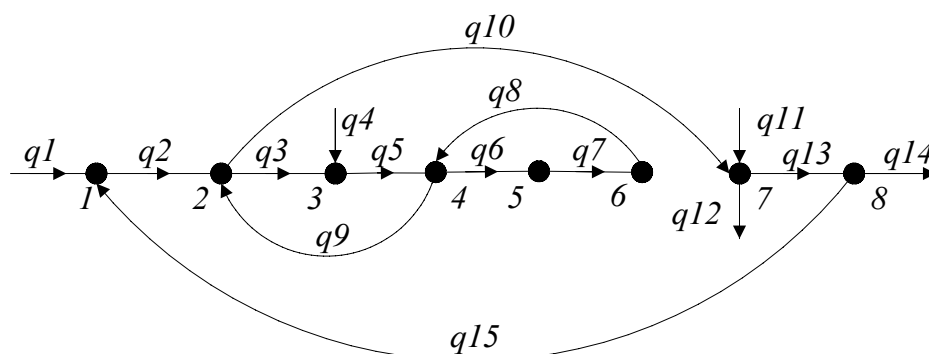


Рис. 4.3. ППГ ХТС окислительной конверсии метанола

Таблица 4.2

Конструктивные и технологические параметры элементов ХТС

Номер элемента	Описание	Параметры
2	Теплообменник	Площадь поверхности $F_2 = 480 \text{ м}^2$; коэффициент теплопередачи $K_2 = 40 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$
4	Теплообменник	Площадь поверхности $F_4 = 480 \text{ м}^2$; коэффициент теплопередачи $K_4 = 40 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$
5	Печь	Тепловая нагрузка $q_{\text{п}} = 1,4 \cdot 10^5 \text{ Дж/с}$
6	Реактор	Модель представлена в подразделе 3.2
7	Абсорбер	Степень абсорбции формальдегида и метанола $\beta = 0,995$; разница входной и выходной температур потока $\Delta t = 15^\circ\text{C}$
8	Делитель потока	Коэффициент деления $\gamma = 1/3$

Анализ структуры ХТС

1. Выделение комплексов

Матрица смежности

$$\text{ORIGIN} := 1 \quad A := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Матрица путей

$$n := \text{rows}(A) \quad i := 1..n \quad j := 1..n$$

$$C := \sum_{i=1}^n A^i \quad C_{i,j} := \text{if}(C_{i,j} > 0, 1, 0) \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Матрица бикомпонентов

$$D := \overrightarrow{(C \cdot C^T)} \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Следовательно, в ХТС имеется один комплекс, в который входят все ее элементы

2. Идентификация контуров

Структурная матрица

ORIGIN:= 0

S :=

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
0	0	-1	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	-1	1	0	1	0
1	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
2	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0
3	0	0	0	1	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	1	-1	0	1	-1	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	-1	-1	0	0
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	-1	-1

обращение к подпрограмме выделения контуров в графе, записанной в файле Contours.mcd (см. подраздел 2.2):

➔ Ссылка: E:\Andrew\мои книги\Моделирование ХТП\Пособие\Contours.mcd(R)

Contours (S) =

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
0	0	0.01	2	0.02	3	0.03	5	0.04	9	0.02	0	0	0	0
1	0	0.01	2	0.02	10	0.07	13	0.08	15	0.01	0	0	0	0
2	0	0.01	2	0.02	3	0.03	5	0.04	6	0.05	7	0.06	8	0.04

3. Определение оптимального множества разрываемых дуг

Матрица контуров

K :=

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0
1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0	1
2	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0

обращение к подпрограмме поиска особых разрываемых дуг в графе, записанной в файле Special_arcs.mcd (см. подраздел 2.3):

➔ Ссылка: E:\Andrew\мои книги\Моделирование ХТП\Пособие\Special arcs.mcd(R)

$w_0 := 0$ Special(K, w) = (2 3 6) - оптимальное множество разрываемых дуг

4. Определение упорядоченной последовательности расчета ХТС

Матрица смежности разомкнутой ХТС

ORIGIN := 1

$$A := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

обращение к подпрограмме определения упорядоченной последовательности расчета ХТС, записанной в файле Order.mcd (см. подраздел 2.4):

➔ Ссылка: E:\Andrew\мои книги\Моделирование ХТП\Пособие\Order.mcd(R)

Order(A) = (3 5 6 4 2 7 8 1) - упорядоченная последовательность расчета ХТС

Разработка математических моделей элементов ХТС

ORIGIN := 0

Справочные данные, необходимые для моделирования:

молярные массы веществ (компонентов потоков) - см. пункт 2.1.3, пример Б

молярные теплоемкости газообразных веществ - см. пункт 2.1.3, пример Б

теплоты испарения жидких веществ при $t = 0$ С, кДж/кг $r_1 := 1198.3$ $r_5 := 2493.1$

средняя удельная теплоемкость жидкого метанола, Дж/кг $cp_1 := 2514$

Вспомогательные функции:

удельные теплоемкости газообразных компонентов потока, Дж/(кг * К)

$$Cp_1(t) := \frac{CM_1(t)}{M_1} \quad Cp_2(t) := \frac{CM_2(t)}{M_2} \quad Cp_3(t) := \frac{CM_3(t)}{M_3}$$

$$Cp_4(t) := \frac{CM_4(t)}{M_4} \quad Cp_5(t) := \frac{CM_5(t)}{M_5} \quad Cp_6(t) := \frac{CM_6(t)}{M_6}$$

$$Cp(t) := (Cp_1(t) \quad Cp_2(t) \quad Cp_3(t) \quad Cp_4(t) \quad Cp_5(t) \quad Cp_6(t))^T$$

удельная теплоемкость газофазного потока, Дж/кг

$$Cp(Q) := \sum_{i=0}^4 (Q_i \cdot Cp(Q_6)_i) + \left(1 - \sum_{i=0}^4 Q_i\right) \cdot Cp(Q_6)_5 \quad \text{где } Q = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \\ w_5 \\ G \\ t \end{pmatrix} \quad \text{- вектор параметров состояния технологического потока}$$

удельные энтальпии газообразных компонент(потока), Дж/кг

$$h1(t) := r1 + Cp1(t) \cdot t \quad h2(t) := Cp2(t) \cdot t \quad h3(t) := Cp3(t) \cdot t$$

$$h4(t) := Cp4(t) \cdot t \quad h5(t) := r5 + Cp5(t) \cdot t \quad h6(t) := Cp6(t) \cdot t$$

$$h(t) := (h1(t) \quad h2(t) \quad h3(t) \quad h4(t) \quad h5(t) \quad h6(t))^T$$

удельная энтальпия газофазного(потока), Дж/кг

$$H(Q) := \sum_{i=0}^4 (Q_i \cdot h(Q_6)_i) + \left(1 - \sum_{i=0}^4 Q_i\right) \cdot h(Q_6)_5$$

Математическая модель смесителя 1 (выходной поток Q2)

- модель составляется на основе уравнений материального и теплового балансов

$$\left. \begin{array}{l} \text{Given } Q1_0 \cdot Q1_5 + Q15_0 \cdot Q15_5 = Q2_0 \cdot Q2_5 \\ Q1_1 \cdot Q1_5 + Q15_1 \cdot Q15_5 = Q2_1 \cdot Q2_5 \\ Q1_2 \cdot Q1_5 + Q15_2 \cdot Q15_5 = Q2_2 \cdot Q2_5 \\ Q1_3 \cdot Q1_5 + Q15_3 \cdot Q15_5 = Q2_3 \cdot Q2_5 \\ Q1_4 \cdot Q1_5 + Q15_4 \cdot Q15_5 = Q2_4 \cdot Q2_5 \end{array} \right\} \text{- уравнения материального баланса по каждому из компонентов}$$

$$Q1_5 + Q15_5 = Q2_5 \quad \text{- уравнение общего материального баланса}$$

$$Q1_5 \cdot H(Q1) + Q15_5 \cdot H(Q15) = Q2_5 \cdot H(Q2) \quad \text{- уравнение теплового баланса}$$

$\Delta 1(Q1, Q15, Q2) := \text{Minerr}(Q2)$ - вектор выходных переменных элемента, заданный как функция векторов входных переменных

Математическая модель теплообменника 2(выходные потоки Q3 и Q10)

- модель составляется на основе уравнений теплового баланса и теплопередачи
- массовый расход и составы потоков не изменяются

$$N(Q2, Q9) := \frac{Q9_5 \cdot CP(Q9)}{Q2_5 \cdot CP(Q2)} \quad M(Q9, K2, F2) := \frac{K2 \cdot F2}{Q9_5 \cdot CP(Q9)}$$

$$t3(Q2, Q9, K2, F2) := Q2_6 + (Q9_6 - Q2_6) \cdot N(Q2, Q9) \cdot \frac{\exp[M(Q9, K2, F2) \cdot (1 - N(Q2, Q9))] - 1}{\exp[M(Q9, K2, F2) \cdot (1 - N(Q2, Q9))] - N(Q2, Q9)}$$

$$t10(Q2, Q9, K2, F2) := Q9_6 - \frac{t3(Q2, Q9, K2, F2) - Q2_6}{N(Q2, Q9)}$$

$$\Delta 2(Q2, Q9, K2, F2) := \begin{pmatrix} Q3 & Q10 \\ Q2_0 & Q9_0 \\ Q2_1 & Q9_1 \\ Q2_2 & Q9_2 \\ Q2_3 & Q9_3 \\ Q2_4 & Q9_4 \\ Q2_5 & Q9_5 \\ t3(Q2, Q9, K2, F2) & t10(Q2, Q9, K2, F2) \end{pmatrix} \quad \text{- модель теплообменника как векторная функция}$$

Математическая модель смесителя 3(выходной поток Q5)

- модель составляется аналогично модели смесителя 1;
- отличие - в уравнении теплового баланса

Given

$$Q3_0 \cdot Q3_5 + Q4_0 \cdot Q4_5 = Q5_0 \cdot Q5_5 \quad Q3_1 \cdot Q3_5 + Q4_1 \cdot Q4_5 = Q5_1 \cdot Q5_5$$

$$Q3_2 \cdot Q3_5 + Q4_2 \cdot Q4_5 = Q5_2 \cdot Q5_5 \quad Q3_3 \cdot Q3_5 + Q4_3 \cdot Q4_5 = Q5_3 \cdot Q5_5$$

$$Q3_4 \cdot Q3_5 + Q4_4 \cdot Q4_5 = Q5_4 \cdot Q5_5 \quad Q3_5 + Q4_5 = Q5_5$$

$$Q3_5 \cdot H(Q3) + Q4_5 \cdot cp1 \cdot Q4_6 = Q5_5 \cdot H(Q5) \quad \text{- уравнение теплового баланса с участием жидкофазного потока метанола (q4), который испаряется за счет тепла потока q3}$$

$$\Delta 3(Q3, Q4, Q5) := \text{Minerr}(Q5)$$

Математическая модель теплообменника 4 (выходные потоки Q6 и Q9)

- модель полностью аналогична модели теплообменника 2

$$\Delta 4 (Q5, Q8, K4, F4) := \Delta 2 (Q5, Q8, K4, F4)$$

Математическая модель печи 5 (выходной поток Q7)

- печь рассматривается как теплообменник с фиксированной тепловой нагрузкой

$$t7(Q6, q\Pi) := Q6_6 + \frac{q\Pi}{Q6_5 \cdot CP(Q6)}$$

$$\Delta 5 (Q6, q\Pi) := \left(Q6_0 \quad Q6_1 \quad Q6_2 \quad Q6_3 \quad Q6_4 \quad Q6_5 \quad t7(Q6, q\Pi) \right)^T$$

Математическая модель реактора 6 (выходной поток Q8)

- модель получена в подразделе 3.2, поэтому вызываем ее, ссылаясь на соответствующий файл Mathcad:

☞ Ссылка: E:\Andrew\мои книги\Моделирование ХТП\Пособие\Reactor.mcd(R)

$$\Delta 6 (Q7) := \left(y(Q7)_0 \quad y(Q7)_1 \quad y(Q7)_2 \quad y(Q7)_3 \quad y(Q7)_4 \quad Q7_5 \quad 160 \right)^T$$

Математическая модель абсорбера 7 (выходные потоки Q12 и Q13)

	Q12	Q13	
$g(Q10, Q11, \beta) :=$	$\beta \cdot Q10_0 \cdot Q10_5$	$(1 - \beta) \cdot Q10_0 \cdot Q10_5$	- находим покомпонентные расходы выходных потоков
	0	$Q10_1 \cdot Q10_5$	
	$\beta \cdot Q10_2 \cdot Q10_5$	$(1 - \beta) \cdot Q10_2 \cdot Q10_5$	
	0	$Q10_3 \cdot Q10_5$	
	$\beta \cdot Q10_4 \cdot Q10_5 + Q11_5$	$(1 - \beta) \cdot Q10_4 \cdot Q10_5$	

$$G(Q10, Q11, \beta) := \left(\sum g(Q10, Q11, \beta)^{\langle 0 \rangle} \quad Q10_5 + Q11_5 - \sum g(Q10, Q11, \beta)^{\langle 0 \rangle} \right) \text{ - определяем общие расходы выходных потоков}$$

$$t(Q10, Q11, \Delta t) := \left(Q11_6 + \Delta t \quad Q10_6 - \Delta t \right) \text{ - вычисляем температуры выходных потоков}$$

$$w(Q10, Q11, \beta) := \begin{bmatrix} \frac{g(Q10, Q11, \beta)_{0,0}}{(G(Q10, Q11, \beta)^T)_0} & \frac{g(Q10, Q11, \beta)_{0,1}}{(G(Q10, Q11, \beta)^T)_1} \\ \frac{g(Q10, Q11, \beta)_{1,0}}{(G(Q10, Q11, \beta)^T)_0} & \frac{g(Q10, Q11, \beta)_{1,1}}{(G(Q10, Q11, \beta)^T)_1} \\ \frac{g(Q10, Q11, \beta)_{2,0}}{(G(Q10, Q11, \beta)^T)_0} & \frac{g(Q10, Q11, \beta)_{2,1}}{(G(Q10, Q11, \beta)^T)_1} \\ \frac{g(Q10, Q11, \beta)_{3,0}}{(G(Q10, Q11, \beta)^T)_0} & \frac{g(Q10, Q11, \beta)_{3,1}}{(G(Q10, Q11, \beta)^T)_1} \\ \frac{g(Q10, Q11, \beta)_{4,0}}{(G(Q10, Q11, \beta)^T)_0} & \frac{g(Q10, Q11, \beta)_{4,1}}{(G(Q10, Q11, \beta)^T)_1} \end{bmatrix} \quad \text{- находим составы Выходных потоков}$$

- формируем модель абсорбера, объединяя вышезаданные функции:

$$\Delta 7 (Q10, Q11, \beta, \Delta t) := \text{stack} (w(Q10, Q11, \beta), G(Q10, Q11, \beta), t(Q10, Q11, \Delta t))$$

Математическая модель делителя потоков 8 (выходные потоки Q13 и Q14)

- механическое разделение входящего потока на два выходящих без изменения состава и температуры

$$\Delta 8 (Q13, \gamma) := \begin{bmatrix} \text{Q14} & \text{Q15} \\ Q13_0 & Q13_0 \\ Q13_1 & Q13_1 \\ Q13_2 & Q13_2 \\ Q13_3 & Q13_3 \\ Q13_4 & Q13_4 \\ Q13_5 \cdot (1 - \gamma) & Q13_5 \cdot \gamma \\ Q13_6 & Q13_6 \end{bmatrix}$$

Расчет ХТС декомпозиционным методом

Исходные данные для расчета

$$\begin{matrix}
 Q1 := & \begin{pmatrix} 0 \\ 0.233 \\ 0 \\ 0 \\ 0.005 \\ 1.365 \\ 17 \end{pmatrix} & Q4 := & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0.388 \\ 17 \end{pmatrix} & Q11 := & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0.270 \\ 17 \end{pmatrix} & Q_Init := & \begin{pmatrix} 0.088 \\ 0.212 \\ 0.01 \\ 0.01 \\ 0.01 \\ 4.46 \\ 155 \end{pmatrix} & \text{- вектор нулевых} \\
 & & & & & & & & \text{приближений} \\
 & & & & & & & & \text{параметров} \\
 & & & & & & & & \text{состояния потока}
 \end{matrix}$$

$$K2 := 40 \quad K4 := 40 \quad F2 := 480 \quad F4 := 480 \quad q\Pi := 1.4 \cdot 10^5 \quad \Delta t := 15 \quad \beta := 0.995 \quad \gamma := \frac{2}{3}$$

Нахождение параметров разорванных потоков

разорванными являются потоки 2, 3 и 6, поэтому векторы параметров состояния этих потоков обозначим как X2, X3 и X6 соответственно

1) выражаем параметры разорванных потоков как функции параметров разорванных потоков

$$\begin{matrix}
 \phi_2 (X2, X3, X6) := & \begin{cases} Q7 \leftarrow \Delta 5 (X6, q\Pi) \\ Q8 \leftarrow \Delta 6 (Q7) \\ Q5 \leftarrow \Delta 3 (X3, Q4, Q_Init) \\ Q9 \leftarrow \Delta 4 (Q5, Q8, K4, F4) \langle 1 \rangle \\ Q10 \leftarrow \Delta 2 (X2, Q9, K2, F2) \langle 1 \rangle \\ Q13 \leftarrow \Delta 7 (Q10, Q11, \beta, \Delta t) \langle 1 \rangle \\ Q15 \leftarrow \Delta 8 (Q13, \gamma) \langle 1 \rangle \\ Q2 \leftarrow \Delta 1 (Q1, Q15, Q_Init) \end{cases} & \phi_3 (X2, X3, X6) := & \begin{cases} Q5 \leftarrow \Delta 3 (X3, Q4, Q_Init) \\ Q7 \leftarrow \Delta 5 (X6, q\Pi) \\ Q8 \leftarrow \Delta 6 (Q7) \\ Q9 \leftarrow \Delta 4 (Q5, Q8, K4, F4) \langle 1 \rangle \\ Q3 \leftarrow \Delta 2 (X2, Q9, K2, F2) \langle 0 \rangle \end{cases} \\
 & & \phi_6 (X2, X3, X6) := & \begin{cases} Q7 \leftarrow \Delta 5 (X6, q\Pi) \\ Q8 \leftarrow \Delta 6 (Q7) \\ Q5 \leftarrow \Delta 3 (X3, Q4, Q_Init) \\ Q6 \leftarrow \Delta 4 (Q5, Q8, K4, F4) \langle 0 \rangle \end{cases}
 \end{matrix}$$

2) задаем функции ошибок

$$\varepsilon_2 (X2, j) := \max \left[\left| 1 - \frac{\overrightarrow{X2}^{(j+1)}}{X2^{(j)}} \right| \right]$$

$$\varepsilon_3 (X3, j) := \max \left[\left| 1 - \frac{\overrightarrow{X3}^{(j+1)}}{X3^{(j)}} \right| \right]$$

$$\varepsilon_6 (X6, j) := \max \left[\left| 1 - \frac{\overrightarrow{X6}^{(j+1)}}{X6^{(j)}} \right| \right]$$

$$\varepsilon (X2, X3, X6, j) := \max(\varepsilon_2 (X2, j), \varepsilon_3 (X3, j), \varepsilon_6 (X6, j)) \quad \text{err} := 0.01 - \text{задаем точность решения}$$

3) решаем систему уравнений относительно параметров разорванных потоков методом простой итерации

$$\begin{pmatrix} Q2 \\ Q3 \\ Q6 \end{pmatrix} := \begin{array}{l} (j, E) \leftarrow (0, 1) \\ \begin{pmatrix} X2^{(0)} \\ X3^{(0)} \\ X6^{(0)} \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} Q_Init \\ Q_Init \\ Q_Init \end{pmatrix} \\ \text{while } E > \text{err} \\ \left| \begin{pmatrix} X2^{(j+1)} \\ X3^{(j+1)} \\ X6^{(j+1)} \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} \phi_2(X2^{(j)}, X3^{(j)}, X6^{(j)}) \\ \phi_3(X2^{(j)}, X3^{(j)}, X6^{(j)}) \\ \phi_6(X2^{(j)}, X3^{(j)}, X6^{(j)}) \end{pmatrix} \right. \\ E \leftarrow \varepsilon(X2, X3, X6, j) \\ \left. j \leftarrow j + 1 \right. \\ \begin{pmatrix} X2^{(j)} \\ X3^{(j)} \\ X6^{(j)} \end{pmatrix} \end{array}$$

$$Q2 = \begin{pmatrix} 4.434 \times 10^{-5} \\ 0.189 \\ 2.895 \times 10^{-4} \\ 0.012 \\ 2.055 \times 10^{-3} \\ 3.687 \\ 23.328 \end{pmatrix}$$

$$Q3 = \begin{pmatrix} 4.443 \times 10^{-5} \\ 0.191 \\ 2.895 \times 10^{-4} \\ 0.012 \\ 2.055 \times 10^{-3} \\ 3.688 \\ 88.657 \end{pmatrix}$$

$$Q6 = \begin{pmatrix} 0.095 \\ 0.172 \\ 2.619 \times 10^{-4} \\ 0.011 \\ 1.859 \times 10^{-3} \\ 4.075 \\ 146.421 \end{pmatrix}$$

После нахождения параметров разорванных потоков рассчитываем ХТС декомпозиционным методом в следующей последовательности элементов: {3, 5, 6, 4, 2, 7, 8, 1}. Результаты расчета параметров состояния всех потоков ХТС сведены в таблицу, представленную ниже.

**Расчет ХТС декомпозиционным методом
в соответствии с упорядоченной последовательностью**

$$Q5 := \Delta3(Q3, Q4, Q_Init) \quad Q7 := \Delta5(Q6, q\Pi) \quad Q8 := \Delta6(Q7) \quad Q9 := \Delta4(Q5, Q8, K4, F4)^{\langle 1 \rangle} \quad Q10 := \Delta2(Q2, Q9, K2, F2)^{\langle 1 \rangle}$$

$$Q12 := \Delta7(Q10, Q11, \beta, \Delta t)^{\langle 0 \rangle} \quad Q13 := \Delta7(Q10, Q11, \beta, \Delta t)^{\langle 1 \rangle} \quad Q14 := \Delta8(Q13, \gamma)^{\langle 0 \rangle} \quad Q15 := \Delta8(Q13, \gamma)^{\langle 1 \rangle}$$

Параметры состояния потоков ХТС производства формальдегида

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
0	0	0	0	1	0.095	0.095	0.095	0.012	0.012	0.012	0	0.057	0	0	0
1	0.233	0.189	0.191	0	0.173	0.172	0.172	0.14	0.14	0.14	0	0	0.164	0.164	0.164
2	0	0	0	0	0	0	0	0.079	0.079	0.079	0	0.37	0	0	0
3	0	0.012	0.012	0	0.011	0.011	0.011	0.016	0.016	0.016	0	0	0.019	0.019	0.019
4	0.005	0.002	0.002	0	0.002	0.002	0.002	0.055	0.055	0.055	1	0.574	0	0	0
5	1.365	3.687	3.688	0.388	4.076	4.075	4.075	4.075	4.075	4.075	0.27	0.862	3.483	1.161	2.322
6	17	23.328	88.657	17	80.609	146.421	177.908	160	96.971	42.027	17	32	27.027	27.027	...

📌 Задания для самостоятельного выполнения

1. Рассчитать ХТС гидроочистки дизельного топлива. Описание процесса и исходные данные для расчета представлены ниже.

Технологическая схема. Технологическая схема процесса изображена на рис. 4.4. Сырье (прямогонная дизельная фракция) смешивается с циркуляционным и водородсодержащим газами и затем нагревается в противоточных теплообменниках 1 горячим потоком смеси до 285–300°C. Подогретая парожидкостная смесь разогревается в трубчатой печи 2 до температуры реакции 360–420°C и поступает в реактор 3, где сернистые соединения сырья (меркаптаны, сульфиды, производные тиофена) гидрируются с образованием H₂S. Кроме реакций гидрирования, в реакторе происходит частичный крекинг с образованием углеводородного газа и легких бензиновых фракций. Смесь после реакции отдает теплоту газосырьевой смеси в теплообменниках 1, охлаждается в воздушных теплообменниках 4 до 60–80°C и в водяных холодильниках 5 до 40–50°C, а затем направляется в сепаратор высокого давления 6. Из сепаратора циркуляционный газ поступает в абсорбер 7 на очистку от H₂S. Абсорбция проводится 15%-ным раствором моноэтаноламина. Очищенный газ частично возвращается в цикл, а частично отводится из установки. Нестабильный гидрогенизат направляется в сепаратор низкого давления и стабилизационную колонну на дальнейшую переработку.

Исходные данные для расчета. Параметры состояния входных технологических потоков представлены в табл. 4.3 (см. на с. 103). Параметры оборудования приведены в табл. 4.4 (см. на с. 104).

Математические модели элементов ХТС

Смеситель потоков. Линейная математическая модель смесителя имеет следующий вид:

$$G_{\text{ВЫХ}} = \sum_{i=1}^n G_{\text{ВХ},i}; \quad G_{\text{ВЫХ},j} = \sum_{i=1}^n G_{\text{ВХ},ij}; \quad j = 1, 2, \dots, m;$$
$$T_{\text{ВЫХ}} = 0,91T_{\text{ВХ},1} - 0,25 \cdot 10^{-6} G_{\text{ВХ},1} + 0,082T_{\text{ВХ},2} - 0,5 \cdot 10^{-5} G_{\text{ВХ},2} + \\ + 0,006T_{\text{ВХ},3} + 0,55 \cdot 10^{-5} G_{\text{ВХ},3},$$

где $G_{\text{ВЫХ}}$, $G_{\text{ВХ},i}$ – суммарные расходы выходного и входных потоков соответственно; $G_{\text{ВЫХ},j}$, $G_{\text{ВХ},ij}$ – расходы компонентов выходного и входных потоков соответственно; $T_{\text{ВЫХ}}$, $T_{\text{ВХ},i}$ – температуры выходного и входных потоков соответственно; m – число компонентов в потоке; n – число входных потоков.

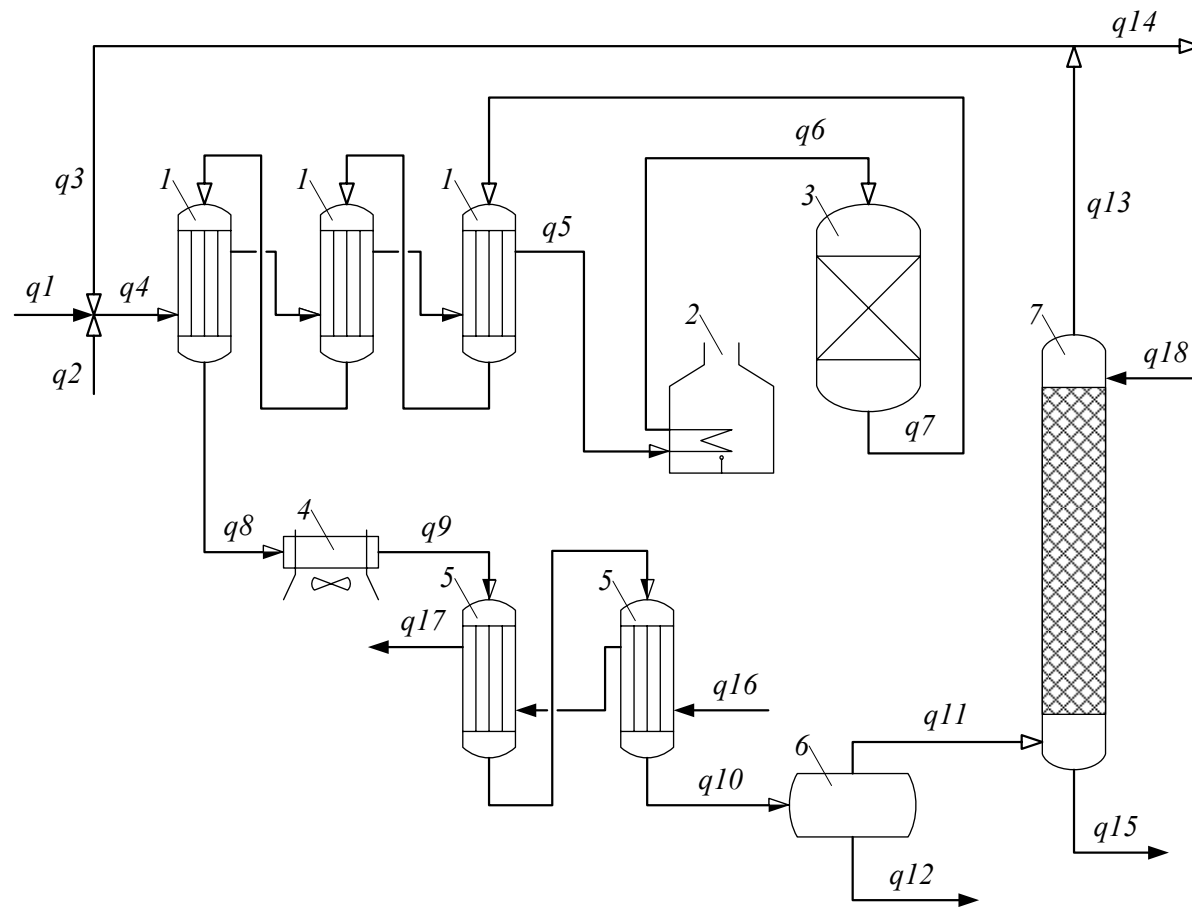


Рис. 4.4. Технологическая схема процесса гидроочистки дизельного топлива:
 1 – сырьевой теплообменник; 2 – печь; 3 – реактор; 4 – воздушный холодильник;
 5 – водяной холодильник; 6 – сепаратор; 7 – абсорбер

Параметры состояния входных потоков ХТС гидроочистки

Параметр	Значение
Расход сырья на входе в систему (поток $q1$), кг/ч	75 000
В том числе:	
– дизельное топливо	74 925
– сернистые соединения (в пересчете на серу)	75
Температура потока $q1$, °С	55
Расход водородсодержащего газа (поток $q2$), кг/ч	520
В том числе:	
– водород	275,6
– углеводороды (парафины) (C_1-C_5)	243,9
– сероводород	По разности
Температура потока $q2$, °С	20
Расход абсорбента (поток $q18$), кг/ч	10 000
В том числе:	
– сероводород	15
– раствор моноэтаноламина	9 985
Температура потока $q18$, °С	20
Расход охлаждающей воды в водяных холодильниках, кг/ч	65 000
Начальная температура воды (поток $q16$), °С	25

Линейное уравнение регрессии для расчета температуры выходного потока получено в результате проведения эксперимента на детерминированной модели с помощью метода полного факторного эксперимента в достаточно узком интервале изменения параметров.

Сырьевой теплообменник. При прохождении через теплообменник расход и состав потоков не меняется, т. е. все расходы в выходных потоках равны расходам в соответствующих входных потоках:

– общие расходы

$$G_{\text{ВЫХ}} = G_{\text{ВХ}};$$

– расходы компонентов потоков

$$G_{\text{ВЫХ},j} = G_{\text{ВХ},j}.$$

Температуры выходных потоков вычисляются по регрессионным уравнениям:

$$T5 = 0,2T4 - 0,3 \cdot 10^{-3} G4 + 0,73T7 - 54,2 + 0,499 \cdot 10^{-3} k1F1n1;$$

$$T8 = 0,62T4 + 0,21T7 + 0,8 \cdot 10^{-3} G7 + 49,15 - 0,539 \cdot 10^{-3} k1F1n1.$$

Индексы у переменных соответствуют номерам потоков на технологической схеме.

Таблица 4.4

Параметры оборудования

Параметр	Значение
<i>Сырьевой теплообменник:</i>	
поверхность теплообмена $F_1, \text{м}^2$	221
коэффициент теплопередачи $k_1, \text{Вт}/(\text{м}^2 \cdot ^\circ\text{C})$	218,6
число теплообменников $n_1, \text{шт.}$	3
<i>Печь:</i> тепловая нагрузка $q_{\text{п}}, \text{кВт}$	
8722,5	
<i>Реактор:</i>	
степень превращения (в расчете на серу) $\alpha, \%$	81,3
расход реагентов на 1 кг превращения серы, кг/кг:	
– водород r_{H_2}	2,9
– дизельное топливо r_{D}	27,54
выход продуктов на 1 кг превращенной серы, кг/кг:	
– сероводород $r_{\text{H}_2\text{S}}$	1
– углеводороды (парафины) r_{U}	8,24
– бензин r_{B}	22,2
<i>Воздушный холодильник:</i> тепловая нагрузка $q_{\text{x}}, \text{кВт}$	
4652	
<i>Водяной холодильник:</i>	
поверхность теплообмена $F_2, \text{м}^2$	200
коэффициент теплопередачи $k_2, \text{Вт}/(\text{м}^2 \cdot ^\circ\text{C})$	216
число аппаратов $n_2, \text{шт.}$	2
<i>Сепаратор:</i> давление, Па	
$5 \cdot 10^8$	
<i>Абсорбер:</i>	
степень абсорбции $\beta, \%$	99,4
разность температур на входе и на выходе абсорбера $\Delta t, ^\circ\text{C}$	5
<i>Делитель потока:</i> коэффициент деления потока γ	
0,96	

Печь. При прохождении через печь расход и состав потоков не меняется:

$$G_{\text{ВЫХ}} = G_{\text{ВХ}}; \quad G_{\text{ВЫХ},j} = G_{\text{ВХ},j}.$$

Температура выходного потока рассчитывается по формуле

$$T_{\text{ВЫХ}} = T_{\text{ВХ}} - 0,11 \cdot 10^{-2} G_{\text{ВХ}} + 90,5 + 1,04 \cdot 10^{-2} q_{\text{п}}.$$

Реактор. Математическая модель реактора имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} G_{\text{ВЫХ}} &= G_{\text{ВХ}}; \\ G_{\text{ВЫХ},j} &= G_{\text{ВХ},j} + r_j \alpha G_{\text{ВХ},S}; \\ T_{\text{ВЫХ}} &= p T_{\text{ВХ}}, \end{aligned}$$

где r_j – расходный коэффициент j -го компонента; $G_{\text{ВХ},S}$, α – соответственно расход и степень превращения серы, поступающей в реактор;

$p = 1,024$ – коэффициент статистического уравнения, полученный в результате анализа показателей функционирования производств-аналогов.

Воздушный холодильник. При прохождении через холодильник расход и состав потоков не меняется:

$$G_{\text{ВЫХ}} = G_{\text{ВХ}}; \quad G_{\text{ВЫХ},j} = G_{\text{ВХ},j}.$$

Температура выходного потока находится по выражению

$$T_{\text{ВЫХ}} = T_{\text{ВХ}} + 0,967 \cdot 10^{-3} G_{\text{ВХ}} - 79,35 - 0,017 q_x.$$

Водяной холодильник. При прохождении через теплообменник расход и состав потоков не меняется:

$$G_{\text{ВЫХ}} = G_{\text{ВХ}}; \quad G_{\text{ВЫХ},j} = G_{\text{ВХ},j}.$$

Температуры выходных потоков вычисляются по регрессионным уравнениям

$$T_{10} = 0,29T_9 + 0,14 \cdot 10^{-3} G_9 + 0,35T_{16} - 0,25 \cdot 10^{-4} G_{16} +$$

$$+ 0,147 \cdot 10^{-3} k_2 F_2 n_2;$$

$$T_{17} = 0,27T_9 + 0,125 \cdot 10^{-4} G_9 + 0,73T_{16} - 0,14 \cdot 10^{-3} G_{16} +$$

$$+ 0,215 \cdot 10^{-3} k_2 F_2 n_2.$$

Индексы у переменных соответствуют номерам потоков на технологической схеме.

Сепаратор. Параметры состояния выходных потоков определяются из уравнений линейной регрессии:

– для газовой фазы

$$G_{\text{ВЫХ}} = G_{\text{ВХ.H}_2} + G_{\text{ВХ.U}} + G_{\text{ВХ.H}_2\text{S}} + G_{\text{ВХ.B}} - 0,7116 \cdot 10^{-2} G_{\text{ВХ.D}} + 27,361 T_{\text{ВХ}} - 2764,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.H}_2} = G_{\text{ВХ.H}_2} - 0,1 \cdot 10^{-3} G_{\text{ВХ.D}} - 0,9 \cdot 10^{-2} T_{\text{ВХ}} - 4,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.U}} = G_{\text{ВХ.U}} - 0,6 \cdot 10^{-2} G_{\text{ВХ.D}} + 10,6 T_{\text{ВХ}} - 750,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.H}_2\text{S}} = G_{\text{ВХ.H}_2\text{S}} - 0,9 \cdot 10^{-4} G_{\text{ВХ.D}} + 0,14 T_{\text{ВХ}} - 11,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.S}} = -0,16 \cdot 10^{-4} G_{\text{ВХ.D}} + 0,04 T_{\text{ВХ}} + 1,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.B}} = G_{\text{ВХ.B}} - 0,86 \cdot 10^{-3} G_{\text{ВХ.D}} + 2,59 T_{\text{ВХ}} - 1450,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.D}} = -0,5 \cdot 10^{-4} G_{\text{ВХ.D}} + 14 T_{\text{ВХ}} - 550,0;$$

– для жидкой фазы

$$G_{\text{ВЫХ}} = G_{\text{ВХ.С}} + 1,00712G_{\text{ВХ.Д}} - 27,361T_{\text{ВХ}} + 2764,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.Н}_2} = 0,1 \cdot 10^{-3} G_{\text{ВХ.Д}} + 0,9 \cdot 10^{-2} T_{\text{ВХ}} + 4,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ}} = G_{\text{ВХ.С}} + 1,00712G_{\text{ВХ.Д}} - 27,361T_{\text{ВХ}} + 2764,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.Н}_2} = 0,1 \cdot 10^{-3} G_{\text{ВХ.Д}} + 0,9 \cdot 10^{-2} T_{\text{ВХ}} + 4,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.У}} = 0,6 \cdot 10^{-2} G_{\text{ВХ.Д}} - 10,6T_{\text{ВХ}} + 750,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.Н}_2\text{S}} = 0,9 \cdot 10^{-4} G_{\text{ВХ.Д}} - 0,14T_{\text{ВХ}} + 11,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.С}} = G_{\text{ВХ.С}} + 0,16 \cdot 10^{-4} G_{\text{ВХ.Д}} - 0,04T_{\text{ВХ}} - 1,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.В}} = 0,86 \cdot 10^{-3} G_{\text{ВХ.Д}} - 2,59T_{\text{ВХ}} + 1450,0;$$

$$G_{\text{ВЫХ.Д}} = 1,00005G_{\text{ВХ.Д}} - 14T_{\text{ВХ}} + 550,0.$$

Здесь индексы U, В и D относятся к углеводородам C₁–C₅, бензину и дизельному топливу соответственно.

Абсорбер. Математическая модель абсорбера может быть представлена в следующем виде:

$$G_{\text{ВЫХ.Н}_2\text{S}}^{\Gamma} = (1 - \beta)G_{\text{ВХ.Н}_2\text{S}}^{\Gamma}; \quad G_{\text{ВЫХ.Н}_2\text{S}}^{\text{Ж}} = \beta G_{\text{ВХ.Н}_2\text{S}}^{\Gamma} + G_{\text{ВХ.Н}_2\text{S}}^{\text{Ж}};$$

$$T_{\text{ВЫХ}}^{\Gamma} = T_{\text{ВХ}}^{\Gamma} - \Delta t; \quad T_{\text{ВЫХ}}^{\text{Ж}} = T_{\text{ВХ}}^{\text{Ж}} + \Delta t.$$

Здесь β – степень абсорбции; Δt – изменение температур в газовом потоке и в абсорбенте; индексы «Г» и «Ж» относятся к газу и жидкости.

Делитель потока. Расходы k -го выходного потока получаются умножением расходов входного потока на коэффициент деления.

Ход работы:

- 1) представить ХТС в виде блок-схемы с использованием типовых технологических операторов;
- 2) представить ХТС в виде потокового графа;
- 3) выделить комплексы в графе;
- 4) определить оптимальное множество разрываемых дуг;
- 5) преобразовать замкнутую ХТС в разомкнутую. Построить блок-схему и потоковый граф разомкнутой ХТС;
- 6) определить последовательность расчета разомкнутой ХТС;
- 7) рассчитать ХТС декомпозиционным итерационным методом.

2. Рассчитать ХТС производства гликолей. Описание химизма и технологической схемы процесса приведено на с. 60–66.

Исходные данные для расчета. Параметры состояния входных потоков вычислить, используя следующую подпрограмму (синтаксис программы Mathcad):

$$\begin{pmatrix} G1 \\ T1 \\ G2 \\ T2 \end{pmatrix} := \begin{array}{l} \text{for } i \in 1..10 \cdot n \\ \left| \begin{array}{l} G1 \leftarrow \text{ceil}(\text{rnd}(20)) \cdot 10 + 2100 \\ T1 \leftarrow \text{ceil}(\text{rnd}(10)) + 15 \\ G2 \leftarrow \text{ceil}(\text{rnd}(10)) \cdot 10 + 900 \end{array} \right. \\ \left| (G1 \ T1 \ G2 \ T1)^T \right. \end{array}$$

Здесь $G1$ – массовый расход потока $q1$, кг/ч; $T1$ – температура потока $q1$, °C; $G2$ – массовый расход потока $q2$, кг/ч; $T2$ – температура потока $q2$, °C; n – номер студента по журналу.

Рассчитанные параметры состояния входных потоков сообщить преподавателю.

Математические модели элементов ХТС. Зависимости между выходными и входными переменными элементов ХТС представлены линейными регрессионными уравнениями, полученными в результате реализации численного полного факторного эксперимента на физико-химических моделях соответствующих элементов ХТС. Массовые расходы выражены в килограммах в час, температуры – в градусах Цельсия.

Математическое описание сырьевого смесителя. Общий и по-компонентные массовые расходы потока $q4$ находятся по уравнениям материального баланса:

$$\begin{aligned} G4 &= G1 + G2 + G3; \\ G4_i &= G1_i + G2_i + G3_i; \quad i = 1, 2, \dots, m, \end{aligned}$$

где m – число компонентов в потоке.

Температура потока, выходящего из смесителя, рассчитывается по формуле

$$\begin{aligned} T4 &= 1,075 + 0,113T1 - 3,427 \cdot 10^{-4}G1 - 9,432 \cdot 10^{-4}G2 + \\ &+ 0,875T3 + 7,083 \cdot 10^{-5}G3. \end{aligned}$$

Математическое описание теплообменника. При прохождении через теплообменник расходы и составы потоков не меняются, т. е.

$$G5 = G4; G5_i = G4_i; i = 1, 2, \dots, m;$$

$$G7 = G6; G7_i = G6_i; i = 1, 2, \dots, m.$$

Температуры выходных потоков определяются по следующим уравнениям:

$$T5 = 25,546 - 9,025 \cdot 10^{-4} G4 + 0,203T4 + 0,827T6;$$

$$T7 = 282,438 + 2,739 \cdot 10^{-3} G4 + 2,853T4 - 1,616T6.$$

Математическое описание реактора. Выходные переменные реактора связаны с входными следующими выражениями:

– массовый расход оксида этилена

$$G6_{\text{ЭО}} = -76,42401 - 1,15832 \cdot 10^{-3} G5 + 0,01269G5_{\text{ЭО}} + 0,37805T5;$$

– массовый расход воды

$$G6_{\text{H}_2\text{O}} = 565,44736 + 0,02572G5 - 0,35703G5_{\text{ЭО}} + 0,96312G5_{\text{H}_2\text{O}} - \\ - 2,56851T5;$$

– массовый расход этиленгликоля

$$G6_{\text{ЭГ}} = 555,86038 + 0,03374G5 + 0,93077G5_{\text{ЭО}} + \\ + 0,7785G5_{\text{ЭГ}} - 2,7174T5;$$

– массовый расход диэтиленгликоля

$$G6_{\text{ДЭГ}} = -2,11633 \cdot 10^4 + 0,14878G5 - 0,0983G5_{\text{ЭО}} + 0,55194G5_{\text{ДЭГ}} + \\ + 98,39124T5;$$

– массовый расход триэтиленгликоля

$$G6_{\text{ТЭГ}} = -2,44224 \cdot 10^3 + 0,01589G5 - 4,43681 \cdot 10^{-3} G5_{\text{ЭО}} + \\ + 4,39624G5_{\text{ТЭГ}} + 11,33272T5;$$

– массовый расход ацетальдегида

$$G6_{\text{АА}} = -13,09747 + 5,38516 \cdot 10^{-5} G5 + 1,35649 \cdot 10^{-3} G5_{\text{ЭО}} + \\ + 1,00175G5_{\text{АА}} + 0,06207T5;$$

– температура на выходе из реактора

$$T6 = 4,11 + 1,336 \cdot 10^{-3} G5 - 1,373 \cdot 10^{-3} G5_{\text{ЭО}} + 0,968T5.$$

Математическое описание сепаратора. В парожидкостном сепараторе поступающие с потоком $q7$ оксид этилена и ацетальдегид полностью переходят в паровую фазу, диэтиленгликоль и триэтиленгликоль не испаряются и остаются в жидкой фазе, т. е.

$$G8_{ЭО} = G7_{ЭО}; G8_{AA} = G7_{AA}; G9_{ДЭГ} = G7_{ДЭГ}; G9_{ТЭГ} = G7_{ТЭГ}.$$

Остальные компоненты распределяются между двумя фазами, их массовые расходы с жидкой фазой, выходящей из сепаратора, могут быть рассчитаны по формулам

$$G9_{H_2O} = 3,12027 \cdot 10^3 + 7,55283 \cdot 10^{-3} G7 + 0,97365 G7_{H_2O} - 28,51833 T7;$$

$$G9_{ЭГ} = 13,34391 - 7,78112 \cdot 10^{-5} G7 + 0,99991 G7_{ЭГ} - 0,11543 T7.$$

Расходы этих же компонентов с паровой фазой определяются из уравнений материального баланса, например,

$$G8_{H_2O} = G7_{H_2O} - G9_{H_2O}.$$

Температуры потоков, покидающих сепаратор, одинаковы и задаются выражением

$$T8 = T9 = 69,402 + 0,307 T7.$$

Математическое описание выпарной установки. В выпарную установку поступает водный раствор гликолей. Вода и этиленгликоль частично испаряются. Остаточное количество этих компонентов в упаренном растворе, выходящем с установки, можно вычислить по следующим формулам:

$$G11_{H_2O} = 6,87823 \cdot 10^{-2} q_{\text{вып}} + 0,45397 G9 + 0,25625 G9_{H_2O} - 114,40801 T9;$$

$$G11_{ЭГ} = -1,40279 q_{\text{вып}} + 0,254 G9 - 0,538 G9_{ЭГ} + 110,624 T9,$$

где $q_{\text{вып}} = 8312$ кВт – тепловая нагрузка выпарной установки.

Диэтиленгликоль и триэтиленгликоль в процессе выпарки не изменяют своего агрегатного состояния и целиком остаются в упаренном растворе.

Общие расходы выходных потоков, а также расходы компонентов, уходящих с паровой фазой, могут быть определены из уравнений материального баланса.

Температуры выходных потоков выпарной установки могут быть найдены с помощью следующих формул:

$$T10 = -4,273 \cdot 10^{-3} q_{\text{вып}} - 9,374 \cdot 10^{-5} G9 - 6,522 \cdot 10^{-6} G9_{H_2O} + 0,814 T9;$$

$$T11 = 4,365 \cdot 10^{-2} q_{\text{вып}} + 5,278 \cdot 10^{-3} G9 - 0,012 G9_{\text{H}_2\text{O}} - 2,218 T9.$$

Математическое описание колонны отгонки воды. Количество отгоняемой воды рассчитывается по формуле

$$G12_{\text{H}_2\text{O}} = G11_{\text{H}_2\text{O}} - 6,683 \cdot 10^{-3}.$$

Гликоли с водой не отгоняются и количественно переходят в кубовый остаток колонны.

Температура верха колонны вычисляется по выражению

$$T12 = 11,276 - 2,238 \cdot 10^{-3} T11,$$

а температура низа колонны –

$$T13 = 115,978 - 6,982 \cdot 10^{-4} G11_{\text{ЭГ}} + 0,012 G11_{\text{дЭГ}}.$$

Математическое описание смесителя рециркулирующих водных потоков. Общий и покомпонентные массовые расходы потока $q3$ находятся по уравнениям материального баланса, как и в случае сырьевого смесителя, рассмотренном выше.

Температура потока $q3$ определяется по следующему уравнению:

$$T3 = 3,854 + 0,721 T10 + 3,91 \cdot 10^{-4} G10 + 0,274 T12 - 2,031 \cdot 10^{-3} G12.$$

Математическое описание колонны отгонки этиленгликоля. В верхний погон колонны переходит вся вода, поступающая с питанием, а также бóльшая часть этиленгликоля, согласно формуле

$$G14_{\text{ЭГ}} = G13_{\text{ЭГ}} - 0,97.$$

Остаток этиленгликоля, а также высшие гликоли уходят с кубовым продуктом колонны.

Температура верха колонны равна $74,7^\circ\text{C}$. Температура низа колонны определяется уравнением

$$T15 = 157,707 + 2,908 \cdot 10^{-4} G13_{\text{дЭГ}} + 5,176 \cdot 10^{-3} G13_{\text{тЭГ}}.$$

Математическое описание колонны отгонки диэтиленгликоля. В верхний погон колонны переходит весь этиленгликоль, поступающий с питанием, а также бóльшая часть диэтиленгликоля, согласно следующему выражению:

$$G16_{\text{дЭГ}} = 0,999 G15_{\text{дЭГ}}.$$

Остаток диэтиленгликоля, а также триэтиленгликоль выводятся с кубовым продуктом колонны.

Температура верха колонны равна $87,1^{\circ}\text{C}$. Температура низа колонны составляет $152,4^{\circ}\text{C}$.

Ход работы:

- 1) разработать топологическую модель ХТС с использованием типовых технологических операторов;
- 2) представить ХТС в виде параметрического потокового графа;
- 3) выделить комплексы в графе;
- 4) определить оптимальное множество разрываемых дуг;
- 5) преобразовать замкнутую ХТС в разомкнутую. Построить потоковый граф разомкнутой ХТС;
- 6) определить последовательность расчета разомкнутой ХТС;
- 7) рассчитать ХТС декомпозиционным итерационным методом.



ОСНОВЫ РАБОТЫ В MATHCAD

Mathcad – мощная математическая система, предназначенная для решения широкого круга математических, физических и инженерных задач. Вместе с тем она достаточно легка в освоении и доступна даже для начинающего пользователя благодаря продуманному, интуитивно понятному интерфейсу, выдержанному в стиле классического Windows-приложения, удобной, тщательно проработанной справочной системе и обширной библиотеке уже готовых решений типовых задач, которые могут быть использованы при разработке новых документов.

При изложении материала главы автор исходил из предположения, что читатель уже имеет навыки работы в таких стандартных Windows-приложениях, как MS Word и MS Excel, поэтому вопросы, связанные с созданием, редактированием и сохранением рабочих документов, не рассматриваются (они аналогичны), а основное внимание уделено работе с функциями и матрицами, решению алгебраических и дифференциальных уравнений и систем, математической обработке данных, т. е. тем вопросам, без которых невозможно решение современных задач химической технологии.

Общий вид окна программной оболочки Mathcad представлен на рис. П1. Основную часть пространства окна занимает область редактирования (рабочий лист), в которую вводятся все расчетные формулы и подпрограммы; сюда же помещаются и результаты вычислений, которые могут быть представлены в виде отдельных чисел, таблиц и графиков. Все основные символы, операторы, процедуры и шаблоны, необходимые для выполнения расчетов, могут быть извлечены из так называемой математической палитры (на рис. П1 – набор кнопок, расположенных в нижней части панели инструментов). Нажатием какой-либо кнопки из палитры инициируется соответствующая тематическая панель со своим набором кнопок. При их нажатии на рабочем листе появляются соответствующие математические символы или операторы, которые могут являться частью математического выражения или подпрограммы; таким же образом можно вызвать шаблон матрицы либо графика функции.

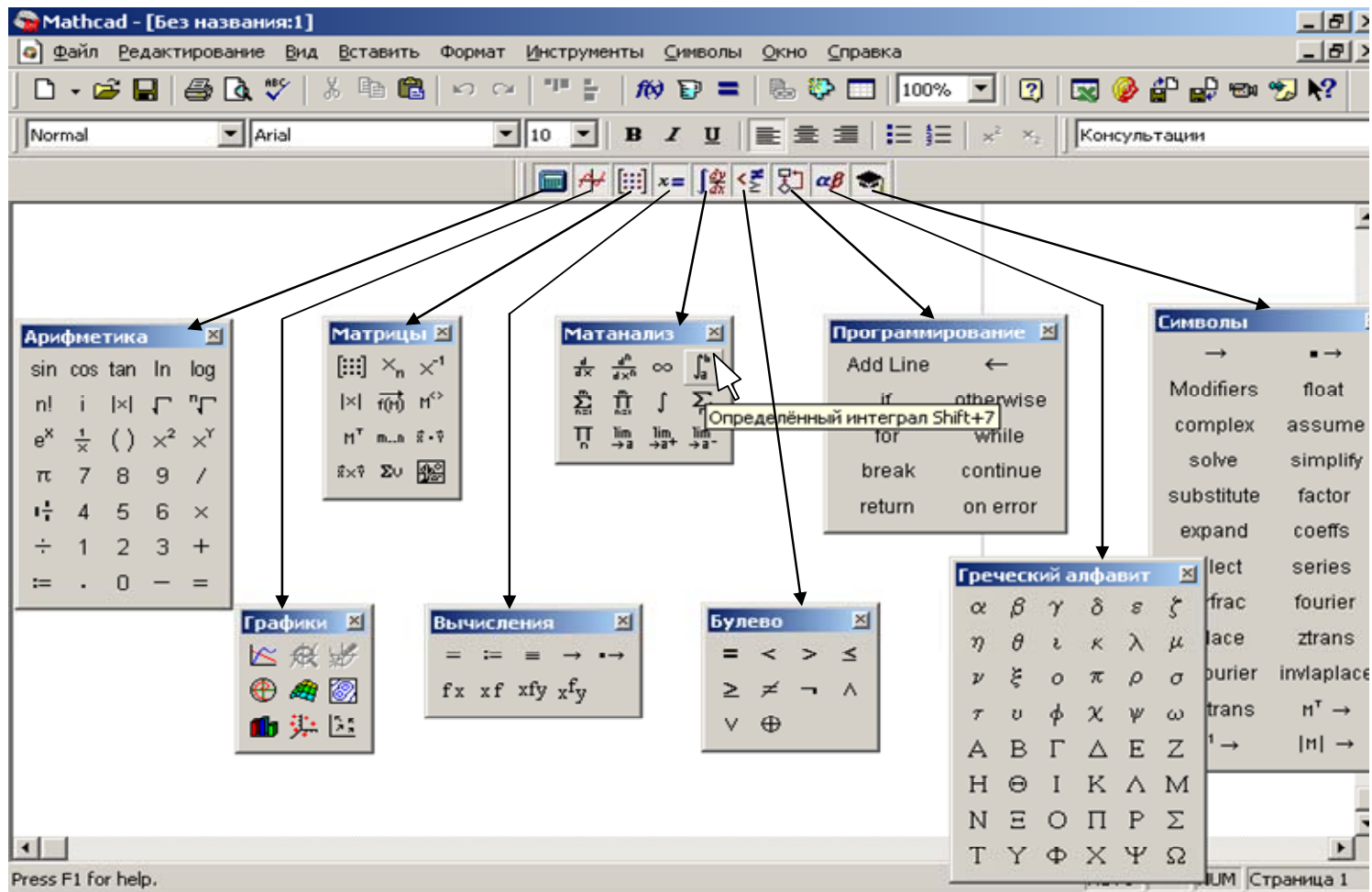


Рис. П1. Окно Mathcad и математическая палитра в развернутом виде

Следует, однако, отметить, что практически все кнопки математической палитры продублированы сочетаниями «горячих» клавиш, поэтому для ускорения работы целесообразно изучить и использовать наиболее употребительные из них при создании расчетных программ. Для того чтобы узнать интересующее сочетание клавиш, достаточно подвести курсор мыши к соответствующей кнопке на панели инструментов и дождаться появления подсказки. Например, как видно из рис. П1, для вставки в математическое выражение шаблона определенного интеграла необходимо нажать сочетание клавиш **Shift + 7**.

При составлении расчетных программ необходимо помнить, что вычисления в Mathcad выполняются слева направо и сверху вниз. Так, если в расчетной формуле или подпрограмме используется имя какой-либо переменной или функции, то эта переменная (функция) должна быть задана на рабочем листе выше или левее текущей формулы (подпрограммы).

В случае неправильного ввода выражения либо возникновения ошибки в процессе вычисления Mathcad выделяет место, где обнаружена ошибка, красным цветом и выдает соответствующее сообщение.

1. Работа с переменными, массивами, функциями пользователя

В алфавит системы Mathcad входят латинские, греческие и кириллические буквы (прописные и строчные), арабские цифры, идентификаторы системных переменных, знаки математических операторов, имена встроенных функций, специальные знаки.

Основными типами данных в системе Mathcad являются константы, переменные, массивы (векторы и матрицы) и файлы данных.

Значения *констант* заведомо определены в системе. К константам относятся: целые и вещественные числа, комплексные числа, системные константы (хранят определенные параметры системы), строковые константы (любой набор символов в кавычках), единицы измерения физических величин.

Переменные – объекты с именем, которым можно присваивать различные значения. Тип переменной (числовая, строковая, символьная и т. д.) в системе Mathcad предварительно задавать не требуется. Имена переменных могут иметь практически любую длину и содер-

жать латинские и греческие буквы, а также цифры. Малые и большие буквы в именах переменных различаются.

Основным оператором, с помощью которого можно присвоить переменной некоторое значение, является знак **:=**, вводимый комбинацией клавиш **Shift + ;** (здесь и далее подразумевается английская раскладка клавиатуры). Присваивание с использованием указанного оператора называется локальным. До этого присваивания переменная не определена и ее нельзя использовать. Существует, однако, оператор **≡**, с помощью которого можно произвести глобальное присваивание, т. е. в этом случае значение переменной будет определено в любой части документа, независимо от места присваивания.

Если возникает необходимость в задании некоторого упорядоченного ряда значений (ряд чисел от начального до конечного с некоторым шагом), то применяются так называемые **ранжированные переменные**. Для создания ранжированной переменной используется выражение

Name := Nfirst, Nfirst + Step .. Nlast,

где Name – имя переменной; Nfirst – начальное значение переменной; Nlast – конечное значение переменной; Step – шаг изменения переменной; .. – символ, указывающий на изменение переменной в заданных пределах (вводится клавишей **;**).

Ранжированные переменные используются для представления функций в виде таблиц и для построения их графиков (см. ниже).

Наиболее простой областью применения Mathcad являются арифметические операции, т. е. система может использоваться как инженерный калькулятор. В общем случае вычисляются математические выражения, в состав которых могут входить переменные и константы (операнды) с операторами и функции с параметрами.

Арифметические операторы предназначены для выполнения арифметических действий над операндами и конструирования математических выражений; наиболее распространенными операторами являются **+**, **-**, *****, **/**, **^**, **√** и др. В Mathcad имеются также расширенные арифметические операторы, например, вычисления суммы и произведения ряда величин, нахождения производной и интеграла (для вызова соответствующего шаблона следует обратиться к математической палитре).

Система Mathcad содержит ряд встроенных элементарных функций, которые задаются своим именем и значением аргумента в круглых

скобках, например тригонометрические функции ($\sin(x)$, $\cos(x)$, $\tan(x)$, $\cot(x)$), обратные тригонометрические функции ($\arcsin(x)$, $\arccos(x)$, $\arctan(x)$), показательные и логарифмические функции ($\exp(x)$, $\ln(x)$, $\log(x)$). В ответ на обращения к ним функции возвращают вычисленные значения.

Приведем некоторые примеры выполнения арифметических операций.

Применение арифметических операторов:

$$\frac{5 + 7^2}{2 \cdot (\sqrt[3]{57} - 25)} - 7^{0.33} = -3.177$$

$$a := 64 \quad b := 4 \quad c := \frac{a}{b} \quad c = 16 \quad d := \frac{\sqrt{27} + a}{|b - 15|} + c^3 \quad d = 4.102 \times 10^3$$

Работа с расширенными операторами:

$$i := 1..5 \quad \sum_i i = 15 \quad \sum_{j=1}^5 (j^2 - 5) = 30 \quad 2 \cdot \prod_i i = 240 \quad \prod_{j=1}^5 \sqrt{j} = 10.954$$

$$x := 1.5 \quad (x^3 - 2) = 1.375 \quad \frac{d}{dx}(x^3 - 2) = 6.75 \quad \int_0^3 (x^3 - 2) dx = 14.25$$

Работа с элементарными функциями:

$i := 0..10$	$x_i := 0.05 \cdot \pi \cdot i$	$x_i =$	$\sin(x_i) =$
		0	0
		0.157	0.156
		0.314	0.309
		0.471	0.454
		0.628	0.588
		0.785	0.707
		0.942	0.809
		1.1	0.891
		1.257	0.951
		1.414	0.988
		1.571	1

Работать с массивами данных в Mathcad так же просто, как и с обычными числами и переменными.

К *массивам* относятся векторы и матрицы. Они так же, как и переменные, задаются каким-либо именем и могут содержать числовые и символьные данные. Наиболее удобно вводить массивы путем заполнения шаблона, который вызывается сочетанием клавиш **Ctrl + M**. При этом вначале появляется диалоговое окно, в котором необходимо указать число строк и столбцов матрицы (рис. П2); в случае вектора один из этих параметров должен быть равен 1.

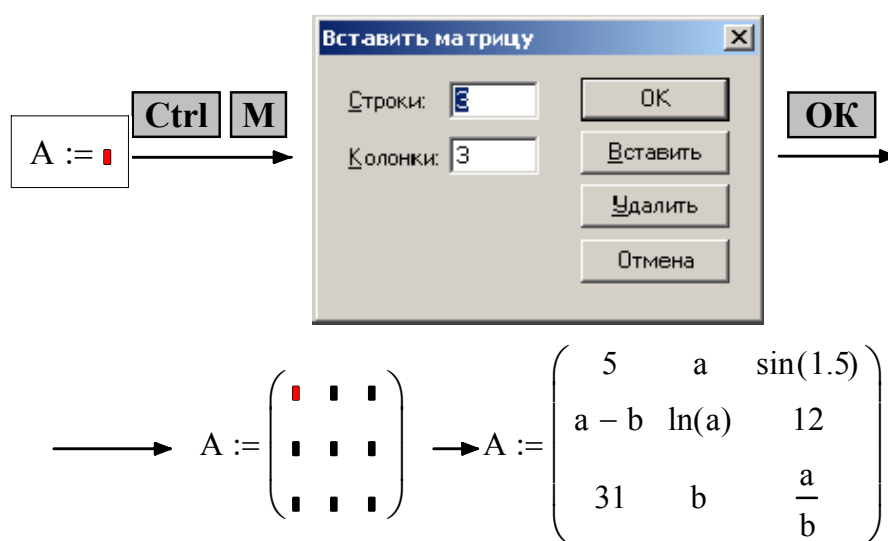


Рис. П2. Задание массивов

Массив представляет собой множество данных – элементов массива. Порядковый номер элемента задается подстрочным индексом. Нижняя граница индексации определяется значением системной переменной **ORIGIN** (можно присвоить 0 или 1). Таким образом, элементы массива являются *индексированными переменными*, т. е. они обозначаются *именем* (совпадает с именем массива, в который входит данный элемент) и *подстрочными индексами* (вводятся клавишей **]**). В случае элемента вектора указывается один индекс (порядковый номер элемента в векторе), в случае элемента матрицы записываются два индекса через запятую (первый для номера строки, второй для номера столбца).

||| - задаем вектор V1 с помощью шаблона: $V1 := \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$

- задаем вектор V2 поэлементно
с помощью индексированных переменных: $V2_0 := 1 \quad V2_1 := 2$

- просматриваем текущие значения
элементов вектора V2, используя знак "=": $V2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$

- создаем матрицу M, применяя для индексации ее элементов ранжированные
переменные i и j:

$i := 0..2 \quad j := 0..1 \quad M_{i,j} := V1_i - V2_j \quad M = \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 2 & 1 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}$

Приведем примеры наиболее распространенных операций с векторами и матрицами (будем использовать векторы и матрицы, заданные выше).

$U1 := V1 \cdot 5 \quad U1 = \begin{pmatrix} 25 \\ 15 \\ 20 \end{pmatrix}$ - умножение вектора на константу

$U2 := V1 + U1 \quad U2 = \begin{pmatrix} 30 \\ 18 \\ 24 \end{pmatrix}$ - сложение двух векторов

$P := V1 \cdot U1 \quad P = 250$ - умножение двух векторов

$Sum := \sum V1 \quad Sum = 12$ - суммирование элементов вектора V1 (**Ctrl+\$** V1)

$U3 := V1^T \quad U3 = (5 \ 3 \ 4)$ - транспонирование вектора V1 (V1 **Ctrl+!**)

$length(V1) = 3$ - число элементов вектора V1

$last(V1) = 2$ - индекс последнего элемента вектора V1

$min(V1) = 3$ - наименьшее значение элементов вектора V1

$max(V1) = 5$ - наибольшее значение элементов вектора V1

$mean(V1) = 4$ - среднее значение элементов вектора V1

$M1 := M \cdot 2 \quad M1 = \begin{pmatrix} 8 & 6 \\ 4 & 2 \\ 6 & 4 \end{pmatrix}$ - умножение матрицы на константу

$$\begin{array}{ll}
 M2 := M + M1 & M2 = \begin{pmatrix} 12 & 9 \\ 6 & 3 \\ 9 & 6 \end{pmatrix} & \text{- сложение двух матриц} \\
 M3 := M^T & M3 = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} & \text{- транспонирование матрицы M} \\
 M4 := M2 \cdot M3 & M4 = \begin{pmatrix} 75 & 33 & 54 \\ 33 & 15 & 24 \\ 54 & 24 & 39 \end{pmatrix} & \text{- умножение двух матриц} \\
 \underline{M4}^{(2)} := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & M4 = \begin{pmatrix} 75 & 33 & 0 \\ 33 & 15 & 1 \\ 54 & 24 & 0 \end{pmatrix} & \text{- задание новых значений элементов} \\
 & & \text{второго (отсчет с нуля) столбца матрицы M4} \\
 & & \text{(M4 Ctrl + 6)} \\
 \Delta := |M4| & \Delta = -18 & \text{- определитель матрицы M4 (Shift + \ M4)} \\
 M5 := M4^{-1} & M5 = \begin{pmatrix} 1.333 & 0 & -1.833 \\ -3 & 0 & 4.167 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix} & \text{- обращение матрицы M4} \\
 \text{rows (M)} = 3 & & \text{- число строк матрицы M} \\
 \text{cols (M)} = 2 & & \text{- число столбцов матрицы M}
 \end{array}$$

При работе в системе Mathcad часто возникает необходимость задания и использования дополнительных функций, предназначенных для решения конкретных задач пользователя. **Функции пользователя** вводятся с применением следующего выражения:

Function_name(parameter_list) := expression.

Имя функции (Function_name) задается так же, как имя переменной. В скобках указывается список параметров функции (parameter_list), т. е. перечень используемых в выражении переменных, разделяемых запятыми. Выражение (expression) – любое математическое выражение, содержащее операнды с операторами и функции с параметрами.

Функции пользователя могут использоваться как самостоятельно, так и в составе других функций произвольной сложности.

Для визуализации функций, заданных таблично либо аналитически, в системе Mathcad имеется программный графический процессор.

Он позволяет строить и редактировать разные графики, например, в декартовой и полярной системе координат, трехмерные поверхности, контурные графики и т. д.

Для построения графиков используются шаблоны, доступные через математическую палитру либо посредством сочетаний «горячих» клавиш.

Чтобы построить двумерный график в декартовой системе координат достаточно ввести имя некоторой предварительно заданной функции $f(x)$, а затем вывести шаблон (**Shift + 2**). Появится шаблон графика с заданной функцией, в который требуется ввести имя переменной x по оси абсцисс. После выхода из области графика он будет построен.

Масштабы по осям задаются автоматически, но их можно изменить, указав принудительно предельные значения абсцисс и ординат на концах осей в шаблоне.

Если строятся графики нескольких функций в одном шаблоне, то для их разделения следует использовать запятые. Если необходимо ограничить область определения функции, то до построения графика следует задать переменную x как ранжированную, указав диапазон ее изменения и шаг.

Построение трехмерных графиков заключается в построении поверхности вида $z(x, y)$, предварительно представленной матрицей **M** значений аппликата z . В соответствующий шаблон (**Ctrl + 2**) нужно занести имя матрицы со значениями аппликата поверхности, т. е. прежде чем строить график поверхности, нужно ее определить математически.

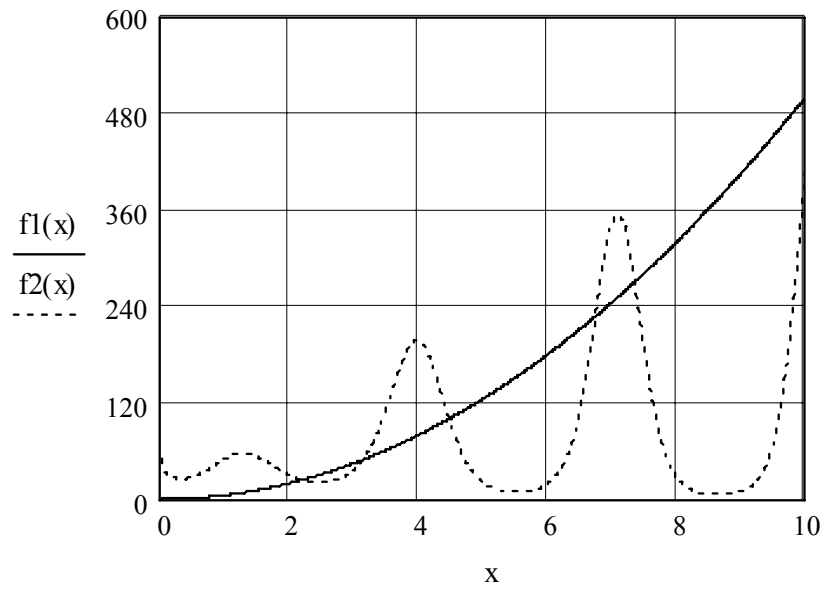
Форматирование графиков (добавление линий сетки, изменение вида и цвета меток, добавление и редактирование названия графика, изменение угла поворота трехмерного графика относительно осей и т. д.) доступно из контекстного меню, вызываемого щелчком правой клавишей мыши по полю графика.

Примеры задания функций пользователя и построения их графиков представлены ниже. На с. 131 приведены задания для самостоятельного выполнения.

||| Аналитический способ задания функций одной переменной

$$f1(x) := 5 \cdot x^2 \quad f2(x) := 50 \cdot x^{\sin(2 \cdot x)}$$

Графики вышезаданных функций в декартовой системе координат

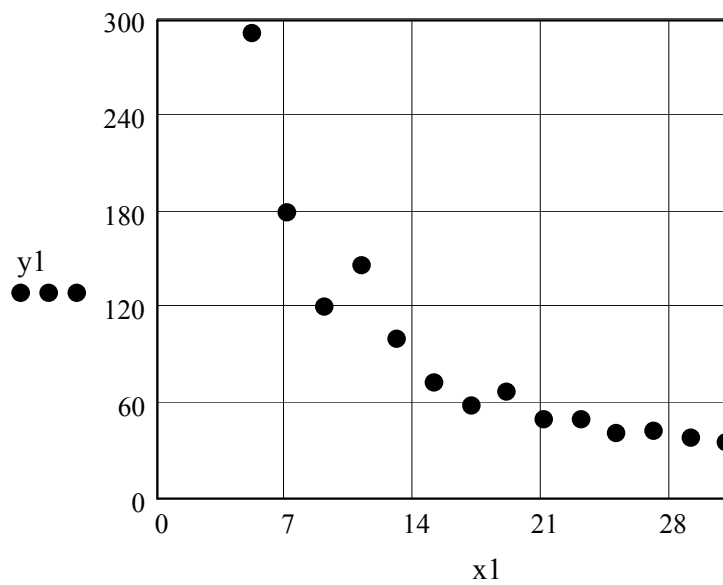


Табличный способ задания функции одной переменной

$i := 0.. 14$

$x1_i :=$ $y1_i :=$

5	291.581
7	179.546
9	120.502
11	146.479
13	100.012
15	72.799
17	58.852
19	66.806
21	50.133
23	49.422
25	40.931
27	43.031
29	38.048
31	34.702
33	33.877



Задание функций двух переменных

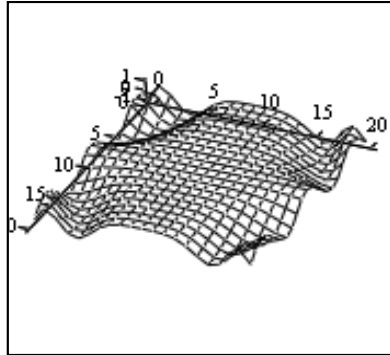
$$z1(x, y) := 1.2 \cos(x \cdot y^2) \quad z2(x, y) := x^3 + y^2$$

Построение графика поверхности (способ 1)

$i := 0..20$ $j := 0..20$ - задаем число значений x и y

$x_i := 0.2 \cdot i - 2$ $y_j := 0.2 \cdot j - 2$ - задаем начальные значения и шаг для x и y

$M_{i,j} := z1(x_i, y_j)$ - формируем матрицу аппликат поверхности



M

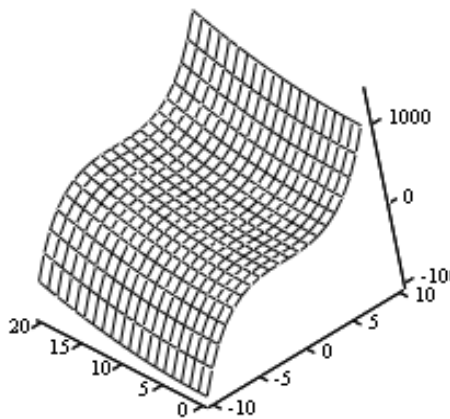
Построение графика поверхности (способ 2)

$x_begin := -10$ $x_end := 10$

$y_begin := 0$ $y_end := 20$ - задаем начальные и конечные значения x и y

$number := 20$ - задаем число значений x и y

$S := \text{CreateMesh}(z2, x_begin, x_end, y_begin, y_end, number)$ - формируем матрицу аппликат поверхности



S

2. Решение алгебраических уравнений и систем

Решение многих инженерных задач связано с отысканием корней алгебраических уравнений и систем. При этом аналитическое решение сложных нелинейных уравнений и систем из них подчас бывает крайне затруднительным и трудоемким. Однако они могут быть решены в Mathcad численными методами с погрешностью, заданной системной переменной **TOL**. Для уравнений вида $f(x) = 0$ решение находится с помощью функции

root(expression, variable_name).

Эта функция возвращает значение переменной (variable_name), при котором выражение (expression) дает 0. Функция реализует вычисления итерационным методом, поэтому необходимо предварительно задавать начальное значение переменной. Если возможно несколько решений уравнения, то выбор решения определяется выбором начального значения переменной.

Для поиска корней *обычного полинома степени n* в Mathcad имеется функция

polyroots(vector_name).

Она возвращает вектор корней полинома степени n , коэффициенты которого находятся в векторе с именем vector_name, имеющем длину, равную $n + 1$. Корни полинома могут быть как вещественными, так и комплексными числами. Не рекомендуется использовать эту функцию, если степень полинома выше шестой, так как в этом случае существенно возрастает погрешность вычисления корней.

Проиллюстрируем применение рассмотренных функций на примере вычисления корней кубического полинома.

```
a0 := 15    a1 := 3    a2 := 31    a3 := -7    Коэффициенты полинома
f(x) := a0 + a1·x + a2·x2 + a3·x3    - задаем полином
Применение функции root :
x := 0    x1 := root(f(x), x)    x1 = 4.622    - вычисляем действительный корень
x := √-1    x2 := root(f(x), x)    x2 = -0.097 + 0.674i    - находим комплексные корни
x3 := root( (f(x) / (x - x2), x) )    x3 = -0.097 - 0.674i
```

Применение функции **polyroots** : $\text{polyroots}(a) = \begin{pmatrix} -0.097 + 0.674i \\ -0.097 - 0.674i \\ 4.622 \end{pmatrix}$

Функцию **root** можно использовать в составе функции пользователя, что нередко позволяет существенно упростить решение сложных задач. Пусть, например, для химической реакции с известной кинетикой требуется изучить зависимость периода полуреакции от температуры процесса.

Кинетические параметры реакции:

$$A := 1.25 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1} \quad E := 27500 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}} \quad R := 8.314 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$$

Константа скорости как функция температуры (Т): $k(T) := A \cdot \exp\left(\frac{-E}{R \cdot T}\right)$

Начальная концентрация реагента: $C_0 := 30$

Текущая концентрация реагента

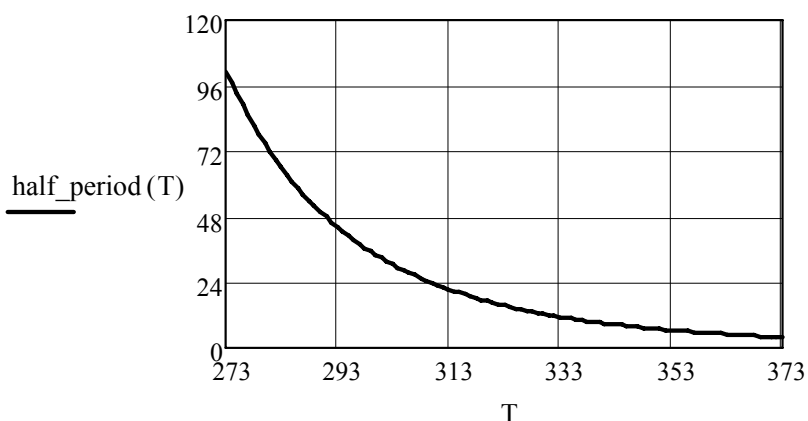
как функция температуры и продолжительности реакции τ : $C(T, \tau) := C_0 \cdot \exp(-k \tau)$

Период полуреакции как функция температуры с использованием функции **root**:

$$\tau := 0 \quad \text{half_period}(T) := \text{root}\left(C(T, \tau) - \frac{C_0}{2}, \tau\right)$$

Диапазон изменения температуры: $T := 273..373$

Зависимость периода полуреакции от температуры



Решение *систем линейных уравнений* в Mathcad осуществляется достаточно просто с применением векторных и матричных операторов и функций. Если, например, задана матрица коэффициентов **A** и вектор свободных членов **B** для системы линейных уравнений в матричной форме $\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{B}$, то вектор решения можно получить из известного выражения $\mathbf{X} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{B}$. Для решения этой же задачи имеется также встроенная функция

Isolve(A, B).

В качестве примера решим следующую систему линейных уравнений:

$$\begin{cases} 2x_1 + 0.3x_2 + 0.2x_3 = 1.3, \\ x_1 - 9x_2 + 0.4x_3 = 1.9, \\ x_1 + 1.1x_3 = 2.3. \end{cases}$$

$\mathbf{A} := \begin{pmatrix} 2 & 0.3 & 0.2 \\ 1 & -9 & 0.4 \\ 1 & 0 & 1.1 \end{pmatrix}$	- матрица коэффициентов системы
$\mathbf{B} := \begin{pmatrix} 1.3 \\ 1.9 \\ 2.3 \end{pmatrix}$	- вектор свободных членов
$\mathbf{X} := \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{B}$	- решение системы
$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 0.499 \\ -0.083 \\ 1.638 \end{pmatrix}$	- результаты решения
$\mathbf{X1} := \text{Isolve}(\mathbf{A}, \mathbf{B})$	$\mathbf{X1} = \begin{pmatrix} 0.499 \\ -0.083 \\ 1.638 \end{pmatrix}$ - решение с применением функции Isolve

При решении *нелинейных уравнений или систем из них* в Mathcad используется специальный вычислительный блок, который открывается служебным словом **Given** и закрывается выражением с функциями **Find(x1, x2, ..., xn)** или **MinErr(x1, x2, ..., xn)**. Между указанными

операторными скобками располагаются уравнения и ограничительные условия (последние – если необходимо). Применять в уравнениях внутри блока знак присваивания нельзя, вместо него используется знак логического равенства («жирный» знак равенства – **Ctrl + =**).

Функции **Find** и **MinErr** различаются принципиально. Первая функция возвращает искомые значения переменных, когда решение реально существует (т. е. дает точное решение). Вторая функция возвращает значения переменных, максимально приближенных даже к несуществующему решению путем минимизации среднеквадратичной погрешности решения (т. е. дает приближенное решение). Обе функции реализуют вычисления итерационным методом, поэтому необходимо предварительно задавать начальные значения переменных.

При использовании функции **MinErr** для решения систем нелинейных уравнений следует обязательно предусматривать проверку решений.

Решим систему нелинейных уравнений

$$\begin{cases} x^2 + 12^y = 51.3, \\ \sin(xy) = 0.5. \end{cases}$$

Решение с помощью функции **Find**:

$x := 0$ $y := 0$ - задаем начальные значения переменных

Given - формируем вычислительный блок

$x^2 + 12^y = 51.3$
Решаемая система уравнений

$\sin(x \cdot y) = 0.5$

$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} := \text{Find}(x, y)$

$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.331 \\ 1.584 \end{pmatrix}$ Найденное решение

Решение с помощью функции **MinErr**:

$x := 0$ $y := 0$ - задаем начальные значения переменных

Given - формируем вычислительный блок

$$x^2 + 12^y = 51.3$$

$$\sin(x \cdot y) = 0.5$$

$$z := \text{Minerr}(x, y) \quad z = \begin{pmatrix} 0.331 \\ 1.584 \end{pmatrix} \quad \text{Найденное решение}$$

Проверка решения:

$$(z_0)^2 + 12^{z_1} = 51.3$$

$$\sin(z_0 \cdot z_1) = 0.5$$

3. Решение дифференциальных уравнений

Ряд задач анализа и синтеза химико-технологических систем, таких как описание структуры потоков в технологических аппаратах, расчет химических реакторов, моделирование нестационарных химико-технологических процессов и др., связан с решением дифференциальных уравнений вида $y'(x) = f(x, y)$. При этом нелинейные дифференциальные уравнения и системы таких уравнений, как правило, не решаются аналитически, т. е. требуют численных методов решения. Mathcad располагает средствами для численного решения дифференциальных уравнений и позволяет представить результаты решения в графическом виде.

Для решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) в Mathcad имеются две основные функции:

rkfixed(V, x1, x2, n, D)

возвращает матрицу решения методом Рунге-Кутты системы ОДУ с начальными условиями в векторе **V** на интервале от x_1 до x_2 при фиксированном числе шагов n , **D** – символьный вектор, в котором записаны правые части дифференциальных уравнений (т. е. первые производные искомых функций);

Rkadapt(V, x1, x2, n, D)

возвращает матрицу решения системы ОДУ, вычисленную методом Рунге-Кутты с переменным шагом.

Функция **Rkadapt** благодаря автоматическому изменению шага решения обычно дает более точный результат, хотя по скорости вычислений может проигрывать функции **rkfixed**.

Если решение системы дифференциальных уравнений имеет вид гладких функций, то вместо указанных функций целесообразно применять функцию

Bulstoer(V, x1, x2, n, D),

которая возвращает матрицу решения системы ОДУ, используя Вундт-метод решения с переменным шагом.

Технику решения дифференциальных уравнений поясним на следующих примерах.

Пример А. Решить дифференциальное уравнение $y' = y^{1.8} - x$ при следующем начальном условии: $y = 1$ при $x = 0$.

$V_0 := 1$ - вектор начальных условий (начальное значение функции)

$x1 := 0$ - начальное значение аргумента

$x2 := 1$ - конечное значение аргумента

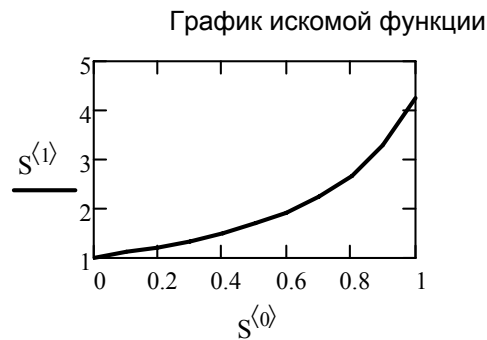
$n := 10$ - число шагов

$D(x, y) := (y_0)^{1.8} - x$ - производная искомой функции [второй аргумент y представляет собой вектор! искомых значений функции]

$S := \text{Rkadapt}(V, x1, x2, n, D)$ - решение дифференциального уравнения с записью результата в матрицу **S** (в нулевом столбце записаны значения x , в первом - соответствующие значения y)

S =

	0	1
0	0	1
1	0.1	1.105
2	0.2	1.221
3	0.3	1.353
4	0.4	1.508
5	0.5	1.695
6	0.6	1.931
7	0.7	2.24
8	0.8	2.664
9	0.9	3.282
10	1	4.261



$x := 0, 0.01.. 1$

Результатом численного решения дифференциального уравнения является таблично заданная функция, т. е. набор дискретных значений аргумента x и соответствующих им значений функции y . Однако часто возникает задача приближенного вычисления значений функции в

промежутках между узловыми (заданными) точками, т. е. задача интерполяции. Наилучшим образом эта задача решается аппроксимацией исходной зависимости с помощью *сплайна*. В этом случае исходная функция заменяется отрезками, например, кубических полиномов, проходящих через три смежные узловые точки. Коэффициенты полиномов рассчитываются так, чтобы непрерывными были первая и вторая производные аппроксимируемой функции. Линия, которую описывает сплайн-функция, напоминает по форме гибкую линейку, закрепленную в узловых точках.

Для осуществления сплайн-аппроксимации в Mathcad можно воспользоваться следующими функциями:

cspline(VX, VY),

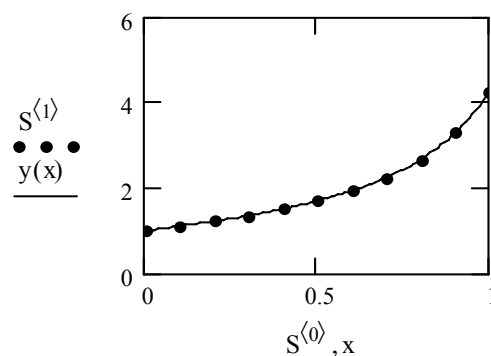
которая возвращает вектор **VS** вторых производных аппроксимируемой функции, заданной векторами **VX** и **VY** ее значений (абсцисс и ординат);

interp(VS, VX, VY, x),

которая возвращает интерполяционное значение $y(x)$ для заданного значения x на основании векторов **VS**, **VX**, **VY**.

Таким образом, сплайн-аппроксимация проводится в два этапа. На первом этапе с помощью функции **cspline** отыскивается вектор **VS** вторых производных функции $y(x)$, заданной векторами **VX** и **VY**. На втором этапе для каждой искомой точки вычисляется значение $y(x)$ с помощью функции **interp**.

$$VS := \text{cspline}(S^{(0)}, S^{(1)}) \quad y(x) := \text{interp}(VS, S^{(0)}, S^{(1)}, x)$$



- возвращаясь к примеру А, проведем сплайн-аппроксимацию табличной функции, полученной в результате решения дифференциального уравнения

Пример Б. Решить систему дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = 1.5y - z^2, \\ \frac{dz}{dx} = 3y^2 - 2z \end{cases}$$

при следующих начальных условиях: $y = 1$ и $z = 2$ при $x = 0$.

$V := \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ - вектор начальных условий

$x1 := 0$ - начальное значение аргумента

$x2 := 10$ - конечное значение аргумента

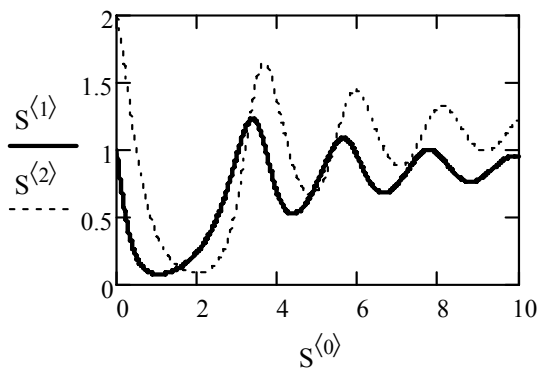
$n := 1000$ - число шагов

$D(x, y) := \begin{bmatrix} 1.5 \cdot y_0 - (y_1)^2 \\ 3 \cdot (y_0)^2 - 2 \cdot y_1 \end{bmatrix}$ - символьный вектор производных искомых функций [второй аргумент (y) представляет собой вектор, т.е. $y_0 = y, y_1 = z$ в решаемой системе уравнений]

$S := \text{Bulstoer}(V, x1, x2, n, D)$ - решение системы дифференциальных уравнений (с записью результата в матрицу S (в нулевом столбце записаны значения x , в первом - соответствующие значения y , во втором - значения z))

	0	1	2
0	0	1	2
1	0.01	0.975	1.989
2	0.02	0.95	1.977
3	0.03	0.925	1.964
4	0.04	0.901	1.95
5	0.05	0.876	1.935
6	0.06	0.852	1.919
7	0.07	0.828	1.902
8	0.08	0.805	1.884
9	0.09	0.781	1.865
10	0.1	0.758	...

Графики искомых функций



📌 Задания для самостоятельного выполнения

1. Построить графики функций одной переменной:

- а) $f1(x) = x^3 - 7x + 6$, $x \in [-10; 10]$; б) $f2(x) = 9 \cdot 10^{-2} \exp(-0.4x)$,
 $x \in [0; 10]$;
- в) $f3(x) = 3x^2 \exp(0.25x - 0.11x^2)$, $x \in [-10; 10]$; г) $f4(x) = \frac{2x + 5}{x^2 - 6x + 5}$,
 $x \in [1; 5]$;
- д) $f5(x) = 2 - \frac{65}{x} + \frac{21}{x^2}$, $x \in [0; 10]$; е) $f6(x) = \sqrt{4 - x^2} + \sqrt[3]{x - 16}$,
 $x \in [-2; 2]$;
- ж) $f7(x) = \ln\left(\left|\frac{x - 4}{x + 4}\right|\right)$, $x \in [-10; 10]$; з) $R1(w) = \sin(3w)$,
 $R2(w) = 1.2 \sin(5w)$,
 $w = 0, 0.01\pi..2\pi$

2. Построить графики функций двух переменных:

- а) $z1(x, y) = 2x + 3y - 4$ при $x = -10..10$; $y = -10..10$;
- б) $z2(x, y) = 16x^2 - 9y^2$ при $x = -100, -90..100$; $y = -100, -90..100$;
- в) $z3(x, y) = xy^3$ при $x = -1000, -900..1000$; $y = -1000, -900..1000$;
- г) $z4(x, y) = -(x + y + x^2 + y^2)$ при $x = -10..10$; $y = -10..10$;
- д) $z5(x, y) = -\sin(xy)$ при $x = -2, -1.8..2$; $y = -2, -1.8..2$.

3. Решить алгебраические уравнения:

- а) $x^3 - 7x + 6 = 96$; б) $\ln\left|\frac{x - 4}{x + 4}\right| = -3.148$;
- в) $\lg(\cos(x)) = -0.366$; г) $\arcsin\left(\frac{4x - 1}{3}\right) = -0.34$;
- д) $\sqrt[4]{4 - x^2} + \sqrt[3]{x^2 - 16} = -1.7$; е) $9 \cdot 10^{-2} x^2 \exp(-0.4x) = 1$;
- ж) $\frac{2x + 5}{x^2 - 6x + 5} = 0.556$; з) $-11x^5 + 12x^4 - 35x^2 + 5 = 0$.

4. Решить системы линейных алгебраических уравнений:

$$а) \begin{cases} 2x_1 + x_2 + 2x_3 = 1, \\ x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 2, \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 1; \end{cases}$$

$$б) \begin{cases} x_1 + x_2 = 1, \\ x_1 - 2x_2 + x_3 = 1, \\ x_1 - 2x_3 = 2; \end{cases}$$

$$в) \begin{cases} x_1 - 2x_2 + 4x_3 - 3x_4 = 1, \\ 2x_1 - 3x_2 + 3x_3 - 2x_4 = 2, \\ 4x_1 - 9x_2 + x_3 - 8x_4 = -3, \\ x_1 + 6x_2 - 4x_3 + 8x_4 = 4; \end{cases}$$

$$г) \begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 0, \\ 2x_1 - 2x_2 + 3x_3 - 3x_4 = 15, \\ 9x_1 + 9x_2 + 4x_3 + 4x_4 = 5, \\ 3x_1 - 3x_2 + 2x_3 - 2x_4 = 15; \end{cases}$$

$$д) \begin{cases} x_1 + x_2 - x_3 - x_4 = 0, \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 = 0, \\ 3x_1 - 2x_2 + x_3 - 5x_4 = 0, \\ x_1 - 5x_2 - x_3 - 8x_4 = 0; \end{cases}$$

$$е) \begin{cases} 2x_1 + 0.3361x_2 + 0.1931x_3 - x_4 = 1.3412, \\ x_1 - 9x_2 + 0.3674x_3 + 3x_4 = 1.9367, \\ x_1 + 0.6931x_2 + 4.8652x_3 + x_4 = 2.3654, \\ x_1 - x_2 + 1.0392x_3 - 6.9347x_4 = 1.9362. \end{cases}$$

5. Решить системы нелинейных алгебраических уравнений:

$$а) \begin{cases} x_1 + x_2 + 3x_3 = 5, \\ x_1^2 - 5x_2 = 15, \\ 2x_2 + x_3^3 = 10; \end{cases}$$

$$б) \begin{cases} \exp(x_1 + \sqrt{x_2} - 3x_3) = \ln(5), \\ \ln(x_1^2 - 5x_2) = \ln(15), \\ \lg\left(\frac{2}{x_2} + x_3^4\right) = \ln(10); \end{cases}$$

$$в) \begin{cases} -\sin(x_1 \cdot x_2) = 0.3, \\ x_1 \cdot x_2^3 = 99.9; \end{cases}$$

$$г) \begin{cases} 31^{x_1} + 3 \cdot 2^{x_2 + x_3} = 65.221, \\ \frac{x_1^2 - 12}{x_1 + x_2^2 + x_3^3} = -0.4, \\ \exp(x_2 - x_1) = 37. \end{cases}$$

6. Решить дифференциальные уравнения I порядка (в случае, если начальные условия не указаны, задать их самостоятельно):

$$а) y' = y + x^2, y(0) = 1, \\ x \in [0; 1], h = 0.1;$$

$$б) y' = x + \frac{xy}{x^2 + 1}, y(0) = 1, x \in [0; 1], \\ h = 0.1;$$

$$в) y' = x^2 - y, y(0) = 2, \\ x \in [0; 1], h = 0.1;$$

$$г) y' = \frac{\cos(x)}{x}, y(1) = 1, x \in [1; 2], h = 0.1;$$

д) $(x + y)dx + (x - y)dy = 0,$ е) $y'\sin(x) - y\cos(x) = 1;$
 $y(0) = 1;$

ж) $y' + \frac{y}{x} = x^2y^2;$ з) $5y' + (2y' - 1)(x - y) = 0.$

7. Решить системы дифференциальных уравнений (в случае, если начальные условия не указаны, задать их самостоятельно):

а) $\frac{dy}{dx} = 3y - z,$ б) $\frac{dx}{dt} = 3x + 4y - e^{3t},$
 $\frac{dz}{dx} = 5y - z,$ $\frac{dy}{dt} = 4x - 3y^2 - e^{4t},$
 $y(0) = 1, z(0) = 2;$ $x(0) = 1, y(0) = 2;$

в) $\dot{x} = x + y + 3z,$ г) $\frac{dy}{dx} = (y + z)^{\sin(x)},$
 $\dot{y} = x + 5y + z,$ $\frac{dz}{dx} = \frac{10x}{z} \sin(y),$
 $\dot{z} = 3x + y + z;$ $y(0) = 2; z(0) = 1.$

8. Решить дифференциальные уравнения высших порядков (в случае, если начальные условия не указаны, задать их самостоятельно):

а) $y'' + y' - 6y = 2e^{3x},$ $y(0) = 1,$ б) $y''' + 3y'' - y' - 3y = 0;$
 $y'(0) = 1;$

в) $y''' = \sin(x) - x,$ $y(0) = 3,$ г) $y''' = 120x^2 - 48x + 18.$
 $y'(0) = 0, y''(0) = -1;$

ЛИТЕРАТУРА

.....
.....
.....

1. Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 416 с.
2. Колесников, В. Л. Компьютерное моделирование и оптимизация химико-технологических систем / В. Л. Колесников, И. М. Жарский, П. П. Урбанович. – Минск: БГТУ, 2004. – 533 с.
3. Колесников, В. Л. Компьютерное моделирование в химической технологии. Курсовое и дипломное проектирование: учеб. пособие для студентов химико-технологических специальностей / В. Л. Колесников, И. М. Жарский, П. П. Урбанович. – Минск: БГТУ, 2008. – 336 с.
4. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. – М.: Высш. шк., 1991. – 400 с.
5. Кафаров, В. В. Анализ и синтез химико-технологических систем / В. В. Кафаров, В. П. Мешалкин. – М.: Химия, 1991. – 432 с.
6. Кондаков, А. И. САПР технологических процессов / А. И. Кондаков. – М.: Издательский центр «Академия», 2007. – 272 с.
7. Математическое моделирование химико-технологических процессов / А. М. Гумеров [и др.]. – М.: КолосС, 2008. – 158 с.
8. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов: практическое руководство / В. А. Холоднов [и др.]. – СПб.: Проффессионал, 2003. – 478 с.
9. Царева, З. М. Основы теории химических реакторов (компьютерный курс) / З. М. Царева, Л. Л. Тобажнянский, Е. И. Орлова. – Харьков: ХГПУ, 1997. – 624 с.
10. Методы и средства автоматизированного расчета химико-технологических систем / Н. В. Кузичкин [и др.]. – Л.: Химия, 1987. – 152 с.
11. Слинько, М. Г. Моделирование химических реакторов / М. Г. Слинько. – Новосибирск: Наука, 1968. – 95 с.
12. Анисимов, И. В. Математическое моделирование и оптимизация ректификационных установок / И. В. Анисимов, В. И. Бодров, В. Б. Покровский. – М.: Химия, 1975. – 216 с.
13. Саутин, С. Н. Планирование эксперимента в химии и химической технологии / С. Н. Саутин. – Л.: Химия, 1975. – 48 с.

Учебное издание

Юсевич Андрей Иосифович

**МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

Учебно-методическое пособие

Редактор *Е. С. Ватеичкина*
Компьютерная верстка *Е. С. Ватеичкина*
Корректор *Е. С. Ватеичкина*

Издатель:

УО «Белорусский государственный технологический университет».

ЛИ № 02330/0549423 от 08.04.2009.

Ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.