

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
-----------------------	---

Глава первая

Моделирование и расчет на ЭВМ химико-технологических процессов на базе детерминированных моделей	7
Пример 1.1. Расчет кинетики химической реакции	7
Пример 1.2. Исследование кинетики химической реакции	12
Пример 1.3. Моделирование работы изотермического реактора	15
Пример 1.4. Расчет комбинированной модели реактора	19
Пример 1.5. Расчет фазового равновесия	25
Пример 1.6. Расчет числа теоретических тарелок в укрепляющей ректификационной колонне	27
Пример 1.7. Расчет числа единиц переноса в укрепляющей ректификационной колонне	31
Пример 1.8. Расчет параметров математической модели гидродинамики экстракционной колонны методом статистических моментов	35
Пример 1.9. Гидравлический расчет трубопровода	40
Задачи	43

Глава вторая

Расчет на ЭВМ параметров стохастических моделей и обработка экспериментальных данных	49
Пример 2.1. Разработка уравнения регрессии на основе пассивного эксперимента	49
Пример 2.2. Разработка уравнения регрессии на основе активного эксперимента на базе матрицы планирования I порядка для полного факторного эксперимента	52
Пример 2.3. Подбор вида дробной реплики при разработке активного эксперимента	58
Пример 2.4. Подбор формы уравнения регрессии по линейной анаморфозе опытных данных	60
Пример 2.5. Расчет коэффициента корреляции	62
Пример 2.6. Оценка роли вариации параметра технологического процесса по критерию Стьюдента	63
Пример 2.7. Расчет размеров капель при дроблении струи, вытекающей из распределительной трубы (форсунки) на базе метода анализа размерностей	66
Задачи	69

Глава третья

Методы оптимизации химико-технологических процессов	75
Пример 3.1. Определение оптимальных условий реализации химической реакции методом классического аналитического поиска экстремума	75

Пример 3.2. Решение задач оптимизации модели на основе уравнения регрессии методами классического аналитического поиска экстремума и Гаусса — Зейделя	78
Пример 3.3. Расчет оптимальных размеров слоя катализатора в реакторе термokatалитической очистки отходящих газов от примесей углеводов методом неопределенных множителей Лагранжа [9]	82
Пример 3.4. Выбор рациональной схемы взаимного расположения аппаратов на базе метода неопределенных множителей Лагранжа	86
Пример 3.5. Расчет оптимального разбавления сточных вод при их биологической очистке от примесей органических веществ методом половинного деления	91
Пример 3.6. Расчет производственной программы группы установок методом линейного программирования	95
Пример 3.7. Расчет профиля оптимальных температур в реакторе идеального вытеснения на основе принципа максимума	100
Пример 3.8. Определение оптимальных скоростей движения сплошной и дисперсной фаз жидкости в процессе экстракции методом симплексного планирования эксперимента	104
Пример 3.9. Оптимизация каскада реакторов идеального смешения методом динамического программирования	114
Задачи	120

Глава четвертая

Расчеты сложных химико-технологических систем (ХТС)

Пример 4.1. Формирование вычислительной последовательности расчета сложной ХТС на основе матрицы смежности	126
Пример 4.2. Разработка алгоритма организующей программы для расчета сложной ХТС на основе шкалы схемы ...	130
Пример 4.3. Расчет замкнутой ХТС	135
Пример 4.4. Расчет материального баланса процесса синтеза хлористого этила [11]	137
Задачи	149

Приложение

Типовые алгоритмы и элементы программирования

1. Ввод исходной информации	151
1.1. Ввод единичных чисел	151
1.2. Ввод массива чисел	152
1.3. Ввод таблицы	155
2. Вывод информации на печать	156
2.1. Вывод единичных чисел	156
2.2. Вывод массивов чисел	157
2.3. Вывод данных в виде таблиц	158

3. Алгоритмы операций над числами	159
3.1. Формирование суммы чисел	159
3.2. Выделение бóльшего (меньшего) числа из массива чисел . . .	161
3.3. Выбор ближайшего бóльшего (меньшего) числа из массива чисел по отношению к заданному числу	163
3.4. Округление чисел	164
Список литературы	165



ВВЕДЕНИЕ

Решение химико-технологических задач на ЭВМ требует формирования комплексного подхода к разработке и реализации алгоритма на базе активного знания фундаментальных и инженерных дисциплин — математики, численных методов решения, химии, физической химии, процессов и аппаратов химической технологии, основ экономики, общей химической технологии. Настоящее пособие явилось результатом обобщения многолетнего опыта преподавания и оригинальных материалов практических занятий по курсам «Применение ЭВМ в химической технологии», «Применение ЭВМ в биотехнологии» и «Математическое моделирование в химической технологии», изучаемых в Уфимском государственном нефтяном техническом университете. Пособие предназначено для оказания помощи студентам при самостоятельном решении задач химической технологии, как в рамках программы данных курсов, так и при курсовом и дипломном проектировании.

Не касаясь теоретических вопросов разработки математических моделей и алгоритмов решения типовых математических задач, рассматриваемых в других курсах, в данном пособии на ряде примеров рассмотрены специфические особенности алгоритмизации расчетов достаточно известных технологических процессов, гарантирующие правильность расчетов.

По каждому из основных разделов пособия предложены примеры, которые изучаются студентами в ходе подготовки к практическому занятию.

На самом занятии, в зависимости от уровня подготовки студентов, могут разбираться и анализироваться примеры или решаться контрольные задачи. Контрольные задачи могут также включаться в экзаменационные билеты. Целесообразно завершать решение задачи составлением программы на любом изучаемом алгоритмическом языке и получением итоговых результатов на компьютере. Для студентов, недостаточно освоивших языки программирования, в приложении к пособию изложены некоторые прикладные вопросы программирования на простейшем языке «Бейсик». В перечне задач приведен ряд индивидуальных инженерных задач для самостоятельного решения, которые можно использовать как темы курсовых работ студентов с учетом их специализации.

ГЛАВА ПЕРВАЯ

МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТ НА ЭВМ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА БАЗЕ ДЕТЕРМИНИРОВАННЫХ МОДЕЛЕЙ

ПРИМЕР 1.1. РАСЧЕТ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

Дана изотермическая реакция $A \xrightarrow{k_1} B \xrightleftharpoons[k_3]{k_2} C$, где k_i — константа скорости частных реакций. Реакции 1, 2 — первого порядка, реакция 3 — второго порядка. Целевой компонент реакции — B . Известны начальные концентрации C_i компонентов системы при времени $\tau = 0$; $C_{A0} = 20$ г/л, $C_{B0} = 0$, $C_{C0} = 0$ и значения констант k_i . Определить продолжительность реакции τ_p , при которой обеспечивается максимальный выход целевого компонента (рис. 1.1).

Математическая модель кинетики реакции имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{dC_A}{d\tau} &= -k_1 C_A; \\ \frac{dC_B}{d\tau} &= k_1 C_A - k_2 C_B + k_3 C_C^2; \\ \frac{dC_C}{d\tau} &= k_2 C_B - k_3 C_C^2,\end{aligned}\tag{1.1}$$

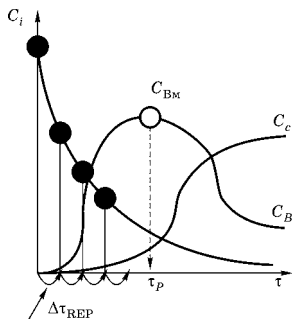


Рис. 1.1

Кинетические кривые реакции $A \rightarrow B \rightleftharpoons C$, • — реперные точки, $\Delta\tau_{\text{REP}}$ — шаг реперных точек

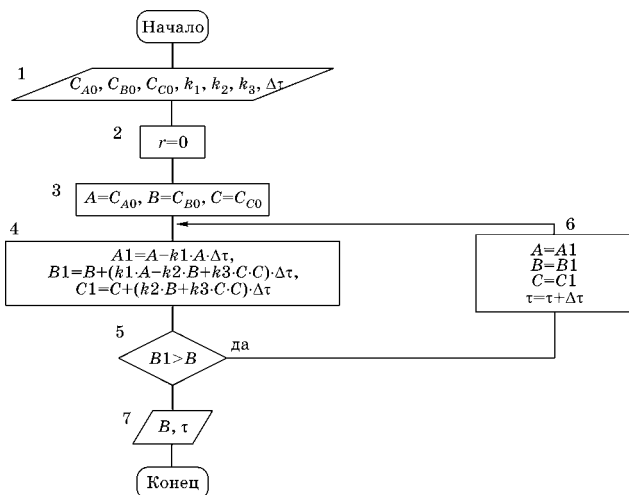


Рис. 1.2

Блок-схема решения примера 1.1 в общем виде

и решается по методу Эйлера по рекуррентному соотношению.

$$C_{I,n+1} = C_{I,n} + \left(\frac{dC_I}{d\tau} \right)_{(\tau=\tau_n)} \cdot \Delta\tau; \quad (1.2)$$

$$\tau_{n+1} = \tau_n + \Delta\tau, \quad (1.3)$$

где $\Delta\tau$ — шаг интегрирования.

На рисунке 1.1 приведена блок-схема решения задачи в общем виде, где концентрации компонентов C_i , представлены как A, B, C для предыдущих $(n - x)$ расчетов и как A_1, B_1, C_1 для последующих $(n + 1 - x)$ расчетов. При достижении максимальной величины $B = C_{B_m}$ решение задачи прекращается.

Поскольку точность решения задачи по методу Эйлера зависит от величины шага интегрирования (чем меньше шаг, тем точнее решение, но больше продолжительность расчета), рассмотрим принципы автоматического обеспечения правильности расчета, задав погрешность определения концентрации C_B , равную ΔC . ΔC можно при-

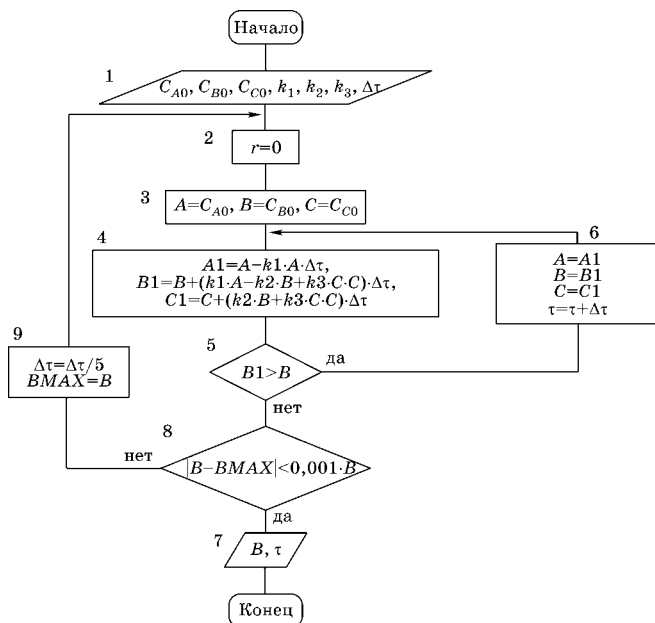


Рис. 1.3

Блок-схема решения примера 1.1 с автоматическим обеспечением правильности решения

нять равной погрешности экспериментального определения концентрации C_B , например, с помощью хроматографа, или принять на уровне 1–0,1% от величины C_B , например: $\Delta C_B = 0,001 \cdot C_B$.

В число исходных данных вводится произвольно малое значение $BMAX$, например, $BMAX = 0$. После определения лучшей концентрации компонента B в ходе расчета кинетики с шагом $\Delta\tau$ и сравнения B с $BMAX$ (рис. 1.3) расчет полностью повторяют с уменьшенным в 2–10 раз шагом интегрирования (например, $\Delta\tau = \Delta\tau/5$) до приемлемого совпадения B и $BMAX$.

Как видно из рисунка 1.3, получение верного решения достигается дополнением блок-схемы принципиального решения (рис. 1.2) всего двумя блоками (8 и 9).

Недостатками рассмотренного решения задачи являются:

- совпадение значения $B = B_{\text{MAX}}$ при различных шагах интегрирования может быть формальным (случайным), и полная гарантия правильности расчета кинетики обеспечивается лишь при приемлемом совпадении кинетических кривых при различных значениях шага интегрирования $\Delta\tau$;
- решение не позволяет рассмотреть кинетику решения задачи в целом, ибо значения концентраций компонентов не выводятся на печать или дисплей.

Очевидно, для устранения этих связанных друг с другом недостатков необходимо результаты расчета выводить на печать и сравнивать между собой при различных значениях шага интегрирования.

Чтобы избежать операций с чрезмерным объемом информации (например, при шаге 0,0001 и $\tau_p = 1$ с придется проанализировать до 30 000 значений концентраций компонентов A , B и C при каждой вариации шага интегрирования $\Delta\tau$), будем подвергать анализу значения концентраций компонентов A , B , и C только в реперных точках, сканирующих область исследования с большим шагом $\Delta\tau_{\text{REP}} \gg \Delta\tau$ (рис. 1.1). При этом дробление шага интегрирования $\Delta\tau$ в ходе поиска правильного решения следует брать таким, чтобы в $\Delta\tau_{\text{REP}}$ всегда укладывалось целое число $\Delta\tau$. Достаточно взять 5–10 реперных точек для достаточно полной информации о кинетике и, например, при $\tau_p = 1$ мы будем анализировать 15–30 значений концентраций компонентов A , B , C вместо 30 000 значений.

Для обеспечения вывода информации только в реперной точке, когда фактическое время реакции совпадает с позицией реперной точки, можно воспользоваться двумя приемами:

1) если продолжительность реакции τ_p примерно известна, то, приняв $\Delta\tau_{\text{REP}}$, можно сделать следующую вставку (рис. 1.4) между блоками 4 и 5 на рисунках 1.2 и 1.3 (на рисунке 1.14 j — время по оси реперных точек):

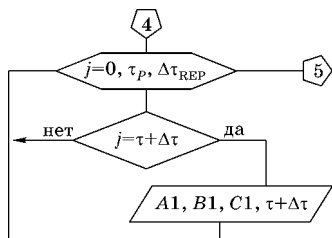


Рис. 1.4

б) если τ_P неизвестна, то вставка между блоками 4 и 5 примет вид (рис. 1.5):

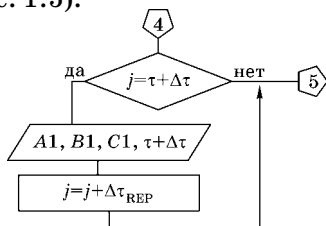


Рис. 1.5

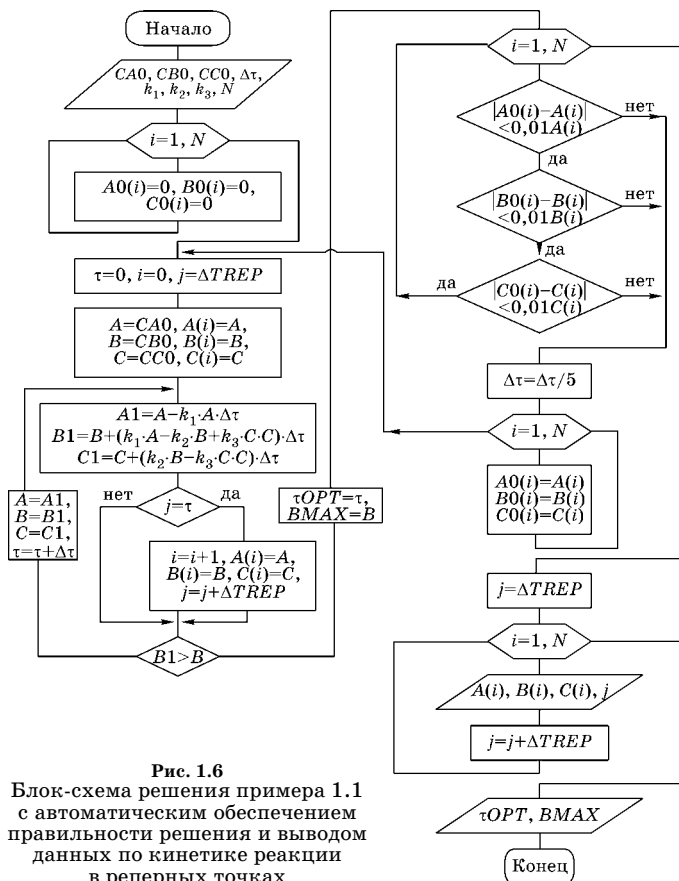


Рис. 1.6

Блок-схема решения примера 1.1 с автоматическим обеспечением правильности решения и выводом данных по кинетике реакции в реперных точках