

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего профессионального образования
«Казанский Национальный Исследовательский Технологический Университет»
Бугульминский филиал

Методические указания и контрольное задание по дисциплине
«Современные методы расчета химико-технологических систем»

Составитель- профессор, д.т.н. Шаймарданов Р.Г.

Бугульма, 2016

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1 Итерационные методы для решения уравнений на местах разрыва	4
2 Метод простой итерации.....	5
3 Метод Вегстейна	6
4 Пример декомпозиционного расчета ХТС с использованием метода простой итерации	7
4.1 Структурный анализ ХТС.....	7
4.2 Составление математических описаний элементов ХТС.....	8
4.3 Решение задачи с помощью электронной таблицы EXCEL и системы компьютерной математики Mathcad.....	10
4.3.1 Решение задачи с помощью электронной таблицы EXCEL.....	10
4.3.2 Решение задачи в Mathcad методом простой итерации с помощью элементов программирования	12
4.3.3 Решение задачи в Mathcad методом Вегстейна с помощью элементов программирования	13
4.3.4 3 Решение задачи в Mathcad с помощью процедуры оптимизации.....	15
4.4 Интегральный метод расчета.....	16
5 Контрольная работа . Расчет ХТС с использованием электронной таблицы Excel и системы компьютерной математики Matcad.....	18
5.1 Варианты индивидуальных заданий	19
6. Приложение	22
Литература	27

Современные методы расчета химико-технологических систем

В методических указаниях рассматриваются вопросы, связанные с расчетом химико-технологических систем (ХТС) с материальными и тепловыми рециклами.

Приведены алгоритмы решения задач, которые предполагают при расчетах использовать электронную таблицу EXCEL и систему компьютерной математики Mathcad.

Методические указания соответствуют содержанию дисциплин «Современные методы расчета химико-технологических систем» «Моделирование систем», «Системный анализ химических производств», «Системный анализ химических технологий» государственных образовательных стандартов.

Методические указания предназначены для бакалавров, магистров, аспирантов высших учебных заведений и могут быть использованы в системах непрерывного профессионального образования по компьютерным технологиям.

ВВЕДЕНИЕ

Принципы и понятия математического моделирования в последнее время получили существенное развитие. Оно связано с интенсивным применением [информационных технологий](#) и вычислительной техники. Использование мощных программных комплексов при расчете процессов и аппаратов химической технологии дает возможность значительно сократить время от исследования процесса до его внедрения в промышленность.

В методических указаниях приводятся известные методы для расчета ХТС с материальными и тепловыми рециклами, что позволяет прогнозировать поведение сложных процессов в изменяющихся условиях функционирования систем.

Методические указания состоят из двух частей: первая часть теоретическая, вторая часть представляет собой варианты контрольных работ.

В первой главе методических указаний рассматриваются итерационные методы для решения уравнений на местах разрыва потоков.

Во второй главе рассматривается метод простой итерации для расчета ХТС.

В третьей главе рассматривается метод Вегстейна для расчета ХТС.

В четвертой главе приводится пример [декомпозиционного](#) расчета ХТС с использованием простой итерации, электронной таблицы EXCEL и системы компьютерной математики Mathcad.

В пятой главе предлагаются варианты контрольных работ для расчета ХТС.

Шестая глава-приложение содержит необходимые сведения по расчету ХТС с использованием электронной таблицы EXCEL

При использовании методических указаний целесообразно сначала обратиться к вводным материалам, которые содержатся в главах 1-4, затем перейти к главе 5 для выполнения работ по расчету ХТС.

Теоретические сведения

. Интегральные и декомпозиционные методы расчета ХТС.

Суть интегральных методов расчета ХТС заключается в объединении систем уравнений, описывающих работу отдельных аппаратов, в одну большую систему уравнений с дальнейшим решением этой системы. При декомпозиционном методе расчета ХТС представляется в виде отдельных блоков, соответствующих элементам ХТС, и, расчет ХТС сводится к последовательному расчету отдельных блоков. В данном случае размерность каждой отдельной системы уравнений, соответствующей блоку ХТС, относительно невелика.

Сравним характеристики интегрального и декомпозиционного методов расчета ХТС:

Как было указано выше, суть интегрального метода заключается в объединении систем уравнений, описывающих работу отдельных аппаратов, в одну большую систему уравнений с дальнейшим решением этой системы. Таким образом, линейные уравнения материального и теплового балансов объединяются с нелинейными уравнениями [равновесия химических реакций](#), дифференциальными линейными и нелинейными уравнениями, уравнениями гидродинамики в частных производных и т.д. в единую "большую" систему уравнений, например, в общем виде:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \sum G_i = 0 & \text{– уравнение материального баланса} \\ \sum Q_i = 0 & \text{– уравнение теплового баланса} \\ \frac{dX_i}{dt} = k C_A^m C_B^n & \text{– уравнение кинетики химических реакций} \\ \frac{\partial Y_i}{\partial Z} = f(Re, Pr, Ar \text{ и } m, \rho) & \text{– уравнение гидродинамики} \\ \text{и т.д.} & \end{array} \right.$$

Данная система уравнений содержит множество уравнений различного типа от линейных до дифференциальных уравнений в частных производных. Такие системы уравнений называются смешанными и требуют специальных математических методов для своего решения. Более того, в зависимости от типа уравнений (сложность которых определяется типом модулей), методы решения системы уравнений могут иметь чисто математические ограничения и требовать специального представления задачи. Это приведет к тому, что для конкретной ХТС должна составляться уникальная система уравнений. В связи со сложностью, система уравнений может быть трудноразрешима, и требовать применения специальных математических методов. Следовательно, перед использованием интегрального метода необходимо с математической точки зрения предварительно проанализировать математические зависимости, лежащие в основе модулей ХТС.

Таким образом, для использования интегрального метода проектировщику необходимо иметь достаточно серьезную математическую подготовку и специальные компьютерные программы для решения смешанных систем уравнений (линейных, нелинейных, дифференциальных, в частных производных и др.). Однако даже в этом случае, с целью оперативного получения результатов расчета, интегральный способ расчета можно рекомендовать только для простых ХТС или для ХТС, где необходимо рассчитать только материальные балансы без учета кинетики, [термодинамики](#) и т.д. (т.е. решить линейную систему уравнений).

Суть декомпозиционного метода расчета заключается в том, что ХТС представляется в виде отдельных блоков, соответствующих элементам ХТС. Расчет ХТС сводится к последовательному расчету отдельных блоков. В этом случае, при расчете отдельного модуля требуется рассчитать только ограниченное количество уравнений, соответствующих конкретному модулю, т.е. выполнить проверочный расчет конкретного процесса. Следует отметить, что при наличии ограниченного количества возможных модулей ХТС, их алгоритмы расчета давно разработаны и приведены в специальной литературе и в виде компьютерных программ (данные алгоритмы также преподавались в курсе "[Моделирование](#) ХТП"). Именно поэтому, вследствие своей универсальности, наибольшее распространение, как при расчете сложных, так и простых ХТС, получил декомпозиционный способ расчета.

Как известно, большинство ХТС имеет рециркуляционные соединения, образующие замкнутую ХТС, непосредственный расчет которой с помощью декомпозиционного принципа невозможен. Для решения таких систем их структуру сначала необходимо привести к разомкнутому виду, и, только затем производить расчет с использованием декомпозиционного способа расчета. Однако, не смотря на то, что теория и алгоритмы анализа структуры ХТС с целью определения оптимального множества разрываемых связей с целью перевода структуры из замкнутого к разомкнутому виду, и нахождения оптимальной последовательности расчета ХТС, достаточно хорошо разработаны, каждая ХТС сама по себе уникальна. В связи с этим, в конкретном случае могут возникнуть проблемы нахождения оптимального множества разрываемых связей и оптимальной последовательности расчета декомпозиционным способом.

Существуют разновидности декомпозиционного способа расчета замкнутых ХТС, наиболее простым из которых является итерационный способ расчета. Рассмотрим итерацион-

ный способ расчета замкнутых ХТС на примере простейшей схемы, представленной на Рис.1.

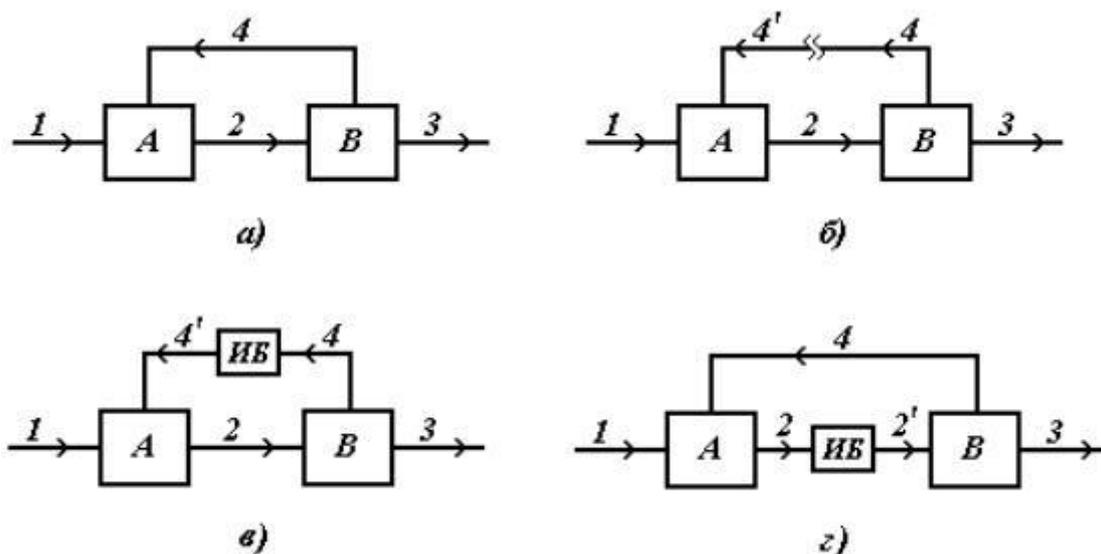


Рис.1. Иллюстрация итерационного способа расчета ХТС

Как видно на Рис.1а, простейшая замкнутая ХТС состоит из двух модулей (А и В), связанных четырьмя технологическими связями, из которых связь 4 является рециркуляционной. Исходя из исходной задачи расчета ХТС, исходными данными для расчета указанной ХТС будут параметры функционирования элементов А и В, а также параметры входящего в ХТС потока номер 1. Однако, провести расчет модуля А с целью получения параметров потока 2 невозможно, т.к. неизвестны параметры потока 4. Расчет модуля В произвести также невозможно, т.к. неизвестен поток 2, входящий в этот модуль. Таким образом, непосредственное применение декомпозиционного способа расчета этой замкнутой ХТС невозможно.

Для того чтобы декомпозиционный способ можно было применить, необходимо привести ХТС из замкнутого вида к разомкнутому. Для этого, в случае указанной ХТС, можно "разорвать" любой поток, входящий в рецикл, т.е. поток 2 или 4. В случае разрыва потока 4 (см.Рис.1б), выходящего из модуля В и входящего в модуль А, образуется новый входящий в ХТС и в модуль А поток 4'. В связи с тем, что деление потока на 4 и 4' является условным (применяемым только для цели перевода структуры ХТС из замкнутого к разомкнутому виду), то при применении итерационного способа расчета, в место разрыва помещается дополнительный модуль – итерационный блок (ИБ) (см.Рис.1в). В этом случае, исходя из исходной задачи расчета ХТС, исходными данными для расчета указанной ХТС будут являться параметры функционирования элементов А и В, а также параметры входящих потоков 1 и 4'. Первоначальные параметры потока 4' могут определяться с применением какого-либо алгоритма расчета и на основании заданных исходных данных.

С указанным набором исходных данных появляется возможность выполнить ПЕРВЫЙ расчет ХТС, т.е. определить параметры потока 2, зная которые рассчитать параметры потоков 3 и 4. В данном случае, параметры потока 4 будут отличаться от параметров потока 4', поэтому, итерационный блок, проанализировав оба набора данных (потоков 4 и 4'), рассчитает суммарную погрешность и присвоит новые значения параметров потока 4'. Так как новые значения потока 4' будут формироваться итерационным блоком с учетом расчетных параметров потока 4, то при выполнении ВТОРОГО расчета ХТС, суммарная погрешность будет меньше, чем при первом расчете. Далее, циклические расчеты (итерации) проводятся до тех пор, пока значения суммарной погрешности не будут ниже требуемой точности расчета.

Итерационный метод расчета ХТС обычно применяется для расчета относительно простых ХТС, т.к. применение данного метода для сложных ХТС является не достаточно эффективным, т.к. предусматривает последовательные приближения искомых параметров

потоков. В связи с тем, что элементы ХТС, исходя из их физико-химической природы, могут функционировать лишь в заданных интервалах изменения параметров, применение итерационного метода иногда может быть невозможно, т.к. в процессе сходимости этого математического метода, значения технологических параметров могут выйти за пределы функционирования элементов ХТС. При расчете ХТС, имеющей несколько разрываемых потоков (наличие нескольких рециклов), применение итерационного метода вообще может быть достаточно проблематично, т.к. вследствие наличия технологических связей, итерационные процессы будут взаимосвязаны, что негативно повлияет на достижение решения для всей системы.

При расчете сложных ХТС, имеющих несколько разрываемых потоков, обычно применяются методы многомерной минимизации суммарной погрешности, описанные в специальной литературе (например /1/). Суть этих методов заключается в том, что в отличие от итерационного метода, искомые значения параметров потоков рассчитываются при проведении расчета, с помощью специальных математических методов с ограничениями, наличие которых не позволяет выйти за пределы функционирования технологических операторов (в процессе нахождения решения), что позволяет достичь сходимости намного быстрее и надежнее.

Как было указано выше, рецикл можно привести из замкнутого вида к разомкнутому виду путем разрыва одной из технологических связей, входящих в рецикл. На Рис.1г представлен вариант разрыва потока 2. В этом случае, имея начальные приближения параметров потока 2', сначала будет рассчитываться модуль В с определением параметров потоков 3 и 4, а затем модуль А с определением параметров потока 2. В отличие от предыдущего варианта, итерации будут проводиться по параметрам потока 2, а не потока 4. Вопросы выбора оптимальных вариантов перевода ХТС из замкнутого к разомкнутому виду будут рассмотрены далее.

Сравнение особенностей интегрального и декомпозиционного методов расчета ХТС представлены в Таблице 1.

Таблица 1.

Сравнительные характеристики интегрального и декомпозиционного методов расчета ХТС.

Интегральный метод	Декомпозиционный метод
Способ представления задачи	
Глобальная система уравнений	Отдельные моделирующие блоки, стыкующиеся с помощью координирующей программы
Способ решения задачи	
Совместное решение уравнений	Последовательный расчет с использованием итерационного метода расчета, и, с предварительным анализом ХТС для выявления оптимальной последовательности расчета ХТС.
Достоинства	
Возможность проведения расчета для любого набора неизвестных переменных	Меньшее количество вычислений, наглядность
Недостатки	
Большая размерность единой системы уравнений наряду с отсутствием надежных методов решения смешанных систем линейных, нелинейных и дифференциальных уравнений большой размерности. Уникальность каждой системы уравнений.	Трудность построения оптимального алгоритма расчета ХТС.
Рекомендации	

Интегральный метод	Декомпозиционный метод
Применять только при расчетах упрощенных ХТС	Применять для расчета ХТС произвольной сложности.

1. ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ НА МЕСТАХ РАЗРЫВОВ

Декомпозиционный метод предполагает решение уравнений на местах разрыва потоков. При этом могут быть использованы традиционные методы решения систем нелинейных алгебраических уравнений.

Как известно, в результате структурного анализа ХТС комплекс превращается в разомкнутую систему (рисунок 1.1). На месте разрыва необходимо решать систему уравнений в неявном виде: $X=Y(X)$

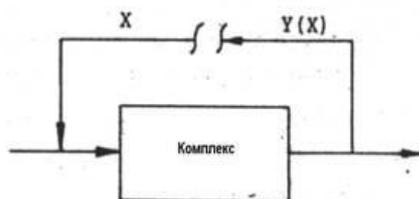


Рисунок 2 – Представление комплекса после разрыва потоков

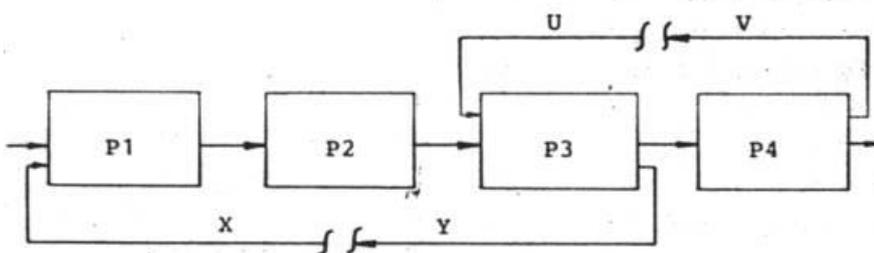


Рисунок 3 - Представление комплекса после разрыва потоков

На местах разрыва потоков (рисунок 3) необходимо решать уравнения:

$$U=V(U,X) \quad Y=X(U,X)$$

Для решения этих уравнений в современных программных продуктах используются следующие методы:

- метод простой итерации;
- метод Вегстейна;
- метод Ньютона-Рафсона и другие.

В общем случае на местах разрыва необходимо решать следующую систему из n нелинейных алгебраических уравнений с n неизвестными:

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

2 МЕТОД ПРОСТОЙ ИТЕРАЦИИ И ЕГО МОДИФИКАЦИИ

Для применения метода простой итерации система рассматриваемых уравнений преобразуется к следующему виду: $x_i = \varphi_i(x_1, \dots, x_n)$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Задаются начальные приближения и осуществляется поиск решения по этому преобразованному уравнению. Необходимо отметить, что на сходимость процедуры поиска решения сильно влияет способ представления преобразованных уравнений и выбор начального приближения.

Пример 1. Рассмотрим решение уравнения $x^3 - x - 1 = 0$ (1)

Начальное приближение $x^{(0)} = 0$, точность решения $\varepsilon = 10^{-2}$.

Представим уравнение в виде: $x = x^3 - 1$ (2)

Результаты, приведенные в таблице 2, показывают, что процесс решения расходится.

Таблица 2 – Результаты решения уравнения (2) методом простой итерации

k	$x^{(k)}$	$x^{(k+1)}$
0	0	-1
1	-1	-2
2	-2	-9
3	-9	-730
4	-730	$5,3 \cdot 10^8$

Представим уравнение (1) в виде: $x = \sqrt[3]{x+1}$ (3)

Результаты, приведенные в таблице, показывают, что процесс решения сходится.

Таблица 4 - Результаты решения уравнения (3) методом простой итерации

k	$x^{(k)}$	$x^{(k+1)}$
0	0	1
1	1	1,26
2	1,26	1,32
3	1,32	1,325
4	1,325	1,326

На 4 шаге выполняется условие сходимости $|x^{(4)} - x^{(3)}| < 0,01$ и итерационный процесс заканчивается.

Пример 2.

Рассмотрим решение системы уравнений:

$$\left. \begin{aligned} a x_1 + x_2 + x_1^2 + x_2^3 &= 111 \\ x_1 + b x_2 + x_1^3 - x_2^2 &= 198 \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Начальное приближение $x^{(0)} = (1,1)$, при $a = 100$, $b = 100$.

Представим систему в виде (5)

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= -0,01x_2 - 0,01x_1^2 - 0,01x_2^3 + 1,11 = \varphi_1(x_1, x_2) \\ x_2 &= -0,01x_1 - 0,01x_1^3 - 0,01x_2^2 + 1,98 = \varphi_2(x_1, x_2) \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

В таблице 5 показан ход итерационного процесса поиска решения системы (4).

Таблица 5- ход итерационного процесса

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k+1)}$
0	1	1
1	1,08	1,97
2	1,00218	1,99541
3	1,00055	1,99973
4	1,00002	1,99997
5	1,00000	2,00000

3. МЕТОД ВЕГСТЕЙНА

В соответствии с этим методом: $x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + t_i(x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)})$,

$$t_i = \frac{x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)}}{2x_i^{(k-1)} - x_i^{(k)} - x_i^{(k-2)}}$$

где

В нижеследующей таблице приведены результаты решения системы (4) с использованием метода Вегстейна.

k	x1	x2	t1	t2
0	1	1	-0,493	0,027
1	1,08	1,97	-0,33	0,028
2	1,002	1,995	-0,248	0,028
3	1,041	1,996	-0,199	0,029
4	1,028	1,996		
5	1,031	1,996		
6	1,03	1,996		

4 ПРИМЕР ДЕКОМПОЗИЦИОННОГО РАСЧЕТА ХТС С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ПРОСТОЙ ИТЕРАЦИИ

Определить расходы промежуточных и выходных потоков ХТС (рисунок 4.1).

Пусть $G_{01} = 1000 \text{ кг} \cdot \text{ч}^{-1}$; $G_{21} = 0,1G_{12}$; $G_{31} = 0,2(G_{23} + G_{43})$; $G_{23} = 0,3G_{12}$; $G_{43} = 0,4G_{34}$.

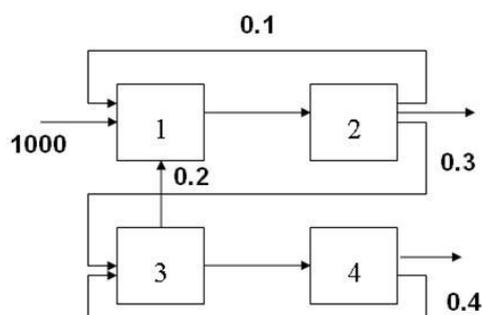


Рисунок 4.1- Химико-технологическая система

Здесь и в дальнейшем приняты следующие обозначения: $G_{ij}^{(p)}$ - расход потока, выходящего из i -го элемента и поступающего в j -й элемент. Если первый индекс 0, то поток соответствует входному потоку ХТС, если второй индекс 0, поток соответствует выходному потоку ХТС.

4.1 СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ ХТС

Все элементы ХТС образуют комплекс, т. е. могут быть рассчитаны только совместно. В соответствии со структурным анализом ХТС с помощью прадерева можно выделить следующие контуры:

$$K_1 = \{1 - 2 - 1\}, K_2 = \{1 - 2 - 3 - 1\}, K_3 = \{3 - 4 - 3\}$$

Так как параметричность всех потоков одинакова (каждый поток характеризуется только расходом), то для преобразования замкнутой ХТС в разомкнутую можно воспользоваться, например, разрывом дуг 1—2 и 3—4.

Окончательная последовательность расчета ХТС: {ИБ, 2, 4, 3, 1}, где ИБ-итерационный блок, в котором задаются начальные приближения по потокам, и обеспечивается равенство параметров полученных потоков.

Информационная блок-схема расчета ХТС с указанием расходов соответствующих потоков представлена на рисунке 4.2.

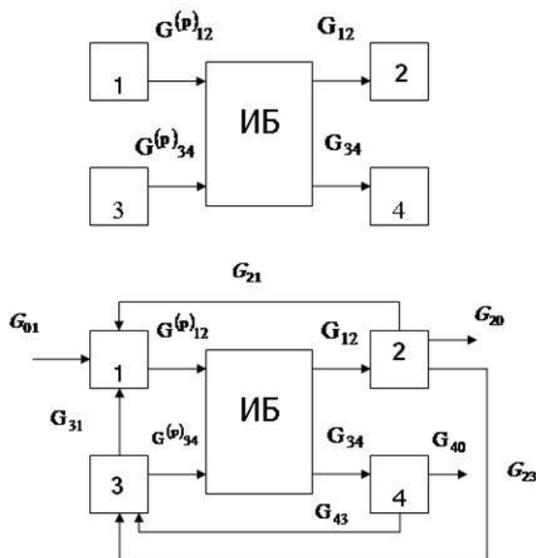


Рисунок 4.2- Этапы составления информационной блок-схемы и определение последовательности расчета элементов ХТС

4.2 СОСТАВЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ОПИСАНИЙ ЭЛЕМЕНТОВ ХТС

Для расчета ХТС необходимо наличие математических описаний отдельных элементов ХТС. В рассматриваемом примере их можно составить с помощью соотношений между расходами потоков, заданных в условии.

Запишем математические описания элементов ХТС согласно определенной ранее вычислительной последовательности (рисунок 4.3).

На рисунке 4.3 $G_{12}^{(p)}$, $G_{34}^{(p)}$ - рассчитанные расходы соответствующих разорванных потоков.

Их начальные значения задаются в виде приближенных значений G_{12}, G_{34} .

В результате расчета должно быть: $G_{12} = G_{12}^{(p)}$, $G_{34} = G_{34}^{(p)}$.

Таким образом, математическое описание данной ХТС представляет собой систему из 8-и линейных уравнений с 8-ю неизвестными.

Для данного примера конечно можно воспользоваться известными методами решения таких уравнений. В общем же случае, как правило, получается система нелинейных уравнений. Для решения данной задачи можно воспользоваться различными методами, в данном случае - методом простой итерации. Этот метод носит общий характер и с успехом применяется для расчета сложных реальных ХТС.

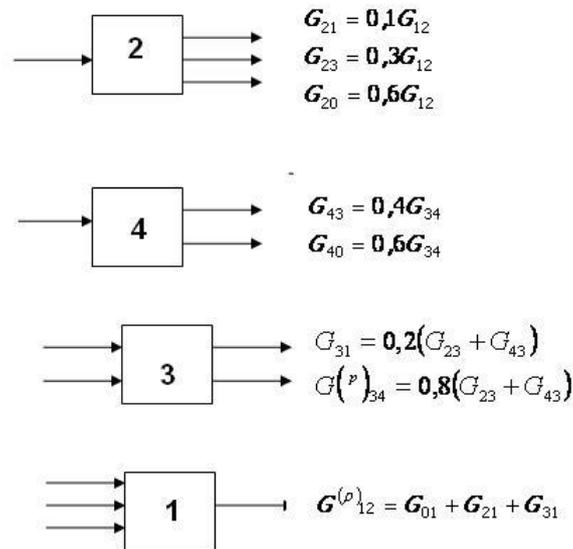


Рисунок 4.3 - Последовательность расчета элементов ХТС

Алгоритм решения задачи

Шаг 1. Ввод исходных данных.

В данном случае таковыми будут:

G_{01} — расход входного потока, кг·ч⁻¹;

ϵ — точность вычисления, %;

G_{12}, G_{34} — начальные приближения для расходов на выходе ИБ.

Шаг 2. Задание номера итерации, $k=1$.

Шаг 3. Расчет ХТС в соответствии с найденной в результате структурного анализа последовательностью:

сначала необходимо для элемента 2 определить значения расходов для выходных потоков G_{21}, G_{23} и G_{20} ,

затем — для элемента 4: G_{43}, G_{40} ,

далее для элемента 3: G_{31} и $G^{(p)}_{34}$

и, наконец, для элемента 1 значение $G^{(p)}_{12}$. Индекс p указывает на расчетные значения

Шаг 4. Проверка условий

$$\left| \frac{G^{(p)}_{12} - G_{12}}{G_{12}} \right| \cdot 100 > \epsilon \quad \text{или} \quad \left| \frac{G^{(p)}_{34} - G_{34}}{G_{34}} \right| \cdot 100 > \epsilon$$

Шаг 5. Если эти условия выполнены, т. е. значения соответствующих расходов на местах разрывов определены с большей погрешностью, чем ϵ , то в соответствии с методом простой итерации

$$G_{12} = G^{(p)}_{12}, \quad G_{34} = G^{(p)}_{34}, \quad k = k + 1.$$

и вычисления ХТС повторяются, начиная с шага 3.

Шаг 6. Если же условия не выполнены, т. е. значения соответствующих расходов на местах разрыва найдены с заданной точностью, то выполняется шаг 7.

Шаг 7. Печать числа итераций k , необходимых для расчета ХТС, и значений расходов промежуточных и выходных потоков.

По приведенному выше алгоритму была составлена программа для реализации задачи с помощью электронной таблицы Excel и системы компьютерной математики Mathcad.

4.3 РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕКТРОННОЙ ТАБЛИЦЫ EXCEL И СИСТЕМЫ КОМПЬЮТЕРНОЙ МАТЕМАТИКИ MATHCAD

4.3.1 РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕКТРОННОЙ ТАБЛИЦЫ EXCEL

Для решения нашей задачи в ячейку E1 вводится значение расхода входного потока G01. В ячейки E5, E6 задаются начальные значения для поисковых переменных G34, G12.

В ячейках E11-E18 осуществляется расчет ХТС в соответствии с установленной последовательностью.

В ячейках F21, F22 вычисляются рассогласования по расходам в местах разрыва потоков в виде квадратов разностей.

В ячейку E26 заносится суммарное рассогласование по расходу разорванных потоков. Далее с помощью поиска решения минимизируем квадрат суммы по G34 и G12. Результаты решения представлены на рисунке - 4.4.

	A	B	C	D	E	F
1	Ввод исходных данных:			G01=	=1000	
2						
3						
4	Начальные приближения для					
5	расходов:			G34=	436,759029004817	
6				G12=	1231,53164233069	
7						
8	Расчет ХТС в соответствии с					
9	найденной в результате					
10	структурного анализа последо-					
11	вательностью:			G21=	=0,1*\$E\$6	
12				G23=	=0,3*\$E\$6	
13				G20=	=0,6*\$E\$6	
14				G43=	=0,4*\$E\$5	
15				G40=	=0,6*\$E\$5	
16				G31=	=0,2*(\$E\$12+\$E\$14)	
17				G34R=	=\$E\$12+\$E\$14-\$E\$16	
18				G12R=	=\$E\$1+\$E\$11+\$E\$16	
19						
20						
21	Квадраты разностей расходов :			(G34-G34R)^2=		=(E5-E17)^2
22				(G12-G12R)^2=		=(E6-E18)^2
23						
24	Минимизируем квадрат суммы					
25	с помощью поиска решения					
26	по G34 и G12:				=(F21+F22)^2	
27						

Рисунок 4.4 - Результаты решения задачи декомпозиционного расчета ХТС с помощью EXCEL

4.3.2 РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ В MATHCAD МЕТОДОМ ПРОСТОЙ ИТЕРАЦИИ С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕМЕНТОВ ПРОГРАММИРОВАНИЯ

Ввод исходных данных: $G01 := 1000$

Задание начальных приближений: $G12 := 1000$ $G34 := 1000$

Задание функции пользователя:

```
f(G34, G12, K) :=
  K ← 1
  d ← 5
  z ← 5
  while |d| ≥ 0.1 ∧ |z| ≥ 0.1
    G21 ← 0.1 · G12
    G23 ← 0.3 · G12
    G20 ← 0.6 · G12
    G43 ← 0.4 · G34
    G40 ← 0.6 · G34
    G31 ← 0.2 · (G23 + G43)
    G34R ← 0.8 · (G23 + G43)
    G12R ← G01 + G31 + G21
    d ←  $\frac{|G34R - G34| \cdot 100}{G34R}$ 
    z ←  $\frac{|G12R - G12| \cdot 100}{G12R}$ 
    K ← K + 1
    G34 ← G34R
    G12 ← G12R
  (
    G01
    G21
    G23
    G20
    G43
    G40
    G31
    G34
    G12
    K
  )
```

Задание номера итерации

Точность расчета

Условие расчета

Расчет ХТС в соответствии с найденной в результате структурного анализа последовательностью

Проверка условий

Порядок вывода результатов

Вывод результатов:

	0
0	$1 \cdot 10^3$
1	123.274
2	369.821
3	739.642
f(G34, G12, K) = 4	174.937
5	262.406
6	108.952
7	435.807
8	$1.232 \cdot 10^3$
9	7

Рисунок 4.5 - Результаты решения задачи декомпозиционного расчета ХТС с помощью MATHCAD

4.3.3 РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ В MATHCAD МЕТОДОМ ВЕГСТЕЙНА С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕМЕНТОВ ПРОГРАММИРОВАНИЯ

Ввод исходных данных: $G01 := 1000$

Задание начальных приближений:

$G120 := 1500$ $G340 := 500$

$m_1 := G120$ $m_2 := G340$

Задание функции пользователя:

$$f(G120, G340) := \begin{array}{l} G21 \leftarrow 0.1 \cdot G120 \\ G23 \leftarrow 0.3 \cdot G120 \\ G20 \leftarrow 0.6 \cdot G120 \\ G43 \leftarrow 0.4 \cdot G340 \\ G40 \leftarrow 0.6 \cdot G340 \\ G31 \leftarrow 0.2 \cdot (G23 + G43) \\ G341 \leftarrow 0.8 \cdot (G23 + G43) \\ G121 \leftarrow G01 + G31 + G21 \\ \begin{pmatrix} G121 \\ G341 \end{pmatrix} \end{array}$$

Простая итерация

Первая итерация

$$f(G120, G340) = \begin{pmatrix} 1.28 \times 10^3 \\ 520 \end{pmatrix}$$

$k := f(G120, G340)$

$G120 := k_1$

$G340 := k_2$

Рисунок 4.6-Протокол решения задачи (начало)

Вторая итерация

$$f(G120, G340) = \begin{pmatrix} 1.246 \times 10^3 \\ 473.6 \end{pmatrix}$$

$$p := f(G120, G340)$$

$$\underline{G120} := p_1$$

$$\underline{G340} := p_2$$

Третья простая итерация

$$f(G120, G340) = \begin{pmatrix} 1.237 \times 10^3 \\ 450.688 \end{pmatrix}$$

Метод Вегстейна

$$tG12 := \frac{p_1 - k_1}{2 \cdot k_1 - p_1 - m_1}$$

$$tG12 = 0.18$$

$$\underline{G120} := p_1 + tG12 \cdot (p_1 - k_1)$$

$$G120 = 1.24 \times 10^3$$

$$tG34 := \frac{p_2 - k_2}{2 \cdot k_2 - p_2 - m_2}$$

$$tG34 = -0.699$$

$$\underline{G340} := p_2 + tG34 \cdot (p_2 - k_2)$$

$$G340 = 506.024$$

Рисунок 4.7- Протокол решения задачи (окончание)

4.3.4 РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ В MATHCAD С ПОМОЩЬЮ ПРОЦЕДУРЫ МИНИМИЗАЦИИ

Ввод исходных данных: $G01 := 1000$

Задание начальных приближений: $G12 := 1000$

Задание функции пользователя: $G34 := 1000$

$R(G34, G12) :=$

$G21 \leftarrow 0.1 \cdot G12$	
$G23 \leftarrow 0.3 \cdot G12$	
$G20 \leftarrow 0.6 \cdot G12$	Расчет ХТС
$G43 \leftarrow 0.4 \cdot G34$	
$G40 \leftarrow 0.6 \cdot G34$	
$G31 \leftarrow 0.2 \cdot (G23 + G43)$	
$G34R \leftarrow 0.8 \cdot (G23 + G43)$	
$G12R \leftarrow G01 + G31 + G21$	
$d \leftarrow (G34R - G34)^2$	
$z \leftarrow (G12R - G12)^2$	
$R \leftarrow d + z$	

Given

$$G12 > 0 \quad G34 > 0$$

$$\begin{pmatrix} G34 \\ G12 \end{pmatrix} := \text{Minimize}(R, G34, G12) \quad \begin{pmatrix} G34 \\ G12 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 434.783 \\ 1.232 \times 10^3 \end{pmatrix}$$

Рисунок 4.8 - Результат решения задачи

Ниже представлены результаты декомпозиционного расчета ХТС с использованием метода простой итерации

Исходные данные	Рассчитанные значения расходов потоков										
	F	G_{12}	G_{34}	G_{21}	G_{23}	G_{20}	G_{43}	G_{40}	$G_{34}^{(p)}$	$G_{12}^{(p)}$	k
1000	1	1000	1000	123,4	370,2	740,4	176,5	264,7	434,8	1232	5

4.4 ИНТЕГРАЛЬНЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА

Интегральный метод расчета предполагает совместное решение уравнений математического описания элементов ХТС.

Для рассматриваемого примера эти уравнения имеют вид:

1-й элемент $G_{12} = G_{01} + G_{21} + G_{31},$

$$G_{21} = 0,1G_{12}$$

$$G_{23} = 0,3G_{12}$$

2-й элемент $G_{20} = 0,6G_{12}$

$$G_{31} = 0,2(G_{23} + G_{43})$$

3-й элемент $G_{34} = 0,8(G_{23} + G_{43})$

$$G_{43} = 0,4G_{34}$$

4-й элемент $G_{40} = 0,6G_{34}$

Неизвестные: $G_{12}, G_{21}, G_{31}, G_{23}, G_{43}, G_{34}, G_{40}, G_{20}$ определяются из решения системы из 8-и уравнений с 8-ю неизвестными. Для данной ХТС эта система уравнений линейная. Введем следующие обозначения:

G_{12}	G_{21}	G_{31}	G_{23}	G_{43}	G_{34}	G_{40}	G_{20}	G_{01}
x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	1000

Результат решения задачи представлен на рисунке 4.9.

$$\begin{aligned}
 x1 &:= 1000 & x2 &:= 1000 & x3 &:= 1000 & x4 &:= 1000 \\
 x5 &:= 1000 & x6 &:= 1000 & x7 &:= 1000 & x8 &:= 1000
 \end{aligned}$$

Given

$$x1 = 1000 + x2 + x3$$

$$x2 = 0.1 \cdot x1$$

$$x4 = 0.3 \cdot x1$$

$$x8 = 0.6 \cdot x1$$

$$x3 = 0.2 \cdot (x4 + x5)$$

$$x6 = 0.8 \cdot (x4 + x5)$$

$$x5 = 0.4 \cdot x6$$

$$x7 = 0.6 \cdot x6$$

$$x1 > 0 \quad x2 > 0 \quad x3 > 0 \quad x4 > 0 \quad x5 > 0 \quad x6 > 0 \quad x7 > 0 \quad x8 > 0$$

$$\begin{pmatrix} x1 \\ x2 \\ x3 \\ x4 \\ x5 \\ x6 \\ x7 \\ x8 \end{pmatrix} := \text{Find}(x1, x2, x3, x4, x5, x6, x7, x8) = \begin{pmatrix} 1.232 \times 10^3 \\ 123.188 \\ 108.696 \\ 369.565 \\ 173.913 \\ 434.783 \\ 260.87 \\ 739.13 \end{pmatrix}$$

Проверка $x8 + x7 = 1 \times 10^3$

Рисунок 4.9 - Результат решения задачи интегральным методом

5. КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА №1

РАСЧЕТ ХТС С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭЛЕКТРОННОЙ ТАБЛИЦЫ EXCEL И СИСТЕМЫ КОМПЬЮТЕРНОЙ МАТЕМАТИКИ МАТНСAD

При выполнении задания следует учитывать, что каждый поток характеризуется только расходом. Варианты заданий приведены ниже (расходы заданы в кг-ч-1).

Порядок выполнения работы

В соответствии с индивидуальным заданием необходимо выполнить следующее.

1. Провести структурный анализ заданной ХТС.
2. Составить математическое описание элементов ХТС.
3. Составить информационную блок-схему расчета ХТС.
4. Составить алгоритм расчета ХТС методом простой итерации.
5. Выполнить расчет ХТС на ПК с использованием электронной таблицы Excel и Mathcad.

Содержание отчета

Отчет по лабораторной работе должен содержать:

1. Постановку задачи.
2. Результаты структурного анализа ХТС.
3. Уравнения математического описания ХТС.
4. Информационную блок-схему расчета ХТС.
5. Алгоритм и листинги программ расчета ХТС методом простой итерации.
6. Результаты расчета расходов для всех элементов ХТС на ПК.
7. Анализ полученных результатов.

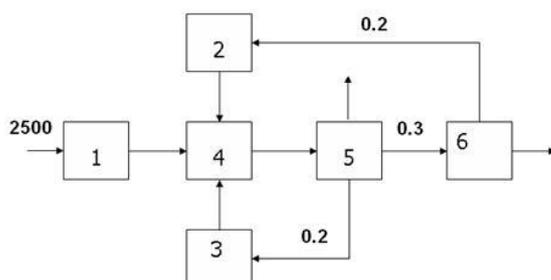
Дополнительные контрольные вопросы к лабораторной работе

1. Сформулируйте задачу расчета стационарного режима ХТС.
2. Что является основой для расчета ХТС?
3. В чем сущность декомпозиционного и интегрального методов расчета ХТС?
4. Каковы, на Ваш взгляд, основные преимущества и недостатки этих методов расчета?
5. Назовите этапы расчета ХТС с использованием метода простой итерации.
6. Поясните алгоритм декомпозиционного расчета ХТС методом простой итерации.

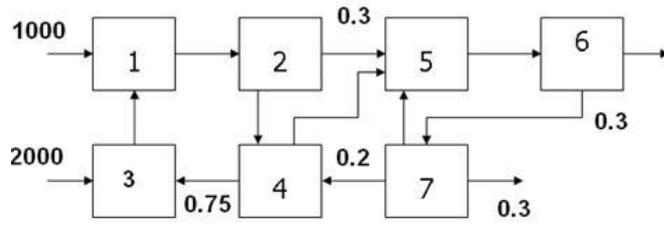
5.1. ВАРИАНТЫ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ЗАДАНИЙ К КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЕ

Ниже приведены варианты заданий по номерам последних цифр в зачетной книжке. Все параметры в формулах, если не оговорено иное, следует записывать в системе СИ. Параметры вариантов 9-16 необходимо увеличить в 1,2 раза по отношению к вариантам представленным в вариантах 1-8, соответственно. Параметры вариантов 17-24 увеличить на 1.25. Параметры вариантов 25-32 увеличить в 1,3 раза.

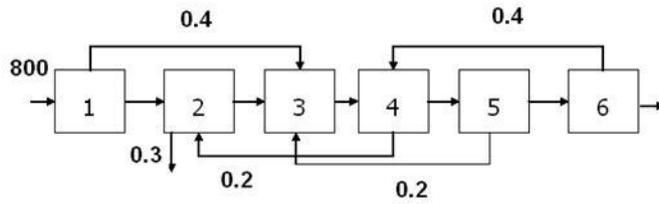
Задание 1



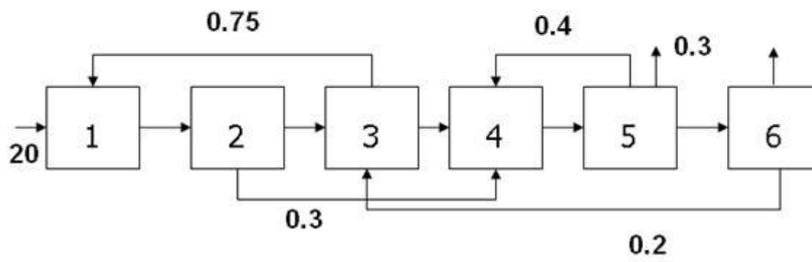
Задание 2



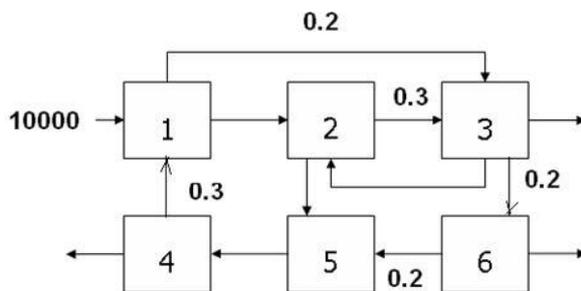
Задание 3



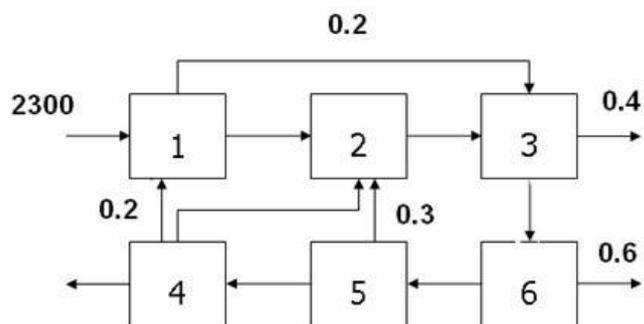
Задание 4



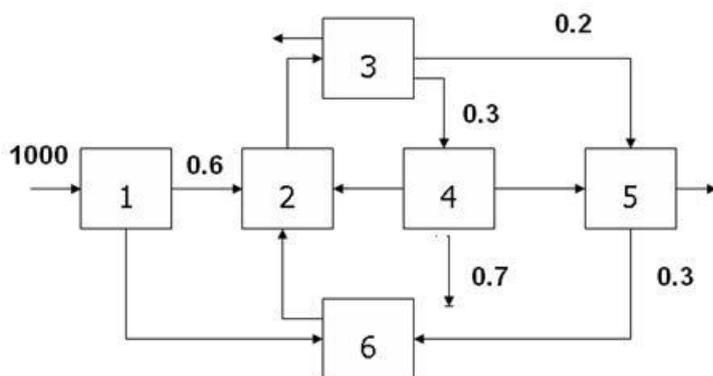
Задание 5



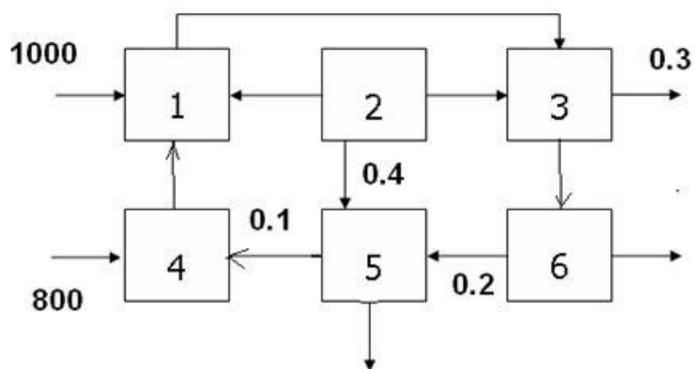
Задание 6



Задание 7



Задание 8



6. Приложение

Подготовка задачи для решения в рамках EXCEL проводится в следующей последовательности:

- 1) выбор ячеек для поисковых переменных,
- 2) задание в них координат исходной точки поиска,
- 3) выбор ячейки для значения целевой функции,
- 4) запись в ней формулы для её вычисления,
- 5) выбор ячеек для ограничений в виде функциональных неравенств,
- 6) запись в ячейках формул для их вычисления,
- 7) выбор ячеек для ограничений в виде функциональных равенств,
- 8) записи в ячейках формул для их вычисления.

Далее с помощью кнопок “Сервис”, ”Поиск решения” подключается один из двух градиентных методов: метод Ньютона или метод сопряжённых градиентов. Задаются ячейки, значения которых будут варьироваться в процессе поиска, добавляются ограничения на переменные, задаются параметры поиска (число итераций, способ вычисления частных производных и т. д.). По команде “Выполнить “ осуществляется решение задачи.

Примеры решения задач оптимизации.

Функция Пауэлла

Найти минимум функции $f(x,y,z,v) = (x+10y)^2 + 5 \cdot (v-z)^2 + (y-2 \cdot v)^4 + 10(x-z)^4$.

На рисунке 6.1 показан предварительный этап решения задачи оптимизации.

На первом этапе выбираются произвольные ячейки (например, В1-В4) для поисковых переменных x , y , v , z . В эти ячейки вводятся координаты исходной точки поиска (5, 0.5, 0.1, 0.1).

Далее выбирается произвольная ячейка для значений целевой функции (например, С1) и в неё записывается формула для вычисления этих значений.

Далее с помощью кнопок “Сервис”, ”Поиск решения” подключается один из двух градиентных методов: метод Ньютона или метод сопряжённых градиентов (рисунок 6.2, рисунок 6.3).

После нажатия клавиши ”Добавить” задаются ограничения на переменные (рисунок 6.4).

После задания параметров поиска и нажатия клавиши ВЫПОЛНИТЬ (рисунок 6.5) происходит решение задачи с указанием состояния поиска решения на каждой итерации (рисунок 6.6). Результат решения показан на рисунке 6.7.

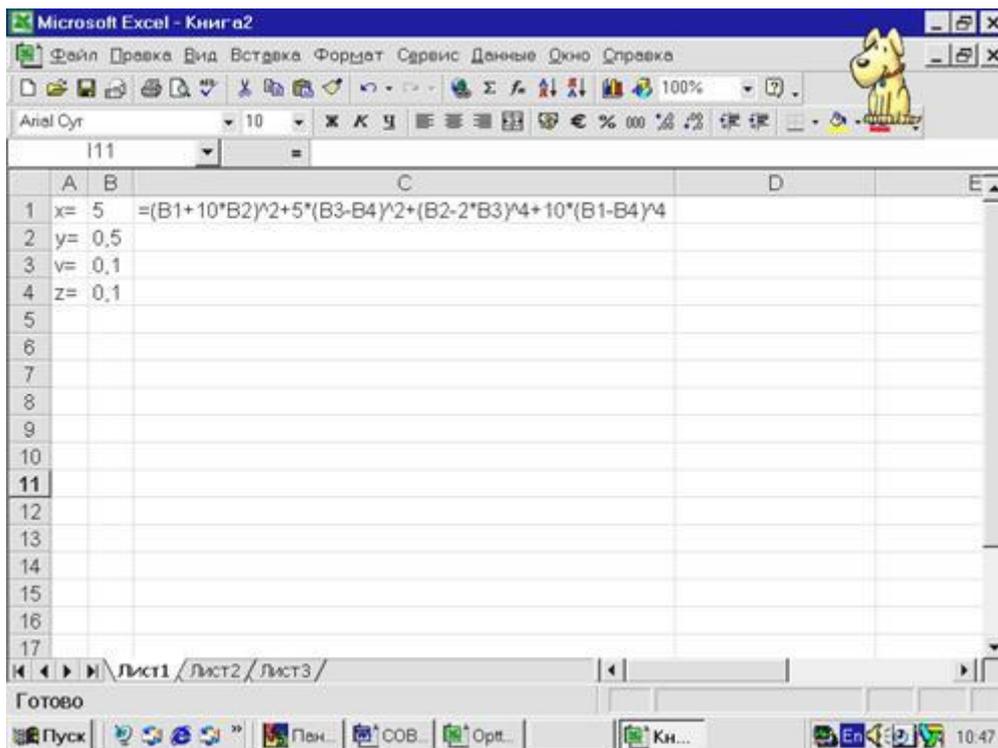


Рисунок 6.1 - Решение задачи оптимизации. Функция Пауэлла

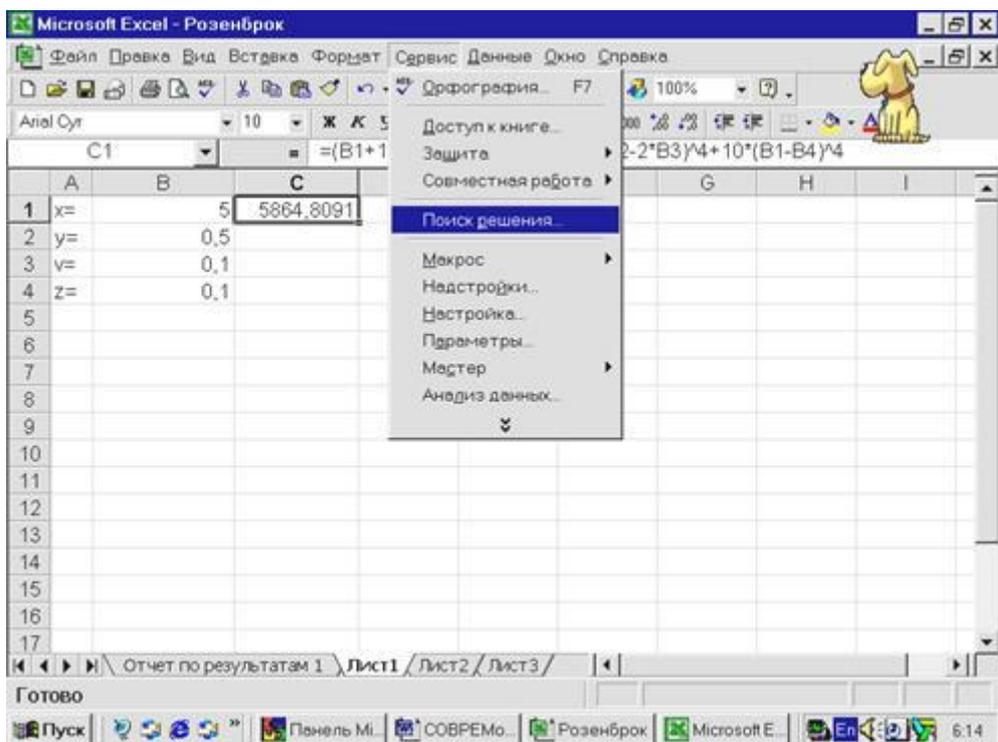


Рисунок 6.2 - Подключение одного из двух градиентных методов: метода Ньютона или метода сопряжённых градиентов

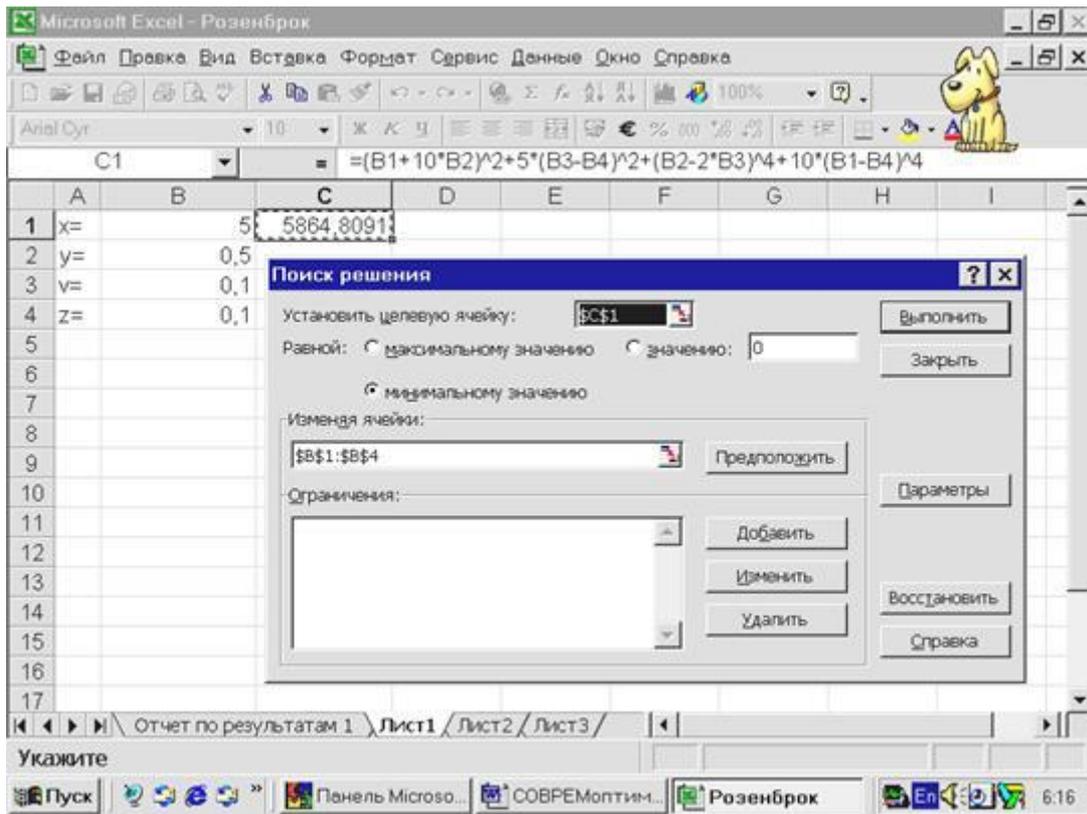


Рисунок 6.3 - Подключение одного из двух градиентных методов: метода Ньютона или метода сопряжённых градиентов

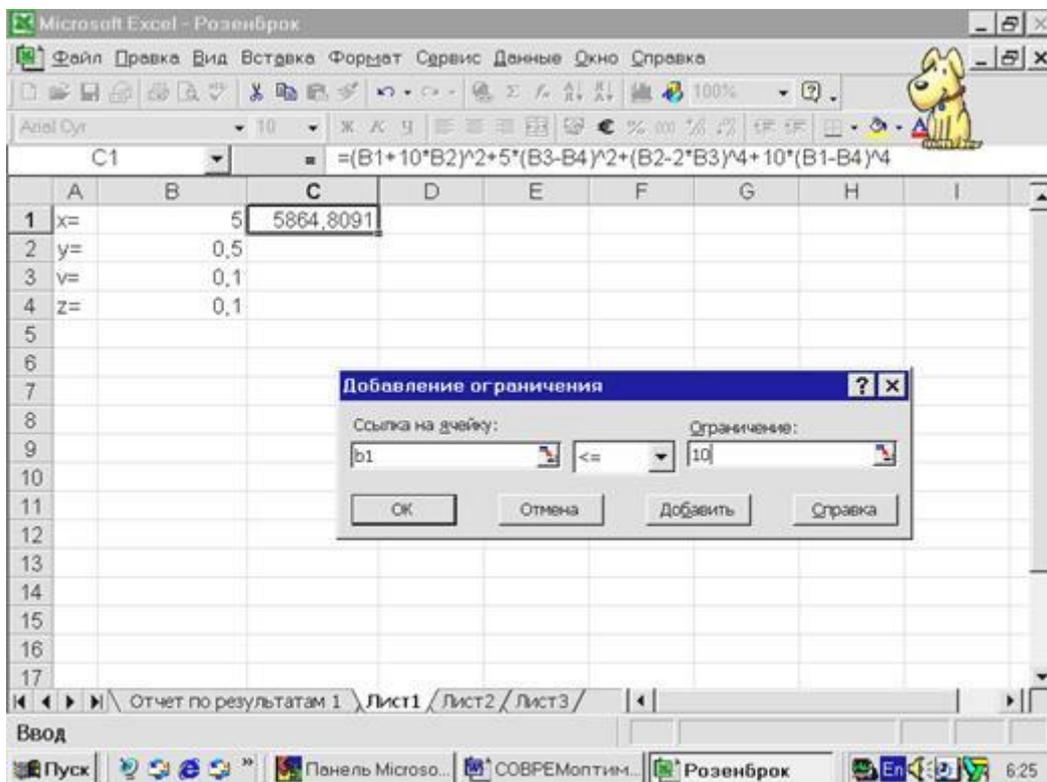


Рисунок 6.4 - Задание ограничений на переменные

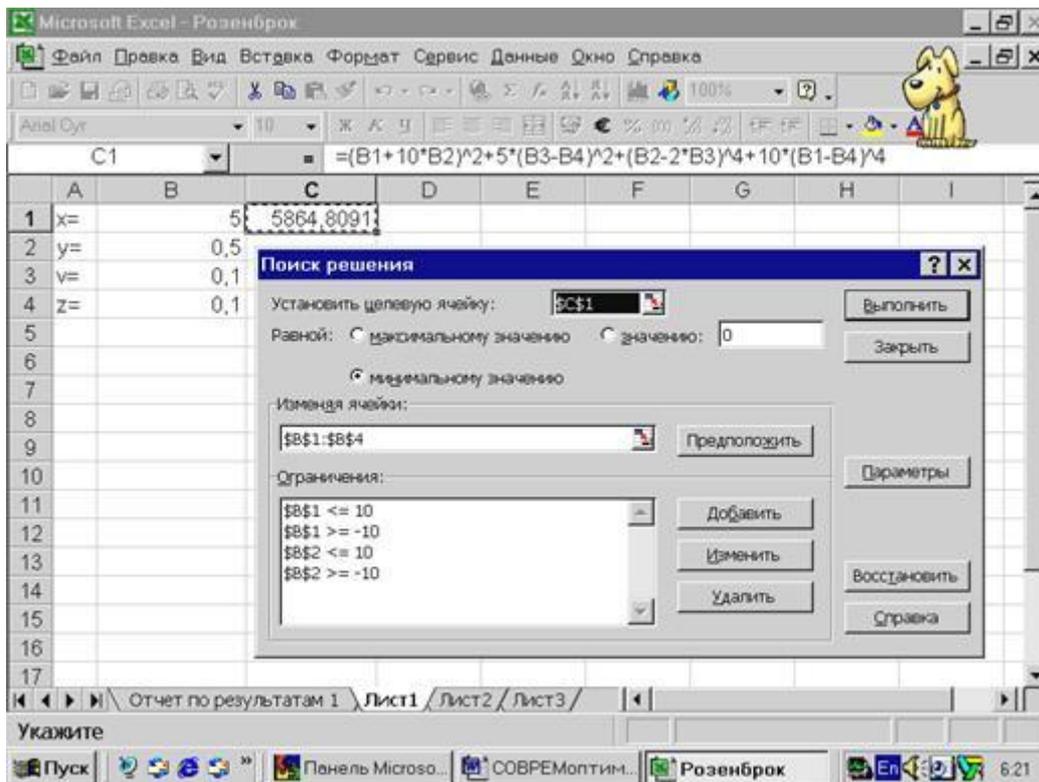


Рисунок 6.5 - Решение задачи

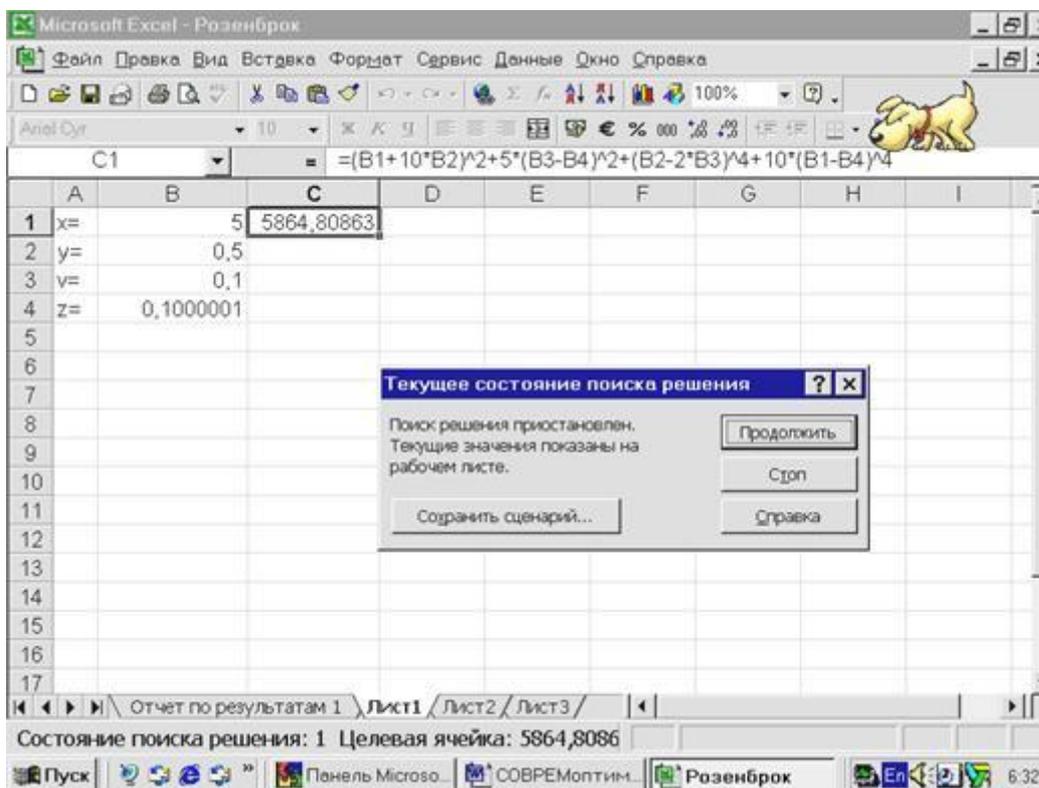


Рисунок 6.6 - Решение задачи с указанием решения на каждой итерации

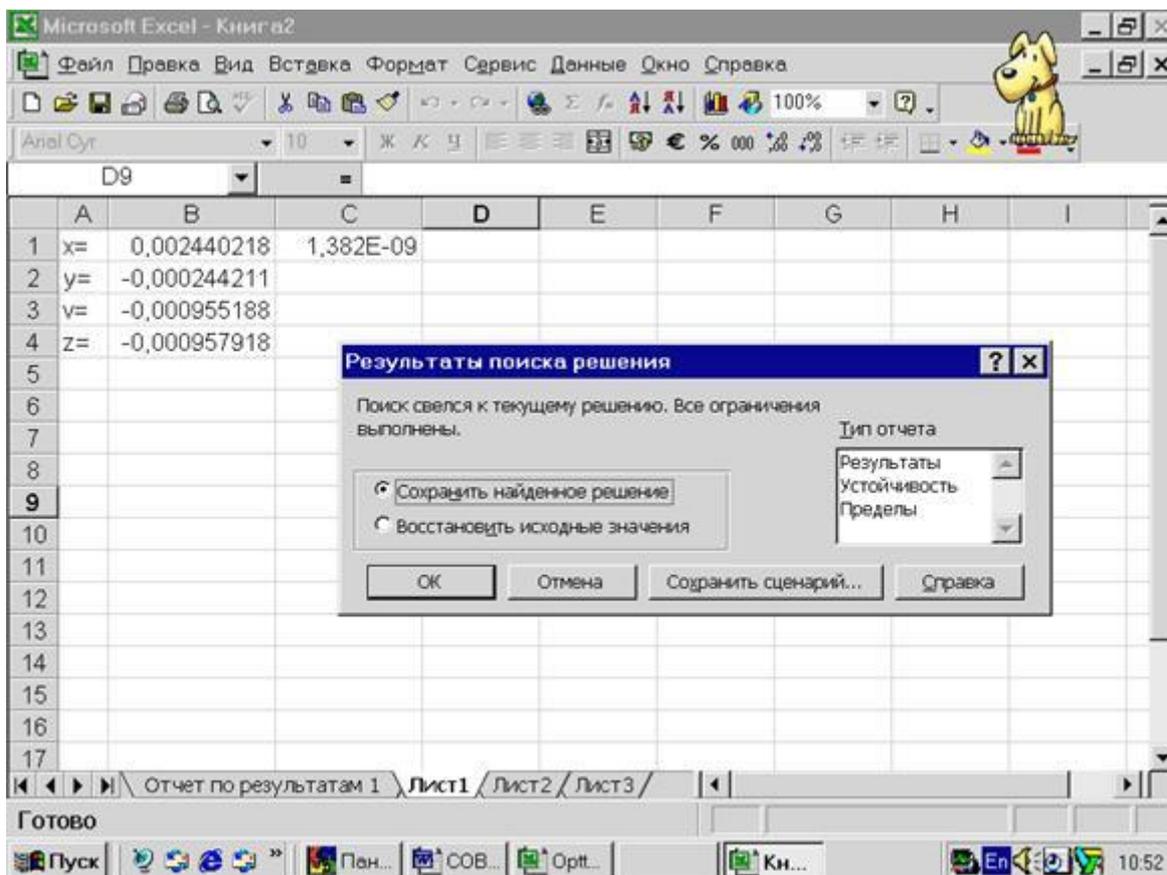


Рисунок 6.7 - Решение задачи

ЛИТЕРАТУРА

1. , Хартманн К, , Андреева анализ и принятие решений. Компьютерные технологии моделирования химико-технологических систем. СПб.: СПГТИ (ТУ), 2008.-160 с.
2. Холоднов В. А, , Боровинская анализ и принятие решений. Математическое моделирование и оптимизация объектов химической технологии в Mathcad и Excel. СПб.: СПГТИ (ТУ), 2007.-433 с.

КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА №2

Варианты к контрольному заданию

Буквы алфавита	Задачи				
	№1	№2	№3	№4	№5
а, б, в	1	16	17	32	33
г, д, е, ё	2	15	18	31	34
ж, з, и, й, к	3	14	19	30	
л, м, н	4	13	20	29	
о, п, р	5	12	21	28	
с, т, у	6	11	22	27	
ф, х, ц, ч, ш	7	10	23	26	
щ,ъ,ы,ь,э,ю,я	8	9	24	25	

Номера вопросов, входящих в контрольное задание, определяют по таблице, в зависимости от сочетания букв в фамилии студента. Из приведенных ниже контрольных вопросов необходимо ответить письменно на 4 вопроса соответствующих Вашему варианту.

Номер первой задачи соответствует первой букве фамилии, второй задачи – второй букве и т.д. Если фамилия студента содержит меньше 9 букв номера последующих задач и вопросов будут соответствовать последней букве фамилии.

ПЕРЕЧЕНЬ КОНТРОЛЬНЫХ ВОПРОСОВ

1. Модели. Моделирование. Области применения моделирования.
2. Определение модели. Свойства моделей. Цели моделирования. Классификация моделей.
3. Материальное моделирование. Идеальное моделирование
4. Физическое моделирование. Определение. Назначение. Достоинства. Недостатки.
5. Математическое моделирование. Классификация математических моделей. Задачи, которые решаются с помощью математического моделирования.
6. Основные виды математических моделей.
7. Этапы построения математической модели.
8. Схема этапов математического моделирования.
9. Состав математического описания химико-технологического объекта. Требования, предъявляемые к модели химико-технологического объекта.
10. Структура математической модели химико-технологического объекта.
11. Математическое описание структуры потоков в аппарате (гидродинамика). Типовые математические модели структуры потоков в аппарате. 12. Модель идеальное смешение. Модель идеальное вытеснение.
13. Разновидности модели идеальное вытеснение -диффузионное однопараметрическое вытеснение, диффузионное, двухпараметрическое вытеснение. Ячеечная модель.
14. Тепловой баланс химико-технологического объекта.
15. Методы составления математических моделей. Эмпирический метод составления математических моделей. Пассивный эксперимент. Активный эксперимент. Теоретический метод составления математических моделей.
16. Экспериментально-аналитический метод составления математических моделей
17. Области применения различных моделей структуры потоков в аппарате
18. Основные классы уравнений встречающихся в математическом описании. Способы решения дифференциальных уравнений
19. Численные методы решения дифференциальных уравнений.: Метод Эйлера первого порядка, Метод Рунге-Кутты 4 порядка
20. Структурные модели .
21. Классификация структурных моделей.
22. Способы построения структурных моделей.
23. Принципы построения математических моделей химико-технологических систем (ХТС) .Декомпозиционные методы расчета Интегральные методы.
24. Структурный анализ ХТС(Способы представления структуры ХТС).
25. Классификация и назначение топологических моделей ХТС(графов). Поточковые графы. Информационно потоковые графы. Сигнальные графы. Структурные графы.
26. Графы. Матричное представление графов: матрица ветвей, матрица циклов, матрица смежности, матрица инцидентий. Матрицы связей.

27. Классификация ХТС по особенностям технологической топологии.
28. Типы технологических связей в топологии ХТС.
29. Классификация моделей ХТС. Гомоморфные, изоморфные модели. Классификация ХТС по способу функционирования.
30. Общий вид систем уравнений материально-тепловых балансов ХТС.
31. Идентификация ХТС. Оптимизация ХТС.
32. Основы построения статистических моделей
33. Регрессионный анализ – МНК.
34. Модели и методы анализа пространственно-временных структур

Основная литература

1. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: "Химия", 1976. - 496 с.
2. Кузичкин Н.В., Саутин С.Н., Пунин Л.Е. и др. Методы и средства автоматизированного расчета химико-технологических систем. Л.: "Химия", 1987. - 150 с.
3. Терещенко Л.Я., Багров И.В., Бусыгин Н.Ю. Применение ЭВМ в технологии химических волокон и отделочном производстве. СПб: Изд-во СПбГУ, 1993. - 258 с.
4. Бусыгин Н.Ю., Багров И.В. Системный анализ технологических процессов. Автоматизированный расчет сложных химико-технологических систем. – СПб: СПГУТД, 2002. – 142 с.
5. Багров И.В. Модели технологических процессов и их реализация на ПЭВМ. – СПб.: СПГУТД, 2002. – 239 с.

Дополнительная литература

1. Банди Б. Методы оптимизации. М.: Радио и связь, 1988. - 130 с.
2. Кафаров В.В., Мешалкин В.П., Гурьева Л.В. Оптимизация теплообменных процессов и систем. М.: Энергоатомиздат, 1988. - 192 с.

Электронные учебные материалы, выставленные на сервере <http://eco.sutd.ru>:

- Типовые устройства компьютера
- Операционная система [Windows 95/98/2000/XP](#)
- Компьютерные сети. Интернет. Электронная почта
- Офисные программы [MS Word](#), [MS Excel](#), [MS Access](#)
- Учебник по Word 97 (расширенный курс)
- Основы работы в оболочке Turbo Pascal для Windows
- Основы работы в среде MathCAD
- Библиотечные процедуры и функции Паскаля
- Численные методы в химико-технологических расчетах