

Задача 1.

Рассчитать оптимальное время проведения химической реакции в аппарате идеального смешения, приняв в качестве критерия оптимальности выход целевого продукта P .

Схема реакции:



Порядок обеих стадий реакции – первый. Константы скоростей равны:

$$k_1 = 0,35 \text{ час}^{-1}$$

$$k_2 = 0,13 \text{ час}^{-1}$$

Решение

Материальный баланс по компонентам A и P :

$$v(x_A^{(0)} - x_A) - V k_1 x_A = 0 \quad \text{!!!!}$$

При делении уравнений на расход реагента v получаем:

$$x_A^{(0)} - x_A - k_1 \cdot \tau \cdot x_A = 0 \quad \text{!!!!}$$

где $\tau = V/v$ - среднее время пребывания реагентов в реакторе

Выход продукта P выражается:

$$\psi_P = \frac{x_P}{x_A^{(0)}} = \frac{k_1 \cdot \tau}{(1 + k_1 \cdot \tau) \cdot (1 + k_2 \cdot \tau)}$$

Необходимое условие существования экстремума:

$$\frac{d\psi_P}{d\tau} = 0$$

$$\frac{d\psi_P}{d\tau} = \frac{k_1(1 - k_1 \cdot k_2 \cdot \tau^2)}{[(1 + k_1 \cdot \tau) \cdot (1 + k_2 \cdot \tau)]^2}$$

Поскольку $[(1+k_1 \cdot \tau) \cdot (1+k_2 \cdot \tau)]^2 \neq 0$ и $k_1 \neq 0$

Условие экстремума будет иметь вид:

$$1 - k_1 \cdot k_2 \cdot (\tau^{opt})^2 = 0$$

Откуда:

$$\tau^{opt} = \frac{1}{\sqrt{k_1 \cdot k_2}}$$

$$\tau^{opt} = \frac{1}{\sqrt{0,35 \cdot 0,13}} = 4,7 \text{ часа}$$

$$\psi_P^{max} = \frac{k_1}{(\sqrt{k_1} + \sqrt{k_2})^2} = \frac{0,35}{(\sqrt{0,35} + \sqrt{0,13})^2} = 0,39$$

Программа:

- **Modell_tau** (построение графиков x_A от T и x_P от T . Графическое решение задачи. Поиск экстремума. Программа расчета оптимального времени пребывания (τ - час) в изотермическом реакторе идеального смешения со стехиометрической схемой реакции $A - P - S$)

1. Файл DATA.m

Программный код файла DATA.m - задание исходной информации для расчетов

```
function DATA
```

```
global xa0 k1 k2 tau_a tau_b;
```

Концентрация реагента A в долях в реакции A-P-S (мольные доли)

```
xa0=1;
```

Константы скоростей реакций (час⁻¹)

```
k1=0.35; k2=0.13;
```

Левая граница поиска оптимального времени пребывания в реакторе (час)

tau_a=1;

Правая граница поиска оптимального времени пребывания в реакторе (час)

tau_b=10;

end

2. Файл modell_stat_tau.m

Программный код файла modell_stat_tau.m - расчет выходных концентраций продуктов из реактора

Значения вектора x функции modell_stat_tau зависят от параметра «tau»

function x=modell_stat_tau(tau)

global xa0 k1 k2;

Обнуляем матрицу a и вектор b

a=zeros(2,2);b=zeros(2,1);

Для решения системы уравнений используем метод обратной матрицы.

Преобразуем систему уравнений:

$$\begin{cases} x_A^{(0)} - x_A - k_1 \cdot \tau \cdot x_A = 0 \\ \end{cases}$$

чтобы получить коэффициенты матрицы:

$$\begin{cases} (1+k_1 \cdot \tau) \cdot x_A + 0 \cdot x_P = x_A^{(0)} \\ \end{cases}$$

Задание коэффициентов матрицы A (коэффициенты перед x_A и x_P) и вектора B (коэффициенты правой части системы уравнений, после знака «равно») .

a(1,1)=1+k1*tau;a(1,2)=0;b(1)=xa0;

a(2,1)=tau*k1;a(2,2)=(-1-tau*k2); b(2)=0;

*Определение выходных параметров модели. $A=x*B$. $x=A/B$. $x=A^{-1}*B$*

x=inv(a)*b;

Оператор inv(a) - поиск обратной матрицы A

end

3. Файл GLAV_maximum_phi_p.m

Программный код файла GLAV_maximum_phi_p.m - главная управляющая программа

```
clc;
```

```
clear all;
```

```
close all;
```

```
global t ха xp tau_a tau_b;
```

```
i=0;
```

```
DATA;
```

Задаем значение коэффициента tau (время пребывания в реакторе, мин) в интервале от tau_a до tau_b с шагом 0.1

```
for tau=tau_a:0.1:tau_b
```

```
    i=i+1;
```

Вызываем функцию x= model1_stat_tau(tau)

```
x= model1_stat_tau(tau);
```

Массив значений коэффициента tau(мин) в интервале от tau_a до tau_b с шагом 0.1

```
t(i)=tau;
```

Массив значений коэффициента ха (мол.дол) - концентрации продукта A на выходе из реактора в заданном интервале температур от tau_a до tau_b

```
ха(i)=x(1);
```

Массив значений коэффициента ха (мол.дол) - концентрации продукта P на выходе из реактора в заданном интервале температур от tau_a до tau_b

```
xp(i)=x(2);
```

```
end
```

```
REPORT;
```

4. Файл REPORT.m

Программный код файла REPORT.m - отчет о работе программы

```
global ха0 k1 k2 t ха xp tau_a tau_b;
```

Выводим на экран необходимый текст.

```
disp('ПРОГРАММА      МОДЕЛИРОВАНИЯ      ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО  
РЕАКТОРА ИДЕАЛЬНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ ');
```

```
disp('      РЕАКЦИЯ : А - Р - S ');
```

```
disp('-----');
```

```
disp('Программа      включает      следующие      файлы:  
GLAV_model1_grafik.m+DATA.m+model1_stat_tau+REPORT.m');
```

```
disp('_____')  
)
```

```
disp('ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ ');
```

```
disp('-----');
```

Оператор num2str(xa0, '%10.2f') переводит числовые значения в строковые.

Для этого необходимо записать оператор num2str, далее в скобках указываем переменную, которую необходимо перевести в строковый формат «ха0», затем ставим запятую «,» либо пробел и в одинарных кавычках через точку указываем число символов (%10) в строковой переменной и количество знаков после запятой(2f).

```
disp(['1.Концентрация реагента А на входе в реактор ( ха0 ) = '  
num2str(xa0, '%10.2f') ' мольные доли']);
```

```
disp('-----');
```

```
disp(['2.Константа скорости первой элементарной реакции ( k1) = '  
num2str(k1, '%10.2f') ' час(-1)']);
```

```
disp(['3.Константа скорости второй элементарной реакции ( k2) = '  
num2str(k2, '%10.2f') ' час(-1)']);
```

```
disp('-----');
```

```
disp(['4.Левая граница интервала поиска оптимального времени пребывания в  
реакторе ( tau_a) = ' num2str(tau_a, '%10.2f') ' час']);
```

```
disp('-----');
```

```
disp(['5. Правая граница интервала поиска оптимального времени  
пребывания в реакторе( tau_b) = ' num2str(tau_b, '%10.2f') ' час']);
```

```

disp('_____');
disp('-----');
disp('РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ');
disp('-----');
disp('-----');
disp('1.Концентрации продуктов на выходе из реактора');
disp('-----');
disp('_____')
disp(' tau(час)      xa(мол.д.)      xp(мол.д.) ');
disp('_____')
i=0;

```

Выводим таблицу данных. Переменные t, xa, xp;

```

for i=1:length(t)
    tt=t(i);xaa=xa(i);xpp=xp(i);
    disp(sprintf('%10.3ft %10.5ft %10.5f',tt,xaa,xpp));
end

```

Построение графиков

```

hfig(1)=figure;
hfig(2)=figure;

```

Рисунок 1. График зависимости выхода продукта А от времени пребывания в реакторе.

```

figure(hfig(1));

```

Построение графика

```

plot(t,xa);

```

Название графика

```

title('График зависимости выхода продукта А от времени пребывания в реакторе');

```

Подписи осей графика.

```

xlabel('tau - час');ylabel('Выходные концентрации : xa - мольные доли');

```

Наложение сетки на график

```
grid on;
```

Рисунок 2. График зависимости выхода продукта P от времени пребывания в реакторе

```
figure(hfig(2));
```

Построение графика

```
plot(t,xp);
```

Название графика

```
title('График зависимости выхода продукта P от времени пребывания в реакторе');
```

Подписи осей графика.

```
xlabel('tau - час');ylabel('Выходные концентрации : xp - мольные доли');
```

Наложение сетки на график

```
grid on;
```

```
end
```

ОТЧЕТ

ПРОГРАММА МОДЕЛИРОВАНИЯ ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА ИДЕАЛЬНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ

РЕАКЦИЯ : A - P - S

Программа включает следующие файлы:
GLAV_model1_grafik.m+DATA.m+model1_stat_tau+REPORT.m

ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ

1. Концентрация реагента А на входе в реактор (x_{a0}) = 1.00 мольные доли

2. Константа скорости первой элементарной реакции (k_1) = 0.35 час⁽⁻¹⁾

3. Константа скорости второй элементарной реакции (k_2) = 0.13 час⁽⁻¹⁾

4. Левая граница интервала поиска оптимального времени пребывания в реакторе (τ_a) = 1.00 час

5. Правая граница интервала поиска оптимального времени пребывания в реакторе (τ_b) = 10.00 час

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

1.Концентрации продуктов на выходе из реактора

tau(час)	ха(мол.д.)	хр(мол.д.)
1.000	0.74074	0.22943
1.100	0.72202	0.24320
1.200	0.70423	0.25586
1.300	0.68729	0.26751
1.400	0.67114	0.27822
1.500	0.65574	0.28809
1.600	0.64103	0.29716
1.700	0.62696	0.30552
1.800	0.61350	0.31321
1.900	0.60060	0.32029
2.000	0.58824	0.32680
2.100	0.57637	0.33278
2.200	0.56497	0.33828
2.300	0.55402	0.34333
2.400	0.54348	0.34796
2.500	0.53333	0.35220
2.600	0.52356	0.35608
2.700	0.51414	0.35963
2.800	0.50505	0.36287
2.900	0.49628	0.36581
3.000	0.48780	0.36849
3.100	0.47962	0.37091
3.200	0.47170	0.37309
3.300	0.46404	0.37506

3.400	0.45662	0.37682
3.500	0.44944	0.37839
3.600	0.44248	0.37978
3.700	0.43573	0.38101
3.800	0.42918	0.38207
3.900	0.42283	0.38299
4.000	0.41667	0.38377
4.100	0.41068	0.38442
4.200	0.40486	0.38496
4.300	0.39920	0.38537
4.400	0.39370	0.38569
4.500	0.38835	0.38590
4.600	0.38314	0.38602
4.700	0.37807	0.38605
4.800	0.37313	0.38600
4.900	0.36832	0.38587
5.000	0.36364	0.38567
5.100	0.35907	0.38541
5.200	0.35461	0.38508
5.300	0.35026	0.38469
5.400	0.34602	0.38424
5.500	0.34188	0.38374
5.600	0.33784	0.38320
5.700	0.33389	0.38260
5.800	0.33003	0.38197
5.900	0.32626	0.38129
6.000	0.32258	0.38057
6.100	0.31898	0.37982
6.200	0.31546	0.37904
6.300	0.31201	0.37822

6.400	0.30864	0.37738
6.500	0.30534	0.37651
6.600	0.30211	0.37561
6.700	0.29895	0.37469
6.800	0.29586	0.37375
6.900	0.29283	0.37279
7.000	0.28986	0.37180
7.100	0.28694	0.37080
7.200	0.28409	0.36979
7.300	0.28129	0.36876
7.400	0.27855	0.36771
7.500	0.27586	0.36665
7.600	0.27322	0.36558
7.700	0.27064	0.36450
7.800	0.26810	0.36341
7.900	0.26560	0.36231
8.000	0.26316	0.36120
8.100	0.26076	0.36008
8.200	0.25840	0.35896
8.300	0.25608	0.35782
8.400	0.25381	0.35669
8.500	0.25157	0.35555
8.600	0.24938	0.35440
8.700	0.24722	0.35325
8.800	0.24510	0.35210
8.900	0.24301	0.35094
9.000	0.24096	0.34979
9.100	0.23895	0.34863
9.200	0.23697	0.34747
9.300	0.23502	0.34630

9.400	0.23310	0.34514
9.500	0.23121	0.34398
9.600	0.22936	0.34281
9.700	0.22753	0.34165
9.800	0.22573	0.34049
9.900	0.22396	0.33932
10.000	0.22222	0.33816

- **Optim1_tau** (Оптимальные значения режимных параметров реактора: времени пребывания, концентрации продукта А на выходе из реактора, концентрации продукта Р на выходе из реактора. Программа расчета оптимального времени пребывания (tau - час) в изотермическом реакторе идеального смешения со стехиометрической схемой реакции А - Р –S)

1. Файл DATA.m

Программный код файла DATA.m - задание исходной информации для расчетов

```
function DATA
```

```
global xa0 k1 k2 tau_a tau_b;
```

Концентрация реагента А в долях в реакции А-Р-S (мольные доли)

```
xa0=1;
```

Константы скоростей реакций (час⁽⁻¹⁾)

```
k1=0.35; k2=0.13;
```

Левая граница поиска оптимального времени пребывания в реакторе (час)

```
tau_a=1;
```

Правая граница поиска оптимального времени пребывания в реакторе (час)

```
tau_b=5;
```

```
end
```

2. Файл modell_stat_tau.m

Программный код файла modell_stat_tau .m - расчет выходных концентраций продуктов из реактора

Значения параметра phi_p функции modell_stat_tau зависят от параметра «tau»

```
function phi_p= modell_stat_tau(tau)
```

global xa0 k1 k2 xa xp;

Обнуляем матрицу a и вектор b

$a=zeros(2,2);b=zeros(2,1);$

Для решения системы уравнений используем метод обратной матрицы.

Преобразуем систему уравнений:

$$\begin{cases} x_A^{(0)} - x_A - k_1 \cdot \tau \cdot x_A = 0 \\ \end{cases}$$

чтобы получить коэффициенты матрицы:

$$\begin{cases} (1+k_1 \cdot \tau) \cdot x_A + 0 \cdot x_P = x_A^{(0)} \\ \end{cases}$$

Задание коэффициентов матрицы A (коэффициенты перед x_A и x_P) и вектора B (коэффициенты правой части системы уравнений, после знака «равно»).

$a(1,1)=1+k1*\tau;a(1,2)=0;b(1)=xa0;$

$a(2,1)=\tau*k1;a(2,2)=(-1-\tau*k2); b(2)=0;$

Определение выходных параметров модели. $A=x*B$. $x=A/B$. $x=A^{-1}*B$

Оператор $inv(a)$ - поиск обратной матрицы A

$x=inv(a)*b$; $xa=x(1);xp=x(2);$

Вычисление критерия оптимальности ϕ_r (целевой функции);

В дальнейшем будет использоваться оператор « $fminbnd$ », который находит минимум функции. Для того чтобы найти максимум функции с помощью оператора « $fminbnd$ », мы ставим знак «-» перед $x(2)/xa0$

$\phi_r=-x(2)/xa0;$

end

3. Файл GLAV_maximum_phi_r.m

Программный код файла $GLAV_maximum_phi_r.m$ - главная управляющая программа

clc;

clear all;

```

close all;
global tau_opt phi_p_max tau_a tau_b;
DATA;
disp('Информация об итерационном процессе расчета');
Информация об итерационном процессе расчета
iteration=optimset('Display','iter');
Реализация алгоритма поиска максимума функции одной переменной
[tau_opt,phi_p]=fminbnd('model1_stat_tau',tau_a,tau_b,iteration);
Знак «-» перед phi_p необходим для корректного вывода данных экстремума
функции. Оператор «fminbnd» находит минимум функции со знаком «-». Нам
нужен максимум функции со знаком «+».
phi_p_max=-phi_p;
REPORT;

```

4. Файл REPORT

```

function REPORT
Программный код файла REPORT.m - отчет о работе программы
global xa0 k1 k2 tau_opt phi_p_max xa xp tau_a tau_b;
Выводим на экран необходимый текст.
disp('ПРОГРАММА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ
ПРЕБЫВАНИЯ');
disp('В ИЗОТЕРМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ ИДЕАЛЬНОГО
ПЕРЕМЕШИВАНИЯ ');
disp(' РЕАКЦИЯ : A - P - S ');
disp('-----');
disp('Программа :
GLAV_maximum_phi_p.m+DATA.m+model1_stat_tau.m+REPORT.m');
disp('_____');
disp('ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ ');
disp('-----');
Оператор num2str(xa0, '%10.2f') переводит числовые значения в строковые.

```

Для этого необходимо записать оператор `num2str`, далее в скобках указываем переменную, которую необходимо перевести в строковый формат «ха0», затем ставим запятую «,» либо пробел и в одинарных кавычках через точку указываем число символов (%10) в строковой переменной и количество знаков после запятой(2f).

```
disp(['1.Концентрация реагента А на входе в реактор ( ха0 ) = '
num2str(ха0,'%10.2f) ' мольные доли']);
disp('-----');
disp(['2.Константа скорости первой элементарной реакции ( k1) = '
num2str(k1,'%10.2f) ' час^(-1)']);
disp('-----');
disp(['3.Константа скорости второй элементарной реакции ( k2) = '
num2str(k2,'%10.2f) ' час^(-1)']);
disp('-----');
disp(['4.Левая граница интервала поиска оптимального времени пребывания в
реакторе ( tau_a) = ' num2str(tau_a,'%10.2f) ' час']);
disp('-----');
disp(['5. Правая граница интервала поиска оптимального времени
пребывания в реакторе( tau_b) = ' num2str(tau_b,'%10.2f) ' час']);
disp('_____');
disp('-----');
disp('РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ');
disp('-----');
disp('-----');
disp('1.Оптимальные значения режимных параметров реактора');
disp('-----');
disp('_____');
disp(' tau_opt(час)   phi_p_max   ха(мол.д.)   хр(мол.д.) ');
disp('_____');
```

Выводим таблицу данных. Переменные tau_opt, phi_p_max, ха, хр;


```
disp(sprintf('%10.3f\t %10.5f\t %10.5f\t %10.5f',tau_opt,phi_p_max,xa,xp));  
end
```

ОТЧЕТ

Информация об итерационном процессе расчета

Func-count	x	f(x)	Procedure
1	2.52786	-0.353318	initial
2	3.47214	-0.377974	golden
3	4.05573	-0.384151	golden
4	4.28466	-0.385317	parabolic
5	4.54721	-0.385967	parabolic
6	4.64824	-0.386045	parabolic
7	4.67998	-0.386051	parabolic
8	4.68733	-0.386052	parabolic
9	4.68803	-0.386052	parabolic
10	4.68807	-0.386052	parabolic
11	4.68811	-0.386052	parabolic

ПРОГРАММА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ ПРЕБЫВАНИЯ

В ИЗОТЕРМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ ИДЕАЛЬНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ РЕАКЦИЯ : A - P - S

Программа :

GLAV_maximum_phi_p.m+DATA.m+model1_stat_tau.m+REPORT.m

ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ

1. Концентрация реагента А на входе в реактор (x_{a0}) = 1.00 мольные доли

2. Константа скорости первой элементарной реакции (k_1) = 0.35 час⁽⁻¹⁾

3. Константа скорости второй элементарной реакции (k_2) = 0.13 час⁽⁻¹⁾

4. Левая граница интервала поиска оптимального времени пребывания в реакторе (τ_a) = 1.00 час

5. Правая граница интервала поиска оптимального времени пребывания в реакторе (τ_b) = 5.00 час

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

1. Оптимальные значения режимных параметров реактора

τ_{opt} (час)	ϕ_{p_max}	x_a (мол.д.)	x_p (мол.д.)
--------------------	-----------------	----------------	----------------

4.688	0.38605	0.37867	0.38605
-------	---------	---------	---------