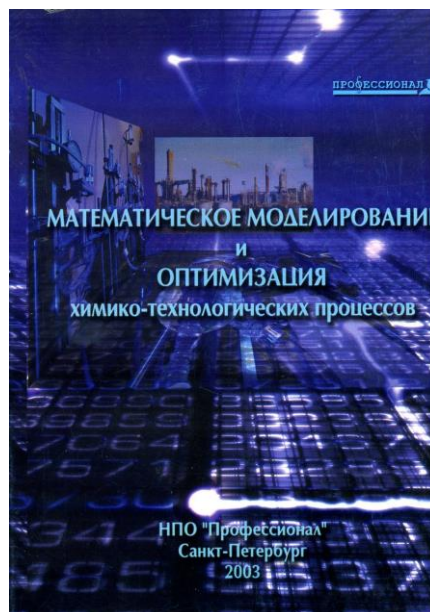


Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов

В.А. Холоднов, В.П. Дьяконов, Е.Н. Иванова, Л.С. Кирьянова



СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

1. Основные понятия математического моделирования химико-технологических процессов
 - 1.1. Понятие математического описания химико-технологического процесса
 - 1.2. Основная терминология
 - 1.3. Основы моделирования химико-технологических процессов
 - 1.4. Теоретический метод построения модели химико-технологического процесса
 - 1.5. Системы компьютерной математики
2. Работа с математической системой Mathcad
 - 2.1. Начало работы с Mathcad
 - 2.1.1. Первый запуск системы
 - 2.1.2. Интерфейс пользователя системы Mathcad
 - 2.1.3. Палитры математических знаков и документы Mathcad
 - 2.1.4. Работа с формульным редактором
 - 2.1.5. Вызов встроенных функций
 - 2.1.6. Элементы графической визуализации
 - 2.1.7. Ошибки в вычислениях и отладка вычислений
 - 2.1.8. Работа с центром управления ресурсами и справкой
 - 2.2. Основные объекты входного языка Mathcad
 - 2.2.1. Алфавит, константы и переменные
 - 2.2.2. Операторы сравнения и логические операторы
 - 2.2.3. Специальные операторы входного языка
 - 2.3. Работа с функциями

- 2.3.1. Типовые элементарные функции
- 2.3.2. Функции комбинаторики и теории чисел
- 2.3.3. Функции Бесселя и гамма-функция
- 2.3.4. Дополнительные неактивные функции
- 2.3.5. Функции с условиями сравнения
- 2.3.6. Функция условных выражений if,
- 2.3.7. Функции строковых данных
- 2.3.8. Функции контроля типа переменных
- 2.3.9. Функции пользователя и рекурсивные функции
- 2.4. Работа с массивами, векторами и матрицами
- 2.4.1. Типы массивов и доступ к их элементам
- 2.4.2. Векторные и матричные функции
- 2.4.3. Дополнительные матричные функции
- 2.4.4. Решение систем линейных уравнений
- 2.5. Сохранение и использование данных
- 2.6. Проведение линейной и сплайновой аппроксимаций
- 2.6.1. Одномерная линейная аппроксимация
- 2.6.2. Сплайн-интерполяция и аппроксимация
- 2.7. Статистическая обработка данных
- 2.7.1. Типовые статистические функции
- 2.7.2. Статистические функции для распределений вероятности
- 2.7.3. Выполнение регрессии разного вида
- 2.7.4. Новые функции Mathcad для проведения регрессии
- 2.7.5. Функции сглаживания и предсказания
- 2.8. Решение нелинейных уравнений и систем
- 2.8.1. Функция поиска корня нелинейного уравнения root
- 2.8.2. Функция поиска всех корней многочлена polyroots
- 2.8.3. Директива Given для подготовки блока решения системы уравнений
- 2.8.4. Функции Find и Minerr для решения систем нелинейных уравнений
- 2.9. Реализация итерационных вычислений
- 2.10. Решение задач оптимизации и линейного программирования
- 2.11. Быстрые преобразования Фурье и волновые преобразования
- 2.11.1. Быстрое прямое и обратное преобразования Фурье
- 2.11.2. Вейвлеты и их особенности
- 2.11.3. Прямое и обратное волновые (вейвлет) преобразования
- 2.11.4. Функции волновых преобразований Mathcad и их применение
- 2.11.5. Анализ сигналов и функций по вейвлет-спектрограммам
- 2.11.6. Вейвлет-моделирование процесса смещения фракций
- 2.12. Обработка изображений в среде Mathcad
- 2.12.1. Обработка монохромных изображений
- 2.12.2. Обработка цветных изображений
- 2.12.3. Вейвлет-компрессия рисунков в пакете Wavelet Extension Pack
- 2.13. Решение дифференциальных уравнений
- 2.13.1. Функции для решения ДУ различного вида
- 2.13.2. Функция odesolve
- 2.14. Символьные вычисления и оптимизация вычислений
- 2.15. Программирование в системе Mathcad
- 2.15.1. Основные средства программирования
- 2.15.2. Пример программирования — построение фрактала «кукуруза»
- 2.16. Интеграция Mathcad с другими программными средствами
- 2.16.1. Обзор программных средств, интегрируемых с системой Mathcad

- 2.16.2. Интеграция Mathcad с текстовым процессором Word
- 2.16.3. Интеграция Mathcad с табличным процессором Excel
- 2.16.4. Интеграция Mathcad с другими программными средствами
- 2.16.5. Интеграция Mathcad с графическими пакетами
- 2.16.6. Интеграция Mathcad с матричной лабораторией MATLAB
- 3. Построение графиков
 - 3.1. Работа с двумерными графиками
 - 3.1.1. Типовое построение графиков в декартовой системе
 - 3.1.2. Типовое построение графиков в полярной системе
 - 3.2. Работа с трехмерной графикой
 - 3.2.1. Построение поверхностей с использованием матрицы-аппликат
 - 3.2.2. Построение 3D графиков без задания матрицы-аппликат
 - 3.2.3. Параметрическое задание поверхности
 - 3.2.4. Построение контурных трехмерных графиков
 - 3.2.5. Форматирование
- 4. Математическое моделирование химико-технологических процессов на основе решения нелинейных алгебраических уравнений и систем
 - 4.1. Решение уравнения с одним неизвестным для задач химической технологии
 - 4.1.1. Определение pH растворов слабых кислот
 - 4.1.2. Определение равновесной степени конверсии и состава конвертированного газа при конверсии окиси углерода [38, с. 133]
 - 4.1.3. Определение равновесной концентрации аммиака при синтезе [38, с. 133]
 - 4.1.4. Расчет свойств реальных газов по уравнению Редлиха-Квонга
 - 4.1.5. Зависимость термо-э.д.с. от температуры
 - 4.1.6. Зависимость персистентной длины от радиуса инерции и среднеквадратичного расстояния
 - 4.1.7. Расчет аппарата однократного испарения (расчет доли отгона многокомпонентной смеси)
 - 4.2. Решение систем линейных алгебраических уравнений в задачах химической технологии
 - 4.2.1. Обработка результатов спектрофотометрического исследования
 - 4.2.2. Материальный баланс в производственном планировании
 - 4.2.3. Получение кислоты заданной концентрации
 - 4.3. Решение систем нелинейных уравнений в задачах химической технологии
 - 4.3.1. Определение зависимости концентраций компонентов для стационарного процесса химического превращения в реакторе с мешалкой. Определение оптимальной скорости подачи исходной смеси
 - 4.3.2. Моделирование стационарного процесса химического превращения в реакторе с мешалкой
 - 4.3.3. Моделирование стационарного процесса сульфирования нафталина в реакторе с мешалкой
 - 4.3.4. Моделирование стационарного процесса химического превращения в каскаде реакторов с мешалкой при разных температурах в каждом реакторе
 - 4.3.5. Расчет последовательности экстракторов
 - 4.3.6. Распределение потоков жидкости
 - 4.3.7. Частичное окисление метана
 - 4.3.8. Моделирование стационарного режима реактора получения полиэтилена высокого давления
- 5. Основы математического моделирования химико-технологических процессов с помощью решения дифференциальных уравнений
 - 5.1. Решение задачи Коши для дифференциальных уравнений и систем первого порядка

- 5.2. Решение задачи Коши для дифференциальных уравнений высших порядков
- 5.3. Решение задачи Коши для жестких систем дифференциальных уравнений
- 5.4. Решение краевых задач химической технологии
 - 5.4.1. Двухточечные краевые задачи. Однопараметрическая диффузионная модель стационарного химического реактора
- 5.5. Математическое моделирование ХТП на основе решения дифференциальных уравнений в частных производных
- 5.6. Исследование химико-технологических процессов с помощью решения систем дифференциальных уравнений
 - 5.6.1. Моделирование нестационарного процесса сульфирования нафталина в реакторе с мешалкой
 - 5.6.2. Моделирование процесса окисления ксилена до фталевого ангидрида в трубчатом реакторе
 - 5.6.3. Моделирование процесса дегидрирования бензола в трубчатом реакторе
 - 5.6.4. Моделирование процесса превращения нитробензола до анилина в трубчатом реакторе
 - 5.6.5. Моделирование процесса очистки сточной воды от органических примесей в электролизере
 - 5.6.6. Моделирование процесса абсорбции аммиака водой из газообразной смеси
 - 5.6.7. Математическое моделирование динамики теплообменного аппарата (противоток)
 - 5.6.8. Моделирование динамических режимов реактора получения полиэтилена при высоком давлении
- 5.7. Моделирование химико-технологических объектов управления
 - 5.7.1. Регулирование уровня жидкости в емкости
 - 5.7.2. Регулирования температуры в емкости
 - 5.7.3. Моделирование процесса регулирования температуры в химическом реакторе
- 6. Обработка эксперимента и статистическое моделирование в химической технологии
 - 6.1. Статистические функции MathCAD
 - 6.1.1. Непрерывные и дискретные распределения. Функции распределения и плотности вероятности
 - 6.1.2. Генераторы случайных чисел
 - 6.1.3. Интервал случайного разброса. Доверительный интервал непрерывного и дискретного распределений
 - 6.1.4. Статистические тесты
 - 6.1.5. Выборки
 - 6.2. Статистики совокупностей
 - 6.3. Первичная обработка экспериментальной информации
 - 6.3.1. Сглаживание данных
 - 6.3.2. Интерполяция и экстраполяция
 - 6.4. Построение эмпирических зависимостей
 - 6.4.1. Линейная и нелинейная аппроксимация экспериментальных данных с использованием функций Unfit и genfit
 - 6.4.2. Корреляция. Линейная регрессия
 - 6.4.3. Планирование и обработка экспериментальных данных
 - 6.4.3.1. Полный факторный эксперимент
 - 6.4.3.2. Частные виды нелинейной регрессии. Полиномиальная, параболическая и экспоненциальная регрессии
 - 6.4.3.3. Множественная регрессия. Метод Брандона
 - 6.5. Примеры построения статистических моделей в химической технологии :
 - 6.5.1. Линейная аппроксимация зависимости температуры плазменной струи от времени отдаления от сопла (с использованием функции linfit)

- 6.5.2. Нелинейная аппроксимация зависимости электрокинетического потенциала от химической природы поверхности носителя с использованием функции genfit
- 6.5.3. Вычисление параметров зависимости константы скорости реакции от температуры
- 6.5.4. Моделирование процесса гидрокрекинга Н-гексана на алюмомолибденовом катализаторе (с использованием полного факторного эксперимента)
- 6.5.5. Использование метода Брандона для построения модели процесса синтеза темплена (поли-4-метилпентена-1)
- 7. Символьные вычисления в химической технологии
 - 7.1. Символьные операции и приемы работы с ними
 - 7.2. Использование символьных операторов для преобразования выражений, вычисления сумм, производных, интегралов с численными и символьными результатами
 - 7.3. Символьное решение уравнений и систем
 - 7.3.1. Символьное решение нелинейных алгебраических уравнений
 - 7.3.2. Символьное решение систем уравнений
 - 7.3.3. Символьное решение дифференциальных уравнений
 - 7.4. Примеры из химической технологии
 - 7.4.1. Вычисление значений летучести метана в зависимости от давления при заданной температуре
 - 7.4.2. Вычисление равновесной степени превращения в производстве серного ангидрида
 - 7.4.3. Получение различных значений концентраций кислот
 - 7.4.4. Символьные вычисления для моделирования кинетики химических реакций
- 8. Использование средств программирования при моделировании химико-технологических процессов
 - 8.1. Вызов операторов программирования и приемы работы с ними
 - 8.2. Использование операторов программных блоков
 - 8.2.1. Условный оператор
 - 8.2.2. Операторы цикла
 - 8.2.3. Прерывание цикла при помощи операторов
 - 8.3. Примеры из химической технологии
 - 8.3.1. Расчет константы скорости реакции разложения диметилового эфира
 - 8.3.2. Определение летучести аммиака/как функции давления
 - 8.3.3. Расчет каскада из n равнообъемных реакторов с мешалкой для определения оптимального температурного режима
 - 8.3.4. Расчет зависимости равновесной степени превращения в производстве серного ангидрида от начальной концентрации диоксида
- 9. Основы оптимизации химико-технологических процессов и систем в mathcad
 - 9.1. Постановка задачи оптимизации
 - 9.2. Классификация задач оптимизации
 - 9.3. Выбор управляющих переменных при оптимизации
 - 9.4. Многомерная оптимизация
 - 9.5. Основы решения задач оптимизации с помощью программного продукта Mathcad
 - 9.6. Оптимизация с использованием традиционных методов
 - 9.6.1. Метод золотого сечения
 - 9.6.2. Метод сканирования
 - 9.6.3. Метод покоординатного спуска
 - 9.7. Оптимизация с использованием встроенных функций Mathcad
 - 9.7.1. Использование функции Minerr.
 - 9.8. Решение задач оптимизации химико-технологических процессов
 - 9.8.1. Идентификация параметров экспериментальной зависимости
 - 9.8.2. Определение оптимальных параметров эрлифтного аппарата
 - 9.8.3. Оптимизация капитальных затрат на перевозку нефти морским путем
 - 9.8.4. Оптимизации теплообменной подсистемы

9.8.5. Оптимизации последовательности реакторов

9.8.6. Оптимизации последовательности экстракторов с рециклом

9.8.7. Оптимизация системы последовательного извлечения примесей из сточных вод

Приложение 1

Приложение 2

Приложение 3