Ю.В. ЛИТОВКА

ПОЛУЧЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ ПРОЕКТНЫХ РЕШЕНИЙ И ИХ АНАЛИЗ С ИСПОЛЬЗОВАНИ-ЕМ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

ИЗДАТЕЛЬСТВО ТГТУ

Ю.В. ЛИТОВКА

ПОЛУЧЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ ПРОЕКТНЫХ РЕШЕНИЙ И ИХ АНАЛИЗ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ



ИЗДАТЕЛЬСТВО ТГТУ

Ю.В. ЛИТОВКА

ПОЛУЧЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ ПРОЕКТНЫХ РЕШЕНИЙ И ИХ АНАЛИЗ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Утверждено Ученым советом университета в качестве учебного пособия



Тамбов Издательство ТГТУ 2006

Рецензенты:

Заведующий кафедрой «Компьютерное и математическое моделирование» Тамбовского государственного университета им. Г.Р. Державина доктор технических наук, профессор А.А. Арзамасцев

Доцент кафедры «Автоматизированное проектирование технологического оборудования» Тамбовского государственного технического университета кандидат технических наук В.Н. Немтинов

Литовка, Ю.В.

Л646 Получение оптимальных проектных решений и их анализ с использованием математических моделей : учебное пособие / Ю.В. Литовка. – Тамбов : Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2006. – 160 с. – 200 экз. – ISBN 5-8265-0540-0.

Предложено использование вычислительной техники для решения вычислительных задач на алгоритмическом языке высокого уровня (C^{++} , Паскаль и др.), а также материалы для осваивания пакета прикладных программ автоматизированного моделирования ChemCAD.

Предназначено для выполнения лабораторных работ по дисциплинам «Модели и методы анализа проектных решений» и «Оптимизация», а также выполнения курсовой работы по дисциплине «Модели и методы анализа проектных решений» студентами специальности САПР 3—4 курсов.

УДК 681.5.001 2-52(076) ББК Л11-1с116я73-5+Ж2-5-05я73-5

ISBN 5-8265-0540-0

- © Литовка Ю.В., 2006
- © ГОУ ВПО «Тамбовский государственный технический университет» (ТГТУ), 2006

Учебное издание

ЛИТОВКА Юрий Владимирович

ПОЛУЧЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ ПРОЕКТНЫХ РЕШЕНИЙ И ИХ АНАЛИЗ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Учебное пособие

Редактор З.Г. Чернова Компьютерное макетирование Е.В. Кораблевой

Подписано в печать 12.12.2006 Формат $60 \times 84/16$. Бумага офсетная. Гарнитура Times New Roman. 9,0 уч.-изд. л. Тираж 200 экз. Заказ № 812

Издательско-полиграфический центр ТГТУ 392000, Тамбов, Советская, 106, к. 14

При автоматизированном проектировании новых объектов на современном этапе возникают задачи получения оптимального проектного решения с точки зрения некоторого заданного критерия.

Выбор наилучшего решения предполагает наличие двух основных элементов: параметров, варьированием которых проектировщик получает различные варианты проектируемого изделия, и критерия сравнения, позволяющего указать лучший среди них. Для связи критерия и варьируемых параметров используют математические модели, представляющие систему булевских, алгебраических или дифференциальных уравнений.

В общем случае задача оптимального проектирования ставится следующим образом. Найти значения варьируемых параметров $x_1, x_2, ..., x_n$, доставляющих минимум (максимум) критерию R при выполнении уравнений связи и ограничений:

$$R = f(x_1, x_2, ..., x_n, x'_1, x'_2, ..., x'_n),$$

$$x_{1 \min} \le x_1 \le x_{1 \max},$$

$$......$$

$$x_{n \min} \le x_n \le x_{n \max}.$$

Решение оптимизационной задачи ищется в зависимости от вида критерия, варьируемых параметров, уравнений связи и ограничений, аналитическими и численными методами линейного, нелинейного или динамического программирования, а также вариационными методами.

Для анализа проектных решений необходимо уметь решать системы уравнений математической модели.

В настоящем учебном пособии рассмотрены методы построения математических моделей химикотехнологических объектов и алгоритмы решения полученных систем уравнений; конечномерные и вариационные методы оптимизации. Приведен лабораторный практикум и курсовая работа по математическому моделированию и оптимизации.

Учебное пособие предназначено для студентов 3–4 курсов специальности «САПР», изучающих дисциплины «Оптимизация» и «Модели и методы анализа проектных решений».

1. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЕКТИРУЕМЫХ ОБЪЕКТОВ

В настоящее время используются три метода построения математических моделей - аналитический, экспериментальный и экспериментально-аналитический. Поскольку для проектирования новых объектов могут быть использованы математические модели, построенные лишь аналитическим методом, остановимся на нем подробнее.

Аналитическим методом составления математического описания называют способ вывода уравнений на основе теоретического анализа физических и химических процессов, происходящих в моделируемом объекте, учете конструкции аппаратуры и характеристик перерабатываемых веществ. При выводе уравнений используются фундаментальные законы сохранения вещества и энергии, а также кинетические закономерности процессов химических превращений, переноса тепла и массы.

Основными этапами построения модели аналитическим методом являются [1]:

- 1. Выбор объекта исследования.
- 2. Изучение объекта моделирования. Проводится ознакомление с конструкцией объекта и протекающими в нем физико-химическими процессами.
- 3. Составление структурной схемы объекта и принятие допущений. Моделируемый объект условно разделяется на ряд звеньев.

Принимается система допущений, которая, как правило, направлена на упрощение и обоснование принятой структурной схемы моделируемого объекта.

- 4. Составление математического описания отдельных звеньев.
- 5. Определение параметров уравнений. Часть требуемых параметров, каждый из которых имеет строгий физический смысл, можно найти в справочной технической литературе, для определения других требуется постановка специальных экспериментов.
 - 6. Составление и анализ уравнений всего объекта в целом.
 - 7. Выбор методов решения уравнений модели.
- 8. Оценка точности (адекватности) модели. Точность может быть оценена сравнением выходной координаты, рассчитанной по модели, и этой же координаты, измеренной на объекте, при одинаковых входных координатах.

В зависимости от типа химико-технологического объекта, в математическую модель могут входить следующие системы уравнений: гидродинамики, кинетики тепло- и массообмена, кинетики химических реакций.

Гидродинамические уравнения используются в том случае, если через моделируемый объект осуществляется непрерывный проток реакционной смеси. При описании движения среды используются следующие моде-

1. «Идеальное смешение» – для описания реакторов с мешалкой, барботажных аппаратов, реакторов с псевдоожиженным слоем и др.:

$$\frac{dM(\tau)}{d\tau} = m_{\rm BX}(\tau) - m_{\rm BbIX}(\tau); \tag{1.1}$$

$$\frac{dM(\tau)}{d\tau} = m_{\text{BX}}(\tau) - m_{\text{BbIX}}(\tau); \tag{1.1}$$

$$\frac{d(M(\tau)C_{\text{BbIX}}(\tau))}{d\tau} = m_{\text{BX}}(\tau)C_{\text{BX}}(\tau) - m_{\text{BbIX}}(\tau)C_{\text{BbIX}}(\tau), \tag{1.2}$$

где M — масса среды в аппарате; τ — время; $m_{\text{вх}}$, $m_{\text{вых}}$ — массовый расход, соответственно, на входе и выходе аппарата; $C_{\text{вх}}$, $C_{\text{вых}}$ – концентрация, соответственно, на входе и выходе аппарата.

Важен частный случай: $m_{\text{вх}} = m_{\text{вых}} = m$. Тогда $\frac{dM}{d\tau} = 0$, откуда M = const u, следовательно:

$$\frac{dC_{\text{BbIX}}(\tau)}{d\tau} = \frac{1}{\tau} \left(C_{\text{BX}}(\tau) - C_{\text{BbIX}}(\tau) \right), \tag{1.3}$$

где $\tau_s = M/m$ – среднее время пребывания среды в аппарате.

2. «Идеальное вытеснение» – для описания трубчатых реакторов:

$$\frac{\partial C(\tau, l)}{\partial \tau} = -u \frac{\partial C(\tau, l)}{\partial l},\tag{1.4}$$

где l – длина трубы реактора; u – скорость движения среды по трубе.

3. Однопараметрическая диффузионная гидродинамическая модель – используется для описания распылительных и насадочных колонн:

$$\frac{\partial C(\tau, l)}{\partial \tau} = -u \frac{\partial C(\tau, l)}{\partial l} + D_z \frac{\partial^2 C(\tau, l)}{\partial l^2}, \qquad (1.5)$$

где D_z – коэффициент продольной диффузии.

4. Комбинированная модель «идеальное смешение» и байпас:

$$\begin{cases} \frac{dC_{c}(\tau)}{d\tau} = \frac{1}{\tau_{s}} \left(C_{BX}(\tau) - C_{c}(\cdot \quad (1.6) \right) \\ C_{BMX}(\tau) = \kappa_{\delta} C_{BX}(\tau) + (1 - \kappa_{i} \quad (1.7) \end{cases}$$

где $C_{\rm c}$ – концентрация на выходе элемента «идеальное смешение»; $\kappa_{\rm f}$ – коэффициент байпаса.

5. Комбинированная модель «идеальное вытеснение» и циркуляция:

$$\frac{\partial C(\tau, l)}{\partial \tau} = -u \frac{\partial C(\tau, l)}{\partial l}; \tag{1.8}$$

$$C(0,l) = 0;$$
 (1.9)

$$C(\tau,0) = C_{\rm R}(\tau); \tag{1.10}$$

$$C_{\rm RX}(\tau) + \kappa_{\rm II} C_{\rm RMX}(\tau) = (1 + \kappa_{\rm II}) C_{\rm R}(\tau), \qquad (1.11)$$

где $C_{\text{\tiny B}}$ – концентрация на входе элемента «идеальное вытеснение»; $\kappa_{\text{\tiny L}}$ – коэффициент циркуляции.

Отметим, что комбинированной моделью, включавшей элементы «идеальное смешение», «идеальное вытеснение», байпас и циркуляцию можно описать гидродинамику объекта любой сложности.

Если в объекте протекают химические реакции, необходимо использовать уравнения формальной кинетики, имеющие вид

$$\frac{dC_i}{d\tau} = k(T)S_i C_1^{\alpha_1} C_2^{\alpha_2} ... C_n^{\alpha_n} , \qquad (1.12)$$

где C_i — концентрация i-го вещества, участвующего в химической реакции; k — константа скорости реакции; T — абсолютная температура; α_i — порядок реакции по i-му веществу; S_i — стехиометрический коэффициент для i-го вещества.

Зависимость константы скорости реакции от температуры определяется уравнением Аррениуса:

$$k = A \exp(-E/RT), \tag{1.13}$$

где A – предэкспоненциальный множитель; E – энергия активации; R – универсальная газовая постоянная. Например, для бимолекулярной реакции второго порядка, имеющей вид

$$S_1C_1 + S_2C_2 \xrightarrow{k} S_3C_3$$
, (1.14)

уравнения кинетики для участвующих в реакции веществ записываются следующим образом:

$$\frac{dC_1}{d\tau} = -kS_1C_1C_2; {(1.15)}$$

$$\frac{dC_2}{d\tau} = -kS_2C_1C_2; {(1.16)}$$

$$\frac{dC_3}{d\tau} = kS_3C_1C_2. {(1.17)}$$

Если некоторое вещество участвует в нескольких простых реакциях (имеет место сложная параллельная, последовательная, обратимая или смешанная реакция), то кинетическое уравнение будет состоять из суммы уравнений, описывающих простые реакции. Например, пусть вещество C_1 участвует в трех простых реакциях:

$$\xrightarrow{k_1} S_1 C_1 + S_2 C_2 \xrightarrow{k_2} S_3 C_3;$$
(1.18)

$$S_4C_1 + S_5C_3 \xrightarrow{k_3} S_6C_4$$
. (1.19)

Тогда для вещества C_1 кинетическое уравнение имеет вид

$$\frac{dC_1}{d\tau} = -k_1 S_1 C_1 C_2 + k_2 S_1 C_3 - k_3 S_4 C_1 C_3. \tag{1.20}$$

Если через некоторый объект осуществляется проток среды и в нем протекают химические реакции, необходимо использовать уравнения гидродинамики и химической кинетики. Пусть, например, в реакторе с мешалкой протекает реакция (1.14). Гидродинамический режим такого объекта близок к идеальному смешению. Система уравнений объединит уравнение (1.3) и систему (1.15) - (1.17):

$$\frac{dC_1}{d\tau} = \frac{1}{\tau_S} \left(C_{1BX} - C_1 \right) - kS_1 C_1 C_2 ; \qquad (1.21)$$

$$\frac{dC_2}{d\tau} = \frac{1}{\tau_S} (C_{2BX} - C_2) - kS_2 C_1 C_2; \qquad (1.22)$$

$$\frac{dC_3}{d\tau} = -\frac{1}{\tau_s}C_3 + kS_3C_1C_2. \tag{1.23}$$

Уравнение (1.23) записано, исходя из того, что $C_{3\text{вх}} = 0$.

Рассмотрим еще пример. Пусть в трубчатом реакторе протекают реакции (1.18), (1.19). Гидродинамику трубчатого реактора опишем моделью «идеальное вытеснение». Уравнение для вещества C_1 в данном случае объединит уравнения (1.4) и (1.20):

$$\frac{\partial C_1}{\partial \tau} = -u \frac{\partial C_1}{\partial l} - k_1 S_1 C_1 C_2 + k_2 S_1 C_3 - k_3 S_4 C_1 C_3.$$
 (1.24)

Если в объекте протекают процессы массопереноса, необходимо использовать уравнения основных законов массопередачи.

Уравнение массопроводности, учитывающее перемещение жидкой или газообразной фазы в твердой фазе, имеет вид

$$dm = -k_{\rm M} \frac{\partial C}{\partial x} dF , \qquad (1.25)$$

где dm — количество вещества, переместившееся в твердой фазе в единицу времени; $k_{\rm M}$ — коэффициент массопроводности; ∂C — градиент концентрации перемещаемой фазы; x — направление движения потока массы; ∂F — площадь, через которую перемещается вещество.

Перенос вещества от границы раздела фаз в ядро потока описывается уравнением массоотдачи (закон Щукарева):

$$dm = \beta \left(C_{\pi} - C_{\mathfrak{g}} \right) dF , \qquad (1.26)$$

где β – коэффициент массоотдачи; C_{π} – концентрация у поверхности раздела фаз; C_{π} – концентрация в ядре потока.

Молекулярная диффузия в потоке жидкости или газа описывается первым законом Фика

$$dm = -D\frac{\partial C}{\partial x}dF, \qquad (1.27)$$

где D – коэффициент диффузии.

Если в объекте протекают тепловые процессы (теплообмен с внешней средой, выделение или поглощение тепла вследствие химических реакций) – необходимо использовать уравнения кинетики теплопереноса. Основное уравнение теплопередачи

$$q = k_{\rm T} \Delta t F \,, \tag{1.28}$$

где $k_{\rm T}$ – коэффициент теплопередачи; Δt – разность температур.

Уравнение теплопроводности, учитывающее распространение тепла в твердых телах и в тонких слоях жидкостей или газов, имеет вид

$$dq = -\lambda \frac{\partial t}{\partial x} dF , \qquad (1.29)$$

где dq — количество тепла, переданного теплопроводностью в единицу времени; λ — коэффициент теплопроводность; ∂t — градиент температуры.

Перенос тепла от границы раздела фаз в ядро потока описывается уравнением теплоотдачи

$$dq = \alpha_t (t_n - t_g) dF , \qquad (1.30)$$

где α_t – коэффициент теплоотдачи; t_n – температура на поверхности; t_n – температура в ядре потока.

Рассмотрим теперь пример сочетания гидродинамических и тепловых процессов. Пусть, например, в реакторе с мешалкой протекает экзотермическая реакция (1.14), тепловой эффект которой равен Q_p [Дж/моль]. Для отвода тепла реактор охлаждают хладоагентом, подаваемым в рубашку. Уравнение теплового баланса в этом случае будет иметь следующий вид:

$$\frac{dQ}{d\tau} = q_{\text{BX}} - q_{\text{BMX}} - q_{\text{T}} + q_{\text{p}},\tag{1.31}$$

где dQ — изменение тепла в объеме реактора; $q_{\rm BX}$ — поток тепла, поступающий с исходным веществом; $q_{\rm BMX}$ — поток тепла, уходящий с продуктами реакций; $q_{\rm T}$ — поток тепла, уходящий вследствие теплообмена; $q_{\rm p}$ — поток тепла, выделяющегося в экзотермической реакции.

Распишем тепловые потоки:

$$dQ = c_t V \rho dT;$$
 $q_{\text{BX}} = c_t v_{\text{BX}} \rho T_{\text{BX}};$

$$\begin{split} \boldsymbol{q}_{\scriptscriptstyle \mathrm{BbIX}} &= \boldsymbol{c}_{\scriptscriptstyle \mathrm{f}} \boldsymbol{v}_{\scriptscriptstyle \mathrm{BbIX}} \boldsymbol{\rho} \boldsymbol{T}; \qquad \boldsymbol{q}_{\scriptscriptstyle \mathrm{T}} = \boldsymbol{k}_{\scriptscriptstyle \mathrm{T}} \boldsymbol{F} \left(\boldsymbol{T} - \boldsymbol{T}_{\scriptscriptstyle \mathrm{T}} \right), \\ \boldsymbol{q}_{\scriptscriptstyle \mathrm{D}} &= \boldsymbol{k} \boldsymbol{C}_{\scriptscriptstyle \mathrm{I}} \boldsymbol{C}_{\scriptscriptstyle \mathrm{2}} \boldsymbol{Q}_{P} \boldsymbol{V}; \end{split}$$

где c_t – теплоемкость; ρ – плотность реакционной среды; $v_{\text{вк}}$, $v_{\text{вых}}$ – объемный расход реакционной среды, соответственно, на входе и выходе реактора; $T_{\text{г}}$ – температура реакционной среды на входе и выходе реактора; $T_{\text{г}}$ – температура хладоагента.

Подставив тепловые потоки в уравнение (1.31) и приняв, что $v_{\text{вх}} = v_{\text{вых}} = v$, получим:

$$\frac{dT}{d\tau} = \frac{v}{V} (T_{\text{BX}} - T) - \frac{k_{\text{T}}F}{c_t V \rho} (T - T_{\text{T}}) + \frac{kC_1 C_2 Q_{\text{p}}}{c_t \rho}.$$
 (1.32)

Рассмотрим другой пример. Пусть в трубчатом реакторе протекают реакции (1.18), (1.19), причем реакция (1.19) эндотермическая и ее тепловой эффект $Q_{\rm p3}$. Для поддержания заданной скорости протекания процесса реактор обогревают теплоносителем.

Уравнение теплового баланса имеет вид

$$\frac{\partial Q}{\partial \tau} = -u \frac{\partial Q}{\partial l} + q_{\rm T} - q_{\rm p3}. \tag{1.33}$$

Распишем тепловые потоки:

$$\partial Q = c_t \Delta V \rho \partial T$$
; $q_T = k_T \Delta F (T_T - T)$; $q_p = k_3 C_1 C_3 Q_{p3} \Delta V$,

где ΔV – объем элементарного фрагмента трубы реактора длиной Δl ; ΔF – площадь теплообмена элементарного фрагмента трубы.

$$\Delta V = \frac{\pi D^2 \Delta l}{4} \; ; \qquad \Delta F = \pi D \Delta l \; ,$$

где D – диаметр трубы реактора.

После подстановок в (1.33) и сокращений на Δl получим:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = -u \frac{\partial T}{\partial l} + \frac{4k_{\rm T}}{c_t D \rho} (T_{\rm T} - T) - \frac{k_3 C_1 C_3 Q_{\rm p3}}{c_t \rho} \,. \tag{1.34}$$

Математические модели используются не только в задачах оптимизации проектируемого объекта, но и для проверки его работоспособности методами статистического анализа на этапе проектирования. К таким методам относятся методы «наихудшего случая» и имитационного моделирования.

Проверка работоспособности методом «наихудшего случая» заключается в расчете по математической модели множества значений выходных координат при подаче на вход предельно возможных отклонений внутренних и внешних координат от своих номинальных значений. Полученные выходные координаты сравниваются с допустимыми значениями y_{\min} , y_{\max} [2].

Метод имитационного моделирования заключается в постановке численного эксперимента на математической модели с целью оценить различные стратегии, обеспечивающие функционирование исследуемого объекта [3]. Имитационная система включает генератор случайных процессов, математические модели и блок анализа результата (рис. 1.1).

Случайным процессом $z(\tau)$ называют функцию действительного параметра – времени τ , значения z которой при каждом τ являются случайными величинами. Основными характеристиками случайных процессов являются математическое ожидание M, дисперсия σ^2 и корреляционная функция K. Большинство реальных процессов имеют постоянные во времени значения M и σ^2 . Такие случайные процессы называются стационарными.

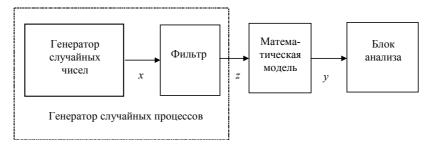


Рис. 1.1. Схема системы имитационного моделирования

Будем далее рассматривать стационарные случайные процессы, характеристики которых могут быть оценены следующим образом:

$$M \cong \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} z_i ; \qquad (1.35)$$

$$\sigma^2 \cong \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (z_i - M)^2 ;$$
 (1.36)

$$K(S) \cong \frac{1}{N-S} \sum_{i=1}^{N-S} (z_i - M)(z_{s+i} - M),$$
 (1.37)

где z_i – значение случайной функции $z(\tau)$ в момент времени τ_i ; N – количество измерений случайной функции.

При моделировании внешних воздействий удобнее вместо отдельных точек корреляционной функции иметь некоторое аппроксимирующее математическое выражение. Наиболее распространенный тип корреляционных функций, позволяющий аппроксимировать широкий класс процессов, имеет вид

$$K(S) = \sigma^2 \exp(-\alpha |S|), \tag{1.38}$$

где α – параметр аппроксимации.

Построение генератора случайных процессов начинается с проведения экспериментов на действующем объекте, аналогичном проектируемому, и получения ряда экспериментальных значений случайного процесса. После этого полученный ряд обрабатывается и находятся оценки M_0 , σ_0^2 , α_0 характеристик случайного процесса.

Следующий этап — собственно построение генератора, на выходе которого должен формироваться случайный процесс с заданными характеристиками M_0 , σ_0^2 , α_0 .

На рис. 1.1 x — равномерно распределенные случайные числа с характеристиками: матожидание $M_x = 0$, дисперсия равна σ_0^2 ; $z(\tau)$ — случайный процесс с характеристиками M_0 , σ_0^2 , α_0 .

Генератор случайных чисел может быть организован с использованием следующих методов [3] – [5]:

1. Мультипликативный конгруэнтный алгоритм (метод вычетов). Каждое последующее случайное число x_{i+1} образуется из предыдущего x_i , согласно рекуррентному соотношению

$$x_{i+1} = \lambda_1 x_i \left(\operatorname{mod} \lambda_2 \right),\,$$

которое означает, что число x_{i+1} равно остатку от деления нацело на λ_2 , произведения числа x_i на постоянный множитель λ_1 .

Для получения случайных чисел из интервала [-0,5;0,5] используют выражение

$$x_i = x_i / \lambda_2 - 0.5 .$$

2. Метод произведений. Произвольно выбираются два числа λ_1 и λ_2 , имеющие одинаковое число значащих цифр m, и находится их произведение $q=\lambda_1\lambda_2$. Из всех значащих цифр произведения q выбираются m цифр, расположенных в середине числа q и эти цифры используются как случайное число λ_3 . Следующее случайное число λ_4 получается аналогично из произведения $\lambda_2\lambda_3$ и т.д. Центрированная последовательность случайных чисел получается по формуле

$$x_i = \lambda_i - 0.5$$
.

3. Получение псевдослучайных последовательностей из иррациональных чисел. Способ основан на свойстве иррациональных чисел образовывать неупорядоченную последовательность цифр дробной части при вычислении иррационального числа с достаточно высокой степенью точности. Алгоритм может быть записан в виде следующих формул:

$$x_0 = \{\lambda_1\} - 0.5;$$
 $x_i = \{\lambda_2 x_{i-1}\} - 0.5.$

Здесь скобки $\{\}$ означают, что из числа, стоящего в скобках, берется только дробная часть; λ_1 , λ_2 – иррациональные числа.

После получения ряда случайных чисел проверяется равенство нулю его математического ожидания M_x и вычисляется дисперсия σ_x^2 .

Предположим, что полученный ряд случайных чисел представляет собой белый шум, т.е. его значения некоррелированы и корреляционная функция имеет вид

$$K_x(S) = \sigma_x^2 \delta(x),$$

где $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака.

Тогда случайный процесс $z(\tau)$, полученный в результате вычисления интеграла свертки вида

$$z(\tau) = \int_{0}^{\tau} x(t - \theta) \sqrt{\frac{\sigma_0^2}{\sigma_x^2 \alpha_0}} e^{-\alpha_0 \theta} d\theta + M_0, \qquad (1.39)$$

будет иметь заданные характеристики M_0 , σ_0^2 , α_0 .

Для вычисления интеграла (1.39) на ЭВМ используют приближенную формулу

$$z(k) \cong \frac{1}{N_S} \sum_{i=k}^{k+N_S} x(i) \sqrt{\frac{\sigma_0^2}{\sigma_x^2 \alpha_0}} e^{-\alpha_0(i-k)} + M_0.$$
 (1.40)

Однако, вследствие того, что ряд случайных чисел x_i не является белым шумом, формулу (1.40) необходимо корректировать следующим образом:

$$z(k) \cong \frac{1}{N_s} \sum_{i=k}^{k+N_s} x(i) \sqrt{\frac{\sigma_0^2}{\sigma_x^2 \alpha_0 A_2}} A_1 e^{-A_2 \alpha_0 (i-k)} + M_0, \tag{1.41}$$

где A_1 , A_2 — параметры, определяемые для каждого конкретного генератора случайных чисел; N_s — количество суммируемых членов ряда x (показывает, из какого количества членов ряда x получается один член ряда z. Для реальных процессов с экспоненциально убывающей корреляционной функцией достаточно взять значение N_s = 10).

Полученный случайный процесс $z(\tau)$ подается на вход математической модели динамики. Таким образом имитируется работа объекта в режиме реального времени. Выходная координата $y(\tau)$, полученная по математической модели, подается в блок анализа, в котором исследуется поведение объекта. Негативными признаются следующие результаты имитационного моделирования:

- выходная координата монотонно увеличивается (уменьшается) во времени и выходит за допустимые пределы y_{max} (y_{min});
 - выходная координата имеет отдельные выбросы, выходящие за пределы $y_{\text{max}}, y_{\text{min}};$
 - скорость изменения выходной координаты превышает заданный предел.

По результатам исследования объекта статистическими методами делается вывод о работоспособности объекта либо о необходимости его перепроектирования.

Для закрепления лекционного материала по дисциплине «Модели и методы анализа проектных решений» выполняются лабораторные работы с использованием ЭВМ, которые заключаются в построении математических моделей различных объектов, выборе методов решения полученной системы уравнений, написании программы решения уравнений модели, расчете на ЭВМ и анализе полученных результатов.

Лабораторная работа 1.1

СОСТАВЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТАТИКИ ОБЪЕКТА С СОСРЕДОТОЧЕННЫМИ КООРДИНАТАМИ И ПОЛУЧЕНИЕ СТАТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НА ЭВМ

Цель: приобретение навыков моделирования статики объектов с сосредоточенными координатами.

Задание: произвести численное решение системы уравнений статики и получить статические характеристики объекта с сосредоточенными координатами

Общие положения

В химической технологии широко распространена группа объектов, которые характеризуются высокой степенью однородности содержимого объема. К таким объектам можно отнести аппараты с мешалкой, барботажные аппараты, аппараты с псевдоожиженным слоем твер-дой фазы.

В качестве примера рассмотрим моделирование статики выпарного аппарата.

В выпарном аппарате (рис. 1.2) происходят следующие физические процессы: конденсация пара в греющей камере, передача тепла от пара через стенку поверхности нагрева к кипящей жидкости, в результате чего выделяются пары растворителя и увеличивается концентрация раствора [6].

Выпарные аппараты одной из распространенных конструкций представляют собой емкость с выпариваемым раствором, обогреваемую перегретым паром. Вторичный пар, образующийся при кипении

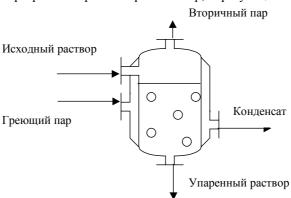


Рис. 1.2. Схема выпарного аппарата

раствора, отсасывается из верхней части аппарата вакуум-насосом; упаренный раствор отводится из нижней части аппарата. Необходимый для обеспечения теплопередачи от греющего пара к выпариваемому раствору перепад температуры получается вследствие того, что давление греющего пара выше, чем давление над кипящим раствором.

Входными координатами выпарного аппарата являются расход $m_{\rm BX}$ и концентрация $C_{\rm BX}$ раствора, подаваемого на вход, расход тепла q, поступающего со свежим греющим паром (расход тепла для насыщенного пара однозначно определяется его температурой $T_{\rm II}$).

Выходные координаты — расход вторичного пара $m_{\rm BT}$, расход $m_{\rm BMX}$ и концентрация $C_{\rm BMX}$ раствора на выходе. Наиболее важной выходной координатой для выпарных аппаратов является концентрация раствора на выходе. С учетом последнего замечания, структурная схема выпарного аппарата может быть представлена в виде, показанном на рис. 1.3.

Будем рассматривать выпарной аппарат как одно звено. Примем следующую систему допущений:

- 1. Гидродинамический режим идеальное смешение.
- 2. Тепловые потери в окружающую среду отсутствуют.
- 3. В выпарной аппарат подается раствор, нагретый до температуры кипения.
- 4. Выпарной аппарат является стационарным объектом.
- 5. Теплоемкость раствора и теплота парообразования не зависят от температуры и концентрации раство-

Целью построения математической модели является получение уравнений, связывающих выходную координату с входными: $C_{\rm BX}$, $m_{\rm BX}$, $T_{\rm II}$.

Математическая модель статики выпарного аппарата состоит из следующих уравнений:

материального баланса

$$m_{\rm BX} = m_{\rm BMX} + m_{\rm BT}; \qquad (1.42)$$

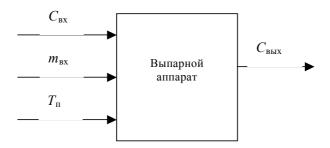


Рис. 1.3. Структурная схема выпарного аппарата

- материального баланса по сухому веществу

$$m_{\rm RX}C_{\rm RX} = m_{\rm RMX}C_{\rm RMX}; (1.43)$$

- теплового баланса (с учетом допущения 2):

$$q_{\rm BX} + q_{\rm T} - q_{\rm BMX} - q_{\rm BT} = 0 , \qquad (1.44)$$

где $q_{\scriptscriptstyle T}$ – поток тепла через поверхность теплообмена от греющего пара к кипящему раствору, Дж/с; $q_{\scriptscriptstyle BX}$ – поток тепла, вносимого в аппарат с раствором, Дж/с; $q_{\scriptscriptstyle BX}$ – поток тепла, уходящего из аппарата с раствором, Дж/с; $q_{\scriptscriptstyle BX}$ – поток тепла, уходящего из аппарата со вторичным паром, Дж/с.

Потоки тепла выражаются следующими зависимостями:

$$q_{\mathrm{T}} = k_{\mathrm{T}} F \left(T_{\mathrm{T}} - T_{\mathrm{p}} \right), \tag{1.45}$$

где $k_{\rm T}$ – коэффициент теплопередачи, Вт/м²град; $T_{\rm p}$ – температура кипения раствора, °C; $T_{\rm n}$ – температура греющего пара, °C; F – площадь теплообмена, м²;

$$q_{\rm BX} = m_{\rm BX} c_t T_{\rm BX} \,, \tag{1.46}$$

где c_t – теплоемкость раствора, Дж/кг град; $T_{\rm BX}$ – температура раствора на входе, °C;

$$q_{\text{BMX}} = m_{\text{BMX}} c_t T_{\text{p}} ; \qquad (1.47)$$

$$q_{\rm BT} = m_{\rm BT} r \,, \tag{1.48}$$

где r – теплота парообразования вторичного пара, Дж/кг.

Учитывая допущение 3, уравнение (1.46) может быть записано в следующем виде:

$$q_{\rm BX} = m_{\rm BX} c_t T_{\rm p} . \tag{1.49}$$

Подставив в уравнение (1.44) выражения (1.45), (1.47)–(1.49), получим:

$$k_{\rm T}F(T_{\rm II} - T_{\rm p}) + c_t T_{\rm p}(m_{\rm BX} - m_{\rm BMX}) - m_{\rm BT}r = 0.$$
 (1.50)

Из уравнений (1.42), (1.43), (1.50) легко получить искомую зависимость:

$$C_{\text{BMX}} = f(C_{\text{BX}}, m_{\text{BX}}, T_{\text{II}}).$$

Порядок выполнения работы

- 1. Составить блок-схему алгоритма решения системы уравнений (1.42), (1.43), (1.50) математической модели статики выпарного аппарата.
 - 2. Подготовить программу для вычислительной машины, реализующую алгоритм из п. 1.
 - 3. Получить статические характеристики по каналам:
- а) $C_{\rm BX} \to C_{\rm BMX}$. Концентрация $C_{\rm BX}$ изменяется от C_0 до C_1 с шагом $\Delta C = 0,4$ %. При этом $m_{\rm BX} = {\rm const},\ T_{\rm II} = {\rm const};$
- б) $m_{\rm BX} \to C_{\rm Bbix}$. Расход на входе изменяется от m_0 до m_1 с шагом $\Delta m = 0,2$ кг/с. При этом $C_{\rm BX} = {\rm const},\ T_{\rm BX} = {\rm const};$
- в) $T_{\rm II} \to C_{\rm BMX}$. Температура греющего пара изменяется от T_0 до T_1 с шагом 0,5°. При этом $C_{\rm BX}$ = const, $m_{\rm BX}$ = const.

Исходные данные, необходимые для расчета, приведены в табл. 1.1.

Для всех расчетов принять $T_{\rm p}=90$ °C. Значения констант: $\tau=2,26\cdot10^6$ Дж/кг; $k_{\rm T}=5000$ Вт/м² град; F=10 м²; $c_t=4187$ Дж/кг · град.

Содержание отчета

Графики зависимостей $C_{\text{вых}}(C_{\text{вх}})$, $C_{\text{вых}}(m_{\text{вх}})$, $C_{\text{вых}}(T_{\text{п}})$.

Контрольные вопросы

- 1. Дать определение статического режима работы объектов.
- 2. Какие из принятых при составлении математического описания допущений являются наименее обоснованными?

Таблица 1.1

№ варианта	<i>C</i> ₀ , %	C_1 , %	C _{BX} , %	<i>m</i> ₀ , кг/с	<i>m</i> ₁ , кг/с	$m_{\rm bx}$, кг/с	T₀, °C	T₁, °C	T _π , °C
1	14	18	15	4	6	5	120	135	130
2	6	10	8	4	6	4	122	140	130
3	8	12	10	4,5	6,8	5	125	140	135
4	9	14	12	4,2	6,5	4,5	123	138	132
5	12	16	14	4,2	6,4	4,6	130	150	140
6	7	12	10	3,9	5,4	4	125	145	138
7	10	14	12	4,5	7	5	130	155	150
8	11	15	13	4,8	7	6	132	160	153
9	20	25	20	6	8	7	120	140	130
10	13	18	16	5	7	6	124	142	135
11	6	12	9	3,8	5,4	4,2	120	140	130
12	15	20	16	4,4	6,9	4,8	132	158	146
13	8	14	12	5	7	6	128	145	140

Продолжение табл. 1.1

№ варианта	<i>C</i> ₀ , %	<i>C</i> ₁ , %	$C_{\scriptscriptstyle \mathrm{BX}}, \%$	т₀, кг/с	<i>m</i> ₁ , кг/с	$m_{\rm bx}$, кг/с	T₀, °C	T₁, °C	T _π , °C
14	18	23	21	7	8,4	7	150	160	155
15	17	21	18	4	6	5	130	140	136
16	7,5	12	8	3,8	5,5	4	125	140	140
17	19	24	22	6,3	8,8	6,5	140	152	150
18	14	20	15	7	8,5	7	142	158	152
19	7	10	8	3,9	5,7	4,8	133	145	142
20	10	15	12	4,6	7	5	135	150	145
21	14	20	19	4,8	6,6	4,9	120	140	135
22	5	9	6	4,8	7,5	5,2	130	150	140

№ варианта	<i>C</i> ₀ , %	<i>C</i> ₁ , %	C _{BX} , %	т₀, кг/с	<i>m</i> ₁ , кг/с	$m_{\rm bx}$, кг/с	T₀, °C	T₁, °C	T _π , °C
23	12	17	14	4,1	6,9	4,2	128	144	142
24	13	19	16	5,2	7,7	5,5	141	156	148
25	11	15	13	4	6	4,5	132	146	140
26	6	12	8	4	7	6	134	151	142
27	17	24	19	6	9	7,5	140	156	150
28	20	26	23	8	14	10	125	138	133
29	11	17	13	4	6,7	5,1	135	149	140
30	5	10	7	5,1	7,8	6,2	127	142	135
31	6,6	11	8	4	7	5	140	160	150
32	13	18	15	7	12	9	122	139	131
33	14	19	16	6	11	9	120	140	130
34	7	14	10	7	13	10	137	151	142
35	17	26	22	10	15	12	125	146	132
36	7,1	13	9	5,5	8	7	121	138	129
37	16	24	20	9,9	15	11	130	152	144
38	5	9	7	6	12	9	119	133	127
39	8,1	14	11	4	9	7	133	152	144
40	15	21	18	11	17	13	120	134	126
41	13	19	16	9	15	11	118	135	127
							Пр	одолжение	табл. 1.1
<u>№</u> варианта	<i>C</i> ₀ , %	C_1 , %	$C_{\scriptscriptstyle \mathrm{BX}},\%$	<i>m</i> ₀ , кг/с	<i>m</i> ₁ , кг/с	<i>m</i> _{вх} , кг/с	T₀, °C	<i>T</i> ₁ , °C	T _π , °C
42	11	17	15	7,7	13	10	126	145	137
43	18	25	22	12	18	15	120	138	128
44	5,9	9,8	7	4,6	8,8	6,5	133	158	145
45	12	19	15	9	14	11	124	138	130
46	6,4	11	8	6	11	9	135	157	144
47	7,7	12	9	6,9	12	10	133	156	142
48	14	19	17	9	17	13	120	140	130
49	11	17	13	8	14	10	122	144	133
50	17	26	22	12	18	14	118	132	124

Лабораторная работа 1.2

СОСТАВЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДИНАМИКИ ОБЪЕКТА С СОСРЕДОТОЧЕННЫМИ КООРДИНАТАМИ И ПОЛУЧЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НА ЭВМ

Цель: приобретение навыков моделирования динамики объектов с сосредоточенными координатами. *Задание*: произвести численное решение системы уравнений динамики на ЭВМ и получить динамические характеристики объекта с сосредоточенными координатами.

Общие положения

Динамические режимы объектов с сосредоточенными координатами описываются системой обыкновенных дифференциальных уравнений, в которых учитывается изменение входных и выходных координат во времени.

Построение математической модели динамики объекта с сосредоточенными координатами осуществим для выпарного аппарата, рассмотренного в лабораторной работе 1.1.

Целью построения математической модели динамики является получение зависимости выходной координаты $C_{\text{вых}}$ от времени при изменении входных координат $C_{\text{вх}}$, $m_{\text{вх}}$ и $T_{\text{п}}$.

Математическая модель динамики выпарного аппарата состоит из следующих уравнений:

• материального баланса:

$$\frac{dM(\tau)}{d\tau} = m_{\rm BX}(\tau) - m_{\rm BHX}(\tau) - m_{\rm BT}(\tau); \qquad (1.51)$$

здесь M – масса раствора, находящегося в аппарате; τ – время;

• уравнения расхода через выходной вентиль:

$$m_{\text{BMX}} = \sigma \sqrt{P_0 + H\rho - P_1}, \qquad (1.52)$$

где σ – коэффициент пропускной способности выходного вентиля; P_0 – давление в аппарате; P_1 – давление после выходного вентиля; H – уровень раствора в аппарате; ρ – плотность раствора;

• материального баланса по сухому веществу:

$$\frac{d(M(\tau) C_{\text{BMX}}(\tau))}{d\tau} = m_{\text{BX}}(\tau) C_{\text{BX}}(\tau) - m_{\text{BMX}}(\tau) C_{\text{BMX}}(\tau); \qquad (1.53)$$

• теплового баланса:

$$c_t \frac{d(M(\tau)T_p(\tau))}{d\tau} = k_t F(T_{\Pi} - T_p(\tau)) + (m_{\text{BX}}(\tau) - m_{\text{BBIX}}(\tau))c_t T_p(\tau) - m_{\text{BT}} r.$$

Поскольку все тепло, передаваемое от греющего пара к кипящему раствору расходуется только на выпаривание растворителя, температура раствора не изменяется, поэтому уравнение теплового баланса будет иметь вид:

$$c_t T_p \frac{dM(\tau)}{d\tau} = k_t F(T_{\Pi} - T_p) + (m_{BX}(\tau) - m_{BLIX}(\tau))c_t T_p - m_{BT} r$$
. (1.54)

В связи с тем, что масса M раствора в аппарате может быть определена следующим образом: $M = HS\rho$, где S – площадь основания аппарата, уравнение (1.52) может быть записано в виде

$$m_{\text{\tiny BMX}} = \sigma \sqrt{P_0 + M / S - P_1} \ ,$$

а уравнение (1.51), соответственно:

$$\frac{dM(\tau)}{d\tau} = m_{\rm BX}(\tau) - \sigma \sqrt{P_0 + M(\tau)/S - P_1} - m_{\rm BT}(\tau). \tag{1.55}$$

Для решения системы уравнений (1.53) — (1.55) математической модели динамики необходимо задать начальные условия. В качестве начальных условий для $C_{\text{вых}}$ и $T_{\text{п}}$ будем использовать произвольную точку статической характеристики (из лабораторной работы 1.1) с известными значениями $C_{\text{вх}}$, $m_{\text{вх}}$, $m_{\text{вх}}$, T_{p} (точку желательно выбрать в середине статической характеристики); начальное условие для M определим из выражения

$$M = S \left(\left(\frac{m_{\text{BX}} - m_{\text{BT}}}{\sigma} \right)^2 + P_1 - P_0 \right), \tag{1.56}$$

где $m_{\rm BX}, m_{\rm BT}$ – значения массовых расходов используемой точки статической характеристики.

Исследование динамики выпарного аппарата будем осуществлять, подавая на вход ступенчатое возмущение раздельно по каналам $C_{\rm вx}$, $m_{\rm вx}$ и $T_{\rm п}$ [7].

Решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений (1.53)-(1.55) можно искать любым известным методом (Рунге-Кутта, Эйлера, итераций и т.д.) [8]. Шаг интегрирования $\Delta \tau = 0.1$ с; интервал интегрирования от 0 до $\tau_{max} = 500$ с.

Порядок выполнения работы

- 1. Составить блок-схему алгоритма решения системы уравнений (1.53) (1.55) с начальным условием (1.56) математической модели динамики выпарного аппарата
 - 2. Подготовить программу для ЭВМ, реализующую алгоритм из п. 1.
 - 3. Получить динамические характеристики по следующим каналам:
 - а) $C_{\text{вх}} \to C_{\text{вых}}$; при этом $m_{\text{вх}} = \text{const}$, $T_{\text{п}} = \text{const}$;
 - б) $m_{\rm BX} \to C_{\rm вых}$; при этом $C_{\rm BX} = {\rm const}, T_{\rm II} = {\rm const};$
 - в) $T_{\Pi} \to C_{\text{вых}}$; при этом $C_{\text{вх}} = \text{const}$, $m_{\text{вх}} = \text{const}$;

Ступенчатые возмущения $\Delta C_{\text{вх}}$, $\Delta m_{\text{вх}}$, ΔT_{Π} задавать относительно точки начального условия.

Возмущения на входе ($\Delta C_{\rm BX}$, $\Delta m_{\rm BX}$, $\Delta T_{\rm p}$) заданы в табл. 1.2. Параметры уравнений: $\sigma = 0.12~{\rm kr}^{0.5}~{\rm m/c}$; $S = 0.75~{\rm m}^2$; $P_0 = 7900~{\rm kr/m}^2$; $P_1 = 7600~{\rm kr/m}^2$.

Таблица 1.2

№ варианта	$\Delta C_{\scriptscriptstyle \mathrm{BX}},\%$	$\Delta m_{\rm bx}$, kg/c	ΔT_{Π} , °C	№ варианта	$\Delta C_{\scriptscriptstyle \mathrm{BX}},\%$	$\Delta m_{\rm bx}$, kg/c	ΔT _π , °C
1	-4	2	14	9	3,1	-5	17
2	3	3	13	10	2,6	2,1	14
3	2,5	1,3	-10,5	11	-4	3,2	_9
4	-2	2	12	12	2	4	11
5	-4	2	-13,2	13	-3	-4	-10
6	3	2,8	-5	14	4,4	5,3	12
7	2	3,2	8,5	15	-2,7	-4,7	13
8	2	2,5	9	16	3,8	1,9	6

Продолжение табл. 1.2

№ варианта	$\Delta C_{\scriptscriptstyle \mathrm{BX}}$, %	$\Delta m_{\rm BX}$, кг/с	ΔT_{Π} , °C	№ варианта	$\Delta C_{\scriptscriptstyle \mathrm{BX}}$, %	$\Delta m_{\rm BX}$, кг/с	ΔT _{II} , °C
17	-2	-2	14	34	5	3,2	13,6
18	-6	-1,4	15	35	-4,9	3,9	-9,5
19	2	3,8	15	36	-3,7	-4,1	12
20	3	1	-14	37	2,8	-4,3	-12,5
21	-4	-1	-8	38	6	5	16
22	2	3,5	5	39	-6	3,7	11
23	3	2	- 7	40	3,5	1,7	-14,2
24	3	2,8	-5	41	4,1	4,2	7,5
25	-2,5	-2,5	4	42	3,8	-3,6	-10
26	-3	-3	6	43	-3	4,7	_9
27	3,8	1,5	9	44	5,3	5	14
28	2,5	3	- 5	45	4	4	4
29	2	3	16	46	3,7	2,7	-5
30	3	2,5	-13	47	-2	-3,5	-8
31	2,5	3	-14	48	-4,3	2,5	11
32	-4,1	-1,1	4	49	4	5	7
33	3	2	5	50	3	3	9

Содержание отчета

- 1. Привести значения $m_{\text{вх}}$, $m_{\text{вт}}$, $C_{\text{вх}}$, $C_{\text{вых}}$, $T_{\text{п}}$ в точке начального условия, взятой со статической характеристики, а также рассчитанное в этой точке значение массы M раствора в аппарате.
- 2. По результатам расчетов построить три пары графиков: $C_{\text{вх}}(\tau)$, $C_{\text{вых}}(\tau)$; $m_{\text{вх}}(\tau)$, $C_{\text{вых}}(\tau)$; $T_{\text{п}}(\tau)$, $C_{\text{вых}}(\tau)$. Диапазон изменения времени $[0, \tau_{\text{max}}]$.

Контрольные вопросы

- 1. В чем заключается отличие статического и динамического режимов работы технологического оборудования?
 - 2. Дать определение динамической характеристике объекта с сосредоточенными координатами.
 - 3. Дать определение параметрам и коэффициентам уравнений математической модели.

Лабораторная работа 1.3

СОСТАВЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТАТИКИ ОБЪЕКТА С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ КООРДИНАТАМИ И ПОЛУЧЕНИЕ СТАТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НА ЭВМ

Цель: приобретение навыков моделирования статики объектов с распределенными координатами.

Задание: произвести численное решение системы уравнений статики и получить статические характеристики объекта с распределенными координатами.

Общие положения

Объекты с распределенными координатами характеризуются изменением параметров не только во времени, но и по сечению и длине. К таким объектам можно отнести трубчатые теплообменники, конденсаторы, трубчатые реакторы, печи и другие аппараты.

В качестве примера рассмотрим моделирование статики процесса разложения этилена в трубчатом реакторе [9], [10].

Процесс протекает по следующей схеме: этилен разлагается на ацетилен и водород по реакции

$$C_2H_4 \xrightarrow{k_1} C_2H_2 + H_2$$
.

В свою очередь, ацетилен разлагается на углерод и водород:

$$C_2H_2 \xrightarrow{k_2} 2C + H_2$$
;

здесь k_1, k_2 – константы скоростей реакций.

Процесс проводится в трубчатом реакторе в газовой фазе, нагревание реакционного объема осуществляется электронагревателем (рис. 1.4). Длина реактора, как правило, в 200 – 2000 раз превышает его диаметр.

Этилен



Рис. 1.4. Схема трубчатого реактора разложения этилена

В реактор подается этилен и инертный газ – разбавитель, присутствие которого предотвращает возможность образования взрывоопасных концентраций.

Входными координатами для рассматриваемого объекта будут являться концентрация $C_{\rm BX}$ этилена на входе в реактор, массовый расход m смеси на входе в реактор, температура T в реакторе. Выходными координатами являются зависимости концентраций этилена C_1 и ацетилена C_2 от текущей длины реактора l.

Представим реактор разложения этилена в виде одного звена. В этом случае его структурная схема будет иметь вид, представленный на рис. 1.5.



Рис. 1.5. Структурная схема реактора

Примем следующие допущения:

- 1. В связи с тем, что длина реактора значительно (более чем в 100 раз) превышает его диаметр, будем использовать гидродинамическую модель «идеальное вытеснение».
- 2. Температура в реакторе электронагревательными элементами поддерживается постоянной по длине трубы и во времени.
 - 3. Плотность реакционной смеси не меняется по длине трубы.

Целью построения математической модели является получение уравнений, связывающих выходные координаты $C_1(l)$, $C_2(l)$ с входными: $C_{\rm Bx}$, m, T.

Константы скоростей реакций, подчиняющиеся закону Аррениуса, связаны с температурой T в зоне реакции следующими уравнениями:

$$k_1 = A_1 \exp(-E_1/RT); \quad k_2 = A_2 \exp(-E_2/RT).$$

Уравнение, описывающее реакцию разложения этилена, движущегося по трубе, имеет вид

$$\frac{\partial C_1(\tau, l)}{\partial \tau} = -u \frac{\partial C_1(\tau, l)}{\partial l} - k_1 C_1(\tau, l),$$

где C_1 – концентрация этилена; u – скорость движения реакционной смеси по трубе; τ – текущее время; l – расстояние от начала трубы до текущей точки.

Аналогичное уравнение для ацетилена имеет вид

$$\frac{\partial C_2 \left(\mathbf{\tau}, l \right)}{\partial \mathbf{\tau}} = -u \frac{\partial C_2 \left(\mathbf{\tau}, l \right)}{\partial l} + k_1 C_1 \left(\mathbf{\tau}, l \right) - k_2 C_2 \left(\mathbf{\tau}, l \right).$$

В связи с тем, что мы будем рассматривать статический режим работы реактора, приравняем нулю производную по времени. Система уравнений примет вид:

$$u\frac{dC_1(l)}{dl} = -k_1C_1(l); (1.57)$$

$$u\frac{dC_2(l)}{dl} = k_1 C_1(l) - k_2 C_2(l). \tag{1.58}$$

Скорость u может бить выражена через массовый расход m реакционной среды через аппарат:

$$u = \frac{m}{\rho S} = \frac{m}{\rho \pi D^2 / 4}$$
, (1.59)

где ρ – плотность реакционной среды; S – площадь сечения трубы; D – диаметр трубы.

Подставив выражение (1.59) в уравнения (1.57) и (1.58), получаем систему уравнений, удобную для расчета:

$$m\frac{dC_1(l)}{dl} = -k_1C_1(1)\frac{\pi D^2}{4}\rho; (1.60)$$

$$m\frac{dC_2(l)}{dl} = (k_1C_1(1) - k_2C_2(l))\frac{\pi D^2}{4}\rho;$$
 (1.61)

$$k_1 = A_1 \exp(-E_1/RT);$$
 (1.62)

$$k_2 = A_2 \exp(-E_2/RT).$$
 (1.63)

Граничные условия: $C_1(0) = C_{\text{вх}}$, $C_2(0) = 0$, где $C_{\text{вх}}$ – концентрация этилена на входе в реактор.

Для использования в уравнениях (1.60), (1.61), концентрацию $C_{\rm BX}$ следует перевести из процентов в моль/м³ по формуле

$$C_{\mu} = \frac{C_{\rm BX} \rho}{100 \% \mu_{\rm AT}},$$

где $\mu_{\text{эт}}$ – молекулярная масса этилена, моль/кг.

Порядок выполнения работы

- 1. Составить блок-схему алгоритма решения системы уравнений (1.60) (1.63) математической модели статики реактора разложения этилена.
 - 2. Подготовить программу для ЭВМ, реализующую алгоритм из п. 1.
 - 3. Получить статические характеристики по следующим каналам:
 - а) $T \to C_1(l)$, $C_2(l)$. Температура T изменяется от T_0 до T_1 с шагом $\Delta T = 25^\circ$. При этом m = const, $C_{\text{вх}} = \text{const}$.
- б) $C_{\rm BX} \to C_1(l)$, $C_2(l)$. Концентрация $C_{\rm BX}$ изменяется от $C_{\rm BX0}$ до $C_{\rm BX1}$ с шагом $\Delta C = 5$ %. При этом $T = {\rm const.}$ $m = {\rm const.}$
- в) $m \to C_1(l)$, $C_2(l)$. Массовый расход изменяется от m_0 до m_1 с шагом $\Delta m = 0,15$ кг/с. При этом T = const, $C_{\text{вх}} = \text{const}$.

В зависимости от варианта статические характеристики следует получать только по одному каналу, для которого указаны значения границ изменения входной координаты в табл. 1.3.

Исходные данные, необходимые для расчета, сведены в табл. 1.3. Величина L – длина реактора. Константы: R=8,31 Дж/моль·град; $E_1=251~000$ Дж/моль; $E_2=297~000$ Дж/моль; $A_1=2\cdot10^{11}$; $A_2=8\cdot10^{12}$; $\rho=1,4$ кг/м 3 ; D=0,1 м. Шаг интегрирования $\Delta l=0,5$ м.

Таблица 1.3

№ вариан- та	<i>m</i> , кг/с	$C_{\scriptscriptstyle \mathrm{BX}}$, %	<i>Т</i> , К	<i>L</i> , м	<i>Т</i> ₀ , К	<i>T</i> ₁ , К	$C_{\text{bx}0}$, %	C_{Bx1} , %	<i>m</i> ₀ , кг/с	<i>m</i> ₁ , кг/с
1	0,5	30	_	160	1250	1300	_	_	_	_
2	_	20	1360	40	_	_	_	_	0,2	0,5
3	1,0	1	1360	80	1	_	20	30	_	_
4	0,2	40	ı	200	1200	1250	_	ı	_	_
5	0,2	ı	1200	200	ı	_	30	40	_	_
6	-	20	1250	190	_	_	_	_	0,5	1
7	2,2	25	1	180	1300	1360	_	-	_	_

№ вариан- та	<i>m</i> , кг/с	$C_{\scriptscriptstyle \mathrm{BX}}$, %	<i>Т</i> , К	<i>L</i> , м	<i>Т</i> ₀ , К	<i>T</i> ₁ , К	$C_{\text{BX}0}$, %	C _{BX1} , %	т₀, кг/с	<i>m</i> ₁ , кг/с
8	0,2	_	1220	210	_	_	20	30	_	_
9	_	24	1360	150	_	_	_	_	2,2	2,5
10	2,5	22	_	220	1270	1330	_	_	_	_
11	2,0	_	1300	200	_	_	25	37	_	_
12	_	31	1350	160	_	_	_	_	2,6	3,0

Продолжение табл. 1.3

№ вари- анта	<i>m</i> , кг/с	$C_{\text{bx}},$	<i>Т</i> , К	<i>L</i> ,	<i>Т</i> ₀ , К	<i>T</i> ₁ , К	$C_{\text{BXO}},$	$C_{\text{Bx1}},$	<i>m</i> ₀ , кг∕с	<i>m</i> ₁ , кг∕с
13	1,5	_	1300	200	_	_	32	43		-
14	0,7	28	_	180	1220	1300	-	1		-
15	0,5	_	1250	190	_	_	20	32	١	_
16	_	35	1300	210	_	_	-	-	1,5	2,0
17	0,2	_	1200	240	_	_	26	38	_	_
18	1,7	40	_	210	1280	1350	_	_	_	_
19	1,0	_	1240	250	_	_	30	40	_	_
20	_	20	1360	90	_	_	_	_	0,6	1,0
21	0,5	_	1350	70	_	_	20	30	_	_
22	3,0	30	_	120	1310	1360	_	_	_	_
23	0,8	_	1230	260	_	_	25	35	_	_
24	_	36	1270	210	_	_	_	_	0,7	1,1
25	1,7	_	1310	200	_	_	22	35	_	_
26	3,1	29	_	130	1300	1345	_	_	_	_
27	1,6	38	_	220	1275	1335	_	_	_	_
28	_	33	1290	200	_	_	_	_	0,8	1,2
29	_	19	1370	100	_	_	_	_	0,5	1,1
30	0,9	_	1240	250	_	_	26	36	_	_
31	1,5	_	1290	210	_	_	31	41	_	_
32	_	18	1330	90	_	_	_	_	0,7	1,5
33	0,8	27	_	190	1200	1290	_	_	_	_
34	2,8	25	_	140	1260	1330	_	_	_	_
35	3,3	26	_	150	1240	1350	_	_	_	_
36	_	20	1300	120	_	_	_	_	1,0	2,0
37	3,5	_	1250	200	_	_	15	28	_	_
38	_	31	1270	200	_	_	_	_	0,7	1,5
39	1,6	20	_	250	1250	1350	_	_	_	_
40	1,2	_	1300	130	_	_	20	31	_	_

Продолжение табл. 1.3

№ вари- анта	<i>m</i> , кг/с	$C_{\scriptscriptstyle \mathrm{BX}}$, %	<i>Т</i> , К	L, M	<i>Т</i> ₀ , К	<i>T</i> ₁ , К	$C_{\rm BXO}, \%$	$C_{\text{Bx}1}$, %	m_0 , кг/с	<i>m</i> ₁ , кг/с
41	1,8	24	_	200	1245	1360	_	_	_	_
42	_	32	1280	220	_	_	_	_	1,0	2,0
43	_	24	1310	160	_	_	-	_	1,6	3,0
44	2,2	_	1250	200	_	_	18	29	_	_
45	3,0	_	1230	270	_	_	24	35	_	_
46	2,0	30	_	250	1290	1390	_	_	_	_

№ вари- анта	<i>m</i> , кг/с	$C_{\scriptscriptstyle \mathrm{BX}},\%_{\scriptscriptstyle 0}$	<i>Т</i> , К	<i>L</i> ,	<i>Т</i> ₀ , К	<i>T</i> ₁ , К	$C_{\text{Bx}0}$, %	C_{Bx1} , %	m_0 , кг/с	<i>m</i> ₁ , кг/с
47	_	26	1320	140	-	_	-	-	2,0	3,4
48	2,3	21	_	160	1300	1400	_	_	_	_
49	1,8	27	_	220	1200	1300	_	_	_	_
50	_	25	1280	200	_	_	_	_	2,2	3,8

Содержание отчета

По результатам расчетов построить в координатах C_1 , l семейство графиков C_1 (l) и в координатах C_2 , l семейство графиков C_2 (l) статической характеристики при различных значениях температуры в реакторе, или массового расхода на входе в реактор, или концентрации этилена на входе в реактор (в зависимости от варианта). Для построения графиков концентрации C_1 , C_2 перевести из размерности моль/м³ в проценты.

Контрольные вопросы

- 1. Какими математическими моделями гидродинамики могут быть описаны объекты с распределенными координатами?
- 2. Какими уравнениями описывается кинетика сложных химических реакций? Привести примеры уравнений для параллельных и обратимых химических реакций.
- 3. Каким образом статические характеристики трубчатого реактора, рассмотренного в лабораторной работе, могут быть использованы для его оптимизации?
- 4. Какие вычислительные методы используются для решения системы уравнений статики объекта с распределенными координатами? Дать сравнительную характеристику этих методов.

Лабораторная работа 1.4

СОСТАВЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДИНАМИКИ ОБЪЕКТА С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ КООРДИНАТАМИ И ПОЛУЧЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НА ЭВМ

Цель: приобрести навыки моделирования динамики объектов с распределенными координатами.

Задание: произвести численное решение уравнений динамики и получить динамические характеристики объекта с распределенными координатами.

Общие положения

Объекты с распределенными координатами характеризуются изменением технологических координат (температуры, концентрации, плотности и т.д.) по длине, радиусу, и для их описания используется гидродинамические модели «идеальное вытеснение», диффузионные, ячеечные и другие.

Динамический режим работы объекта характеризуется изменением выходных координат при изменении входных или при воздействии возмущений.

При описании процессов, протекающих в объектах с распределенными координатами в динамическом режиме, необходимо учитывать изменение концентрации, температуры и других координат во времени, по длине, радиусу. В связи с этим математическая модель динамики объекта с распределенными координатами представляет собой систему уравнений в частных производных — наиболее сложный случай при моделировании технологических объектов.

Для решения уравнений в частных производных могут использоваться методы конечных элементов, конечных разностей, метод сведения к обыкновенным дифференциальным уравнениям с параметром (метод характеристик).

Геометрическое построение динамической характеристики объекта с распределенными координатами возможно лишь в простейшем случае, когда дифференциальное уравнение включает только две частные производные.

В качестве примера рассмотрим моделирование динамики процесса нагревания жидкости в трубчатом теплообменнике [11].

Трубчатый теплообменник (рис. 1.6) представляет собой пучок труб, помещенных в кожух, по которым движется нагреваемая жидкость. В межтрубном пространстве движется теплоноситель. При движении по трубам жидкость нагревается за счет тепла, поступающего от теплоносителя. Движущей силой процесса является разность температур нагреваемой жидкости и теплоносителя.

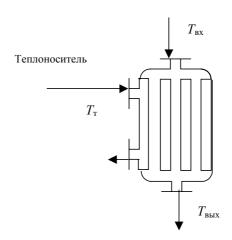


Рис. 1.6. Конструкция трубчатого теплообменника

Входными координатами данного объекта являются температура $T_{\rm вx}$ нагреваемой жидкости на входе в теплообменник; температура $T_{\rm t}$ теплоносителя; скорость u движения жидкости по трубам. Выходная координата – температура $T(\tau, l)$ в любой момент времени τ в любом сечении, находящемся на расстоянии l от начала трубы.

Для получения математической модели выбранного объекта рассмотрим в качестве звена одну трубу теплообменника.

Примем допущения:

- 1. Движение нагреваемой жидкости в трубе описывается гидродинамической моделью «идеальное вытеснение».
 - 2. Температура теплоносителя $T_{\rm T}$ постоянна по длине трубы и во времени.
 - 3. Коэффициент теплопередачи $k_{\rm T}$ не меняется по длине трубы.
 - 4. Плотность ρ и теплоемкость C_t нагреваемой жидкости постоянны.
- С учетом принятых допущений математическую модель динамики трубчатого теплообменника можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = -u \frac{\partial q}{\partial l} + Q_{\rm T} \,, \tag{1.64}$$

где ∂q — изменение количества тепла нагреваемой жидкости; $Q_{\rm T}$ — количество тепла, поступающего к нагреваемой жидкости от теплоно-сителя.

Выразим ∂q через изменение температуры ∂T нагреваемой жидкости:

$$\partial q = c_t \Delta V \rho \, \partial T \,, \tag{1.65}$$

где c_t – теплоемкость нагреваемой жидкости; ρ – плотность нагреваемой жидкости; ΔV – объем нагреваемой жидкости.

Аналогично выразим через T тепло Q_{T} :

$$Q_{\scriptscriptstyle \rm T} = k_{\scriptscriptstyle \rm T} \Delta F(T_{\scriptscriptstyle \rm T} - T); \tag{1.66}$$

здесь $k_{\scriptscriptstyle T}$ – коэффициент теплопередачи; ΔF – площадь поверхности теплообмена; $T_{\scriptscriptstyle T}$ – температура теплоносителя.

Подставим зависимости (1.65), (1.66) в уравнение (1.64):

$$c_t \Delta V \rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = -u c_t \Delta V \rho \frac{\partial T}{\partial l} + k_{\rm T} \Delta F (T_{\rm T} - T)$$
.

Выразим ΔV и ΔF через длину трубы Δl и диаметр D трубы:

$$\Delta F = \pi D \Delta l$$
; $\Delta V = \Delta l \pi D^2 / 4$.

Окончательно получаем:

$$\frac{\partial T(\tau, l)}{\partial \tau} + u \frac{\partial T(\tau, l)}{\partial l} = \frac{4k_{\rm T}}{c_{\rm T} \rho D} (T_{\rm T} - T(\tau, l)). \tag{1.67}$$

Краевые условия: $T(0, l) = T_0(l)$; $T(\tau, 0) = T_{\text{вх}}(\tau)$.

Область определения независимых переменных: $0 \le \tau \le \tau_{\text{max}}, 0 \le l \le L$, где L – длина трубы.

Для решения дифференциального уравнения (1.67) будем использовать метод сведения к обыкновенным дифференциальным уравнениям с параметром [11], называемый также методом характеристик.

Заменим τ и l через α и β :

$$\tau = \alpha + \beta$$
; $l = u(\alpha - \beta)$; $T(\tau, l) = T(\tau(\alpha, \beta), l(\alpha, \beta))$.

В результате получаем обыкновенное дифференциальное уравнение следующего вида:

$$\frac{dT}{d\alpha} = (T_{\rm T} - T(\alpha, \beta)) \frac{4k_{\rm T}}{c_{\rm T}\rho D}.$$
 (1.68)

Уравнение (1.68) полностью эквивалентно уравнению (1.67). Преобразуем области определения независимых переменных:

$$\begin{split} l &= 0 \Rightarrow u \; (\alpha - \beta) = 0 \Rightarrow \alpha = \beta; \; \tau = 0 \Rightarrow \alpha + \beta = 0 \Rightarrow \alpha = -\beta; \\ l &= L \Rightarrow u \; (\alpha - \beta) = L \Rightarrow \alpha = \beta + L/u; \; \tau = \tau_{\text{max}} \Rightarrow \alpha + \beta = \tau_{\text{max}} \Rightarrow \alpha = -\beta + \tau_{\text{max}}. \end{split}$$

Начальное условие $T_0(l)$ будет при $\alpha = \beta$:

$$l = u (-\beta - \beta) = -2u\beta; T_0(l)|_{\alpha = -\beta} = T_0(-2u\beta).$$

Граничное условие $T_{\rm BX}(\tau)$ при $\alpha = \beta$:

$$\tau = \beta + \beta = 2\beta \Rightarrow T_{RX}(\tau)|_{\alpha=\beta} = T_{RX}(2\beta).$$

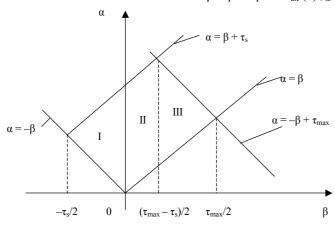


Рис. 1.7. Области определения независимых переменных и краевые условия: $\tau_S = L/u$ – среднее время пребывания

В результате получили три области, отличающиеся краевыми условиями (рис. 1.7):

- I. Область определения $\beta \in [-\tau_s/2, 0]$:
- 1) начинать интегрирование уравнения (1.68) со значения $\alpha = -\beta$;
- 2) за начальное условие для уравнения (1.68) взять $T_0(-2u\beta)$;
- 3) заканчивать интегрирование при условии $\alpha = \beta + \tau_s$.
- II. Область определения $\beta \in [0, (\tau_{\text{max}} \tau_S)/2]$:
- 1) начинать интегрирование уравнения (1.68) со значения $\alpha = \beta$;
- 2) за начальное условие для уравнения (1.68) взять $T_{\rm ex}(2\beta)$;
- 3) заканчивать интегрирование при условии $\alpha = \beta + \tau_S$.
- III. Область определения $\beta \in [(\tau_{max} \tau_S)/2, \tau_{max}/2]$:
- 1) начинать интегрирование уравнения (1.68) со значения $\alpha = \beta$;
- 2) за начальное условие для уравнения (1.68) взять $T_{\rm ex}(2\beta)$;
- 3) заканчивать интегрирование при условии $\alpha = -\beta + \tau_{max}$.

Порядок выполнения работы

- 1. Составить блок-схему алгоритма решения уравнения (1.68) для трех областей определения независимых переменных α и β .
 - 2. Подготовить программу для ЭВМ, реализующую алгоритм из п. 1.
- 3. Получить динамическую характеристику трубчатого теплообменника и построить ее в виде графика в координатах T, τ , l.

Постоянные величины, необходимые для расчета: $k_{\rm T} = 6500~{\rm BT/m^2 \cdot rpaд};~c_t = 4190~{\rm Дж/кг \cdot rpaд};~\rho = 1000~{\rm kr/m^3};~T_{\rm T} = 80~{\rm ^{\circ}C};~L = 1~{\rm m};~D = 0,05~{\rm m};~u = 0,2~{\rm m/c};~\tau_{\rm max} = 10~{\rm c}.$ Краевые условия для исходного уравнения (1.67) приведены в табл. 1.4. Краевые условия необходимо преобразовать согласно методике, приведенной выше.

При интегрировании использовать следующие значения шага переменных: $\Delta \alpha = 0.3$; $\Delta \beta = 0.2$.

№ вари- анта	$T_0(l)$	$T_{\scriptscriptstyle m BX}\!(au)$	№ вари- анта	$T_0(I)$	$T_{ ext{BX}}(au)$
1	20 + 10 <i>l</i>	$20 + 5\sin \tau$	26	30	30
2	$25 + 3(l+1)^2$	$22 + 6\cos \tau$	27	22 + 4l	$22 - 0.5\tau$
3	$20 + 1,5(l+2)^2$	26 – 5sin τ	28	26 – 7 <i>l</i>	$26 + 0.3\tau$
4	30 + <i>l</i>	$35-5\cos \tau$	29	25	$25 + 0.4\tau$
5	30 – 10 <i>l</i>	$10 + 1/(0,1\tau + 0,05)$	30	27 + 5 <i>l</i>	27
6	25 + 5 <i>l</i>	$25 - \sin \tau$	31	$24 + 5l^2$	24 + 6sin τ
7	25 – 5 <i>l</i>	$15 + 1/(0,1 \cdot \tau + 0,1)$	32	$34 - 7l^2$	34
8	$34 - (l+2)^2$	$20+20/(\exp(\tau)+1)$	33	$24+4l-6l^2$	$19 + 5 \exp(-\tau)$
9	$30-3(l+1)^2$	27 +4sin τ	34	$32 - 3(l+1)^2$	29
10	21 – <i>l</i>	$15+9/(\exp(\tau)+0.5)$	35	50	50
11	$l^2 + 4l + 25$	$25 + 6\sin \tau$	36	40 + 10 <i>l</i>	$40 - 0.5\tau$
12	$20 + 10\exp(-l)$	$20 + 10 \exp(-\tau)$	37	53 – 12 <i>l</i>	$46 + 7\exp(-\tau)$
13	$3l^2 + 6l + 23$	$19 + 4\cos \tau$	38	$44 - (l+2)^2$	40
14	$-3l^2 - 6l + 25$	$15 + 10 \exp(-\tau)$	39	60	60
15	$15 + 15\exp(-l)$	30 – 10sin τ	40	55 – 8 <i>l</i>	$55 - 0.8\tau$
16	$35 - (l+2)^2$	$11 + 2/(0,1\tau + 0,1)$	41	37 + 10l	$37 + 5\sin \tau$
17	20 – <i>l</i>	$20 + \tau + 5\sin \tau$	42	43 – 12 <i>l</i>	$38 + 5\cos \tau$
18	30 - 5l	$\tau - 6\sin \tau + 30$	43	55	$55 - 0.6\tau$
19	$25 - 2(l+1,5)^2$	$\tau + 5\cos\tau + 15,5$	44	$51 + 6l^2$	51
20	$4l^2 + 5l + 20$	10+20/(0,5exp(τ)+1,5)	45	47 – 14 <i>l</i>	$47 - 0.1\tau^2$
21	15 + 10 <i>l</i>	$\tau - 6\cos \tau + 21$	46	49	49
22	$20 + 5l - l^2$	$0.1\tau^2 + 5\sin\tau + 20$	47	$20 + 20\exp(-l)$	$40 - 0.7\tau$
23	25 – 10 <i>l</i>	$0.1\tau^{2} + 0.5\tau - \\ -5\sin \tau + 25$	48	54	$54 + 7\sin \tau$
24	25 – 5 <i>l</i>	$0.1\tau^2 + 5\cos \tau + 20$	49	24 + 20l	44
25	$25 + 5l - 5l^2$	$0.1\tau^2 - 5\cos\tau + 30$	50	63	63

Содержание отчета

По результатам расчета построить график $T(\tau, l)$, при этом ось T расположить вертикально; ось l – горизонтально; ось τ – под углом 135° к осям T и l.

Контрольные вопросы

- 1. Какие численные методы используются для решения уравнений, описывающих динамические режимы работы объектов с распределенными координатами? Дать сравнительную характеристику методов.
- 2. Как изменится математическая модель трубчатого теплообменника при отмене допущения о постоянстве температуры теплоносителя по длине теплообменника и по времени?

Лабораторная работа 1.5

МЕТОД КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ РЕШЕНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Цель: приобрести навыки решения дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка явной разностной схемой.

Задание: произвести численное решение дифференциального уравнения теплопроводности и получить динамическую характеристику.

Общие положения

В качестве примеров объектов, которые описываются дифференциальными уравнениями в частных производных второго порядка, могут быть рассмотрены следующие.

- 1. Объекты, характеризующиеся сложной гидродинамикой, которые описываются гидродинамической моделью диффузионного типа.
- 2. Объекты, для которых необходимы расчеты тепловых, электрических и других полей. Такие объекты описываются уравнениями теплопроводности Фурье, массопроводности и др.

В качестве примера рассмотрим дифференциальное уравнение теплопроводности:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\lambda}{c_t \rho} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right), \tag{1.69}$$

где $T(\tau, x, y, z)$ – температура в точке с координатами (x, y, z) в момент времени τ ; λ – коэффициент теплопроводности; c_t – теплоемкость; ρ – плотность.

Уравнение (1.69) записано при допущении, что коэффициент теплопроводности, теплоемкость и плотность постоянны.

Обозначим для компактности $a = \lambda/(c_t \rho)$.

Для простоты будем рассматривать случай распространения тепла через плоскую стенку, т.е. уравнение (1.69) примет вид

$$\frac{\partial T(\tau, x)}{\partial \tau} = a \frac{\partial^2 T(\tau, x)}{\partial x^2}, \qquad (1.70)$$

 $0 \le x \le X$; $0 \le \tau \le \tau_{\text{max}}$;

 $T(0, x) = \varphi(x)$ – начальное условие;

 $T(\tau, 0) = f_1(\tau)$ – первое граничное условие;

 $T(\tau, X) = f_2(\tau)$ – второе граничное условие.

Такие краевые условия называются условиями первого рода.

Введем равномерную сетку по переменным: $\tau - c$ шагом $\Delta \tau$, x - c шагом Δx . Будем называть слоем множество всех узлов сетки, имеющих одно и то же значение координаты τ .

Для аппроксимации уравнения (1.70) введем шаблон, изображенный на рис. 1.8.

Введем обозначение $T(\tau_i, x_i) = T_{i,i}$.

Заменим производные разностями

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} \approx \frac{T_{j+1,i} - T_{j,i}}{\Delta \tau} \; ; \quad \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{T_{j,i+1} - 2T_{j,i} + T_{j,i-1}}{\Delta x^2} \; .$$

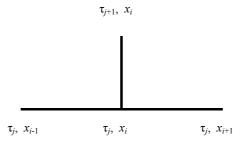


Рис. 1.8. Шаблон явной разностной схемы

Подставим разностные формы в уравнение (1.70):

$$\frac{T_{j+1,i} - T_{j,i}}{\Delta \tau} = a \frac{T_{j,i+1} - 2T_{j,i} + T_{j,i-1}}{\Delta x^2} ,$$

откуда

$$T_{j+1,i} = a \frac{\Delta \tau}{\Delta x^2} \left(T_{j,i+1} - 2T_{j,I} + T_{j,i-1} \right) + T_{j,i}. \tag{1.71}$$

Поскольку решение ищется по явной формуле (1.71), данная схема называется явной разностной.

Находить решение такой системы следует по слоям.

Рассмотрим вычисление первого слоя, для чего зададим j=0. Крайняя точка первого слоя определится из краевого условия: $T_{1,0}=f_1(\tau_1)$. Следующая точка определяется из выражения (1.71) при i=1:

$$T_{1,1} = a \frac{\Delta \tau}{\Delta x^2} (T_{0,2} - 2T_{0,1} + T_{0,0}) + T_{0,1};$$

при этом $T_{0.0}$, $T_{0.1}$, $T_{0.2}$ определяются из начального условия $\varphi(x)$.

Увеличивая i, рассчитаем все внутренние точки первого слоя, а крайнюю (при x = X) найдем из граничного условия $T_{1,N} = f_2(\tau_1)$.

Заметим, что устойчивое решение явной разностной схемой можно получить лишь при выполнении условия $\Delta \tau \leq 0.5 \Delta x^2$.

Порядок выполнения работы

- 1. Составить блок-схему алгоритма решения уравнения (1.70).
- 2. Подготовить программу для ЭВМ, реализующую алгоритм из п. 1.
- 3. Получить динамическую характеристику распространения тепла в плоской пластине и построить ее в виде графика в координатах T, τ , x.

Постоянные величины, необходимые для расчета: $a = 1,3 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2/\text{c}; \Delta x = 0,1 \text{ м}; X = 1 \text{ м}; \tau_{\text{max}} = 100 \text{ c}.$ Краевые условия для исходного уравнения (1.70) приведены в табл. 1.5.

Таблица 1.5

№ варианта	$\varphi(x)$	$f_1(au)$	$f_2(\tau)$
1	20 + 10x	$20 + 5\sin \tau$	30
2	$25 + 3(x+1)^2$	$22 + 6\cos \tau$	$37 - 0.1\tau$
3	$20 + 1,5(x+2)^2$	$26-5\sin\tau$	$33,5+0,08\tau$
4	30 + x	$35-5\cos \tau$	$11 + 1/(0.1\tau + 0.05)$
5	30 - 10x	$10 + 1/(0,1\tau + 0,05)$	$20 + 5\sin \tau$
6	25 + 5x	$25 - \sin \tau$	$30 + 0,0004\tau^2 - 0,1\tau$
7	25 - 5x	$15 + 1/(0,1\tau + 0,1)$	26 – 6cos τ
			Продолжение табл. 1
№ варианта	φ(x)	$f_{ m l}(au)$	$f_2(\tau)$
8	$34 - (x+2)^2$	$20 + 20/(\exp(0.1\tau) + 1)$	25 + 4sin τ
9	$30-3(x+1)^2$	27 + 4sin τ	$18 + 0.1\tau$
10	21-x	$15 + 9/(\exp(0.1\tau) + 0.5)$	$0.0005\tau^2 + 0.07\tau + 20$
11	$x^2 + 4x + 25$	$25 + 6\sin \tau$	30
12	$20 + 10\exp(-x)$	$20 + 10\exp(-0.1\tau)$	$13.7 + 10\exp(-0.1\tau)$
13	$3x^2 + 6x + 23$	19 + 4cos τ	$32 - 0.12\tau$
14	$-3x^2 - 6x + 25$	$15 + 10 \exp(-\tau)$	12 + 4cos τ
15	$15 + 15\exp(-x)$	30 – 10sin τ	$20,05 + 10\sin \tau$
16	$35 - (x+2)^2$	$11 + 2/(0.1\tau + 0.1)$	26 – 10sin τ
17	20 - x	$20 + \tau + 5\sin \tau$	$0,0003\tau^2 + 0,06\tau + 19$
18	30 - 5x	$\tau - 6\sin \tau + 30$	$25 + 0.11\tau$
19	$25-2(x+1)^2$	$\tau + 5\cos \tau + 18$	$17 + 0.15\tau$
20	$4x^2 + 5x + 20$	$10 + 20/(0.5 \exp(0.1\tau) + 1.5)$	29
21	15 + 10x	$0.11\tau - 6\cos \tau + 21$	25 – 10sin τ
22	$20 + 5x - x^2$	$0.001\tau^2 + 5\sin \tau + 20$	$20 + 4\cos \tau$
23	25 - 10x	$0.05\tau - 5\sin \tau + 25$	$5 + 1/(0,1\tau + 0,1)$
24	25 - 5x	$0.001\tau^2 + 5\cos\tau + 20$	$2/(0.1\tau + 0.1)$
25	$25 + 5x - 5x^2$	$0.001\tau^2 - 5\cos\tau + 30$	$25 + 0.15\tau$
26	30	$30 + 0.05\tau$	$30 - 0.1\tau$
27	22 + 4x	22 – 0,05τ	26 – 0,05τ
28	26 - 7x	$26 + 0.03\tau$	$19 + 5\exp(-0.1\tau)$
29	25	$25 + 0.04\tau$	$25 + 7\exp(-0.11\tau)$
30	27 + 5x	27	32 + 6sinτ
31	$24 + 5x^2$	$24 + 6\sin \tau$	$22 + 7\cos \tau$
32	$34 - 7x^2$	34	$27 + 0.04\tau$
33	$24 + 4x - 6x^2$	$19 + 5\exp(-0.1\tau)$	$22 + 0.05\tau$
34	$32-3(x+1)^2$	29	20 – 0,06τ
35	50	50	$50 + 0.04\tau$
36	40 + 10x	$40 - 0.05\tau$	$50 - 0.05\tau$
37	53 – 12 <i>x</i>	$46 + 7\exp(-0.1\tau)$	41
38	$44 - (x+2)^2$	40	$28 + 7\cos \tau$
39	60	60	60 + 6sin τ

№ варианта	$\varphi(x)$	$f_1(au)$	$f_2(au)$
40	55 – 8x	$55 - 0.08\tau$	47
41	37 + 10x	$37 + 5\sin \tau$	$55 - 8\exp(-0.12\tau)$
42	43 - 12x	$38 + 5\cos \tau$	$31 + 0.04\tau$
43	55	55 – 0,06τ	$55 + 0.04\tau$
44	$51 + 6x^2$	51	$0,0005\tau^2 + 57$
45	47 - 14x	$47 - 0.001\tau^2$	33 + 6sin τ
46	49	49	$0,0007\tau^2 + 49$
47	$20 + 20\exp(-x)$	$40 - 0.07\tau$	27,36
48	54	54 + 7sin τ	$54 - 0,0007\tau^2$
49	24 + 20x	24	$44 - 0.05\tau$
50	63	$63 + 0.1\tau$	$63 - 0.1\tau$

Содержание отчета

По результатам расчета построить график $T(\tau, x)$, при этом ось T расположить вертикально; ось x – горизонтально; ось τ – под углом 135° к осям T и x.

Контрольные вопросы

- 1. Какие численные методы используются для решения дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка? Дать сравнительную характеристику методов.
- 2. Какие шаблоны могут использоваться при аппроксимации дифференциального выражения разностной схемой?
 - 3. Какие преимущества и недостатки имеют явная и неявная разностные схемы?

Лабораторная работа 1.6

ИССЛЕДОВАНИЕ АЛГОРИТМОВ ГЕНЕРАЦИИ ПСЕВДОСЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ ДЛЯ ЦЕЛЕЙ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Цель: приобрести навыки построения алгоритмов случайных процессов.

Задание: разработать алгоритмы генерации псевдослучайных процессов и получить псевдослучайный процесс с заданными статистическими характеристиками.

Общие положения

Важным элементом системы автоматизированного проектирования, позволяющим осуществить проверку работоспособности спроектированного объекта, является подсистема имитационного моделирования. Имитационное моделирование осуществляется в два этапа. Первый этап — построение составных частей имитационной подсистемы (математических моделей, генераторов случайных процессов, алгоритмов оптимального проектирования и управления и т.д.) и их индивидуальная проверка. Второй этап — собственно исследование спроектированного объекта.

Данная лабораторная работа посвящена построению важных элементов системы имитационного моделирования – генераторов случайных процессов, описанных выше.

Порядок выполнения работы

- 1. Подготовить программу для ЭВМ, реализующую генератор случайных чисел по методу, указанному в табл. 1.6.
- 2. Вычислить математическое ожидание M_x по формуле (1.35) и σ_x^2 по формуле (1.36) для ряда случайных чисел, полученных генератором в п. 1.
 - 3. Отцентрировать генератор случайных чисел в случае неравенства нулю M_{x} .
- 4. Подготовить программу для ЭВМ, реализующую генератор случайных процессов по формуле (1.41). При этом значения параметров A_1 , A_2 задать равными единице.
- 5. По формулам (1.35), (1.36) рассчитать значения математического ожидания M_z и дисперсии σ_z^2 полученного случайного процесса.
- 6. По формуле (1.37) рассчитать 20 значений корреляционной функции K_z полученного случайного процесса.
 - 7. Аппроксимировать полученные значения K_z выражением (1.38) и найти α_z .

8. В случае, если полученные значения M_z , σ_z^2 , α_z более, чем на 10 % каждое отличаются по модулю от заданных значений M_0 , σ_0^2 , α_0 , подобрать любым поисковым методом нелинейного программирования параметры A_1, A_2 , при которых случайный процесс будет иметь характеристики $M_z, \ \sigma_z^2$, α_z , не более, чем на 10 % отличающиеся от заданных.

Исходные данные, необходимые для построения генераторов случайных процессов, приведены в табл. 1.6. Длину ряда случайных чисел x_i использовать N = 200.

Количество случайных чисел Z_i , получаемых генератором, также равно 200. Количество значений корреляционной функции K_z , используемых при аппроксимации выражением (1.38), взять равным 20.

При генерации случайных чисел конгруэнтным методом первое число ряда $Z_0 = 1$.

Таблица 1.6

Nº	ТИП	λ_1	λ_2	M_0	$\sigma_0^{\ 2}$	α_0
1	Конгруэнтный	513	218	11	6	0,11
2	метод	511	218	8	4,5	0,17
3		5 ⁸	214	21	15	0,1
4		5 ⁹	214	18	14	0,16
5		5 ⁸	215	17,5	11	0,14
6		5 ⁹	38	13	8	0,12
7		5 ¹²	311	28	17	0,13
8		5 ¹¹	313	14,4	6	0,14
9		5 ¹⁰	39	250	3600	0,15
10		5 ⁹	310	100	900	0,1
11		5 ¹²	2 ¹⁷	80	400	0,11
12		5 ¹⁰	216	200	2500	0,12
13		510	213	70	625	0,14
14		5 ⁸	312	120	1225	0,12
15		5 ¹³	311	140	2025	0,13
16	Метод	0,4211	0,7371	15	3	0,15
17	произведений	0,5549	0,2417	12	11	0,08
18		0,8673	0,1171	25	100	0,1
19		0,1885	0,5771	7	6	0,16
20		0,176815	0,493894	14	15	0,11
21	Метод ирра- циональных чисел	π	$\sqrt{2}$	19	25	0,05
22		$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	18,7	23	0,08
23		$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	32	41	0,1
24		e	$\sqrt{3}$	15	36	0,06
25		$\sqrt{5}$	$\sqrt{2}$	30	100	0,11
26		e	π	10	15	0,13

Продолжение табл. 1.6

Nº	ТИП	λ_1	λ_2	M_0	$\sigma_0^{\ 2}$	α_0
27	Метод ирра- циональных чисел	π	e	21,3	58	0,1
28		$\sqrt{5}$	$\sqrt{3}$	16	16	0,15
29		$\sqrt{5}$	π	12	15	0,16
30		$\sqrt{3}$	e	8	11,5	0,09
31		$\sqrt{7}$	$\sqrt{11}$	15	36	0,07

Nº	ТИП	λ_1	λ_2	M_0	$\sigma_0^{\ 2}$	α_0
32		$\sqrt{\pi}$	√e	20	100	0,1
33		$\sqrt{7}$	$\sqrt{13}$	150	900	0,11
34		$\sqrt{13}$	$\sqrt{11}$	140	2500	0,12
35		$\sqrt{11}$	$\sqrt{7}$	200	4900	0,13
36		$\sqrt{11}$	$\sqrt{13}$	110	400	0,14
37		$\sqrt{7}$	e	75	625	0,15
38		$\sqrt{11}$	π	90	900	0,16
39		e	$\sqrt{7}$	40	100	0,1
40		π	$\sqrt{13}$	60	570	0,09
41		$\sqrt{23}$	e	133	865	0,08
42		$\sqrt{17}$	√11	128	1000	0,1
43		π	$\sqrt{23}$	88	443	0,11
44		π	$\sqrt{17}$	149	750	0,13
45		e	$\sqrt{23}$	210	6400	0,1
46		e	$\sqrt{17}$	36	36	0,12
47		$\sqrt{23}$	$\sqrt{2}$	18	25	0,14
48		$\sqrt{17}$	$\sqrt{3}$	105	124	0,1
49		$\sqrt{13}$	$\sqrt{5}$	77	169	0,09
50		$\sqrt{23}$	$\sqrt{5}$	214	8100	0,1

Содержание отчета

- 1. Полученный ряд значений случайного процесса.
- 2. График полученных значений случайного процесса.
- 3. График полученных значений корреляционной функции и аппроксимирующей ее экспоненциальной зависимости.
 - 4. Полученные значения M_z , σ_z^2 , α_z .
 - 5. Найденные параметры A_1, A_2 .

Контрольные вопросы

- 1. Каков физический смысл математического ожидания, дисперсии и корреляционной функции случайного процесса?
- 2. Какова методика формирования случайного процесса с заданными характеристиками из последовательности случайных чисел?
- 3. Какие методы статистического анализа используются для проверки работоспособности спроектированного объекта?

Лабораторная работа 1.7

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЪЕКТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАКЕТА ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ ChemCAD

Цель: приобретение навыков работы с пакетом прикладных программ моделирования объектов химической технологии ChemCAD.

Задание: построить схему и произвести расчеты трубчатого реактора разложения этилена с использованием пакета прикладных программ моделирования объектов химической технологии ChemCAD.

Общие положения

Краткое описание пакета прикладных программ ChemCAD и порядок работы с пакетом. Программа ChemCad (версия 5.0) представляет собой инструментальные средства моделирования химико-технологических

процессов для решения задач исследования и проектирования химико-технологических систем, в том числе отдельных аппаратов.

ChemCad имеет модульную структуру и состоит из системного и функционального наполнений, представляющих собой средства и объекты расчета, а также баз данных и интерфейса пользователя, обладающего мощными графическими возможностями.

Для получения справочной информации можно использовать команду Help/Help Topics (Помощь/Содержание справки), после чего на экран выводится окно ChemCad 5.0 Help (ChemCad 5.0 Помощь).

Моделирование новой технологической схемы с помощью ChemCad'а предполагает следующие этапы:

- 1. Создать новый файл технологической схемы.
- 2. Выбрать технические размерности.
- 3. Выбрать компоненты.
- 4. Выбрать термодинамические модели.
- 5. Построить технологическую схему.
- 6. Задать параметры входных потоков.
- 7. Задать параметры для всех единиц оборудования.
- 8. Запустить программу моделирования.
- 9. Просмотреть результаты моделирования на экране.
- 10. Распечатать результаты моделирования на принтере.

Эти этапы не обязательно выполнять в такой же последовательности, не обязательно также проходить через все эти этапы при построении технологической схемы, так как для некоторых из них существует информация по умолчанию; но все эти этапы, по крайней мере, следует принять во внимание при решении каждой задачи.

1. Создание нового файла технологической схемы. При работе с заданием (технологической схемой) подразумевается его загрузка, сохранение и управление этим заданием.

Для открытия нового задания используется команда **File/New Job (Файл/Новое задание)** на панели инструментов, после чего программа в окне **Сохранение файла** предложит ввести имя файла. Это имя используется для создания нового подкаталога в каталоге программы CC5DATA.

Задание из существующего на диске файла можно открыть, используя команду **File/Open Job...** (Файл/Открыть задание...) на панели инструментов. Все последующие действия выполняются стандартным образом, как для любого приложения Windows.

После открытия нового задания в заголовке окна выводится его имя, отображаются меню, панель инструментов и Main Palette (Основная палитра). Текущий режим программы указывается в строке состояния: Mode: Flowsheet (Режим: Технологическая схема). После открытия существующего на диске задания текущим режимом программы является режим Mode: Simulation (Режим: Моделирование).

2. Выбор технических размерностей. При создании технологической схемы необходимо выбрать технические размерности. В программе представлены три набора единиц измерения: английский, метрический и СИ. Эти наборы называются профилями единиц измерения.

Для выбора технических размерностей используется команда Format/Engineering Units (Формат/Единицы измерения). На экран выводится окно Engineering Unit Selection (Выбор единиц измерения).

В списках области **Stream Flow Units (Расходные единицы потока)** выбираются глобальные размерности расхода:

- Total Flow (Общий расход) общего расхода;
- Component Flow (Pacxoд компонентов) расхода компонентов потока.

Выбор текущих размерностей производится с помощью соответствующих кнопок, расположенных в нижней части окна: English (Английская), Si (СИ), Metric (Метрическая).

3. Выбор компонентов. В соответствии с этапами моделирования следующим шагом является задание списка химических компонентов процесса. Выбор компонентов производится из банка данных программы. Для этого используется команда ThermoPhisical/Component List (Термофизика/Список компонентов) на панели инструментов. После выполнения команды на экран выводится окно Component Selection (Выбрать компонент). Команда и кнопка доступны в режиме Mode: Simulation (Режим: Моделирование), для перехода в который используется команда операционного меню Edit Flowsheet (Редактирование технологической схемы) на панели инструментов.

В области **Component Databank (Банк данных компонентов)** перечислены все компоненты всех баз данных системы и локальных пользовательских баз данных. Список компонентов составлен по возрастанию их идентификационных номеров (ID). В поле **Search for (Поиск по)** компоненты вводятся либо по ID номерам, либо по названиям или формулам. С помощью кнопки **Next (Следующий)** можно перемещаться по списку области **Component Databank** в соответствии с введенным в поле **Search for** поисковым контекстом.

В левой части окна в области **Selected Components (Выбранные компоненты)** отображается список компонентов, используемых в задании. Он создается по мере выбора нужного компонента из списка области **Component Databank.** Для выбора нужного компонента требуется либо набрать его номер в поле **Search for (Поиск по)** и нажать клавишу [ENTER], либо дважды щелкнуть левой клавишей мыши на имени компонента. Выбранный компонент выводится в области **Selected Components.**

Созданный список компонентов можно соответствующим образом изменять:

- Add (Добавлять) новые компоненты в список. Для этого надо либо выбрать нужный компонент в области Component Databank, либо ввести его номер в поле Search for и нажать кнопку Add. Добавленный компонент появится в конце списка, созданного в области Selected Components.
- Insert (Вставлять) новые компоненты в список. Для этого надо установить курсор мыши на том компоненте, перед которым будет вставляться новый, выбрать нужный компонент в области Component Databank и нажать кнопку Insert.
- Delete (Удалять) компонент из списка. Для этого выбирается удаляемый компонент и нажимается кнопка Delete. Причем вся информация и ссылки на удаленный компонент также убираются из модели.
 - Clear (Очистить) все присутствующие в списке компоненты.

Для сохранения созданного списка компонентов надо нажать кнопку **ОК.** Программа перешлет эти данные в файл задания и вернется в режим **Mode:Simulation.**

4. Выбор термодинамических моделей. Термодинамические свойства потоков определяются заданием любых двух параметров из следующих: температура, давление, доля пара и энтальпия.

Чтобы получить точные результаты расчетов, необходимо выбрать метод, наиболее подходящий для данной химической системы. Выбор термодинамических моделей сводится преимущественно к выбору пригодных методов расчета констант фазового равновесия, энтальпии, энтропии, плотности, вязкости, теплопроводности и поверхностного натяжения содержимого потока. ChemCad содержит примерно 50 методов расчета констант фазового равновесия с различными вариантами и около 12 способов расчета энтальпии. Для выбора термодинамических методов используются команды меню ThermoPhisical (Термофизика), доступные в режиме Mode: Simulation (Режим: Моделирование).

- 5. Построение технологической схемы сводится, в основном, к размещению изображений технологического оборудования (далее аппаратов или пиктограмм аппаратов) на экране и соединению их потоками. Иногда на этапе построения схемы возникает необходимость в создании новых и модификаций имеющихся пиктограмм. Рассмотрим последовательность выполнения этих шагов.
- **5.1.** *Размещение изображений аппаратов*. Выставление изображений аппаратов выполняется в режиме Mode: Edit Flowsheet (Режим: Редактирование технологической схемы). **При создании нового задания переход в этот режим выполняется автоматически.**

На экран выводится Main Palette (Основная палитра). Каждый квадрат палитры содержит символ, указывающий его функции, и пиктограммы аппаратов. Вывести/убрать основную палитру можно с помощью команды View/Main Pallete (Просмотр/Основная палитра), на панели инструментов. Кроме основной палитры для ряда пиктограмм выводится Sub Palletes (Подпалитра) с дополнительными вариантами пиктограмм аппарата. Вызов подпалитры выполняется щелчком правой кнопки мыши на изображении пиктограммы. Для выбора пиктограммы аппарата надо установить на ней курсор мыши, появится подсказка с названием пиктограммы, и далее щелкнуть левой клавишей мыши. После этого на экране отображается курсор в виде квадрата, который можно перемещать по экрану. Для отказа от выставления пиктограммы на экран выполняется команда Edit/Undo (Редактирование/Отменить). Команда позволяет последовательно отказаться от всех выставленных на экран пиктограмм аппаратов. Для восстановления на экране отмененных ранее пиктограмм выполняется команда Edit/Redo (Редактирование/Восстановить).

Размещение изображений аппаратов технологической схемы начинается, как правило, с выставления пиктограммы **Feed (Питание).** Для размещения выбранной пиктограммы надо щелкнуть левой клавишей мыши – и в указанном месте она отобразится. Рядом с пиктограммой автоматически выставляется ее ID (идентификационный номер). Эти номера присваиваются последовательно, начиная с 1, в порядке выставления пиктограмм.

После размещения первой пиктограммы на экране вновь появляется основная палитра для выбора другой пиктограммы аппарата. Все последующие действия по выбору и размещению пиктограмм выполняются аналогичным образом. Завершение размещения изображений аппаратов технологической схемы заканчивается выставлением пиктограмм **Product (Продукт)**.

На каждом этапе выставления аппаратов или при завершении этого процесса можно сохранить введенную информацию, выполнив команду File/Save (Файл/Сохранить) или File/Save As Case (Файл/Сохранить как вариант).

- 5.2. Создание и модификация пиктограмм аппаратов. У каждого аппарата, как правило, имеется множество пиктограмм. Однако для решения практических задач этого может оказаться недостаточным. Поэтому программой предусмотрены широкие возможности модификации пиктограмм. Для этого надо выделить пиктограмму, щелкнув на ней правой кнопкой мыши, после чего на экран выводится контекстное меню со следующими командами:
 - Cut (Вырезать) вырезает выделенный объект и помещает его в буфер обмена;
 - Сору (Копировать) копирует выделенный объект в буфер обмена;
 - Delete (Удалить) удаляет выделенный объект;
 - Select All (Выделить все) выделяет все объекты, расположенные в рабочей области окна;
 - Bring to Front (Перенести на передний план) помещает выделенный объект на передний план;
 - Send to Back (Поместить на задний план) помещает выделенный объект на задний план;

- Flip Horisontal X (Вращение объекта относительно оси X) выполняет поворот выделенного объекта относительно оси X;
- Flip Vertical Y (Вращение объекта относительно оси Y) выполняет поворот выделенного объекта относительно оси Y;
- 90 Clock wise (Поворот по часовой стрелке на 90 градусов) выполняет поворот выделенного объекта по часовой стрелке на 90 градусов;
- 90 Conunter CW (Поворот против часовой стрелки на 90 градусов) выполняет поворот выделенного объекта против часовой стрелки на 90 градусов;
- Edit ID (Редактирование ID) номера) выполняет редактирование ID номера выделенного объекта. В окне Enter a new unit ID or press cancel (Введите новый ID номер оборудования или нажмите отказ) с соответствующее поле надо ввести новый ID номер и нажать кнопку ОК;
- Edit Name (Редактирование имени) позволяет ввести метку длиной не более 12 символов для выделенного объекта. В окне Enter new label or press cancel (Введите новую метку или нажмите отказ) в соответствующее поле надо ввести метку и нажать кнопку ОК;
 - Show ID (Показать ID номер) выделяет порядковый номер объекта;
 - **Redraw (Обновить)** обновляет изображение на экране.
- 5.3. *Изображение потоков на технологической схеме*. После завершения размещения аппаратов технологической схемы необходимо соединить их материальными потоками. При изображении потоков следует руководствоваться рядом общих правил.
 - а) Каждый поток направлен от аппарата-источника к аппарату-приемнику.
- б) Каждый аппарат имеет позиции входа и выхода. Они останавливаются при создании пиктограммы аппарата. Программа ориентирует потоки по отношению к этим позициям. Поток всегда направлен из выхода аппарата-источника к входу аппарата-приемника.
- в) Начало потока определяется появлением курсора в виде стрелки рядом с позицией выхода из аппаратаисточника. При нажатой левой кнопки мыши программа строит поток из этой позиции.
- г) При изображении потока, приближаясь к позиции входа аппарата, вновь появляется курсор в виде стрелки. Поток фиксируется нажатием левой клавиши мыши. Одновременно рядом с потоком отображается его ID номер.
- д) Для отказа от изображения потока надо нажать правую кнопку и выполнить Stop drawing stream (Приостановить изображение потока). Соединение аппаратов потоками выполняется в режиме Mode: FlowSheet. В Main Pallete (Основной палитре) надо выбрать символ Stream (Поток), который позволит указать начало и конец потока. После выполненных действий курсор мыши принимает вид маленького креста. Для изображения потока курсор подводится близко к пиктограмме питания. Когда появится стрелка рядом с выходом аппарата, фиксируется левая кнопка мыши и с помощью мыши в соответствующем направлении рисуется поток. Когда появится стрелка входного потока следующей пиктограммы, снова фиксируется левая кнопка мыши. Программа изобразит поток, идущий прямо в эту точку и автоматически присвоит ему его ID (идентификационный номер).

С помощью соответствующих команд контекстного меню можно, по аналогии с модификацией выставленных пиктограмм аппаратов, выполнять различные модификации потоков и их ID номеров.

На каждом этапе соединения аппаратов потоками или при завершении этого процесса можно сохранить введенную информацию, выполнив команду File/Save (Файл/Сохранить) или File/Save As Case (Файл/Сохранить как вариант).

6. Задание параметров потоков питания и разрываемых потоков. Следующим этапом является задание параметров потоков питания и разрываемых потоков. Термодинамическое состояние потока определяется любыми двумя параметрами из трех следующих: температуры, давления и долей пара; обычно задаются температура и давление. При задании всех трех параметров ChemCad выводит сообщение об избыточном определении потока. Для каждого потока питания нужно задать расход по всем веществам, включенным в список компонентов, либо задаться суммарным расходом компонентов и их концентрациями.

Если в схеме присутствуют рецикловые (разрываемые) потоки, то для расчета схемы используется итерационный процесс. В этом случае задание начальных приближений параметров разрываемых потоков не обязательно, программа принимает в их качестве нулевые значения. Однако удачный подбор отличных от нуля начальных приближений может ускорить сходимость.

Задание параметров потока можно выполнить следующими способами: дважды щелкнуть левой клавишей мыши на интересующем потоке; использовать команду контекстного меню Edit Unit Op Streams (Редактирование потоков единицы оборудования) для задания параметров потоков выбранной единицы оборудования; с помощью команд меню Specifications (Спецификации). Задание параметров потоков выполняется в режиме Mode: Simulation. Рассмотрим команды меню Specifications.

Команда **Select Streams** (**Выбор потоков**) позволяет выбирать интересующие потоки технологической схемы. После выполнения команды на экран выводится окно **Select Streams** для ввода ID номера потока. Этот номер можно либо непосредственно ввести в поле, либо щелкнуть левой клавишей мыши на нужном потоке, и его номер появится в поле окна. После нажатия кнопки **ОК** на экран выводится окно **Edit Streams** (**Редактиро**-

вания потоков). Ввод данных по составу и параметрам состояния потока выполняется в соответствующие поля и завершается каждый раз нажатием клавиши [ENTER]. Данные можно редактировать и удалять. Кнопка Flash (Испарение) используется для расчета испарения параметров состава, температуры и давления. Кнопка Comp List (Список компонентов) выводит на экран текущий список компонентов. Окно Edit Streams может охватывать все выбранные на технологической схеме потоки. После определения всех параметров потока нажимается кнопка ОК.

Все последующие команды меню **Specifications**, относящиеся к заданию параметров потоков, выполняются аналогично команде **Select Streams** и позволяют:

- Feed Streams (Потоки питания) автоматически выбрать все потоки питания технологической схемы;
- Cut Streams (Разрываемые потоки) редактировать разрываемые потоки технологической схемы;
- Copy Stream (Копирование потока) копировать все данные, относящиеся к одному потоку, в другой поток. Для этого надо в окне Copy Stream (Копируемый поток) в полях Copy Stream to (Копировать поток в) ввести, соответственно, номера исходного потока и потока, в который будут копироваться данные;
- Select Cut Streams (Выбрать разрываемые потоки) переопределить разрываемые потоки технологической схемы;
- Reset Cut Streams (Восстановить исходные разрываемые потоки) восстановить исходные номера и состояние разрываемых потоков.
- 7. Ввод параметров оборудования. По аналогии с заданием параметров потока, для ввода параметров оборудования также используются: двойной щелчок левой клавишей мыши на единице оборудования, команда контекстного меню Edit Unit Op Data (Редактирование параметров единицы оборудования) и соответствующие команды меню Specifications (Спецификации). Задание параметров оборудования выполняется в режиме Mode: Simulation.

Команда Specifications/Select UnitOps (Спецификации/Выбор оборудования) позволяет выбрать отдельные единицы оборудования. Их выбор выполняется аналогично выбору потоков.

Команда Specifications/All UnitOps (Спецификации/Все оборудование) позволяет автоматически выбрать все оборудование технологической схемы. Окна для ввода параметров появляются на экране последовательно, в соответствии с ID номерами оборудования.

Вид окна ввода параметров определяется типом оборудования и используемыми параметрами оборудования, которые заложены в его модулях расчета. Окно может содержать один и более разделов. Ниже рассматриваются окна ввода параметров для ряда основных аппаратов, используемых в химико-технологических процессах.

7.1. Теплообменник. В ChemCad'е представлены модули расчета теплообменников Heat exchanger (HTXR) с одним или двумя входными потоками. При одном входном потоке модуль служит как нагреватель или как охладитель. Если у теплообменника два входных потока, то доступны более сложные режимы. Рассмотрим ввод параметров для двустороннего теплообменника.

Окно ввода параметров содержит три раздела.

В разделе **Specifications (Спецификации)** представлены основные данные, такие, как перепады давления, температуры потоков и т.д.

Значения Pressure Drops: (defaults=0) (Перепад давления (по умолчанию=0)) вводятся в поля Stream ID (Поток ID). Это положительная величина или 0.

Calculation Modes: (Режимы расчета:) позволяют выбрать варианты расчета. В списке Backcalc Mode (for Autocalc): (Режим обратного счета (для автоматического расчета)) содержатся варианты для обратного счета. Он используется только для режима автоматического расчета. По умолчанию установлено 0 No back calculation (0 Не включен). Последующие четыре варианта позволяют пересчитать температуру и расход вхолных потоков.

Список **Utility Option:** (Вспом. опций) используется только для двусторонних теплообменников и позволяет так определить параметры второго выходного потока, чтобы он соответствовал требуемой (рассчитанной) тепловой нагрузке аппарата. По умолчанию установлено **0 Utility Option Off (0 Вспом. опция выключена).** При выборе другого варианта необходимо задать либо выходную температуру, либо долю пара в каждом выходном потоке.

В соответствующие поля Enter one specification only (Введите только один параметр) вводятся значения следующих параметров:

- **Temperature Stream ID (Температура потока ID)** температура первого (второго) выходного потока. Рядом выводится ID номер потока;
- Vapor fraction stream ID (Доля пара потока ID) доля пара первого (второго) выходного потока. Значение должно быть между 0.00001 и 1. Если задано значение 0.00001, то рассчитывается температура кипения первого (второго) выходного потока. Этот параметр должен быть использован для систем с одним компонентом и систем с полной/частичной конденсацией или испарением;
- **Subcooling stream ID** (**Недогрев потока ID**) температура недогрева первого (второго) выходного потока. Задается температура ниже точки кипения;
- Superheat stream ID (Перегрев потока ID) температура перегрева первого (второго) выходного потока. Задается температура выше точки росы, положительное число.

Соответствующие поля Delta temperature specifications: (Значения допустимых температурных погрешностей:) используются для задания:

- Min delta temperature (Минимальная температурная погрешность) минимальной допустимой температурной погрешности;
- Hot outlet-cold inlet и Hot inlet-cold outlet (Горячий выходной холодный входной и Горячий входной холодный выходной) разности между температурами горячего выходного и холодного входного потока и температурами горячего входного и холодного выходного потока. Заполняются только для теплообменника с двумя входными потоками;
- **Stream ID-stream ID (Поток ID поток ID)** разности температур между двумя выходными потоками двухстороннего теплообменника. Задается для прямоточного теплообменника:
- **Stream ID-stream ID (Поток ID поток ID)** разности температур между входным и выходным потоками;
- **Heat Duty** (**Тепловая нагрузка**) тепловой нагрузки. Задается для теплообменника с одним или двумя входными потоками. Для теплообменника с двумя входными потоками это всегда положительное число.

Heat Transfer Coeff. and Area specification: (Значения коэффициента теплопередачи и поверхности теплообмена:) используются для задания значений:

- Heat Transfer Coeff. (U) (Коэффициент теплопередачи (U)) коэффициента теплопередачи;
- Area/shell (Пов/кожух) площади поверхности теплообмена.

Раздел **Misc. Settings (Необязательные параметры (установки)**) используется для задания информации по кожухам, трубам, трубному пространству и другим параметрам. Здесь же выводятся рассчитанные значения: тепловой нагрузки теплообменника, среднелогарифмической разности температур, поправочного коэффициента и др. В разделе **Cost. Estimations (Стоим. оценки)** приводятся значения рассчитанных стоимостных оценок.

7.2. Реакторы. ChemCad предоставляет средства для решения большого количества задач, связанных с реакторами, начиная с простых стехиометрических реакций и кончая множественными кинетическими реакциями.

Модуль Stoichiometric reactor (REAC) моделирует стехиометрический реактор при наличии набора стехиометрических коэффициентов, ключевых компонентов и степеней превращения. Реактор может быть адиабатическим, изотермическим или с подводом/отводом тепла.

Окно модуля содержит два раздела. В разделе **General Specifications (Общие спецификации)** представлены опции для задания общих технических условий.

В области **Specify Thermal Mode: (Специальный тепловой режим:)** выбирается тепловой режим работы реактора:

Adiabatic (Адиабатический) – адиабатический;

Isothermal (Изотермический) – изотермический;

Heat Duty (Тепловая нагрузка) – с заданной тепловой нагрузкой.

В списке **Key component (Ключевой компонент)** определяется позиция ключевого компонента. Предполагается, что ключевой компонент является реагентом. Это обязательный для ввода параметр.

В следующих полях задаются значения:

- Frac. Conversion (Степень превращения) степени превращения ключевого компонента (значение от 0 до 1). Это обязательный для ввода параметр.
- Heat of Reaction (Теплота реакции) теплоты реакции. Она задается при стандартных условиях, т.е. при 25 °C. Эта величина положительна для эндотермических реакций и отрицательна для экзотермических. Параметр не обязателен для ввода, если теплота реакции не задана, то программа оценит ее по данным о теплоте образования каждого компонента из базы данных.
- **Reactor Pressure** (Давление в реакторе) давления в реакторе. Если задан 0, то давление в реакторе будет равно давлению входного потока.
 - Calc H of Reac. (Расч. значение теплоты реакции).
- В **Stochiometric Coefficients:** (Стехиометрические коэффициенты:) задается последовательный набор стехиометрических коэффициентов: отрицательных для реагентов, положительных для продуктов и нулевых для веществ, не участвующих в реакции. При необходимости задание стехиометрических коэффициентов можно продолжить, выбрав раздел **More Components** (Другие компоненты).

У модуля REAC может быть один вход и до трех выходов. Если есть несколько выходов, то первый содержит пар (если таковой присутствует), а второй и третий содержат жидкости (если таковые присутствуют).

Модуль Equilibrium reactor (EREA) используется для расчета равновесных реакторов. Он может работать с двухфазными системами, но реакция будет происходить только в одной фазе, которая задается пользователем.

Окно модуля имеет два раздела. Paздел General Specifications (Общие спецификации) содержит параметры общего назначения.

В поле **Number of reactions (Число реакций)** задается число реакций. Можно одновременно задать до 20 реакций.

В Pressure drop (Перепад давления) задается перепад давления в реакторе.

Область **Reactor Model (Модель реактора)** содержит опции для определения модели реактора и фазы реакции.

Модель реактора выбирается в списке Specify reactor type: (Типы моделей реактора:):

- General equilibrium reactor (Общий равновесный реактор);
- Shift reactor (Конвертор CO);
- Methanation reactor (Метанатор).

EREA может использоваться для моделирования любого набора реакций. Для общего равновесного реактора данные по равновесию и стехиометрии задаются в меню данных реакций. Для реакции конверсии СО и для реакционной системы получения метана в ChemCad'е имеются требуемые равновесные данные.

Предполагается, что реакция происходит в одной фазе, которая задается пользователем:

- Liquid only (Только жидкая) фаза жидкая (по умолчанию);
- Vapor only (Только пар) фаза паровая;
- Liquid reaction, Mixed phase (Жидкая реакция, смешанная фаза) реакция протекает в жидкой фазе, смешанная фаза;
- Vapor reaction, Mixed phase (Паровая реакция, смешанная фаза) реакция протекает в паровой фазе, смешанная фаза.

Любой равновесный реактор может быть адиабатическим, адиабатическим с заданной тепловой нагрузкой или изотермическим. Выбор теплового режима реактора выполняется в области **Thermal mode:** (**Тепловой режим:**):

- Adiabatic (no heat exchange) (Адиабатический (без изменения тепла)) для этого режима выходная температура (температура реакции) будет рассчитана, а тепловая нагрузка принимается равной 0.
- Isothermal (specify temp) (Изотермический (с заданной темпер.)) для этого режима температура реакции равна температуре реактора. Рассчитывается тепловая нагрузка, требуемая для поддержания заданной температуры.

Specify heat duty (Заданная тепловая нагрузка) — это адиабатический режим с заданной тепловой нагрузкой. Выходная температура (температура реакции) рассчитывается при заданной тепловой нагрузке. Задание режимов расчета выполняется в области **Specify calculation mode: (Задание режима расчета:)**:

- Reaction conversion (Конверсия реакции) при задании конверсии реакции расчет равновесия не обязателен, а тепловые и материальные балансы определяются точно из стехиометрии, теплоты реакции и заданной конверсии. Для конвертора СО и метанатора не задается.
- Approach delta T (Температурное приближение) задается температурное приближение в поле Temperature delta в зависимости от выбранного режима.
- Approach Fraction (Степень приближения) степень приближения к равновесию используется вместе с равновесной конверсией. Степени приближения к равновесию задаются в экранах реакций, которые выводятся на экран после определения числа редактируемых реакций. Окна содержат опции для задания Base component (Базовый компонент), константы Appeниуса, Heat of reaction (Теплота реакции), Approach delta Т (Приближенное дельта Т), Frac. approach (Степень приближения к равновесию) и Frac. conversion (Степень превращения базового компонента). Далее задаются стехиометрические коэффициенты и степенные факторы для каждого из компонентов реакции.

Раздел More Specifications (Другие спецификации) содержит дополнительные данные для ввода:

- Number of iterations (Число итераций) задается допустимое число итераций для обеспечения сходимости уравнений. По умолчанию равно 30.
 - Tolerance (Погрешность) задается погрешность для расчета равновесия.
- Edit reaction number (Редактирование номера реакции) указывается, какие реакции должны быть исправлены:
 - 0 все реакции;
 - −1 ни одной реакции;
 - N реакция с номером N.

Для выбора единиц измерения используются соответствующие списки области Reaction Engineering Units (Единицы измерения параметров реакции): Temperature Units: (Единицы температуры:); Pressure Units: (Единицы давления:); Heat of Reaction Units: (Единицы теплоты реакции:); Molar Flow Units: (Мольные единицы расхода:).

В области **Convergence Method (Метод сходимости)** выбирается метод сходимости. По умолчанию установлен метод, рассматривающий потоки компонентов как независимые переменные и, таким образом, отвечающий за обратимость реакции при указании приближенной доли. Другая опция позволяет применять метод, использующий превращение компонентов потоков питания в качестве самостоятельных переменных и, таким образом, не отвечающий за обратимость при указании приближенной доли.

В поле Temperature reference for heat of reaction: (Контрольная температура теплоты реакции:) задается значение контрольной температуры реакции.

В поле Calculated overall heat of reaction Rxn (Рассчитанная общая теплота реакции) выводится рассчитанное значение общей теплоты реакции.

У модуля EREA один вход и может быть до трех выходов. Если есть два или три выходных потока, то первый выходной поток – пар (если есть), а второй и третий выходной поток – жидкость (если есть).

Модуль Kinetic Reactor (KREA) служит для поверочного и проектного расчетов кинетических реакторов идеального вытеснения PFR (РИВ) и реакторов идеального смешения CSTR (РИС). Каждый из реакторов (РИВ

или РИС) может быть жидкофазным или газофазным. Допускаются также двухфазные реакторы, но реакция может иметь место только в одной фазе.

Окно модуля имеет два раздела. Раздел **General Specifications (Общие спецификации)** содержит параметры, которые используются как для реактора РИВ, так и для реактора РИС.

В поле **Number of reactions (Количество реакций)** вводится число реакций. Допускается до 20 одновременных реакций.

В поле **Reactor pressure** (Давление в реакторе) задается давление на входе в реактор. Если оно не задано, то используется давление во входном потоке.

В **Pressure Drop** (**Перепад давления**) определяется давление, при котором протекает химическая реакция в реакторе. Для РИС эта величина равна нулю. Для РИВ профиль давления равномерно распределяется между входом и выходом по числу шагов интегрирования.

В области **Reactor Model (Модель реактора)** определяется тип реактора и фаза протекания реакции.

Тип реактора выбирается в списке Specify reactor type: (Определение типа реактора:):

- Cont Stir Tank Reac. (CSTR) реактор идеального смешения (РИС);
- Plug Flow Reactor (PFR) реактор идеального вытеснения (РИВ).

Следующие опции позволяют задать фазу протекания реакции:

- Liquid (Только жидкость) (по умолчанию);
- Vapor only (Только пар);
- Liquid reaction, Mixed phase реакция протекает в жидкой фазе, смешанная фаза;
- Vapor reaction, Mixed phase реакция протекает в паровой фазе, смешанная фаза.

В области **Thermal mode: (Тепловой режим:)** выбирается тепловой режим (вариант расчета):

- Isothermal (specify temp) (Изотермический (определить температуру)). Для него рассчитывается тепловая нагрузка. В этом случае в поле напротив необходимо ввести значение температуры. В противном случае используется температура входного потока.
- Adiabatic (no heat exchange) (Адиабатический (без изменения тепла)). Для этого режима рассчитывается температура для РИС и температурный профиль для РИВ.
- Specify heat duty (Заданная тепловая нагрузка). Для этого режима в случае РИС с заданной тепловой нагрузкой итерационно определяется температура. В поле напротив задается количество тепла, добавляемое или отнимаемое от реакции. Используются глобальные единицы измерения. В случае РИВ тепловая нагрузка равномерно распределяется на каждом шаге интегрирования и затем используется для расчета температурного профиля.
- Spec PFR temp. profile (later) (Заданный температурный профиль для PИВ). Этот режим используется только в случае РИВ. Задаются значения температур на каждом шаге интегрирования и для них вычисляются соответствующие тепловые нагрузки. Затем они суммируются и определяется общая тепловая нагрузка.
- Specify PFR utility U (Заданное условие вспомогательного потока для PИВ). В этом режиме тепловая нагрузка на каждом шаге интегрирования вычисляется индивидуально с использованием общего коэффициента теплопередачи. В поле напротив вводится значение коэффициента теплопередачи. Это значение необходимо только для РИВ.

В области Specify calculation mode (Определение режима расчета) выбирается режим расчета:

- Specify Volume, Calculate conversion (Задан объем, рассчитать степень превращения).
- Specify conversion, Calculate volume (Задана степень превращения, рассчитать объем).

Если выбран режим расчета Specify Volume, Calculate conversion, то в поле Reactor Volume (Объем реактора) для РИС задается объем. Для РИВ вводится либо объем, либо объем как произведение длины, диаметра труб и числа труб. В режиме Specify PFR utility U объем задается только в виде произведения. При режиме Specify Volume; Calculate conversion объем реактора используется для вычисления степени превращения реагентов, а также выходных составов и условий.

Если выбран режим расчета **Specify conversion. Calculate volume**, то объем используется в РИВ для определения размера реактора.

В списке **Key Component (Ключевой компонент**) выбирается номер ключевого компонента, относительно которого определяется объем реактора. Расчет связан со степенью превращения одного (ключевого) компонента независимо от числа реакций.

Если выбран режим расчета **Specify conversion, Calculate volume,** то в поле **Conversion (Степень превращения)** задается степень превращения ключевого компонента. При задании этого параметра определяется объем реактора. Для РИС объем определяется временем пребывания, для РИВ – пока не будет достигнута требуемая степень превращения ключевого компонента.

Раздел **More Specifications** (Другие условия) содержит геометрические параметры и численные параметры для выполнения счета. В этом разделе указывается номер редактируемой реакции.

Диалоговое меню **Reaction (Реакция)** позволяет пользователю задать стехиометрию и кинетику реакции. В диалоговом окне должна быть описана каждая реакция. Общее количество реакций задается при заполнении поля **Numeric reactions (Количество реакций)** из диалогового окна **General Specifications (Общие спецификации).**

Общая скорость реакции для одного компонента в моделируемой реакции задается следующим выражением:

$$r_{i} = \left(\sum_{j=1}^{nrx} N_{ij} A_{j} e^{-E_{j}/RT} \prod_{k=1}^{k_{j}} C_{k}^{\alpha_{kj}}\right) \left(1 + \sum_{k=1}^{n_{j}} \Phi_{kj} e^{-E_{kj}/RT} C_{kj}^{\beta_{kj}}\right)^{-\beta_{j}},$$

где r_i – скорость реакции по i-му компоненту, [моль/(объем время)]; i – обозначение i-го компонента; k – обозначение k-го реагента; j – обозначение j-ой реакции; N_{ij} – стехиометрический коэффициент i-го компонента в j-ой реакции; A_j – предэкспоненциальный множитель (Frequency factor) в j-ой реакции; E_j – энергия активации в j-ой реакции; E_j – универсальная газовая постоянная; E_j – абсолютная температура; E_j – концентрация E_j – компонента, [моль/м³]; E_j – порядок реакции (Exp. Reactor); E_j – количество реагентов; E_j – энергентический фактор (Adsorp Exp.) адсорбционный фактор (Adsorp Exp.).

Топология модуля KREA зависит от наличия вспомогательного потока. Если этот поток отсутствует (термические режимы 1–4), то у реактора может быть множество входов и три выхода, где 1 = пар, 2 = первая жидкость, 3 = вторая жидкость. Если задан вспомогательный поток (термический режим = 5), то у реактора может быть два входа и два выхода. Первые вход и выход содержат потоки процесса, а вторые вход и выход – вспомогательные потоки.

8. Запуск программы моделирования. Для проведения моделирования технологической схемы используются команды меню Run (Счет). С помощью этих команд можно задавать последовательность расчета и выполнять контроль над ходом расчета.

Рассмотрим варианты моделирования технологической схемы:

- Run All (Счет всего) рассчитывает все оборудование технологической схемы. При этом программа в первую очередь проверяет все данные перед началом расчетов. В процессе проверки она может выдавать как предупреждения, так и сообщения об ошибках. Расчет не будет выполняться до тех пор, пока не будут устранены причины этих ошибок. Последовательность расчета модулей оборудования определяется программой автоматически.
- Run Selected Units (Счет выбранного оборудования) выполняет расчет одной или более единиц выбранного оборудования. Процесс выбора тот же, что и при работе с командой UnitOps (Оборудование). Команда может использоваться для задания последовательности расчета.
- Recycles (Рециклы) позволяет идентифицировать порядок расчета рециклов технологической схемы и рассчитать их.
- Calculation sequence (Последовательность расчета) позволяет задать свою последовательность расчета.

После выполнения команды на экран выводится окно **ChemCad Message box** с сообщением о результатах расчета. Для продолжения расчета надо нажать кнопку **Yes** (Да), в противном случае **No** (**Het**).

8.1. Интерактивный просмотр результатов. Просмотр полученных результатов используется как на промежуточных этапах моделирования технологической схемы, так и по его завершению. При просмотре в любой момент все данные для моделирования и его результаты можно распечатать или записать в файл.

Для просмотра используются команды меню Results (Результаты) и Plot (Граф.), доступные в режиме Mode: Simulation.

8.2. Просмотр с помощью меню Results (Результаты). Команды меню Results (Результаты) используются при просмотре на экране всех данных для моделирования и результатов моделирования в табличной форме. Результаты просмотра выводятся в окне редактора WordPad.

Перед просмотром с помощью команды **Results/Set Flow Units (Результаты/Размерности расхода),** при необходимости, можно выбрать новые глобальные размерности расхода.

Команда Results/Stream Compositions (Результаты/Составы потоков) выводит на экран подменю с различными командами для просмотра составов потоков технологической схемы:

- Select Streams (Выбор потоков) позволяет задать один или более потоков для просмотра на экране. Выбор потоков выполняется аналогично выбору, описанному ранее для команды Select Streams (Выбор потоков);
 - All Streams (Все потоки) выводит на экран составы всех потоков технологической схемы;
- Feed Streams (Потоки питания) позволяет просмотреть составы только потоков питания технологической схемы:
 - Product Streams (Потоки продуктов) выбирает для просмотра только продуктовые потоки;
- Unit Streams (Потоки единицы оборудования) выводит на экран только те потоки, которые связаны с выбранной единицей оборудования.

Команда Results/Stream Properties (Просмотр/Свойства потоков) выводит на экран подменю с различными командами для просмотра свойств потоков.

Команда **Select Properties (Выбрать свойства)** позволяет выбрать нужные свойства потоков, которые будут выводиться при просмотре.

Выбор потоков выполняется аналогично выбору, описанному для команды Stream Compositions (Составы потоков).

С помощью следующих команд меню **Results** можно:

- UnitOp's (Оборудование) просмотреть исходные данные и рассчитанные величины для одной или более выбранных единиц оборудования;
 - Topology (Топология) вывести на экран матрицу процесса;
- Thermodynamics (Термодинамика) вывести на экран установленные для текущего задания термодинамические опции;
- Tower Profiles (Профили по колонне) просмотреть профиль ректификации для выбранной колонны: число ступеней, температуру, давление, расходы жидкости и пара, расход питания, выход продукта, тепловую нагрузку кипятильника и конденсатора, расход, нагрузку циркуляционного насоса;
- Tray Compositions (Составы на тарелках) вывести на экран значения температуры, давления, состава жидкости и пара, константы равновесия для каждой ступени выбранной ректификационной колонны;
- **Tray Properties (Свойства на тарелках)** выполнить просмотр транспортных свойств жидкости и пара для указанных ступеней выбранной ректификационной колонны;
- **Distillation Curves (Кривые дистилляции)** выбрать один или более потоков для просмотра полного набора кривых дистилляции в табличной форме;
 - Convergence (Сходимость) вывести на экран все установленные параметры сходимости.

Результаты просмотра можно сохранить в файле формата doc, выполнив команду Файл/Сохранить.

- 9. Просмотр с помощью меню Plot (Граф.) Для графического изображения результатов моделирования используются команды меню Plot (Граф.). С помощью этих команд можно вычертить профили по колоннам, изменения свойств потоков и диаграммы парожидкостного равновесия.
- 10. Составление от отчета. СhemCad позволяет создавать отчет о результатах моделирования в виде таблиц. Их можно вывести на экран, сохранить в текстовом файле со стандартной кодировкой символов (ASCII), в файле типа (PRN) или послать отчет на устройство печати. Программа имеет стандартный формат вывода отчета, однако при необходимости его можно изменить. Можно указать, какие части отчета, а также какие потоки и свойства будут включены в отчет. Имеются опции для задания формата выводимых чисел.

Отчет можно получить в табличной (текстовой) форме и в виде диаграммы технологического процесса.

Моделирование реактора. В качестве примера рассмотрим моделирование статики процесса разложения этилена в трубчатом реакторе для получения ацетилена [9], [10].

Процесс протекает по следующей схеме: этилен разлагается на ацетилен и водород по реакции

$$C_2H_4 \xrightarrow{k_1} C_2H_2 + H_2;$$

в свою очередь ацетилен разлагается на углерод и водород:

$$C_2H_2 \xrightarrow{k_2} 2C + H_2;$$

здесь k_1, k_2 – константы скоростей реакций.

Примем следующие допущения:

- в связи с тем, что длина реактора значительно (более чем в 100 раз) превышает его диаметр, будем использовать гидродинамическую модель «Идеальное вытеснение»;
 - температура *T* в реакторе поддерживается постоянной по длине трубы и во времени.

Исходные данные и константы, необходимые для расчета: E_1 = 65 000; E_2 = 87 000; A_1 = 2·10¹¹; A_2 = 8·10¹²; D = 0,1 м; давление в реакторе P = 100 000 Па; T = 1200 К; $m_{\rm BX}$ = 1800 кг/ч; точность расчетов ε = 0,001.

Порядок выполнения работы

- 1. Загрузить пакет прикладных программ ChemCAD.
- 2. Создать новый файл технологической схемы.
- 3. Выбрать технические размерности. В качестве профиля единиц измерения задать СИ. Указать в окне **Mass (Macca)** размерность «кг».
- 4. Выбрать компоненты, участвующие в процессе. Из базы данных выбираются: Ethylene этилен; Acetylene ацетилен; Carbon углерод; Hydrogen водород.
- 5. Построить технологическую схему. Выбрать из палитры **Kinetic reactor**, щелкнуть правой кнопкой мыши, и выбрать из подпалитры **Kinetic reactor #2**, т.е. реактор «идеальное вытеснение». Расположить выбранный реактор на поле технологической схемы. Добавить входной и выходной потоки.

- 6. Задать параметры входного потока. Общий расход на входе (**Total flow**) в данном случае будет совпадать с расходом этилена и равняться 1800 кг/ч (см. исходные данные).
 - 7. Задать параметры реактора.

Уравнение скорости реакции (Kinetic rate expression) задать стандартное (Standart).

Тип реактора (**Specify reactor type**) задать «идеальное вытеснение» (**PFR – Plug Flow**). Поскольку на вход в реактор подается газовая фаза, а в ходе реакций образуются частицы твердой фазы (углерод), то фазовый состав следует указать: основная газовая фаза, смесь фаз (**Vapor reaction, Mixed phase**).

Согласно допущению 2, температурный режим выбирается изотермический (Isothermal).

Длину трубы (**Length of tube**) указать равную 10 м.

При редактировании обеих реакций предэкспоненциальный множитель (**Frequency factor**) и энергию активации (**Activation energy**) взять из исходных данных. При редактировании первой реакции задать стехиометрические коэффициенты (**Stoichiometric coefficient**): для этилена = -1; для ацетилена = 1; для водорода = 1. При редактировании второй реакции задать стехиометрические коэффициенты: для ацетилена = -1; для водорода = 1; для углерода = 2.

Остальные параметры (температуру и давление в реакторе, диаметр трубы, точность вычислений и т.д.) взять из исходных данных.

- 8. Запустить программу моделирования.
- 9. Просмотреть результаты моделирования на экране.
- 10. Многократно повторить расчет, задавая длину трубы от 10 до 200 м с шагом 10 м.
- 11. Построить графики изменения расхода этилена и ацетилена по длине реактора.

Содержание отчета

Таблицы и графики изменения расхода этилена и ацетилена по длине реактора.

Контрольные вопросы

1. Какова последовательность действий пользователя при работе с пакетом прикладных программ Chem-CAD?

2.1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Математическая постановка задачи оптимизации включает в себя целевую функцию $f_0(X)$, $X = (x_1, x_2, ..., x_n)$, представляющую собой количественную оценку качества решения, и допустимое множество X^d , представляющее собой множество допустимых вариантов решения. Решением задачи оптимизации является такой вектор $X \in X^d$, который минимизирует или максимизирует целевую функцию $f_0(X)$. Очевидно, что всякую задачу максимизации $f_0(X)$ можно заменить задачей минимизации функции $-f_0(X)$, поэтому в дальнейшем будем рассматривать оптимизационные задачи вида

$$f_0(X) \to \min$$
 при $X \in X^d$. (2.1)

Если допустимое множество X^d лежит в евклидовом пространстве R^n , то задачи вида (2.1) называют конечномерными оптимизационными задачами, а теорию и методы решения конечномерных задач - математическим программированием.

Классификацию задач оптимизации можно проводить по нескольким признакам в зависимости от вида функции $f_0(X)$ и допустимого множества X^d .

2.2. ЗАДАЧИ БЕЗУСЛОВНОЙ И УСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Если множество X^d совпадает с R^n , то имеет место задача безусловной оптимизации. В задачах условной оптимизации множество X^d определяется, как правило, системой линейных и нелинейных ограничений (равенств и неравенств). В этом случае имеет место наиболее общий случай конечномерной оптимизационной задачи, называемой общей задачей математического программирования:

> $f_0(X) \rightarrow \min;$ (2.2)

при условиях

$$f_i(X) \ge 0, i = 1, ..., p;$$

 $f_i(X) = 0, i = p + 1, ..., m.$

В частных случаях задача (2.2) может не содержать ограничений-равенств или ограничений-неравенств.

Геометрическую интерпретацию задач оптимизации и методов нахождения их решений удобно проводить на примере двумерных задач с отображением целевой функции в виде линий равного уровня (равных $\nabla f_0(X)$

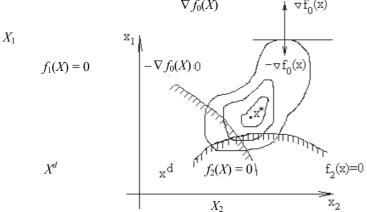


Рис. 2.1. Геометрическая интерпретация задачи условной оптимизации

значений), а множества X^d – в виде соответствующей области на координатной плоскости (рис. 2.1). Пересечение частей плоскости, определяемых неравенствами $f_i(X) \ge 0$ (заштрихованные части) определяет допустимое множество X^d . Векторы $\nabla f_0(X)$ и $-\nabla f_0(X)$ — соответственно градиент и антиградиент функции $f_0(X)$ в некоторой точке X, показывающие направления наискорейшего возрастания и убывания функции в этой точке.

В зависимости от вида функций $f_0(X)$ и $f_i(X)$ выделяют частные случаи задачи (2.2). Если $f_0(X)$ и $f_i(X)$ – линейные функции, то имеет место задача линейного программирования. Если хотя бы одна из функций $f_0(X)$ или f(X) нелинейна, то задача (2.2) есть задача нелинейного программирования. В том случае, если допустимое множество X^d конечно или счетно и не имеет предельных точек, то имеет место задача дискретного программирования. Частным случаем последней является задача целочисленного программирования, когда все допустимые точки имеют целочисленные координаты.

Приведенная классификация конечномерных задач оптимизации является наиболее общей. Более подробную информацию по этому вопросу можно получить, например, из [13].

Для каждого типа конечномерных оптимизационных задач существуют свои численные методы их решения. Разработанный комплекс лабораторных работ в рамках учебной дисциплины «Оптимизация» предназначен для практического изучения наиболее распространенных методов решения одномерных и многомерных задач безусловной и условной оптимизации.

Лабораторная работа 2.1

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ОДНОМЕРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ МЕТОДАМИ ПОЛОВИННОГО ДЕЛЕНИЯ, «ЗОЛОТОГО» СЕЧЕНИЯ И ФИБОНАЧЧИ

Цель: приобретение навыков по применению методов половинного деления, «золотого» сечения и Фибоначчи для нахождения минимума функции одной переменной.

Задание: произвести численное решение задачи минимизации предлагаемых функций методами половинного деления, «золотого» сечения и Фибоначчи.

общие положения

Пусть требуется найти минимум целевой функции $f_0(x)$ на отрезке $[a_0, b_0]$. Для функции $f_0(x)$ известно лишь, что она непрерывна на отрезке $[a_0, b_0]$, имеет на нем один локальный минимум и необязательно дифференцируема во всех точках отрезка. Примеры функций показаны на рис. 2.2.

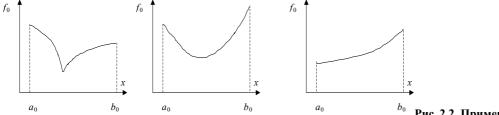


Рис. 2.2. Примеры целевых функций

Ввиду того, что в практических задачах часто неизвестно, является ли целевая функция $f_0(x)$ дифференцируемой на исследуемом отрезке, существенное значение среди методов одномерной минимизации имеют методы, не требующие вычисления производных. Наиболее распространенными среди них являются методы половинного деления, «золотого» сечения и Фибоначчи. Основная идея этих методов состоит в построении последовательности отрезков $[a_k, b_k]$, стягивающихся при $k \to \infty$ в к точке $x = \operatorname{argmin} f_0(x), x \in [a_0, b_0]$.

Метод половинного деления. На отрезке $[a_0, b_0]$ (рис. 2.3) выявляется точка x_0 , которая делит отрезок пополам. Затем вычисляются две точки x_1 , и x_2 такие, которые делят пополам отрезки $[a_0, x_0]$ $[x_0, b_0]$:

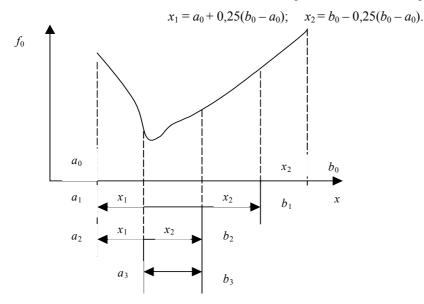


Рис. 2.3. Метод половинного деления

В точках x_1 и x_2 вычисляются значения функции $f_0(x)$, которые сравниваются между собой. В зависимости от результатов сравнения из дальнейшего рассмотрения исключается один из отрезков $[a_0, x_1]$ или $[x_2, b_0]$. Если

- 1) $f_0(x_1) < f_0(x_2)$, то исключается отрезок $[x_2, b_0]$;
- 2) $f_0(x_1) > f_0(x_2)$, то исключается отрезок [a_0, x_1];
- 3) $f_0(x_1) = f_0(x_2)$, то исключается любой из отрезков.

Таким образом, на каждой последующей итерации длина отрезка локализации минимума уменьшается на 25 % по сравнению с длиной отрезка на предыдущей итерации. Критерием окончания поиска в методе половинного деления является выполнение условия $b_k - a_k \le \varepsilon$, где ε – точность вычисления минимума.

Оценка числа итераций N, необходимых для нахождения минимума функции $f_0(x)$ на отрезке $[a_0, b_0]$ с точностью ε , может быть получена из следующих соображений. После выполнения 1-й итерации отрезок локализации минимума будет иметь длину, равную $0.75(b_0 - a_0)$. После выполнения 2-й итерации $-0.75(0.75(b_0 - a_0)) = 0.75^2(b_0 - a_0)$, после выполнения N-й итерации $-0.75^N(b_0 - a_0)$.

Поиск заканчивается тогда, когда выполняется условие

$$0.75^{N}(b_{0}-a_{0}) \leq \varepsilon.$$
 Отсюда $0.75^{N} \leq \frac{\varepsilon}{b-a}$, или $N \ln 0.75 \geq \ln \frac{\varepsilon}{b-a}$, или $N \geq \left[-\frac{\ln \frac{b-a}{\varepsilon}}{\ln 0.75} \right]$.

Здесь [] означает округление до ближайшего большего целого. При этом оценка числа вычислений значений функции составляет 2N.

Метод «золотого» сечения. Лучшие результаты могут быть получены, если деление отрезка $[a_0, b_0]$, на котором отыскивается минимум, производить в определенном иррациональном отношении (рис. 2.4). Определим отношение длины отрезков $[a_0, x_1]$ и $[x_2, b_0]$ к длине отрезка $[a_0, b_0]$ из условия того, чтобы на всех итерациях отрезок локализации разбивался бы в одном и том же отношении, и при этом начиная со второй итерации на каждой итерации вычислялась бы только одна новая точка $(x_1$ или x_2), а вторая из них использовалась бы от предыдущей итерации. Очевидно, что эти условия будут выполнены тогда, когда справедливо следующее:

$$\dfrac{b_0-x_2}{b_0-a_0}=\dfrac{x_2-x_1}{x_2-a_0}$$
. Положим
$$s=b_0-a_0; \\ s_1=b_0-x_2=x_1-a_0; \quad s_2=x_2-x_1=s-2s_1$$
 Тогда
$$\dfrac{s_1}{s}=\dfrac{s-2s_1}{s-s_1}$$
.

Разделим числитель и знаменатель правой части последнего равенства на s:

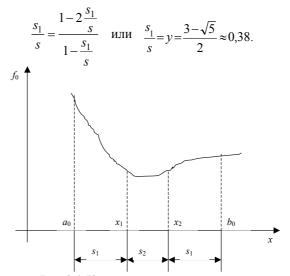


Рис. 2.4. К методу «золотого» сечения

Полученное значение носит название «золотого» сечения. При его использовании на очередной итерации минимум функции f_0 локализуется на отрезке, длина которого равна $1-y\approx 0,62$ от длины отрезка локализации на предыдущей итерации. Таким образом, за одну итерацию отрезок локализации минимума уменьшается приблизительно на 38 %.

Оценка числа итераций N, необходимых для нахождения минимума функции $f_0(x)$ на отрезке $[a_0, b_0]$ с точностью ε может быть получена аналогично рассмотренному выше подходу и составит

$$N \ge \left[-\frac{\ln \frac{b-a}{\varepsilon}}{\ln \frac{\sqrt{5-1}}{2}} \right]$$

При этом число вычислений значений функции составит N+1.

Метод Фибоначчи основан на использовании свойств последовательности чисел Фибоначчи. Последовательность чисел Фибоначчи задается рекуррентной формулой:

$$F_{k+1} = F_{k-1} + F_k, k = 1, 2, ..., F_0 = F_1 = 1.$$

Метод Фибоначчи предполагает разбиение на каждой итерации отрезка локализации минимума целевой функции в отношении двух последовательных чисел Фибоначчи. Предположим, что для нахождения минимума функции $f_0(x)$ на отрезке $[a_0, b_0]$ с точностью ε требуется выполнить N итераций. На первой итерации разобьем отрезок $[a_0, b_0]$ точкой x_1 на два отрезка $[a_0, x_1]$ и $[x_1, b_0]$ такие, что отношение их длин равно отношению чисел Фибоначчи F_{N-2} и F_{N-1} (рис. 2.5), т.е.

$$\frac{x_1 - a_0}{b_0 - x_1} = \frac{F_{N-2}}{F_{N-1}}.$$

Учитывая то, что $F_N = F_{N-1} + F_{N-2}$, получим

$$x_1 = b_0 - \frac{F_{N-1}}{F_N} (b_0 - a_0).$$

Точка x_2 выбирается симметрично x_1 относительно середины отрезка $[a_0, b_0]$, т.е.

$$x_2 = a_0 + F_{N-1}(b_0 - a_0)/F_N$$
.

Далее вычисляются значения $f_0(x_1)$, $f_0(x_2)$ и сравниваются между собой. Если $f_0(x_1) < f_0(x_2)$, то новым отрезком локализации $[a_1, b_1]$ становится отрезок $[a_0, x_2]$, в противном случае — отрезок $[x_1, b_0]$. Из рис. 2.5 видно, что после выполнения первой итерации $a_1 = a_0$, $b_1 = x_2$, $x_2 = x_1$. Необходимо вычислить точку x_1 , располагающуюся симметрично x_2 относительно середины отрезка $[a_1, b_1]$.

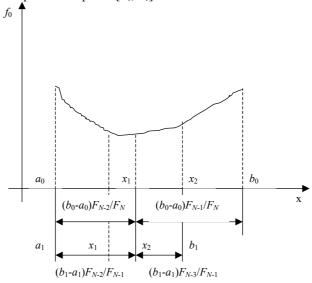


Рис. 2.5. Метод Фибоначчи

Очевидно, что $b_1 - x_1 = \frac{F_{N-2}}{F_N} (b_0 - a_0)$.

С другой стороны $b_1 - a_1 = \frac{F_{N-1}}{F_N} (b_0 - a_0)$.

Отсюда следует, что $x_1 = b_1 - \frac{F_{N-2}}{F_{N-1}} (b_1 - a_1)$.

Для произвольной k-й итерации, $k=1,\ldots,N$, точки x_1 или x_2 могут быть вычислены, соответственно, по формулам:

$$x_1 = b_{k-1} - \frac{F_{N-k}}{F_{N-k+1}} (b_{k-1} - a_{k-1}); \quad x_2 = a_{k-1} + \frac{F_{N-k}}{F_{N-k+1}} (b_{k-1} - a_{k-1}).$$

Определим теперь количество итераций N, необходимых для решения задачи минимизации функции $f_0(x)$ на отрезке $[a_0, b_0]$ с точностью ε .

Принимая за критерий окончания поиска выполнение условия

$$b_N - a_N \le \varepsilon$$
 или $\frac{1}{F_N} (b_0 - a_0) \le \varepsilon$,

получим число итераций N, определяемое из условия

$$F_{N-1} \le \frac{b_0 - a_0}{\varepsilon} \le F_N \ .$$

Количество вычислений значений функции составит N+1.

Порядок выполнения работы

- 1. Составить алгоритмы решения задачи минимизации функции одной переменной методами половинного деления, «золотого» сечения и Фибоначчи.
 - 2. Подготовить программы для вычислительной машины, реализующие алгоритмы из п. 1.

- 3. Найти решение задачи перечисленными методами с точностью $\varepsilon = 0,01$, используя в качестве $f_0(x)$ и отрезка $[a_0, b_0]$ данные из табл. 2.1. Результаты решения должны содержать последовательность a_k , b_k и значения x, полученные при решении задачи каждым из методов.
- 4. Построить на бумаге три графика целевой функции на отрезке $[a_0, b_0]$ и проиллюстрировать процесс нахождения решения задачи каждым из методов.

Таблица 2.1

N.C.				NC.			
№	f(V)	~	L	№	f(V)	~	4
вари- анта	$f_0(X)$	a_0	b_0	вари- анта	$f_0(X)$	a_0	b_0
	3 . 0 2 . 0 4 . 0		2		3 40 5 2 2 2 4 10	2.5	_
1	$-x^3 + 9x^2 - 24x - 2$	-5	3	26	$x^3 - 10.5x^2 + 36x + 10$	3,5	9
2	$x^3 + 1.5x^2 - 6x - 12$	-1,5	7	27	$-2x^3 - 6x^2 - 1$	-5	7
3	$-x^3 + 3x + 3$	- 5	0	28	$-2x^3 - 9x^2 + 10$	-8	-1
4	$x^3 + 10.5x^2 + 30x + 13$	-4,5	4	29	$x^3 + 4.5x^2 + 11$	-2,5	6
5	$2x^3 + 15x^2 + 24x - 5$	-3,5	5	30	$x^3 - 6x^2 + 9x - 13$	2	6
6	$x^3 - 3x + 2$	0	4	31	$2x^3 + 18x^2 + 48x + 11$	-3	6
7	$-x^3 - 10.5x^2 - 30x - 4$	-10	-4,5	32	$2x^3 - 6x^2 + 3$	1	4
8	$2x^3 - 6x + 3$	0	2,5	33	$-x^3 + 4.5x^2 + 1$	-6	6
9	$x^3 - 15x^2 + 63x + 12$	5	11	34	$-x^3 + 12x + 1$	-6	1,5
10	$x^3 - 12x - 5$	0	2,5	35	$x^3 - 4.5x^2 + 6x - 12$	1,5	0
11	$x^3 - 13.5x^2 + 54x - 15$	4,5	9	36	$x^3 - 9x^2 + 24x - 15$	3	8
12	$x^3 + 4.5x^2 + 6x - 11$	-2,5	3	37	$2x^3 - 12x^2 + 18x + 14$	2	7
13	$x^3 + 6x^2 + 9x - 4$	-2	4	38	$x^3 - 9x^2 + 15x + 9$	3	9
14	$-x^3 - 10.5x^2 - 36x + 6$	-9	-4,5	39	$x^3 - 1.5x^2 - 6x + 11$	0,5	12
15	$x^3 - 4.5x^2 + 7$	1,5	10	40	$2x^3 - 24x^2 + 72x + 7$	4	6
16	$x^3 - 12x^2 + 45x + 10$	4	10	41	$x^3 - 3x^2 + 11$	1	11
17	$-2x^3+6x^2+4$	-6	1	42	$x^3 + 9x^2 + 15x + 4$	-3	8
18	$x^3 + 9x^2 + 24x + 4$	-3	4	43	$-2x^3 + 12x^2 - 18x - 4$	-3	2
19	$x^3 + 3x^2 + 12$	-1	5	44	$2x^3 + 21x^2 + 60x - 6$	-4,5	2
20	$-x^3 - 12x^2 - 45x + 12$	-10	-4	45	$-x^3 - 7.5x^2 - 12x - 11$	-10	1
21	$x^3 + 1.5x^2 + 7$	-1,5	6	46	$2x^3 - 15x^2 + 24x + 7$	2,5	8
22	$x^3 - 12x^2 + 36x - 1$	4	10	47	$-x^3 + 1.5x^2 + 6x + 15$	-7	8
23	$x^3 + 6x^2 - 11$	-2	2	48	$x^3 + 10.5x^2 + 36x - 14$		0,5
24	$-x^3 - 7.5x^2 - 18x - 3$	- 7	-3,5	49	$-2x^3 + 6x - 11$	-3	0
25	$-x^3 + 12x^2 - 36x - 11$	-5	4	50	$x^3 - 7.5x^2 + 18x - 6$	2,5	9

Содержание отчета

- 1. Задание на выполнение лабораторной работы в соответствии с номером варианта из табл. 2.1.
- 2. Краткое описание методов половинного деления, «золотого» сечения и Фибоначчи.
- 3. Распечатки программ, реализующие перечисленные методы на ЭВМ, с описанием.
- 4. Результаты решения задачи.
- 5. Геометрическая иллюстрация процесса нахождения решения задачи.
- 6. Краткие выводы по работе, содержащие сравнительный анализ методов и результатов решения.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

- 1. Какие задачи автоматизированного проектирования приводят к необходимости использования оптимизационных методов одномерного поиска?
 - 2. Какими выражениями оценивается эффективность работы методов одномерного поиска?
- 3. Каковы преимущества рассмотренных поисковых алгоритмов перед классическими методами анализа экстремума функции одной переменной?

Литература: [12], [13].

Лабораторная работа 2.2

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ БЕЗУСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

МЕТОДАМИ ПОКООРДИНАТНОГО СПУСКА И СИМПЛЕКСНЫМ

Цель: приобретение навыков по использованию модифицированного метода покоординатного спуска и симплексного метода для минимизации функций многих переменных.

Задание: провести численное решение задач минимизации предлагаемых функций модифицированным методом покоординатного спуска и симплексным методом.

Обшие положения

Методами нулевого порядка называют методы поиска экстремума, использующие только значения целевой функции и не требующие вычисления производных. К числу наиболее эффективных методов этой группы относятся модифицированный метод покоординатного спуска Пауэлла и симплексный метод Нелдера-Мида.

Метод покоординатного спуска. Рассмотрим вначале метод покоординатного спуска Гаусса-Зейделя на примере функции двух переменных, линии равного уровня которой изображены на рис. 2.6. Из некоторой начальной точки $X^0 = (x_1^0, x_2^0)$ производится поиск минимума вдоль направления оси x_1 с получением точки X^0 . В этой точке касательная к линии равного уровня параллельна оси x_1 . Затем из точки x^0 производится поиск минимума вдоль направления оси x_2 с получением точки x^0 .

Следующие итерации выполняются аналогично. Для минимизации функции $f_0(X)$ вдоль осевых направлений может быть использован любой из методов одномерной минимизации. Для локализации отрезка, содержащего точку минимума в осевом направлении, может быть использована, например, следующая процедура. Обозначим через y_1 значение x_1^0 , а через y_2 – значение $x_1^0 + \delta_1$, где $\delta_1 > 0$. Вычислим значения $f_0(y_1, x_2^0)$; $f_0(y_2, x_2^0)$.

Пусть, например, $f_0(y_1, x_2^0) > f_0(y_2, x_2^0)$. Тогда следует вычислять значения $f_0(y_i, x_2^0)$, $y_i = y_{i-1} + \delta_{i-1}$, i = 3, 4, ... до тех пор, пока не будет найдена такая точка y_i , что $f_0(y_i, x_2^0) \ge f_0(y_{i-1}, x_2^0)$. В этом случае отрезком локализации минимума функции f_0 вдоль направления оси x_1 , проходящего через точку X^0 , будет являться отрезок $[y_{i-2}, y_i]$. При этом можно выбирать δ_i = const или $\delta_{i+1} = 2\delta_i$, i > 0. В том случае, если $f_0(y_1, x_2^0) \le f_0(y_2, x_2^0)$, то $y_1 = y_2$, $\delta_1 = -\delta_1$, $y_2 = y_1 + \delta_1$, и процедура локализации отрезка выполняется подобно описанной выше. В этом случае отрезком локализации будет являться отрезок $[y_i, y_{i-2}]$.

Аналогичным образом определяется отрезок локализации функции f_0 вдоль направления оси x_2 .

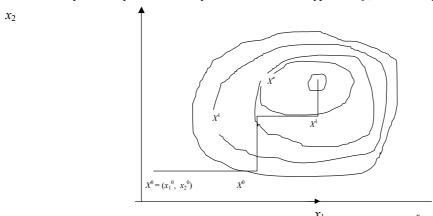


Рис. 2.6. Метод покоординатного спуска Гаусса-Зейделя

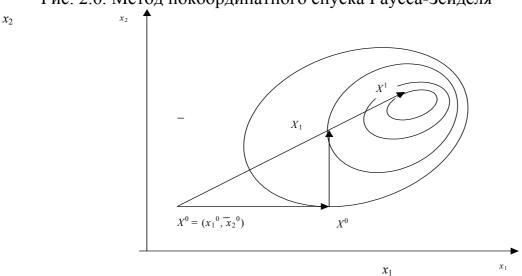


Рис. 2.7. Метод Пауэлла

Критерием окончания поиска является выполнение условия:

$$\|x^{k+1} - x^k\| \le \varepsilon$$
, где $\|x^{k+1} - x^k\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i^{k+1} - x_i^k)^2}$.

Для минимизации функций многих переменных М. Пауэлл предложил использовать следующую модификацию метода Гаусса-Зей-деля. После получения точки \overline{X}^0 локальным поиском вдоль координатных осей выполняется поиск вдоль направления, соединяющего точки X^0 и \overline{X}^0 (рис. 2.7) с получением точки X^1 , т.е. $X^1 = X^0 + h_0$ ($\overline{X}^0 - X^0$), где h_0 вычисляется из условия того, что точка X^1 является точкой минимума функции f_0 вдоль направления

$$S^0 = (\bar{x}_1^0 - x_1^0, \bar{x}_2^0 - x_2^0)$$
, r.e. $h_0 = \operatorname{argmin}(f_0(X^0 + hS^0))$.

Значение h_0 отыскивается любым из методов одномерной минимизации. Для локализации отрезка [h', h''], содержащего минимум по h, необходимо использование процедуры локализации, описанной выше. При этом очевидно, что в точке $X^0 h_0 = 0$, в точке $\overline{X}^0 h_0 = 1$.

Следующие итерации выполняются аналогично.

Симплексный метод. Множество (n + 1)-й равноудаленной точки в n-мерном пространстве называется правильным симплексом. В случае n = 2 правильным симплексом является равносторонний треугольник. Идея симплексного метода состоит в сравнении значений функции в (n+1) вершинах симплекса и перемещении его в направлении наилучшей точки. Симплексный метод, допускающий как правильные, так и неправильные симплексы, является одним из самых эффективных методов нулевого порядка при $n \le 6$.

Алгоритм решения задачи симплексным методом может быть представлен в виде следующей последовательности шагов.

- 1. Задаются n+1 точка X^1 , X^2 , ..., X^{n+1} , являющиеся вершинами начального симплекса. 2. Вычисляются величины $f_1 = f_0(X^1)$, ..., $f_{n+1} = f_0(X^{n+1})$. 3. Определяются вершины h, g, l, для которых f_h наибольшее значение среди всех f_i , i = l, ..., n+1; f_g следующее за наибольшим; f_1 – наименьшее значение.
 - 4. Определяется центр тяжести X^{C} всех точек, кроме X^{h}

$$X^C = \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=1\\i\neq h}}^n X^i$$

- и вычисляется значение целевой функции f_0 в точке $X^C f_C$.

 5. Выполняется операция отражения точки X^h относительно точки X^C с коэффициентом отражения α и получением точки X^0 (рис. 2.8). При этом $X^0 X^C = \alpha(X^C X^h)$, откуда $X^0 = (1 + \alpha)X^C \alpha X^h$. Вычисляется значение целевой функции f_0 , в точке $X^0 f_0$.
- 6. Значение f_0 сравнивается со значениями f_1 и f_g . Возможны три случая: 6.1. Если $f_0 < f_1$, то направление из точки X^C в точку X^0 является наиболее предпочтительным для перемещения. В этом случае выполняется операция растяжения симплекса с коэффициентом растяжения в и получением точки X'. При этом $X' - X^C = \beta (X^0 - X^C)$, откуда $X' = (1 - \beta)X^C - \beta X^0$. Далее вычисляется значение целевой функции f_0 в точке $X' - f_r$ и осуществляется его сравнение со значени-

ем f_1 . Возможны два случая:

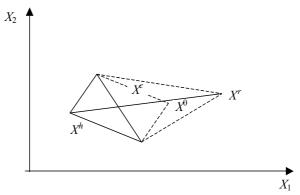


Рис. 2.8. Операция отражения и растяжения симплекса

- 6.1.1. Если $f_r < f_1$, то точка X^n перемещается в точку X^r , образуя новый симплекс, текущая итерация заканчивается и выполняется переход к шагу 10 для проверки критерия останова.
- 6.1.2. Если $f_r \ge f_1$, то точка X^r отбрасывается, так как перемещение было выполнено слишком далеко. В этом случае точка X^n перемещается в точку X^0 , образуя новый симплекс, текущая итерация заканчивается и выполняется переход к шагу 10 для проверки критерия останова.
- 6.2. Если $f_1 < f_0 \le f_{\rm gx}$, то X^0 является не самой плохой точкой. В этом случае точка X^h перемещается в точку X^0 и выполняется переход к шагу 10.
 - 6.3. Если $f_0 > f_g$, то выполняется переход к шагу 7.
 - 7. Выполнение операции сжатия симплекса. Возможны два варианта сжатия в зависимости от значений f_0 и
 - 7.1. Если $f_0 < f_h$, то результатом операции сжатия является точка X^S , определяемая из условия

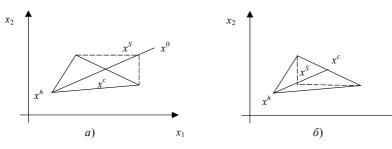
$$X^{S} - X^{C} = \gamma (X^{0} - X^{C})$$
 или $X^{S} = \gamma X^{0} + (1 - \gamma)X^{C}$.

В этом случае точка X^S будет лежать между X^C и X^0 (рис. 2.9, a).

7.2. Если $f_0 \ge f_h$, то результатом операции сжатия является точка X^S , определяемая из условия

$$X^{S} - X^{C} = \gamma (X^{h} - X^{C})$$
 или $X^{S} = \gamma X^{h} + (1 - \gamma)X^{C}$

 $X^S - X^C = \gamma (X^h - X^C)$ или $X^S = \gamma X^h + (1 - \gamma) X^C$. В этом случае точка X^S будет лежать между X^h и X^C (рис. 2.9, δ). Далее вычисляется значение целевой функции в точке $X^S - f_S$.



^{x₁}Рис. 2.9. Операция сжатия симплекса

- 8. Сравниваются значения f_h и f_S
- 8.1. Если $f_S < f_h$, то точка X^h перемещается в точку X^S , образуя новый симплекс, текущая итерация заканчивается и выполняется переход к шагу 10.
- 8.2. Если $f_S \ge f_h$, то точки со значением функции, меньшим, чем f_h , найти не удалось. В этом случае выполняется переход к шагу 9.
- 9. Выполнение операции уменьшения размеров симплекса. Размерность симплекса уменьшается относительно точки X^I путем уменьшения в два раза расстояний от точки X^I до всех остальных вершин симплекса (рис. 2.10).

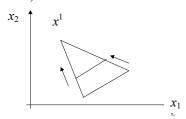


Рис. 2.10. Операция уменьшения размеров симплекса

При этом

$$X^{i} = X^{i} + \frac{1}{2}(X^{i} - X^{1}), i \neq 1.$$

Затем вычисляются $f_i = f_0(X^i), i = 1, ..., n+1$, и выполняется переход к шагу 10.

значения

10. ПРОВЕРКА КРИТЕРИЯ ОСТАНОВА. ПРОЦЕСС ПОИСКА ПРЕКРАЩАЕТСЯ, ЕСЛИ ПО ЗАВЕРШЕНИИ ОЧЕРЕДНОЙ *К*-Й ИТЕРАЦИИ ВЫПОЛНЯЕТСЯ УСЛОВИЕ

$$\sigma < \varepsilon$$
, ГДЕ $\sigma^2 = \sum_{i=1}^{n+1} (f_i - f)^2 / (N+1)$ И $f = \sum_{i=1}^{n+1} f_i / (n+1)$.

Если условие $\sigma < \epsilon$ не выполняется, то осуществляется переход к шагу 3.

В качестве значений коэффициентов отражения, растяжения и сжатия рекомендуется использовать: $\alpha=1, \quad \delta=2, \quad \gamma=0,5$. Для формирования начального симплекса задается точка X^1 , остальные точки вычисляются по формулам: $X^2=X^1+kE^1, X^3=X^2+kE^2, ..., X^{n+1}=X^n+kE^n,$ где $E^j=(e_1,e_2,...,e_j,...,e_n)$ – вектор, у которого $e_j=1$, а остальные элементы равны 0,j=1,...,n,k – произвольная длина шага.

Порядок выполнения работы

- 1. Составить алгоритмы решения задачи минимизации функции n переменных методами покоординатного спуска Пауэлла и симплексным.
 - 2. Подготовить программы для ЭВМ, реализующие алгоритмы п. 1.
 - 3. Найти решение задачи перечисленными методами, используя в качестве $f_0(X)$ функции вида:

a)
$$f_0(x_1, x_2) = \frac{((x_1 - a)\cos(\alpha) + (x_2 - b)\sin(\alpha))^2}{c^2} + \frac{((x_2 - b)\cos(\alpha) - (x_1 - a)\sin(\alpha))^2}{d^2};$$

 $X^* = (a, b);$

б) функцию Розенброка:

$$f_0(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2; \quad x^* = (1, 1).$$

Функция первого вида задает в пространстве $(x_1, x_2, f_0(X))$ эллиптический параболоид с вершиной в точке (a, b). Линиями равного уровня такой функции являются эллипсы. Угол α определяет угол поворота осей эллипсов относительно координатных осей. Значения c и d определяют длины полуосей эллипса, соответствующего значению $f_0(X)=1$. Параметры функции $-a,b,c,d,\alpha$ для каждого варианта приведены в табл. 2.2.

Таблица 2.2

№ вари-анта	а	b	С	d	α	№ вари-анта	а	b	c	d	α
1	0	1	2	6	30	26	-4	-10	2	3	70
2	-4	5	3	5	115	27	9	7	1	3	105
3	-2	-4	3	6	75	28	5	0	2	5	20
4	0	1	2	4	110	29	8	6	1	2	75
5	1	6	4	7	130	30	3	0	2	5	25
6	-2	4	2	5	35	31	3	7	4	7	50
7	0	1	2	4	40	32	-5	-10	3	5	130
8	-7	3	2	3	10	33	7	-3	1	3	75
9	2	-2	3	4	20	34	9	6	3	5	45

10	0	8	1	3	5	35	9	-6	2	3	55
11	-6	-1	2	3	20	36	-6	0	3	5	60
12	1	-5	1	4	145	37	8	1	1	6	50
13	-3	-9	3	5	25	38	1	-4	1	3	25
14	-2	5	1	3	120	39	6	9	1	4	20
15	-6	-5	4	7	80	40	-3	6	1	2	115
16	8	-1	2	5	170	41	10	9	3	7	35
17	6	-1	3	4	70	42	3	8	2	5	130
18	-3	-9	3	5	65	43	-9	-5	3	5	75
19	1	10	1	4	120	44	9	4	2	5	60
20	2	3	1	2	15	45	-9	4	1	2	155
21	0	1	2	3	80	46	-5	-2	1	3	15
22	-1	1	2	5	50	47	6	2	3	4	50
23	6	4	3	5	175	48	2	-9	3	7	15
24	-3	-3	1	2	45	49	4	2	2	5	70
25	2	-2	2	5	75	50	9	-1	3	5	35

Решение задачи произвести каждым методом из двух различных начальных точек. Для функции Розенброка одной из таких точек должна быть точка $X^0 = (-1, 2, 1)$.

Результаты решения задачи методом Пауэлла должны содержать последовательность координат точек X^0 , \overline{x}^0 , \overline{x}^0 , X^1 , ..., X^* . Результаты решения задачи симплексным методом должны содержать последовательность координат точек-вершин симплексов $X^0 = (X_1^0, X_2^0, ..., X_{n=1}^0), ..., X^k = (X_1^k, X_2^k, ..., X_{n+1}^k)$ и оптимальное решение X^* с указанием производимых на каждой итерации операций по деформации симплекса.

4. Построить на бумаге линии равного уровня обеих функций и геометрически проиллюстрировать процесс нахождения решения задачи для каждых метода, функции и начального приближения.

Содержание отчета

- 1. Задание на выполнение лабораторной работы в соответствии номером варианта из табл. 2.2.
- 2. Краткое описание методов покоординатного спуска Пауэлла и симплексного.
- 3. Распечатки программ, реализующие перечисленные методы на ЭВМ, с описанием.
- 4. Результаты решения задачи.
- 5. Рисунки, иллюстрирующие процесс нахождения решения задачи.
- 6. Краткие выводы по работе, содержащие сравнительный анализ методов и результатов решения.

Литература: [12], [13].

Лабораторная работа 2.3

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ БЕЗУСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ МЕТОДАМИ НАИСКОРЕЙШЕГО СПУСКА И СОПРЯЖЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ

Цель: приобретение навыков по использованию методов наискорейшего спуска и сопряженных градиентов для минимизации функции многих переменных.

Задание: провести численное решение задач минимизации предлагаемых функций методами наискорейшего спуска и сопряженных градиентов.

Обшие положения

Методы наискорейшего спуска и сопряженных градиентов относятся к методам первого порядка. Методами первого порядка называют методы поиска экстремума, использующие для нахождения решения информацию как о значениях целевой функции, так и о значениях ее первых производных.

Метод наискорейшего спуска – используется свойство градиента функции в точке указывать направление наибыстрейшего возрастания (в направлении антиградиента – убывания) функции в точке.

Рассмотрим использование метода наискорейшего спуска для минимизации функции двух переменных $f_0(x_1, x_2)$. Пусть в качестве начального приближения выбрана некоторая точка $X^0 = (x_1^0, x_2^0)$. Каждая итерация при поиске минимума методом наискорейшего спуска состоит из двух этапов. На первом этапе в точке X^0 вычисляются значения частных производных по переменным x_1, x_2 , которые определяют

направление градиента функции $f_0(X)$ в этой точке. На втором этапе определяется следующая точка X^1 как

$$X^1 = X^0 + h_0 S^0, \text{ где } S^0 = -\nabla f_0(X^0) = \left[-\frac{\partial f_0(X^0)}{\partial x_1} \,,\, -\frac{\partial f_0(X^0)}{\partial x_2} \right] - \text{ антиградиент функции } f_0 \text{ в точке } X^0, \ h_0 - \text{ неиз-$$

вестное значение коэффициента h.

Значение h_0 вычисляется из условия того, что точка X^{I} является точкой минимума функции $f_0(X)$ вдоль на-

$$h_0 = \underset{h}{\arg\min} \ f_0(X^0 + hS^0).$$

Для поиска значения h_0 допускается использовать любой из методов одномерной минимизации. Для локализации отрезка, содержащего значение h_0 , следует использовать процедуру, рассмотренную в лабораторной работе 2.2.

Для произвольных k-й итерации и функции n переменных следующее приближение X^{k+1} к точке минимума X вычисляется как

$$x_{i}^{k+1} = x_{i}^{k} + h_{k} s_{i}^{k}, \quad i = 1, ..., n, \quad h_{k} = \underset{h}{\operatorname{arg \, min}} f_{0}(X^{k} + hS^{k});$$

$$S^{k} = -\nabla f_{0}(X^{k}) = \left[-\frac{\partial f_{0}(X^{k})}{\partial x_{1}}, -\frac{\partial f_{0}(X^{k})}{\partial x_{2}}, ..., -\frac{\partial f_{0}(X^{k})}{\partial x_{n}} \right].$$

Поиск заканчивается при выполнении условия

$$\sum_{i=1}^{n} \left[\frac{\partial f_0(X^k)}{\partial x_i} \right]^2 \le \varepsilon, \tag{2.3}$$

где ϵ – заранее заданное положительное число.

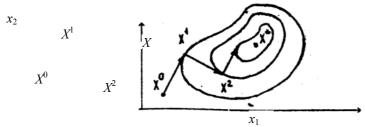


РИС. 2.11. МЕТОД НАИСКОРЕЙШЕГО СПУСКА

Для приближенного вычисления частных производных целевой функции $f_0(X)$ по переменным x_i , i = 1, ..., n, в точке X^k используется разностная схема:

$$\frac{\partial f_0(X^k)}{\partial x_i} = \frac{f_0(x_1, x_2, ..., x_i + \Delta x, ..., x_n) - f_0(x_1, x_2, ..., x_n)}{\Delta x},$$

где Δx – малое приращение по переменным x_i , i = 1, ..., n.

Геометрическая иллюстрация работы метода наискорейшего спуска приведена на рис. 2.11.

Метод сопряженных градиентов. Функция *п* переменных, приводимая к виду

$$f_0(X) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} a_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} b_i x_i + c, \qquad (2.4)$$

называется квадратичной функцией. В векторной форме записи функцию $f_0(X)$ можно представить в виде

$$f_0(X) = \frac{1}{2} XAX^T + BX^T + c,$$

где $X = (x_1, x_2, ..., x_n)$ – вектор-строка; X^T – вектор-столбец; T – символ транспонирования; $A = (a_{ij}), i, j = 1, ..., n$ – симметричная матрица размера $n \times n$; $B = (b_i), i = 1, ..., n$ – постоянный вектор размера n; c – константа.

Для квадратичных функций

$$\begin{split} \frac{\partial f_0}{\partial x_i} &= \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j + b_i, \quad i = 1, ..., n; \\ \frac{\partial^2 f_0}{\partial x_i \partial x_j} &= a_{ij}, \quad i, j = 1, ..., n. \end{split}$$

Идея метода сопряженных градиентов основана на стремлении минимизировать квадратичную функцию за конечное число шагов. Для этого требуется найти направления S^0 , S^1 , ..., S^{n-1} такие, что последовательность n одномерных минимизаций вдоль этих направлений приводит к отысканию минимума функции (2.5) при любом начальном приближении X^0 .

Указанным свойством обладает система взаимно сопряженных относительно матрицы вторых производных \mathbf{A} векторов. Два вектора S^k и S^{k+1} называются сопряженными (относительно матрицы \mathbf{A}), если они отличны

от нуля и для них выполняется условие $(S^k)\mathbf{A}(S^{k+1})^T=0$.

Векторы S^0 , S^1 , ..., S^k называются взаимно сопряженными, если все они отличны от нуля и для любых i, j = 0, ..., k и $i \neq j$ выполняется условие $(S^i)\mathbf{A}(S^j)^T = 0$.

Частным случаем сопряженности векторов S^k и S^{k+1} является случай их ортогональности (перпендикулярности), когда матрица **A** представляет собой единичную матрицу.

В методе сопряженных градиентов система взаимно сопряженных направлений строится по правилу

$$S^{0} = -\nabla f_{0}(X^{0}); \quad S^{k} = -\nabla f_{0}(X^{k}) + \beta_{k-1}S^{k-1}, \quad k = 1, 2, ...,$$

где коэффициент β_{k-1} определяется из условия сопряженности векторов S^k и S^{k-1} , т.е.

$$(S^{k-1})\mathbf{A}(S^k)^T = 0; (S^{k-1})\mathbf{A}(-\nabla f_0(X^k) + \beta_{k-1}S^{k-1})^T = 0.$$

Проведя несложные преобразования, получим выражение для вычисления β_{k-1} при минимизации квадратичных функций:

$$\beta_{k-1} = \frac{(S^{k-1})\mathbf{A}(\nabla f_0(X^k))^T}{(S^{k-1})\mathbf{A}(S^{k-1})^T}.$$
 (2.6)

Для произвольной k-й итерации следующее приближение X^{k+1} к точке минимума X^* определяется из условия того, что точка X^{k+1} является точкой минимума функции $f_0(X)$ вдоль направления, определяемого вектором S^k , т.е.

$$X^{k+1} = X^k + h_k S^k$$
, $h_k = \underset{h}{\operatorname{arg \, min}} f_0(X^k + h S^k)$.

Локализация отрезка (h', h'') содержащего значение h_k , и поиск значения h_k выполняются с использованием тех же процедур, что и в методе наискорейшего спуска.

Для вычисления β_{k-1} удобнее пользоваться другим выражением, в котором отсутствует матрица вторых производных **A**:

$$\beta_{k-1} = \frac{(\nabla f_0(X^k))(\nabla f_0(X^k))^T}{(\nabla f_0(X^{k-1}))(\nabla f_0(X^{k-1}))^T}.$$
 (2.7)

В таком виде оно может быть использовано как для минимизации квадратичных, так и неквадратичных функций, у которых значения вторых производных в точках X^k , k = 0, 1, ..., не являются неизменными.

Таким образом, для минимизации квадратичных функций метод сопряженных градиентов является конечно-шаговым и позволяет найти решение не более, чем за n итераций. Для минимизации неквадратичных функций метод перестает быть конечно-шаговым, получаемые им направления S^0 , S^1 , ..., не являются, вообще говоря, взаимно сопряженными относительно какой-либо матрицы. В этом случае в качестве критерия окончания поиска используется условие (2.3). Геометрическая иллюстрация метода сопряженных градиентов приведена на рис. 2.12.

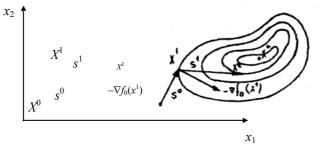


Рис. 2.12. Метод сопряженных градиентов

ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

- 1. Составить алгоритмы решения задачи минимизации функции n переменных методами наискорейшего спуска и сопряженных градиентов. Для вычисления β_{k-1} , k = 1, 2, ..., использовать выражение (2.7).
 - 2. Подготовить программы для ЭВМ, реализующие алгоритмы п. 1.
- 3. Найти решение задачи перечисленными методами, используя задание из лабораторной работы 2.2. Решение задачи произвести каждым методом из двух различных начальных точек. Для функции Розенброка одной из таких точек должна быть точка $X^0 = (-1, 2, 1)$.

Результаты решения задачи должны содержать последовательность точек $X^0, X^1, ..., X^*$ с соответствующими значениями целевой функции в них.

4. Построить на бумаге линии равного уровня обеих функций и геометрически проиллюстрировать процесс нахождения решения задачи для каждых метода, функции и начального приближения.

- 1. Задание на выполнение лабораторной работы в соответствии с номером варианта из табл. 2.2.
- 2. Краткое описание методов наискорейшего спуска и сопряженных градиентов.
- 3. Распечатки программ, реализующие перечисленные методы на ЭВМ, с описанием.
- 4. Результаты решения задачи.
- 5. Рисунки, иллюстрирующие процесс нахождения решения задачи.
- 6. Краткие выводы по работе, содержащие сравнительный анализ методов и результатов решения.

Литература: [13], [16].

Лабораторная работа 2.4

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ С ОГРАНИЧЕНИЯМИ-НЕРАВЕНСТВАМИ МЕТОДОМ ШТРАФНЫХ ФУНКЦИЙ

Цель: приобретение навыков по применению метода штрафных функций для решения задач условной оптимизации с ограничениями-неравенствами.

Задание: провести численное решение задач оптимизации с использованием внешней и внутренней функции штрафа.

общие положения

Решение задач оптимизации методом штрафных функций основано на сведении их к последовательности безусловных задач для функций, зависящих от параметра.

Рассмотрим следующую задачу условной оптимизации:

$$f_0(X) \to \min$$
 (2.8)

при условиях $f_i(X) \ge 0$, i = 1, ..., m; $X = (x_1, x_2, ..., x_n)$.

На основе функций $f_0(X)$ и $f_i(X)$, i=1,...,m строится функция R(X,K) следующего вида: $R(X,K)=f_0(X)+S(K,f_0(X),f_1(X),...,f_m(X))$, где K – параметр, называемый коэффициентом штрафа; S – функция штрафа за нарушения ограничений (штрафная функция).

В зависимости от вида различают внутренние (барьерные) и внешние функции штрафа, а методы построения последовательности задач для минимизации функций $R(X,\ K)$ — соответственно методами внутренней и внешней точек.

В обоих методах решается последовательность задач безусловной минимизации функций $R(X, K_i)$, i = 0, 1, 2, ..., локальные минимумы которых $X^*(K_i)$ при $K_i \to \infty$ стремятся к точке X^* , являющейся решением исходной задачи.

В методах внутренней точки функция штрафа строится таким образом, чтобы обеспечивалось приближение к решению X^* внутри допустимой области. В этом случае функция штрафа должна резко возрастать при приближении к границе допустимой области изнутри, тем самым препятствуя нарушению ограничений. На границе области функция штрафа либо не существует, либо имеет разрыв. Примерами внутренних функций штрафа являются следующие:

$$S_1(X,K) = -\frac{1}{K} \sum_{i=1}^{m} \ln f_i(X); (2.9)$$

$$S_2(X,K) = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^{m} \frac{1}{f_i(X)}.$$
 (2.10)

В методах внешней точки функция штрафа резко возрастает при выходе за границы допустимой области с тем, чтобы предотвратить блуждание точек слишком далеко от нее. Примером внешней функции является квадратичная функция штрафа вида

$$S_3(X,K) = K \sum_{i=1}^{m} (\min(0, f_i(2.11))^2.$$

Для методов внутренней точки важно, чтобы начальная точка X^0 и точки X^i , получаемые в процессе последующих вычислений, принадлежали допустимой области. Это вытекает из следующих соображений. Функция штрафа (2.9) не определена вне допустимой области. При использовании функции (2.10), по мере приближения точек X^i к границе внутри допустимой области, функция $R(X,K) \to \infty$, а по мере приближения к границе снаружи допустимой области $R(X,K) \to -\infty$. На границе области функция R(X,K) не существует. Следовательно, если локальный поиск осуществлять вдоль прямой, соединяющей две точки, одна из которых лежит внутри, а другая вне допустимой области ограничений, то минимум будет найден вне допустимой области и будет невозможно вновь войти в область ограничений.

Пусть задана некоторая начальная точка X^0 , не принадлежащая допустимой области, т.е. в этой точке не выполняется хотя бы одно из ограничений $f_i(X) > 0$, i = 1, ..., m. Для «перемещения» точки X^0 в допустимую область воспользуемся следующей схемой (рис. 2.13). Составим вспомогательную функцию $\phi(X)$, имеющую вил

$$\varphi(X) = \sum_{i=1}^{m} \min(0, f_i(X)).$$

В том случае, если точка X находится вне допустимой области, то $\varphi(X) < 0$, в противном случае $\varphi(X) = 0$. «Перемещение» точки X^0 в допустимую область выполняется по направлению градиента функции $\varphi(X)$ в соответствии с алгоритмом $X^{i+1} = X^i + h\nabla\varphi(X^i)$, i = 0, 1, 2, ..., где h – коэффициент, влияющий на величину шага по направлению.

 X^{i-1} в допустимую область является выполнение условий

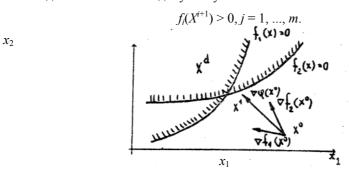


Рис. 2.13. К «перемещению» начальной точки в допустимую область

Найденная точка X^{i+1} принимается за X^0 .

Алгоритм решения задачи (2.8) с использованием функций штрафа вида (2.9) или (2.10) можно представить в виде следующей последовательности шагов.

- 1. Выбирается начальная точка X^0 . Если она не принадлежит допустимой области, выполняется ее «перемещение» в эту область в соответствии с описанным выше алгоритмом. Точка X^0 принимается за точку минимума функции R(X,K) и обозначается как X_0^* . Через i обозначается номер решаемой безусловной задачи и полагается i=1.
 - 2. Выбирается начальное значение $K = K_i$.
- 3. Используя какой-либо метод безусловной минимизации, определяется точка X_i^* , являющаяся минимумом функции $R(X, K_i)$.
 - 4. Проверяется критерий окончания решения задачи

$$||X_i^* - X_{i-1}^*|| \le \varepsilon.$$

Если условие выполняется, то осуществляется переход к шагу 6, в противном случае – к шагу 5.

- 5. Положим i = i + 1, $K_i = K_{i-1}C$. В качестве начальной точки X_i^0 поиска минимума функции $R(X, K_i)$ принимается точка X_{i-1}^* , и выполняется переход к шагу 3.
 - 6. За результат решения задачи X^* принимается точка X_i и процесс поиска заканчивается.

В качестве начального значения K_1 , выбирается $K_1 = 1$. В качестве значения C выбирается C = 10.

Алгоритм решения задачи (2.8) с использованием функции штрафа вида (2.11) аналогичен предыдущему с той лишь разницей, что допускается выбор в качестве начального приближения точки, не требующей проверки на принадлежность допустимой области, т.е. точка X^0 может лежать как внутри, так и вне допустимой области.

Порядок выполнения работы

- 1. Составить алгоритмы решения задачи минимизации функции *п* переменных при наличии ограничений типа неравенств методом штрафных функций с использованием функций штрафа вида (2.10) и (2.11). В качестве метода решения безусловных задач допускается использовать любой из рассмотренных методов.
 - 2. Подготовить программы для ЭВМ, реализующие алгоритмы п. 1.
- 3. Найти с использованием перечисленных алгоритмов решение задачи в соответствии с вариантом из табл. 2.3. При этом общий вид функции $f_0(X)$ совпадает с видом $f_0(X)$ из лабораторной работы 2.2. Результаты решения задачи должны содержать последовательность точек X_0^* , X_1^* , ..., X_n^* с соответствующими значениями

коэффициента K и целевой функции в них. Поиск решения каждым алгоритмом произвести из двух различных начальных точек, одна из которых должна лежать внутри, а другая вне допустимой области.

4. Построить на бумаге линии равного уровня целевой функции и допустимую область и геометрически проиллюстрировать процесс нахождения решения задачи.

Таблица 2.3

№ вари- анта	а	b	с	d	α	Ограничения
1	-2	-1	1	3	15	$x_1^3 - \frac{1}{x_2} \le 0; \ x_1 - x_2 \ge 0$
2	4	4	2	3	55	$x_1 - \frac{4}{x_2} \le 0; x_1 \ge 0$
3	-4	2	1	2	10	$\frac{x_1}{x_2} + 3 x_2 \cos x_1 \le 0;$ $x_1^2 + x_2^2 - 16 \le 0$
4	2	1	2	5	35	$x_1 - x_2 \sin x_1 + 1 \le 0;$ $x_1^2 + x_2^2 - 16 \le 0$
5	2	2	1	2	100	$\frac{x_1^2 - x_2}{x_2^2 - x_1} \le 0; \ x_1 + x_2 \le 0$
6	2	1	1	4	20	$e^{\frac{x_1}{x^2}} - x_1 \le 0; x_2 \ge 0$

Продолжение табл. 2.3

№ вари- анта	а	b	с	d	α	Ограничения
7	2	1	2	3	60	$8 x_1^3 + x_2^3 - 4 \le 0; x_2 \ge 0$
8	2	1	3	7	45	$x_2 e^{x_1} - x_1^2 \le 0$; $x_1 + x_2 + 1 \ge 0$
9	1	-3	1	3	85	$\frac{x_1}{e^{x^2}} + \frac{1}{x_2 + 2} \le 0;$ $x_1 \ge 0$
10	0,6	-3	2	5	25	$\frac{x_1 x_2 + 1}{x_1^2 - 1} \le 0; \ x_1 - x_2 \ge 0$
11	5	-1	1	3	30	$x_1^2 + 2x_2^3 - 8 \le 0; x_1 + x_2 \ge 0$
12	6	2	2	3	150	$x_1 \sin x_2 + x_2 \cos x_1 - 1 \le 0;$ $x_1 \ge 0$
13	6	2	1	4	110	$x_1 + 6\sin x_2 \le 0; \ x_1 \ge 0$
14	4	2	1	2	5	$x_1 \sin x_2 - \frac{1}{x_2} \le 0; \ x_1 \ge 0$
15	0	1	2	7	50	$x_2 \cos x_1^2 - x_1 \le 0; \ x_1 - 5 \le 0$
16	-1	-2	1	4	65	$x_2^3 - x_1^2 + 3x_2^2 - x_1 + 1 \le 0;$ $x_2 \le 0$
17	1	1	1	3	120	$x_1 x_2 - \frac{1}{e^{x^2}} \le 0; x_1 + x_2 \ge 0$
18	3	0,5	2	5	40	$\frac{10}{x_1} + \frac{x_1}{x_2} \le 0; x_1 \ge 0$

19	0	0,3	1	5	15	$\frac{7}{x_2} + 4x_1 - 9 \le 0; x_2 \le 0$
20	-1	2	2	3	35	$\frac{x_2}{\sin x_1 + 1} - x_1 \ge 0;$ $x_1 - x_2 - 1 \le 0$
21	-2	-1	1	2	60	$4x_1^2 - x_2 \le 0; x_1 \ge 0$

Продолжение табл. 2.3

№ вари- анта	а	b	С	d	α	Ограничения
22	-2	-1	1	3	35	$-x_1^3 + x_2 + 1 \le 0; x_2 \le 0$
23	-2	-1	1	2	10	$-x_1^3 + 4x_2 \le 0; \ x_1 - x_2 \ge 0$
24	2	1	2	5	65	$-x_1^2 + 5x_2 \le 0; \ x_1 + x_2 - 1 \ge 0$
25	1	1	3	8	25	$x_1^2 + 5\sin x_2 \le 0; \ x_1 + x_2 + 2 \ge 0$
26	2	1	1	4	80	$x_1^2 + 4\cos x_2 \le 0; \ x_1 - x_2 + 2 \ge 0$
27	2	1	2	5	15	$x_1 \sin x_1 + 4x_2 \le 0;$ $x_1 + 2 \ge 0$
28	2	1	1	7	75	$x_1 \sin x_1 + 4 \cos x_2 \le 0;$ $\frac{-10}{x_1} + x_2 \le 0$
29	-5	4	2	3	130	$x_2 - \sin e^{-x^{1}} \le 0; \ x_1 - x_2 + 1 \le 0$
30	-0,5	0,5	3	4	100	$x_2 - x_1^2 / 2 + x_1^3 / 9 \le 0;$ $x_1 + x_2 \ge 0$
31	2	2	2	7	120	$x_2 \cos x_1 + x_1 \le 0; \ x_1 + x_2 + 1 \ge 0$
32	1	1	1	3	75	$ x_1 - x_1 x_2 + x_2 + 1 \le 0; x_2 - x_1 \le 0 $
33	0	0	2	5	60	$x_1 x_2^2 + 1 \le 0; \ x_1 + 1 \ge 0$
34	2	-1	2	3	45	$x_1 + \frac{\sin x_2}{e^{x_1}} \le 0; \ x_2 - x_1 \le 0$
35	2	0	1	5	10	$\frac{x_1}{\sin x_1} + \frac{x_2}{\cos x_2} - 1 \le 0; \ x_1 \ge 0$
36	1	1	2	7	100	$\frac{x_1^3}{7} - \frac{x_2^2}{6} + 1 \le 0; \ x_1 + x_2 + 1 \ge 0$
37	0	1	1	3	60	$x_1^2 x_2 - x_2^2 x_1 + 4 \le 0;$ $x_2 - x_1 \ge 0$

Продолжение табл. 2.3

№ вари- анта	а	b	С	d	α	Ограничения
38	4	-2	2	5	45	$x_1 - x_2 \sin x_2 \le 0; \ x_2 + 4 \ge 0$
39	2	-1	1	3	50	$\cos x_2 + \sin x_1 + x_1 \le 0; x_2 - x_1 \le 0$
40	0	-1	2	5	35	$\sin x_2 + x_1 x_2 \le 0; \ x_1 - x_2 + 1 \ge 0$
41	-2	-1	3	7	60	$e^{x^2} - 9x_1 \le 0; x_1 - x_2 - 1 \le 0$
42	1	1	1	2	120	$e^{\cos x^2} + x_1 \le 0; x_1 + 3 \ge 0$
43	-3	-1	2	3	5	$-x_1 e^{\cos x^2} - 1 \le 0; x_1 + x_2 \le 0$
44	3	2	1	3	60	$7x_1 + x_2 \cos x_1 \le 0; \ x_1 + x_2 \ge 0$

45	2	0	2	7	45	$x_1^3 + x_2^2 \sin x_2 \le 0; \ x_1 \ge 0$
46	2	0	1	3	50	$x_1^3 + 3x_1x_2 + x_2^2 \le 0;$ $x_1 - x_2 \ge 0$
47	0	-1	1	2	50	$2x_1^3 + x_2^2 + 4x_1 + 1 \le 0;$ $x_1 + 1 \ge 0$
48	5	5	2	5	60	$x_1^2 x_2 - 8 \le 0; \ x_2 \ge 0$
49	4	-2	1	2	55	$\frac{\cos x_1}{x_1} - x_2 \le 0; \ x_1 + x_2 - 2 \ge 0$
50	-2	2	2	9	140	$e^{x_1} - x_2 \le 0; x_2 \ge 0$

Содержание отчета

- 1. Задание на выполнение лабораторной работы в соответствии с вариантом из табл. 2.3.
- 2. Краткое описание алгоритмов решения задачи.
- 3. Распечатки программ, реализующие перечисленные алгоритмы на ЭВМ, с описанием.
- 4. Результаты решения задачи.
- 5. Рисунки, иллюстрирующие процесс нахождения решения задачи.
- 6. Краткие выводы по работе, содержащие сравнительный анализ алгоритмов внутренней и внешней точек и результатов решения.

Литература: [12], [14].

Лабораторная работа 2.5

РЕШЕНИЕ ОБЩЕЙ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ КОМБИНИРОВАННЫМ МЕТОДОМ

Цель: приобретение навыков по применению метода штрафных функций для решения общей задачи математического программирования.

Задание: провести численное решение задачи оптимизации с использованием комбинированной внутренне-внешней функции штрафа.

Обшие положения

Рассмотрим задачу условной оптимизации с ограничениями -равенствами, называемыми также уравнениями связей:

$$f_0(X) \to \min$$
 (2.12)

при условиях $f_i(X) = 0$, i = 1, ..., m; $X = (x_1, x_2, ..., x_n)$.

Для такой задачи внутренние штрафные функции неприменимы из-за отсутствия «внутренности» допустимой области. В этом случае используют внешние штрафные функции, например, квадратичную, которая для случая ограничений-равенств имеет вид

$$S_4(X,K) = K \sum_{i=1}^{m} (f_i(X))^2.$$
 (2.13)

Алгоритм решения задачи (2.12) со штрафной функцией (2.13) аналогичен алгоритму внешней точки, рассмотренному в предыдущей лабораторной работе.

Пусть требуется решить общую задачу математического программирования вида

$$f_0(X) \to \min$$
 (2.14)

при условиях $f_i(X) \ge 0$, i = 1, ..., m; $f_i(X) = 0$, i = m + 1, ..., q, $X = (x_1, x_2, ..., x_n)$.

Для решения такой задачи целесообразно [14] использовать комбинированную внутренне-внешнюю штрафную функцию, где внутренней, учитывающей ограничения-неравенства, будет логарифмическая, а внешней, учитывающей ограничения-равенства, будет квадратичная. В этом случае функция R(X, K) будет иметь вид

$$R(X,K) = f_0(X) - \frac{1}{K} \sum_{i=1}^{m} \ln f_i(X) + K \sum_{i=m+1}^{q} (f_i(X))^2.$$
 (2.15)

Для функции R(X, K) предполагаем, что для всех ограничений выбирается один и тот же коэффициент штрафа K.

Алгоритм решения задачи (2.14) с использованием функции штрафа (2.15) аналогичен алгоритму внутренней точки, рассмотренному в лабораторной работе 2.4.

Порядок выполнения работы

- 1. Составить алгоритм решения общей задачи математического программирования методом штрафных функций с использованием функции штрафа вида (2.15). В качестве метода решения безусловных задач допускается использовать любой из рассмотренных методов.
 - 2. Подготовить программу для ЭВМ, реализующую алгоритм п. 1.
- 3. Найти решение задачи в соответствии с вариантом из табл. 2.4. Результаты решения задачи должны содержать последовательность точек X_0^* , X_1^* , ..., X_n^* с соответствующими значениями коэффициента K и целевой функции в них.
- 4. Построить на бумаге линии равного уровня целевой функции и допустимую область и геометрически проиллюстрировать процесс нахождения решения задачи.

Таблица 2.4

№ варианта	а	b	с	d	α	Ограничения
1	5	5	1	3	60	$\begin{aligned} x_2^2 - 3x_1 - 2x_2 - 5 &= 0; \\ x_1 - 5x_2 &\le 0 \end{aligned}$
2	-2	-1	2	3	125	$x_2^2 - x_1 = 0;x_2^5 + 3x_1^2 - 2x_1 - 5 \le 0$
3	-4	2	1	2	10	$x_1 + x_2 + 8 = 0;x_2^2 x_1 - 2x_1 - 5x_2 \le 0$
4	-5	-4	2	5	5	$x_1 - x_2 = 0;x_1 x_2 - 2x_1 - 5x_2 + 4 \le 0$
5	5	2	1	2	35	$x_1 + 2x_2 + 4 = 0;$ $x_1 e^{x^2} - 5x_2 + 4 \le 0$
6	3	5	2	3	150	$\begin{aligned} x_1^2 - 10x_2 &= 0; \\ x_2x_1e^{x^2} - 2x_1 - 5x_2 + 4 &\le 0 \end{aligned}$
7	-10	-10	3	7	30	$x_2 - 5x_1 = 0;5x_2 - 2x_1^2 - x_2^2 x_1 \le 0$
8	3	-2	1	3	75	$x_1 + 5x_2 = 0;$ $x_2^2 + 3x_1 - 2x_2 - 5 \le 0$
9	-3	-1	2	5	110	$3x_1 - x_2^2 = 0;$ $x_2^5 + 3x_1^2 - 2x_1 - 5 \le 0$
10	10	10	1	3	45	$x_2 + 4x_1 + 8 = 0;$ $x_2^2 x_1 - 2x_1 - 5x_2 \le 0$

Продолжение табл. 2.4

№ варианта	а	b	С	d	α	Ограничения
11	-2	-1	2	3	80	$x_2^2 - 7x_1 + 2x_1x_2 + 3 \le 0;$ $x_1 + x_2 = 0$
12	-2	-1	1	4	120	$x_2 - 6x_1 + 2x_1^2 x_2 + 3 \le 0;$ $x_1 - 2x_2 - 4 = 0$
13	-3	2	2	5	35	$x_1 - 3x_2x_1 + e^{x^2} \le 0;$ $2x_1 - x_2 + 4 = 0$
14	0	0	1	3	135	$x_1 - 3x_2 e^{x_1} + 2 \le 0;$ $x_1 + x_2 - 1 = 0$
15	2	3	1	4	50	$ x_1x_2 + 4x_2^2 - e^{x^1} \le 0; x_1 + x_2 - 4 = 0$
16	-2	-1	2	5	60	$x_2^3 - x_1 \le 0; x_1 = 0$
17	-3	-1	1	3	130	$x_1^2 + 2x_2 \le 0; x_2 - x_1 = 0$
18	-2	1	3	7	100	$3x_2^3 - x_1 \le 0; x_2 - 4x_1 = 0$
19	4	1	3	8	50	$4x_1 + x_2^4 \le 0;$ $x_1 - 10x_2 = 0$
20	2	1	4	9	60	$2x_2/x_1 - x_2 + 2 \le 0;$ $x_1 + x_2 - 1 = 0$
21	0	0	1	2	45	$x_1 x_2 + 54 \le 0;$ $3x_1 + x_2 - 6 = 0$
22	2	3	2	9	110	$6x_1e^{x^2} - 1 \le 0;$ $x_1 - x_2 = 0$
23	4	-1	1	3	55	$2x_1 - 3e^{x^2/x^2} \le 0;$ $x_1 + x_2 - 1 = 0$

№ варианта	а	b	С	d	α	Ограничения
24	4	-2	1	5	25	$\begin{vmatrix} x_1^3 - 4x_2^2 + x_1 - 2 \le 0; \\ x_1 - 3x_2 + 1 = 0 \end{vmatrix}$
25	-2	-1	2	5	40	$ 0,4 \cos x_1 - \sin x_2 \le 0; x_1 + 2x_2 + 2 = 0 $
26	-1	2	1	2	150	$\sqrt{e^{x1}} + x_1 x_2 + 4 \le 0;$ $x_1 + x_2 = 0$
27	2	4	2	3	50	$x_1x_2 - e^{x_1} \le 0;$ $x_1 + x_2 - 4 = 0$
28	4	3	3	4	70	$x_1 x_2^2 - e^{x^2} \le 0;$ $x_1 + x_2 - 5 = 0$
29	2	3	4	5	45	$x_1^2 + x_2^3 - 2 \le 0; x_1 = 0$
30	2	3	2	7	120	$x_1 x_2 + 3\cos x_2 \le 0; x_1 - x_2 + 3 = 0$

Продолжение табл. 2.4

	1	I	I	1	1	Прооблжение табл. 2.4
№ варианта	а	b	С	d	α	Ограничения
31	2	2	1	3	10	$\begin{cases} x_1 x_2 + 3e^{x^2} \le 0; \\ x_1 + x_2 = 0 \end{cases}$
32	2	2	2	5	50	$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 0 \\ e^{5x^2} + x_1^3 &\le 0; x_1 - x_2 &= 0 \end{aligned}$
33	-3	2	1	2	30	$2x_2^3 - e^{x1} \le 0;$ $x_1 + x_2 + 2 = 0$
34	-2	0	1	4	105	$x_2x_1^2 + 2x_2 - x_1 \le 0;$ $3x_1 - x_2 + 2 = 0$
35	-1	2	2	9	80	$3x_1 - x_2 + 2 = 0$ $3x_2^3 - x_1^2 - 2 \le 0;$ $x_1 + x_2 + 1 = 0$
36	4	2	1	4	70	$x_1 + x_2 + 1 = 0$ $4x_1 + x_2^4 - 1 \le 0;$ $x_1 + 2x_2 + 2 = 0$
37	1	2	2	5	140	$x_1 + 2x_2 + 2 = 0$ $5x_2/x_1 - e^{x^1} + 1 \le 0;$ $x_1 + x_2 - 2 = 0$
38	1	1	3	5	60	$x_1x_2 + 4\cos x_1 \le 0;$ $2x_1 + x_2 - 2 = 0$
39	2	3	3	5	65	$4x_1e^{x^2} - x_2 \le 0;$
40	4	-1	3	7	55	$x_1 - x_2 + 3 = 0$ $2x_1 - 3e^{x^2} + x_2 \le 0;$ $x_1 + x_2 = 0$
41	4	-1	2	5	65	$x_1 - 4x_2^2 - 2x_1x_2 \le 0;$ $2x_2 + x_1 - 2 = 0$
42	-2	-1	4	9	45	$5\cos x_1 - \sin x_2 + 4 \le 0;$
43	-1	1	3	8	120	$x_1 + x_2 + 3 = 0$ $\cos e^{x_1} + x_1 x_2 + 4 \le 0;$ $x_1 + x_2 + 1 = 0$
44	2	2	1	3	30	$x_1 + x_2 + 1 = 0$ $x_2^4 - e^{x_1} + x_1 \le 0;$ $x_1 - x_2 - 1 = 0$
45	0	1	2	3	100	$x_1^3 + 2x_2 - x_1 + 3 \le 0;$
46	1	2	1	2	50	$2x_1 - x_2 = 0$ $4x_2^2 - x_1^2 + x_2 - 2 \le 0;$ $x_1 - x_2 + 1 = 0$
47	2	2	1	4	25	$x_1 - x_2 + 1 = 0$ $4x_1 + x_2^2 - e^{x^1}/x_2 \le 0;$ $x_2 - 4x_1 = 0$
48	1	2	1	6	130	$x_2 - 4x_1 = 0$ $6x_2 - x_1 e^{x_1} + 1 \le 0;$ $x_1 + x_2 - 2 = 0$
49	-2	0,5	2	7	70	$x_1x_2 + 4\cos x_2 \le 0;$
50	2	3	5	9	60	$x_1 + 2x_2 = 0$ $x_2 e^{x^2} - 8x_1^2 + 3 \le 0;$ $x_1 + x_2 - 3 = 0$

Содержание отчета

- 1. Задание на выполнение лабораторной работы в соответствии с вариантом из табл. 2.4.
- 2. Краткое описание алгоритма решения задачи.
- 3. Распечатку программы, реализующей алгоритм на ЭВМ, с описанием.
- 4. Результаты решения задачи.
- 5. Рисунки, иллюстрирующие процесс нахождения решения задачи.

Контрольные вопросы

- 1. Какие методы используются для численного решения задач оптимизации с ограничениями типа равенств и типа неравенств?
- 2. В чем преимущества численных методов перед классическими методами решения оптимизационных задач с ограничениями?
- 3. Почему в качестве функции штрафа, учитывающей ограничения-неравенства целесообразно использовать логарифмическую, а учитывающую ограничения-равенства квадратичную?

Литература: [14].

Лабораторная работа 2.6

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ СИМПЛЕКС-МЕТОДОМ

Цель: приобретение навыков по использованию симплекс-метода для решения задачи линейного программирования.

Задание: провести численное решение задачи линейного программирования.

Общие положения

Симплекс-метод, известный как метод последовательного улучшения плана, является основным численным методом решения задач линейного программирования (ЛП). Он широко используется и в численных методах нелинейной и дискретной оптимизации как вспомогательный аппарат для решения возникающих подзадач.

Симплекс-метод применяется к задаче ЛП в канонической форме

$$f_0(X) = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_n x_n \to \min$$
 (2.16)

при условиях

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + ... + a_{1n}x_n = b_1;$$

 $a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + ... + a_{2n}x_n = b_2;$
 $a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + ... + a_{mn}x_n = b_m;$
 $x_1, x_2, ..., x_n \ge 0, b_1, b_2, ..., b_m > 0,$

или в матричной форме записи

$$f_0(X) = C^T X \rightarrow \min$$

при условиях AX = B; $X \ge 0$, B > 0.

Система ограничений задачи (2.16) состоит из m уравнений с n неизвестными (m < n). Любое неотрицательное решение задачи при этих ограничениях является допустимым решением. Имея m уравнений с n неизвестными можно получить решение (хотя не всегда допустимое), придавая n-m неизвестным произвольные значения и разрешая систему относительно m других переменных. Особый интерес представляют решения, когда n-m неизвестных приравниваются 0. Если такое решение единственно, то оно называется базисным. Если оно k тому же допустимо, то называется базисными допустимым решением. Переменные, приравненные 0, называются небазисными, а остальные – базисными. Очевидно, что выбрать n-m небазисных переменных можно k способами, k способами, k способами, k способами, k способами, k способами, k способами.

Пусть требуется решить задачу ЛП вида

$$f_0(X) = -3x_1 - 4x_2 \rightarrow \min$$

при условиях: $x_1 \ge 10$; $x_2 \ge 5$; $x_1 + x_2 \le 20$; $-x_1 + 4x_2 \le 20$.

Система ограничений задачи образует в плоскости x_10x_2 допустимую область в виде выпуклого многоугольника (рис. 2.14) с вершинами A, B, C, D. Из теории ЛП [15] известно, что если решение задачи ЛП сущест-

вует и единственно, то оно лежит области. Известно также, что все соответствуют вершинам

Приведем рассматриваемую преобразовав систему неравенств дополнительных неотрица-Тогда каноническая форма зада-

$$f_0(X) = -3x_1 - 4x_2 \rightarrow \min$$
при условиях

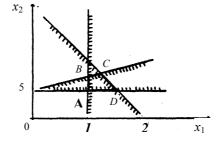


Рис. 2.14. Геометрическая интерпретация задачи ЛП

в одной из вершин допустимой базисные допустимые решения допустимой области.

задачу к каноническому виду, в систему равенств путем введения тельных переменных x_3 , x_4 , x_5 , x_6 . чи будет иметь вид

В этом примере две небазисные переменные (или четыре базисные) можно выбрать $C_n^{n-m} = C_6^2 = 15\,$ способами. Из 15 базисных решений только четыре допустимы и соответствуют вершинам допустимой области.

Основная идея симплекс-метода состоит в направленном переборе вершин допустимой области (направленном переходе от одного допустимого базисного решения к другому). Особая проблема возникает при поиске координат первой анализируемой вершины (поиске начального базисного решения).

Начальное допустимое базисное решение, с которого начинается применение симплекс-метода, легко найти, если матрица коэффициентов системы ограничений с учетом дополнительных переменных содержит единичную подматрицу $m \times m$. Рассмотрим процедуру построения начального допустимого базисного решения для различных типов ограничений в постановке задачи ЛП.

Тип 1. Ограничения заданы в виде
$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \le b_i; \ b_i > 0; \ i=1,...,m.$$

Введением дополнительных неотрицательных переменных $x_{n+1}, x_{n+2}, ..., x_{n+m}$ система неравенств приводится к системе равенств вида

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j + x_{n+i} = b_i; i = 1, ..., m.$$

Матрица коэффициентов при дополнительных переменных образует единичную подматрицу требуемого вида, и эти переменные используются для определения начального базисного решения. В этом случае начальное допустимое базисное решение записывается в виде

$$x_i = 0$$
; $j = 1, ..., n, x_{n+1} = b_i$; $i = 1, ..., m$.

Тип 2. Ограничение заданы в виде
$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \ge b_i; \ b_i > 0; \ i = 1, ..., \ m.$$

Введением дополнительных неотрицательных переменных $x_{n+1}, x_{n+2}, ..., x_{n+m}$ с коэффициентами -1 система неравенств приводится к системе равенств вида $\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j - x_{n+i} = b_i; i = 1, ..., m.$

Однако такое преобразование не позволяет получить единичной матрицы требуемого вида, и дополнительные переменные не могут быть использованы для получения начального допустимого базисного решения. Тогда поступают следующим образом. Вводятся вспомогательные неотрицательные переменные x_{n+m+1} , x_{n+m+2} , ..., x_{n+m+m} с коэффициентами 1 и строится искусственная целевая функция

$$W = \sum_{i=1}^{m} x_{n+m+i} .$$

Рассматривается вспомогательная задача ЛП вида

$$W = \sum_{i=1}^{m} x_{n+m+i} \to \min$$

при условиях
$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j - x_{n+i} + x_{n+m+i} = b_i; \ i=1,...,m,$$

для которой начальное базисное решение очевидно. Это $x_i = 0$; j = 1, ..., n + m; $x_{n+m+i} = b_i$; i = 1, ..., m.

Вспомогательная задача решается тем же симплекс-методом. Решением задачи являются значения $x_{n+m+i} = 0$, i = 1, ..., m (вспомогательные переменные), а среди остальных n + m переменных будут n нулевых и m ненулевых. Ненулевые переменные, являющиеся базисными для последней итерации решения вспомогательной задачи, и образуют начальное допустимое базисное решение для исходной задачи ЛП.

Тип 3. В ограничениях присутствуют равенства. В этом случае в каждое ограничение-равенство вводится вспомогательная переменная, и дальнейшие действия аналогичны рассмотренным выше для ограничений типа 2.

Таким образом, алгоритм решения задачи ЛП симплекс-методом при задании ограничений в произвольной форме должен предусматривать автоматический ввод дополнительных и вспомогательных неотрицательных переменных и порождать начальное допустимое базисное решение.

Пусть в задачу входят n переменных и m ограничений, среди которых n_1 в виде неравенств со знаком \leq , n_e – в виде равенств и n_g – в виде неравенств со знаком \geq . Пусть ограничения расположены именно в таком порядке. Правые части при этом у всех ограничений положительны. Тогда исходная задача имеет следующий вид:

при условиях

В соответствии с рассмотренными правилами преобразования ограничений, в последние n_g ограничений вводятся дополнительные переменные $x_{n+1}, ..., x_{n+n_g}$ с коэффициентом -1. В первые n_1 ограничений вводятся дополнительные переменные $x_{n+n_g+1}, ..., x_{n+n_g+n_1}$ с коэффициентом +1. В следующие n_e ограничений вводятся вспомогательные переменные $x_{n+n_g+n_1}, ..., x_{n+n_g+n_1+n_e}$ с коэффициентом +1 и в последние n_g ограничений — вспомогательные переменные $x_{n+n_g+n_1+n_e+1}, ..., x_{n+n_g+n_1+n_e+n_g}$ с коэффициентом +1. Последние $n_1+n_e+n_g$ столбцов расширенной матрицы коэффициентов образуют единичную матрицу требуемого вида, и начальное допустимое базисное решение вспомогательной задачи будет иметь вид

$$x_{n+n_g+i} = b_i$$
; $i = 1, ..., m$; $x_j = 0$; $j = 1, ..., n + n_g$.

Искусственная целевая функция W является суммой вспомогательных переменных. Выразив ее через неба-

зисные переменные, получим
$$\sum_{j=1}^{n+n_g} d_j x_j = W + W_0$$
, где $d_j = -\sum_{i=n_1+1}^m a_{ij}$; $W_0 = -\sum_{i=n_1+1}^m b_i$.

Пример. Исходная задача ЛП представлена в виде

Тогда вспомогательная задача будет иметь вид:

Начальное допустимое базисное решение для этой задачи очевидно: $x_1, ..., x_5 = 0$; $x_6 = 2$; $x_7 = 4$; $x_8 = 6$; $x_9 = 9$. В таком виде задача называется канонической формой для базисных переменных x_6, x_7, x_8, x_9 .

Таким образом, при $n_e + n_g = 0$ построение начального допустимого базисного решения задачи ЛП очевидно, в противном случае для этих целей строится и решается вспомогательная задача ЛП.

Рассмотрим теперь итерационный процесс решения задачи ЛП симплекс-методом при известном начальном допустимом базисном решении и построенной для этого решения канонической формой. Решение задачи удобно иллюстрировать в симплекс-таблицах. Для задачи (2.18) исходная таблица для первой итерации будет выглядеть следующим образом:

Итерация 1

Базис	Значение	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	<i>x</i> ₉
x_6	2	-1	0	1	0	0	1	0	0	0

x_7	4	1	1	1	0	0	0	1	0	0
x_8	6	2	3	1	-1	0	0	0	1	0
x_9	9	1	5	6	0	-1	0	0	0	1
$-f_0(X)$	0	-1	-2	-3	0	0	0	0	0	0
-W	-19	-1	-9	8	1	1	0	0	0	0

Итерационный процесс решения задачи ЛП симплекс-методом состоит из следующих шагов.

- 1. Выбор переменной для включения в базисные. Для этого определяется наименьший из коэффициентов d_i при небазисных переменных. Пусть это коэффициент d_j . Если коэффициент отрицателен, то увеличение x_j от 0 приведет к убыванию функции W. Если все d_i положительны, то функция W не может быть уменьшена, и минимум найден. Для задачи (2.18) переменной, включаемой в базисные, будет x_2 .
- 2. Выбор переменной для исключения из базисных. Увеличивать x_j , не нарушая условия не отрицательности текущих базисных переменных, можно до некоторого предела, при котором одна из базисных переменных обратится в 0. Эта переменная и будет исключена из базисных. Как определить эту переменную? Канонически форма для текущих базисных переменных такова, что в каждой строке ограничении присутствует лишь одна, уникальная для этой строки, базисная переменная. Если в i-м ограничении $a_{ij} > 0$, то наибольшее значение, которое может принимать переменная x_j , равно b_i/a_{ij} . В этом случае текущая базисная переменная x_s , содержащаяся в этом ограничении, обратится в 0.

Если $a_{ij} = 0$, то текущая базисная переменная x_s при увеличении x_j изменяться не будет. Если $a_{ij} < 0$, то при увеличении x_j переменная x_s будет возрастать. Таким образом, x_j может изменяться до значения

$$x_i^{\text{max}} = \min\{b_i / a_{ij}\}; i = 1, \dots, m; a_{ij} > 0.$$
 (2.19)

Для задачи (2.18) на первой итерации имеем:

$$x_j^{\text{max}} = x_2 = \min \{4/1,6/2,9/5\} = 9/5.$$

Пусть минимум достигается для строки r. Тогда текущая базисная переменная x_s , содержащаяся в строке r, исключается из базисных. В нашем примере r = 4, s = 9. Элемент a_{rj} (a_{42}) называется ведущим элементом, строка r – ведущей строкой, столбец j – ведущим столбцом.

3. Построение новой канонической формы. Теперь переменная x_j (x_2) стала базисной, а переменная x_s (x_9) – небазисной. Чтобы построить новую каноническую форму, коэффициент при x_j в ведущей строке приведем к единице, поделив строку на a_{rj} и образовав тем самым новую ведущую строку.

Далее исключим x_j из других ограничений и из функций W и f_0 . Для этого из каждой i-й строки, i=1,...,m, $i\neq r$, с коэффициентом a_{ij} при x_j вычтем a_{ij} (новая ведущая строка). Из строки для функции W с коэффициентом $d_j<0$ вычтем d_j (новая ведущая строка). Из строки для функции f_0 с коэффициентом $c_j<0$ вычтем c_j (новая ведущая строка). Далее выполняется переход к шагу 1.

Исходная симплекс-таблица для второй итерации в рассматриваемой задаче будет иметь вид:

Итерация 2

Базис	Значение	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	<i>X</i> ₉
x_6	2	-1	0	1	0	0	1	0	0	0
x_7	11/5	-4/5	0	-1/5	0	1/5	0	1	0	-1/5
x_8	3/5	7/5	0	-13/5	-1	3/5	0	0	1	-3/5
x_2	9/5	1/5	1	6/5	0	-1/5	0	0	0	1/5
$-f_0(X)$	18/5	-3/5	0	6/5	0	-2/5	0	0	0	2/5
-W	-14/5	4/5	0	94/5	1	-4/5	0	0	0	9/5

После решения вспомогательной задачи последняя симплекс-таблица, предварительно преобразованная, используется как начальная для решения исходной задачи. Преобразования сводятся к исключению из таблицы столбцов, связанных с вспомогательными переменными, и строки, связанной с функцией W. Для рассматриваемого примера это будут последние три столбца и строка таблицы.

Порядок выполнения работы

- 1. Составить алгоритм решения задачи ЛП симплекс-методом.
- 2. Подготовить программу для ЭВМ, реализующую алгоритм.
- 3. Найти решение задачи в соответствии с вариантом из табл. 2.5. Для всех вариантов к перечисленным ограничениям следует добавить ограничения $x_1 \ge 0$, $x_2 \ge 0$.
 - 4. Геометрически проиллюстрировать процесс нахождения решения задачи ЛП симплекс-методом.

Таблица 2.5

№	Целевая функция	№	Целевая функция
варианта	и ограничения	варианта	и ограничения
1	$f_0(X) = 3.4x_1 + 4.3x_2$	2	$f_0(X) = -0.9x_1 - 0.3x_2$

№ варианта	Целевая функция и ограничения	№ варианта	Целевая функция и ограничения
	$4,7x_1 + 2,8x_2 \ge 18$ $4,2x_1 - 8,2x_2 \ge 3,3$ $6,7x_1 - 2,5x_2 \le 31,5$		$2,3x_1 + 13,2x_2 \ge 23,1$ $8,2x_1 + 23,1x_2 \le 134,2$ $-3,1x_1 + 8,3x_2 \le 2,5$ $8,3x_1 - 13,1x_2 \le 34,2$
3	$f_0(X) = 1,1x_1 - 2,2x_2$ $3,6x_1 + 1,5x_2 \ge 4,2$ $2,0x_1 + 1,0x_2 \le 20$ $-2,0x_1 + 2,0x_2 \le 7$ $-1,8x_1 + 2,4x_2 \le 10$	4	$f_0(X) = -0.8x_1 + 1.3x_2$ $0.3x_1 + 0.9x_2 \ge 3.0$ $3.4x_1 + 1.3x_2 \le 23.0$ $-1.2x_1 + 4.3x_2 \le 18.7$

Продолжение табл. 2.5

№ варианта	Целевая функция и ограничения	№ варианта	Целевая функция и ограничения
5	$f_0(X) = -29, 1x_1 - 24, 3x_2$	6	$f_0(X) = -1,0x_1 - 1,0x_2$
	$0.4x_1 + 29x_2 \ge 484.8$		$23,4x_1+49,1x_2 \ge 239,1$
	$29,4x_1+18,4x_2 \ge 1484,8$		$3,4x_1 + 2,5x_2 \le 49$
	$23,5x_1 + 74,2x_2 \le 5293,2$		
	$x_1 \le 69,4$		
7	$f_0(X) = -29, 1x_1 + 35, 5x_2$	8	$f_0(X) = -3.2x_1 - 4.2x_2$
	$14,3x_1 + 28,3x_2 \ge 483,4$		$x_2 \ge 1.9$
	$19,4x_1 + 9,4x_2 \le 523,4$		$2,4x_1+5,7x_2 \le 17,3$
	$-9,4x_1+19,4x_2 \le 333,4$		$-5.3x_1 + 2.4x_2 \le 6.3$
9	$f_0(X) = -3.2x_1 + 4.2x_2$	10	$f_0(X) = -3.2x_1 + 2.5x_2$
	$x_1 \ge 6.8$		$84,2x_1+49,2x_2 \ge 944,4$
	$4,2x_1 + 29,2x_2 \ge 207$		$3,2x_1 + 8,2x_2 \le 103,3$
	$-14,8x_1 + 8,1x_2 \le 10$		$0.3x_1 - 0.9x_2 \le 3.6$
	$293,1x_1 + 8,1x_2 \le 2945,2$		
11	$f_0(X) = -23,1x_1 + 38,6x_2$	12	$f_0(X) = -74,3x_1 - 23,4x_2$
	$2,4x_1+5,2x_2 \ge 48,1$		$45,3x_1+34,2x_2 \ge 34,4$
	$x_1 \leq 5$		$34,2x_1-1,1x_2 \ge 11$
	$34x_1 + 21,6x_2 \le 375,3$		$28,4x_1+12,5x_2 \le 28,2$
			$49x_1 - 34, 3x_2 \le 7, 8$
13	$f_0(X) = -3,2x_1 - 4,2x_2$	14	$f_0(X) = -1, 2x_1 - 2, 0x_2$
	$19,3x_1+16,5x_2 \ge 294,8$		$12,4x_1 + 69,0x_2 \ge 33$
	$94,1x_1 + 74,2x_2 \le 3394,9$		$85,2x_1 + 430,0x_2 \le 349$
	$-38x_1 + 74, 2x_2 \le 1594, 9$		$x_1 \le 1,7$
15	$f_0(X) = -1,0x_1 - 1,7x_2$	16	$f_0(X) = -2.5x_1 - 4.1x_2$
	$4.7x_1 + 3.1x_2 \ge 12.5$		$-3.5x_1 + 7.2x_2 \ge 25.2$
	$4,4x_1+3,7x_2 \le 43,2$		$8,3x_1 + 2,5x_2 \le 25,2$
	$40,4x_1 - 23,6x_2 \le 63,5$		$-7,3x_1 + 3,8x_2 \le 25,2$
17	$f_0(X) = -3.6x_1 + 1.3x_2$	18	$f_0(X) = -3.0x_1 - 2.3x_2$
	$4,7x_1 + 24,6x_2 \ge 49,1$		$6,3x_1 - 4,5x_2 \ge 24,1$
	$23,4x_1+42,3x_2 \le 193,1$		$1,0x_1 + 8,6x_2 \le 9,9$
	$-3.6x_1 + 17.4x_2 \le 43.5$		$7,2x_1 - 8,1x_2 \le 42,4$
19	$f_0(X) = -1.0x_1 + 1.0x_2$	20	$f_0(X) = -2.3x_1 + 4.5x_2$
	$19,3x_1 + 24,2x_2 \ge 103,2$		$75,1x_1 + 94,2x_2 \ge 206,6$
	$34,2x_1+43,2x_2 \le 384,2$		$34,2x_1 + 12,7x_2 \le 102$
	$3.1x_1 - 8.2x_2 \le 5.2$		$-4,3x_1+23,1x_2 \le 4,6$

Продолжение табл. 2.5

			F
№ варианта	Целевая функция и ограничения	№ варианта	Целевая функция и ограничения
21	$f_0(X) = 0.3x_1 - 1.0x_2$	22	$f_0(X) = -2.6x_1 - 4.6x_2$
	$1,4x_1+3,4x_2 \ge 11,1$		$4.7x_1 + 2.3x_2 \ge 7.0$
	$3.2x_1 + 4.1x_2 \le 34.0$		$4.6x_1 + 2.4x_2 \le 30.0$
	$-2,4x_1+2,4x_2 \le 3,0$		$-4.5x_1 + 2.5x_2 \le 20.0$
	$7,1x_1-8,4x_2 \le 2,2$		$4.3x_1 - 2.6x_2 \le 10.0$
23	$f_0(X) = -1,0x_1 - 1,0x_2$	24	$f_0(X) = 2.0x_1 - 1.0x_2$
	$2.1x_1 + 9.2x_2 \ge 13.0$		$3,4x_1+2,5x_2 \ge 10,0$

№ варианта	Целевая функция и ограничения	№ варианта	Целевая функция и ограничения
	$122.4x_1 + 233.6x_2 \le 683$	·¥ ·· ··	$94.2x_1 + 23.5x_2 \le 231.8$
	$4.5x_1 - 3.1x_2 \le 7.1$		$-12,4x_1 + 8,5x_2 \le 34,6$
25	$f_0(X) = -4.2x_1 + 8.1x_2$	26	$f_0(X) = 3.5x_1 - 6.3x_2$
20	$2.5x_1 + 8.5x_2 \ge 18.4$	20	$\begin{vmatrix} 300(1) & 3500(1) & 5500(2) \\ 2.5x_1 + 9.4x_2 \ge 23.4 \end{vmatrix}$
	$7.3x_1 + 3.1x_2 \le 23.1$		$85.3x_1 + 84.2x_2 \le 384.2$
	$-2.5x_1 + 7.2x_2 \le 14.2$		$-4.6x_1 + 2.5x_2 \le 9.4$
27	$f_0(X) = -4.4x_1 - 5.7x_2$	28	$f_0(X) = -2.3x_1 - 7.2x_2$
	$9.3x_1 + 13.5x_2 \ge 12.6$		$-4.2x_1 + 4.2x_2 \ge 6.8$
	$2.4x_1 + 3.1x_2 \le 9.4$		$3.6x_1 + 6.1x_2 \le 21.5$
	, , , , , , , , , , , , , , , , , , , ,		$2.5x_1 + 4.5x_2 \ge 10.4$
29	$f_0(X) = -2.3x_1 - 2.4x_2$	30	$f_0(X) = 3.0x_1 + 5.0x_2$
	$x_1 \ge 2.0$		$5.7x_1 + 7.5x_2 \ge 50.5$
	$7,4x_1+8,1x_2 \le 84,1$		$6.6x_1 - 5.5x_2 \ge 4.4$
	$-8.5x_1 + 74.0x_2 \le 189.2$		$29.9x_1 + 14.3x_2 \le 387.3$
31	$f_0(X) = -7.4x_1 - 32.4x_2$	32	$f_0(X) = -2.3x_1 - 3.4x_2$
	$75,3x_1 + 0,4x_2 \ge 204,0$		$0.8x_1 + 0.6x_2 \ge 3.1$
	$3,6x_1+3,1x_2 \le 43,0$		$4.6x_1 + 3.1x_2 \le 34.1$
	$53,4x_1 - 23,4x_2 \le 555$		
33	$f_0(X) = -76,1x_1 - 34,6x_2$	34	$f_0(X) = 46,9x_1 - 27,1x_2$
	$-3,4x_1+12,6x_2 \ge 23$		$-3,1x_1 + 67,2x_2 \ge 0$
	$34.0x_1 + 12.6x_2 \le 123$		$x_1 \ge 3, 1, x_2 \le 3, 3$
	$-2.5x_1 + 6.3x_2 \le 22.2$		$5,2x_1+2,4x_2 \le 25,1$
35	$f_0(X) = -4.3x_1 - 3.2x_2$	36	$f_0(X) = -34,4x_1 + 22,2x_2$
	$3,6x_1 + 8,0x_2 \ge 49,1$		$5,2x_1+7,5x_2 \ge 18,6$
	$3,7x_1 + 8,1x_2 \le 59,1$		$45,9x_1 + 76,1x_2 \le 456$
			$-34,1x_1+52,1x_2 \le 42,2$
			$42,1x_1 - 51,1x_2 \le 69,2$
37	$f_0(X) = -23,1x_1 - 34,1x_2$	38	$f_0(X) = 45,2x_1 - 34,1x_2$
	$5,1x_1+3,2x_2 \ge 19,9$		$x_1 \ge 3, 2, x_2 \ge 2, 8$
	$32,9x_1 + 12,7x_2 \le 230$		$9.6x_1 - 3.4x_2 \ge 17.3$
	$x_2 \le 9.6$		$6,2x_1+7,1x_2 \le 52,3$

№ варианта	Целевая функция и ограничения	№ варианта	Целевая функция и ограничения
39	$f_0(X) = -34.7x_1 + 28.9x_2$	40	$f_0(X) = -26.8x_1 + 18.7x_2$
	$4.9x_1 + 8.3x_2 \ge 34.2$		$x_2 \ge 7.2$
	$9.2x_1 + 3.6x_2 \le 45.2$		$45.9x_1 + 12.8x_2 \le 365$
	$-4.5x_1 + 1.4x_2 \le 8.1$		$-46,7x_1 + 23,4x_2 \le 243$
41	$f_0(X) = -34,7x_1 - 40,6x_2$	42	$f_0(X) = 1,0x_1 + 0,3x_2$
	$2.7x_1 + 1.6x_2 \ge 3.1$		$34,6x_1 + 29,1x_2 \ge 186,2$
	$39,2x_1 + 48,7x_2 \le 234,0$		$-6,4x_1+2,6x_2 \le 13,6$
	$4.7x_1 - 6.2x_2 \le 12.5$		$4,2x_1-2,4x_2 \le 12,5$
			$5,2x_1 + 2,8x_2 \le 36,9$
43	$f_0(X) = -34,5x_1 + 23,4x_2$	44	$f_0(X) = 5.0x_1 + 3.0x_2$
	$12,3x_1 + 23,4x_2 \ge 88,8$		$3.5x_1 + 6.3x_2 \ge 34.1$
	$65,2x_1 + 7,9x_2 \le 234,5$		$-3.2x_1 + 8.2x_2 \ge 14.7$
	$3,6x_1 + 34,1x_2 \le 223,4$		$x_2 \le 7$
45	$f_0(X) = -34,1x_1 - 44,1x_2$	46	$f_0(X) = 3.0x_1 + 4.0x_2$
	$3.7x_1 + 1.8x_2 \ge 10.0$		$3.5x_1 + 1.0x_2 \ge 25.1$
	$34,7x_1 + 21,5x_2 \le 267,2$		$-5.2x_1 + 3.0x_2 \ge 10.0$
	$-63,1x_1 + 44,4x_2 \le 274,1$		$2,7x_1 + 3,8x_2 \le 122,3$
47	$f_0(X) = -57,2x_1 - 94,1x_2$	48	$f_0(X) = 2.0x_1 + 3.0x_2$
	$45,2x_1+83,1x_2 \ge 285,2$		$8,3x_1+3,8x_2 \ge 33,3$
	$2,3x_1+1,0x_2 \le 15,5$		$7,3x_1 - 3,1x_2 \ge 7,7, x_2 \ge 2$
			$5,7x_1 + 9,2x_2 \le 97,8$
49	$f_0(X) = -3.5x_1 + 4.7x_2$	50	$f_0(X) = x_1 + 2.5x_2$
	$2 \le x_2 \le 3,1$		$4.6x_1 + 9.3x_2 \ge 77.7$

№	Целевая функция	№	Целевая функция
варианта	и ограничения	варианта	и ограничения
	$3,6x_1 + 9,1x_2 \le 34,2$		$-3,3x_1 + 4,4x_2 \le 5,5$ $33,3x_1 - 4,4x_2 \le 785,3$

Содержание отчета

- 1. Задание на выполнение лабораторной работы.
- 2. Распечатка программы, реализующей метод на ЭВМ, с описанием.
- 3. Результаты решения задачи.
- 4. Рисунок, иллюстрирующий процесс нахождения решения задачи.
- 5. Краткие выводы по работе.

Литература: [15], [16].

3. ВАРИАЦИОННЫЕ ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ

Наряду с задачами, в которых необходимо определить максимальные или минимальные значения некоторой целевой функции, при проектировании новых объектов нередко возникает необходимость нахождения функций, доставляющих экстремум целевому функционалу. Такие задачи имеют место, например, при проектировании трубчатых химических реакторов (здесь требуется найти функцию распределения температуры по длине реактора, максимизирующую производительность), ректификационных колонн, стеклоплавильных печей и многих других объектов.

Для решения таких задач разработаны многочисленные аналитические и численные методы. Преимущество аналитических методов заключается в получении точного решения, недостаток — узкий класс задач, которые могут быть решены этими методами. Численными методами (особенно прямыми) могут быть решены многие задачи, не имеющие аналитического решения.

Простейшая вариационная задача ставится следующим образом.

Пусть функция F(t, x, x') имеет непрерывные частные производные по всем аргументам до второго порядка включительно. Среди всех функций x(t), имеющих непрерывную производную и удовлетворяющих граничным условиям $x(t_0) = x_0$, $x(t_1) = x_1$ найти ту функцию, которая доставляет экстремум функционалу:

$$J[x(t)] = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x(t), x'(t)) dt.$$
 (3.1)

Для того чтобы решить поставленную задачу, необходимо прежде всего познакомиться с определениями приращения и вариации функционала.

Приращением функционала называется величина

$$\Delta J = J[x(t) + \delta x(t)] - J[x(t)], \tag{3.2}$$

где δx – приращение аргумента функционала.

Согласно определению 1 [18], вариация функционала (3.1) имеет вид

$$\delta J = \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial F}{\partial x} \, \delta x + \frac{\partial F}{\partial x'} \, \delta x' \right) dt \,. \tag{3.3}$$

Согласно определению 2 [18], вариацией функционала (3.1) называется значение производной функционала $J[x(t) + L\delta x]$ по параметру L, когда L = 0:

$$\delta J = \frac{\partial}{\partial L} J[x(t) + L \delta x]\Big|_{L=0} . \tag{3.4}$$

Аналитические методы решения вариационных задач основаны на необходимом условии экстремума функционала – обращении в нуль вариации функционала. Рассмотрим аналитические методы для простейшей задачи и более сложных случаев.

Из необходимого условия экстремума функционала выводится следующее утверждение. Для того, чтобы функционал (3.1) достигал на функции x(t) экстремума, необходимо, чтобы эта функция удовлетворяла уравнению Эйлера:

$$\frac{\partial F}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial F}{\partial x'} \right) = 0. \tag{3.5}$$

Если требуется отыскать экстремум функционала, зависящего от производных высшего порядка

$$J[x(t)] = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x(t), x'(t), ..., x^{(n)}(t)) dt,$$
 (3.6)

а граничные условия имеют вид

$$x(t_0) = x_0; \ x'(t_0) = x'_0, ..., \ x^{(n-1)}(t_0) = x_0^{(n-1)};$$

 $x(t_1) = x_1; \ x'(t_1) = x'_1, ..., \ x^{(n-1)}(t_1) = x_1^{(n-1)},$

то экстремалями функционала (3.6) являются функции, полученные при решении уравнения Эйлера-Пуассона

$$\frac{\partial F}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial F}{\partial x'} \right) + \frac{d^2}{dt^2} \left(\frac{\partial F}{\partial x''} \right) - \dots + (-1)^n \frac{d^n}{dt^n} \left(\frac{\partial F}{\partial x^{(n)}} \right) = 0.$$
 (3.7)

Если требуется отыскать экстремум функционала, зависящего от m функций:

$$J[x_1, x_2, ..., x_m] = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x_1, x_2, ..., x_m, x_1', x_2', ..., x_m') dt$$
 (3.8)

при граничных условиях вида

$$x_i(t_0) = x_{i0}; x_i(t_1) = x_{i1}, i = 1, 2, ..., m$$

то экстремали функционала (3.8) находятся из системы уравнений Эйлера

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial F}{\partial x_i'} \right) = 0, \ i = 1, 2, ..., m.$$
 (3.9)

Если требуется отыскать экстремум функционала

$$J[x] = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x, x') dt$$
 (3.10)

при условиях $K[x] = \int\limits_{t_2}^{t_1} G(t, x, x') \, dt = A$, $x(t_0) = x_0$, $x(t_1) = x_1$ (такая задача называется изопериметрической), то

экстремаль функционала (3.10) определяется путем нахождения экстремали функционала вида

$$L = \int_{t_0}^{t_1} [F(t, x, x') + \lambda G(t, x, x')] dt, \qquad (3.11)$$

где λ – некоторая константа.

Если в оптимизационной вариационной задаче граничные условия заданы не в виде точек, а в виде функций, такая задача называется задачей с подвижными границами.

Необходимо отыскать экстремум функционала

$$J[x(t)] = \int_{\gamma} F(t, x, x') dt, \qquad (3.12)$$

определенного на гладких кривых x = x(t), концы которых $A(t_0, x_0)$ и $B(t_1, x_1)$ лежат на кривых: $x = \varphi(t)$ и $x = \Psi(t)$.

Для решения поставленной задачи составляется и решается уравнение Эйлера, в результате чего находится семейство экстремалей $x = f(t, C_1, C_2)$.

Параметры C_1 и C_2 определяются из уравнений:

$$f(t_0, C_1, C_2) = \varphi(t_0); \quad f(t_1, C_1, C_2) = \Psi(t_1)$$
 (3.13)

и из условий трансверсальности:

$$F + (\varphi' - x') \frac{\partial F}{\partial x'} \Big|_{t=t_0} = 0; \quad F + (\Psi' - x') \frac{\partial F}{\partial x'} \Big|_{t=t_1} = 0.$$
 (3.14)

Если задача с подвижными границами ставится для поиска экстремума функционала вида

$$F[x, y] = \int_{\gamma} F(t, x, y, x', y') dt$$

и точка $A(t_0, x_0, y_0)$ закреплена, а другая граничная точка $B(t_1, x_1, y_1)$ может перемещаться по некоторой кривой, заданной уравнениями $x = \varphi(t), \ y = \Psi(t)$, то условие трансверсальности в этом случае принимает вид

$$[F + (\varphi' - x')\frac{\partial F}{\partial x'} + (\psi' - y')\frac{\partial F}{\partial y'}]\Big|_{t=t_1} = 0.$$
 (3.15)

Если точка $B(t_1, x_1, y_1)$ может перемещаться по некоторой поверхности $y = \varphi(x, t)$, то условие трансверсальности запишется в виде двух выражений:

$$(F - x' \frac{\partial F}{\partial x'}) + (\varphi' - y') \frac{\partial F}{\partial y'}) \Big|_{t=t_1} = 0;$$
 (3.16)

$$\left(\frac{\partial F}{\partial x'} + \frac{\partial F}{\partial y'} \frac{\partial \varphi}{\partial x'}\right) \Big|_{t=t_1} = 0.$$
 (3.17)

Как правило, аналитическое решение уравнения Эйлера удается получить лишь в простейших случаях. В большинстве практических случаев используют численные методы – пристрелки и прогонки. Согласно методу пристрелки, исходное дифференциальное уравнение заменяется разностной схемой и подбирается значение первой производной в начальной точке, при которой выполняется граничное условие в конечной точке.

Метод прогонки заключается в двукратном просчете задачи: сначала рассчитываются коэффициенты прогонки, используя которые вычисляются значения искомой функции.

Сложность подынтегральной функции исходного функционала часто не позволяет получить уравнение Эйлера, либо это уравнение получается чрезвычайно громоздким. В таких случаях целесообразно использовать прямые методы решения вариационной задачи, которые заключаются в подборе функции, при которой функционал имеет экстремум. При этом не используется необходимое условие экстремума и не решается уравнение Эйлера.

Прямой метод Ритца заключается в том, что значения функционала рассматриваются не на произвольных функциях, а на возможных линейных комбинациях функций $W_i(t)$: $x_n = \sum_{i=1}^n a_i W_i(t)$ с постоянными коэффициентами a_i .

Функции x_n должны быть допустимыми в рассматриваемой задаче и прежде всего должны удовлетворять граничным условиям.

Прямой метод Канторовича отличается от метода Ритца тем, что допускаются нелинейные относительно искомых параметров $a_1, a_2, ..., a_n$ комбинации функций $W_i(t)$.

Прямые конечно-разностные методы заключаются в том, что решение ищется не на произвольных функциях, а лишь на ломаных, составленных из конечного числа n прямолинейных звеньев с заданными через Δt абсциссами вершин. Таким образом, требуется найти n значений $x_i(t_0 + i \Delta t)$, при которых функционал экстремален

Для приобретения навыков решения вариационных задач выполняются практические и лабораторные работы.

Практическая работа заключается в решении вариационной задачи аналитическим методом; лабораторные – численными методами с использованием ЭВМ. Полученное при выполнении практической работы № 3.1 аналитическое решение оптимизационной вариационной задачи используется в качестве проверочного при выполнении лабораторных работ №№ 3.1–3.3, заключающихся в поиске экстремума того же самого функционала численными методами. В лабораторных работах рассмотрены четыре численных метода: решения уравнения Эйлера, прямые методы Ритца, Канторовича и конечно-разностный метод Эйлера. Большое внимание численным методам объясняется чрезвычайно узким кругом вариационных задач, которые могут быть решены аналитически.

Практическая работа 3.1

ПОИСК ЭКСТРЕМУМА ФУНКЦИОНАЛА. АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ЭЙЛЕРА

Цель: приобретение навыков аналитического решения оптимизационных вариационных задач. **Задание:** найти экстремум и экстремали функционала, решив аналитическим методом уравнение Эйлера.

Общие положения

Рассмотрим примеры составления и решения уравнения Эйлера, Эйлера-Пуассона, системы уравнений Эйлера для различных вариационных задач.

Пусть необходимо отыскать экстремум функционала вида

$$J[x(t)] = \int_{1}^{2} ((x')^{2} - 2tx)dt; \quad x(1) = 0, \ x(2) = -1.$$

В данном случае имеем простейшую вариационную задачу. Для получения уравнения Эйлера запишем:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = -2t, \quad \frac{\partial F}{\partial x'} = 2x'; \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial F}{\partial x'} \right) = \frac{d}{dt} (2x') = 2x''.$$

Уравнение Эйлера имеет вид -2t - 2x'' = 0 или t + x'' = 0.

Общее решение уравнения Эйлера есть: $x(t) = -t^2/6 + C_1t + C_2$.

Граничные условия дают систему уравнений для определения C_1 и C_2 :

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = 1/6; \\ 2C_1 + C_2 = 2/6 \end{cases}$$

откуда $C_1 = 1/6$, $C_2 = 0$. Следовательно, экстремум может достигаться на кривой: $x = t(1 - t^2)/6$.

Рассмотрим теперь пример отыскания экстремума функционала, зависящего от производных высшего порядка.

Пусть, например, требуется найти экстремум функционала

$$J[x(t)] = \int_{0}^{1} (360t^{2}x - (x'')^{2}) dt;$$

 $x(0) = 0; \quad x'(0) = 1; \quad x(1) = 0; \quad x'(1) = 2,5.$

Для получения уравнения Эйлера-Пуассона запишем:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = 360t^2$$
; $\frac{\partial F}{\partial x'} = 0$; $\frac{\partial F}{\partial x''} = -2x''$.

Уравнение Эйлера-Пуассона имеет вид:

$$360t^2 + \frac{d^2}{dt^2}(-2x'') = 0$$
 или $x^{(4)}(t) = 180t^2$.

Его общее решение: $x(t) = 0.5 t^6 + C_1 t^3 + C_2 t^2 + C_3 t + C_4$.

Используя граничные условия, получим: $C_1 = 3/2$; $C_2 = -3$; $C_3 = 1$; $C_4 = 0$; искомая экстремаль: $x(t) = t^6/2 + 3t^3/2 - 3t^2 + 1$.

Рассмотрим далее пример отыскания экстремума функционала, зависящего от m функций.

Пусть, например, требуется отыскать экстремум функционала

$$J[x(t), y(t)] = \int_{1}^{2} ((x')^{2} + y^{2} + (y')^{2}) dt$$

при граничных условиях x(1) = 1; x(2) = 2; y(1) = 0; y(2) = 1. Здесь $F(t, x, x', y, y') = (x')^2 + y^2 + (y')^2$.

Для получения системы уравнений Эйлера запишем:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = 0;$$
 $\frac{\partial F}{\partial x'} = 2x';$ $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial F}{\partial x'} \right) = 2x'';$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = 2y; \quad \frac{\partial F}{\partial y'} = 2y'; \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) = 2y''.$$

Система уравнений Эйлера имеет вид:

$$\begin{cases} -2x'' = 0; \\ 2y - 2y'' = 0 \end{cases}$$
 или
$$\begin{cases} x'' = 0; \\ y - y'' = 0. \end{cases}$$

Решая эту систему, находим:

$$x = C_1 t + C_2$$
; $y = C_3 e^t + C_4 e^{-t}$

Используя граничные условия, получим:

$$C_1 = 1$$
; $C_2 = 0$; $C_3 = 1/(e^2 - 1)$; $C_4 = e^2/(e^2 - 1)$.

Искомые экстремали: x = t; y = sh(t-1)/sh 1, где sh - гиперболический синус.

Рассмотрим теперь пример изопериметрической задачи.

Пусть, например, необходимо отыскать экстремум функционала

$$J[x(t)] = \int_{-a}^{a} x(t) dt, \ x(-a) = x(a) = 0$$

при дополнительном условии, что

$$K[x(t)] = \int_{-a}^{a} \sqrt{1 + (x')^2} dt = A, \quad A > 2a.$$

Составляем вспомогательную функцию $H=F+\lambda G=x+\lambda\sqrt{1+(x')^2}$ и рассматриваем вспомогательный функционал $L=\int\limits_{-a}^a H(t,x,x')\ dt,$ уравнение Эйлера для которого имеет вид $\dfrac{d}{dt}\bigg(\dfrac{\lambda x'}{\sqrt{1+(x')^2}}\bigg)=1,$ откуда $\dfrac{\lambda x'}{\sqrt{1+(x')^2}}=t+C_1.$

Разрешая последнее уравнение относительно х', находим:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{t + C_1}{\sqrt{\lambda^2 + (t + C_1)^2}}.$$

Интегрируя полученное уравнение, имеем $(t + C_1)^2 + (x + C_2)^2 = \lambda^2$.

Постоянные C_1 , C_2 и параметр λ определим из граничных условий и изопериметрического уравнения. Имеем: $C_2{}^2 = \lambda^2 - (C_1 - a)^2$; $C_2{}^2 = \lambda^2 - (C_1 + a)^2$, откуда $C_1 = 0$, $C_2 = \sqrt{\lambda^2 - a}$, так что $x = \sqrt{\lambda^2 - t^2} - \sqrt{\lambda^2 - a^2}$, $x' = -t/\sqrt{\lambda^2 - t^2}$.

Тогда изопериметрическое условие дает:

$$A = \int_{-a}^{a} \lambda dt / \sqrt{\lambda^2 - t^2} = \lambda \arcsin(t/\lambda) \begin{vmatrix} t = a \\ t = -a \end{vmatrix} = 2\lambda \arcsin(a/\lambda)$$

или $a/\lambda = \sin(A/2\lambda)$, откуда находим λ .

Рассмотрим далее пример решения задачи с подвижными границами. Пусть, например, требуется найти расстояние между параболой $x = t^2$ и прямой t - x = 5. Элементарное Δs расстояние между двумя точками на плоскости, координаты которых отличаются на dt и dx, равно:

$$\Delta S = \sqrt{dx^2 + dt^2} \ .$$

Выполним некоторые преобразования:

$$\Delta S = \sqrt{dt^2 + \frac{dx^2}{dt^2}dt^2} = \sqrt{1 + \frac{dx^2}{dt^2}}dt = \sqrt{1 + (x')^2}dt \; .$$

Расстояние между двумя точками на плоскости выразится интегралом

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{1 + (x')^2} dt.$$
 (3.18)

Задача сводится к нахождению экстремального значения интеграла (3.18) при условии, что левый конец экстремали может перемещаться по кривой $x = t^2$, а правый – по прямой x = t - 5. Таким образом, в нашем случае имеем

$$\varphi(t) = t^2; \ \Psi(t) = t - 5$$

Для составления уравнения Эйлера запишем:

$$\partial F/\partial x = 0; \ \partial F/\partial x' = x'/\sqrt{1+(x')^2};$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial F}{\partial x'}\right) = \frac{x''\sqrt{1+(x')^2} - (x')^2x''/\sqrt{1+(x')^2}}{1+(x')^2}.$$

Уравнение Эйлера имеет вид x'' = 0.

Общее решение уравнения Эйлера: $x = C_1 t + C_2$.

Условия трансверсальности имеют вид:

$$\left(\sqrt{1+(x')^2} + (2t-x')\frac{x'}{\sqrt{1+(x')^2}}\right)\bigg|_{t=t_0} = 0;$$

$$\left(\sqrt{1+(x')^2} + (1-x')\frac{x'}{\sqrt{1+(x')^2}}\right)\bigg|_{t=t_1} = 0.$$

Так как из (3.19) $x' = C_1$, получим:

$$\begin{split} &\sqrt{1+C_1^2} + (2t_0 - C_1) \, \frac{C_1}{\sqrt{1+C_1^2}} = 0; \\ &\sqrt{1+C_1^2} + (1-C_1) \, \frac{C_1}{\sqrt{1+C_1^2}} = 0. \end{split}$$

Уравнения (3.13) в данном случае принимают вид

$$C_1t_0 + C_2 = t_0^2$$
; $C_1t_1 + C_2 = t_1 - 5$.

В результате проведенных преобразований имеем четыре уравнения с четырьмя неизвестными C_1 , C_2 , t_0 , t_1 , решив которые получим:

$$C_1 = -1$$
; $C_2 = 3/4$; $t_0 = 1/2$; $t_1 = 23/8$.

Окончательно имеем уравнение экстремали x = -t + 3/4 и расстояние между параболой и прямой:

$$S = \int_{1/2}^{23/8} \sqrt{1 - (-1)^2} dt = \frac{19\sqrt{2}}{8}.$$

Порядок выполнения работы

1. Составить уравнение Эйлера (или Эйлера-Пуассона, или систему уравнений Эйлера – в зависимости от варианта) для функционала, приведенного в табл. 3.1. Для вариантов 19 – 21 заданы дополнительные уравнения свя-

зи: 19)
$$\int_{0}^{1} x dt = 3$$
; 20) $\int_{0}^{1} x^{2} dt = 2$; 21) $\int_{0}^{1} (x - (x')^{2}) dt = 1/12$.

- 2. Решить полученное уравнение Эйлера аналитическим методом.
- 3. Построить график полученной экстремали (или экстремалей если искомых функций несколько).
- 4. Вычислить экстремальное значение функционала.
- 5. Определить, является ли найденный экстремум минимумом или максимумом. Для этого подставить в функционал любую функцию, отличную от экстремали, удовлетворяющую граничным условиям, вычислить функционал и сравнить полученное значение с экстремальным.

Содержание отчета

Подробное описание последовательности получения уравнения Эйлера (или уравнения Эйлера-Пуассона, или системы уравнений Эйлера) и его решения. График полученной экстремали. Экстремальное значение функционала.

Контрольные вопросы

- 1. Как формулируется необходимое условие экстремума функционала?
- 2. В каких случаях экстремали, найденные из уравнения Эйлера, являются решением исходной вариационной залачи?
 - 3. Каковы частные случаи интегрируемости уравнения Эйлера?
- 4. Каковы методы решения вариационных задач с голономными, неголономными и изопериметрическими связями?

Литература: [18], [19].

Таблица 3.1

№ вари-анта	Функционал	Граничные условия
1	$J[x] = \int_{-1}^{0} (12tx - (x')^{2}) dt$	x(-1) = 1; x(0) = 0
2	$J[x] = \int_{1}^{2} ((x')^{2} + 2xx' + x^{2}) dt$	x(1) = 1; x(2) = 0
3	$J[x] = \int_{0}^{1} \sqrt{x(1+(x')^{2})} dt$	$x(0) = 1/\sqrt{2} ;$ $x(1) = 1/\sqrt{2}$
4	$J[x] = \int_{0}^{1} x(x')^2 dt$	$x(0) = 1;$ $x(1) = \sqrt[3]{4}$
5	$J[x] = \int_{0}^{\pi} (4x\cos t + (x')^{2} - x^{2}) dt$	x(0) = 0; $x(\pi) = 0$
6	$J[x] = \int_{0}^{1} ((x')^{2} - x^{2} - x)e^{2t}dt$	x(0) = 0; x(1) = 1/e
7	$J[x] = \int_{-1}^{1} ((x')^2 - 2tx) dt$	x(-1) = -1; x(1) = 1

№ вари-анта	Функционал	Граничные условия
8	$J[x] = \int_{-1}^{0} ((x')^{2} - 2tx) dt$	x(-1) = 0; x(0) = 2
9	$J[x] = \int_{1}^{e} (t(x')^{2} + xx') dt$	x(1) = 0; x(e) = 1
10	$J[x] = \int_{0}^{1} (x^{2} + 2(x')^{2} + (x'')^{2}) dt$	x(0) = 0; x(1) = 0; x'(0) = 1; $x'(1) = -\sinh 1$
11	$J[x] = \int_{-1}^{0} (240x - (x''')^{2}) dt$	x(-1) = 1; $x(0) = 0;$ $x'(-1) = -4,5;$ $x'(0) = 0;$ $x''(-1) = 16;$
12	$J[x] = \int_{a}^{b} (x + (x'')^2) dt$	x''(0) = 0 x(a) = 0; x(b) = 1; x'(a) = 0; x'(b) = 1
13	$J[x] = \int_{0}^{1} ((x')^{2} + (x'')^{2}) dt$	x(0) = 0; x(1) = sh 1; x'(0) = 1; x'(1) = ch 1
14	$J[x] = 0.5 \int_{0}^{1} (x'')^{2} dt$	x(0) = 0; x'(0) = 0; x'(1) = 1; x(1) = 1
15	$J[x,y] = \int_{0}^{\pi/4} (2y - 4x^2 + (x')^2 - (y')^2) dt$	x(0) = 0; $x(\pi/4) = 1;$ y(0) = 0; $y(\pi/4) = 1$
16	$J[x,y] = \int_{-1}^{1} (2tx - (x')^2 + \frac{(y')^3}{3}) dt$	x(1) = 0; x(-1) = 2; y(1) = 1; y(-1) = -1

Продолжение табл. 3.1

№ вари-анта	Функционал	Граничные условия
17	$J[x,y] = \int_{0}^{\pi/2} ((x')^{2} + (y')^{2} - 2xy) dt$	x(0) = 0; $x(\pi/2) = 1;$ y(0) = 0; $y(\pi/2) = 1$
18	$J[x,y] = \int_{0}^{1} ((x')^{2} + (y')^{2} + 2x) dt$	x(0) = 1; x(1) = 3/2; y(0) = 0; y(1) = 1
19	$J[x] = \int_0^1 (x')^2 dt$	x(0) = 1; x(1) = 6
20	$J[x] = \int_{0}^{1} (t^{2} - (x')^{2}) dt$	x(0) = 0; x(1) = 0
21	$J[x] = \int_0^1 (x')^2 dt$	x(0) = 0; x(1) = 1/4
22	Найти кратчайшее расстояние от точки A до эллипса	$A (1,0);$ эллипс $4x^2 + 9y^2 = 36$
23	Найти кратчайшее расстояние от точки A до параболы	$A(-1,5);$ парабола $x^2 = t$

№ вари-анта	Функционал	Граничные условия
24	Найти кратчайшее расстояние	окружность:
	от окружности до прямой	$x^2 + t^2 = 1;$
		прямая:
		x + t = 4 A(-1, 3);
25	Найти кратчайшее расстояние	
	от точки A до прямой	прямая: $x = 1 - 3t$
26	Найти кратчайшее расстояние	M(0,0);
	от точки M до гиперболы	гипербола: $x = 1/t$
27	Найти кратчайшее расстояние	M(0,2)
20	от точки M до кривой	кривая: $x = t^3$
28	Найти кратчайшее расстояние между кривыми	кривая 1: $x^2/25 + y^2/16 = 1$;
		кривая 2: $x^2 + y^2 = 4$
	1	x + y = 4
29	$J[x] = \int_{-\infty}^{1} \frac{\sqrt{1 + (x')^2}}{x} dt$	x(0) = 1;
2)	$\int [x] - \int \frac{1}{x} dx$	x(1) = 2
	0	Продолжение тав
№ вари-анта	Функционал	Граничные
Via Bupir uniu	·	условия
30	$I[x] = \int_{-\infty}^{2} x'(1+t^2x') dt$	x(1) = 5;
30	$\int_{1}^{\infty} \int_{1}^{\infty} x \left(1 + i \cdot x\right) dt$	x(2) = 10
	1	x(0) = 0;
31	$J[x] = \int (tx' + (x')^2) dt$	x(0) = 0, $x(1) = 5$
	$J[x] = \int_{1}^{2} x'(1+t^{2}x') dt$ $J[x] = \int_{0}^{1} (tx' + (x')^{2}) dt$ 2	λ(1) 3
22	$\int_{0}^{2} \left(\frac{2}{2} + \left(\frac{2}{2} \right) \right) dx$	x(1) = 1;
32	$J[x] = \int_{1}^{2} (x^2 + (x')^2 - 2x \sin t) dt$	x(2) = 0
	1 2	x(0) = 1;
33	$J[x] = \int_{0}^{1} (x^{2} + 2txx' + (x' + t)^{3}) dt$	x(1) = 1,5
		··(1) = 0·
34	$J[x] = \int \frac{1+x^2}{(x')^2} dt$	x(1) = 0;
	$\int_{1}^{3} (x)^{2}$	x(2) = 1
	$J[x] = \int_{1}^{2} \frac{1+x^{2}}{(x')^{2}} dt$ $J[x] = \int_{0}^{1} (xt+x^{2}-2(x')^{2}) dt$	x(0) = 1;
35	$J[x] = \int (xt + x^2 - 2(x')^2)dt$	x(1) = 2
	0	3(1) 2
	2 c 2 c 2	x(1) = 0;
36	$J[x] = \int (t^{2}(x')^{2} + 2x^{2} + 2tx) dt$	x(1) = 0, $x(2) = 1$
	1	` `
37	$J[x] = \int_{1}^{2} (t^{2}(x')^{2} + 2x^{2} + 2tx) dt$ $J[y, z] = \int_{0}^{x_{1}} ((y')^{2} + (z')^{2} + 2yz) dx$	y(0) = 0;
		z(0) = 0.
	0	Точка $B(x_1, y_1, z_1)$
		перемещается
		по плоскости $x = \pi/2$
	$\pi/2$	y(0)=0;
38	$J[y, z] = \int_{0}^{\pi/2} (2yz - 2y^2 + (y')^2 - (z')^2) dt$	$y(\pi/2)=1;$
	0	z(0)=0;
		$z(\pi/2) = -1$
39	$ I[x] = \int_{1}^{1} ((x')^{2} + 2xx' - 16x^{2}) dt$	x(0) = 5;
	$\int_{0}^{\pi} \left[\int_{0}^{\pi} \left(\frac{1}{2} \right) \right] dx = \int_{0}^{\pi} \left(\frac{1}{2} \right) dx$	x(1) = 10
	U	
	2	$\omega(0) = 7$
40	$ x = \int_{1}^{2} (16x^{2} + (x'')^{2} + x^{2}) dt$	x(0) = 7;
40	$J[x] = \int_{0}^{1} ((x')^{2} + 2xx' - 16x^{2}) dt$ $J[x] = \int_{0}^{2} (16x^{2} - (x'')^{2} + t^{2}) dt$	x(0) = 7; x(2) = 106; x'(0) = -2;

Продолжение табл. 3.1

условия

№ вари-анта	Функционал	Граничные условия
41	$J[x] = \int_{0}^{1} (2xt + (x''')^{2}) dt$	x(0) = 0; $x'(0) = 1;$ $x''(0) = 1;$ $x(1) = 1;$ $x'(1) = 0;$ $x''(1) = 1,5$
42	$J[y] = \int_{1}^{2} \frac{(y')^2}{t^3} dt$	y(1) = 1; y(2) = 4
43	$J[x] = \int_{0}^{1} (x^{2} + (x')^{2} + 2xe^{t}) dt$	x(0) = 0; x(1) = 2
44	$J[x] = \int_{0}^{\pi/2} (x^2 - (x')^2 - 2x\sin t) dt$	x(0) = 0; $x(\pi/2) = 2$
45	$J[x] = \int_{0}^{1} \left(x^{2} + (x')^{2} + \frac{2x}{\cosh t}\right) dt$	x(0) = 0; x(1) = 1
46	$J[x] = \int_{0}^{\pi/2} ((x'')^2 - 2(x')^2 + x^2 - 2x \sin t) dt$	x(0) = 0; x'(0) = 1; $x(\pi/2) = 1;$ $x'(\pi/2) = 2$
47	$J[x] = \int_{0}^{\pi/\sqrt{3}} ((x''')^{2} + x^{2} - 2xt^{3}) dt$	$x(0) = 1;$ $x'(0) = 1;$ $x''(0) = 1,5$ $x(\pi/\sqrt{3}) = 0;$ $x'(\pi/\sqrt{3}) = 2;$ $x''(\pi/\sqrt{3}) = 1$
48	$J[y, z] = \int_{0}^{\pi/2} ((y')^{2} + (z')^{2} + 2yz) dt$	y(0) = 0; z(0) = 0; $z(\pi/2) = 1;$ $z(\pi/2) = -1$
49	$J[y] = \int_{0}^{1} ((y')^{2} + yy' + 0.5y^{2}) dt$	y(0) = 0; y(1) = 2
50	$J[x] = \int_{0}^{1} (tx + x^{2} + 2x^{2}(x')^{2}) dt$	x(0) = 1; x(1) = 2

Лабораторная работа 3.2

ПОИСК ЭКСТРЕМУМА ФУНКЦИОНАЛА. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ЭЙЛЕРА

Цель: приобретение навыков численного решения краевого дифференциального уравнения Эйлера. *Задание*: найти экстремум и экстремали функционала, решив численным методом уравнение Эйлера.

Общие положения

Уравнение Эйлера (3.5), Эйлера-Пуассона (3.7), а также система уравнений Эйлера (3.9) являются дифференциальными уравнениями второго и более высокого порядков и интегрируются в конечном виде лишь в исключительных простейших случаях. Как правило, аналитическое решение получить не удается, поэтому используют численные методы.

Так как краевые условия исходной вариационной задачи задаются на обеих границах, то для численного решения уравнения Эйлера используют методы пристрелки и прогонки.

В случае решения уравнения Эйлера-Пуассона по методу пристрелки, следует подбирать на левой границе значения производных от n-го до 2n-го порядков (здесь n – порядок производной в подынтегральной функции заданного функционала). При этом сначала подбирается значение производной 2n-го порядка, при котором выполняется граничное условие в конечной точке для производной (n – 1)-го порядка, далее подбирается значение производной (2n – 1)-го порядка, при котором выполняется граничное условие в конечной точке для производной (n – n)-го порядка и т.д.

В случае решения задачи с подвижными границами дополнительно подбирается значение t_0 , а в случае изопериметрической задачи – значение λ .

Подбор значений производной на левом конце интегрирования, значения t_0 для задачи с подвижными границами, значения λ в изопериметрической задаче осуществляется любым методом нелинейного программирования.

После численного решения задачи, найденная табличная функция используется для вычисления значения функционала по методу прямоугольников, трапеций или Симпсона.

Порядок выполнения работы

- 1. Составить структурную схему алгоритма решения уравнения Эйлера, Эйлера-Пуассона или системы уравнений Эйлера, составленных при выполнении практической работы 3.1, методом пристрелки или прогонки. Шаг интегрирования использовать не менее 0,01 от интервала интегрирования.
 - 2. Подготовить программу для ЭВМ, реализующую алгоритм из п. 1.
- 3. Найти экстремали и построить их графики в тех же координатах, которые использовались в практической работе 3.1.
- 4. Вычислить значение функционала для найденной численно экстремали и сравнить его с истинным значением, полученным аналитическим методом.

Содержание отчета

Структурная схема алгоритма решения задачи. Графики полученных экстремалей. Экстремальное значение функционала.

Контрольные вопросы

- 1. Какие методы используются для численного решения краевых задач?
- 2. В чем заключаются особенности численного решения уравнения Эйлера при наличии уравнении связи голономного и неголономного типа?

Литература: [20], [21].

Лабораторная работа 3.2

ПОИСК ЭКСТРЕМУМА ФУНКЦИОНАЛА ПРЯМЫМИ МЕТОДАМИ РИТЦА И КАНТОРОВИЧА

Цель: приобретение навыков решения оптимизационных вариационных задач прямыми методами. **Задание:** найти экстремум и экстремали функционала прямыми методами Ритца или Канторовича.

Общие положения

Сложность подынтегральной функции исходного функционала часто не позволяет получить уравнение Эйлера, либо это уравнение получается чрезвычайно громоздким. В таких случаях целесообразно использовать прямые методы решения вариационной задачи, которые заключаются в подборе функции, при которой функционал имеет экстремум. При этом не используется необходимое условие экстремума и не решается уравнение Эйлера.

Метод Ритца заключается в том, что значения функционала рассматриваются не на произвольных функциях, а на возможных линейных комбинациях функций $W_i(t)$.

Для выбора функций W_i может быть использован следующий подход. Выбирается одна функция $W_0(t)$, которая удовлетворяет заданным граничным условиям:

$$W_0(t_0) = x_0; \ W_0(t_1) = x_1.$$

Все остальные функции $W_i(t)$ выбираются из условия

$$W_{i}\left(t_{0}\right) =W_{i}\left(t_{1}\right) =0,$$

и решение ищется среди функций

$$x_n = \sum_{i=1}^n a_i W_i(t) + W_0(t) .$$

Нулевые значения в граничных точках имеют, например, функции вида

$$W_i(t) = (t - t_0)(t - t_1)\varphi_i(t)$$
 или $W_i(t) = \sin(i\pi(t - t_0)/(t - t_0))\varphi_i(t)$,

где $\varphi_i(t)$ – произвольные непрерывные функции.

В случае, если подынтегральная функция исходного функционала зависит от производных высших порядков, выбор функций W_i усложняется. Пусть, например, требуется решить задачу (3.6). В этом случае функция $W_0(t)$ должна удовлетворять 2n граничным условиям; а функция $W_i(t)$ должны выбираться из условий:

$$W_i(t_0) = W_i(t_1) = 0;$$

 $W_i'(t_0) = W_i'(t_1) = 0;$
 $W_i^{(n-1)}(t_0) = W_i^{(n-1)}(t_1) = 0.$

Этим условиям удовлетворяют, например, функции вида

$$W_i(t) = (t - t_0)^n (t - t_1)^n \varphi_i(t),$$

где $\varphi_I(t)$ – произвольные непрерывные функции.

В задаче с подвижными границами (3.12), после задания некоторой функции x_n и задания начальных приближений коэффициентов a_i , требуется дополнительно решать уравнение $x_n(t) = \varphi(t)$, из которого определяют левую границу (t_0, x_0) , и уравнение $x_n(t) = \psi(t)$, из которого определяют правую границу (t_1, x_1) интегрирования функционала.

В задаче со связями (3.10) составляется вспомогательный функционал (3.11), для которого методом Ритца ищется экстремаль, при этом к n искомым коэффициентам $a_1, a_2, ..., a_n$ добавляются n+1 неизвестные λ_i .

Порядок выполнения работы

- 1. Составить структурную схему алгоритма нахождения экстремума функционала, приведенного в табл. 3.1, методом Ритца (четные варианты) и методом Канторовича (нечетные варианты).
- 2. Подобрать три функции x_n : n = 2, 3, 4 (здесь n количество искомых коэффициентов), удовлетворяющие граничным условиям.
 - 3. Составить программу для вычислительной машины, реализующую алгоритм из п. 1.
 - 4. Найти экстремум функционала и экстремали для n = 2, 3, 4.
- 5. Для каждого решения построить графики экстремалей в тех же координатах, которые использовались в практической работе 3.1.

Содержание отчета

Структурная схема алгоритма решения задачи. Выбранные экстремали с найденными коэффициентами и их графики для n = 2, 3, 4. Экстремальные значения функционала для n = 2, 3, 4.

Контрольные вопросы

- 1. Какие требования предъявляются к функциям, используемым в прямых методах Ритца и Канторовича?
- 2. Какой из прямых методов решения вариационных задач позволяет получить решение с меньшим количеством искомых коэффициентов?
 - 3. При каких условиях решение, найденное прямым методом, стремится к точному?
- 4. Какой из методов (Ритца или Канторовича) требует больших вычислительных затрат при его реализации?

Литература: [18], [22].

Лабораторная работа 3.3

ПОИСК ЭКСТРЕМУМА ФУНКЦИОНАЛА ПРЯМЫМ МЕТОДОМ ЛОКАЛЬНЫХ ВАРИАЦИЙ

Цель: приобретение навыков решения оптимизационных вариационных задач прямыми конечноразностными методами.

Задание: найти экстремум и экстремали функционала прямым методом локальных вариаций.

Общие положения

Прямые конечно-разностные методы заключаются в том, что решение ищется не на произвольных функциях, а лишь на ломаных, составленных из конечного числа n прямолинейных звеньев с заданными через Δt абсциссами вершин. Таким образом, требуется найти n значений $x_i(t_0+i\Delta t)$, при которых функционал экстремален. Задача поиска непрерывной функции сводится к более простой задаче отыскания n значений этой функции.

Согласно методу локальных вариаций, заданный интервал интегрирования $[t_0, t_1]$ разбивается на n отрезков и задаются начальные приближения $x_{10}, x_{20}, ..., x_{n0}$ значений функции. Затем n-1 значение x фиксируется, а x_1 меняется до тех пор, пока функционал не достигнет экстремума. Далее меняется x_2 и т.д. Метод аналогичен методу покоординатного спуска нелинейного программирования.

В задаче с подвижными границами (3.12) алгоритм несколько усложняется. Задается начальное приближение t_0 и определяется $x_0 = \varphi(t_0)$. Далее задается t_1 , и находится $x_1 = \psi(t_1)$. После этого отрезок $[t_0, t_1]$ разбивается на n интервалов и методом локальных вариаций находятся значения $x_1, x_2, ..., x_n$. Далее меняются значения t_0, t_1 до тех пор, пока функционал не достигнет экстремума.

В задаче со связями (3.10) составляется вспомогательный функционал (3.11) и методом локальных вариаций находятся значения $x_1, x_2, ..., x_n$ и λ , при которых функционал (3.11) экстремален.

Порядок выполнения работы

- 1. Составить структурную схему алгоритма нахождения экстремума функционала, приведенного табл. 3.1, методом локальных вариаций.
 - 2. Составить программу для вычислительной машины, реализующую алгоритм из п. 1.
- 3. Найти экстремум функционала и экстремали для трех случаев: n = 3, $\Delta t = (t_1 t_0)/3$; n = 4, $\Delta t = (t_1 t_0)/4$; n = 5, $\Delta t = (t_1 t_0)/5$.
- 4. Для каждого решения построить графики экстремалей в тех же координатах, которые использовались в практической работе 3.1.

Содержание отчета

Структурная схема алгоритма решения задачи. Графики найденных экстремалей для n = 3, 4, 5. Экстремальные значения функционала для n = 3, 4, 5.

Контрольные вопросы

- 1. Каковы особенности использования конечно-разностного метода Эйлера в задачах с голономными и неголономными связями?
 - 2. При каких условиях решение, найденное методом локальных вариаций, стремится к точному?
 - 3. Какие методы относятся к прямым конечно-разностным методам решения вариационных задач?

Литература: [18].

КУРСОВАЯ РАБОТА

Курсовая работа по дисциплине «Модели и методы анализа проектных решений» предусматривает построение математической модели заданного проектируемого объекта, оптимизацию проектируемого объекта и проверку его работоспособности методом имитационного моделирования. Курсовая работа способствует закреплению лекционного материала и навыков, полученных на лабораторных занятиях, а также развитию умения работать со специальной литературой.

Каждый студент должен выполнить индивидуальное задание в течение семестра с использованием вычислительной техники.

Выполнение курсовой работы заключается в построении математической модели проектируемого объекта, разработке алгоритмов оптимизации и имитационного моделирования, составлении и отладке программ для решения уравнений математической модели, задач оптимизации и имитационного моделирования и расчете заданий по полученным программам. Работа всех программ демонстрируется преподавателю, после чего оформляется отчет, который должен иметь объем порядка 20–30 страниц и состоять из ряда обязательных разделов.

СОДЕРЖАНИЕ ОБЯЗАТЕЛЬНЫХ РАЗДЕЛОВ КУРСОВОЙ РАБОТЫ

- 1. Введение. Краткое описание сущности поставленной задачи.
- 2. Объект проектирования, его особенности. При необходимости дать схему объекта. Привести постановку задачи оптимального проектирования и обосновать необходимость построения математической модели для связи критерия с варьируемыми параметрами.
- 3. *Математическая модель заданного объекта*. Описать построение математической модели аналитическим методом в следующей последовательности:
 - структурная схема объекта и принятие допущений;
 - составление и вывод уравнений математической модели отдельных звеньев и всего объекта в целом;
- определение параметров уравнений математической модели (с обязательным указанием литературных источников);
 - описание методов решения систем уравнений модели.

Здесь же дать исходные данные и результаты расчета нескольких значений выходной величины (критерия). Сделать вывод о правильности математической модели.

- 4. *Исследование метода оптимизации*. Привести блок-схему алгоритма метода оптимизации, определенного в задании, его описание. Указать исследуемую функцию, значения переменных и функции в точке экстремума, а также результаты расчета и выводы относительно работоспособности метода оптимизации.
- 5. Оптимизация объекта проектирования. Описать процесс оптимизации объекта отлаженным на предыдущем этапе методом с использованием полученной математической модели, привести результаты расчета: оптимальные значения варьируемых параметров и критерия.
- 6. Проверка работоспособности спроектированного объекта методом имитационного моделирования, включающая построение генератора случайных процессов с заданными характеристиками. Описать имитационный эксперимент, его результаты графики изменения во времени входной координаты, задаваемой генератором случайных процессов, и выходной координаты, полученной в результате расчета.
 - 7. Выводы. Кратко обобщить основные результаты работы.
- 8. *Литература*. Указать литературные источники, используемые при выполнении курсовой работы в соответствии с ГОСТ 7.1–2003.
- 9. Приложение: распечатки программ оптимизации объекта по математической модели и имитационного моделирования, их описание согласно стандарту единой системы программной документации и распечатки результатов расчетов.

Описание программы должно содержать следующие разделы:

- общие сведения (обозначение и наименование программы, языки программирования, на которых написана программа);
 - функциональное назначение;
- описание логической структуры (программа разбивается на логически законченные фрагменты циклы, подпрограммы, ветвления, которые кратко описываются);
 - используемые технические средства;
 - вызов и загрузка программы;
 - входные данные;
 - выходные данные.

Выполнение курсовой работы следует начинать с изучения заданного объекта проектирования по литературным источникам. Выявить его особенности, протекающие в нем процессы, конструкцию. Далее осуществить построение математической модели заданного объекта для связи критерия оптимизации с варьируемыми параметрами. Например, если в качестве критерия задана производительность PR целевого продукта, а варьируемыми параметрами являются температура T в аппарате и его объем V, то математическая модель будет представлять систему уравнений, связывающих PR с T и V.

Затем необходимо составить программу решения системы уравнений математической модели, рассчитать несколько значений выходной величины (критерия) при различных значениях варьируемых переменных, взятых из заданного диапазона. Анализируя результаты расчета, сделать вывод о правильности математической модели.

При оптимизации следует использовать модель динамики для объектов с сосредоточенными координатами, модель статики для объектов с распределенными координатами. При имитационном моделировании для всех объектов использовать модель динамики.

При выполнении расчетов по математической модели динамики интегрирование осуществлять до установления статического режима, определяемого по моменту времени, в который значения концентраций всех веществ на предыдущем и последующем шагах интегрирования отличаются менее, чем на 0,01 %.

Значения температуры, используемые для вычисления констант скорости реакции по уравнению Аррениуса, подставлять в градусах Кельвина.

Для программной реализации и исследования метода оптимизации далее следует составить блок-схему алгоритма метода оптимизации, определенного в задании, программу, реализующую метод оптимизации. Провести исследование работы метода на контрольном примере, использующем функцию Розенброка или аналогичную функцию с заранее известной точкой экстремума. В случае, если метод сходится к экстремуму правильно, делать вывод о его работоспособности.

Затем отлаженным методом оптимизируется объект проектирования по заданному критерию с использованием полученной математической модели. При этом на место процедуры-функции, на которой исследовался метод оптимизации, ставится процедура-функция решения системы уравнений математической модели.

В качестве примера рассмотрим следующую задачу оптимизации. Найти методом простого перебора температуру T в заданном объекте и его объем V, при которых производительность PR объекта будет максимальной. Пусть задан объект, гидродинамический режим в котором близок к идеальному смешению, а протекающий процесс описывается следующей обратимой реакцией:

$$C_1 + 2C_2 \xrightarrow[k_2]{k_1} C_3.$$

Здесь C_1 , C_2 , C_3 – концентрации участвующих в реакции веществ; k_1 , k_2 – константы скорости прямой и обратной реакций.

Для связи варьируемых переменных V и T с критерием оптимизации PR запишем систему уравнений динамики данного объекта:

$$\tau_{\rm s} = V/v; \tag{4.1}$$

$$k_1 = A_1 \exp(-E_1/RT);$$
 (4.2)

$$k_2 = A_2 \exp(-E_2/RT);$$
 (4.3)

$$dC_1/d\tau = 1/\tau_s (C_{1BX} - C_1) - k_1 C_1 C_2 + k_2 C_3;$$
(4.4)

$$dC_2/d\tau = 1/\tau_s (C_{2BX} - C_2) - 2k_1C_1C_2 + 2k_2C_3;$$
 (4.5)

$$dC_3/d\tau = -1/\tau_s C_3 + k_1 C_1 C_2 - k_2 C_3; \tag{4.6}$$

$$PR = C_3 \nu \rho. \tag{4.7}$$

Здесь τ – текущее время; $C_{1\text{вх}}$, $C_{2\text{вх}}$ – концентрации поступающих на вход аппарата реагентов; τ_s – среднее время пребывания реакционной среды в аппарате; ν – объемный расход реакционной среды через аппарат; A_1 , A_2 – предэкспоненциальные множители; E_1 , E_2 – энергии активации; R – универсальная газовая постоянная; ρ – средняя плотность реакционной среды.

Оптимизацию заданного объекта будем осуществлять методом простого перебора, структурная схема алгоритма которого представлена на рис. 4.1.

В блоке 2 осуществляется ввод данных, необходимых для решения задачи: входные координаты и параметры уравнений математической модели A_1 , A_2 , E_1 , E_2 , R, $C_{1\text{вx}}$, $C_{2\text{вx}}$, v, ρ , шаг интегрирования $d\tau$, точность вычисления ϵ , а также границы изменения варьируемых координат T_0 , T_1 , V_0 , V_1 и значения шагов по варьируемым координатам ΔT , ΔV .

В блоках 3–13 реализован алгоритм простого перебора всех значений варьируемых координат в границах T_0 , T_1 и V_0 , V_1 с шагами ΔT и ΔV . На каждом шаге осуществляется обращение к подпрограмме «**MM**» расчета производительности PR_1 по математической модели. Если полученное значение производительности превышает максимальное среди всех предыдущих значений, в блоке 9 осуществляется его запоминание, а также фиксируются значения T и V, при которых достигнуто максимальное значение производительности.

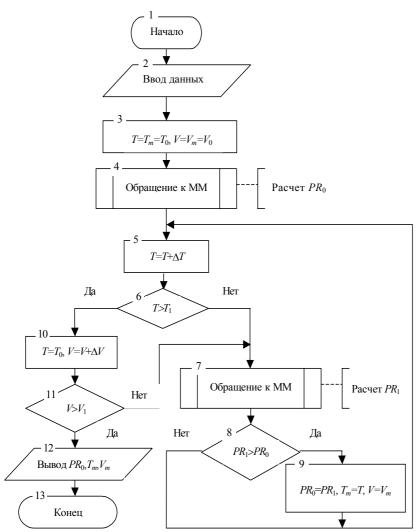


Рис. 4.1. Структурная схема оптимизации объекта по математической модели

Структурная схема подпрограммы «**MM**» решения системы уравнений математической модели представлена на рис. 4.2.

В блоках 2, 3 по значениям T и V, передаваемым из вызывающей программы, рассчитываются величины среднего времени пребывания τ_s и констант k_1 , k_2 скоростей прямой и обратной реакций по уравнениям (4.1) – (4.3).

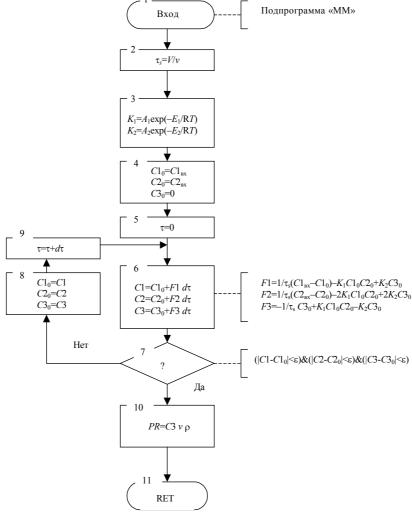


Рис. 4.2. Структурная схема подпрограммы «ММ» решения системы уравнений математической модели

В блоках 5–9 организован цикл решения системы дифференциальных уравнений (4.4) – (4.6) методом Эйлера. Интегрирование завершается при выполнении условия, когда значения концентраций C_1 , C_2 , C_3 на предыдущем и последующем шагах интегрирования отличаются менее, чем на заданную величину ε (блок 7).

В блоке 10 рассчитывается производительность PR по уравнению (4.7), значение которой возвращается в вызывающую программу.

Результатом работы программы оптимизации объекта являются значения T_m , V_m , при которых производительность PR имеет максимальное значение.

Завершающим этапом выполнения курсовой работы является проверка работоспособности спроектированного объекта методом имитационного моделирования.

Для проведения имитационного эксперимента программно реализуются генераторы случайных процессов с заданными характеристиками. По математической модели динамики, оптимальные параметры которой найдены на этапе оптимизации, рассчитываются значения выходной координаты объекта (например, концентрации целевого продукта на выходе) при поступлении на вход значений, вырабатываемых генератором случайных процессов. По виду изменений выходной координаты делается вывод о работоспособности спроектированного объекта.

Таким образом, в результате выполнения курсовой работы находятся оптимальные параметры проектируемого объекта — элементы конструкции (объем, длина трубы, количество тарелок и т.д.), входные координаты (температура, расход, концентрация, ток и т.д.) и проверяется работоспособность спроектированного объекта.

ЗАДАНИЯ ДЛЯ КУРСОВОЙ РАБОТЫ

При описании заданий используются следующие обозначения: α_i — порядок i-й реакции; A_i , E_i — предэкспоненциальный множитель и энергия активации уравнения Аррениуса для вычисления константы скорости i-й реакции; ρ — средняя плотность реакционной среды; v, m — соответственно, объемный и массовый расход реакционной среды через аппарат; Q_i — тепловой эффект i-й реакции; H — высота аппарата; D — диаметр аппарата; L — длина трубы аппарата; C_i — концентрация i-го компонента реакционной среды; y — степень превращения; I — ток; V — объем; F — площадь поверхности теплообмена; α_i — коэффициент теплоотдачи; k_i — коэффициент теплопередачи; T — температура реакционной среды; T — температура теплоносителя; T — скорость движения реакционной среды через аппарат; T — масса реакционной среды в

аппарате; τ — время; δ — толщина электрохимического покрытия; \mathcal{G} — электрохимический эквивалент; i — плотность тока; \mathbf{B}_{T} — выход по току; S — площадь катода; X — соотношение исходных компонентов; k_{M} — коэффициент массоотдачи; PR — производительность; \mathbf{U} — цена; M_{O} — математическое ожидание входной координаты; K — корреляционная функция входной координаты; dt — аргумент корреляционной функции, которая показывает вероятностную связь значений случайного процесса, отстоящих на интервал dt; μ_i — молекулярная масса i-го компонента реакционной среды.

Вариант 1. Найти методом Ритца распределение температуры по длине трубчатого реактора синтеза полиэтилена (используя линейный закон $T = T_0 + T_1 l$), при котором длина трубы реактора будет минимальной:

$$2000 \text{ C}_2\text{H}_4 \xrightarrow{\quad k \quad} (-\text{C}_2\text{H}_4-)_{2000};$$

$$\alpha = 1; E = 68\ 000\ \text{Дж/моль}; A = 120\ 000; D = 0,025\ \text{m}; Y \geq 0,9;$$

$$\rho = 130\ \text{kg/m}^3; \ v = 0,1\ \text{m}^3/\text{c}; \ C_{\text{C}_2\text{H}_{4\text{Bx}}} = 20\ \%; 470 \leq T_0 \leq 540\ \text{K}; -1 \leq T_1 \leq 2.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{пол}}$; входная координата: $C_{\text{эт}}$; $M_0 = 3000$ моль/м³; $K = 1200 \exp(-0.06 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 10, 12, 25].

Вариант 2. Найти методом Нелдера-Мида соотношение *X* исходных реагентов метан/водяной пар и длину трубы реактора-конвертора метана для получения водорода, при которых концентрация водорода на выходе из реактора будет максимальной:

$$CH_4 + 2H_2O \xrightarrow{k_1} CO_2 + 4H_2;$$

$$\alpha_1 = 2$$
; $\alpha_2 = 2$; $A_1 = 2000$; $E_1 = 124\ 100\ Дж/моль$; $A_2 = 3\cdot 10^5$; $E_2 = 180\ 000\ Дж/моль$; $\rho = 0.9\ кг/м^3$; $u = 0.5\ м/c$; $T = 1120\ K$; $0.1 \le X \le 10$.

При имитационном моделировании выходная координата C_{H_2} ; входная координата: T; $M_0 = 1120$ K; $K = 64\exp(-0.1dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 10, 25, 34, 38].

Вариант 3. Найти методом золотого сечения длину трубы реактора окисления бензола C_6H_6 до малеинового ангидрида $C_4H_2O_3$, при которой концентрация малеинового ангидрида на выходе будет максимальной:

$$C_6H_6 + 4O_2 \xrightarrow{k_1} C_4H_2O_3 + CO + CO_2 + 2H_2O;$$

 $C_4H_2O_3 + 2O_2 \xrightarrow{k_2} 2CO + 2CO_2 + H_2O;$
 $C_6H_6 + 6O_2 \xrightarrow{k_3} 3CO + 3CO_2 + 3H_2O;$

$$\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=1;\ A_1=92\cdot 10^8;\ E_1=150\ 000\ \rm{Дж/моль};\ A_2=16\cdot 10^7;$$

$$E_2=132\ 000\ \rm{Дж/моль};\ A_3=580;\ E_3=60\ 000\ \rm{Дж/моль};$$

$$D=0,12\ \rm{m};\ T=640\ \rm{K}\ (\text{температура постоянна по длине реактора});$$

$$m_{\rm C_6H_{\rm 6BX}}=0,015\ \rm{kr/c};\ \ m_{\rm O_{2BX}}=0,035\ \rm{kr/c};\ \ \rho=200\ \rm{kr/m}^3.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{м.ан.}}$; входная координата $C_{\text{бенз.вх.}}$; $M_0 = 770$ моль/м³; $K = 400 \exp(-0.09 dt)$.

Литература: [1, 3, 12, 24, 25, 32, 39–41].

Вариант 4. Найти методом покоординатного спуска длину трубы реактора пиролиза смеси углеводородов – этана, бутана, пропана и температуру в реакторе, при которых суммарное количество этилена и пропилена на выходе реактора будет максимальным:

$$C_2 H_6 \xrightarrow{k_1} C_2 H_4 + H_2;$$

$$C_2 H_4 + 2 H_2 \xrightarrow{k_2} 2 C H_4;$$

$$5 C_4 H_{10} \xrightarrow{k_3} 3 C_3 H_6 + 3 C H_4 + 2 C_2 H_4 + 2 C_2 H_6;$$

$$5 C_3 H_8 \xrightarrow{k_4} 2 C_2 H_4 + 2 C H_4 + 3 C_3 H_6 + 3 H_2;$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 1; A_1 = 2820; E_1 = 75\,\,000\,\,\text{Дж/моль}; A_2 = 137;$$

$$E_2 = 45\,\,000\,\,\text{Дж/моль}; A_3 = 880; E_3 = 66\,\,500\,\,\text{Дж/моль}; A_4 = 600;$$

$$E_4 = 59\,\,000\,\,\text{Дж/моль}; u = 180\,\,\text{м/c}; \, \rho = 1,6\,\,\text{кг/м}^3; \, C_{C_2 H_{6BB}} = 20\,\,\%;$$

$$C_{C_4 H_{10BX}} = 40\,\,\%; \, 1000 \leq T \leq 1100\,\,\text{K}; \, 1 \leq L \leq 250\,\,\text{m}.$$

При имитационном моделировании выходная координата $SUM(C_{\text{этил}} + C_{\text{проп.}})_{\text{вых.}}$, входная координата $C_{\text{бутан.вх}}$; $M_0 = 10 \text{ моль/м}^3$; $K = 4\exp(-0.05dt)$.

Литература: [1, 3, 12, 24, 25, 30].

Вариант 5. Найти методом равномерного поиска площадь поверхности теплообмена периодического реактора с мешалкой получения эпоксидной смолы, при которой время получения полимера смолы концентрацией 0.3 моль/м³ будет минимальным. При проведении процесса температура в реакторе не должна превышать 60 °C:

$$C_1 + C_2 \xrightarrow{k_1} C_3 + Q_1;$$

$$C_1 + C_2 \xrightarrow{k_2} C_4 + Q_2;$$

$$C_4 + C_5 \xrightarrow{k_3} C_6 + C_7;$$

$$C_3 + C_6 \xrightarrow{k_4} C_5 + C_2 + Q_4.$$

Здесь C_1 – дифинелолпропан; C_2 – эпихлоргидрин; C_3 – полимер эпоксидной смолы (целевой продукт); C_4 – хлоргидриновый эфир; C_5 – NaOH; C_6 – NaCl; C_7 – диглицидиловый эфир; α_1 = α_2 = α_3 = α_4 = 2; V = 3 m^3 ; A_1 = 2553; E_1 = 34 000 Дж/моль; A_2 = 2,1·10⁹; E_2 = 7,7·10⁴ Дж/моль; A_3 = 8,4·10⁹; E_3 = 5,2·10⁴ Дж/моль; A_4 = 9,45·10⁴; E_4 = 3,75·10⁴ Дж/моль; Q_1 = 62540 кДж/моль; Q_2 = 1·10⁶ кДж/моль; Q_4 = 1,08·10⁶ кДж/моль; E_4 = 700 Вт/м²·град; E_4 = 40 °C; E_4 = 1180 кг/м³; E_4 = 1200 Дж/кг·град; E_4 = 8 °C; E_4 = 0,55 моль/м³; E_4 = 0,35 моль/м³; E_4 = 0,10 моль/м³; 6,5 ≤ E_4 ≤ 10,5 м².

При имитационном моделировании выходная координата C_3 , входная координата T_t , $M_0 = 8$ °C; $K = 4\exp(-0.085dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 31].

Вариант 6. Найти методом Хука и Дживса с дискретным шагом температуру сырья, поступающего в циклонный сажевый реактор и объем реактора, при которых выход сажи из реактора будет максимальным:

$$CH_4 + 2O_2 \xrightarrow{k_1} CO_2 + 2H_2O + Q_1;$$

$$2C_3H_4 + 5O_2 \xrightarrow{k_2} 6CO + 4H_2O + Q_2;$$

$$C_3H_4 \xrightarrow{k_3} 3C + 2H_2;$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = 2; \ \alpha_3 = 1; \ A_1 = 1600; \ E_1 = 16 \cdot 10^4 \ \text{Дж/моль}; \ A_2 = 600;$$

$$E_2 = 127\ 000\ \text{Дж/моль}; \ A_3 = 10; \ E_3 = 98\ 000\ \text{Дж/моль}; \ Q_1 = 22\ 500\ \text{Дж/моль};$$

$$Q_2 = 12\ 150\ \text{Дж/моль}; \ \rho = 1,5\ \text{кг/м}^3; \ C_t = 1190\ \text{Дж/кг·град}; \ v = 0,7\ \text{м}^3/\text{c};$$

$$C_{\text{BX}} \cap H_{4\text{BB}} = 22\ \%; \ C_{\text{C}_3H_{4\text{BB}}} = 43\ \%; \ 1400 \le T_{\text{BX}} \le 1800\ \text{K}; \ 5 \le V \le 10\ \text{m}^3.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{C_{\text{вых}}}$, входная координата $C_{\text{метан вх}}$; $M_0 = 20 \text{ моль/м}^3$; $K = 12 \exp(-0.07 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 42].

Вариант 7. Найти методом наискорейшего подъема температуру в реакторе с псевдоожиженным слоем катализатора для получения фреона Φ 12 (CCl₂F₂) и объем псевдоожиженного слоя, при которых концентрация фреона Φ 12 на выходе из реактора будет максимальной:

$$CCl_4 + 2HF \xrightarrow{k_1} CCl_2F_2 + 2HCl;$$
 $CCl_4 + HF \xrightarrow{k_2} CCl_3F + HCl;$
 $CCl_4 + 3HF \xrightarrow{k_3} CCl_3 + 3HCl;$

$$\alpha_1$$
 = α_2 = α_3 = 2; A_1 = 5000; E_1 = 64 000 Дж/моль; A_2 = 10 000;

$$E_2$$
= 85 000 Дж/моль; A_3 = 150 000; E_3 = 95 000 Дж/моль; v = 0,2 м³/с;

$$C_{\text{CCl4rx}} = 40 \%$$
; $\rho = 2.5 \text{ KF/M}^3$; $2 \le V \le 5 \text{ M}^3$, $550 \le T \le 700 \text{ K}$.

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\Phi 12\text{вых}}$; входная координата v; $M_0 = 0.2 \text{ м}^3/\text{c}$; $K = 4.10^{-4} \exp(-0.08 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32].

Вариант 8. Найти методом покоординатного спуска с локализацией минимума по каждой координате методом равномерного поиска температуру в контактном аппарате получения формальдегида и объем аппарата, при которых концентрация формальдегида на выходе из аппарата будет максимальной:

2CH₃OH + O₂
$$\xrightarrow{k_1}$$
 2HCHO + 2H₂O;
CH₃OH $\xrightarrow{k_2}$ HCHO + H₂;
2CH₃OH + 3O₂ $\xrightarrow{k_3}$ 2CO₂ + 4H₂O;

$$CH_3OH + H_2 \xrightarrow{k_4} CH_4 + H_2O;$$

$$\alpha_1 = \alpha_3 = \alpha_4 = 2$$
; $\alpha_2 = 1$; $A_1 = 50$; $E_1 = 64\,000$ Дж/моль; $A_2 = 10$;

 $E_2 = 44\ 000\ \text{Дж/моль}; A_3 = 10^6; E_3 = 108\ 000\ \text{Дж/моль}; A_4 = 25\cdot10^5;$

 E_4 = 112 000 Дж/моль; m_{CH3OHBX} = 0,28 кг/с; $m_{\text{возд,вх}}$ = 0,28 кг/с;

$$\rho = 1.6 \text{ kg/m}^3$$
; $2 \le V \le 5 \text{ m}^3$; $800 \le T \le 950 \text{ K}$.

При имитационном моделировании выходная координата C_{HCHOBMX} , входная координата $m_{\text{CH}_3\text{OH}_{\text{BX}}}$, $M_0 = 0.28$ кг/с; $K = 26 \cdot 10^{-4} \exp(-0.09 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32].

Вариант 9. Найти методом нормированного градиента объем реактора получения хлороформа путем хлорования метана и температуру в нем, при которых концентрация хлороформа на выходе из реактора будет максимальной:

$$CH_4 + C1_2 \xrightarrow{k_1} CH_3Cl + HCl;$$

$$CH_3Cl + Cl_2 \xrightarrow{k_2} CH_2Cl_2 + HCl;$$

$$CH_2Cl_2 + Cl_2 \xrightarrow{k_3} CHCl_3 + HCl;$$

$$CHCl_3 + Cl_2 \xrightarrow{k_4} CCl_4 + HCl;$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 2; A_1 = 8000; E_1 = 58\ 000\ Дж/моль; A_2 = 48\ 000;$$

$$E_2 = 71\ 000\ Дж/моль; A_3 = 17\ 600; E_3 = 64\ 000\ Дж/моль; A_4 = 5\ 400\ 000;$$

$$E_4 = 95\ 000\ Дж/моль; v = 0,5\ m^3/c; C_{CH_{4Bx}} = 40\ \%; \rho = 1,7\ кг/м^3;$$

$$600 \le T \le 800\ K; 30 \le V \le 40\ m^3.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{CHCl}_{3\text{вых}}}$ входная координата $C_{\text{метан вх}}$; $M_0 = 42$ моль/м³; $K = 26 \exp(-0.12 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32].

Вариант 10. Найти методом случайного поиска с обратным шагом объем реактора получения ацетона и температуру в нем, при которых концентрация ацетона на выходе будет максимальной:

$$2(CH_3)_2CHOH + O_2 \xrightarrow{k_1} 2(CH_3)_2CO + 2H_2O;$$

 $2(CH_3)_2CHOH + 9O_2 \xrightarrow{k_2} 6CO_2 + 8H_2O;$
 $2(CH_3)_2CHOH + O_2 \xrightarrow{k_3} 2CH_3COOH + 2CH_4;$

$$(CH_3)_2CHOH \xrightarrow{k_4} CH_3CHCH_2 + H_2O;$$

$$\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=2;\ \alpha_4=1;\ A_1=20;\ E_1=60\ 000\ Дж/моль;\ A_2=200;$$

$$E_2=65\ 000\ Дж/моль;\ A_3=2\cdot 10^6;\ E_3=130\ 000\ Дж/моль;\ A_4=505\ 000;$$

$$E_4=118\ 000\ Дж/моль;\ v=0,2\ {\rm m}^3/{\rm c};\ \ C_{{\rm O}_{2BX}}=50\ \%;\ \rho=1,9\ {\rm kg/m}^3;$$

$$650 \le T \le 900 \text{ K}; 1 \le V \le 5 \text{ м}^3.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{ацет.вых}}$, входная координата v, $M_0 = 0.2 \text{ m}^3/\text{c}$; $K = 1 \cdot 10^{-4} \exp(-0.075 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32].

Вариант 11. Найти методом локальных вариаций по четырем сечениям методом простого перебора функцию распределения температуры реакционной смеси по длине трубы кожухотрубного аппарата синтеза окиси этилена, при которой длина труб аппарата будет минимальной:

$$2\mathrm{C}_2\mathrm{H}_4 + \mathrm{O}_2 \xrightarrow{k_1} 2\mathrm{C}_2\mathrm{H}_4\mathrm{O};$$

$$\mathrm{C}_2\mathrm{H}_2 + 3\mathrm{O}_2 \xrightarrow{k_2} 2\mathrm{CO}_2 + 2\mathrm{H}_2\mathrm{O};$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = 2; \ C_{\mathrm{CH}_{4\mathrm{BX}}} = 0,4; \ C_{\mathrm{O}_{2\mathrm{BX}}} = 0,6; \ u = 0,5 \ \mathrm{m/c}; \ A_1 = 200;$$

$$E_1 = 33\ 800\ \mathrm{Дж/моль}; \ A_2 = 500; \ E_2 = 41\ 200\ \mathrm{Дж/моль}; \ \rho = 1,1 \ \mathrm{kg/m}^3;$$

$$C_{\mathrm{C}_2\mathrm{H}_4\mathrm{O}_{\mathrm{BUY}}} \geq 0,5; \ 450 \leq T \leq 570 \ \mathrm{K}.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{С}_2\text{H}_4\text{O}_{\text{вых}}}$; входная координата $C_{\text{этилен вх}}$; $M_0 = 16$ моль/м³; $K = 10 \exp(-0.06 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32, 37].

Вариант 12. Найти методом дихотомии температуру в трубчатом контактном аппарате для производства циклогексанона, при которой длина труб аппарата будет минимальной:

$$C_5 \text{H}_{10} \text{CHOH} \xrightarrow{k_1} C_5 \text{H}_{10} \text{CO} + \text{H}_2;$$

$$C_5 \text{H}_{10} \text{CHOH} \xrightarrow{k_2} C_6 \text{H}_{10} + \text{H}_2 \text{O};$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = 1; \ C_{\text{C}_5 \text{H}_{10} \text{CHOH}_{\text{BX}}} = 0.8; \ C_{\text{C}_5 \text{H}_{10} \text{CO}_{\text{BX}}} = 0.2; \ D = 0.2 \text{ M},$$
 количество труб $N = 36; \ \nu = 4 \text{ M}^3 \text{/c}; \ A_1 = 3000; \ E_1 = 50 \ 600 \ \text{Дж/моль};$
$$A_2 = 700; \ E_2 = 40 \ 000 \ \text{Дж/моль}; \ \rho = 3.1 \ \text{кг/м}^3; \ C_{\text{C}_5 \text{H}_{10} \text{CO}_{\text{Вых}}} \ge 0.5;$$

$$650 < T < 770 \ \text{K}.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{C_5H_{10}CO_{\text{вых}}}$; входная координата $C_{\text{циклогексанол}}$ вхудная координата $C_{\text{циклогексанол}}$ вхудная координата $C_{\text{циклогексанол}}$ (вт. $M_0 = 25 \text{ моль/м}^3$; $K = 16 \exp(-0.1 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32].

Вариант 13. Найти методом спуска с «наказанием случайностью» температуру в газофазном реакторе получения ацетона из окиси пропилена и объем реактора, при которых концентрация ацетона на выходе из реактора будет максимальной:

$$\begin{array}{c} {\rm C_3H_6O} \stackrel{k_1}{\longrightarrow} {\rm CH_3COCH_3;} \\ {\rm C_3H_6O} \stackrel{k_2}{\longrightarrow} {\rm CH_3CH_2CHO;} \\ \\ \alpha_1=\alpha_2=1; \, A_1=2; \, E_1=20\ 000\ {\rm Дж/моль}; \, A_2=2; \, E_2=24\ 000\ {\rm Дж/моль}; \\ \rho=2,2\ {\rm kr/m}^3; \, \nu=0,03\ {\rm m}^3/{\rm c}; \, C_{\rm Bx}=1; \, 700\leq T\leq 1000\ {\rm K}; \ \ 1\leq {\it V}\leq 3\ {\rm m}^3. \end{array}$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{ацет.вых.}}$; входная координата v; $M_0 = 0.03 \text{ m}^3/\text{c}$; $K = 1 \cdot 10^{-4} \exp(-0.06 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32].

Вариант 14. Найти методом прямого перебора площадь поверхности теплообмена и массу реакционной смеси, загружаемой в реактор периодического действия производства пентаэритрита, при которых концентрация пентаэритрита после завершения процесса будет максимальной. Время проведения процесса 30 мин.

3HCHO + CH₃CHO
$$\xrightarrow{k_1}$$
 (CH₂OH)₃C₂HO + Q_1 ;
(CH₂OH)₃C₂HO + HCHO + H₂O $\xrightarrow{k_2}$ C(CH₂OH)₄ + HCOOH + Q_2 ;
2HCHO + 4CH₃CHO + H₂O $\xrightarrow{k_3}$ (CH₂OH)₃CH₂OCH₂C(CH₂OH)₃;
 $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 2$; $A_1 = 40~000$; $E_1 = 67~000~\text{Дж/моль}$; $A_2 = 35~000$;
 $E_2 = 68~000~\text{Дж/моль}$; $A_3 = 160~000$; $E_3 = 70~000~\text{Дж/моль}$;
 $Q_1 = 81~000~\text{Дж/моль}$; $\rho = 810~\text{кг/м}^3$; $Q_2 = 48~600~\text{Дж/моль}$; $T_t = 12~^{\circ}$ C;
 $C_t = 1200~\text{Дж/кг-град}$; $K_t = 5000~\text{Вт/м}^2$ -град; $T_{\text{вх}} = 27~^{\circ}$ C; $C_{\text{CH}_3\text{CHO}_{uv}} = 0,3$;

$$C_{\rm HCHO_{DN}} = 0.4; 7 \le F \le 12 \text{ m}^2; 2000 \le M \le 3000 \text{ кг.}$$

При имитационном моделировании выходная координата T_i ; $M_0 = 12$ °C; $K = 25\exp(-0.05dt)$.

Литература [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32].

Вариант 15. Найти методом чисел Фибоначчи температуру в трубчатом реакторе пиролиза уксусной кислоты для получения уксусного ангидрида, при которой длина трубы реактора будет минимальной:

$$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{COOH} \xrightarrow{k_1} \text{CH}_2\text{CO} + \text{H}_2\text{O}; \\ & \longleftarrow \\ \text{CH}_2\text{CO} + \text{CH}_3\text{COOH} \xrightarrow{k_3} \text{C}_4\text{H}_6\text{O}_3; \\ \\ \alpha_1 = 1; \ \alpha_2 = \alpha_3 = 2; \ A_1 = 2000; \ E_1 = 1 \cdot 10^5 \ \text{Дж/моль}; \ A_2 = 70\ 000; \\ \rho = 1,8 \ \text{кг/m}^3; \ E_2 = 135\ 000 \ \text{Дж/моль}; \ A_3 = 7000; \ E_3 = 97\ 000 \ \text{Дж/моль}; \\ C_{\text{VKC AHIT BMX}} \geq 70\ \%; \ u = 0,1 \ \text{M/c}; \ 920 \leq T \leq 1060 \ \text{K}. \end{array}$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{укс.анг.вых.}}$, входная координата $C_{\text{укс.вх}}$; $M_0 = 20$ моль/м³; $K = 4\exp(-0.06dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32].

Вариант 16. Найти методом локальных вариаций по пяти сечениям методом дихотомии функцию распределения температуры теплоносителя по длине трубчатого реактора получения фталевого ангидрида, при которой длина трубы реактора будет минимальной:

$$\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=2;\ A_1=8000;\ E_1=72\ 600\ \text{Дж/моль};\ A_2=4000;$$

$$E_2=77\ 000\ \text{Дж/моль};\ A_3=3\cdot 10^5;\ E_3=87\ 000\ \text{Дж/моль};\ K_t=500\ \text{Вт/м}^2\text{град};$$

$$u=0,1\ \text{м/c};\ T_{\text{вх}}=650\ \text{K};\ Q_1=1,47\cdot 10^7\ \text{Дж/моль};\ Q_2=1,4\cdot 10^8\ \text{Дж/моль};$$

$$Q_3=19,6\cdot 10^6\ \text{Дж/моль};\ C_t=1100\ \text{Дж/кг·град};\ \rho=1,4\ \text{кг/м}^3;\ D=0,025\ \text{м};$$

$$C_{\text{наф.вх.}}=0,1;\ C_{\text{O_{200}}}=0,2;\ C_{\text{фт.анг.вых.}}\geq 4\ \text{%};\ 260\leq T_t\leq 300\ \text{°C}.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{фт.анг.вых}}$, входная координата $C_{\text{наф. вх.}}$; $M_0 = 1$ моль/м³; $K = 0.4 \exp(-0.071 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32, 37].

Вариант 17. Найти методом слепого поиска температуру в парофазном трубчатом реакторе производства винилацетата и длину трубы реактора, при которых концентрация винилацетата на выходе из реактора будет максимальной:

$$\text{CH}_3\text{COOH} + \text{C}_2\text{H}_2 \xrightarrow{k_1} \text{CH}_3\text{COOCHCH}_2;$$

$$\text{CH}_3\text{COOH} + \text{CH}_3\text{COOCHCH}_2 \xrightarrow{k_2} \text{(CH}_3\text{COO})_2\text{CHCH}_3;$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = 2; A_1 = 150\ 000; E_1 = 78\ 000\ \text{Дж/моль}; A_2 = 5\cdot 10^6;$$

$$E_2 = 87\ 900\ \text{Дж/моль}; u = 0,01\ \text{м/c}; \ \rho = 2,5\ \text{кг/м}^3; \ C_{\text{CH}_3\text{COOH}_{\text{Bx}}} = 0,7;$$

$$C_{\text{C}_2\text{H}_{2\text{BB}}} = 0,3; 440 \leq T \leq 480\ \text{K}.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{винилац,вых}}$, входная координата $C_{\text{ацетилен вх.}}$; $M_0 = 30$ моль/м³; $K = 10 \exp(-0.088 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32].

Вариант 18. Найти методом Флетчера и Ривса площадь поверхности теплообмена охлаждающих труб и начальную температуру реакционной смеси в периодическом реакционном аппарате (редукторе) производства анилина, при которых время проведения процесса до получения анилина концентрации большей 15 % будет минимальным:

При имитационном моделировании выходная координата T, входная координата T_t , $M_0 = 10$ °C; $K = 2,1\exp(-0.09dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32, 36].

Вариант 19. Найти методом штрафных функций площадь поверхности теплообмена и объемный расход реакционной смеси на входе в контактный аппарат производства синильной кислоты, при которых концентрация синильной кислоты на выходе из реактора будет максимальной:

$$2\text{CH}_4 + 2\text{NH}_3 + 3\text{O}_2 \xrightarrow{k_1} 2\text{HCN} + 6\text{H}_2\text{O} + Q_1;$$

$$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \xrightarrow{k_2} \text{CO} + 3\text{H}_2 - Q_2;$$

$$2\text{CH}_4 + \text{O}_2 \xrightarrow{k_3} 2\text{CO} + 4\text{H}_2;$$

$$4\text{NH}_3 + 3\text{O}_2 \xrightarrow{k_4} 2\text{N}_2 + 6\text{H}_2\text{O} + Q_4;$$

$$\alpha_1 = 3; \ \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 2; \ A_1 = 10\ 000; \ E_1 = 156\ 000\ \text{Дж/моль}; \ A_2 = 20\ 000;$$

$$E_2 = 166\ 400\ \text{Дж/моль}; \ A_3 = 50\ 000; \ E_3 = 177\ 000\ \text{Дж/моль}; \ A_4 = 500;$$

$$E_4 = 160\ 000\ \text{Дж/моль}; \ K_t = 2000\ \text{Вт/м}^2 \cdot \text{град}; \ T_t = 500\ \text{K}; \ V = 10\ \text{м}^3;$$

$$T_{\text{BX}} = 1200\ \text{K}; \ Q_1 = 361\ 000\ \text{Дж/моль}; \ Q_2 = 950\ 000\ \text{Дж/моль};$$

$$Q_4 = 1520\ \text{кДж/моль}; \ C_t = 1200\ \text{Дж/кг} \cdot \text{град}; \ \rho = 1,9\ \text{кг/м}^3; \ C_{\text{CH4BX}} = 13\ \%;$$

$$C_{\text{O}_{2BB}} = 15\ \%; \ C_{\text{NH}_{3BX}} = 12\ \%; \ 5 \le F \le 20\ \text{m}^2; \ 0,01 \le \nu_{\text{BX}} \le 0,2\ \text{m}^3/\text{c}.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{циан.вых.}}$; входная координата $C_{\text{метан вх}}$; $M_0 = 15$ моль/м³; $K = 12 \exp(-0.1 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32].

Вариант 20. Найти методом «тяжелого шарика» площадь поверхности теплообмена и объем реактора хлорирования спирта технологической цепочки получения хлораля: реактора с мешалкой хлорирования спирта и перегонного куба с мешалкой, при которых концентрация хлораля на выходе будет максимальной. Реактор с мешалкой хлорирования спирта:

$$2C_2H_5OH + 3Cl_2 \xrightarrow{k_1} CHCl_2CHOHOC_2H_5 + 4HC1 + Q_1;$$

 $CHCl_2CHOHOC_2H_5 + Cl_2 \xrightarrow{k_2} CCl_3CHOHOC_2H_5 + HC1;$
 $CCl_3CHOHOC_2H_5 + H_2O \xrightarrow{k_3} CCl_3CH(OH)_2 + C_2H_5OH;$

$$C_2 \text{H}_5 \text{OH} + \text{HC1} \xrightarrow{k_4} C_2 \text{H}_5 \text{C1} + \text{H}_2 \text{O},$$
 $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_4 = 2; \ \alpha_3 = 1; \ \text{v} = 0.3 \ \text{m}^3 / \text{c}; \ A_1 = 110; \ E_1 = 47\ 000 \ \text{Дж/моль};$ $A_2 = 800; \ E_2 = 30\ 000 \ \text{Дж/моль}; \ A_3 = 1000; \ E_3 = 32\ 000 \ \text{Дж/моль};$ $A_4 = 1000; \ E_4 = 55\ 000 \ \text{Дж/моль}; \ T_t = 290\ \text{K}; \ K_t = 9000 \ \text{Вт/m}^2 \cdot \text{град};$ $T_{\text{вх}} = 370\ \text{K}; \ Q_1 = 25.5\ \text{кДж/моль}; \ C_t = 2200\ \text{Дж/кг} \cdot \text{град};$ $\rho = 850\ \text{кг/m}^3; \ C_{\text{спирт вх}} = C_{\text{C12 вх}} = 50\ \%; \ 2 \le F \le 15\ \text{m}^2; \ 1 \le V \le 3\ \text{m}^3.$

Перегонный куб с мешалкой:

$$CCl_3CHOHOC_2H_5 \xrightarrow{k_5} CCl_3CHO + C_2H_5OH;$$
 $CCl_3CH(OH)_2 \xrightarrow{k_6} CCl_3CHO + H_2O;$
 $V_k = 5 \text{ m}^3; \text{ A}_5 = 6 \cdot 10^8; E_5 = 80 \ 000 \ Дж/моль; A_6 = 4 \cdot 10^8;$
 $E_6 = 65 \ 000 \ Дж/моль.$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{хлораль. вых.}}$, входная координата v, $M_0 = 0.3 \text{ м}^3/\text{c}$; $K = 15 \cdot 10^{-4} \exp(-0.06 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 32].

Вариант 21. Найти методом Ритца функцию изменения величины тока по времени (используя квадратичный закон $I = I_0 + I_1 \tau + I_2 \tau^2$) электрохимической ванны хромирования, при которой время процесса нанесения покрытия толщиной 150 мкм будет минимальным:

$$BT = 0.1 \cdot \lg ((14 \cdot 10^5 + 400T)/(1 + 41.6 \cdot I + 0.04 \cdot I^2));$$

 $T = 50 \, ^\circ\text{C}; S = 1 \, \text{м}^2; \ \Im = 0.00013 \, \text{кг/A·мин}; \ 2400 \le I_0 \le 3500 \, \text{A}.$

При имитационном моделировании выходная координата δ ; входная координата I; $M_0 = 2500$ A; $K = 1 \cdot 10^4 \exp(-0.07 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 12, 25, 27].

Вариант 22. Найти симплексным методом температуру в барботажном аппарате производства аммиачной селитры и высоту H аппарата, при которых концентрация аммиачной селитры на выходе будет максимальной:

$$NH_3 + HNO_3 \xrightarrow{k_1} NH_4NO_3;$$

$$NH_4NO_3 \xrightarrow{k_2} NO_2 + 2H_2O;$$

$$\alpha_1 = 2; \ \alpha_2 = 1; \ A_1 = 553; \ E_1 = 48\ 650\ \text{Дж/моль}; \ A_2 = 2\cdot 10^{13};$$

$$E_2 = 137\ 000\ \text{Дж/моль}; \ D = 2,5\ \text{м}; \ \rho = 1400\ \text{кг/м}^3; \ C_{\text{HNO3}\ \text{вх}} = 53\ \%;$$

$$m_{\text{HNO3}\ \text{вх}} = 7,5\ \text{кг/c}; \ m_{\text{NH3}\ \text{вх}} = 3\ \text{кг/c}; \ 0,5 \le H \le 10\ \text{м}; \ 100 \le T \le 270\ ^{\circ}\text{C}.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{NH4NO3 вых}}$, входная координата $m_{\text{HNO3 вх}}$; $M_0 = 7,5$ кг/с; K = 1,6exp(-0,082dt).

Литература: [1, 3, 7, 12, 24, 25, 28].

Вариант 23. Найти градиентным методом высоту H_k слоя катализатора и температуру в реакторе синтеза аммиака, при которых концентрация аммиака на выходе из реактора будет максимальной:

$$N_2 + 3H_2 \xrightarrow{k_1} 2NH_3;$$
 $\rho = 0,38 \text{ кг/м}^3; \ \alpha_1 = 2; \ \alpha_2 = 1; \ A_1 = 0,156; \ E_1 = 16 500 \ Дж/моль,$
 $A_2 = 7 \cdot 10^6; \ E_2 = 124 \ 000 \ Дж/моль; \ D = 0,2 \ \text{м}; \ u = 0,318 \ \text{м/c};$
 $C_{N2 \ \text{BX}.} = 0,25; \ 0 \le H_k \le 20 \ \text{м}; \ 600 \le T \le 900 \ \text{K}.$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{NH}_{3\text{вых}}}$, входная координата $C_{\text{водор.вх.}}$; $M_0 = 140$ моль/м³; $K = 110 \exp(-0.05 dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 10, 12, 24, 25].

Вариант 24. Найти методом Розенброка с дискретным шагом количество N полок с катализатором и температуру в контактном аппарате производства серной кислоты, при которых концентрация SO_3 на выходе из аппарата будет максимальной:

$$2SO_2 + O_2 \xrightarrow[k_2]{k_1} 2SO_3.$$

Прямая реакция описывается кинетическим уравнением:

$$r_1 = k_1 \ C_{\mathrm{SO}_2}^2 \ C_{\mathrm{O}_2}$$
; $\alpha_2 = 1$; $A_1 = 9 \cdot 10^7$; $E_1 = 160\ 000\ Дж/моль$;

$$A_2 = 5.10^{14}$$
; $E_2 = 260\ 000\ Дж/моль$; $D = 1\ \text{м}$; $v = 0.5\ \text{м}^3/\text{c}$;

 $C_{\rm O_{2_{\rm RR}}} = 11$ %; $C_{{\rm SO_{2_{\rm RY}}}} = 7$ %, высота каждого слоя катализатора H = 1 м,

$$\rho = 1.5 \text{ K}\Gamma/\text{M}^3$$
; $1 \le N \le 10$; $670 \le T \le 870 \text{ K}$.

При имитационном моделировании выходная координата $C_{{\rm SO}_{3{\rm Bbix}}}$; входная координата $C_{{\rm SO}_{2{\rm Bx}}}$; $M_0=1,7$ моль/м³; $K=0,4{\rm exp}(-0,09dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 10, 12, 24, 25].

Вариант 25. Найти методом случайного поиска с постоянным радиусом поиска и случайным направлением температуру в реакторе конверсии оксида углерода для получения водорода и концентрацию оксида углерода на входе в реактор, при которых объем реактора будет минимальным:

$$CO + H_2O \xrightarrow{k_1} CO_2 + H_2;$$

$$\alpha_1=\alpha_2=2;\,A_1=49\ 200;\,E_1=95\ 300\ \text{Дж/моль};\,A_2=1\cdot 10^{14};$$

$$E_2=215\ 000\ \text{Дж/моль};\,\rho=1000\ \text{кг/м}^3;\,\nu=1,5\ \text{м}^3/\text{c};\,\,C_{\text{Н}_{2\text{ввы}}}\geq 3\ \text{\%},$$

$$40 \le C_{\text{CObx}} \le 60$$
 %; $540 \le T \le 615$ K.

ПРИ ИМИТАЦИОННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ВЫХОДНАЯ КООРДИНАТА $C_{\rm H_{2BBM}}$, ВХОДНАЯ КООРДИНАТА V; $M_0 = 1 \, {\rm M}^3/{\rm C}$; $K = 0.07{\rm EXP}(-0.1DT)$.

Литература: [1, 3, 7, 10, 12, 24, 25, 38].

Вариант 26. Найти методом прямого поиска с возвратом количество N тарелок абсорбера для получения азотной кислоты, при котором концентрация азотной кислоты на выходе абсорбера будет максимальной:

$$3NO_2 + H_2O \xrightarrow{k} 2HNO_3 + NO;$$

 $\alpha = 2$; A = 50~000; E = 65~200~Дж/моль; $\rho = 1000~$ кг/м 3 ; $m_{\text{NO2BX}} = 5~$ кг/с;

 $m_{\rm H2OBX}$ = 2 кг/с, объем каждой тарелки V = 0,3 м³; T = 300 K, 1 \leq N \leq 20.

При имитационном моделировании выходная координата C_{HNO_3} , входная координата T; M_0 = 300 K; K = 200exp(-0.094dt).

Литература: [1, 3, 7, 10, 12, 24, 25].

Вариант 27. Найти методом Девиса, Свенна и Кемпи температуру в электрохимической ванне меднения и площадь катода, при которых время процесса нанесения покрытия толщиной 10 мкм будет минимальным: $BT = 1 + 0.0021 \cdot i - 1 \cdot 10^{-5} (i - 260)^2 - 0.0132 \cdot T;$

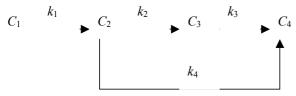
$$I = 500 \text{ A}$$
; $\Im = 4.10^{-5} \text{ кг/A·мин}$; $50 \le T \le 70 \text{ °C}$; $0.8 \le S \le 4 \text{ м}^2$.

При имитационном моделировании выходная координата δ ; входная координата I; $M_0 = 500$ A; $K = 2000 \exp(-0.06 dt)$.

Литература: [1, 3, 24, 25, 27, 38].

Вариант 28. Найти методом парабол длину трубы трубчатого реактора синтеза нитрила никотиновой кислоты, при которой концентрация целевого продукта на выходе из реактора будет максимальной.

Упрощенная схема протекания химических процессов в реакторе:



 C_1 – 3-пиколин (сырье); C_2 – альдегид; C_3 – нитрил никотиновой кислоты (целевой продукт); C_4 – углекислый газ; α_1 = α_2 = α_3 = α_4 = 1;

$$A_1 = 5 \cdot 10^{10}$$
; $E_1 = 19$ 213 Кал/моль; $A_2 = 1, 5 \cdot 10^{13}$; $E_2 = 24$ 430 Кал/моль;

$$A_3 = 34 \cdot 10^{17}$$
; $E_3 = 35 \, 400 \, \text{Кал/моль}$; $A_4 = 55 \, 000$; $E_4 = 8000 \, \text{Кал/моль}$;

$$v = 0.3 \text{ m}^3/\text{c}$$
; $T = 450 \text{ K}$; $\rho = 2.8 \text{ kg/m}^3$; $D = 0.1 \text{ m}$; $C_{1\text{BX}} = 20 \%$;

$$\mu_1 = 0.105 \text{ кг/моль}; \ \mu_3 = 0.116 \text{ кг/моль}; \ 1 \le L \le 10 \text{ м}.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{3\text{вых}}$; входная координата $C_{1\text{вых}}$; $M_0 = 5$ моль/м³; $K = 1,2\exp(-0.082dt)$.

Литература: [1, 3, 13, 23, 25].

Вариант 29. Найти методом покоординатного подъема с локализацией максимума по каждой координате методом дихотомии температуру в барботажном реакторе синтеза этилового спирта и объем реактора, при которых концентрация этилового спирта на выходе из реактора будет максимальной:

$$C_2H_4 + H_2SO_4 \xrightarrow{k_1} C_2H_5OSO_3H;$$
 $C_2H_5OSO_3H + C_2H_4 \xrightarrow{k_2} (C_2H_5O)_2SO_2;$
 $C_2H_5OSO_3H + H_2O \xrightarrow{k_3} C_2H_5OH + H_2SO_4;$
 $(C_2H_5O)_2SO_2 + 2H_2O \xrightarrow{k_4} 2C_2H_5OH + H_2SO_4;$
 $(C_2H_5O)_2SO_2 + C_2H_5OH \xrightarrow{k_5} C_2H_5OC_2H_5 + C_2H_5OSO_3H;$
 $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_5 = 2; \ \alpha_3 = \alpha_4 = 1; \ A_1 = 4,55 \cdot 10^{11}; \ E_1 = 92\ 000\ \text{Дж/моль};$
 $A_2 = 2,5 \cdot 10^{10}; \ E_2 = 86\ 000\ \text{Дж/моль}; \ A_3 = 7,3 \cdot 10^{12}; \ E_3 = 94\ 000\ \text{Дж/моль};$
 $A_4 = 2 \cdot 10^8; \ E_4 = 64\ 000\ \text{Дж/моль}; \ A_5 = 2 \cdot 10^{11}; \ E_5 = 103\ 000\ \text{Дж/моль};$
 $V_{C_2H_{4BX}} = 3,5\ \text{м}^3/\text{c}; \ \rho = 1300\ \text{кг/м}^3; \ m_{H_2SO_{4BX}} = 3\ \text{кг/c}; \ \rho_{C_2H_4} = 1,2\ \text{кг/m}^3;$
 $m_{H_2O_{BX}} = 1\ \text{кг/c}; \ 300 \le T \le 340\ \text{K}; \ 1 \le V \le 21\ \text{M}^3.$

При имитационном моделировании выходная координата $B_{\text{спирт вых}}$; входная координата $m_{\text{H}_2\text{SO}_{4\text{BB}}}$; $M_0=3$ кг/с; $K=1,4\exp(-0.06dt)$.

Литература: [1, 3, 7, 10, 12, 24, 25].

Вариант 30. Найти методом покоординатного спуска с локализацией минимума по каждой координате методом золотого сечения температуру и ток в электрохимической ванне кадмирования, при которых время получения покрытия толщиной 30 мкм будет минимальным:

$${\rm BT}=0,38\cdot \lg \ (550T/(10+24i)) \ ;$$
 $S=5\ {\rm m}^2;\ \Im=3,3\cdot 10^{-5}\ {\rm kr}/{\rm A\cdot muh};\ 20\le T\le 40\ {\rm ^{\circ}C};\ 500\le I\le 2000\ {\rm A}.$

При имитационном моделировании выходная координата δ ; входная координата I; M_0 равно оптимальному значению тока, найденному на этапе оптимизации; $K = 1 \cdot 10^4 \exp(-0.076 dt)$.

Литература: [1, 3, 12, 24, 25, 27].

Вариант 31. Найти овражным методом площадь поверхности труб для отвода тепла из кипящего слоя и объем печи кипящего слоя для обжига серного колчедана, при которых концентрация SO_2 на выходе из печи будет максимальной:

$$4 \mathrm{FeS}_2 + 11 \mathrm{O}_2 \xrightarrow{k_1} 2 \mathrm{Fe}_2 \mathrm{O}_3 + 8 \mathrm{SO}_2 + \mathrm{Q}_1;$$
 $2 \mathrm{SO}_2 + \mathrm{O}_2 \xrightarrow{k_2} 2 \mathrm{SO}_3;$
 $\alpha_1 = \alpha_2 = 2; A_1 = 4800; E_1 = 62\ 000\ \mathrm{Дж/моль}; A_2 = 2 \cdot 10^{11};$
 $E_2 = 108\ 000\ \mathrm{Дж/моль}; Q_1 = 125, 4\ к\mathrm{Дж/моль}; v_{\mathrm{возд.вx}} = 10\ \mathrm{m}^3/\mathrm{c};$
 $T_{\mathrm{FeS2bx}} = 300\ \mathrm{K}; T_{\mathrm{воздювx}} = 300\ \mathrm{K}; \rho = 570\ \mathrm{kr/m}^3; m_{\mathrm{FeS2bx}} = 6\ \mathrm{kr/c};$
 $K_t = 5800\ \mathrm{Bt/m}^2\cdot\mathrm{град}; T_t = 283\ \mathrm{K}; C_t = 2300\ \mathrm{Дж/кr}\cdot\mathrm{град};$
 $1 \le F \le 100\ \mathrm{m}^2; 1 \le V \le 20\ \mathrm{m}^3.$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{SO}_{2\text{вых}}}$, входная координата $v_{\text{возд.вх}}$; $M_0 = 10 \text{ м}^3/\text{c}$; $K = 3\exp(-0.058dt)$.

Литература: [1, 3, 10, 12, 24, 25].

Вариант 32. Найти модифицированным партан-методом температуру и ток в электрохимической ванне цинкования, при которых время получения покрытия толщиной 50 мкм будет минимальным:

$$BT = (0.01T^2 + 0.001T)/(0.0001i^2);$$
 $S = 2 \text{ m}^2; \ \Im = 2.03 \cdot 10^{-7} \text{ kg/A·muh}; \ 20 \le T \le 30 \text{ °C}; \ 700 \le I \le 900 \text{ A}.$

При имитационном моделировании выходная координата δ , входная координата T, M_0 равно оптимальному значению температуры, найденному на этапе оптимизации, $K = 10 \exp(-0.1 dt)$.

Литература: [1, 3, 12, 24, 25, 27, 38].

Вариант 33. Найти методом оптимизационного поиска в заданном направлении с целью нахождения допустимой точки диаметр реактора дегидрирования бутана и объем аппарата дегидрирования бутилена двухстадийной схемы производства дивинила из бутана, при которых концентрация дивинила на выходе двухстадийной схемы будет максимальной.

Реакция в кипящем слое реактора дегидрирования бутана:

$$C_4H_{10} \xrightarrow{k_1 \atop k_2} C_4H_8 + H_2.$$

РЕАКЦИЯ В КОНТАКТНОМ АППАРАТЕ ДЕГИДРИРОВАНИЯ БУТИЛЕНА:

$$\begin{matrix} C_4 H_8 \xleftarrow{k_3} C_4 H_6 + H_2; \\ & \longleftarrow_{k_4} \end{matrix}$$
 С₄H₆ + H₂;
$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 1; \ \alpha_4 = 0; \ A_1 = 45\ 500; \ E_1 = 75\ 000\ \text{Дж/моль}; \ A_2 = 50\ 000;$$

$$E_2 = 80\ 000\ Дж/моль$$
; $A_3 = 330$; $E_3 = 27\ 000\ Дж/моль$; $A_4 = 14\ 000$;

$$E_4$$
 = 56 000 Дж/моль; v = 0,2 м³/с; T_1 = 600 °C; T_2 = 620 °C; ρ_1 = 1,6 кг/м³;

 $\rho_2 = 0.9 \text{ кг/м}^3$, высота кипящего слоя 1: $H_1 = 1.5 \text{ м}$;

$$0.3 \le D_1 \le 0.6 \text{ m}; 0.1 \le V_2 \le 4.5 \text{ m}^3.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{див}}$, входная координата $v_{\text{вх}}$; $M_0 = 0.2 \text{ м}^3/\text{c}$; K = 0.01 exp(-0.083 dt).

Литература: [1, 3, 10, 12, 24, 25, 38].

Вариант 34. Найти модифицированым методом Хука и Дживса (безградиенным методом наискорейшего спуска) концентрацию NiSO₄, в начальный момент времени и площадь катода в электрохимической ванне ни-келирования, при которых время нанесения покрытия толщиной 80 мкм будет минимальным:

$$BT = 0.01 \cdot \lg(0.005 \cdot i + 0.6 \cdot T) - 10C_1^2 + 4C_1 + 0.3;$$

$$C_1$$
 – концентрация NiSO₄; $\Theta=0.304\cdot10^{-6}$ кг/А·с; $I=800$ A; $T=50$ °C;
$$0.1\leq C_1\leq 0.4;\ 1\leq S\leq 10\ \mathrm{m}^2.$$

При имитационном моделировании выходная координата δ , входная координата T; $M_0 = 50$ °C; $K = 80 \exp(-0.09 dt)$.

Литература: [1, 3, 12, 24, 25, 27].

Вариант 35. Найти методом сопряженных градиентов концентрацию $SnSO_4$ в начальный момент времени и площадь катода в электрохимической ванне оловянирования, при которых время получения покрытия толщиной 5 мкм будет минимальным:

$$\begin{split} \mathbf{B}T &= (0.1 + 40 \cdot C_1 - 620 \cdot C_1^{\ 2})/\ln(0.02 \cdot i + 2.6); \\ C_1 &- \text{концентрация SnSO}_4; \ \Im = 0.306 \cdot 10^{-6} \ \text{кг/A·c}; \ I = 550 \ \text{A}; \\ 0.01 &\leq C_1 \leq 0.05; \ 1.6 \leq S \leq 10 \ \text{m}^2. \end{split}$$

При имитационном моделировании выходная координата δ ; входная координата I; $M_0 = 550$ A; $K = 7000 \exp(-0.1 dt)$.

Литература: [1, 3, 12, 24, 25, 27].

Вариант 36. Найти комплексным методом Бокса количество N полок в ацетиленовом генераторе и расход карбида кальция на входе, при которых массовый расход ацетилена на выходе будет максимальным:

$$\text{CaC}_2 + 2\text{H}_2\text{O} \xrightarrow{k} \text{C}_2\text{H}_2 + \text{Ca}(\text{OH})_2;$$
 $\alpha = 2$; $A_1 = 1,7 \cdot 10^6$; $E_1 = 80~000~\text{Дж/моль}; T = 373~\text{K}; ~m_{\text{H}_2\text{O}_{\text{BX}}} = 5~\text{кг/c};$

$$ρ = 1350 \text{ kg/m}^3$$
; $M_1 = M_2 = ... = M_n = 50 \text{ kg}$, $1 \le N \le 10$; $1 \le m_{\text{CaC}_{2pq}} \le 35 \text{ kg/c}$.

При имитационном моделировании выходная координата $m_{\text{ацет.вых}}$, входная координата $m_{\text{H}_2\text{O}_{\text{BX}}}$, M_0 = 5 кг/c; K = 4exp(-0,068dt).

Литература: [1, 3, 10, 12, 24, 25, 34].

Вариант 37. Найти методом перебора с делением шага длину трубы трубчатого реактора синтеза метилового спирта, при которой концентрация метилового спирта на выходе из реактора будет максимальной:

$$CO + 2H_2 \xrightarrow{k_1} CH_3OH;$$

 $CO + 3H_2 \xrightarrow{k_2} CH_4 + H_2O;$

$$2CH_3OH \xrightarrow{k_3} CH_3OCH_3 + H_2O;$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = 2$$
; $\alpha_3 = 1$; $A_1 = 40\,000$; $E_1 = 100\,000\,$ Дж/моль; $A_2 = 10\,000$;

 $E_2 = 104\ 000\ Дж/моль;\ A_3 = 3.8 \cdot 10^7;\ E_3 = 111\ 000\ Дж/моль;\ v_{\rm px} = 0.02\ {\rm m}^3/{\rm c};$

$$T = 650 \text{ K}$$
; $\rho = 0.5 \text{ kg/m}^3$; $D = 0.2 \text{ m}$; $C_{\text{COBX}} = 33 \%$; $0 \le L \le 10 \text{ m}$.

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{спиртвых}}$; входная координата $C_{\text{СОвх}}$, $M_0 = 5$ моль/м³; $K = 1 \exp(-0.077 dt)$.

Литература: [1, 3, 10, 12, 24, 25, 35].

Вариант 38. Найти партан-методом площадь теплообмена труб, охлаждающих барботажную колонну для синтеза уксусной кислоты окислением ацетальдегида и массовый расход ацетальдегида m_a на входе, при которых концентрация уксусной кислоты на выходе будет максимальной:

$$CH_3CHO + O_2 \xrightarrow{k_1} CH_3CO_3H;$$
 $CH_3CO_3H + CH_3CHO \xrightarrow{k_2} 2CH_3COOH + Q_2;$
 $\alpha_1 = \alpha_2 = 2; A_1 = 12\ 000; E_1 = 53\ 000\ Дж/моль; A_2 = 380;$
 $E_2 = 47\ 000\ Дж/моль; Q_2 = 23\ 800\ Дж/моль; v_{O2\ вx} = 2\ m^3/c; V = 10\ m^3;$

$$T_{\text{BX}} = 320 \text{ K}; \ \rho = 700 \text{ кг/м}^3; \ K_t = 9300 \text{ Bt/m}^2 \cdot \text{град}; \ T_t = 7 \text{ °C};$$

$$C_t = 2100 \text{ Дж/кг-град; } 5 \le F \le 10 \text{ м}^2; 1 \le m_{\text{asy}} \le 4 \text{ кг/c.}$$

При имитационном моделировании, выходная координата $C_{\text{укс.к-ты}}$, входная координата $T_{\text{вх}}$, $M_0 = 320$ K, $K = 800 \exp(-0.061 dt)$.

Литература: [1, 3, 10, 12, 24, 25, 38].

Вариант 39. Найти методом барьеров количество N реакторов и площадь теплообмена каждого реактора батареи последовательно соединенных полимеризаторов для синтеза каучука, при которых концентрация каучука на выходе из батареи реакторов будет максимальной. Учесть, что $N \le N_m$, где N_m – номер реактора, добавление которого приводит к увеличению концентрации каучука менее, чем на 0,1 %:

$$6000 \cdot C_1 \xrightarrow{k} C_2 + Q;$$

 C_1 – мономер (бутадиен); C_2 – полимер (каучук); α = 1; A = 310; E = 38 900 Дж/моль; Q = 14 400 кДж/моль; $C_{1\text{вх}}$ = 40 %; $T_{\text{вх}}$ = 30 °C; V_1 = = V_2 = ... = V_n = 1,5 м³; $V_{\text{вх}}$ = 1,1 м³/с; ρ = 800 кг/м³; C_t = 1800 Дж/кг·град, Z_1 = 0,054; Z_2 = 168; K_t = 8000 Вт/м²·град; T_t = 17 °C; $1 \le N \le 12$; $5 \le F \le 20$ м².

При имитационном моделировании выходная координата $C_{2\text{вых}}$, входная координата $T_{\text{вх}}$; $M_{\text{o}} = 30$ °C; $K = 100 \exp(-0.057 dt)$.

Литература: [1, 3, 10, 12, 24, 25].

Вариант 40. Найти методом покоординатного подъема с локализацией максимума по каждой координате методом чисел Фибоначчи температуру в аппарате полого типа для окисления оксида азота до диоксида и объем аппарата, при которых концентрация диоксида азота на выходе из аппарата будет максимальной:

$$2\text{NO} + \text{O}_2 \xrightarrow{k_1} 2\text{NO}_2;$$

$$\text{NO} + \text{NO}_2 \xrightarrow{k_3} \text{N}_2\text{O}_3;$$

$$\alpha_2 = \alpha_4 = 1; \ \alpha_1 = \alpha_3 = 2; \ v = 0,03 \ \text{м}^3/\text{c}; \ A_1 = 20 \ 000; \ E_1 = 38 \ 000 \ \text{Дж/моль};$$

$$A_2 = 5 \cdot 10^{10}; \ E_2 = 85 \ 000 \ \text{Дж/моль}; \ A_3 = 1 \cdot 10^6; \ E_3 = 56 \ 000 \ \text{Дж/моль};$$

$$A_4 = 5.10^7$$
; $E_4 = 60~000~$ Дж/моль; $\rho = 1.37~$ кг/м 3 ; $C_{NO~BX} = 60~$ %;

$$40 \le T \le 200$$
 °C; $1 \le V \le 10$ m³.

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{NO2Bыx}}$, входная координата $C_{\text{NO вx}}$; $M_0 = 27$ моль/м³; $K = 20 \exp(-0.092 dt)$

Литература: [1, 3, 10, 12, 24, 25].

Вариант 41. Найти методом сканирования с делением шага количество N ступеней многоступенчатого реактора смешения нитрирования бензола и температуру в реакторе, при которых концентрация $C_6H_5NO_2$ на выходе из реактора будет максимальной

$$C_6 H_6 + \text{HNO}_3 \xrightarrow{k_1} C_6 H_5 \text{NO}_2 + \text{H}_2 \text{O};$$

$$C_6 H_5 \text{NO}_2 + \text{HNO}_3 \xrightarrow{k_2} C_6 H_4 (\text{NO}_2)_2 + \text{H}_2 \text{O};$$

$$4 \text{HNO}_3 \xrightarrow{k_3} 4 \text{NO}_2 + 2 \text{H}_2 \text{O} + \text{O}_2;$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = 2; \ \alpha_3 = 1; \ \nu = 1 \cdot 10^{-5} \ \text{m}^3 / \text{c}; \ A_1 = 20 \ 000; \ E_1 = 53 \ 000 \ \text{Дж/моль};$$

$$A_2 = 25 \ 000; \ E_2 = 60 \ 000 \ \text{Дж/моль}; \ A_3 = 2,2 \cdot 10^8; \ E_3 = 75 \ 000 \ \text{Дж/моль};$$

$$V_1 = V_2 = \dots = V_n = 1 \cdot 10^{-4} \text{m}^3; \ C_{\text{бенз вх}} = 25 \ \%; \ \rho = 1170 \ \text{кг/m}^3;$$

$$C_{\text{HNO3 BX}} = 30 \%$$
; $1 \le N \le 10$; $290 \le T \le 340 \text{ K}$.

При имитационном моделировании выходная координата. $C_{\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_{2\text{вых}}}$; входная координата $C_{\text{бензол вх}}$; $M_0 = 3750 \text{ моль/м}^3$; $K = 1100 \exp(-0.084 dt)$.

Литература: [1, 3, 12, 24, 25, 26, 32].

Вариант 42. Найти методом перебора с делением шага объем реактора с мешалкой синтеза полиэтилена, при котором технологическая составляющая прибыли *PR* будет максимальной:

$$2000 C_2H_4 \xrightarrow{k} (-C_2H_4-)_{2000};$$

$$PR = m_{\Pi} \coprod_{\Pi} - m_{\Im} \coprod_{\Im} - q_t \coprod_{q};$$

 $m_{\rm II}$ – массовый расход полиэтилена на выходе; $m_{\rm 3}$ – массовый расход этилена на выходе; q_t – расход тепла, идущего на нагрев реакционной массы; $\coprod_{\rm II}$. $\coprod_{\rm 3}$. $\coprod_{\rm 4}$ – соответственно, цена полиэтилена, этилена и тепла. Диаметр реактора равен его высоте. Теплообмен осуществляется через боковые стенки реактора и днище.

$$\alpha_1 = 1$$
; $A = 12~000$; $E = 68~000~$ Дж/моль; $m_{\text{вх}} = 3~$ кг/с; $T_t = 600~$ K;

$$T_{\text{BX}} = 400 \text{ K}$$
; $K_t = 800 \text{ Bt/m}^2 \cdot \text{град}$; $C_t = 1800 \text{ Дж/кг} \cdot \text{град}$; $\rho = 130 \text{ кг/m}^3$;

$$C_{\text{этил вх}} = 20 \%$$
; $\coprod_{\Pi} = 300 \text{ р./кг}$; $\coprod_{\Omega} = 100 \text{ р./кг}$;

$$\coprod_{a} = 20 \cdot 10^{-8} \text{ р./Дж; } 1 \leq V \leq 20 \text{ м}^{3}.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{полиэт}}$ вых, входная координата T_t ; $M_0 = 600$ K; $K = 480 \exp(-0.06 dt)$.

Литература: [1, 3, 10, 12, 24, 25, 35].

Вариант 43. Найти методом возможных направлений Зойтендейка температуру в реакторе полого типа синтеза хлористого этила и объем реактора, при которых концентрация хлористого этила на выходе будет максимальной:

$$C_2H_4 + HCl \xrightarrow{k_1 \atop k_2} C_2H_5Cl;$$

$$\alpha_1$$
= 2; α_2 = 1; ν = 0,02 м³/c; A_1 = 1,2; E_1 = 8480 Дж/моль; A_2 = 90;

$$E_2 = 29~000~$$
Дж/моль, $C_{\text{этил вх}} = 45~\%$; $C_{\text{HCl вx}} = 40~\%$; $\rho = 1.45~\text{кг/м}^3$;

$$100 \le T \le 250$$
 °C; $1 \le V \le 10$ m³.

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{С2H}_5\text{Cl}_{\text{вых}}}$; входная координата $C_{\text{этилен вх}}$; $M_0 = 23$ моль/м³; $K = 20 \exp(-0.093 dt)$.

Литература: [1, 3, 12, 15, 24-26].

Вариант 44. Найти методом компенсирующих констант объем сульфатной печи для производства сульфата натрия и температуру теплоносителя, при которых производительность по сульфату натрия будет максимальной:

$$2NaCl + H_2SO_4 \xrightarrow{k_1 \atop k_2} Na_2SO_4 + 2HC1;$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = 2$$
; $A_1 = 550$; $E_1 = 118\,000\,$ Дж/моль; $A_2 = 15$;

$$E_2$$
 = 130 000 Дж/моль; $T_{\rm BX}$ = 800 K; $m_{\rm NaCl~BX}$ = 0,1 кг/с; $m_{\rm H2SO4~BX}$ = 0,06 кг/с; K_t = 4650 Вт/м 2 ·град; C_t = 3100 Дж/кг·град; F = 15 м 2 ; ρ = 3500 кг/м 3 ;

$$600 \le t_T \le 700 \text{ °C}; 1 \le V \le 2 \text{ M}^3.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{Na}_2\text{SO}_{4\text{вых}}}$; входная координата $T_{\text{вх}}$; M_0 = 800 K, K = 870exp(-0,089dt).

Литература: [1, 3, 12, 24, 25, 26, 38].

Вариант 45. Найти методом скользящего допуска объем газогенератора кипящего слоя и температуру в реакторе, при которых выход оксида углерода будет максимальным:

$$2C + O_2 \xrightarrow{k_1} 2CO;$$

$$C + H_2O \xrightarrow{k_2} CO + H_2;$$

 $\alpha_1 = \alpha_2 = 2$; $A_1 = 1,2$; $E_1 = 79\ 000\ Дж/моль$; $A_2 = 1,8$; $E_2 = 84\ 000\ Дж/моль$;

$$m_{\text{C}_{\text{BX}}} = 0.1 \text{ кг/c}; \ v_{\text{кислород BX}} = 0.09 \text{ m}^3/\text{c}; \ v_{\text{пар BX}} = 0.0002 \text{ m}^3/\text{c};$$
 $\rho_{\text{пара}} = 500 \text{ кг/m}^3; \ \rho = 726 \text{ кг/m}^3; \ 0.2 \le V \le 2.6 \text{ m}^3; \ 1000 \le T \le 1100 \text{ K}.$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{СОвых}}$; входная координата $m_{\text{C}_{\text{вх}}}$; $M_0 = 0,1$ кг/с; $K = 0,0004 \exp(-0,053 dt)$.

Литература: [1, 3, 12, 24, 25, 26, 38].

Вариант 46. Найти методом проектирования градиента температуру этана на входе в адиабатическую колонну крекинга этана и высоту колонны, при которых выход этилена будет максимальным:

$$C_2H_6 \xrightarrow[k_2]{k_1} C_2H_4 + H_2 + Q;$$

 α_1 = 1; α_2 = 2; u = 0,01 м/с; A_1 = 2,1; E_1 = 93 000 Дж/моль; A_2 = 175;

$$E_2$$
= 104 000 Дж/моль; Q = 80 784 Дж/моль; C_t = 1900 Дж/кг·град; ρ = 1,32 кг/м³; 700 \leq $T_{\rm nx}$ \leq 900 °C; 0,1 \leq H \leq 5 м.

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{этилен вых}}$; входная координата $C_{\text{этана}}$; $M_0 = 30$ моль/м³; $K = 13 \exp{(-0.072 dt)}$.

Литература: [1, 3, 10, 12, 24–26].

Вариант 47. Найти методом внутренней точки температуру теплоносителя на входе в реактор крекинга бутана и высоту реактора, при которых концентрация этилена не выходе будет максимальной:

$$C_4H_{10} \xrightarrow{k} 2C_2H_4 + H_2.$$

Теплоноситель (гранулы глинозема) движется параллельно потоку газа с одинаковой с ним скоростью и занимает половину объема реактора.

$$\alpha$$
 = 1; u = 1 м/c; A = 12,45; E = 12 300 Дж/моль; средний диаметр гранулы глинозема DN = 0,01 м; $T_{\rm r \, BX}$ = 260 °C; $\rho_{\rm r}$ = 2,5 кг/м³; $\rho_{\rm r}$ = 1200 кг/м³; $C_{\rm r}$ = 2400 Дж/кг·град; $C_{\rm r}$ = 740 Дж/кг·град;

$$a_t = 1.8 \text{ Bт/м}^3$$
град; $1 \le H \le 10 \text{ м}$; $1000 \le T_{\text{\tiny T}} \le 1200 \text{ °C}$.

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{эт вых}}$; входная координата $C_{\text{бут}}$; $M = 30 \text{ моль/м}^3$; $K = 8\exp(-0.072 dt)$.

Литература: [1, 3, 12, 24, 25, 26, 38].

Вариант 48. Найти методом перебора с делением шага массовый расход апатита на входе в реактор производства суперфосфата (суперфосфатной камеры), при котором объем камеры будет минимальным:

$$Ca_5F(PO_4)_3 + 5H_2SO_4 + 5nH_2O \xrightarrow{k_1} 3H_3PO_4 + 5(CaSO_4\cdot 0, 5H_2O) + HF;$$
 $Ca_5F(PO_4)_3 + 7H_3PO_4 + 5H_2O \xrightarrow{k_2} 5Ca(H_2PO_4)_2\cdot H_2O + HF;$
 $\alpha_1 = \alpha_2 = 2, A_1 = 5\cdot 10^2; E_1 = 44\ 000\ \text{Дж/моль}; A_2 = 4,3\cdot 10^2;$
 $E_2 = 41\ 000\ \text{Дж/моль}; m_{\text{серн.кисл.вx}} = 50\ \text{кг/c}; C_{\text{серн.кисл.вx}} = 68\ \%;$
производительность реактора по суперфосфату $P_{\text{вых}} \ge 12\ \text{кг/c};$
 $T = 390\ \text{K}; \rho = 1900\ \text{кг/m}^3; 1 \le m_{\text{вх}} \le 30\ \text{кг/c}.$

При имитационном моделировании выходная координата $P_{\text{вых}}$; входная координата $m_{\text{серн.кисл.вx}}$; M_0 =50 кг/с; K = 75exp(-0,091dt).

Литература: [1, 3, 10, 12, 24, 25, 35].

Вариант 49. Найти методом последовательной безусловной оптимизации объем реактора кипящего слоя получения хлора и температуру в реакторе, при которых выход хлора будет максимальным

$$4HCl + O_2 \xrightarrow{k} 2Cl_2 + 2H_2O.$$

Реакция протекает в псевдоожиженном слое катализатора на его поверхности (катализатор – сплав хлоридов калия и окиси железа). Катализатор – гранулы диаметром 1 см занимает половину объема реактора.

$$\alpha=2;\ A=650;\ E=18\ 000\ \text{Дж/моль};\ \rho=1,5\ \text{kg/m}^3;\ K_{\text{m сол кисл}}=0,1\ \text{m/c};$$

$$K_{\text{m кислор}}=0,15\ \text{m/c};\ K_{\text{m хрора}}=0,18\ \text{m/c};\ C_{\text{сол кисл вх}}=35\ \%;\ C_{\text{кислор вх}}=10\ \%;$$

$$v=0,001\ \text{m}^3/\text{c};\ 400\le t\le 500\ ^{\circ}\text{C};\ 0,1\le V\le 2\ \text{m}^3.$$

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{хлор вых}}$, входная координата $C_{\text{сол кисл вх}}$; $M_0 = 15$ моль/м³; $K = 11 \exp(-0.07 dt)$.

Литература: [1, 3, 12, 24, 25, 26, 38].

Вариант 50. Найти методом Вейсмана высоту H колонны синтеза карбамида и температуру в колонне, при которых концентрация карбамида на выходе будет максимальной

$$2NH_3 + CO_2 \xleftarrow{k_1 \atop k_2} NH_2COONH_4;$$

$NH_2COONH_4 \xrightarrow{k_3} (NH_2)_2CO + H_2O;$

 α_1 = 2; α_2 = α_3 = 1; A_1 = 3000; E_1 = 92 000 Дж/моль; A_2 = 15 000; E_2 = 104 000 Дж/моль; A_3 = 300; E_3 = 53 000 Дж/моль; u = 0,1 м/с; ρ = 680 кг/м³; $C_{\text{аммиак вх}}$ = 60 %; 450 \leq T \leq 600 K; 1 \leq H \leq 10 м.

При имитационном моделировании выходная координата $C_{\text{кар6}}$; входная координата $C_{\text{аммиак вх}}$; $M_0 = 24~000$ моль/м³; $K = 10^6 \exp(-0.079 dt)$.

Литература: [1, 3, 10, 12, 24, 25, 38].

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Построение математических моделей химико-технологических объектов / Е.Г. Дудников, В.С. Балакирев, В.Н. Кривсунов, А.М. Цирлин. Л. : Химия, 1970. 312 с.
- 2. Системы автоматизированного проектирования : в 9 кн. Кн. 4. Математические модели технических объектов : учебное пособие для втузов / под ред. И. П. Норенкова. М. : Высшая школа, 1986. 160 с.
- 3. Шеннон, Р. Имитационное моделирование систем искусство и наука / Р. Шеннон. М. : Мир, 1975. 502 с.
- 4. Нейлор, Т. Машинные имитационные эксперименты с моделями экономических систем / Т. Нейлор. М. : Мир, 1975. 502 с.
 - 5. Рязанов, Ю.А. Случайные процессы / Ю.А. Рязанов. М.: Наука. 1971. 288 с.
 - 6. Таубман, Е.И. Выпаривание / Е.И. Таубман. M. : Химия, 1982. 328 c.
- 7. Закгейм, А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов / А.Ю. Закгейм. М. : Химия, 1982. 288 с.
- 8. Лапин, А.А. Итерационные методы анализа и поиска решений задач автоматизированного проектирования / А.А. Лапин. М.: МИХМ, 1984. 80 с.
- 9. Френкс, Р. Математическое моделирование в химической технологии / Р. Френкс. М. : Химия, 1971. 272 с.
- 10. Общая химическая технология: в 2 ч. / под ред И.П. Мухленова. М. : Высшая школа, 1984.- Ч. 2.-264 с.
- 11. Лапин, А.А. Автоматизированное проектирование и разработка САПР трубчатых химических реакторов / А.А. Лапин, Н.В. Лапина. Тамбов : TИXM, 1991. 76 с.
- 12. Бояринов, А.И. Методы оптимизации в химической технологии / А.И. Бояринов, В.В. Кафаров. М. : Химия, 1975. 500 с.
- 13. Сухарев, А.Г. Курс методов оптимизации / А.Г. Сухарев, А.В. Тимохов, В.В. Федоров. М. : Наука, 1986. 328 с.
- 14. Фиакко, А. Нелинейное программирование. Методы последовательной безусловной минимизации / А. Фиакко, Г. Мак-Кормик. М. : Мир, 1972. 240 с.
- 15. Линейное и нелинейное программирование / И.И. Ляшенко, Е.А. Карагодова, Н.В. Черникова и др. Киев : Вища школа, 1975. 372 с.
 - 16. Карманов, В.Г. Математическое программирование / В.Г. Карманов. М.: Наука, 1986. 288 с.
- 17. Алексеев, О.Г. Комплексное применение методов дискретной оптимизации / О.Г. Алексеев. М. : Нау-ка, 1987. 248 с.
- 18. Эльсгольц, Л.Э. Дифференциальные уравнения и вариацион-ное исчисление / Л.Э. Эльсгольц. М. : Наука, 1969. 424 с.
- 19. Гноенский, Л.С. Математические основы теории управляемых систем / Л.С. Гноенский, Г.А. Каменский, Л.Э. Эльсгольц. М. : Наука, 1969. 512 с.
 - 20. Самарский, А.А. Численные методы / А.А. Самарский, А.В. Гулин. М.: Наука, 1989. 432 с.
- 21. Бахвалов, Н.С. Численные методы / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. М. : Наука. 1987. 600 с.
 - 22. Михлин, С.Г. Численная реализация вариационных методов / С.Г. Михлин. М.: Наука, 1966. 432 с.
- 23. Математическая модель реактора для получения нитрила никотиновой кислоты / Быков Ю.М., Гусейнов Э.М., Крюков Г.К. и др. // Автоматизация химической промышленности : сборник. М. : 1973. С. 18.

- 24. Базара, М. Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы / М. Базара, К. Шэтти. М.: Химия, 1988. 583 с.
- 25. Бусленко, В.Н. Автоматизация имитационного моделирования сложных систем / В.Н. Бусленко. М. : Наука. 1977. 239 с.
- 26. Вэйлас, С. Химическая кинетика и расчеты промышленных реакторов / С. Вэйлас. М. : Химия, 1967. 416 с.
- 27. Кудрявцев, Н.Т. Электролитические покрытия металлами / Н.Т. Кудрявцев. М. : Химия, 1979. 352 с.
- 28. Производство аммиачной селитры в агрегатах большой единичной мощности / М.Е. Иванов, В.М. Олевский, Н.Н. Голяков и др. М. : Химия, 1990. 288 с.
- 29. Классен, П.В. Основные процессы технологии минеральных удобрений / П.В. Классен, И.Г. Гришаев. М.: Химия, 1990. 304 с.
- 30. Лукьянов, П.И. Пиролиз углеводородов из нефтяного сырья / П.И. Лукьянов, А.Г. Басистов. М. : Гостоптехиздат, 1962.-273 с.
- 31. Благонравова, А.А. Лаковые эпоксидные смолы / А.А. Благонравова, А.И. Непомнящий. М. : Химия, 1970. 248 с.
- 32. Юкельсон, И.И. Технология основного органического синтеза / И.И. Юкельсон. М.: Химия, 1968. 848 с.
- 33. Плановский, А.Н. Аппаратура промышленности полупродуктов и красителей / А.Н. Плановский, Д.А. Гуревич. М.: Госхимиздат. 1961. 504 с.
 - 34. Банди, В. Методы оптимизации. Вводный курс / В. Банди. М.: Радио и связь, 1988. 128 с.
 - 35. Турчак, Л.И. Основы численных методов / Л.И. Турчак. М. : Наука, 1987. 320 с.
- 36. Минимизация в инженерных расчетах на ЭВМ. Библиотека программ / С.В. Гуснин, Г.А. Смельянов, Г.В. Резников и др. М. : Машиностроение, 1981. 120 с.
- 37. Моисеев, Н.Н. Численные методы в теории оптимальных систем / Н.Н. Моисеев. М. : Наука, 1971. 424 с.
- 38. Химмельблау, Д. Прикладное нелинейное программирование / Д. Химмельблау. М.: Мир, 1975. 536 с.
- 39. Малыгин, Е.Н. Математическая модель реактора окисления бензола до малеинового ангидрида / Е.Н. Малыгин // Труды ТИХМ. Тамбов, 1969. Вып. 4. С. 398–401.
- 40. Определение коэффициентов математической модели реактора окисления бензола до малеинового ангидрида / В.С. Балакирев, Н.В. Воронов, И.М. Глазырин и др. // Труды ТИХМ. Тамбов, 1970. Вып. 4. С. 441–444.
- 41. Балакирев, В.С. Оптимальное распределение температуры в реакторе окисления бензола до малеинового ангидрида / В.С. Балакирев, Е.Н. Малыгин // Труды ТИХМ. Тамбов, 1971. Вып. 6. С. 147–150.
- 42. Цыганков, М.П. Вопросы оптимального управления циклонным сажевым реактором / М.П. Цыганков // Труды ТИХМ. Тамбов, 1971. Вып. 6. C. 140–147.
 - 43. ХЕМКАД. Версия 3.0. Руководство пользователя. М., МХТИ, 1995.
- 44. Исследование и проектирование химико-технологических процессов с применением моделирующей программы ChemCad : учебное пособие / Н.Н. Зиятдинов, В.М. Емельянов, Л.А. Смирнова, Т.В. Лаптева. Казань : Казанский технол. ун-т, 2001. 84 с.

СОДЕРЖАНИЕ

BBI	ЕДЕНИЕ	3
1.	ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПРО- ЕКТИРУЕМЫХ ОБЪЕКТОВ	4
	Лабораторная работа 1.1 СОСТАВЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТА- ТИКИ ОБЪЕКТА С СОСРЕДОТОЧЕННЫМИ КООРДИ- НАТАМИ И ПОЛУЧЕНИЕ СТАТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕ- РИСТИК НА ЭВМ	14
	Лабораторная работа 1.2 СОСТАВЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДИ- НАМИКИ ОБЪЕКТА С СОСРЕДОТОЧЕННЫМИ КООР- ДИНАТАМИ И ПОЛУЧЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ХА- РАКТЕРИСТИК НА ЭВМ	19
	Лабораторная работа 1.3 СОСТАВЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТА- ТИКИ ОБЪЕКТА С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ КООРДИНА- ТАМИ И ПОЛУЧЕНИЕ СТАТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИ-	
	СТИК НА ЭВМ	23
	РАКТЕРИСТИК НА ЭВМ	29
	Лабораторная работа 1.6 ИССЛЕДОВАНИЕ АЛГОРИТМОВ ГЕНЕРАЦИИ ПСЕВ- ДОСЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ ДЛЯ ЦЕЛЕЙ ИМИТА- ЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ	38
	Лабораторная работа 1.7 МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЪЕКТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХ- НОЛОГИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАКЕТА ПРИКЛАД- НЫХ ПРОГРАММ ChemCAD	42
2.	КОНЕЧНОМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ	63
	СЕЧЕНИЯ И ФИБОНАЧЧИ	6571
	Лабораторная работа 2.3 РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ БЕЗУСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ МЕТОДАМИ НАИСКОРЕЙШЕГО СПУСКА И СОПРЯ- ЖЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ	78
	Лабораторная работа 2.4 РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ С ОГРАНИЧЕНИЯМИ-НЕРАВЕН- СТВАМИ МЕТОДОМ ШТРАФНЫХ ФУНКЦИЙ	83
	Лабораторная работа 2.5 РЕШЕНИЕ ОБЩЕЙ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ КОМБИНИРОВАННЫМ МЕТОДОМ	90
	Лабораторная работа 2.6	94

105
109
119
120
122
125
156