**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**

Федеральное государственное автономное образовательное   
учреждение высшего образования

**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ**

**ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.03.01 «Химическая технология», профиль «Химическая технология подготовки и переработки нефти и газа»

**ОТЧЕТ ПО ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ №3**

|  |
| --- |
| Название работы |
| **Идентификация кинетических параметров при моделировании химических реакций** |
| Вариант |
| **Вариант ХХ** |
| По дисциплине |
| **Системный анализ процессов химической технологии** |

Студент

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Группа** | **ФИО** | **Подпись** | **Дата** |
|  |  |  | **19.03.2021** |

Руководитель

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Должность** | **ФИО** | **Ученая степень, звание** | **Подпись** | **Дата** |
| **Доцент** | **Чузлов В.А** | **к.т.н.** |  |  |

Томск – 2021 г.

**Цель работы:**

1. Составьте кинетическую модель в соответствии с представленной схемой превращений.
2. Решить полученную кинетическую модель на заданном интервале по времени при заданных начальных концентрациях компонентов, участвующих в химических превращениях, методом Рунге-Кутты.
3. Определить кинетические параметры химических превращений, используя генетический алгоритм и данные по наблюдаемым концентрациям химических веществ, участвующих в реакциях, при различном времени процесса.
4. Построить зависимости изменения концентраций химических веществ от времени протекания реакций по исходным данных и результатам расчета.

**Исходные данные:**

Схема превращений:

Время процесса – 4,0 сек.

Таблица 1 – Начальные концентрации

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| C11H24 | C11H22 | C11H20 | Н2 |
| 0,8 | 0,1 | 0,1 | 0,0 |

Таблица 2 – Значение исходной концентрации во времени

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Время, сек. | C11H24 | C11H22 | C11H20 | H2 |
| 0,0 | 0,800000 | 0,100000 | 0,100000 | 0,000000 |
| 0,4 | 0,592651 | 0,233285 | 0,174063 | 0,281412 |
| 0,8 | 0,439050 | 0,277354 | 0,283596 | 0,544545 |
| 1,2 | 0,325249 | 0,274252 | 0,400500 | 0,775251 |
| 1,6 | 0,240959 | 0,248230 | 0,510811 | 0,969852 |
| 2,0 | 0,178496 | 0,213638 | 0,607866 | 1,129369 |
| 2,4 | 0,132246 | 0,177654 | 0,690099 | 1,257853 |
| 2,8 | 0,097956 | 0,144498 | 0,757546 | 1,359590 |
| 3,2 | 0,072582 | 0,115378 | 0,812039 | 1,439457 |
| 3,6 | 0,053772 | 0,090998 | 0,855230 | 1,501459 |
| 4,0 | 0,039836 | 0,071047 | 0,889116 | 1,549280 |

**Теоретическая часть:**

Генетический алгоритм– это эвристический алгоритм поиска, используемый для решения задач оптимизации и моделирования путём случайного подбора, комбинирования и вариации искомых параметров с использованием механизмов, аналогичных естественному отбору в природе.

Является разновидностью эволюционных вычислений, с помощью которых решаются оптимизационные задачи с использованием методов естественной эволюции, таких как отбор, мутация и скрещивание.

Отличительной особенностью генетического алгоритма является акцент на использовании оператора «скрещивания», который производит операцию рекомбинации решений-кандидатов, роль которой аналогична роли скрещивания в живой природе.

Описание генетического алгоритма:

1. Случайным образом задается множество генотипов начальной популяции. Они оцениваются с использованием «функции приспособленности», в результате каждый фенотип получает собственное значение приспособленности, определяющее насколько хорошо он описывает поставленную задачу;
2. Из полученного множества решений выбираются лучшие (по значению приспособленности);
3. К выбранным решениям применяются генетические операции мутации и скрещивания. В результате получают новые решения. Для них также вычисляется значение приспособленности и производится селекция лучших решений, которые попадают в следующее поколение;
4. Пункты 2 – 3 повторяются итеративно до достижения заданного критерия остановки алгоритма.

Критерии остановки алгоритма:

* Нахождение глобального или субоптимального решения;
* Исчерпание числа поколений, отпущенных на эволюцию.

**Метод Рунге-Кутте:**

Большой класс численных методов решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений и их систем:

где:*h* – шаг вычисления;

*f (x, y)*– правая часть дифференциального уравнения.

**Практическая часть:**

1. Для идентификаций кинетических параметров была составлена кинетическая модель, которая имеет вид:
2. Для решения данной модели была составлена программа в среде PascalABC c применением метода многомерной оптимизаций – генетический алгоритм. Решение данной модели производилось методом Рунге-Кутте на заданном интервале по времени при заданных начальных концентрациях реагентов. Программа расчета представлена в Приложении А.
3. В результате расчета программы были получены данные, приведенные в таблицах 3 и 4.

Таблица 3 – Полученные значения концентрации

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Время, сек. | C11H24 | C11H22 | C11H20 | H2 |
| 0 | 0,8 | 0,1 | 0,1 | 0 |
| 0,4 | 0,679406625 | 0,143847223 | 0,076746152 | 0,297339527 |
| 0,8 | 0,576991703 | 0,154171403 | 0,168836893 | 0,49184519 |
| 1,2 | 0,490014983 | 0,148319073 | 0,261665945 | 0,671650962 |
| 1,6 | 0,416149282 | 0,135406765 | 0,348443953 | 0,832294671 |
| 2,0 | 0,353418224 | 0,120126444 | 0,426455332 | 0,973037107 |
| 2,39 | 0,300143354 | 0,104805768 | 0,495050878 | 1,094907524 |
| 2,79 | 0,254899229 | 0,090521365 | 0,554579406 | 1,199680177 |
| 3,19 | 0,216475281 | 0,077698579 | 0,60582614 | 1,289350859 |
| 3,59 | 0,183843425 | 0,066433002 | 0,649723572 | 1,365880147 |
| 3,99 | 0,156130552 | 0,056661515 | 0,687207933 | 1,431077382 |

Таблица 4 – Полученные значения констант скорости и функции приспособленности

|  |  |
| --- | --- |
| Параметр | Значение |
| k1, с-1 | 6,520892 |
| k2, с-1 | 1,525549 |
| Функция приспособленности | 0,408479 |

1. По полученным результатам и исходным данным (Таблица 2) построили зависимость изменения концентрации химических веществ от времени протекания реакций по исходным данным, представленные на рисунке 1 – 4.

Рисунок 1 – Зависимость изменения исходной и расчетной концентрации С11Н24 от времени протекания процесса

Рисунок 2 – Зависимость изменения исходной и расчетной концентрации С11Н22 от времени протекания процесса

Рисунок 3 – Зависимость изменения исходной и расчетной концентрации С11Н20 от времени протекания процесса

Рисунок 4 – Зависимость изменения исходной и расчетной концентрации Н2 от времени протекания процесса

**Вывод:**

В ходе лабораторной работы была составлена кинетическая модель в соответствии с представленной схемой превращения, на основе которой была написана программа в среде PascalABC для решения данной системы с помощью метода Рунге-Кутте.

Решение данной модели основано на методе многомерной оптимизации – генетический алгоритм и определено в интервале времени от 0 до 4,0 с при заданных начальных концентрациях веществ, участвующих в реакциях.

В результате решения программы были определены такие кинетические параметры, как константы скорости реакций (k1=6,52 с-1, k2 = 1,53 с-1), концентрации веществ при заданном времени с шагом 0,4 с (Таблица 3). На основе полученных данных построили зависимости изменения концентрации химических веществ от времени протекания реакций по исходным данным и результатам расчета (Рисунок 1 – 4). Согласно полученным зависимостям, можно заметить значительное расхождение исходных концентраций от расчетных (Рисунок 1, 2, 3), для зависимости, представленной на рисунке 4 расхождение меньше. Расхождение исходных и расчетных концентраций свидетельствует о рассчитанной также в ходе решения модели функции приспособленности, значение которой составляет – 0,408479. Данное значение показывает суммарное квадратичное отклонение и является достаточно большим. Уменьшить данную величину, и, соответственно, погрешность расчета можно варьированием параметров генетического алгоритма (количество поколений, размер популяции и т.д).

**ПРИЛОЖЕНИЕ А**

Программа расчета

**uses**UGeneticAlgorithm;

**function**kin\_scheme (time: real; c, k: **array of** real): **array of** real;

**begin**

SetLength (result, c.Length);

result[0] := -k[0]\*c[0];

result[1] := k[0]\*c[0]-k[1]\*c[1];

result[2] := k[0]\*c[0]+k[1]\*c[1];

result[3] := k[1]\*c[1];

**end**;

**function**runge\_kutt (

func: **function**(time: real; c, k: **array of** real): **array of** real;

c, k: **array of** real; start, stop: real;

h: real := 0.01): **array of array of** real;

**function**sum(arr1, arr2: **array of** real; a: real): **array of** real;

**begin**

SetLength(result, arr1.Length);

**forvar**i := 0 **to** result.High**do**

result[i] := arr1[i]+a\*arr2[i];

**end**;

**begin**

**var**k1 := ArrFill(c.Length, 0.0);

**var**k2 := ArrFill(c.Length, 0.0);

**var**k3 := ArrFill(c.Length, 0.0);

**var**k4 := ArrFill(c.Length, 0.0);

**var**c\_ := copy(c);

**var**iter := Trunc((stop - start)/h)+1;

**var**time := start;

SetLength(result, iter);

**forvar**i := 0 **to** result.High**do**

SetLength(result[i], c.Length+1);

**forvar**i := 0 **to** result.High**do**

**begin**

result[i][0] := time;

**forvar**j :=0 **to** c\_.High**do**

result[i][j+1] := c\_[j];

k1 := func(time, c\_, k);

k2 := func(time + h / 2, sum(c\_, k1, h / 2), k);

k3 := func(time + h / 2, sum(c\_, k2, h / 2), k);

k4 := func(time + h, sum(c\_, k3, h), k);

**forvar**j := 0 **to** c\_.High**do**

c\_[j] += h / 6 \* (k1[j] + 2 \* k2[j] + 2 \* k3[j] + k4[j]);

time += h

**end**;

**end**;

**function**obj\_func(k, act\_values: **array of** real):real;

**begin**

**var**res := runge\_kutt(kin\_scheme, |0.8, 0.1, 0.1, 0.0|, k, 0.0, 4.0);

**var**res\_ := res[40][1:];

**Окончание приложения А**

**foreachvar**i**in** range(80, res.High, 40) **do**

res\_ := res\_ + res[i][1:];

**forvar**i := 0 **to** act\_values.High**do**

result+= (act\_values[i] - res\_[i]) \*\* 2

**end**;

**begin**

**var**act\_values: **array of** real;

**foreachvar**(i, item) **in** ReadLines ('act\_values.txt').Numerate **do**

**begin**

SetLength(act\_values, i);

act\_values[i-1] := item.ToReal;

**end**;

**var**k := genetic\_algorithm(||1e-3,10|, |1e-3,1||, obj\_func, act\_values)[0];

k.Println;

**var**res := runge\_kutt(kin\_scheme, |0.8, 0.1, 0.1, 0.0|, k[:^1], 0.0, 4.0);

**foreachvar**i**in** range(40, res.High, 40) **do**

res[i].Println;

**end**.