

**ЭФФЕКТИВНОСТЬ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
ПРОГРАММНОГО ПАКЕТА MATLAB
ДЛЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

А.Р.Сафаров

Институт химических проблем им. М.Ф.Нагиева Национальной АН Азербайджана

В работе приводится подробное описание решения системы дифференциальных уравнений с использованием программного пакета MATLAB на примере кинетической модели парофазного окисления этилового спирта в уксусную кислоту.

Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) занимает важное место при моделировании и оптимизации химико-технологических процессов. Теория дифференциальных уравнений является одним из самых больших разделов современной математики и представляет собой богатую, широко разветвленную теорию.

Основная особенность теории ОДУ в современной химико-технологической науке – это непосредственная связь теории ОДУ с приложениями. Изучая какие-либо физико-химические явления, исследователь, прежде всего, создает его математическую идеализацию, где записывает основные законы, управляющие этим явлением, в математической форме. Очень часто эти законы можно выразить в виде дифференциальных уравнений. Исследуя полученные дифференциальные уравнения вместе с дополнительными условиями, которые, как правило, задаются в виде начальных и граничных условий, инженер-технолог получает сведения о происходящем явлении. Изучение математической модели математическими методами позволяет не только получить качественные характеристики физико-химических явлений и рассчитать с заданной степенью точности ход реального процесса, но и дает возможность проникнуть в суть этих явлений, а иногда предсказать и новые физико-химические эффекты.

Из теории известно, что для решения функции дифференциального уравнения необходимо задать дополнительные

условия – начальные (решается задача Коши) и краевые (решается краевая задача). В результате при решении может быть получено требуемое частное решение ОДУ – одна функция для одного уравнения или конечное число функций для системы уравнений [1].

Важными для приложений являются исследование и нахождение методов численного решения ОДУ. Теория должна дать в руки инженера-технолога методы экономного и быстрого вычисления решения. В настоящее время важную роль в развитии теории ОДУ, в частности их численных решений, играет применение современных электронных вычислительных машин с использованием элементов программирования или готовых математических программных пакетов.

Конечно же, имеющиеся алгоритмы численных методов решения можно и самому спрограммировать, используя различные инструментальные средства программирования, к примеру с помощью языка C++, но в данном случае инженеру-химику придется также быть приличным программистом. При этом задача осложняется, когда приходится изменять решаемые функции, также следует точно учитывать используемые переменные, а в случае необходимости визуализации решений, это будет требовать еще более высокого уровня знаний в области программирования.

Поэтому для решения данной задачи встает проблема выбора удобного, относительно простого для использования, и в то же время эффективного пакета

прикладных программ. Для проведения моделирования в данной области были использованы различные пакеты прикладных программ. Однако наиболее удобной является система MATLAB.

MATLAB – одна из наиболее мощных математических систем, пользующаяся большой популярностью пользователей во всем мире. Она является универсальной и уникальной по своему характеру системой. Уникальность системы определяется следующими ее особенностями: система ориентирована на матричные операции; наличие большого числа библиотечных функций, делающих ее одновременно специализированной математической системой, предназначенной для решения ряда научных и инженерных задач; возможность диалога с другими математическими системами (Maple, Mathcad, MS Excel). В системе имеются готовые модули для решения широкого класса задач оптимизации, для решения дифференциальных уравнений, систем

дифференциальных уравнений, уравнений в частных производных и многое другое [2-3]

Для того чтобы показать эффективность решения СДУ с использованием программного пакета MATLAB, нами была выбрана кинетическая модель парофазного окисления этилового спирта в уксусную кислоту на основе цеолитного катализатора [4].

В работе [5] приведены результаты изучения кинетических закономерностей парофазного окисления этилового спирта в уксусную кислоту на природном цеолите – клиноптиллолите, и на их основе была разработана кинетическая модель процесса, которая занимает центральное место в математической модели, служащей основой для оптимального проектирования.

Кинетическая модель парофазного каталитического окисления этилового спирта в уксусную кислоту имела следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dA_1}{d\left(\frac{G_{\text{кат}}}{N_1^0}\right)} = \frac{k_3 b_1 b_3 P_1 P_4}{(1 + b_1 P_1 + b_2 \sqrt{P_2} + b_3 P_4 + b_4 P_5)^2} \\ \frac{dA_2}{d\left(\frac{G_{\text{кат}}}{N_1^0}\right)} = \frac{k_2 b_2 \sqrt{P_2} b_4 P_5 - k_3 b_1 b_3 P_1 P_4}{(1 + b_1 P_1 + b_2 \sqrt{P_2} + b_3 P_4 + b_4 P_5)^2} \\ \frac{dA_3}{d\left(\frac{G_{\text{кат}}}{N_1^0}\right)} = \frac{k_1 b_1 b_2 P_1 \sqrt{P_2} - k_2 b_2 \sqrt{P_2} b_4 P_5 - k_4 b_4 P_3 P_2 (1 + b_1 P_1 + b_2 \sqrt{P_2} + b_3 P_4 + b_4 P_5)}{(1 + b_1 P_1 + b_2 \sqrt{P_2} + b_3 P_4 + b_4 P_5)^2} \\ \frac{dA_4}{d\left(\frac{G_{\text{кат}}}{N_1^0}\right)} = \frac{2k_4 P_2 b_4 P_5}{1 + b_1 P_1 + b_2 \sqrt{P_2} + b_3 P_4 + b_4 P_5} \end{array} \right. \quad (1)$$

где A_i – выходы этилацетата, уксусной кислоты, ацетальдегида, и диоксида углерода соответственно; $\frac{G_{\text{кат}}}{N_1^0}$ - время контак-

та; b_1, b_2, b_3, b_4 – адсорбционные константы

$$X = 2A_1 + A_2 + A_3 + 0.5A_4$$

$$n_1 = N_1^0 (1 - X)$$

$$n_2 = N_2^0 - N_1^0 (A_1 + A_2 + 0.5A_3 + 1.5A_4)$$

$$n_3 = N_1^0 A_1$$

$$n_4 = N_1^0 A_2$$

$$n_5 = N_1^0 A_3$$

равновесия этиловым спиртом, кислородом, уксусной кислотой и ацетальдегидом; $k_i (i = \overline{1,4})$ – константы скоростей реакций.

Материальный баланс был представлен нижеследующими уравнениями:

(2)

$$n_6 = N_1^0 A_4$$

$$n_7 = 2n_3 + n_4 + n_5 + 1.5n_6$$

$$n_8 = N_3^0$$

где N_1^0, N_2^0, N_3^0 – моль/час, число молей этилового спирта, кислорода и азота, подаваемого на входе; n_1 – этиловый спирт, моль/час; n_2 – кислород, моль/час; n_3 – этилацетат, моль/час; n_4 – уксусная кислота, моль/час; n_5 – ацетальдегид, моль/час; n_6 – диоксид углерода; n_7 – вода, моль/час; n_8 – азот, моль/час; X – конверсия этилового спирта.

Парциальные давления компонентов определялись по следующей формуле:

$$P_i = \frac{n_i}{\sum_{i=1}^8 n_i} P_{об}, \quad (3)$$

где $P_{об}$ – общее давление системы ($P_{об}=1$ атм); P_i ($i = \overline{1,8}$) – парциальные давления

этилового спирта, кислорода, этилацетата, уксусной кислоты, ацетальдегида, диоксида углерода, воды и азота согласно приведенным индексам.

Используя комбинацию методов нелинейного программирования, были определены значения параметров предложенной кинетической модели [5].

Теперь опишем процедуру решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ) данной кинетической модели с использованием пакета MATLAB. Для этого мы должны в первую очередь создать m-файл функцию, где будет записана наша система уравнений. Ниже приводится листинг созданной m-файл функции:

```
function dy=uk(t,y)
dy=zeros(4,1);
ku1=6.3216; ku2=0.19081; ku3=0.59096; ku4=0.04118;
ku5=320.3; ku6=88.954; ku7=439.58; ku8=15312;
N10=0.043502128; N20=0.174008514; N30=0.217510642;
X=2*y(1)+y(2)+y(3)+0.5*y(4);
rn1=N10*(1-X);
rn2=N20-N10*(y(1)+y(2)+0.5*y(3)+1.5*y(4));
rn3=N10*y(1);
rn4=N10*y(2);
rn5=N10*y(3);
rn6=N10*y(4);
rn7=2*rn3+rn4+rn5+1.5*rn6;
rn8=N30;
sni=rn1+rn2+rn3+rn4+rn5+rn6+rn7+rn8;
p1=rn1/sni; p2=rn2/sni; p4=rn4/sni; p5=rn5/sni;
rm=1+ku5*p1+ku6*sqrt(p2)+ku7*p4+ku8*p5;
t1=ku5*p1/rm; t2=ku6*sqrt(p2)/rm; t3=ku7*p4/rm; t4=ku8*p5/rm;
rr1=ku1*t1*t2; rr2=ku2*t4*t2; rr3=ku3*t1*t3; rr4=ku4*t4*p2;
dy(1)=rr3;
dy(2)=rr2-rr3;
dy(3)=rr1-rr2-rr4;
dy(4)=2*rr4;
end;
```

Как видно из листинга m-файл функция носит название «uk» и имеет два параметра (t, y). Здесь t представляет собой независимую переменную неизвестных функций, что соответствует времени контакта $\frac{G_{кат}}{N_1^0}$. Определяемые неизвестные

функции, обозначенные через $dy(1), dy(2), dy(3), dy(4)$ представляют собой изменение выходов продуктов реакций A_1, A_2, A_3, A_4 . Затем создается нулевая матрица $dy=zeros(4,1)$, состоящая из одной строки, куда будут записываться результаты процесса интегрирования для каждого

продукта. Далее приводится инициализация констант скоростей реакций, начальных мольных скоростей входных реагентов $N10$ (спирт), $N20$ (кислород), $N30$ (азот). Вслед за этим задается уравнения материального баланса (2) и уравнение кинетики (1). Вызов функции на исполнение происходит из главного окна, посредством использования, так называемого решателя или солвера ode45:

```
[T Y]=ode45(@uk,[0 60],[0 0 0 0])
```

Здесь приводится название вызываемой m-файл функции, интервал интегрирования, а также начальные значения для каждого продукта. Следует отметить, что для решения СДУ в MATLAB реализованы различные численные методы. Их реализации названы солверами ОДУ и подробное описание алгоритмов солверов дано в справочной системе MATLAB.

Очень часто солвер ode45 дает вполне хорошие результаты, им стоит воспользоваться в первую очередь. Он основан на формулах Рунге-Кутты четвертого и пятого порядка точности. Солвер ode23 также основан на формулах Рунге-Кутты, но уже более низкого порядка точности. Имеет смысл применять ode23 в задачах, содержащих небольшую жесткость, когда требуется получить решение с невысокой степенью точности. Если же

требуется получить решение нежесткой задачи с высокой степенью точности, то наилучший результат даст ode113, основанный на методе переменного порядка Адамса-Бэшфорта-Милтона. Солвер ode113 оказывается особенно эффективным для нежестких СДУ, правые части, которых вычисляются по сложным формулам.

Если решаемая система является жесткой, то для решения подходит солвер ode15s, основанный на многошаговом методе Гира, который допускает изменение порядка. Если требуется решить жесткую задачу с невысокой степенью точностью, то хороший результат может дать солвер ode23s реализующий одношаговый метод Розенброка второго порядка.

Конечно же, при решении практических задач необходимо контролировать вычисления. Все солверы допускают задание ряда параметров, позволяющих повысить эффективность вычислений в зависимости от решаемой задачи.

Таким образом, как видно из вышеприведенного примера, для решения СДУ в системе MATLAB нам только необходимо задать правую часть СДУ в виде m-файл функции и указать в командной строке подходящий решатель.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мышкис А.Д. //Лекции по высшей математике. М.: Изд. «Наука». 1967. 640 с.
2. Кондрашов В.Е., Королев С.Б. //Matlab, как система программирования научно-технических расчетов. М.: Изд. «Мир». 2007. 350 с.
3. Поршнев С.В. Учебник Matlab 7. //Основы работы и программирования. Изд. «Бином». 2006. 320 с.
4. Патент SU №1549945 А1.
5. Алиев А.М., Кулиев А.Р., Меджидова С.М. и др. // Азерб. хим. журн. 2005. №1. с.10.

KİMYA-TEKNOLOJİ SİSTEMLƏRİNDƏ ADİ DİFERENSİAL TƏNLİKLƏR SİSTEMİNİN MATLAB PROQRAM PAKETİ VASİTƏSİ İLƏ HƏLL EDİLMƏSİNİN EFFEKTİVLİYİ

A.R.Səfərov

Məqalədə qaz fazada etil spirtinin sirkə turşusuna oksidləşməsinin kinetik modeli timsalında MATLAB proqram paketi vasitəsi ilə diferensial tənliklər sisteminin həll edilməsi yolları ətrafı göstərilib.

***EFFICIENCY OF THE SOLUTION OF SYSTEMS
OF ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS WITH THE HELP OF SOFTWARE
PACKAGE MATLAB FOR CHEMICAL-TECHNOLOGICAL SYSTEMS***

A.R.Safarov

The work provides a detailed description of the solution of system of differential equations with the help of software package MATLAB after the example of kinetic model of vapour-phase oxidation of ethyl spirit into acetic acid.