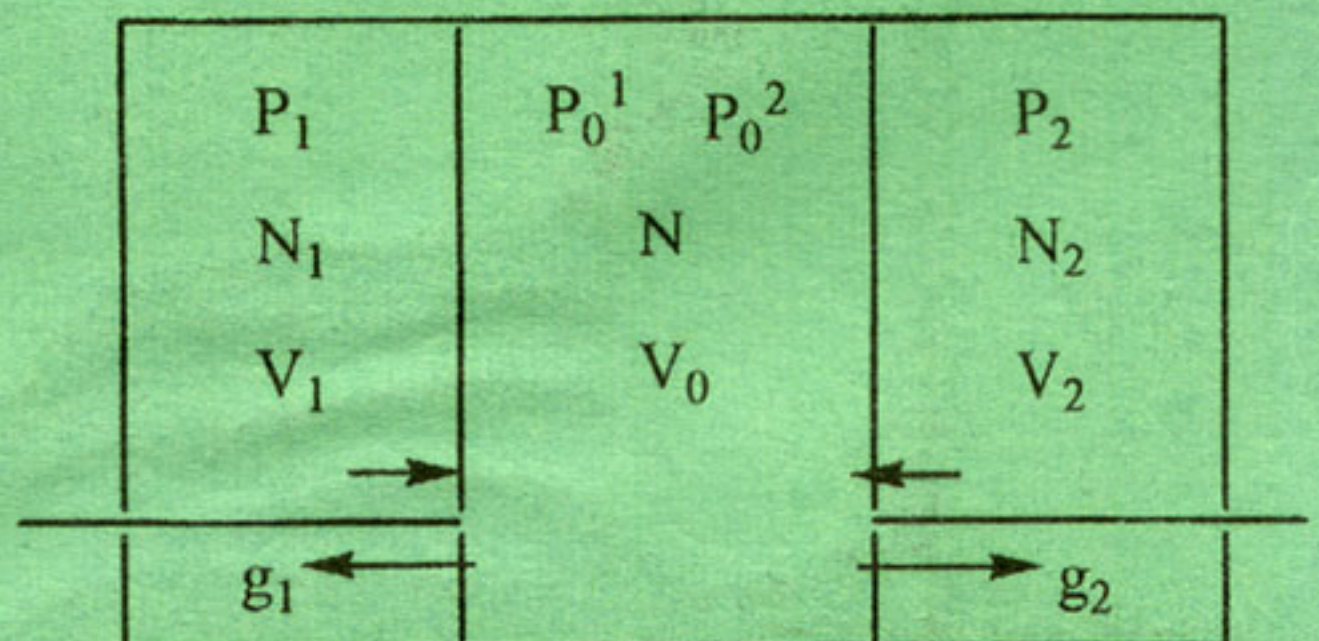
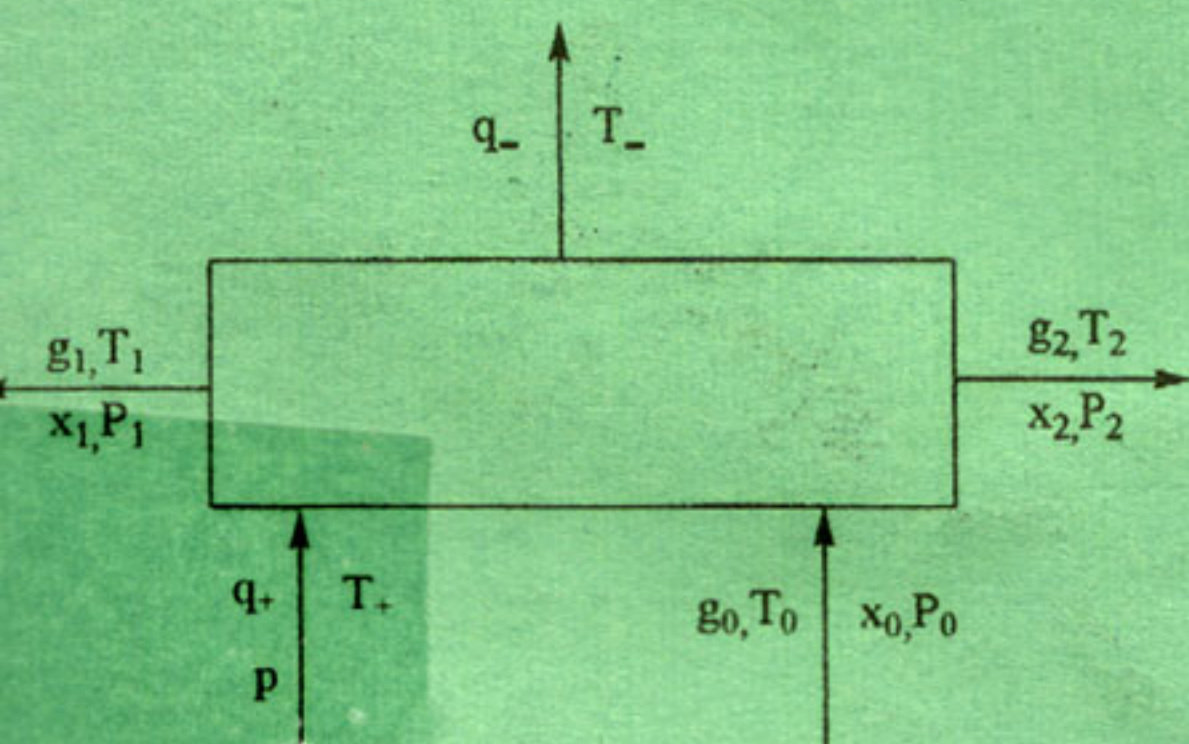
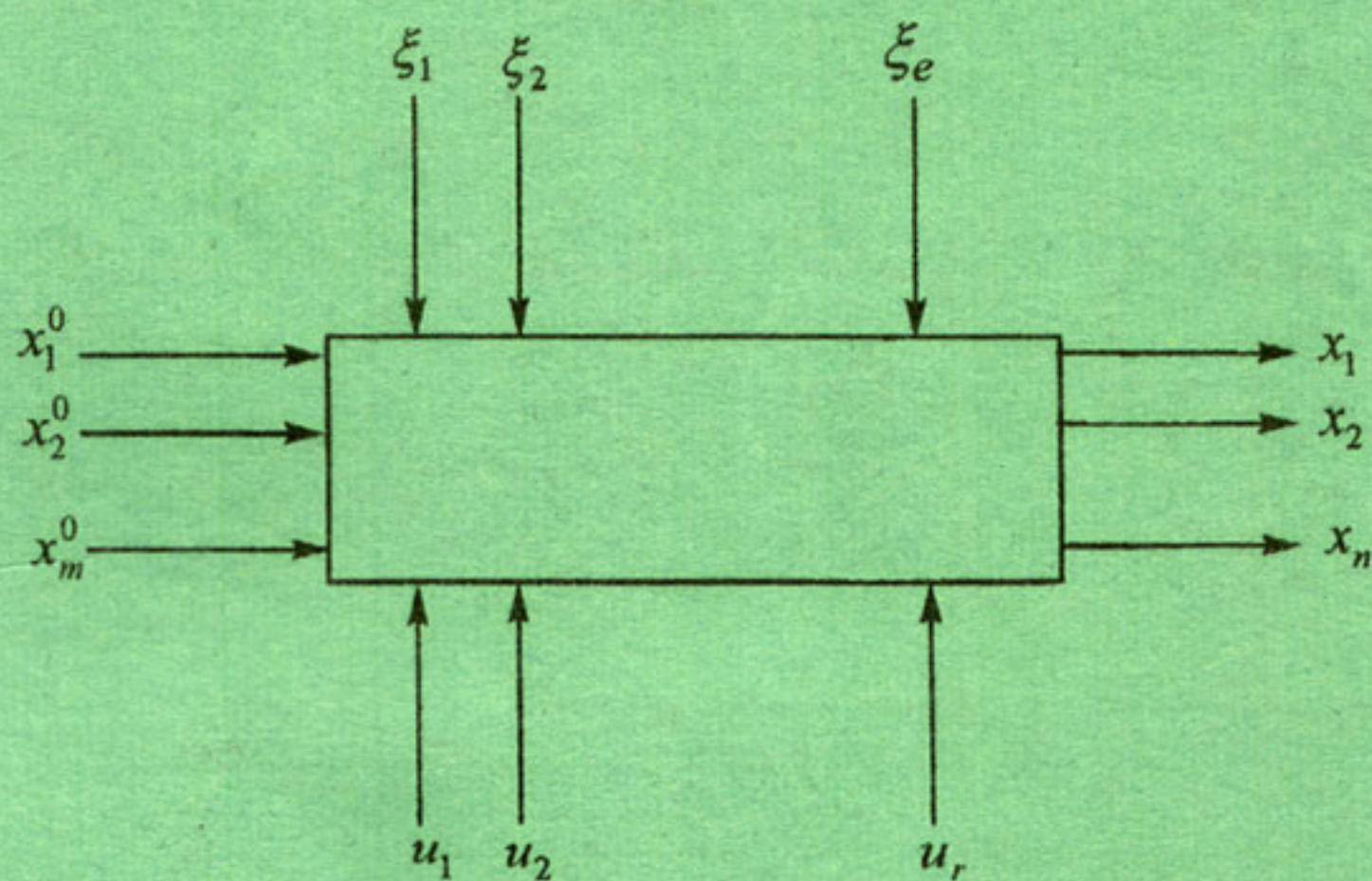


Ф.К. Шмидт

## Методы оптимизации в химической термодинамике и кинетике.





Федеральное агентство по образованию  
Государственное образовательное учреждение высшего  
профессионального образования  
Иркутский государственный университет

Ф.К. Шмидт

**Методы оптимизации в химической  
термодинамике и кинетике.**

Учебное пособие.

Иркутск  
2005

Печатается по решению научно-методического совета Иркутского государственного университета

УДК 66.012 (076.5); 536.7

Рецензент – доктор химических наук, профессор В.С. Ткач

Шмидт Ф.К. Методы оптимизации в химической термодинамике и кинетике, Учебн. пособие.- Иркутск: Иркутский госуниверситет, 2005, с. 214

В учебном пособии изложены математические основы методов оптимизации и управления: экстремум функций одной и многих переменных, принцип максимума Понтрягина, динамическое, линейное и нелинейное программирование. Рассмотрены основные положения химической термодинамики и кинетики. Специальные разделы посвящены управлению равновесием и расчетам равновесных составов, моделям конечных и экстремальных промежуточных состояний на языке математического программирования. Особое внимание уделено оптимизации в термодинамике необратимых процессов и в кинетике сложных реакций.

Учебное пособие предназначено для студентов химических факультетов, а также аспирантов, научных работников, занимающихся в области оптимизации химических процессов.

Назв. 57. Таб. 2, Ил. 42

© Ф.К. Шмидт, 2005



## Предисловие

Химика-исследователя и инженера в первую очередь интересует состояние химического равновесия и закономерности протекания химических процессов во времени. Ответы на эти вопросы дают химическая термодинамика и химическая кинетика. Эти два раздела составляют основу физической химии. Последняя треть XX века ознаменовалась широким использованием математических методов и вычислительной техники для математического описания химических процессов в термодинамическом и кинетическом аспектах. Результатом такого подхода стала возможность поиска наилучшего способа осуществления химических процессов, то есть их оптимизация.

Важнейшей задачей, стоящей перед химиками, является максимальное ускорение переноса результатов лабораторных исследований новых процессов и технологических схем в промышленность. Математическое описание процессов, их оптимизация позволяют реально ускорить промышленное внедрение результатов лабораторных исследований и обеспечивать оптимальные технологические режимы.

В предлагаемом учебном пособии, в доступной для химика форме, изложены математические основы методов оптимизации, получивших распространение в химии и химической технологии и их использование при изложении той части равновесной термодинамики, которая получила название термодинамики при конечном времени, а также химической кинетики. На наш взгляд такое пособие будет полезно студентам химических факультетов при углубленном изучении физической химии, а также широкому кругу научных и инженерно-технических работников предприятий, исследовательских и проектных организаций. Разумеется книга не претендует на изложение всех аспектов оптимизации в химии. Автор отдает себе отчет в том, что могут иметь место субъективные оценки того или иного вопроса. Он будет весьма признателен за любые указания на них для их исправления в будущем.

При написании автором использовано большое число книг, обзоров и оригинальных статей. Ссылки делаются в основном на монографии и учебные пособия, которые в наибольшей степени были использованы автором, особенно в части конкретных примеров.



«Наш мир – лучший из миров,  
ибо...в нем не происходит ничего,  
в чем не был бы виден смысл  
некоторого максимума или минимума.»  
Л. Эйлер

## **1 Математические основы методов оптимизации и управления.**

Оптимизация – это целенаправленная деятельность, заключающаяся в получении наилучших результатов при определенных условиях. Слово «оптимальный» происходит от латинского «*optimus*», что означает наилучший или совершенный. В количественном (математическом) аспекте оптимизация представляет собой поиск минимума или максимума функций или функционалов. Оба понятия минимум и максимум объединяются одним термином «экстремум», что означает крайний, поэтому задачи оптимизации называют также экстремальными.

Оптимизация любого процесса заключается в нахождении оптимума функции описывающей этот процесс (математическая модель процесса) и/или соответственно оптимальных условий проведения (оптимального управления) данного процесса.

Решение любой задачи оптимизации начинают с выявления цели оптимизации, то есть формулировки требований, предъявляемых к объекту оптимизации. Возможность решения оптимизационной задачи зависит также от того, насколько корректно сформулированы критерии оптимизации. В зависимости от конкретных объектов и условий в качестве критерия оптимизации может быть, например, термодинамический критерий – максимальная работа термодинамического процесса; технологический – максимальный выход продукта реакции при заданном расходе исходных веществ; экономический – минимальная стоимость продукта при заданной производительности и т.д.

На основании выбранного критерия оптимизации составляется так называемая целевая функция, которая описывает зависимость критерия оптимизации от параметров, влияющих на его значение. Задача оптимизации сводится к нахождению экстремума (максимума или минимума) целевой функции.

Необходимым условием правильной постановки оптимизационной задачи является требование нахождения оптимального значения только одной величины, при этом необходимо располагать ресурсами оптимизации, под которыми понимают свободу выбора значений некоторых параметров оптимизируемого процесса или объекта. Другими словами, оптимизируемый процесс или объект, должен обладать