

Matlab Script zum Aufrufen aller anderen Funktionen

Contents

- Konventionen für verwendete Vektoren und Matrizen:
- Aufgabe 4.1
- Aufgabe 4.2
- Aufgabe 4.3
- Startwertkombination
- Ausgaben:

Konventionen für verwendete Vektoren und Matrizen:

Drücke werden mit p bezeichnet

`p(1)=p(CO)`

`p(2)=p(H2O)`

`p(3)=p(H2)`

`p(4)=p(CO2)`

Aufgabe 4.1: p1

Aufgabe 4.2: p2

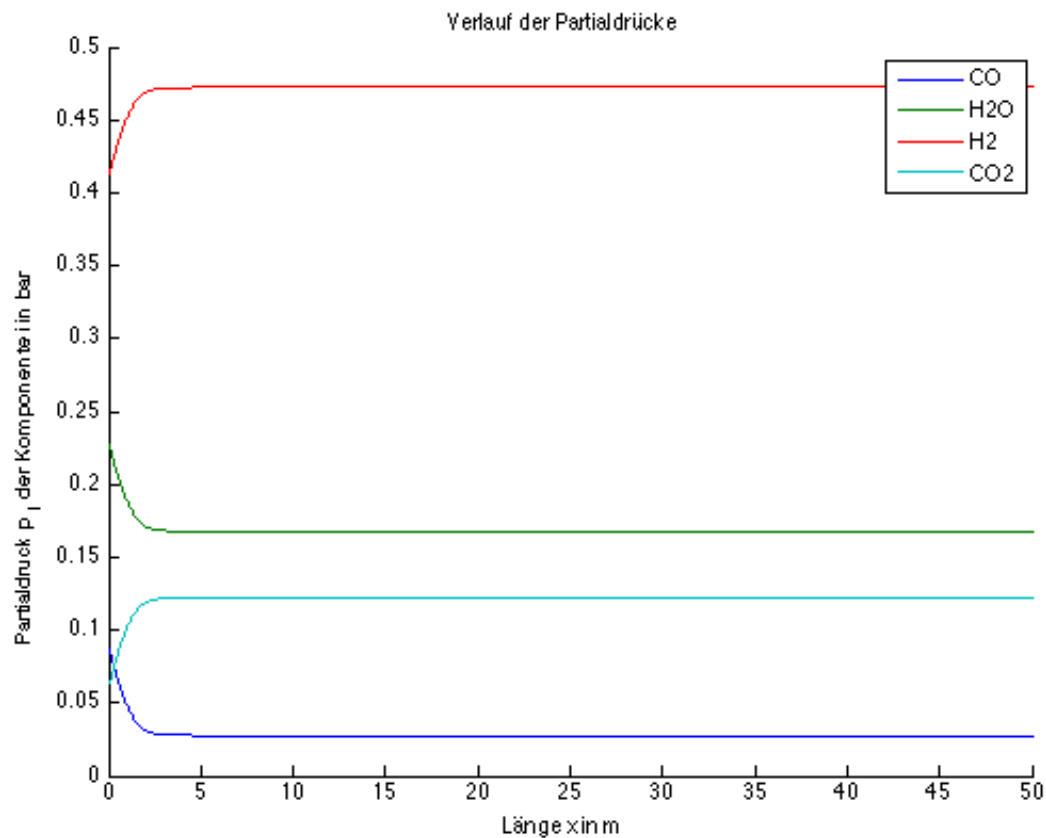
Längen tragen grundsätzlich ein x im Namen

```
clc; close all; clear all;
```

Aufgabe 4.1

```
tic;
T=673.15; %Temperatur der Reaktion [K]
xspan=[0 50]; %Länge des Reaktors [m]
[x p1]=DGLfunc(T,xspan); %Aufruf der von 'DGLfunc' zur Rückgabe der Partialdrücke
t1=toc;

% Figure1: Verlauf der Partialdrücke
fig1=figure(1);
hold on;
set(fig1,'Name','Verlauf der Partialdrücke'); %Name der figure wird geändert
plot(x,p1)
title('Verlauf der Partialdrücke');
xlabel('Länge x in m');
ylabel('Partialdruck p_i der Komponente i in bar');
legend('CO','H2O','H2','CO2')
```



Aufgabe 4.2

```

disp('#####')
disp('Output von fmincon')
tic;
%w ist Opt.variable
%w(1) ist die Temperatur
%w(2) ist die Länge

A=[];
b=[];
Aeq=[];
beq=[];
lb=[10;10]; %mind. 10m Länge und 10K Temperatur
ub=[1000; 1000]; %max. 1000K und 1000m Länge
%Bem.: lower and upper bound (lb, ub) werden nicht unbedingt benötigt

options=optimset('display','final','algorithm','sqp');
%display 'final' bewirkt eine einmalige Ausgabe am Ende der Optimierung, die
%anzeigt, warum fmincon die Suche beendet hat
w0_fmincon=[673.15 50]; %Startbedingungen für Suche mit T=v0_fmincon(1) und x=v0_fmincon
(2)

disp('_____')
disp('Aufgabe 4.2')

[w,x,exitflag]= fmincon(@(w)zielfunc_fmincon1(w),w0_fmincon,A,b,Aeq,beq,lb,ub,@(w)nonlin
1(w),options);
t2=toc; %Zeitnahem für Berechnung von Aufgabe 4.2

[~,p2]=DGLfunc(w(1),[0 w(2)]);

```

```
#####  
Output von fmincon
```

Aufgabe 4.2

Local minimum possible. Constraints satisfied.

fmincon stopped because the size of the current step is less than the default value of the step size tolerance and constraints are satisfied to within the default value of the constraint tolerance.

Aufgabe 4.3

Unterteilung des PFTR in acht äquidistante Abschnitte unter der idealisierten Annahme von konstanten Temperaturen

v ist die Optimierungsvariable
v(1) ist die konstante Temperatur für Abschnitt 1
...
v(8) ist die konstante Temperatur für Abschnitt 8
v(9) ist die Länge

Startwertkombination

-Temperatur: entsprechen ungefähr der Lösung von Aufgabe 4.2
-Länge: entspricht ungefähr der Lösung von Aufgabe 4.2
-Kommentar: man kann sich zwar denken, dass die Länge kleiner werden muss, aber für einen ersten Versuch sind die Startwerte durchaus vertretbar

```
tic;  
  
A=[];  
b=[];  
Aeq=[];  
beq=[];  
lb=[10;10;10;10;10;10;10;10;1];  
ub=[1000;1000;1000;1000;1000;1000;1000;1000;200];  
options=optimset('display','final-detailed','algorithm','sqp','MaxIter',5000,'MaxFunEvals',5000,'TolX',1e-10,'TolCon',1e-10,'TolFun',1e-10);  
%display 'final-detailed' bewirkt eine etwas ausführliche Ausgabe des  
%Grundes warum fmincon gestoppt hat. Zum Beispiel Ausgabe der  
%unterschriften Toleranzen usw.  
%MaxIter: Erhöht die Anzahl der maximalen Iterationen [Standard: 3000]  
%MaxFunEvals: maximale Anzahl der Funktionsaufrufe [Standard: #variables*100=900]  
%TolX: maximale Abweichung für Opt.var. [Standard: 1e-6]  
%TolCon: Toleranz für die Verletzung der Nebenbedingungen [Standard: 1e-6]  
%TolFun: Toleranz für die Abweichung des Funktionwertes selber [Standard: 1e-6]  
%alles weitere und viel genauer in der Matlab Hilfe unter:  
%fmincon->Options->All Algorithms  
  
v0_fmincon=[600 600 600 600 600 600 600 600 100]; %Startbedingungen für Suche  
  
disp('_____')  
disp('Aufgabe 4.3')
```

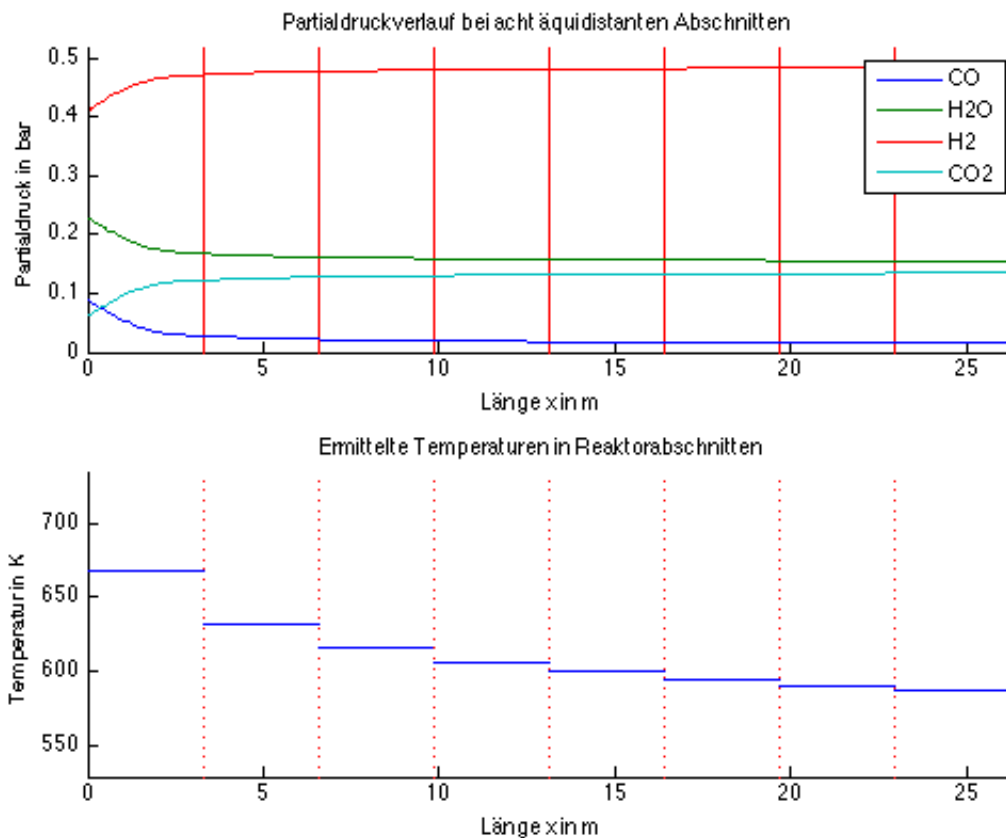
```
[v,x_end,exitflag] = fmincon(@(v)zielfunc_fmincon2(v),v0_fmincon,A,b,Aeq,beq,lb,ub,@(v)n
onlin2(v),options);
t3=toc;

%zum Plot des Ergebnisses
DGLfunc_end(v,true);
```

Aufgabe 4.3

Optimization stopped because the relative changes in all elements of x are less than options.TolX = 1.000000e-10, and the relative maximum constraint violation, 4.579670e-16, is less than options.TolCon = 1.000000e-10.

| Optimization Metric | Options |
|---|---------------------------|
| max(abs(delta_x./x)) = 7.89e-11 | TolX = 1e-10 (selected) |
| relative max(constraint violation) = 4.58e-16 | TolCon = 1e-10 (selected) |



Ausgaben:

```
%4.1
fprintf('\n \n');
disp('#####')
disp('Ausgabe aller ermittelten Ergebnisse')
disp('_____')
disp('Aufgabe 4.1');
disp(['Partialdruck CO am Ende des PFTR: ',num2str(p1(end,1),'% 10.6f'),'bar']);
disp(['Dauer: ',num2str(t1),'s'])
fprintf('\n'); %leere Zeile
```

```

%4.2
disp('_____')
disp('Aufgabe 4.2')
disp(['Länge: ',num2str(w(2)), 'm']);
disp(['Temperatur: ',num2str(w(1)), 'K']);
disp(['Partialdruck CO am Ende des PFTR: ',num2str(p2(end,1),'% 10.6f'),'bar'])
disp(['EXITFLAG beachten: ',num2str(exitflag)]);
disp(['Dauer: ',num2str(t2),'s']);
fprintf('\n'); %leere Zeile
%4.3
disp('_____')
disp('Aufgabe 4.3')
for i=1:8
    disp(['Temperatur(',num2str(i),')',': ',num2str(v(i)), 'K']);
end
disp(['Partialdruck CO am Ende des PFTR: ',num2str(DGLfunc_end(v,false),'% 10.6f'),'bar'
])
disp(['Länge des PFTR: ',num2str(x_end),'m'])
disp(['EXITFLAG beachten: ',num2str(exitflag)]);
disp(['Dauer: ',num2str(t3),'s'])

```

```

#####
Ausgabe aller ermittelten Ergebnisse

```

```

Aufgabe 4.1
Partialdruck CO am Ende des PFTR: 0.027758bar
Dauer: 0.49298s

```

```

Aufgabe 4.2
Länge: 96.1777m
Temperatur: 600.2628K
Partialdruck CO am Ende des PFTR: 0.015000bar
EXITFLAG beachten: 2
Dauer: 5.4876s

```

```

Aufgabe 4.3
Temperatur(1): 668.2245K
Temperatur(2): 631.1772K
Temperatur(3): 615.2621K
Temperatur(4): 605.9297K
Temperatur(5): 599.4594K
Temperatur(6): 594.547K
Temperatur(7): 590.6057K
Temperatur(8): 587.3241K
Partialdruck CO am Ende des PFTR: 0.015000bar
Länge des PFTR: 26.2441m
EXITFLAG beachten: 2
Dauer: 43.2619s

```