НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ

«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»

Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ДО ВИКОНАННЯ
ЛАБОРАТОРНИХ РОБІТ

для студентів напряму
підготовки 6.051301 «Хімічна технологія»

Затверджено Вченою радою ХТФ НТУУ «КПІ»

Київ – 2014

Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології: метод. вказівки до виконання лабораторних робіт для студ. напряму підготовки 6.051301 «Хімічна технологія» *[Електронний ресурс] / [уклад. Бойко Т. В., Фоглер О.М., Абрамова А.О.]. – К: 2014. – 162 с. Систем. вимоги: Pentium; 256 Mb RAM;Windows 2000, XP, Vista; MS Word 97-2003 – Назва з екрану.*

Гриф надано Вченою радою ХТФ НТУУ "КПІ",
протокол № 10 від 24.11.2014 р.

Електронне навчальне видання

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ОБ'ЄКТІВ ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ

Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт для студентів напряму підготовки «Хімічна технологія»

Укладачі:	Бойко Тетяна Владиславівна, канд. техн. наук, доц. Фоглер Ольга Миколаївна, канд. ф.-м. наук, доц. Абрамова Алла Олександрівна, канд. техн. наук, ст.викл.
Відповідальний редактор:	В. І. Бендюг, канд. техн. наук, доц.
Рецензент:	Н.М. Толстопалова, канд. техн. наук, доцент.

За редакцією укладачів

Графік виконання лабораторних робіт

№ з/п	Назва лабораторної роботи (комп’ютерного практикуму)	Кількість ауд. годин
1	Моделювання гідродинаміки потоку у насадковій колоні за допомогою коміркової моделі	4
2	Дослідження теплообмінних апаратів на основі математичних моделей	2
3	Комп’ютерне визначення констант швидкості зворотної хімічної реакції	2
4	Комп'ютерне моделювання ізотермічного реактора ідеального перемішування (РІП) безперервної дії	2
5	Комп'ютерне моделювання ізотермічного реактора ідеального витиснення	4
6	Комп’ютерне дослідження температурних режимів реактора ідеального змішування періодичної дії	4
7	Моделювання процесу абсорбції	2
8	Побудова математичних моделей процесів з використанням методу найменших квадратів (нелінійна регресія)	4
9	Експериментально-статистичне моделювання процесу модифікації перліту (ЦКОП)	2
10	Експериментально-статистичне моделювання процесу цементації ртуті (ЦКРП)	2
11	Планування експерименту на діаграмах склад-властивість	2
12	Оптимізація роботи реактора	2
13	Комп’ютерний розрахунок оптимальних умов хіміко-технологічних процесів з застосування градієнтних методів багатовимірної оптимізації	2
	МКР до модуля	2

Лабораторні роботи виконуються в середовищі Mathcad та Statistica.

Рівні виконання:

1 – самостійно виконується постановка задачі в середовищі Mathcad та Statistica, і її рішення;

2 – виконується за «покроковою» інструкцією;

3 – виконується на основі файла - «зразка».

На РР виноситься:

«Розробка статистичної моделі ОХТ методом повного факторного експерименту».

Для виконання необхідно опанувати матеріал відповідної лекції, матеріал для СРС відповідної теми, на лабораторних заняттях отримати завдання і послідовно зробити наступне:

1) Отримати завдання та проаналізувати матрицю експерименту.
2) Провести розрахунок коефіцієнтів рівняння регресії.
3) Здійснити перевірку однорідності дисперсій.
4) Провести перевірку значущості коефіцієнтів регресії.
5) Зробити перевірку адекватності лінійного рівняння регресії. Проаналізувати отримані результати.
6) Оформити пояснювальну записку (обсяг до 10 стор.), яка вміщує все вище зазначене.

Всі розрахунки по виконанню завдання РР здійснювати в середовищі Mathcad.

Студенти, що не здали РР до МКР не допускаються.

ЗМІСТ

ВСТУП **9**

1. МОДЕЛЮВАННЯ ГІДРОДИНАМІКИ ПОТОКУ У НАСАДКОВІЙ КОЛОНІ ЗА ДОПОМОГОЮ КОМІРКОВОЇ МОДЕЛІ **11**

1.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 11

1.1.1 Призначення й мета моделювання *11*

1.1.2 Основні види моделей та їхні властивості *12*

1.1.3 Основні принципи моделювання *13*

1.1.4 Технологія моделювання *14*

1.1.5 Основні методи рішення завдань моделювання *15*

1.1.6 Контроль правильності моделі *18*

1.1.7 Дослідження гідродинаміки потоку за допомогою методу стандартних збурень *20*

1.1.8 Опис насадкового колонного абсорбера за допомогою коміркової моделі *21*

1.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 23

1.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ 24

2. ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕПЛООБМІННИХ АПАРАТІВ НА ОСНОВІ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ **29**

2.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 29

2.1.1 Моделі ідеального витіснення та ідеального змішування при дослідженні теплообмінних апаратів *29*

2.1.2 Розрахунок теплообмінного апарату для моделі «витіснення-витіснення» *31*

2.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 33

2.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ 34

3. КОМП′ЮТЕРНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НА ЕОМ КОНСТАНТ ШВИДКОСТІ ЗВОРОТНОЇ ХІМІЧНОЇ РЕАКЦІЇ **37**

3.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 37

3.1.1 Приклад розрахунку констант швидкості реакції етерифікації етилового спирту та оцтової кислоти *38*

3.1.2 Алгоритм розрахунку кінетичних констант *39*

3.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 42

3.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ 42

4. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІЗОТЕРМІЧНОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ (РІЗ) БЕЗПЕРЕРВНОЇ ДІЇ **46**

4.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 46

4.1.1 Моделювання проточного реактора ідеального змішування *46*

4.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 49

4.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ 50

5. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІЗОТЕРМІЧНОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ВИТИСНЕННЯ (РІВ) БЕЗПЕРЕРВНОЇ ДІЇ 52

5.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 52

5.1.1 Математичний опис і розрахунок ізотермічного трубчатого реактора ідеального витіснення 52

5.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 54

5.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ 54

6. КОМП'ЮТЕРНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕМПЕРАТУРНИХ РЕЖИМІВ РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ ПЕРІОДИЧНОЇ ДІЇ 57

6.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 57

6.1.1 Математичний опис реактора ідеального змішування періодичної дії 57

6.1.2 Приклад розрахунку проточного реактора ідеального змішування періодичної дії 58

6.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 62

6.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ 63

7. МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ АБСОРБЦІЇ 70

7.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 70

7.1.1 Математичний опис процесу абсорбції 70

7.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 73

7.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ 74

8. ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕСІВ З ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДУ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ (НЕЛІНІЙНА РЕГРЕСІЯ) 78

8.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 78

8.1.1 Лінійна регресія 78

8.1.2 Побудова нелінійної апроксимуючої залежності 80

8.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 84

8.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ 84

9. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ МОДИФІКАЦІЇ ПЕРЛІТУ (ЦКОП) 88

9.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 88

9.1.1 Побудова експериментально-статистичної моделі (ЦКОП) 88

9.1.2 Особливості проведення експериментально-статистичного моделювання в середовищі STATISTICA процесу модифікації перліту 90

9.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 96

9.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ 97

10. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ЦЕМЕНТАЦІЇ РТУТІ (ЦКРП) 103

10.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 103

10.1.1 Особливості побудови рототабельних планів 103

10.1.2 Побудова ЦКРП процесу цементації ртуті 105

10.1.3 Особливості проведення експериментально-статистичне моделювання в середовищі STATISTICA 107

10.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 109

10.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТИ 109

11. ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ НА ДІАГРАМАХ СКЛАД – ВЛАСТИВІСТЬ 115

11.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 115

11.1.1 Побудова залежностей властивостей багатокомпонентних систем від їхнього складу 115

11.1.2 Дослідження процесу зміни властивостей бісульфітної напівцюлелози зі змішаної хвойної деревини 119

11.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 121

11.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ 122

12. ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЖИМУ РОБОТИ РЕАКТОРА 126

12.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 126

12.1.1 Метод сканування 127

12.1.2 Методи виключення інтервалів 127

12.1.3 Метод половинного ділення інтервалів (метод дихотомії) 128

12.1.4 Постановка задачі оптимізації режиму роботи реактора ідеального перемішування 130

12.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 130

12.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ 131

13. КОМП'ЮТЕРНИЙ РОЗРАХУНОК ОПТИМАЛЬНИХ УМОВ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ З ЗАСТОСУВАННЯМ ГРАДІЄНТНИХ МЕТОДІВ БАГАТОВИМІРНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ 134

13.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ 134

13.1.1. Метод релаксації 134

13.1.2. Метод градієнта 136

13.1.3 Постановка задачі оптимізації процесу варіння целюлози 137

13.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ 138

13.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ 138

ЛІТЕРАТУРА 143

ДОДАТКИ 144

Додаток А. Короткі відомості про середовище Mathcad 144

Додаток Б. Короткі відомості про середовище STATISTICA 155

Додаток В. Статистичні критерії 159
Додаток Г. Блок-схема алгоритму мінімізації функції f(x) методом сканування 161
Додаток Д. Блок-схема алгоритму мінімізації функції f(x) методом дихотомії 162

ВСТУП

Моделювання – це один із прогресивних методів, що широко застосовується у сучасній науці, і в першу чергу,її прикладних галузях. Моделювання дозволяє прискорити технічний прогрес, суттєво змінити терміни освоєння нових виробництв. Математичне моделювання є одним із найсучасніших напрямків, що тісно пов’язано з впровадженням сучасної комп’ютерної техніки та інформаційних технологій.

Основною метою курсу «Математичне моделювання та оптимізація об’єктів хімічної технології» є формування навичок використання системного підходу та методів математичного моделювання в хімічній інженерії. Лабораторні роботи виконуються згідно з навчальним планом підготовки бакалаврів напряму підготовки 6.051301 Хімічна технологія.

Процеси хімічної технології – це складні фізико-хімічні системи, що мають подвійну детерміновано-стохастичну природу. Такі системи характеризуються занадто складною взаємодією фаз та компонентів, що їх утворюють. Ключ до вирішення проблеми вивчення хіміко-технологічних процесів надає метод математичного моделювання, що базується на стратегії системного аналізу, зміст якого полягає в уявленні процесу як складної ієрархічної системи, що взаємодіє, із наступним якісним аналізом її структури, розробкою математичного опису і оцінкою невідомих параметрів.

Під *математичним моделюванням* розуміють вивчення властивостей об’єкту на математичній моделі. Його метою є визначення оптимальних умов протікання процесу, управління їм на основі математичної моделі та перенесення результатів на об’єкт. При цьому *математичною моделлю* називається приблизний опис деякого явища чи процесу зовнішнього світу, який наданий за допомогою математичної символіки. Частіше це системи рівнянь, нерівностей, алгоритми та інші математичні структури, що описують оригінал.

Математичне моделювання поєднує три взаємозв’язаних етапи:

1) складання математичного опису об’єкту, що вивчається;

2) вибір методу рішення системи рівнянь математичного опису та реалізація його у формі моделюючої програми;

3) встановлення відповідності (адекватності) моделі об’єкту.

Ці *Методичні вказівки* орієнтовані на виконання комплексу лабораторних робіт, що поєднують установлені на даний час методи і прийоми розробки та застосування математичного моделювання в хімічній технології. Викладання і послідовність відповідає лекційному курсу та матеріалу, що виведено на самостійне вивчення. При виконанні лабораторних робіт в якості програмного забезпечення застосовуються програмний комплекс Mathcad (лабораторні роботи №№ 1-8, №№ 11-13) та Statistica (лабораторні роботи №№ 9-10). Виконання лабораторного практикуму орієнтовано на індивідуальну роботу.

1. МОДЕЛЮВАННЯ ГІДРОДИНАМІКИ ПОТОКУ У НАСАДКОВІЙ КОЛОНІ ЗА ДОПОМОГОЮ КОМІРКОВОЇ МОДЕЛІ

Лабораторна робота № 1

ТЕМА: моделювання гідродинаміки потоку у насадковій колоні за допомогою коміркової моделі.

МЕТА: визначення за експериментальною кривою відгуку кількості комірок *n*-коміркової моделі, яка описує гідродинаміку насадкової колони із застосуванням різних операцій та вбудованих функцій інтегрованого програмного середовища Mathcad.

1.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Досить важливою областю застосування комп'ютерів є математичне моделювання у фізиці, хімії, біології й в інших галузях науки й техніки. В основі математичного моделювання лежать чисельні методи рішення різних рівнянь.

1.1.1 Призначення й мета моделювання

Моделювання — заміщення досліджуваного об'єкта (оригіналу) його умовним образом, описом або іншим об'єктом (моделлю) і вивчення властивостей оригіналу шляхом дослідження властивостей моделі. З моделями й моделюванням ми зіштовхуємося в нашому житті щодня. У дитинстві дитину оточують іграшки: машинки, ляльки, кубики й т.д. - моделі, що повторюють окремі властивості реально існуючих предметів. Граючи, дитина одержує важливі знання про їх. У процесі мислення людина оперує образами об'єктів навколишнього світу, які є різновидами моделей - когнітивними (уявними) моделями.

Реальна користь від моделювання може бути отримана при виконанні двох головних умов:

- модель повинна бути адекватної оригіналу, у тому розумінні, що повинна з достатньою точністю відображати характеристики оригіналу, які цікавлять дослідника;
- модель повинна усувати проблеми, пов'язані з фізичним виміром якихось сигналів або характеристик оригіналу.

Моделювання може здійснюватися із двома головними цілями:

- для вивчення механізму явищ (пізнавальна мета);
- для керування об'єктом, тобто для виробітку по моделі оптимальних керованих впливів.

В обох випадках модель створюється для визначення й прогнозу характеристик, що цікавлять, або сигналів об'єкта.

1.1.2 Основні види моделей та їхні властивості

Залежно від способу реалізації всі моделі можна розділити на два класи.

Фізичні моделі — припускають, як правило, реальне втілення тих фізичних властивостей оригіналу, які цікавлять дослідника. Фізичні моделі спрощені й менші й називаються *макети.* Фізичне моделювання інакше називається *макетування.*

Математичні моделі являють собою формалізовані описи об'єкта або системи за допомогою деякої абстрактної мови, наприклад у вигляді сукупності математичних співвідношень або схеми алгоритму. Розрізняють різні виду математичного моделювання: вербальні (словесні), графічні, табличні, аналітичні й алгоритмічні.

Іноді математична модель описується рівняннями, які випливають із розгляду фізичної сутності явища або системи, які моделюються. Однак частіше опис об'єктів і систем, які моделюються, носить чисто формальний характер і базується на тім, що багато явищ часом всілякої природи

описуються рівняннями (алгебраїчними, диференціальними й іншими) того самого виду. У цьому випадку говорять про *формальні* моделі.

Крім того, явища, системи і їхні моделі можуть бути нестаціонарними й стаціонарними. *Нестаціонарні моделі* характеризуються залежністю їхніх параметрів від часу. У *стаціонарних моделей* такої залежності немає. Природно, що моделювання нестаціонарних явищ набагато складніше, ніж стаціонарних.

Моделі володіють рядом властивостей, від яких залежить успіх їхнього застосування. Відзначимо деякі з них, найбільш важливі.

Адекватність — це ступінь відповідності моделі досліджуваному реальному об'єкту. Вона ніколи не може бути повною. На практиці модель уважають адекватної, якщо вона із задовільною точністю дозволяє досягти цілей дослідження.

Простота (складність) — також є однієї з характеристик моделі. Чим більша кількість властивостей об'єкта описує модель, тим більш складною вона виявляється. Не завжди чим складніше модель, тим вище її адекватність. Треба прагнути знайти найбільш просту модель, що дозволяє досягти необхідні результати вивчення.

Потенційність (передбачуваність) — здатність моделі дати нові знання про досліджуваний об'єкт, спрогнозувати його поводження або властивості.

1.1.3 Основні принципи моделювання

Моделювання базується на декількох основних принципах. Розглянемо їх.

Принцип інформаційної достатності. При повній відсутності інформації про досліджуваний об'єкт побудова його моделі неможлива. З іншого боку, при наявності повної інформації про об'єкт побудова його моделі не має сенсу. Існує деякий рівень апріорної інформації про об'єкт, при досягненні якої може бути побудована його адекватна модель.

Принцип здійснюваності. Створювана модель повинна забезпечувати досягнення поставленої мети дослідження з імовірністю, що істотно відрізняється від нуля.

Принцип множинності моделей. Даний принцип є ключовим. Мова йде про те, що створювана модель повинна відбивати в першу чергу ті властивості реальної системи, які цікавлять дослідника. Відповідно, при використанні будь-якої конкретної моделі пізнаються лише деякі сторони реальності. Для більш повного її дослідження необхідний ряд моделей, що дозволяє з різних сторін і з різним ступенем деталізації розглянути досліджуваний об'єкт.

Принцип агрегування. У більшості випадків складну систему можна представити такою, яка складається з агрегатів (підсистем), для адекватного математичного опису яких виявляються придатними деякі стандартні математичні схеми.

Принцип параметризації. Цей принцип означає, що модель будується у вигляді відомої системи, параметри якої не відомі.

1.1.4 Технологія моделювання

Ступінь реалізації перерахованих принципів кожної конкретної моделі може бути різною. Це залежить не тільки від бажання дослідника, але й від дотримання їм технологій моделювання, а будь-яка технологія має на увазі певну послідовність дій.

У цей час найпоширенішою технологією моделювання є *комплексне моделювання,* під яким розуміється математичне моделювання з використанням засобів обчислювальної техніки. Відповідні технології комплексного моделювання представляють виконання наступних дій:

- визначення мети моделювання;
- розробки концептуальної моделі;
- формалізації моделі;
- програмної реалізації моделі;

- планування модельних експериментів;
- реалізації плану експерименту;
- аналізу й інтерпретації результатів моделювання.

Існують два широких класи технологій моделювання. Перший — *імітаційне моделювання* — базується на обчисленні тих параметрів об'єкта моделювання, які описують його поводження в рамках прийнятих допущень. Як правило, одним з важливих допущень є незмінність структури об'єкта й умов протікання явищ, які моделюються. Другий клас — *ситуаційне моделювання* — заснований на можливості зміни ситуацій у ході моделювання. Він вимагає особливих методів моделювання й у системі Mathcad відсутні засоби для його повноцінної реалізації.

1.1.5 Основні методи рішення завдань моделювання

На етапі програмної реалізації моделі й плану експериментів необхідний вибір методів рішення завдань моделювання. При цьому використаються три основні групи методів:

- графічні - оцінні наближені методи, засновані на побудові й аналізі графіків;
- аналітичні - рішення, строго отримані у вигляді аналітичних виражень (придатні для вузького кола завдань);
- чисельні - основний інструмент для рішення складних математичних завдань, заснований на застосуванні різних чисельних методів.

Аналітичне рішення вдається одержати рідко й частіше лише при спрощеному формулюванні завдання в лінійному наближенні. Основним засобом рішення є алгоритмічний підхід, що реалізує обчислювальний експеримент на ЕОМ. Одержуване на ЕОМ рішення майже завжди містить деяку погрішність (похибку). Нагадуємо, що є абсолютна похибка:

$$\varepsilon = x - x_u$$

у вигляді різниці між наближеним x і точним x_u значеннями результату й відносна похибка:

$$\Delta = \varepsilon / x_u$$

Наявність погрішності рішення обумовлено рядом причин. Перелічимо основні джерела погрішності.

1. Математична модель є лише наближеним описом реального процесу (погрішність моделі).
2. Вихідні дані, як правило, містять погрішності, тому що є або результатами експериментів (вимірів), або рішеннями допоміжних завдань (погрішність даних).
3. Застосовувані для рішення завдання методи в більшості випадків є наближеними (погрішність методу).
4. При введенні вихідних даних в ЕОМ, виконанні операцій, виробляються округлення (обчислювальна погрішність).

Погрішності 1 й 2 - непереборні на даному етапі рішення, для їхнього зменшення доводиться повертатися знову до побудови математичної, а й іноді й концептуальної моделі, проводити додаткове експериментальне уточнення умов завдання.

Оцінка обумовленості обчислювального завдання - ще одна обов'язкова вимога при виборі методу рішення й побудові математичної моделі.

Нехай обчислювальне завдання коректне. Теоретично стійкість завдання означає, що її рішення може бути знайдене з як завгодно малою погрішністю, якщо тільки гарантувати досить малу погрішність вхідних даних. Однак на практиці їхня точність обмежена (і величиною набагато більшої, ніж $\varepsilon_m = 2^{-P+1}$— машинна точність, p — порядок, округлення виконується усіканням).

Як впливають малі, але кінцеві погрішності вхідних даних на рішення? Як сильно вони спотворюють результат? Відповідь на це дає поняття *обумовленості* завдання, тобто чутливість рішення обчислювального завдання до малих погрішностей вхідних даних.

Задачу називають *добре обумовленої,* якщо малим погрішностям вхідних даних відповідають малі погрішності рішення, і *погано обумовленої,* якщо можливі сильні зміни рішення. Часто можливо ввести кількісну оцінку ступеня обумовленості — *число обумовленості.* Його можна інтерпретувати як коефіцієнт можливого зростання похибки в рішенні відносно похибки вхідних даних, що викликали її: якщо встановлено нерівність між цими похибками:

$$\Delta(y^*) \leq \nu_\Delta \cdot \Delta(x^*)$$

абсолютне число обумовленості або

$$\delta(y^*) \leq \nu_\delta \cdot \delta(x^*)$$

відносне число обумовленості (замість похибки можуть фігурувати її границі). Для погано обумовлених завдань $\nu_\delta \gg 1$ (нестійкість $\nu_\delta = \infty$).

При яких значеннях ν_δ можна вважати завдання погано обумовленим? Це залежить від вимог до точності рішення й від рівня забезпечуваної точності вихідних даних.

- Якщо потрібно знайти рішення з точністю 0,1 %, а вхідна інформація задається з точністю в 0,02 %, то при $\nu_\delta = 10$ уже буде погана обумовленість.
- Однак якщо вихідні дані задаються з $\delta(x^*) \leq 0{,}0001\%$, то при $\nu_\delta = 10^3$ — завдання добре обумовлене ($\delta(y^*) = 0{,}1\%$).

Обчислювальні методи перетворяться до виду, зручного для програмної реалізації. Можна виділити наступні класи чисельних методів:

- *метод еквівалентних перетворень* — вихідне завдання заміняють іншим, що має те ж рішення: знаходження кореня нелінійного рівняння $f(x) = 0$ зводять до пошуку точок глобального мінімуму $\Phi(x) = (f(x))^2$;
- *методи апроксимації* — заміняють вихідне завдання іншим, рішення якого близьке до рішення вихідного завдання;
- *методи кінцево-різницеві,* засновані на заміні похідних кінцевими

різницями, наприклад $f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$;

- *прямі (точні) методи* — рішення може бути отримане за кінцеве число елементарних операцій (арифметичні й добування кореня). Багато прямих методів не годяться до застосування в ЕОМ через чутливість до помилок округлення;
- *ітераційні методи* — методи послідовних наближень до рішення завдання. Задається початкове наближення рішення, будується ітераційна послідовність наближень до рішення. Якщо ця послідовність сходиться до рішення, то говорять, що ітераційний процес сходиться. Безліч початкових наближень, для яких метод сходиться, називаються областю збіжності методу;
- *метод статистичних випробувань (Монте-Карло)* — заснований на моделюванні випадкових величин і побудові статистичних оцінок рішень завдань (для моделювання великих систем).

Чисельні методи групуються навколо типових математичних завдань: завдань аналізу, алгебри, оптимізації, рішення диференціальних й інтегральних рівнянь, зворотних завдань (синтез). Цей етап рішення закінчується вибором й обґрунтуванням конкретних чисельних методів рішення, розробкою алгоритмів, які можуть бути програмно реалізовані засобами комп'ютерної техніки.

1.1.6 Контроль правильності моделі

Для контролю правильності отриманої моделі може використатися ряд прийомів:

- *аналіз розмірності* — величини в лівій і правій частині вираження, окремі доданки в кожній із частин повинні мати однакову розмірність;
- *перевірка порядків і характерів залежностей* — параметри й змінні, які в даному завданні виражені величинами більшого порядку малості, можуть бути виключені з розгляду як несуттєві, що часто дозволяє значно спростити модель й її аналіз. Характер зміни значень величин,

які моделюються, повинен відповідати їхньому реальному змісту, не суперечити спостережуваним даним;

- *дослідження граничних випадків* — результати моделювання при крайніх значеннях параметрів моделі, рівних, як правило, нулю або нескінченності, не повинні суперечити змісту (наприклад, енергія реальної фізичної системи не може виявитися нескінченно великий, час протікання процесу — негативним і т.п.). Модель у цьому випадку істотно спрощується й легше для розуміння;
- *перевірка замкнутості й коректності математичного завдання* — система математичних співвідношень повинна мати єдине рішення.

Завдання називається *коректним,* якщо воно задовольняє трьом вимогам:

1) його рішення існує при будь-яких припустимих вхідних даних;

2) це рішення єдине (однозначно визначене);

3) рішення неперервно залежить від даних завдання - стійке стосовно малих збурень вхідних даних.

Рішення обчислювального завдання називається *стійким* за вхідними даними X, якщо воно залежить від вхідних даних безперервним чином; тобто для будь-якого $\varepsilon > 0$ існує $\delta = \delta(\varepsilon) > 0$ таке, що всяким вихідним даним x^*, які задовольняють умові $\Delta(x^*) < \delta$, відповідає наближене рішення y^*, для якого $\Delta(y^*) < \varepsilon$.

Далеко не всі практичні завдання є коректними. До них, наприклад, не відносяться зворотні завдання геофізики, астрофізики, спектрографії, розпізнавання образів, синтез і багато інших важливих прикладних проблем. Властивість коректності завдання має велике значення для вибору методу рішення. До некоректних завдань незастосовні звичайні чисельні методи обчислювальної математики. Строгий аналіз коректності в багатьох випадках математично складний, і обмежується перевіркою відповідності кількості невідомих й рівнянь моделі, які їх зв’язують.

1.1.7 Дослідження гідродинаміки потоку за допомогою методу стандартних збурень

Математичну модель гідродинаміки потоку речовини можна скласти (до проведення експерименту), виходячи з конструкції та принципу дії об'єкту хімічної технології (ОХТ). В цьому разі задача дослідження об'єкту полягатиме у підтвердженні типової гідродинамічної моделі і розрахунку її параметрів.

Типовими гідродинамічними моделями є дві ідеалізовані - ідеального змішування та ідеального витіснення, а також моделі, які з достатньою точністю описують реальні процеси: дифузійна, коміркова та комбінована.

Основні параметрами гідродинамічних моделей реальних процесів зображені на рис. 1.1.

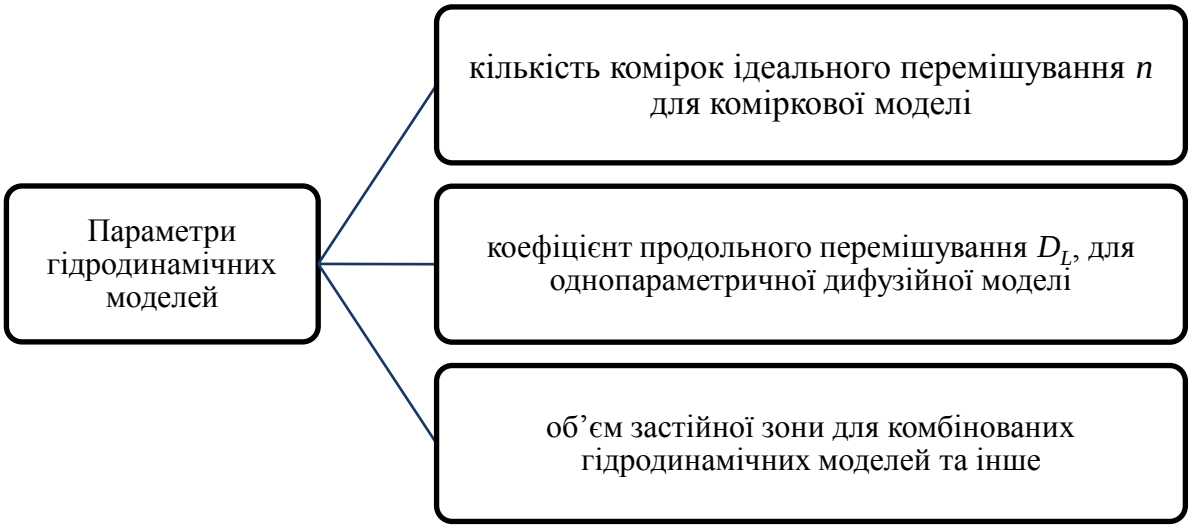


Рис. 1.1 – Основні параметрами гідродинамічних моделей реальних процесів

Одним із методів визначення структури реального потоку та розрахунку параметрів гідродинамічних моделей є експериментальне дослідження реакції ОХТ на стандартні збурення у початковім потоці. На початку проведення експерименту об'єкт зображають у вигляді «чорного ящика».

Імпульсний метод полягає у визначенні параметра *n* через статистичні оцінки диференціальної функції розподілу часу перебування

речовини. Цю функцію знаходять експериментально за даними дослідів із використанням трасеру. При цьому час перебування часток (молекул) речовини в апараті розглядають як випадкову величину, дискретний розподіл та ідеальність якої можуть бути описані за допомогою теоретично ймовірних характеристик.

Трасер (індикатор) вибирають із тим розрахунком, щоби він не руйнував гідродинаміки потоку в апараті і в той же час легко аналізувався. Трасерами, як правило, служать розчини солей, фарб, інертні тверді частки, радіоактивні речовини тощо. Обраний трасер уводять у початковий потік у вигляді стандартного сигналу (східцевого або імпульсного). Частіше збурення вносять у вигляді імпульсу $\delta(t)$, оскільки воно легше реалізується, а також спрощує наступну аналітичну обробку експериментальних даних (при відсутності випадкових збурень).

У певні моменти часу після вводу індикатора відбирають проби з вихідного потоку та аналізують вміст трасера в них. Згідно з експериментальними даними будують F - або C - криві відгуку. На основі форми експериментальної кривої припускають можливий вигляд гідродинамічної моделі (наприклад коміркової) і проводять математичну обробку кривої, в результаті чого розраховують значення параметрів моделі і роблять висновки про адекватність прийнятої моделі реальному об'єкту. При цьому у загальному випадку час перебування τ часток речовини в апараті розглядають як випадкову величину, що має диференційну функцію розподілення - $C_{кр}(t)$.

1.1.8 Опис насадкового колонного абсорбера за допомогою коміркової моделі

Розглядається насадковий колонний апарат (абсорбер), який описується до проведення експерименту комірковою моделлю. На вхід колони (наприклад в потік рідини) вводиться у вигляді імпульсу індикатора - розчин KCl. Результати аналізу вихідного потоку від вмісту

індикатору наведені у завданні. Потрібно визначити кількість комірок *n* порівнянням експериментально одержаної кривої відгуку з кривими, розрахованими згідно з рівнянням коміркової моделі при різноманітних значеннях кількості комірок:

$$C_{кр}(t) = \frac{1}{\tau} \cdot \frac{n^n}{(n-1)!} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^{n-1} \cdot e^{-n \cdot t/\tau} \quad (1.1)$$

де τ – середній час перебування потоку в ОХТ, який може бути знайдений як математичне очікування безперервної випадкової величини *t*:

$$\tau = M[t] = \int_0^\infty t \cdot C_{кр}(t)dt \quad (1.2)$$

Розрахункові (теоретичні) криві коміркової моделі зазвичай наводяться у безрозмірних координатах, оскільки у математичних викладках припускається, що одиничне імпульсне збурення й концентрація не мають конкретної фізичної розмірності.

Під безрозмірними величинами (час і диференційна крива *Z(θ)*) розуміють:

$$\theta = t/\tau, \quad Z(\theta) = C_{кр}(t) \quad (1.3)$$

Таким чином, для порівняння експериментальної кривої з теоретичними кривими (рис. 1.1) необхідно вирахувати τ згідно із залежністю (1.2) і зробити відповідні перерахунки згідно з формулою (1.3). Необхідно також провести нормування експериментальних значень концентрації $C_{вих}(i)$ до загальної енергії імпульсу індикатора *KCl,* введеного у колону:

$$C_{кр}(t) = \frac{C_{вих}(t)}{\int_0^\infty C_{вих}(t)dt} \quad (1.4)$$

Чисельні значення визначних інтегралів, що входять у рівняння (1.2, 1.4) можна знайти, наприклад, за методом трапеції, який у загальному випадку має наступний вигляд:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2} \cdot [y_0 + y_n + 2(y_1 + y_2 + \cdots + y_{n-1})] \quad (1.5)$$

де [a ,b] – інтервал інтегрування; h – крок інтегрування; y_i – значення підінтегральної функції в i-тій точці.

Для виконання необхідних розрахунків доречно використати ЕОМ. Після цього потрібно нанести на один графік C - криві відгуку, розраховані згідно коміркової гідродинамічної моделі (див. рис. 1.2.), а також експериментальну C - криву у безрозмірній формі.

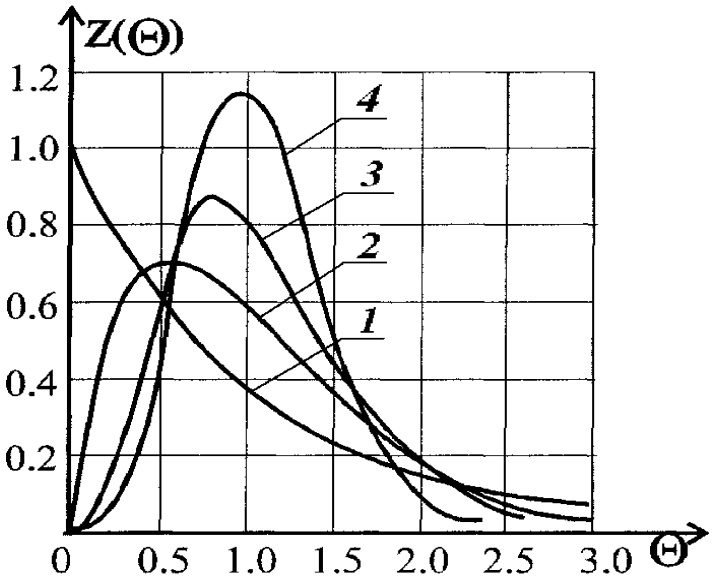


Рис. 1.2 – Порівняння експериментальної кривої з теоретичними кривими при різній кількості комірок (відповідно 1,2,6,8)

Шляхом порівняння потрібно знайти необхідну кількість комірок n, яка буде визначена як основний параметр моделі.

Інструкції по роботі з інтегрованим програмним середовищем Mathcad надаються при роботі в лабораторії обчислювальної техніки. Робота виконується у програмному середовищі Mathcad (версії 8 і вище) на персональному комп'ютері (див. *Додаток А*).

1.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Перед початком виконання першої роботи необхідно у вказаному викладачем місці створити на жорсткому диску комп'ютера папку з назвою своєї групи. В цю папку потрібно зберігати всі файли з результатами виконання лабораторних робіт.

Включіть комп’ютер і запустіть програму Mathcad вказаним викладачем способом.

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.
3. Включити комп’ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.
4. Розробити алгоритм вирішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.
5. Отримати результати та їх проаналізувати.
6. Представити результати роботи на комп’ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

1.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Приклад результатів програмування задачі і геометричної інтерпретації результатів

Вихідні дані: *1 стовпчик – значення часу, 2 – концентрація трасера на виході.*
Розв’язок:

Проведемо нормування експериментальних даних з використанням метода трапеції щодо визначення інтегралу:

$$Cv := \begin{pmatrix} 0 & .17 \\ 1 & 1.15 \\ 2 & 2.0 \\ 3 & 2.0 \\ 4 & 1.5 \\ 5 & 1.14 \\ 6 & 0.66 \\ 7 & .35 \\ 8 & .04 \\ 9 & .02 \end{pmatrix}$$

$$C := \frac{Cv^{\langle 1 \rangle}}{\frac{2 \cdot \sum Cv^{\langle 1 \rangle} - Cv_{0,1} - Cv_{9,1}}{2}}$$

C =

	0
0	0.019
1	0.129
2	0.224
3	0.224
4	0.168
5	0.128
6	0.074
7	0.039
8	$4.477 \cdot 10^{-3}$
9	$2.238 \cdot 10^{-3}$

Визначимо середній час перебування потоку в ОХТ:

$$\tau := \frac{2 \cdot Cv^{\langle 0 \rangle} \cdot C - Cv_{0,0} \cdot C_0 - Cv_{9,0} \cdot C_9}{2}$$

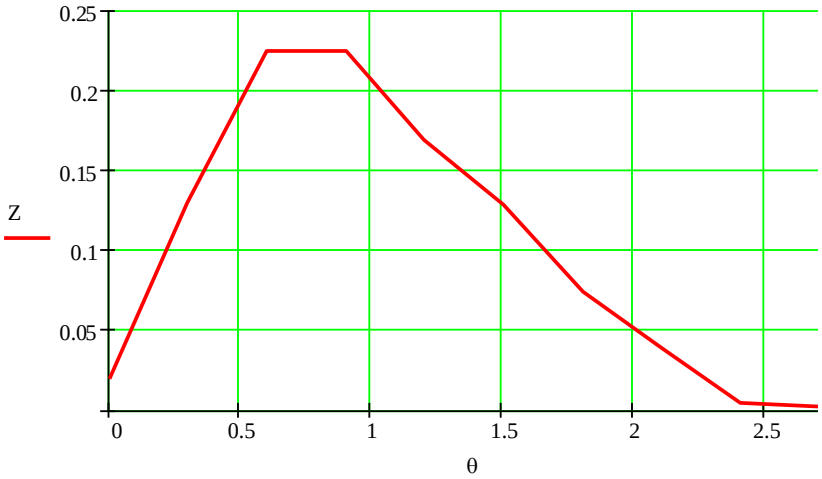
$\tau = 3.321$

Визначимо безрозмірні величини:

$$\theta := \frac{Cv^{\langle 0 \rangle}}{\tau}$$

$Z := C$

Графік у безрозмірних координатах має вигляд:



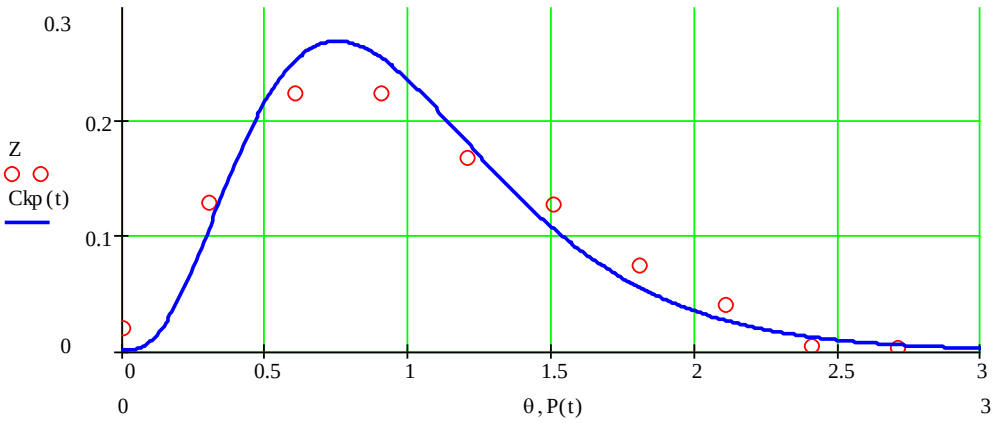
Розраховуємо теоретичну С-криву для різних значень кількості комірок (2,4,6,8), оцінюючи результат за величиною середньо квадратичного відхилення, фіксуючи це у таблиці.

Графічно зобразимо теоретичну криву коміркової моделі та порівняємо її з експериментальною:

$n := 4$

$$Ckp(t) := \frac{n^n \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^{n-1} \cdot e^{-n \cdot \frac{t}{\tau}}}{\tau \cdot (n-1)!}$$

$$P(t) := \frac{t}{\tau}$$



Перевіримо адекватність моделі:

$$Ckpt := \begin{pmatrix} Ckp(Cv_{0,0}) \\ Ckp(Cv_{1,0}) \\ Ckp(Cv_{2,0}) \\ Ckp(Cv_{3,0}) \\ Ckp(Cv_{4,0}) \\ Ckp(Cv_{5,0}) \\ Ckp(Cv_{6,0}) \\ Ckp(Cv_{7,0}) \\ Ckp(Cv_{8,0}) \\ Ckp(Cv_{9,0}) \end{pmatrix}$$

Ckpt =

	0
0	0
1	0.105
2	0.252
3	0.255
4	0.181
5	0.106
6	0.055
7	0.026
8	0.012
9	$5.008 \cdot 10^{-3}$

$$\sigma := \sqrt{\frac{\sum (Ckpt - C)^2}{9}}$$

$\sigma = 0.021$

Результати оцінки (1 рядок – значення кількості комірок, 2- середньо квадратичне відхилення)

$$\mathbf{res} := \begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 & 8 \\ 0.035 & 0.021 & 0.047 & 0.066 \end{pmatrix}$$

Таким чином, параметр моделі n=4

В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм для реалізації. Зробіть висновки щодо отриманих значень параметру коміркової моделі.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 1

1) *Які типові гідродинамічні моделі ви знаєте?*
2) *Назвіть основні параметри гідродинамічних моделей.*
3) *Для яких моделей розподіл часу перебування речовини можна розглядати як випадкову величину?*
4) *Надайте характеристику комірковій моделі.*
5) *Як визначається передавальна функція коміркової моделі?*
6) *Який вигляд мають F- та C- криві для коміркової моделі з різною кількістю комірок?*

7) *Яка послідовність експериментального визначення параметрів гідродинамічних моделей?*
8) *Для чого і яким чином проводиться нормування експериментально одержаних даних?*
9) *Надайте характеристику ідеальним гідродинамічним моделям, які є поодинокими випадками коміркової моделі (при n = 1 та n = ∞).*

2. ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕПЛООБМІННИХ АПАРАТІВ НА ОСНОВІ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ

Лабораторна робота № 2

ТЕМА: дослідження теплообмінних апаратів на основі математичної моделі.

МЕТА: дослідження стаціонарного режиму протиточного кожухотрубчатого теплообмінника, побудова терпературних профілей теплоносіїв.

2.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

2.1.1 Моделі ідеального витіснення та ідеального змішування при дослідженні теплообмінних апаратів

Теплообмінний апарат (ТОА) є одним із широковживаних і різноманітних видів устаткування хіміко-технологічних та інших виробництв. Капіталовкладення і експлуатаційні витрати на ТОА досягають 40-50% від вартості та витрат на все обладнання хіміко-технологічної системи (ХТС). Отже, від характеристик ТОА буде значним чином залежати якість всієї ХТС.

У теперішній час проектування, дослідження та оптимізацію ТОА проводять, як правило, на основі математичних моделей.

Структуру потоків в ТОА частіше за все надають у вигляді моделі ідеального перемішування або моделі ідеального витіснення. Тоді з врахуванням джерела тепла, що виникає в потоці за рахунок теплопередачі, рівняння моделі будуть записані:

- *модель змішування:*

$$Vc_T \frac{dT}{dt} = \vartheta c_T (T_{вх} - T) \pm FK_T \Delta T \qquad (2.1)$$

- *модель витиснення:*

$$Sc_T \frac{\partial T}{\partial t} = \vartheta c_T \frac{\partial T}{\partial l} \pm \frac{F}{L} K_T \Delta T \ , \qquad (2.2)$$

де V – об'єм апарату, $м^3$; ϑ – об'ємна швидкість потоку, $м^3/с$; c_T – теплоємність теплоносія, $Дж/м^3град$; F – поверхня теплообміну, $м^2$; K_T – коефіцієнт теплопередачі, $Вт/м^2град$; ΔT – рушійна сила теплопередачі, $°C$; L – довжина апарату, $м$; 1 – координата довжини, $м$; T – температура, $°C$; t – час, $с$.

Види моделей ТОА в залежності від вигляду моделі структури потоку первинного та вторинного теплоносія наведено на рис. 2.1.

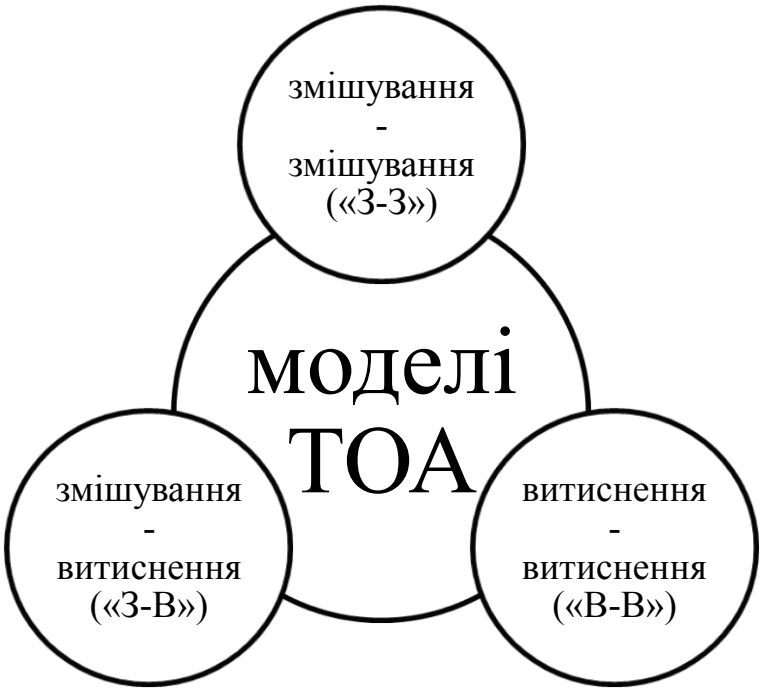


Рис. 2.1 – Види моделей ТОА в залежності від вигляду моделі структури потоку

Частіше застосовують модель «В-В», яка досить добре описує роботу широко розповсюджених ТОА типу «труба в трубі», кожухотрубного тощо. У цьому випадку математична модель ТОА має вигляд:

$$\begin{cases} S_1 c_{T_1} \dfrac{dT_1}{dt} = -\vartheta_1 c_{T_1} \dfrac{dT_1}{dl} - \dfrac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) \\ S_2 c_{T_2} \dfrac{dT_2}{dt} = \pm\vartheta_2 c_{T_2} \dfrac{dT_2}{dl} + \dfrac{F}{L} K_T (T_1 - T_2), \end{cases} \quad (2.3)$$

де індекс 1 – відповідає гарячому, а 2 – холодному теплоносіям; $+\vartheta_2$ – противотік; $-\vartheta_1$ – прямотік.

2.1.2 Розрахунок теплообмінного апарату для моделі «витіснення-витіснення»

На практиці у проектуванні ТОА частіше за все використовуються моделі стаціонарних режимів для проведення конструктивних, теплових і оптимізаційних розрахунків. У випадку моделі «В-В» рівняння (2.3) можна записати:

$$\begin{cases} -\vartheta_1 c_{T_1} \dfrac{dT_1}{dl} - \dfrac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0 \\ \vartheta_2 c_{T_2} \dfrac{dT_2}{dl} + \dfrac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0. \end{cases} \quad (2.4)$$

Межові умови відповідають протиточному руху теплоносіїв: при *1=0*, $T_1(0) = T_{1_П}$; при *1=L*, $T_2(L) = T_{2_П}$.

Хай потрібно отримати розподіл температур по довжині проточного кожухотрубного ТОА.

У цьому випадку початковими даними, наприклад можуть бути: $\vartheta_1 = 0{,}267$ *м*^{3}*/с;* $T_{1_П}$= 76 °*C;* $T_{2_П}$=16 °***C;*** *F*=13 *м*^{2}*;* *L*=1,5 *м;* *K*=60 *Вт/м*^{2}*град;* c_{T_1}=1670 *дж/м*^{3}*град;* c_{T_2}= 4185 · 10^3 *дж/м*^{3}*град;* V_2=0,26· 10^{-3} *м*^{3}*/с.*

Записані рівняння дозволяють розрахувати розподіл температур по довжині ТОА (так званий температурний профіль), а також температуру кожного теплоносія на виході з апарату – T_{1_K} , T_{2_K}. Можна одержати аналітичне рішення цих рівнянь при крайових умовах $T_1(0) = T_{1_П}$, $T_2(L) = T_{2_П}$, чисельними методами із застосуванням ЕОМ.

Таким чином, для розв'язання задачі на ЕОМ необхідно підібрати такі початкові умови $T_2(0)$, в результаті чого наприкінці рішення $(t = \tau_K)$ температура другого теплоносія дорівнюватиме заданому значенню на вході.

Для наведених початкових даних $T_2(\tau_K) = T_{2_П} = 16\ °C$. Схема потоків для розв’язання рівнянь відповідно для заданих граничних умов надана на рис. 2.2.

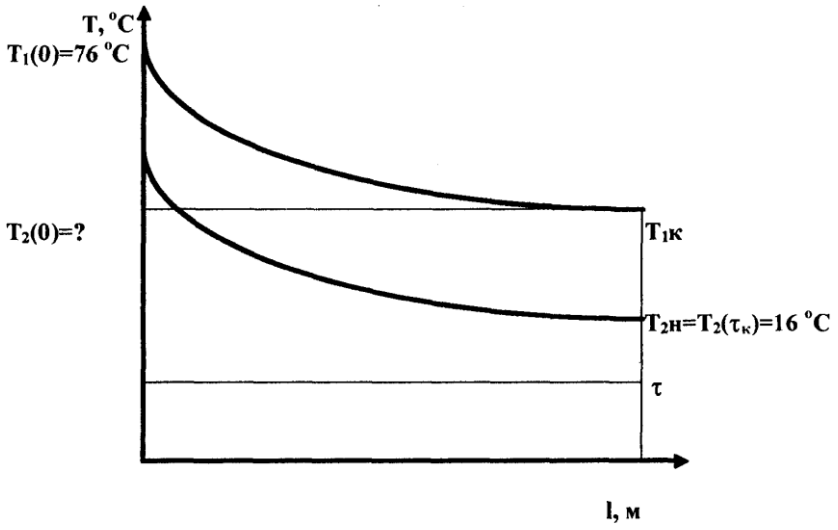


Рис. 2.2 – Профілі температур

При виконанні роботи розглядається той же теплообмінний апарат, що і в прикладі, тобто кожухотрубний, протиточний ТОА в стаціонарному режимі, із тими ж конструктивними та технологічними характеристиками.

Граничні умови $T_{1_П}$ та $T_{2_П}$ надаються в індивідуальному завданні: точність розрахунків можна обрати 0,01.

Потрібно побудувати температурні профілі, які характеризували б залежність температур теплоносіїв від довжини апарату.

Розв'язуючи систему рівнянь (2.4) з допомогою ЕОМ, проводиться підбір $T_2(0)$ послідовно задаючись значеннями T_{1_K}. Рекомендується починати з $T_{1_K} = 20°C$, і змінювати значення температури з кроком $2 - 10\ °C$, доки не буде отримане кінцеве значення $T_2(0)$.

Після закінчення розрахунків необхідно нанести на графік одержані температурні профілі.

Інструкції по роботі з інтегрованим програмним середовищем Mathcad надаються при роботі в лабораторії обчислювальної техніки.

Для розв'язання математичної моделі ТОА можна використати наступну вбудовану функцію *rkfixed (y,* x_1*,* x_2*, n, F)* – видає таблицю результатів рішення систем звичайних диференціальних рівнянь методом Рунге-Кутта четвертого порядку з фіксованим кроком інтегрування. Ця функція має п'ять аргументів: *y* - вектор початкових значень шукані функції; x_1 - початкове значення незалежної змінної; x_2 - кінцеве значення незалежної змінної; *n* - фіксоване число кроків інтегрування; *F* - праві частини системи рівнянь, записані у векторі в символьному виді. Функція *rkfixed (y,* x_1*,* x_2*, n, F)* видає таблицю результатів рішень з (*m* + 1) стовпцями і *n* рядками (*m* - число рівнянь у системі). Нульовий стовпець таблиці - це поточні значення незалежної змінної (аргументу) *x*. Вони визначаються через x_1, x_2 і *n* Наступні стовпці рішення визначають значення ординат шуканих $y_1(x)$, $y_2(x)$, … для відповідних поточних значень аргументу *x*.

Результат рішення системи звичайних диференціальних рівнянь з використанням функції *rkfixed (y,* x_1*,* x_2*, n, F)* у Mathcad представлений у виді таблиці - певним чином побудованої матриці. При цьому перший стовпець таблиці (матриці) містить значення незалежної змінної на кожнім кроці інтегрування. Другий – значення першої шуканої функції для заданого значення незалежної змінної на кожнім кроці інтегрування. Третій – значення другої шуканої функції й і т.д.

Робота виконується у програмному середовищі Mathcad (версії 8 і вище) на персональному комп'ютері.

2.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.

2. Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.
3. Включити комп'ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.
4. Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.
5. Отримати результати та їх проаналізувати.
6. Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

2.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Результати виконання можуть бути такими, наприклад, як наведені нижче.

Вихідні дані:

$\mathbf{v1} := 0.267$ $\quad \mathbf{T1н} := 90$ $\quad \mathbf{F} := 13$ $\quad \mathbf{K} := 60$ $\quad \mathbf{Ct2} := 4185 \cdot 10^{3}$

$\mathbf{v2} := 0.26 \cdot 10^{-3}$ $\quad \mathbf{T2н} := 40$ $\quad \mathbf{L} := 1.5$ $\quad \mathbf{Ct1} := 1670$ $\quad \mathbf{h} := 0.15$

Розв'язання задачі:

$$\mathbf{T} \equiv \begin{pmatrix} 90 \\ 55.5 \end{pmatrix}$$

(матриця температур теплоносіїв у точці входу гарячого теплоносія).

$$\mathbf{G}(\mathbf{t}, \mathbf{T}) := \begin{bmatrix} -\mathbf{F} \cdot \mathbf{K} \cdot \dfrac{(\mathbf{T}_0 - \mathbf{T}_1)}{\mathbf{L} \cdot \mathbf{v1} \cdot \mathbf{Ct1}} \\ -\mathbf{F} \cdot \mathbf{K} \cdot \dfrac{(\mathbf{T}_0 - \mathbf{T}_1)}{\mathbf{L} \cdot \mathbf{v2} \cdot \mathbf{Ct2}} \end{bmatrix}$$

(матриця правих частин диференціальних рівнянь математичної моделі ТОА)

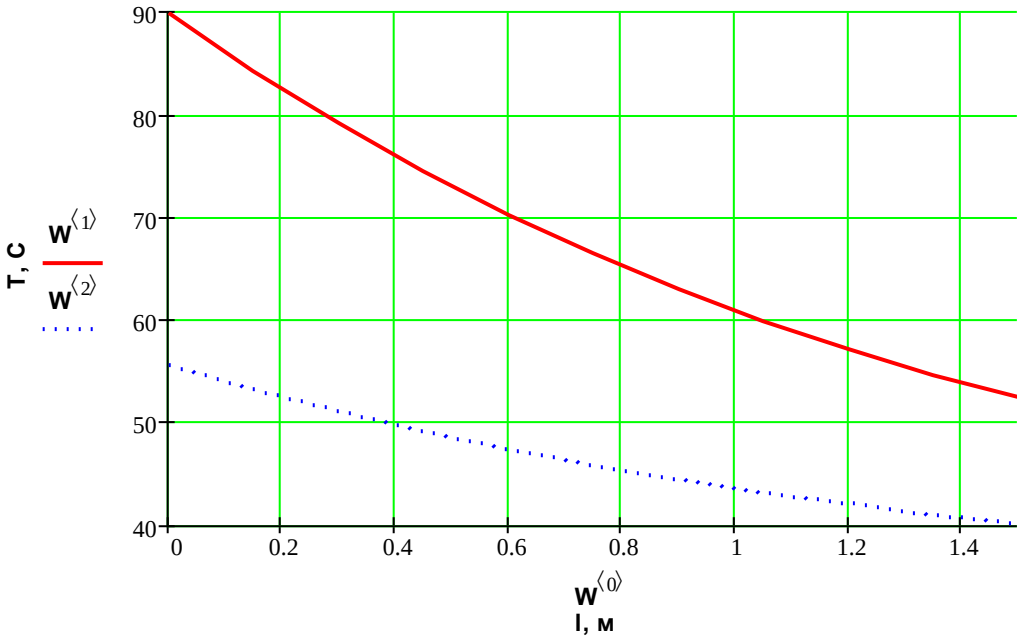
$$\mathbf{W} := \mathbf{rkfixed}(\mathbf{T}, 0, 1.5, 10, \mathbf{G})$$

Рішення математичної моделі

W =

	0	1	2
0	0	90	55.45
1	0.15	84.258	53.097
2	0.3	79.079	50.975
3	0.45	74.408	49.06
4	0.6	70.195	47.334
5	0.75	66.395	45.777
6	0.9	62.969	44.373
7	1.05	59.878	43.106
8	1.2	57.09	41.964
9	1.35	54.576	40.934
10	1.5	52.309	40.005

Профілі розрахованих температур наведені на графіку



В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм для реалізації роботи. Зробіть висновки щодо отриманих температурних профілів.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 2

1) *Які типові моделі використовуються для опису гідродинаміки теплоносіїв у теплообмінних апаратах? Навести приклади.*
2) *Охарактеризуйте основні коефіцієнти і змінні, які входять у математичний опис ТОА, та їх розмірність.*

3) *Який вигляд має блочний принцип при побудові математичної моделі ТОА?*
4) *Охарактеризуйте математичний опис протиточного теплообмінного апарату у стаціонарному режимі, межові умови?*
5) *У чому полягає особливість рішення моделі ТОА у випадку протиточного руху теплоносіїв?*
6) *Які припущення приймають при урахування теплопередачі в математичній моделі ТОА?*

3. КОМП′ЮТЕРНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НА ЕОМ КОНСТАНТ ШВИДКОСТІ ЗВОРОТНОЇ ХІМІЧНОЇ РЕАКЦІЇ

Лабораторна робота № 3

ТЕМА: комп′ютерне визначення на ЕОМ констант швидкості зворотної хімічної реакції.

МЕТА: набуття навичок моделювання кінетики хімічних реакцій на ЕОМ та розрахунок кінетичних констант.

3.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Розрахунок кінетичних параметрів (констант, порядків реакції) є одним з етапів побудови кінетичної моделі хімічної реакції (див. рис. 3.1)

Кінетична модель (рівняння) зв'язує швидкість хімічної реакції з параметрами, від яких вона залежить. Такими параметрами виступають: концентрації реагуючих речовин, температура тощо. Звичайно кінетичні рівняння являють собою систему диференційних рівнянь і містять поряд із концентраціями кінетичні константи та порядки реакцій.

Методи, що існують для знаходження констант моделей безпосередньо зв'язані з обробкою експериментальних даних відповідно до рівнянь швидкості реакції.

В загальному випадку задача знаходження кінетичних констант формулюється так: необхідно знайти значення констант, при яких кінетичні рівняння найкращим чином описували б експериментальні дані.

У тому випадку, коли кінетична модель має простий вигляд, порядок хімічної реакції відомий і диференційні рівняння моделі можуть бути аналітично розв'язані, то розрахунок кінетичних констант рекомендується виконувати безітераційними методами, наприклад, методом середніх, методом найменших квадратів, тощо.

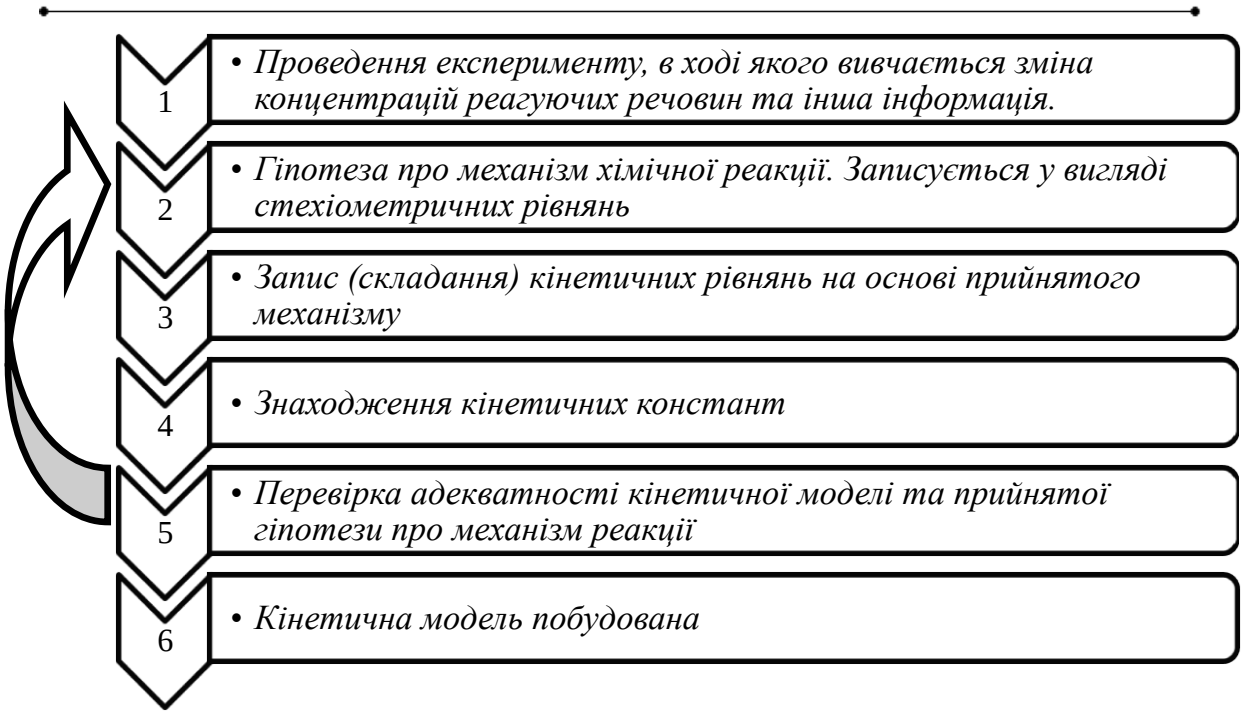


Рис 3.1 – Основні етапи побудови кінетичної моделі

Для процесів із складними реакціями, коли порядок реакції є невідомим, розрахунок кінетичних констант виконується з використанням пошукових методів із допомогою ЕОМ.

3.1.1 Приклад розрахунку констант швидкості реакції етерифікації етилового спирту та оцтової кислоти

Розглядається реакція етерифікації етилового спирту та оцтової кислоти. Необхідно скласти кінетичну модель процесу, знайти значення констант швидкостей і підтвердити механізм реакції, що досліджується.

Експериментальні дані наведені у вигляді залежності ступеня перетворення кислоти у часі процесу. Також встановлено, що реакція є зворотною і константа рівноваги становить:

$$K_p = k_1/k_2 = 4 \tag{3.1}$$

де k_1, k_2 – константи швидкості прямої та зворотної реакції етерифікації, відповідно. Механізм цієї реакції може бути поданий у вигляді наступного рівняння:

$$CH_3COOH + C_2H_5OH \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} CH_3COOC_2H_5 + H_2O$$

або у загальному вигляді:

$$A + B \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} R + S \tag{3.2}$$

Для математичного опису кінетики реакції достатньо записати одне диференційне рівняння швидкості реакції, наприклад, для компонента *A*. Концентрації останніх компонентів реакційної суміші у будь-який момент часу можна знайти виходячи з матеріального балансу:

$$\frac{dC_a}{dt} = -k_1 C_A C_B + k_2 C_R C_S \,. \tag{3.3}$$

Початкові умови:

$$C_A(0) = C_{A_{вх}}\,, \qquad C_B(0) = C_{B_{вх}}\,, \qquad C_R(0) = C_S(0) = 0\,.$$

Якщо припустити, що початкові концентрації *A* і *B* рівні, то у відповідності до стехіометричного рівняння (3.2) можна записати:

$$C_A = C_B, \quad C_R = C_S = C_{A_{вх}} - C_A\,.$$

Після підстановки останніх співвідношень у (3.3) маємо:

$$\frac{dC_{\mathrm{A}}}{dt} = -k_1 C_A^2 + k_2 C_R C_S\,.$$

Якщо $C_{A_{вх}} = 1$ *моль/м*^{3}, а, як відомо, $k_1=4k_2$, то кінетична модель остаточно приймає вигляд нелінійного диференційного рівняння:

$$\frac{dC_{\mathrm{A}}}{dt} = -k_2(3C_A^2 + 2C_A - 1) \tag{3.4}$$

Задача пошуку констант на ЕОМ складається з підбору такого значення k_2, при якому крива машинного рішення якомога краще відповідатиме експериментальним даним наведеним в індивідуальному завданні.

3.1.2 Алгоритм розрахунку кінетичних констант

Алгоритм розрахунку кінетичних констант може бути таким:

1) Задається орієнтовне (довільне) значення k_2 (рекомендується 0,01 або 0,02).
2) Кінетичну модель (3.4) із прийнятим значенням константи чисельно інтегрують на інтервалі від 0 до 1, використовуючи, наприклад,

методи Ейлера або Рунге-Кутта. Результат інтегрування на ЕОМ - розрахункові значення концентрації C_A у різні моменти часу.

3) Розраховується на ЕОМ значення критерію середньоквадратичного відхилення *S* для перевірки адекватності моделі:

$$S = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(C_{A_e} - C_{A_p})^2}\ , \qquad (3.5)$$

де N – кількість експериментальних даних; C_{A_e} , C_{A_p} – значення концентрацій компонента *A* експериментальне та розрахункове, відповідно.

4) Початкове значення *S* рекомендується задати рівним нулеві.

5) Змінюється (наприклад, збільшується) значення константи k_2 (наприклад, на 0,01). Розрахунок повторюють відповідно з п.п. *2* та *3*.

6) Порівнюють попереднє та останнє значення критерію *S*. Якщо значення *S* зменшилося, то продовжують змінювати константу k_2 у тому ж напрямку. Якщо значення *S* збільшилося – у зворотному.

7) Розрахунки виконують у діалоговому режимі з ЕОМ; константи змінюють, доки не буде одержано мінімальне значення критерію *S*.

8) У цьому випадку пошук k_2 припиняється. На графік наносять залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості реакції k_2, на якому відзначають мінімум *S* та знайдене значення константи k_2 (рис. 3.2).

9) Значення константи прямої реакції k_1 розраховують згідно з формулою константи рівноваги (3.1): $k_1=4k_2$.

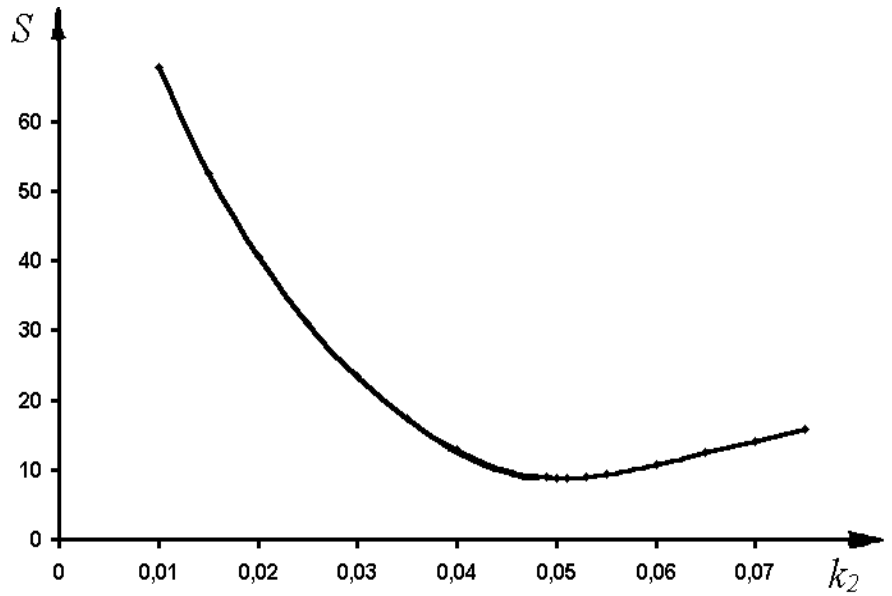


Рис. 3.2 – Залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості реакції k_2

Після закінчення розрахунку констант k_1 та k_2 необхідно нанести розрахункові та експериментальні залежності концентрації компонента *A* від часу на графік і провести візуальний аналіз збігу, тобто оцінити адекватність розробленої кінетичної моделі експериментальним даним (рис. 3.3).

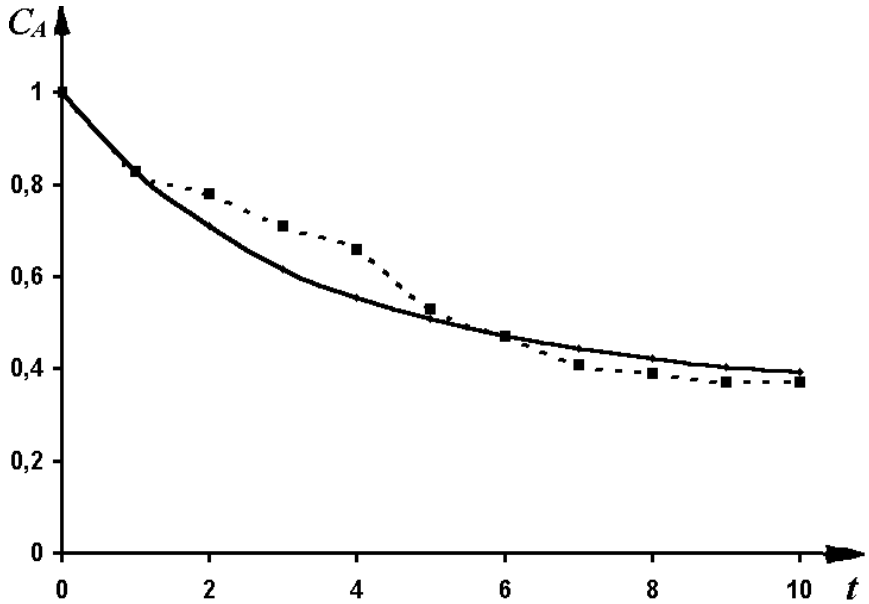


Рис. 3.3 – Залежність концентрації компоненту *A* від часу

3.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.
3. Включити комп'ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.
4. Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.
5. Отримати результати та їх проаналізувати.
6. Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

3.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Початкові дані:

$$Cae := \begin{pmatrix} 0 & 1.00 \\ 1 & 0.88 \\ 2 & 0.76 \\ 3 & 0.7 \\ 4 & 0.62 \\ 5 & 0.60 \\ 6 & 0.48 \\ 7 & 0.44 \\ 8 & 0.40 \\ 9 & 0.39 \\ 10 & 0.33 \end{pmatrix}$$

Пошук адекватного рівняння кінетичної моделі:

$Kp := 4$

Прийняте значення константи швидкості зворотної реакції k2:

$k2 := 0.045$

$$Ca := \begin{pmatrix} Cae_{0,1} \\ Cae_{0,1} \end{pmatrix}$$

$$D(t, Ca) := -k2 \cdot \left(3 \cdot Ca^2 + 2 \cdot Ca - 1\right)$$

Числове інтегрування кінетичної моделі з метою отримання розрахункових значень концентрації Ca у різні моменти часу

$$C := rkfixed(Ca, 0, 10, 10, D)$$

$$Cap := C^{\langle 1 \rangle}$$

$Cap =$

	0
0	1
1	0.848
2	0.737
3	0.655
4	0.592
5	0.542
6	0.504
7	0.473
8	0.448
9	0.428
10	0.411

Середньоквадратичне відхилення розрахункових значень концентрації від експериментальних:

$$S := \sqrt{\frac{\sum \left(Cae^{\langle 1 \rangle} - Cap\right)^2}{11}}$$

$$S = 0.042$$

Значення константи швидкості прямої реакції k1:

$$k1 := Kp \cdot k2$$

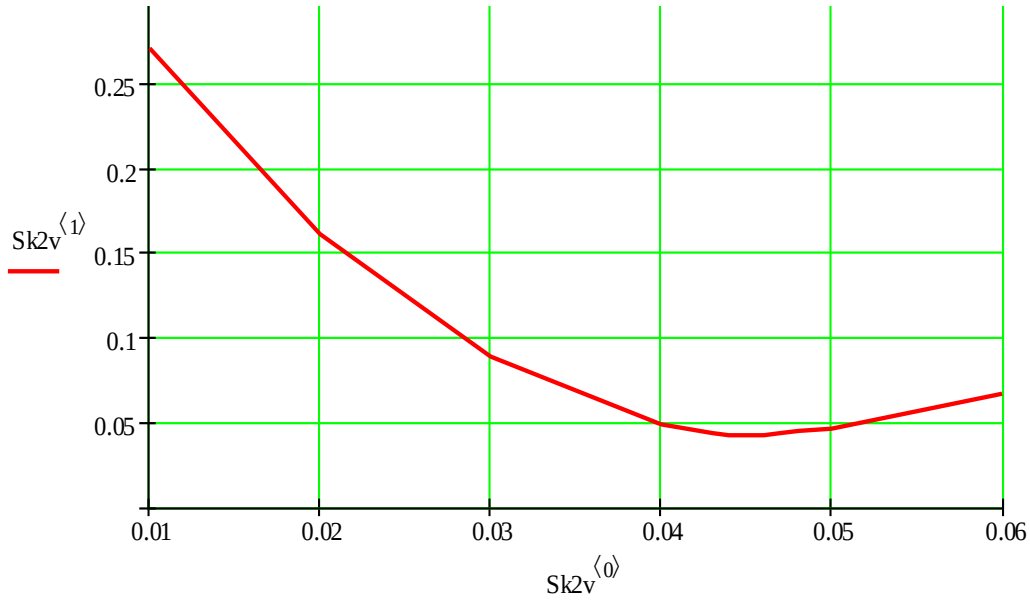
$$k1 = 0.18$$

Розраховані значення константи швидкості зворотної реакції k2 (1-й рядок) та відповідне їй значення середньоквадратичного відхилення (2-й рядок)

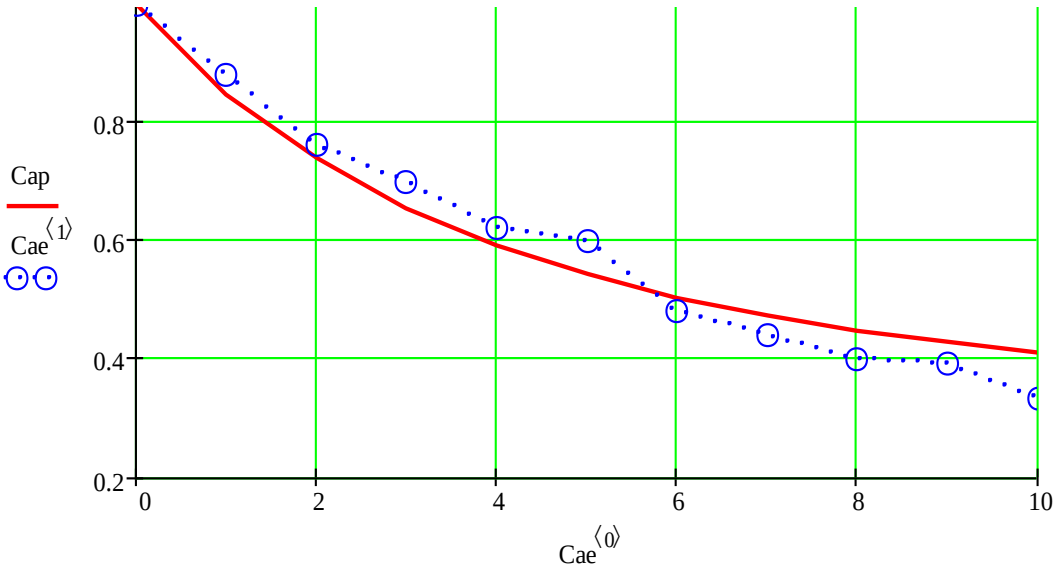
$$Sk2 := \begin{pmatrix} 0.01 & 0.02 & 0.03 & 0.04 & 0.043 & 0.044 & 0.045 & 0.046 & 0.047 & 0.048 & 0.05 & 0.06 \\ 0.271 & 0.161 & 0.089 & 0.048 & 0.043 & 0.042 & 0.042 & 0.042 & 0.043 & 0.044 & 0.046 & 0.067 \end{pmatrix}$$

Транспонуємо матрицю отриманих значень для можливості побудови графічної залежності:

$$Sk2v := Sk2^T$$



Залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості зворотної реакції k2



Перевірка на адекватність (пунктирна крива - експериментальні концентрації, суцільна - розрахункові)

В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм для реалізації роботи. Зробіть висновки щодо отриманих результатів.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №3

1) *Що називається кінетичною моделлю? Від чого залежить швидкість реакції?*
2) *Як формулюється задача розрахунку кінетичних параметрів?*
3) *В чому полягає знаходження кінетичних констант при використанні ЕОМ?*
4) *Сформулюйте умову закінчення пошуку кінетичних констант.*
5) *Як складається кінетична модель для різних типів кінетичних реакцій?*
6) *Охарактеризуйте структурну схему побудови кінетичної моделі.*

4. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІЗОТЕРМІЧНОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ (РІЗ) БЕЗПЕРЕРВНОЇ ДІЇ

Лабораторна робота № 4

ТЕМА: математичне моделювання хімічних процесів в системах автоматизованого проектування.

МЕТА: одержання практичних навичок у побудові математичної моделі хімічного реактору ідеального змішування, оформлення їх у вигляді програмно-обчислювальної процедури (модуля).

4.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

4.1.1 Моделювання проточного реактора ідеального змішування

Багато з хімічних процесів відбуваються у реакторах із змішуванням реакційної суміші близьким до режиму ідеального змішування (РІЗ). В реакторах подібного типу забезпечується майже миттєве і повне змішування речовин, що надходять в апарат. При цьому концентрація компонентів на виході з реактору дорівнює концентрації у реакційній зоні.

У загальному випадку стаціонарний режим описується системою алгебраїчних рівнянь матеріального та теплового балансів відносно до кожного з компонентів.

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau}(C_{вх\,i} - C_i) + W_{ri} = 0 \\ \frac{1}{\tau}(T_{вх} - T) + \frac{1}{C_T}(\pm\Delta H)\,|W_r| - \frac{K_T F}{C_T V}(T - T_x) = 0 \\ \frac{1}{\tau}(T_{вх} - T_x) + \frac{K_T F}{C_x V_x}(T - T_x) = 0 \end{cases} \qquad (4.1)$$

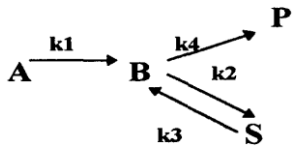
де $i = 1, 2, \ldots, n$ – кількість компонентів реакції; τ, τ_x – середній час перебування потоку в реакторі та холодоагенту в сорочці; $C_{вх_i}$ C_i – вхідна, поточна (вихідна) концентрація i-го компонента; $T_{вх}$, T, T_x – вхідна, поточна (вихідна) температури потоку та температура холодоагенту, відповідно; c_T, c_x – об'ємна теплоємність реакційної суміші та холодоагенту, відповідно; V, V_x – робочий об'єм реактора та сорочки; K_T, F – коефіцієнт та поверхня теплопередачі; W_{r_i} – швидкість перетворення i-го компонента в хімічній реакції; $\pm\Delta H$ – сумарний тепловий ефект; W_r – сумарна швидкість реакції для усіх стадій.

Задача розрахунку згідно з моделлю (4.1) містить в собі визначення концентрацій компонентів реакції C_i, температури суміші T на виході з реактору і температури холодоагенту T_i на виході із сорочки.

У статичному ізотермічному режимі процес в РІЗ можна описати рівнянням матеріального балансу:

$$\frac{1}{\tau}\left(C_{вх_i} - C_i\right) + Wr_i = 0 \tag{4.2}$$

Розглянемо проточний реактор із мішалкою, в якому протікає ізотермічна хімічна реакція типа:



(4.3)

Відомі: концентрації компонентів у вхідному потоці: $C_{A_{вх}} = 1$ *кмоль/м*^{3}; $C_{B_{вх}} = C_{P_{вх}} = C_{S_{вх}} = 0$, константи швидкостей окремих стадій реакції: $k_1 = 0{,}5$ *год*$^{-1}$; $k_2 = 0{,}4$ *год*$^{-1}$; $k_3 = k_4 = 0{,}3$ *год*$^{-1}$; τ – час перебування потоку в реакторі.

Запишемо сумарні швидкості витрат та утворення компонентів у реакції, що розглядається, тобто кінетичну модель згідно з даним механізмом реакції:

$$\begin{cases} Wr_A = \dfrac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \\ Wr_B = \dfrac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S \\ Wr_S = \dfrac{dC_S}{dt} = k_2 C_B - k_3 C_S \\ Wr_P = \dfrac{dC_p}{dt} = k_4 C_B \end{cases} \tag{4.4}$$

Тоді модель ізотермічного реактора у статиці запишемо так:

$$\begin{cases} \dfrac{1}{\tau}(C_{A_{âõ}} - C_A) - k_1 C_A = 0 \\ \dfrac{1}{\tau}(C_{B_{âõ}} - C_B) + k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S = 0 \\ \dfrac{1}{\tau}(C_{S_{âõ}} - C_S) + k_2 C_B - k_3 C_S = 0 \\ \dfrac{1}{\tau}(C_{P_{âõ}} - C_P) + k_4 C_B = 0 \end{cases} \tag{4.5}$$

Зробивши перегрупування відносно початкових концентрацій, приведемо систему (4.5) до вигляду:

$$\begin{cases} C_{A_{âõ}} = (1 + k_1 1\tau) C_A \\ C_{B_{âõ}} = -k_1 \tau C_A + [1 + (k_2 + k_4)\tau] C_B - k_3 \tau C_S \\ C_{S_{âõ}} = -k_2 \tau C_B - (1 + k_3 \tau) C_S \\ C_{P_{âõ}} = -k_4 \tau C_B + C_P \end{cases} \tag{4.6}$$

Розв'язавши систему лінійних рівнянь при заданих значеннях констант швидкостей реакції, часу перебування і вхідних концентрацій, можна одержати концентрації компонентів у вихідному потоці.

Систему (4.6) зручно навести у матричному вигляді для подальшого розв'язання на ЕОМ:

$$C_{вх} = K \cdot C, \tag{4.7}$$

де $C_{вх}$, C – вектори-стовпці вхідних та вихідних концентрацій компонентів, відповідно.

$$C = \begin{Vmatrix} C_A \\ C_B \\ C_S \\ C_P \end{Vmatrix}, C_{вх} = \begin{Vmatrix} C_{Aвх} \\ C_{Bвх} \\ C_{Sвх} \\ C_{Pвх} \end{Vmatrix}, \quad K = \begin{Vmatrix} (1+k_1\tau) & 0 & 0 & 0 \\ -k_1\tau & 1+(k_2+k_4)\tau & -k_3\tau & 0 \\ 0 & -k_2\tau & (1+k_3\tau) & 0 \\ 0 & -k_4\tau & 0 & 1 \end{Vmatrix}$$ – матриця коефіцієнтів (4.8)

Після обернення квадратичної матриці коефіцієнтів за допомогою ЕОМ можна записати остаточний розв'язок математичного опису реактора:

$$C = K^{-1} \cdot C_{Bвх} \tag{4.9}$$

Згідно із заданим викладачем механізмом реакції потрібно скласти статичну математичну модель ізотермічного РІЗ у статиці й підготувати матриці коефіцієнтів *K* для п'яти значень часу перебування ($\tau = 1, 2, 3, 4, 5$). За допомогою ЕОМ одержати обернені матриці. Після розрахункових робіт накреслити залежність концентрації кожного компоненту від часу перебування речовин у потоці.

4.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.
3. Включити комп’ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.
4. Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.
5. Отримати результати та їх проаналізувати.
6. Представити результати роботи на комп’ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

4.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Моделювання проточного реактору ідеального змішування

Початкова концентрація компонентів, *кмоль/м*^{3} та константи швидкості хімічної реакції, *год*$^{-1}$

$$Cinp := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} Cinp(A) \\ Cinp(B) \\ Cinp(S) \\ Cinp(P) \end{matrix} \qquad k := \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.4 \\ 0.3 \\ 0.4 \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \\ k_4 \end{matrix}$$

Час перебування: $i := 0..5$ $\quad \tau := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix}$

Матриці коефіцієнтів:

$$K(\tau) := \begin{bmatrix} 1 + k_0 \cdot \tau & 0 & 0 & 0 \\ -k_0 \cdot \tau & 1 + (k_1 + k_3) \cdot \tau & -k_2 \cdot \tau & 0 \\ 0 & -k_1 \cdot \tau & 1 + k_2 \cdot \tau & 0 \\ 0 & -k_3 \cdot \tau & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Розв’язання системи матричним методом при різних термінах перебування:

$$C^{\langle i \rangle} := K(\tau_i)^{-1} \cdot Cinp$$

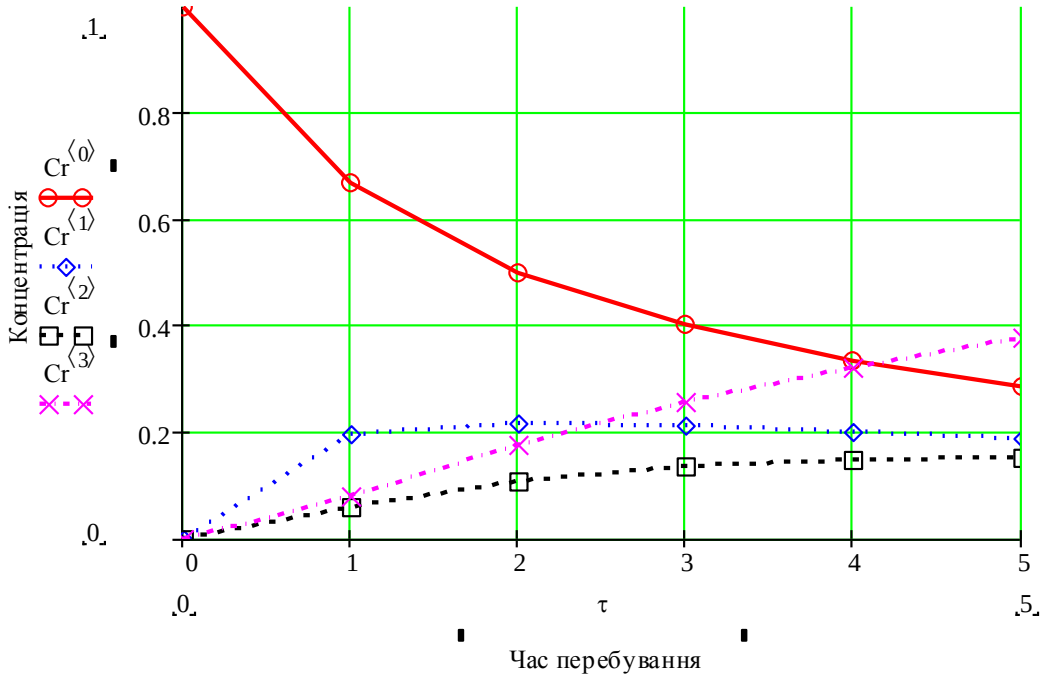
Поточні концентрації знайдені:

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0.667 & 0.5 & 0.4 & 0.333 & 0.286 \\ 0 & 0.195 & 0.217 & 0.212 & 0.2 & 0.188 \\ 0 & 0.06 & 0.109 & 0.134 & 0.146 & 0.15 \\ 0 & 0.078 & 0.174 & 0.254 & 0.321 & 0.376 \end{pmatrix}$$

$$Cr := C^T$$

$$Cr = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.667 & 0.195 & 0.06 & 0.078 \\ 0.5 & 0.217 & 0.109 & 0.174 \\ 0.4 & 0.212 & 0.134 & 0.254 \\ 0.333 & 0.2 & 0.146 & 0.321 \\ 0.286 & 0.188 & 0.15 & 0.376 \end{pmatrix}$$

Тоді, 1-й стовпчик матриці *C* - початкова концентрація, 2, 3, 4, 5 - поточні значення компонентів A, B, S, P.



В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм. Зробіть висновки щодо отриманих розподілів концентрацій компонентів в часі для реактора ідеального змішування.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 4

1) *З яких складових частин складаються автоматизовані програми моделювання ХТС?*
2) *Основні вимоги до оформлення моделей елементів ХТС?*
3) *Чому модуль реактора дуже складно стандартизувати?*
4) *Який вигляд мають математичні моделі реакторів ідеального змішування в загальному випадку для статичного режиму?*
5) *Які обчислювальні методи використовуються для розв'язання рівнянь математичного опису реактору ідеального змішування ?*
6) *Який вигляд мають результати розв'язку моделей реакторів ідеального змішування?*

5. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІЗОТЕРМІЧНОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ВИТИСНЕННЯ (РІВ) БЕЗПЕРЕРВНОЇ ДІЇ

Лабораторна робота № 5

ТЕМА: математичне моделювання хімічних процесів в системах автоматизованого проектування.

МЕТА: одержання практичних навичок у побудові математичної моделі хімічного реактору ідеального витіснення, оформлення їх у вигляді програмно-обчислювальної процедури (модуля).

5.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

5.1.1 Математичний опис і розрахунок ізотермічного трубчатого реактора ідеального витіснення

В реакторі ідеального витіснення (РІВ) приймається поршневе просування без змішування вздовж потоку при рівномірному розподілі реакційної маси у напрямку перпендикулярному рухові. Час перебування в реакторі τ усіх часток однаковий і дорівнює відношенню об’єму РІВ до об'ємної витрати газу або рідини.

Рівняння матеріального балансу для реактора ідеального витіснення в загальному випадку має вигляд:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u\frac{\partial C_i}{\partial l} + Wr_i \qquad (5.1)$$

У статичному ізотермічному режимі процес РІВ достатньо описати тільки рівнянням покомпонентного матеріального балансу

$$-u\frac{\partial C_i}{\partial l} + Wr_i = 0, \qquad (5.2)$$

$$C_i(0) = C_{вх_i}$$

де u – середня лінійна швидкість потоку в РІВ; *1* – координата довжини реактора.

Враховуючи, що $dl/u = d\tau$, систему (5.2) запишемо так:

$$\frac{dC_i}{d\tau} = Wr_i, \tag{5.3}$$

де τ – час перебування, що у даному випадку є аналогом довжини апарату.

При виконанні цієї частини лабораторної роботи зручно взяти ті ж самі початкові дані, що і в попередній частині (схема реакції, час контакту).

Розглянемо проточний реактор із мішалкою, в якому протікає ізотермічна хімічна реакція типу (4.3).

В цьому випадку математична модель РІВ буде мати вигляд системи звичайних диференційних рівнянь (5.4) з відповідними граничними умовами:

$$\begin{cases} \dfrac{dC_A}{d\tau} = -k_1 C_A \\ \dfrac{dC_B}{d\tau} = k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S \\ \dfrac{dC_S}{d\tau} = k_2 C_B - k_3 C_S \\ \dfrac{dC_p}{d\tau} = k_4 C_B \end{cases} \tag{5.4}$$

При початкових умовах $C_{A_{вх}} = 1$ *кмоль/м*^{3}; $C_{B_{вх}} = C_{S_{вх}} = C_{P_{вх}} = 0$.

Система диференційних рівнянь (5.4) описує зміну концентрацій реагуючих речовин від часу перебування в РІВ (або по його довжині).

Для розв'язання системи (5.4) можна скористатися яким-небудь із відомих чисельних методів, наприклад, методом Ейлера чи метод Рунге-Кутта.

Результати рішення моделі РІВ на ЕОМ потрібно накреслити як графічну залежність $C_i = f(\tau)$ (див. рис. 5.1)

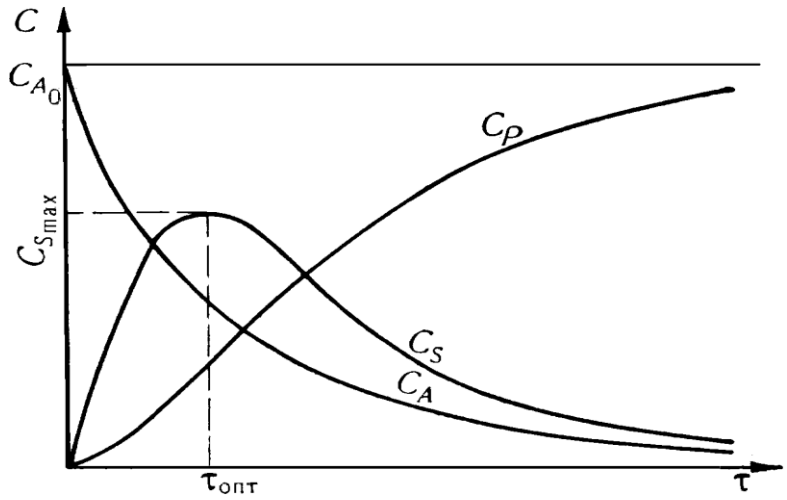


Рис. 5.1 – Графічна залежність $C_i = f(\tau)$

5.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.
3. Включити комп'ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.
4. Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.
5. Отримати результати та їх проаналізувати.
6. Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

5.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Моделювання ізотермічного трубчатого реактору ідеального витіснення

Початкова концентрація компонентів, *кмоль/м*^{3} та константи швидкості хімічної реакції, *год*$^{-1}$

$$Cinp := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} Cinp(A) \\ Cinp(B) \\ Cinp(S) \\ Cinp(P) \end{matrix} \qquad k := \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.4 \\ 0.3 \\ 0.4 \end{pmatrix} \begin{matrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \\ k_4 \end{matrix}$$

Час перебування: $i := 0..5 \qquad \tau := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix}$

Рівняння швидкості хімічної реакції для кожного з компонентів запишемо у вигляді матриці стовпчика:

$$D(t, Cinp) := \begin{bmatrix} -k_0 \cdot Cinp_0 \\ k_0 \cdot Cinp_0 - (k_1 + k_3) \cdot Cinp_1 + k_2 \cdot Cinp_2 \\ k_1 \cdot Cinp_1 - k_2 \cdot Cinp_2 \\ k_3 \cdot Cinp_1 \end{bmatrix}$$

За допомогою вбудованої функції для вирішення системи звичайних диференційних рівнянь методом Рунге-Кутта з фіксованим кроком інтегрування знайдемо розподіл концентрацій компонентів в часі:

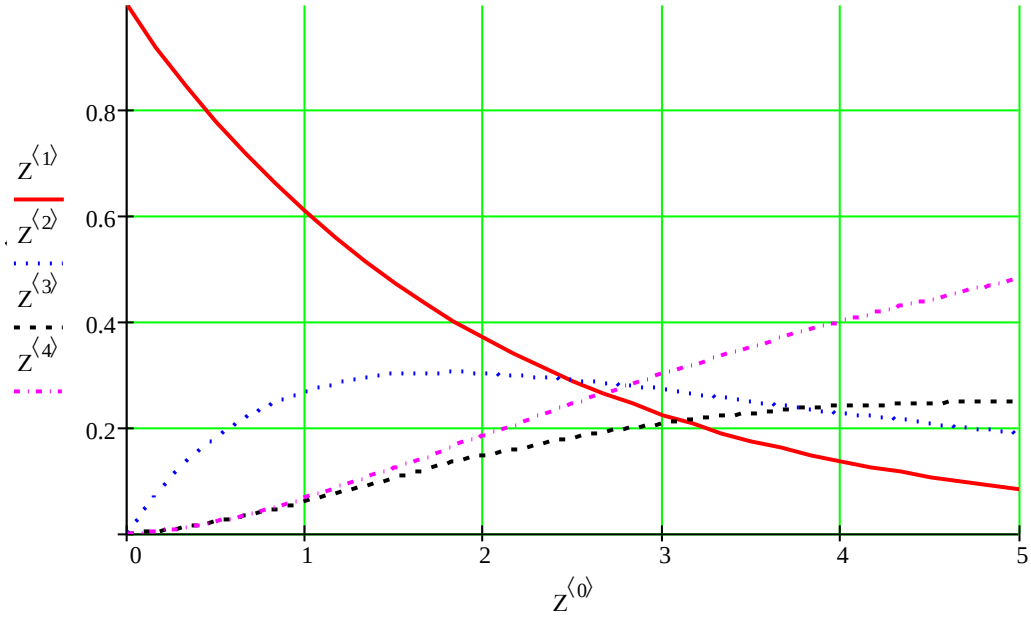
$$Z := rkfixed(Cinp, 0, 5, 30, D)$$

Тоді, з першого по четвертий стовпчик матриці-розв’язку міститиметься концентрація компонентів A, B, S та P відповідно:

Z =

	0	1	2	3	4
0	0	1	0	0	0
1	0.167	0.92	0.075	$2.543 \cdot 10^{-3}$	$2.586 \cdot 10^{-3}$
2	0.333	0.846	0.135	$9.318 \cdot 10^{-3}$	$9.642 \cdot 10^{-3}$
3	0.5	0.779	0.182	0.019	0.02
4	0.667	0.717	0.218	0.031	0.034
5	0.833	0.659	0.247	0.045	0.049
6	1	0.607	0.268	0.06	0.066
7	1.167	0.558	0.283	0.075	0.085
8	1.333	0.513	0.293	0.09	0.104
9	1.5	0.472	0.299	0.105	0.124
10	1.667	0.435	0.303	0.119	0.144
11	1.833	0.4	0.303	0.133	0.164
12	2	0.368	0.302	0.146	0.184
13	2.167	0.338	0.299	0.159	0.204
14	2.333	0.311	0.294	0.17	0.224
15	2.5	0.287	0.289	0.181	0.243

Графічна інтерпретація розв’язку матиме вигляд:



В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм. Зробіть висновки щодо отриманих розподілів концентрацій компонентів в часі для реактора ідеального витіснення.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 5

1) *Який вигляд мають математичні моделі ідеального витіснення в загальному випадку для статичного режиму?*
2) *Які обчислювальні методи використовуються для розв'язання рівнянь математичного опису реакторів ідеального витіснення?*
3) *Який вигляд мають результати розв'язку моделей реакторів ідеального витіснення?*

6. КОМП'ЮТЕРНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕМПЕРАТУРНИХ РЕЖИМІВ РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ ПЕРІОДИЧНОЇ ДІЇ

Лабораторна робота № 6

ТЕМА: дослідження реактора ідеального змішування періодичної дії (РІЗ-П) на основі математичної моделі при різних температурних режимах.

МЕТА: придбати навички математичного моделювання на комп'ютері апарата періодичної дії, математичний опис якого являє собою систему звичайних диференціальних рівнянь, на прикладі РІЗ-П у якому протікає гомогенна хімічна реакція.

6.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

6.1.1 Математичний опис реактора ідеального змішування періодичної дії

Багато з хімічних процесів відбуваються у реакторах із змішуванням реакційної суміші близьким до режиму ідеального змішування (РІЗ). В реакторах подібного типу забезпечується майже миттєве і повне змішування речовин, що надходять в апарат. При цьому концентрація компонентів на виході з реактору дорівнює концентрації у реакційній зоні.

У загальному випадку стаціонарний режим описується системою алгебраїчних рівнянь матеріального та теплового балансів відносно до кожного з компонентів.

Складання математичного опису. Для зони змішування представимо рівняння покомпонентного матеріального і теплового балансів у загальному виді:

$$\frac{dn_j}{dt} = \frac{d(V\rho N_j)}{dt} = \sum_{i=1}^{p} v_i^0 \cdot \rho_i^0 \cdot N_{ji}^0 - v \cdot \rho \cdot N_j + \sum F_{j_\Sigma} \ , \qquad (6.1)$$

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{d(V\rho c_p T)}{dt} = \sum_{i=1}^{p} v_i^0 \cdot \rho_i^0 \cdot c_{p_i}^0 \cdot T_i^0 - v \cdot \rho \cdot c_p \cdot T + \sum F_{T_\Sigma} \ , \qquad (6.2)$$

де $i = \overline{1, p}$ – індекс потоків; верхній індекс «0» відноситься до вхідних потоків; $j = \overline{1, k}$ - індекс компонентів; n_j, N_j – відповідно число моль і молярна частка j-го компонента; V – об'єм реакційної суміші, *м*^{3}; ρ – молярна густина, *кмоль/м*^{3}; v – об'ємна швидкість потоку, *м*^{3}*/с*; Q – кількість теплоти, *кДж*; t – час, *с*; T – температура, *К*; c_p – теплоємність реакційної суміші, *кДж/(кмоль·К)*; $\sum F_{j_\Sigma}$ – сумарне джерело j-го компонента в зоні змішування, *кмоль/с*; $\sum F_{T_\Sigma}$ – сумарне джерело теплоти в зоні змішування, *кДж/с*.

Оскільки періодичний реактор ідеального змішування непроточний, то в його математичному описі відсутні два перших члени в правій частині рівнянь (6.1), (6.2). Тоді рівняння матеріального і теплового балансів приймають вигляд:

$$\frac{d(V\rho N_j)}{dt} = \sum F_{j_\Sigma} \ , \qquad (6.3)$$

$$\frac{d(V\rho C_p T)}{dt} = \sum F_{T_\Sigma} . \qquad (6.4)$$

6.1.2 Приклад розрахунку проточного реактора ідеального змішування періодичної дії

Для різних теплових режимів проведення ендотермічної реакції типу $A \xrightarrow{k_1} R \xrightarrow{k_2} S$ у РІЗ-П, обладнаному теплообмінним пристроєм типу сорочка-термостат, визначити час закінчення реакції. Результати рішення представити в чисельному і графічному виді.

З урахуванням постановки задачі виразимо джерела речовини і тепла через їхні інтенсивності $f_{j,V}$; $q_{T,V}$; $q_{T,F}$:

$$\sum F_{A_\Sigma} = f_{A,V} \cdot V = W_A \cdot V = -k_1 \cdot C_A \cdot V; \quad (6.5)$$

$$\sum F_{R_\Sigma} = f_{R,V} \cdot V = W_R \cdot V = (k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_R) \cdot V; \quad (6.6)$$

$$\sum F_{S_\Sigma} = f_{S,V} \cdot V = W_S \cdot V = k_2 \cdot C_R \cdot V; \quad (6.7)$$

$$\sum F_{T_\Sigma} = q_{T,V} \cdot V + q_{T,F} \cdot F_T = -Q_P \cdot W_S \cdot V + K_T \cdot (T_T - T) \cdot F_T; \quad (6.8)$$

де W_A, W_R, W_S – швидкості відповідно перетворення й утворення, *кмоль/(м*^{3}*·с)*; V – об'єм реакційної суміші, *м*^{3}; F_T – поверхня теплопередачі, *м*^{2}; k_1 та k_2 – константи швидкості стадій реакції, *с*$^{-1}$; K_T – коефіцієнт теплопередачі, *Вт/(м*^{2}*·К)*; Q_P – теплота реакції, *кДж/кмоль S*; T_T – температура теплоносія, *К*; T – температура реакційної суміші, *К*.

Ввівши в рівняння (6.3), (6.4) залежності (6.5) - (6.8), температурні залежності констант швидкості і співвідношення $c_j = \rho \cdot N_j$ після нескладних перетворень отримаємо:

$$k_1 = k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T); \quad (6.9)$$

$$k_2 = k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T); \quad (6.10)$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A; \quad (6.11)$$

$$\frac{dC_R}{dt} = k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_R; \quad (6.12)$$

$$\frac{dC_S}{dt} = k_2 \cdot C_R; \quad (6.13)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{K_T \cdot F_T}{V \cdot \rho \cdot c_P} \cdot (T_T - T) - \frac{Q_P}{\rho \cdot c_P} \cdot k_2 \cdot C_R. \quad (6.14)$$

Для адіабатичного теплового режиму рівняння (6.14) прийме вигляд:

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{Q_P}{\rho \cdot c_P} \cdot k_2 \cdot C_R. \tag{6.15}$$

Ізотермічний тепловий режим забезпечується рівністю теплоприходу і тепловитрат, тобто:

$$\frac{dT}{dt} = 0. \tag{6.16}$$

Таким чином, математична модель в ізотермічних умовах буде така:

$$\begin{cases} \dfrac{dC_A}{dt} = -k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T) \cdot C_A, \\ \dfrac{dC_R}{dt} = k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T) \cdot C_A - k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R, \\ \dfrac{dC_S}{dt} = k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R. \end{cases} \tag{6.17}$$

При початкових умовах:

$$C_A(0) = C_{A_0}, C_B(0) = C_{B_0}, C_S(0) = C_{S_0}, T(0) = T_0.$$

Таким чином, математична модель в адіабатичних умовах буде така:

$$\begin{cases} \dfrac{dC_A}{dt} = -k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T) \cdot C_A, \\ \dfrac{dC_R}{dt} = k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T) \cdot C_A - k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R, \\ \dfrac{dC_S}{dt} = k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R, \\ \dfrac{dT}{dt} = -\dfrac{Q_P}{\rho \cdot c_P} \cdot k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R. \end{cases} \tag{6.18}$$

При початкових умовах:

$$C_A(0) = C_{A_0}, C_B(0) = C_{B_0}, C_S(0) = C_{S_0}, T(0) = T_0.$$

Таким чином, математична модель в політропічних умовах буде така:

$$\begin{cases} \dfrac{dC_A}{dt} = -k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T) \cdot C_A, \\ \dfrac{dC_R}{dt} = k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T) \cdot C_A - k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R, \\ \dfrac{dC_S}{dt} = k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R, \\ \dfrac{dT}{dt} = \dfrac{K_T \cdot F_T}{V \cdot \rho \cdot c_P} \cdot (T_T - T) - \dfrac{Q_P}{\rho \cdot c_P} \cdot k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R. \end{cases} \quad (6.19)$$

При початкових умовах:

$$C_A(0) = C_{A_0}, C_B(0) = C_{B_0}, C_S(0) = C_{S_0}, T(0) = T_0, T_T(0) = T_{T_0}.$$

Математичний опис РІЗ-П для розглянутих теплових режимів (6.17) - (6.19) являє собою систему звичайних диференційних рівнянь першого порядку. Для їх рішення скористаємося методом Ейлера з постійним кроком інтегрування. Сутність методу полягає в тому, що похідна замінюється відношенням кінцевих різниць. Тоді чисельне інтегрування зводиться до обчислення за рекурентним співвідношенням:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot F(x, y), \quad (6.20)$$

де h – крок інтегрування; $F(x, y)$ – права частина диференційного рівняння; y_i – попереднє наближення шуканої величини.

Для узгодження розмірностей у вихідній інформації необхідно розмірність теплоти реакції представити в *Дж/кмоль S* (по речовині *S*):

$$Q_p = 13100 \text{ кДж/кмоль } S \cdot 1000 = 131 \cdot 10^5 \text{ Дж/кмоль } S.$$

Температуру реакційної суміші і теплоносія необхідно виразити в градусах Кельвіна. Інші величини задані в погоджених розмірностях.

Розв’яжемо задачу при наступних початкових даних. Початкові концентрації реагуючих компонентів, *кмоль/м*^{3}: $C_{A_0} = 1{,}15$; $C_{R_0} = 0{,}01$; $C_{S_0} = 0$. Теплота реакції $Q_p = 13100$ *кДж/кмоль* S. Температурні залежності констант швидкості мають вигляд:

$$k_1 = 1{,}84 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(-\frac{60910}{R \cdot T}\right), c^{-1};$$

$$k_2 = 1{,}93 \cdot 10^8 \cdot \exp\left(-\frac{58100}{R \cdot T}\right), c^{-1}.$$

Температура вихідної реакційної суміші 30 °С; температура теплоносія 110 °*С*. Щільність і теплоємність реакційної суміші відповідно рівні 810 *кг/м*^{3}, 1600 *Дж/кг·К* . Обсяг реакційної суміші в РІЗ - П складає 0,8 *м*^{3}; поверхня теплопередачі 2,1 *м*^{2}; коефіцієнт теплопередачі 280 *Вт/(м*^{2}*·К)*.

Припущення і рекомендації:

1) Гідродинамічний режим в апараті і теплообмінному пристрої типу сорочка - ідеальне змішування.

2) Густина, теплоємність реакційної суміші і теплота реакції від температури не залежать.

3) Реакція протікає без зміни об'єму.

Інструкції по роботі з інтегрованим програмним середовищем Mathcad надаються при роботі в лабораторії обчислювальної техніки. Робота виконується у програмному середовищі Mathcad (версії 8 і вище) на персональному комп’ютері.

Згідно із заданим викладачем механізмом реакції потрібно скласти статичну математичну модель ізотермічного РІЗ у статиці й підготувати матриці коефіцієнтів K для п'яти значень часу перебування ($\tau = 1, 2, 3, 4, 5$). За допомогою ЕОМ одержати обернені матриці. Після розрахункових робіт накреслити залежність концентрації кожного компоненту від часу перебування речовин у потоці.

6.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.

3. Скласти математичну модель реактора відповідно до завдання та розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.
4. Включити комп'ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.
5. Отримати результати та їх проаналізувати.
6. Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

6.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

При цьому результати можуть бути, наприклад, такими, як представлені нижче щодо прикладу, розглянутого у розділі теоретичних положень.

Вихідні дані:
Константи швидкості реакції, 1/с:

$$k1(tem) := 1.84\,10^{9} \cdot e^{\frac{-60910}{8.31 \cdot tem}}$$

$$k2(tem) := 1.93\,10^{8} \cdot e^{\frac{-58100}{8.31 \cdot tem}}$$

$i := 1..900$ - кроки інтегрування

$\Delta t := 0.1$ - величина кроку інтегрування, с

Концентрації речовин (кмоль/м^3) і температура (К) у початковий момент часу

$t_0 := 0$

$tem_0 := 303$

$Ca_0 := 1.15$

$Cr_0 := 0.01$

$Cs_0 := 0$

$Qps := 1.31 \cdot 10^7$ - тепловий ефект реакції по речовині S, Дж/кмоль

$cp := 1600$ - питома теплоємність реакційної суміші, Дж/(кг*К)

$\rho := 810$ - густина реакційної суміші, кг/м^3

$V := 0.8$ - об'єм реакційної суміші, *м*^{3}

$Ft := 2.1$ - поверхня теплопередачі, *м*^{2}

$Kt := 280$ - коефіцієнт теплопередачі, *Вт/(м*^{2}*·К)*

$Tt := 383$ - температура теплоносія, *К*

Ліві частини системи диференціальних рівнянь матеріального балансу:

$$FCa(Ca, tem) := -k1(tem) \cdot Ca$$

$$FCr(Ca, Cr, tem) := k1(tem) \cdot Ca - k2(tem) \cdot Cr$$

$$FCs(Cr, tem) := k2(tem) \cdot Cr$$

<u>Моделювання РІЗ-П (ізотермічний режим)</u>

Реалізація метода Ейлера

$$\begin{pmatrix} t_i \\ Ca_i \\ Cr_i \\ Cs_i \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} t_{i-1} + \Delta t \\ Ca_{i-1} + FCa\left(Ca_{i-1}, tem_0\right) \cdot \Delta t \\ Cr_{i-1} + FCr\left(Ca_{i-1}, Cr_{i-1}, tem_0\right) \cdot \Delta t \\ Cs_{i-1} + FCs\left(Cr_{i-1}, tem_0\right) \cdot \Delta t \end{pmatrix}$$

$$\Delta_i := \left| FCa\left(Ca_i, tem_0\right) \right|$$

$\Delta =$

	0
0	0
1	0.066
2	0.065
3	0.065
4	0.065

$t =$

	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4

$Ca =$

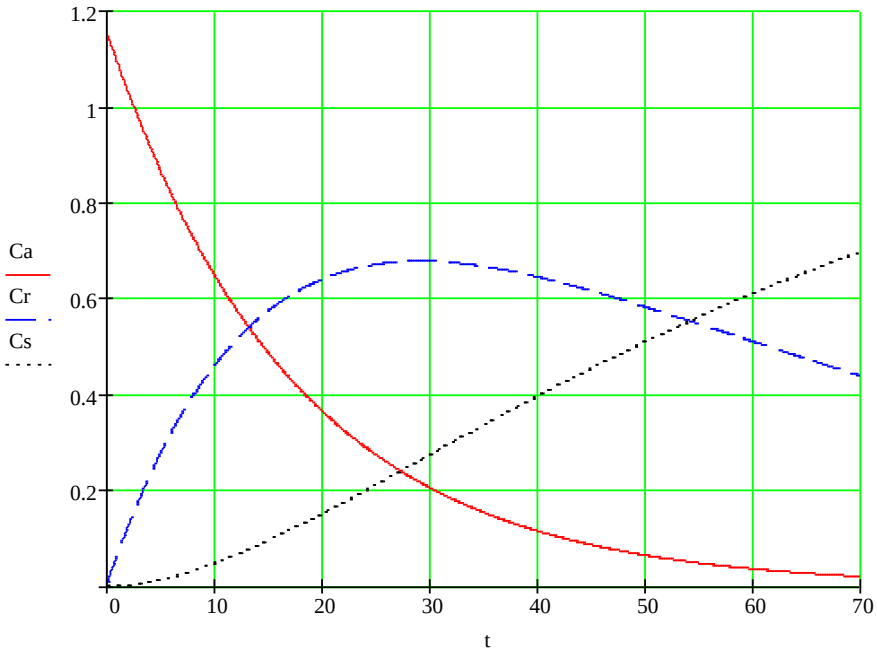
	0
0	1.15
1	1.143
2	1.137
3	1.13
4	1.124

$Cr =$

	0
0	0.01
1	0.017
2	0.023
3	0.03
4	0.036

$Cs =$

	0
0	0
1	$1.838 \cdot 10^{-5}$
2	$4.887 \cdot 10^{-5}$
3	$9.137 \cdot 10^{-5}$
4	$1.458 \cdot 10^{-4}$



Час закінчення реакції: *t=54,02 с*

Моделювання РІЗ-П (адіабатичний режим)

$$Ftem(Cr, tem) := \frac{Qps}{cp \cdot \rho} \cdot \left| FCs(Cr, tem) \right|$$

ліва частина диференційного рівняння теплового балансу

$$\begin{pmatrix} t_i \\ Ca_i \\ Cr_i \\ Cs_i \\ tem_i \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} t_{i-1} + \Delta t \\ Ca_{i-1} + FCa\left(Ca_{i-1}, tem_{i-1}\right) \cdot \Delta t \\ Cr_{i-1} + FCr\left(Ca_{i-1}, Cr_{i-1}, tem_{i-1}\right) \cdot \Delta t \\ Cs_{i-1} + FCs\left(Cr_{i-1}, tem_{i-1}\right) \cdot \Delta t \\ tem_{i-1} + Ftem\left(Cr_{i-1}, tem_{i-1}\right) \cdot \Delta t \end{pmatrix}$$

$$\Delta_i := \left| FCa\left(Ca_i, tem_i\right) \right|$$

$\Delta =$

	0
0	0
1	0.066
2	0.065
3	0.065
4	0.065

$t =$

	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4

$Ca =$

	0
0	1.15
1	1.143
2	1.137
3	1.13
4	1.124

Cr =

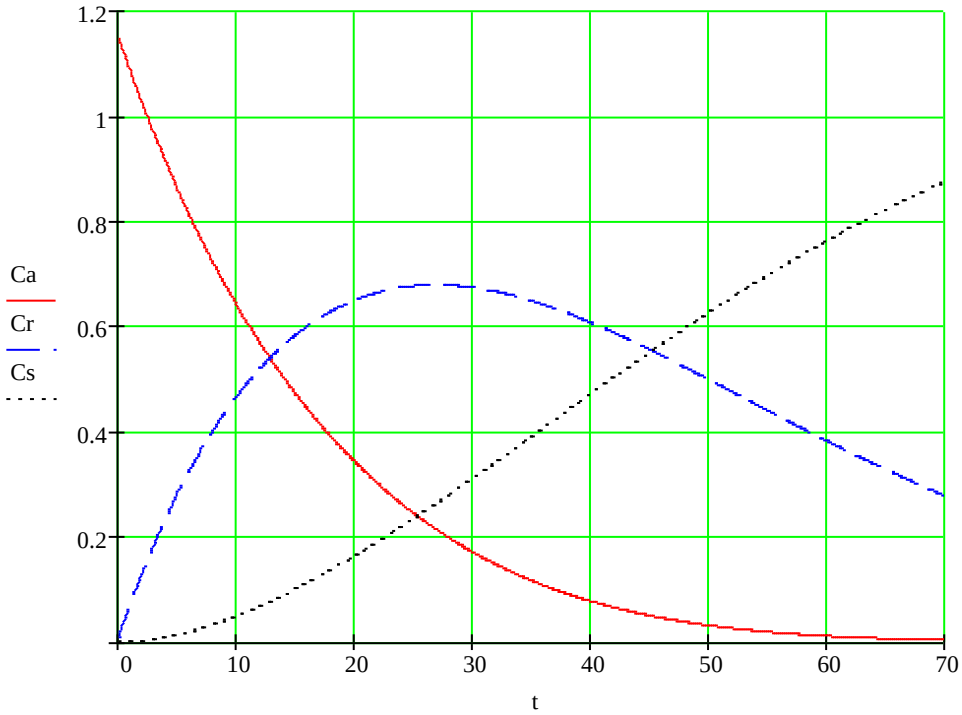
	0
0	0.01
1	0.017
2	0.023
3	0.03
4	0.036

Cs =

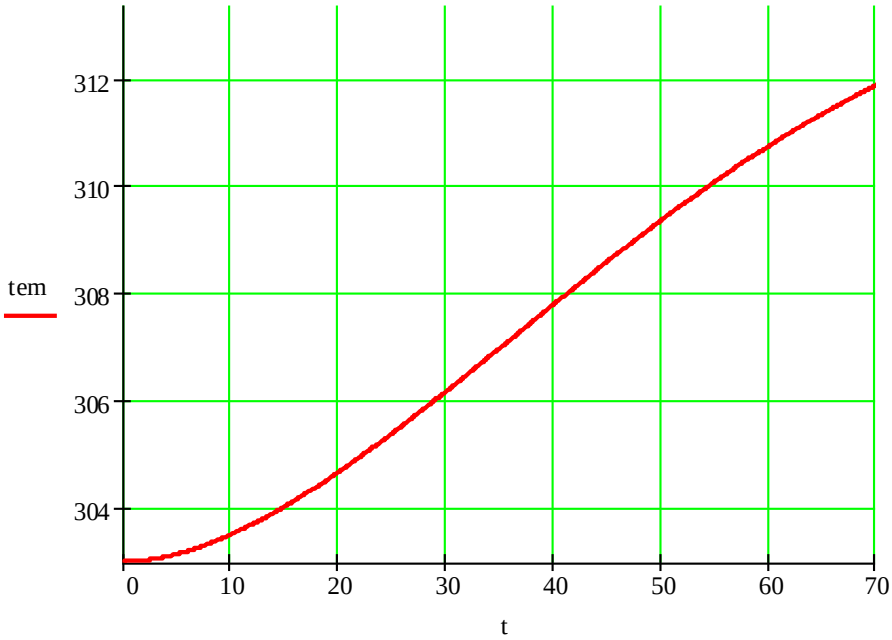
	0
0	0
1	$1.838 \cdot 10^{-5}$
2	$4.887 \cdot 10^{-5}$
3	$9.137 \cdot 10^{-5}$
4	$1.458 \cdot 10^{-4}$

tem =

	0
0	303
1	303
2	303
3	303.001
4	303.001



Час закінчення реакції: *t*=45,136 *c*



Моделювання РІЗ-П *(політропічний режим)*

$$Ftem(Cr, tem) := \frac{Qps}{cp \cdot \rho} \cdot \left| FCs(Cr, tem) \right| + \frac{Kt \cdot Ft \cdot (Tt - tem)}{V \cdot cp \cdot \rho}$$

ліва частина диференційного рівняння теплового балансу

$$\begin{pmatrix} t_i \\ Ca_i \\ Cr_i \\ Cs_i \\ tem_i \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} t_{i-1} + \Delta t \\ Ca_{i-1} + FCa\left(Ca_{i-1}, tem_{i-1}\right) \cdot \Delta t \\ Cr_{i-1} + FCr\left(Ca_{i-1}, Cr_{i-1}, tem_{i-1}\right) \cdot \Delta t \\ Cs_{i-1} + FCs\left(Cr_{i-1}, tem_{i-1}\right) \cdot \Delta t \\ tem_{i-1} + Ftem\left(Cr_{i-1}, tem_{i-1}\right) \cdot \Delta t \end{pmatrix}$$

$$\Delta_i := \left| FCa\left(Ca_i, tem_i\right) \right|$$

$\Delta =$

	0
0	0
1	0.066
2	0.065
3	0.065
4	0.065

$t =$

	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4

$Ca =$

	0
0	1.15
1	1.143
2	1.137
3	1.13
4	1.124

$Cr =$

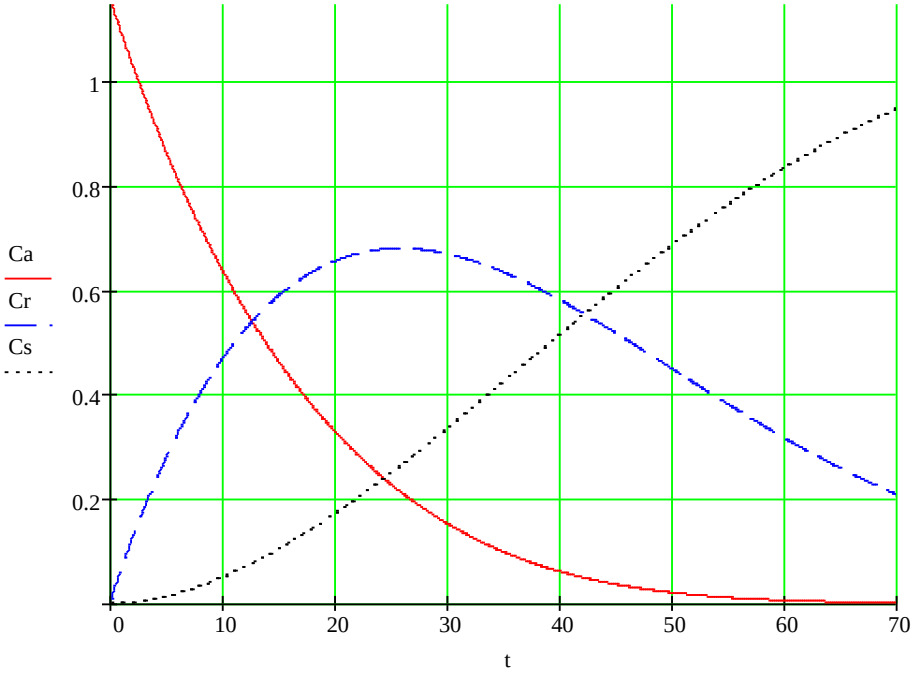
	0
0	0.01
1	0.017
2	0.023
3	0.03
4	0.036

$Cs =$

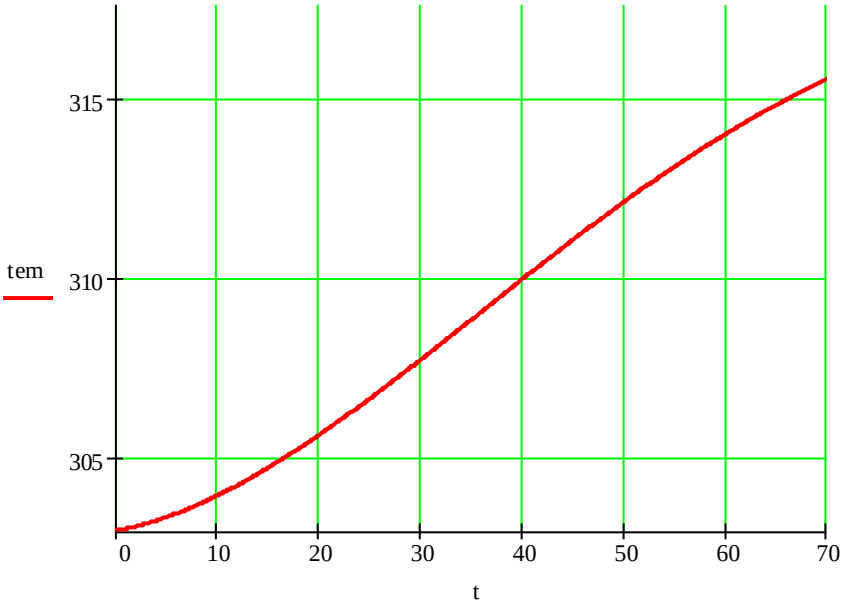
	0
0	0
1	$1.838 \cdot 10^{-5}$
2	$4.888 \cdot 10^{-5}$
3	$9.142 \cdot 10^{-5}$
4	$1.459 \cdot 10^{-4}$

$tem =$

	0
0	303
1	303.005
2	303.01
3	303.015
4	303.02



Час закінчення реакції: *t*=42,08 *c*



Досліджено ендотермічну реакцію, що протікає в РІЗ-П, в різних теплових режимах. Визначено час закінчення реакції: в ізотермічному режимі – 54,02 *c*; адіабатичному – 45,136 *c*; політропічному – 42,08 *c*. Отримані результати свідчать про те, що найбільш ефективним для ендотермічної реакції в заданих умовах є політропічний режим.

На графіках приведено характерні для досліджуваної реакції кінетичні залежності і зміна температури в часі. Екстремальний характер

кінетичної залежності за проміжним продуктом *R* обумовлюється тим, що в початковий момент, коли концентрація продукту *R* мізерно мала, швидкість першої стадії (одержання продукту *R*) переважає над швидкістю другої стадії (витрата продукту *R*). Потім при зменшенні концентрації *A* швидкість витрати *R* стає більше швидкості утворення, і концентрація *R* зменшується. Якщо цільовим продуктом є *R*, то в нашому випадку процес доцільно припинити в момент часу 30 *с*, коли концентрація *R* досягає свого максимуму.

В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм для реалізації. Зробіть висновки щодо отриманих значень результатів моделювання у різних температурних режимах.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 6

1) *Що таке математичне моделювання?*
2) *Яким чином будується математична модель хімічного реактора?*
3) *Дайте визначення кінетичній моделі хімічного процесу?*
4) *Сформулюйте правила побудови кінетичної моделі хімічного процесу?*
5) *Яким чином при моделюванні хімічного реактора враховується вплив температури процесу?*
6) *Як класифікують хімічні реактори за температурним режимом?*
7) *Як класифікують хімічні реактори за гідродинамічним режимом?*

7. МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ АБСОРБЦІЇ

Лабораторна робота № 7

ТЕМА: використання математичних методів моделювання для визначення основних параметрів процесу абсорбції на прикладі процесу поглинання парів ацетону з повітря.

МЕТА: набути уміння математичного моделювання процесу абсорбції.

7.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

7.1.1 Математичний опис процесу абсорбції

Абсорбцією називається процес поглинання одного або декількох компонентів газової (або парової) суміші рідким поглиначем -абсорбентом.

У хімічній промисловості абсорбційні процеси застосовуються: при одержанні готового продукту, наприклад, у виробництві деяких кислот (поглинання окислів азоту розведеною азотною кислотою й ін.); при улавлюванні коштовних компонентів або видаленні шкідливих домішок із газів (поглинання ацетилену ацетоном при тонкому очищенні етилену й ін.).

Процес абсорбції являє собою масообмін у системі, що складається з двох фаз (рідкої і газоподібної). Перехід речовини з однієї фази в іншу відбувається при відсутності рівноваги між фазами.

Виходячи з блокового принципу складання математичних моделей опис процесу абсорбції повинен включати: опис фазової рівноваги в системі газ-рідина, кінетику протікання процесу, опис структури потоків фаз в апараті.

При однаковій температурі і тиску в стані рівноваги, будь-якій концентрації речовини, в одній фазі відповідає рівноважна їй концентрація цієї речовини в іншій фазі:

$$y_р = f(x), \quad (7.1)$$

де x – вміст речовини, що розподіляється, в одній фазі, $y_р$ – рівноважна їй концентрація цієї речовини в іншій фазі.

Для малих концентрацій розчину як основний закон, що характеризує рівновагу в системі газ-рідина, справедливий закон Генрі, відповідно до якого:

$$y_р = K_г \cdot x, \quad (7.2)$$

де $y_р$ – концентрація компонента в газовій фазі, рівноважної з рідиною, x – концентрація компонента в рідкій фазі, $K_г$ – постійна при даній температурі і тиску величина.

Що стосується кінетики процесу: при відсутності рівноваги між фазами відбувається перенос речовини з однієї фази в іншу, відповідно до рівняння масопередачі:

$$dM = K \cdot (y - y_р) \cdot dF \cdot dt, \quad (7.3)$$

де dM – кількість речовини, що перейшла, з однієї фази в іншу через межфазну поверхню dF за час dt, кг; K – коефіцієнт масопередачі, кг/(м^2·с·од.конц.).

Таким чином, рушійною силою процесу абсорбції в будь-якій точці по висоті апарата є різниця між поточною концентрацією компонента і його рівноважною концентрацією.

У більшості випадків абсорбцію проводять у насадкових, тарілчастих або поличних апаратах колонного типу. Для опису структури потоків процесу, що протікає в таких абсорберах, використовують моделі ідеального витиснення, коміркову, дифузійну і комбіновані. При моделюванні процесу в насадковій колоні найбільше поширення одержала модель ідеального витиснення.

З урахуванням того, що:

- газ і поглинач не взаємодіють один з одним,
- потоки рідини і газу рухаються назустріч один одному у поршневому режимі,

- масові витрати і швидкості відповідних потоків постійні,
- процес абсорбції відбувається в ізотермічному режимі.

Математичну модель статики процесу абсорбції в насадковій колоні (рис.7.1) можна представити як:

$$\begin{cases} Ldx + Kv(y - y_p)Sdl = 0 \\ -Gdy - Kv(y - y_p)Sdl = 0 \end{cases}, \qquad (7.4)$$

$y_р = f(x)$, $y\ (l = 0) = y_{вх}$, $x\ (l = L) = x_{вх}$

де L, G – витрати газу та рідини відповідно, кмоль/год; dl – координата висоти шару насадки, м; Kv – об'ємний коефіцієнт масопередачі, кмоль/(год·м^3); S – площа поперечного перетину $(\pi \cdot D^2)/4$, м^2; D – внутрішній діаметр колони, м; x – концентрація компоненту в рідині, відносні одиниці; y – концентрація компоненту у газі, відносні одиниці; yp – концентрація компоненту в газовій фазі рівноважної з рідиною, відносні одиниці.

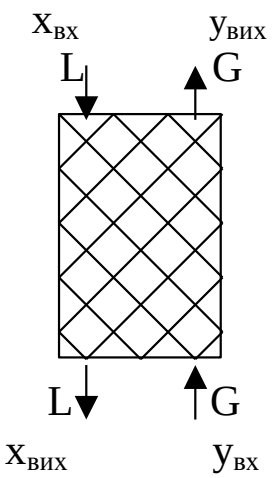


Рис. 7.1 – Схема насадкового абсорбера

При моделюванні процесу абсорбції в тарілчастій колоні можна скористатися комірковою моделлю. З урахуванням того, що:

- газ і поглинач не взаємодіють один з одним,
- гідродинаміка потоків описується комірковою моделлю, згідно з якою відбувається ідеальне перемішування в межах комірки і відсутнє перемішування між комірками,

- масові витрати і швидкості відповідних потоків постійні,
- процес абсорбції відбувається в ізотермічному режимі.

Математичну модель статики процесу абсорбції в і-й комірці можна представити як:

$$\begin{cases} -Lx_i + Lx_{i+1} + K(y_i - y_{pi})S_T = 0 \\ Gy_{i-1} - Gy_i - K(y_i - y_{pi})S_T = 0 \end{cases}, \qquad (7.5)$$

$$y_{pi} = f(x_i),$$

де K – коефіцієнт масопередачі, кмоль/(год·м^2); S_T – робоча площа тарілки, м^2.

7.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.
3. Розробити математичну модель статики процесу поглинання парів ацетону з повітря в насадковому абсорбері.
4. Дослідити зміну вмісту ацетону у повітрі та воді по довжині колони. Зобразити профілі концентрацій. Визначити ступінь абсорбції при заданих конструктивних параметрах.
5. Розробити математичну модель статики процесу поглинання парів ацетону з повітря в тарілчастому абсорбері.
6. Визначити кількість тарілок, необхідної для забезпечення розрахованого в п.3 ступеня абсорбції, припускаючи, що робоча площа тарілки приблизно дорівнює площі поперечного перетину колони. Діаметр колони для розрахунку обрати такий, як і у випадку насадкової колони.
7. Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.
8. Включити комп’ютер і запустити програму Mathcad вказаним

викладачем способом.

9. Отримати результати та їх проаналізувати.
10. Представити результати роботи на комп’ютері викладачу.
11. Перейти до оформлення звіту

7.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Вихідні дані:

$K_V := 0.05$ Середній об'ємний коефіцієнт масопередачі, кмоль/(год*м^3)

$G := 0.3$ Витрата повітря, кмоль/год

$L := 0.7$ Витрата води, кмоль/год

$D := 1.6$ Внутрішній діаметр колони, м

$H := 8.5$ Висота шару насадки, м

$xv := 0.10$ Вміст ацетону у воді, покидаючого абсорбер, кмоль/кмоль води

$yv := 0.27$ Вміст ацетону у повітрі, поступаючого в абсорбер, кмоль/кмоль повітря

$S := \frac{3.14 D^2}{4}$ Площа поперечного перетину, м^2

Розв'язання моделі ідеального витіснення з допомогою функції rkfixed

$$Func(l, y) := \begin{bmatrix} \frac{-K_V \cdot S}{L}\left(y_1 - 1.68 y_0\right) \\ \frac{-K_V \cdot S}{G} \cdot \left(y_1 - 1.68 y_0\right) \end{bmatrix}$$

$$U := rkfixed\left[\begin{pmatrix} xv \\ yv \end{pmatrix}, 0, H, 100, Func\right]$$

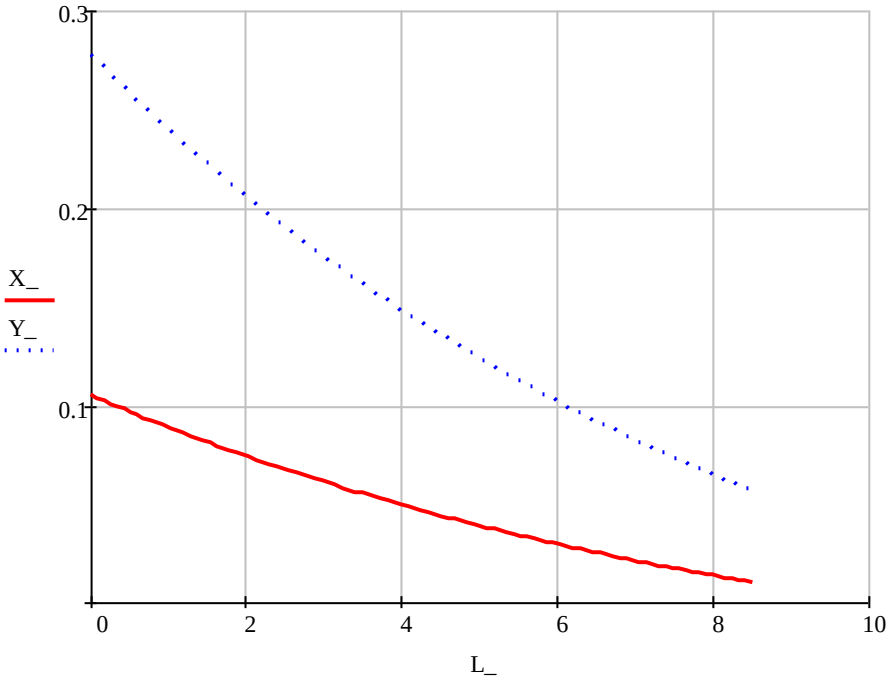
$Y_ := U^{\langle 2 \rangle}$

$L_ := U^{\langle 0 \rangle}$

$X_ := U^{\langle 1 \rangle}$

U =

	0	1	2
0	0	0.105	0.278
1	0.085	0.104	0.275
2	0.17	0.102	0.271
3	0.255	0.101	0.268
4	0.34	0.099	0.265
5	0.425	0.098	0.261
6	0.51	0.096	0.258
7	0.595	0.095	0.255
8	0.68	0.094	0.252
9	0.765	0.092	0.249
10	0.85	0.091	0.245
11	0.935	0.09	0.242
12	1.02	0.088	0.239
13	1.105	0.087	0.236
14	1.19	0.086	0.233
15	1.275	0.085	...



Профіль концентрації ацетону у повітрі (X) та воді (Y) по довжині колони (L)

Розв'язання коміркової моделі ітераційним методом

$K := 0.1$

$$a := \frac{yv - \left(U^{\langle 2 \rangle}\right)_{100}}{yv}$$

$a = 0.796$

$ORIGIN := 0$

$$
\text{tower}(xout, yin, K, a) := \left|\begin{array}{l}
i \leftarrow 1 \\
x_i \leftarrow xout \\
y_0 \leftarrow yin \\
\text{while } \dfrac{y_0 - y_{i-1}}{y_0} < a \wedge i < 100 \\
\quad \left|\begin{array}{l}
y_i \leftarrow \dfrac{G \cdot y_{i-1} + 1.68 K \cdot S \cdot x_i}{G + K \cdot S} \\
x_{i+1} \leftarrow x_i - \dfrac{K \cdot S}{L}\left(y_i - 1.68 x_i\right) \\
i \leftarrow i + 1
\end{array}\right. \\
(i \;\; x \;\; y)
\end{array}\right.
$$

Кількість тарілок:

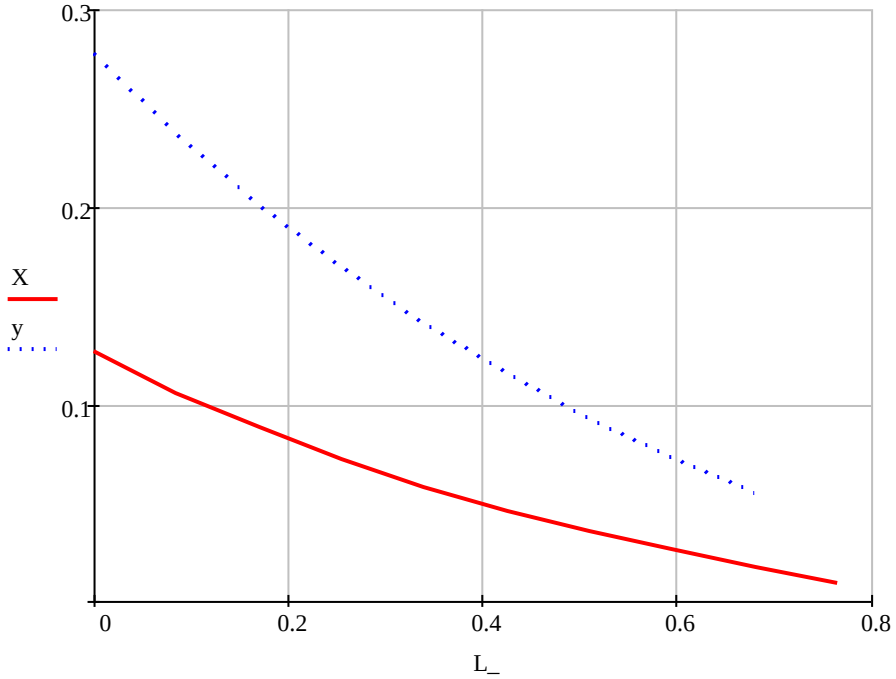
$$n := \text{tower}(xv, yv, K, a)_{0,0} = 9$$

$x := \text{tower}(xv, yv, K, a)_{0,1} =$

	0
0	0
1	0.105
2	0.088
3	0.072
4	0.058
5	0.046
6	0.035
7	0.026
8	0.017
9	$9.442 \cdot 10^{-3}$

$$y := \text{tower}(xv, yv, K, a)_{0,2} = \begin{pmatrix} 0.278 \\ 0.237 \\ 0.201 \\ 0.169 \\ 0.14 \\ 0.115 \\ 0.093 \\ 0.073 \\ 0.055 \end{pmatrix}$$

$$X := \begin{pmatrix} 0.127 \\ 0.105 \\ 0.088 \\ 0.072 \\ 0.058 \\ 0.046 \\ 0.035 \\ 0.026 \\ 0.017 \\ 9.442 10^{-3} \end{pmatrix}$$



Профіль концентрації ацетону у повітрі (X) та воді (y) по довжині колони (L)

В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм для реалізації. Зробіть висновки щодо отриманих результатів.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 7

1) *Що таке абсорбція?*
2) *Де застосовуються абсорбційні процеси?*
3) *Що включає математична модель опису процесу абсорбції?*
4) *Яка модель застосовується при моделюванні процесу у насадковій колоні?*
5) *Яка модель застосовується при моделюванні процесу у тарілчастій колоні?*

8. ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕСІВ З ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДУ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ (НЕЛІНІЙНА РЕГРЕСІЯ)

Лабораторна робота № 8

ТЕМА: побудова математичних моделей процесів з використанням методу найменших квадратів (нелінійна регресія)

МЕТА: оволодіння методикою побудови експериментально-статистичних математичних моделей з використанням метода найменших квадратів (МНК) та придбання навичок побудови математичних моделей нелінійного типу у інтегрованому програмному середовищі Mathcad.

8.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

8.1.1 Лінійна регресія

Широко розповсюдженою задачею обробки даних є представлення їх сукупності деякою функцією $y(x)$. Задача регресії найчастіше всього полягає у отриманні параметрів цієї функції такими, щоб функція наближала «хмарку» вихідних точок (заданих векторами VX та XY) із найменшою середньоквадратичною похибкою. У цьому випадку говорять про регресію *методом найменших квадратів.*

Найчастіше використовується *лінійна регресія*, в якій функція $y(x)$ описує відрізок прямої та має вид:

$$y(x) = a + bx$$

До лінійної регресії можна звести багато видів нелінійної регресії при залежностях виду $y(x)$.

Математично постановка задачі регресії зводиться до наступного. Нехай є набір точно визначених значень x_i і відповідних їм неточних

значень y_i. Припустимо, що існує деяка залежність $f(x_i,\ a_0,\ a_{1,}\ \ \dots\ \ ,\ a_k)$, яка може розглядатись як наближення до залежності $y(x)$, чиї точки представлені як $y_i(x_i)$. Таким чином, ми маємо право записати:

$$y_i = f(x_i,\ a_0,\ a_{1,}\ \ \dots\ \ ,\ a_k) + \xi_i$$

де ξ_i – незалежні випадкові величини із нормальним законом розподілення, які визначають похибку завдання y_i. Зазвичай їх вважають наслідком помилок експерименту. Задача регресії полягає у тому, щоб знайти параметри $a_0,\ a_{1,}\ \ \dots\ \ ,\ a_k$ такими, при яких представлення $y(x)$ нашою функцією $f(x)$ мало найменшу середньоквадратичну похибку. Для цього треба мінімізувати функцію:

$$\Phi(a_0, a_{1,}\ \ \dots\ \ , a_k) = \sum \left(f(x_i, a_0, a_{1,}\ \ \dots\ \ , a_k) - y_i\right)^2$$

Наприклад, для найширше розповсюдженої лінійної регресії, коли $f(x) = a_0 + a_1 x$ (часто замінюють $a_0 = a$ та $a_1 = b$), треба мінімізувати наступний вираз:

$$\Phi(a_0, a_{1,}) = \sum (a_0 + a_1 x_i - y_i)^2$$

Якщо прирівняти $\partial\Phi/\partial a_0$ та $\partial\Phi/\partial a_1$ до нуля, то для лінійної регресії можна знайти її параметри a_0 та $a_{1,}$ у явній формі:

$$a_0 = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - (\sum_{i=1}^{n} x_i)^2}, \qquad a_1 = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - (\sum_{i=1}^{n} x_i)^2}$$

Аналогічним чином можна отримати вираз і для інших видів регресії: поліноміальної, експоненціальної, логарифмічної та ін. З огляду на складність відповідних виразів вони не наводяться – деякі з формул можна знайти у літературі. Багато задач нелінійної регресії можна звести до розглянутої вище лінійної, використовуючи аналогічні перестановки. Але Mathcad для багатьох видів регресії задає потрібні формули явно, що робить перетворення даних непотрібними.

Функції системи Mathcad для проведення лінійної регресії наведені на рис. 8.1.

Рис. 8.1 – Функції системи Mathcad для проведення лінійної регресії

8.1.2 Побудова нелінійної апроксимуючої залежності

При математичному описі процесів хімічної технології часто не має можливості знайти точний функціональний зв'язок між змінними, спираючись на фундаментальні закони збереження речовини та енергії, закони хімічної кінетики, тощо. У такому випадку доцільно на основі експериментальних даних шукати емпіричну залежність, яка формально відображала б вплив вхідних змінних *X* на вихідні *Y*. Будувати модель рекомендується з нанесення експериментальних одержаних значень *X* та *Y* на графік та за характером отриманої залежності вибрати апроксимуючу функцію, що найбільш відповідає даному графіку (наприклад, логарифмічну, показникову, тригонометричну та ін.). В інженерній та науковій практиці широко використовуються апроксимуючі функції у вигляді алгебраїчних многочленів-поліномів:

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n \qquad (8.1)$$

Застосування поліномів має ту перевагу, що невідомі коефіцієнти (параметри) a_i, входять у рівняння лінійно, що спрощує їх розрахунок. Крім того, збільшуючи степінь такого полінома, можна досягнути

практично будь-якої міри наближення розрахункових даних до експериментальних аж до повного збігу.

Задача побудови математичного опису процесу у вигляді (8.1) зводиться до знаходження таких значень коефіцієнтів a_i, при яких досягається найкращий збіг експериментально одержаних y_e та розрахованих за допомогою апроксимуючої залежності вихідних значень y_p.

Одним із методів знаходження коефіцієнтів апроксимуючих поліномів є метод найменших квадратів (МНК), умова якого полягає у тому, що сума квадрата різниці між експериментальними значеннями функції та розрахованими за допомогою апроксимуючого полінома при одних і тих же значеннях аргументу повинна бути мінімальною, тобто:

$$S = \sum_{i=1}^{N} [y_e(x_i) - y_p(x_i)]^2 = \sum [Y_{ei} - Y_{pi}] \to \min \qquad (8.2)$$

Після підстановки (8.1) в умову МНК (8.2) одержуємо:

$$S = \sum_{i=1}^{N} [Y_{ei} - (a_0 x_i^0 + a_1 x_i^1 + a_2 x_i^2 + \ldots + a_n x_i^n) \to \min \qquad (8.3)$$

де $a_0, a_1, a_2, \ldots, a_n$ – невідомі (ті, що потрібно знайти) коефіцієнти поліноміальної емпіричної моделі процесу; n – порядок поліному; N – кількість дослідних значень функції Y. Змінна x_i^0 вводиться у рівняння (8.3) для одноманітності запису.

Як відомо, функція S має мінімум при умові, що похідні незалежних змінних, (у даному випадку похідні коефіцієнтів a_0, a_1, a_2 $\cdots$ a_n) будуть рівними нулеві:

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = \frac{\partial S}{\partial a_1} = \frac{\partial S}{\partial a_2} = \ldots = \frac{\partial S}{\partial a_n} = 0 \qquad (8.4)$$

чому відповідає наступна система:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{N}(y_{ei} - a_0 x_i^0 - a_1 x_i^1 - a_2 x_i^2 - \ldots - a_n x_i^n) x_i^0 = 0 \\ \sum_{i=1}^{N}(y_{ei} - a_0 x_i^0 - a_1 x_i^1 - a_2 x_i^2 - \ldots - a_n x_i^n) x_i^1 = 0 \\ \ldots \\ \sum_{i=1}^{N}(y_{ei} - a_0 x_i^0 - a_1 x_i^1 - a_2 x_i^2 - \ldots - a_n x_i^n) x_i^n = 0 \end{cases} \quad (8.5)$$

Приведемо одержану систему рівнянь до наступного вигляду (так званої системи нормальних рівнянь):

$$\begin{cases} a_0 \sum_i x_i^0 + a_1 \sum_i x_i^1 + \ldots + a_n \sum_i x_i^n = \sum_i y_{ei} x_i^0 \\ a_0 \sum_i x_i^1 + a_1 \sum_i x_i^2 + \ldots + a_n \sum_i x_i^{n+1} = \sum_s y_{ei} x_i^1 \\ \ldots \\ a_0 \sum_i x_i^n + a_1 \sum_i x_i^{n+1} + \ldots + a_n \sum_i x_i^{n+n} = \sum_i y_{ei} x_i^n \end{cases} \quad (8.6)$$

Розв'язуючи систему нормальних рівнянь (8.6) як лінійну відносно коефіцієнтів a_0, a_1, a_2, ... , a_n знаходимо значення останніх, які задовольнять умові МНК.

Застосування ЕОМ для розв'язання таких задач значно полегшує обчислювальний процес, так як процедура складання системи нормальних рівнянь легко формалізується та виконується на ЕОМ. МНК придатний для розрахунку параметрів (коефіцієнтів) і більш складних залежностей ніж поліноміальні (наприклад, логарифмічних, показникових та інших) у тому випадку, якщо спеціальним перетворюванням цих залежностей можна привести їх до вигляду, що є аналогічним поліному (8.1).

В завданні наводяться початкові дані для побудови експериментально - статистичної моделі, тобто дослідні значення вхідної змінної y_{ei} та відповідні значення вхідної змінної x_i. Потрібно за допомогою програмного комплексу Mathcad знайти поліномінальну

залежність *y=f(x)*.

При обробці дослідних даних з допомогою МНК важливо не тільки розраховувати значення коефіцієнтів апроксимуючого полінома, але й знайти такий його ступінь, якому буде відповідати задовільна помилка апроксимації, котру, як правило, оцінюють у вигляді середньої відносної похибки:

$$\delta = \frac{1}{N}\sum_{1i=1}^{N}\frac{\left|y_{ei} - y_{pi}\right|}{y_{ei}} \cdot 100\%$$

Максимальну відносну похибку апроксимації рекомендується прийняти *ε=5-10%*. Якщо нанести експериментальні дані на графік, можна скласти уявлення про приблизне значення степені полінома, 1 чи 2 (крива близька до прямої), або 2 чи 3 (кривизна є достатньо великою). На рис. 8.2 нанесено результати обробки експериментальних даних для полінома 4-го порядку.

Апроксимація вважається задовільною, якщо помилка є буде мати значення близькі до значень середньої відносної похибки *δ*. У випадку незадовільних результатів апроксимації степінь полінома можна підвищувати та знов обробляти експериментальні дані за допомогою МНК.

Після розрахунку на ЕОМ треба нанести одержану розрахункову криву на той же графік що й експериментальні точки, та записати вираз статистичної математичної моделі.

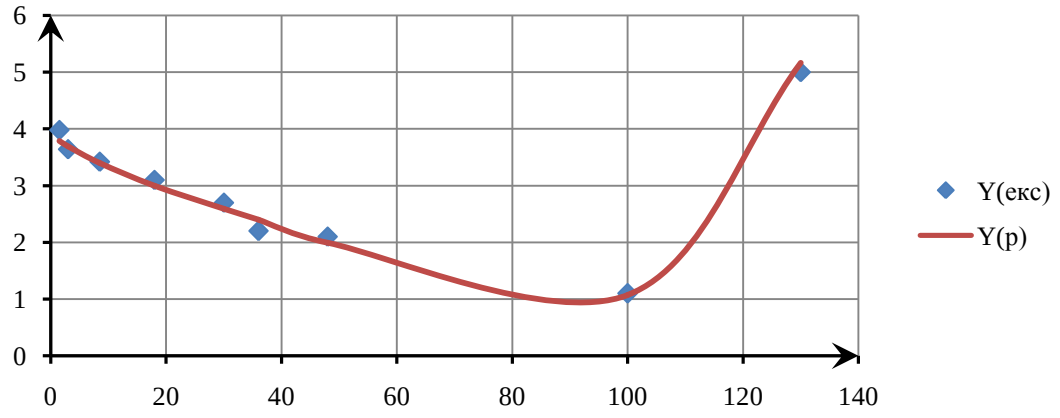


Рис. 8.2 – Експериментальні точки та розрахункова крива

Інструкції по роботі з інтегрованим програмним середовищем Mathcad надаються при роботі в лабораторії обчислювальної техніки.

8.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.
3. Включити комп'ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.
4. Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.
5. Отримати результати та проаналізувати їх.
6. Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

8.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Приклад результатів програмування задачі і геометричної інтерпретації результатів

Вихідні дані по об'єму(V) і водневому показнику (PH):

$$V := \begin{pmatrix} 8.5 \\ 18.0 \\ 30.0 \\ 36.0 \\ 48.0 \\ 100.0 \end{pmatrix}$$ (значення незалежної змінної *x*)

$$PH := \begin{pmatrix} 3.4 \\ 3.0 \\ 2.6 \\ 2.4 \\ 2.0 \\ 1.08 \end{pmatrix}$$ (значення функції *y*)

Визначимо ступінь поліному, що задовольняє похибці

$k := 4$ (k – ступінь поліному)

$H := \mathrm{regress}(V, PH, k)$ (розрахунок коефіцієнтів поліному нелінійної регресії)

$$Y := \begin{pmatrix} \mathrm{interp}(H, V, PH, V_0) \\ \mathrm{interp}(H, V, PH, V_1) \\ \mathrm{interp}(H, V, PH, V_2) \\ \mathrm{interp}(H, V, PH, V_3) \\ \mathrm{interp}(H, V, PH, V_4) \\ \mathrm{interp}(H, V, PH, V_5) \end{pmatrix}$$

$$Y = \begin{pmatrix} 3.4 \\ 3.001 \\ 2.596 \\ 2.403 \\ 1.999 \\ 1.08 \end{pmatrix}$$

$$Ep := \frac{\sum \left(\frac{|PH - Y|}{PH} \right) 100}{6}$$

$Ep = 0.244$ *(розрахункова відносна похибка)*

Реалізація методу МНК

Визначимо коефіцієнти поліному

$$X := \begin{pmatrix} \sum V^0 & \sum V^1 & \sum V^2 & \sum V^3 & \sum V^4 \\ \sum V^1 & \sum V^2 & \sum V^3 & \sum V^4 & \sum V^5 \\ \sum V^2 & \sum V^3 & \sum V^4 & \sum V^5 & \sum V^6 \\ \sum V^3 & \sum V^4 & \sum V^5 & \sum V^6 & \sum V^7 \\ \sum V^4 & \sum V^5 & \sum V^6 & \sum V^7 & \sum V^8 \end{pmatrix}$$

(Розмір матриці *X* дорівнює *k+1*)

$$YX := \begin{pmatrix} PH \cdot V^0 \\ PH \cdot V^1 \\ PH \cdot V^2 \\ PH \cdot V^3 \\ PH \cdot V^4 \end{pmatrix}$$ (Розмір *YX* дорівнює кількості значень (рядків) матриці *Y*)

*X та YX - це вектори системи X*AI=YX, де AI - шукані коефіцієнти.*

$$AI := X^{-1} \cdot YX$$

Знайдені коефіцієнти поліному

$$: AI = \begin{pmatrix} 3.883 \\ -0.067 \\ 1.355 \times 10^{-3} \\ -2.227 \times 10^{-5} \\ 1.261 \times 10^{-7} \end{pmatrix}$$

Перевіримо вірність обчислень:

$$yy(z) := AI_0 + AI_1 \cdot z + AI_2 \cdot z^2 + AI_3 \cdot z^3 + AI_4 \cdot z^4$$

(отримання рівняння нелінійної регресії у вигляді функції користувача (при k=4))

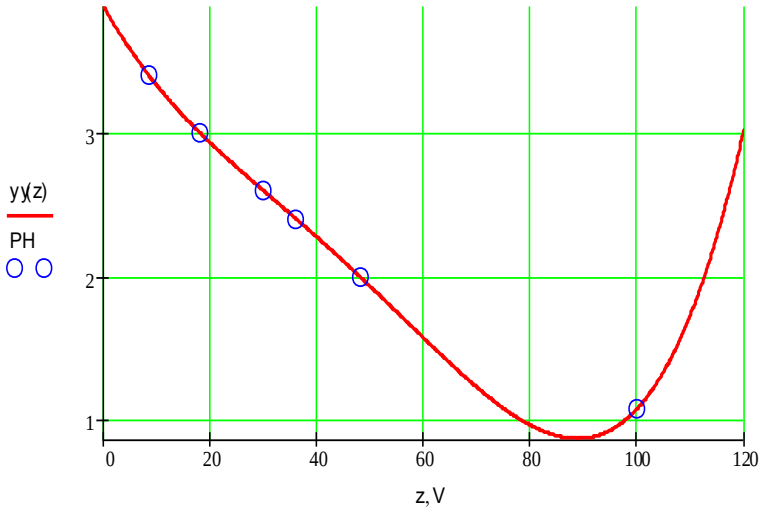
$$Y := \begin{pmatrix} yy(V_0) \\ yy(V_1) \\ yy(V_2) \\ yy(V_3) \\ yy(V_4) \\ yy(V_5) \end{pmatrix}$$

$$Y = \begin{pmatrix} 3.4 \\ 3.001 \\ 2.596 \\ 2.403 \\ 1.999 \\ 1.08 \end{pmatrix}$$ (наближені значення *Y* отримані згідно із рівняння регресії)

$$Ep := \frac{\sum \left(\frac{|PH - Y|}{PH} \right) 100}{6}$$ *(розрахункова відносна похибка)*

Ep = 0.244

Відобразимо поліном графічно:



В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм для реалізації. Зробіть висновки щодо отриманих значень коефіцієнтів рівняння нелінійної регресії та адекватності отриманої моделі.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 8

1) *Характеристика МНК та формулювання його умови.*
2) *До чого зводиться задача побудови поліноміальної математичної моделі?*
3) *Які можливості використання МНК у разі складних апроксимуючих залежностей (логарифмічної, показникової)?*
4) *Який вигляд має алгоритм обробки експериментальних даних із метою побудування поліноміальної математичної моделі?*
5) *Які початкові дані необхідно визначити для виконання стандартної програми на ЕОМ?*
6) *Який підхід (детермінований або статистичний) було використано для постановки даної задачі? Дайте характеристику визначеного підходу.*

9. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ МОДИФІКАЦІЇ ПЕРЛІТУ (ЦКОП)

Лабораторна робота № 9

ТЕМА: побудова експериментально-статистичної моделі процесу модифікації перліту

МЕТА: оволодіння методикою обробки результатів реалізації експерименту на основі центрального композиційного ортогонального плану та статистичного аналізу одержаної математичної моделі в середовищі STATISTICA.

9.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

9.1.1 Побудова експериментально-статистичної моделі (ЦКОП)

Близька до екстремуму область дослідження характеризується суттєвою лінійністю і її не вдається адекватно описати моделями першого порядку. Для адекватного опису цієї області пропонується використовувати ЕС-моделі другого порядку виду:

$$\tilde{y} = b_0 + \sum_{i=1}^{n} b_i x_i + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{\substack{j=i+1 \\ i \neq j}}^{n} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} b_{ii} x_i^2 \ , \qquad (9.1)$$

Як видно, така модель повністю містить в собі модель першого порядку з парними ефектами і квадратичні ефекти. Моделі саме другого, а не більш високих порядків пропонуються тому, що є добре розроблені плани другого порядку, поверхні другого порядку добре досліджені і систематизовані, і, крім того, перехід до моделей більш високого порядку, потребує різкого збільшення об’єму експериментальних досліджень.

Побудова матриці плану. На початковому етапі розвитку теорії планування експерименту, Бокс і Уілсон запропонували для побудови

моделей другого порядку вважати оптимальними плани експерименту, що зберігають принцип ортогональності. Для цього вони запропонували додавати до плану ПФЕ або ДФЕ 2^{n-1}, якщо $n \geq 5$, точку центру плану та певну кількість «зоряних» точок, розміщених на осях факторів на відстанях α так, щоб зберігалась ортогональність розширеної матриці (див. рис. 9.1).

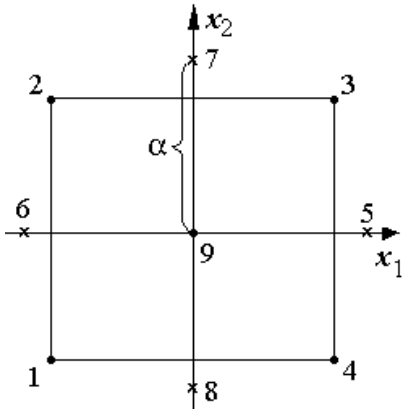


Рис. 9.1 – Розміщення точок центрального композиційного плану (n = 2): 1÷4 – ПФЕ; 5÷8 – «зоряні» точки; 9 – точка центру плану

Такі плани, композиційні по відношенню до планів першого порядку, дістали назву центральних композиційних ортогональних (ЦКОП). Таким чином, ЦКОП містить ядро плану (ПФЕ або ДФЕ), точку центру плану та певну кількість розміщених на осях «зоряних» точок (дві точки на кожен фактор). Таким чином, загальна кількість (N) точок ЦКОП можна знайти: $N = N_я + 2n + 1$, де $N_я$ – кількість точок ядра плану. Величини «зоряних плеч» ортогональних планів є дійсними коренями рівнянь: $\alpha^4 + 2^n \alpha^2 - 2^{n-1}(n + 0{,}5) = 0$, якщо ядром плану є ПФЕ 2^n і $\alpha^4 + 2^{n-1}\alpha^2 - 2^{n-2}(n + 0{,}5) = 0$, якщо ДФЕ 2^{n-1}. Числові показники деяких ЦКОП подано в табл. 9.1.

Таблиця 9.1

Числові показники ортогональних планів

Число факторів	2	3	4	5	5
Ядро плану	ПФЕ 2^2	ПФЕ 2^3	ПФЕ 2^4	ПФЕ 2^5	ДФЕ 2^{5-1}
α	1,000	1,215	1,414	2,187	1,547
N	9	15	25	43	27

Оскільки в загальному випадку дисперсійна матриця для такого плану не діагональна, вводять перетворення для квадратичних ефектів: $x_i' = x_i^2 - \bar{x}_i^2 = x_i^2 - \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2$. Розширена матриця плану експерименту включає стовпці x_0, x_i, $x_i x_j$ і x_i', де $i, j = 1, 2, \ldots, n$, $i < j$.

Коефіцієнти ЕС-моделі можна розрахувати з використанням МНК в матричній формі:

$$B = \left(X^{\mathrm{T}} X\right)^{-1}\left(X^{\mathrm{T}} Y\right), \tag{9.2}$$

де B – матриця-стовпець коефіцієнтів моделі; X – розширена матриця плану експерименту; Y – матриця-стовпець середніх значень вихідної змінної.

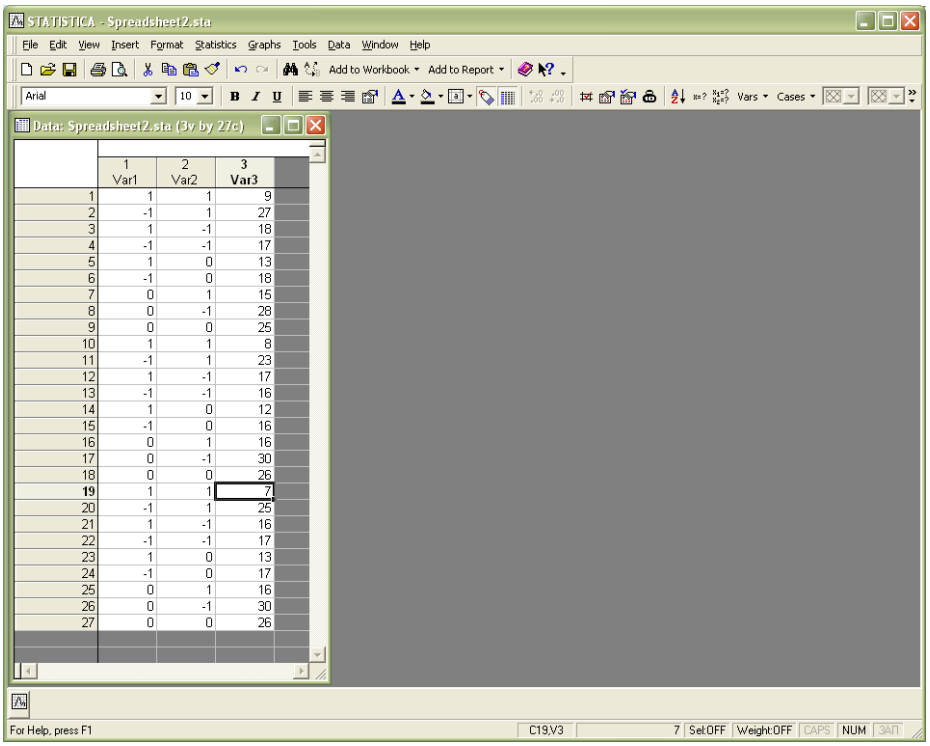
9.1.2 Особливості проведення експериментально-статистичного моделювання в середовищі STATISTICA процесу модифікації перліту

Отримаємо ЕС-модель процесу модифікації перліту та проведемо аналіз моделі в середовищі STATISTICA (див. *Додаток Б*).

Досліджувався вплив температури в зоні сушіння (x_1) та концентрації модифікатора (x_2) на якість одержаного модифікованого перліту - водопоглинання (y). В даній роботі використано ЦКОП для $n = 2$ на основі ПФЕ з трьома паралельними дослідами (y_1, y_2 та y_3):

x_1	+1	-1	+1	-1	+1(α)	-1(α)	0	0	0
x_2	+1	+1	-1	-1	0	0	+1(α)	-1(α)	0
y_1	9	27	18	17	13	18	15	28	25
y_2	8	23	17	16	12	16	16	30	26
y_3	7	25	16	17	13	17	16	30	26

Введемо вихідні дані в електронну таблицю STATISTICA. При цьому матриця планування повторюється стільки разів, скільки було проведено паралельних дослідів. Результат експерименту вводиться в останню колонку (спочатку y_1, потім y_2, потім y_3), як показано на рис. 9.4.



	1 Var1	2 Var2	3 Var3
1	1	1	9
2	-1	1	27
3	1	-1	18
4	-1	-1	17
5	1	0	13
6	-1	0	18
7	0	1	15
8	0	-1	28
9	0	0	25
10	1	1	8
11	-1	1	23
12	1	-1	17
13	-1	-1	16
14	1	0	12
15	-1	0	16
16	0	1	16
17	0	-1	30
18	0	0	26
19	1	1	7
20	-1	1	25
21	1	-1	16
22	-1	-1	17
23	1	0	13
24	-1	0	17
25	0	1	16
26	0	-1	30
27	0	0	26

Рис. 9.4 – Таблиця вихідних даних

Для виконання регресійного аналізу відкриємо модуль **Статистика** (**Statistica**), виберемо опцію **Додаткові лінійні / Нелінійні моделі** (**Advanced Linear / Nonlinear Models**), далі **Основні моделі регресії (General Regression Models)**.

Цей діалог містить два списки **Type of analysis** (вид аналізу) і **Specification method** (завдання методу). У діалозі **Quick Specs Dialog**

можна задати незалежні змінні та дві або більше залежних змінних (рис.9.5).

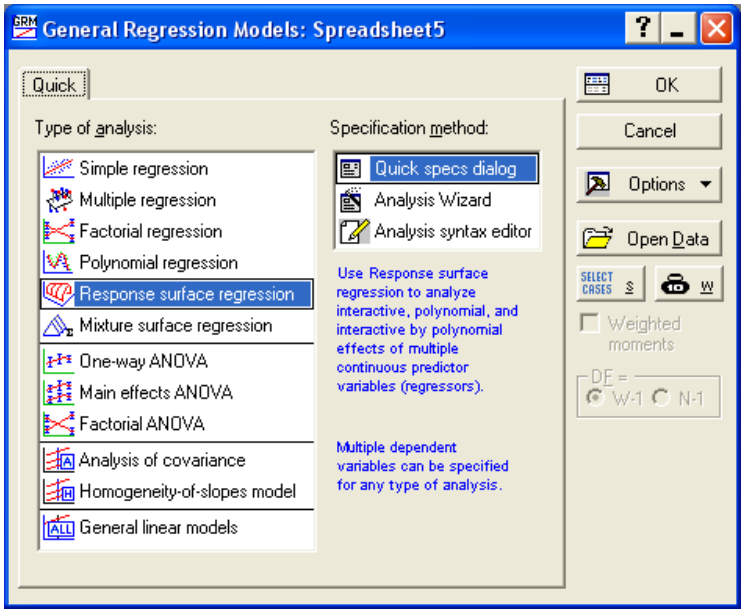


Рис. 9.5 – Вікно вибору типу аналізу

Обираємо для аналізу **Response surface regresion**. Після натискання кнопки ok, у вікні, що з'явився виберіть змінні для аналізу. Вибір змінних здійснюється за допомогою кнопки Змінні (**Variables**), що знаходиться в лівому верхньому куті панелі. Після того як кнопка буде натиснута, діалогове вікно Вибрати списки залежних змінних, неперервних предикатів та необов’язкових факторів, що блокуються - **Select dependent variables, continuous predicators and optinal blocking variables** (рис. 9.6).

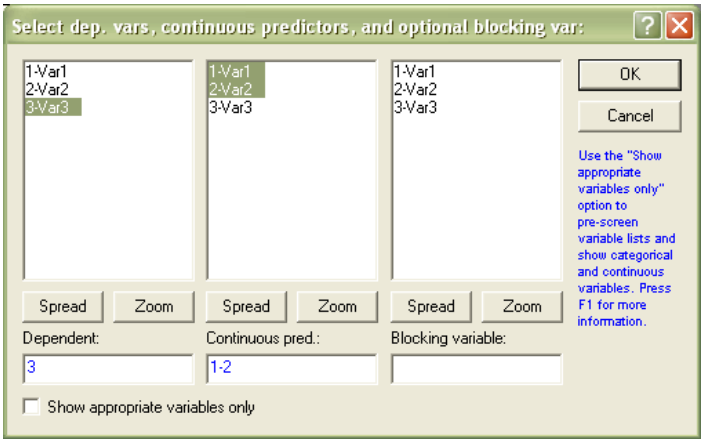
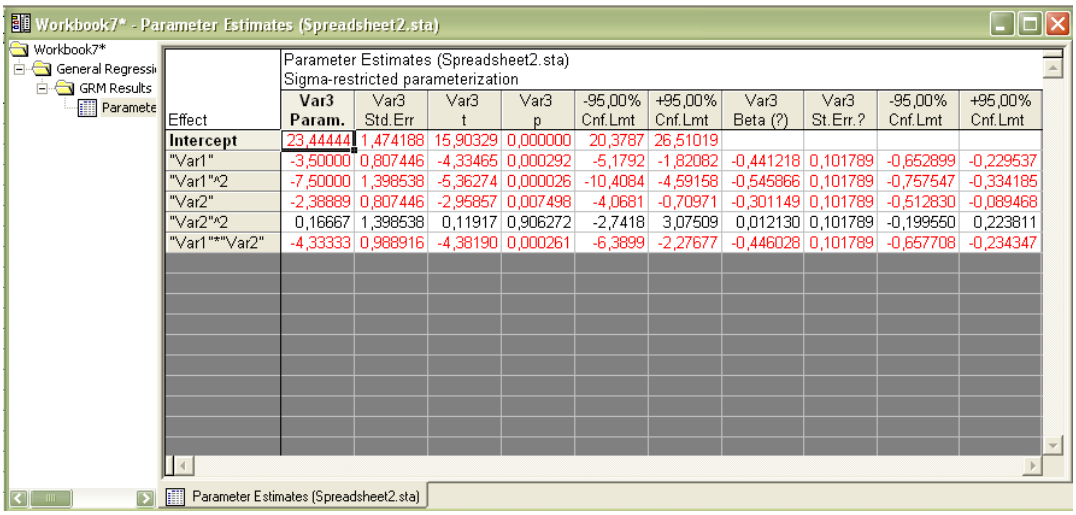


Рис. 9.6 – Вікно вибору змінних для аналізу

У лівій частині вікна виберіть залежну змінну, а в середені - незалежні. Натисніть кноку ОК у правому куті стартової панелі. На екрані

перед вами з'явиться діалогове вікно Результати. В даному вікні виберіть **Coefficients**. На екрані з'являться результати розрахунку коефіцієнтів моделі та відповідні статистичні параметри (рис.9.7).



Workbook7* - Parameter Estimates (Spreadsheet2.sta)

Parameter Estimates (Spreadsheet2.sta)
Sigma-restricted parameterization

Effect	Var3 Param.	Var3 Std.Err	Var3 t	Var3 p	-95,00% Cnf.Lmt	+95,00% Cnf.Lmt	Var3 Beta (?)	Var3 St.Err.?	-95,00% Cnf.Lmt	+95,00% Cnf.Lmt
Intercept	23,44444	1,474188	15,90329	0,000000	20,3787	26,51019				
"Var1"	-3,50000	0,807446	-4,33465	0,000292	-5,1792	-1,82082	-0,441218	0,101789	-0,652899	-0,229537
"Var1"^2	-7,50000	1,398538	-5,36274	0,000026	-10,4084	-4,59158	-0,545866	0,101789	-0,757547	-0,334185
"Var2"	-2,38889	0,807446	-2,95857	0,007498	-4,0681	-0,70971	-0,301149	0,101789	-0,512830	-0,089468
"Var2"^2	0,16667	1,398538	0,11917	0,906272	-2,7418	3,07509	0,012130	0,101789	-0,199550	0,223811
"Var1"*"Var2"	-4,33333	0,988916	-4,38190	0,000261	-6,3899	-2,27677	-0,446028	0,101789	-0,657708	-0,234347

Рис. 9.7 – Вікно результатів розрахунку коефіцієнтів моделі та відповідних статистичних параметрів

В першому стовпчику наведені значення оцінок коефіцієнтів моделі, де *Intercept* – вільний член; *Std.Err.* – стандартні похибки оцінок коефіцієнтів моделі; *t* – значення статистик Стьюдента для перевірки гіпотез про нульові значення коефіцієнтів; *p* – рівні значимості (вірогідності нульової гіпотези). Тут статистично значимі коефіцієнти відмічені червоним кольором (червоним кольором відмічаються ті параметри, для яких $p < 0.05$). Можна побачити, що всі коефіцієнти окрім b_{22} статистично значимі. В наступних двох стовпчиках наведені 95% довірчі інтервали (інтервальні оцінки коефіцієнтів моделі з 95% вірогідністю). Далі представлені (бета) - коефіцієнти, які визначають міру впливу відповідних ефектів моделі на результативну ознаку при відверненні від варіацій інших ефектів, що включені в рівняння регресії. Таким чином, величина цих бета-коефіцієнтів дозволяє встановити відносний внесок кожної незалежної змінної в прогнозування залежної змінної. Можна побачити, що найбільша міра впливу спостерігається у

ефекту x_1^2. Далі представлені стандартні похибки (бета) - коефіцієнтів і їх довірчі інтервали.

Для того, щоб визначити, наскільки адекватно отримана модель описує експеримент, повернемось до вікна результатів та оберемо там вкладку **Whole model R** із закладки **Summary**. Відкриється вікно результатів статистичного аналізу отриманої моделі (рис.9.8).

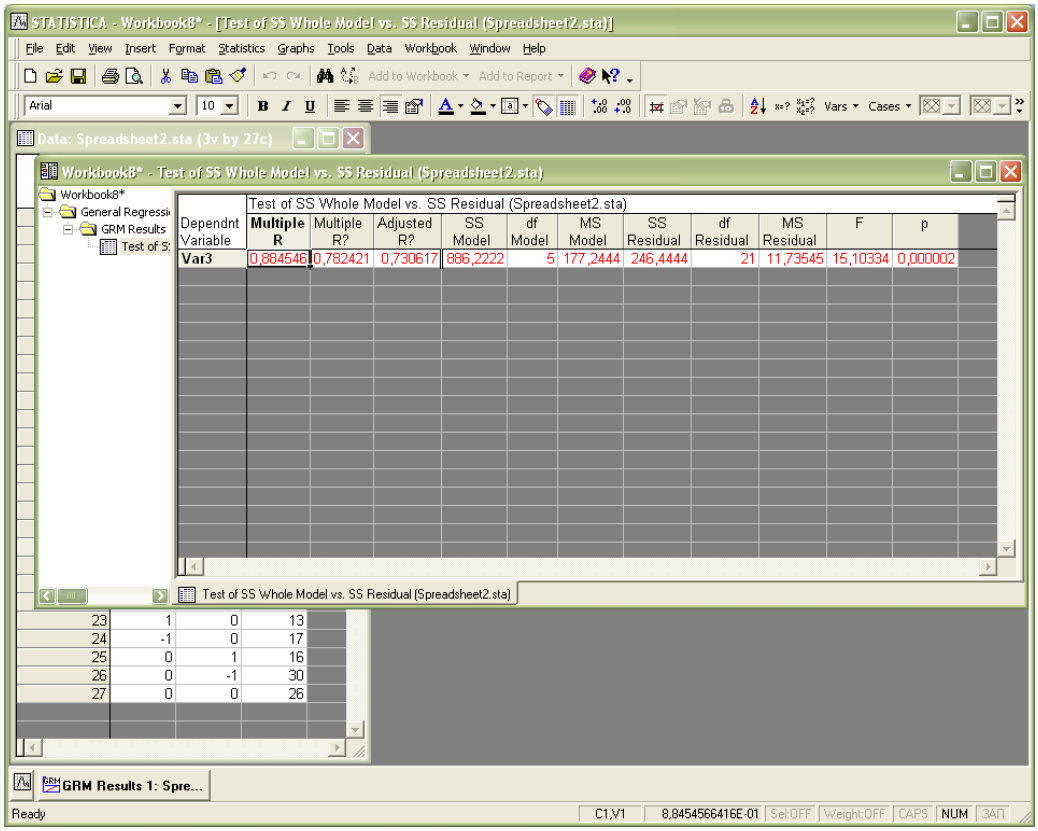


Рис. 9.8 – Вікно результатів статистичного аналізу отриманої моделі

У таблиці приводяться *Multiple R* – множинний коефіцієнт кореляції між залежною змінною і пояснюючими змінними; *R2* – коефіцієнт детермінації, який чисельно виражає частку варіації залежної змінної, поясненої за допомогою регресійного рівняння (чим більше *R2*, тим більшу частку варіації пояснюють змінні, включені до моделі); *adjusted R2* – скоригований коефіцієнт детермінації: *adjusted R2* = 1-(1- R2)(N/(N-p)), де *p* – число параметрів моделі.

Для того, щоб була можливість порівнювати моделі з різним числом регресорів так, щоб число регресорів не впливало на статистику зазвичай

використовується скоригований коефіцієнт детермінації Для моделей з однаковою залежною змінною і однаковим об'ємом вибірки порівняння моделей за допомогою скоригованого коефіцієнта детермінації еквівалентно їх порівнянню за допомогою залишкової дисперсії. Різниця тільки в тому, що останні критерії чим менше, тим краще модель.

Далі наведено *SS model* – сума квадратів, обумовлена регресією:

$$\text{SS model} = \sum_{u=1}^{N} (\tilde{y}_u - \bar{y})^2 \qquad (9.3)$$

де $\bar{y}$ – середнє значення вихідної змінної; $\tilde{y}_u$ – значення вихідної змінної, розраховані за рівнянням для u досліду; *df model* – число ступенів вільності, а саме число оцінюваних параметрів, виключаючи вільний член; *MS model* – дисперсія обумовлена регресією (*SS model/df model*); *SS residual* – сума квадратів, що характеризує відхилення від регресії.

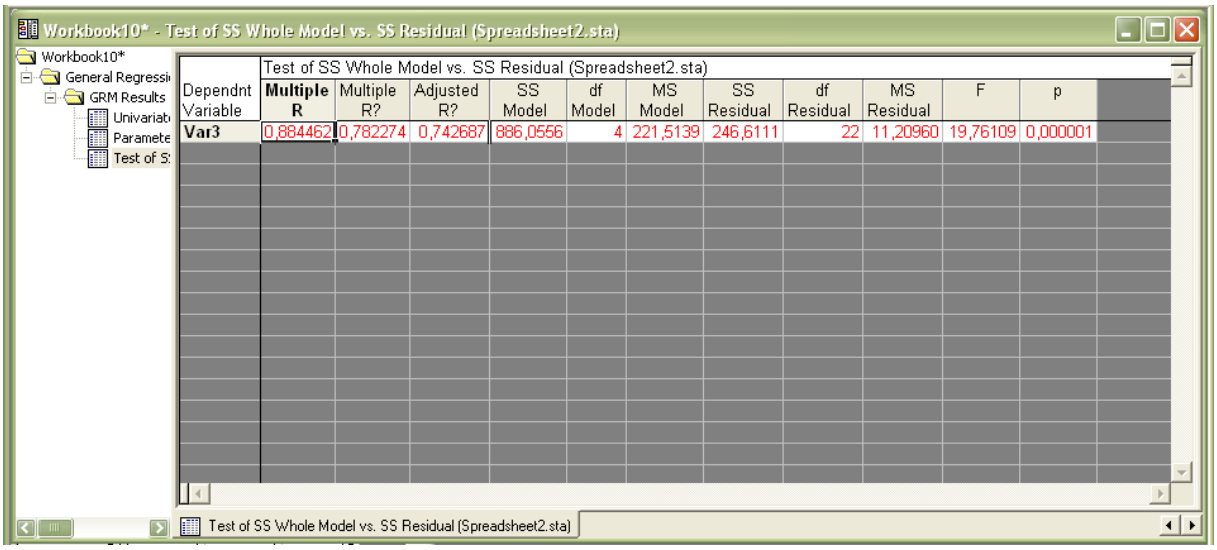
$$\text{SS residual} = \sum_{u=1}^{N} (y_u - \tilde{y}_u)^2 , \qquad (9.4)$$

де y_u – результат експерименту в u досліді; *df residual* – число ступенів вільності, а саме N-L, (L – кількість параметрів, що оцінюється); *MS residual* – дисперсія обумовлена відхиленням від регресії, або залишкова дисперсія (*SS residual/df residual*); *F-критерій* (*MS model/MS residual*), якщо гіпотеза про однорідність дисперсій приймається, то модель адекватна об’єкту дослідження;p – ймовірність помилки для критерію Фішера (якщо p> 0.05, то модель статистично не значима).

Можна побачити з отриманих даних, що запропонована модель адекватно описує досліджуваний процес. Побудована регресія пояснює 79% варіації залежної змінної.

Проведемо пошагову регресію, це дозволить вилучити незначимий регресор з рівняння. Знову обираємо для аналізу **Response surface regresion**. Після натискання кнопки ok, у вікні, що з'явиться обираємо змінні для аналізу. Після чого натискаємо **Options** та обираємо **Forward stepwise** (метод пошагового включення змінних в модель). На екрані перед

вами з'явиться діалогове вікно Результати. В даному вікні виберіть **All effects.** Відкриється вікно результатів статистичного аналізу моделі, з якої виключено незначимий регресор (рис.9.9).



Dependnt Variable	Multiple R	Multiple R?	Adjusted R?	SS Model	df Model	MS Model	SS Residual	df Residual	MS Residual	F	p
Var3	0,884462	0,782274	0,742687	886,0556	4	221,5139	246,6111	22	11,20960	19,76109	0,000001

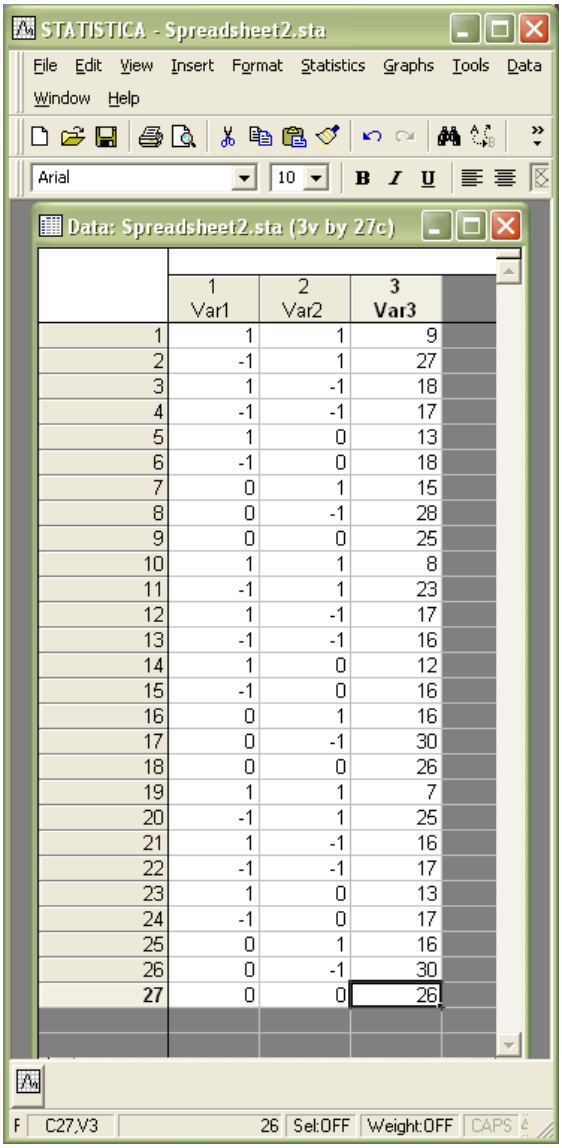
Рис. 9.9 – Вікно результатів статистичного аналізу моделі, з якої виключено незначимий регресор

9.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання, побудувати ЕС-моделі досліджуваного процесу за даними свого варіанту.
3. Включити комп’ютер і запустити програму STATISTICA вказаним викладачем способом.
4. Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища STATISTICA. Провести статистичний аналіз моделі. У випадку наявності незначимого регресору провести пошагову регресію.
5. Отримати результати, перевірити модель на адекватність.
6. Представити результати роботи на комп’ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

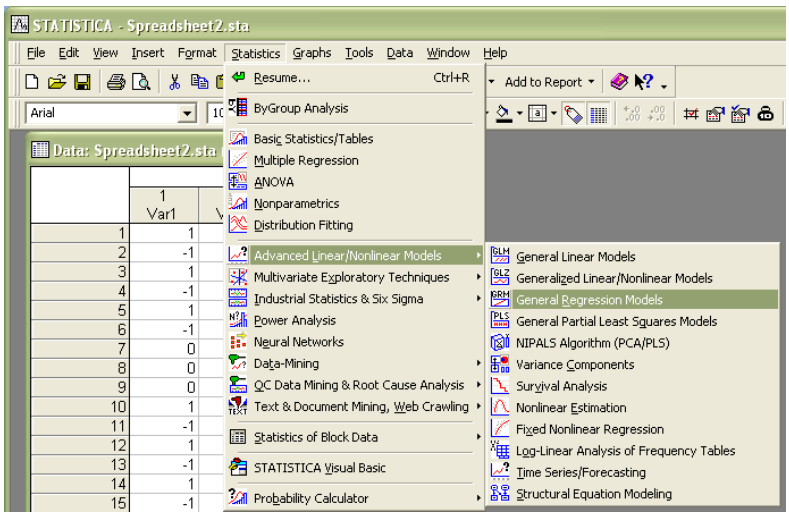
9.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Вихідні дані, введені у таблицю програми **Statistica** (змінні x_1, x_2, кількість паралельних дослідів – 3 (y_1, y_2, y_3), останній стовпчик таблиці змінні y_i (вводяться почергово)).

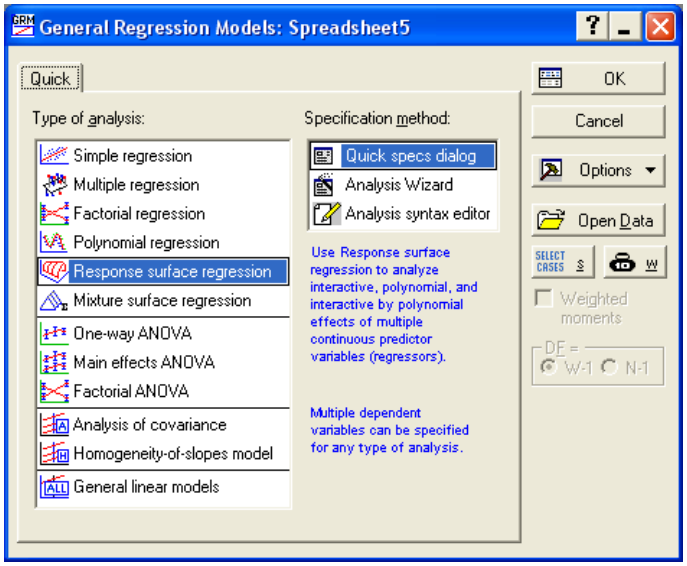


	1 Var1	2 Var2	3 Var3
1	1	1	9
2	-1	1	27
3	1	-1	18
4	-1	-1	17
5	1	0	13
6	-1	0	18
7	0	1	15
8	0	-1	28
9	0	0	25
10	1	1	8
11	-1	1	23
12	1	-1	17
13	-1	-1	16
14	1	0	12
15	-1	0	16
16	0	1	16
17	0	-1	30
18	0	0	26
19	1	1	7
20	-1	1	25
21	1	-1	16
22	-1	-1	17
23	1	0	13
24	-1	0	17
25	0	1	16
26	0	-1	30
27	0	0	26

Для виконання регресійного аналізу відкриємо модуль **Статистика** (**Statistica**), виберемо опцію **Додаткові лінійні / Нелінійні моделі** (**Advanced Linear / Nonlinear Models**), далі **Основні моделі регресії** (**General Regression Models**.



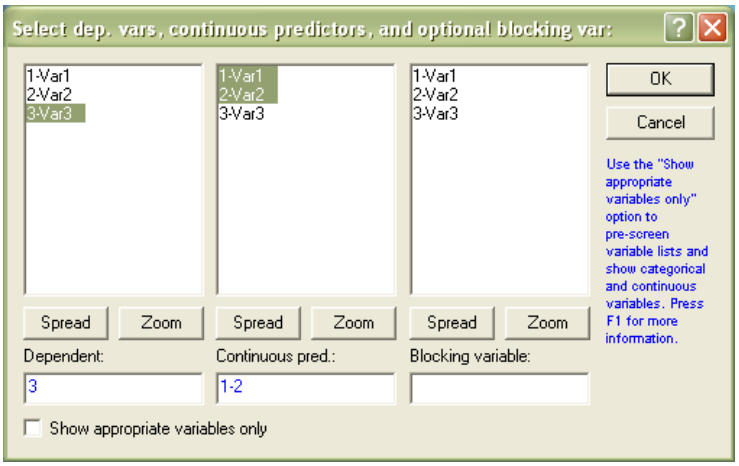
Цей діалог містить два списки **Type of analysis** (вид аналізу) і **Specification method** (завдання методу). У діалозі **Quick Specs Dialog** можна задати незалежні змінні та дві або більше залежних змінних.



Обираємо для аналізу **Response surface regresion**.

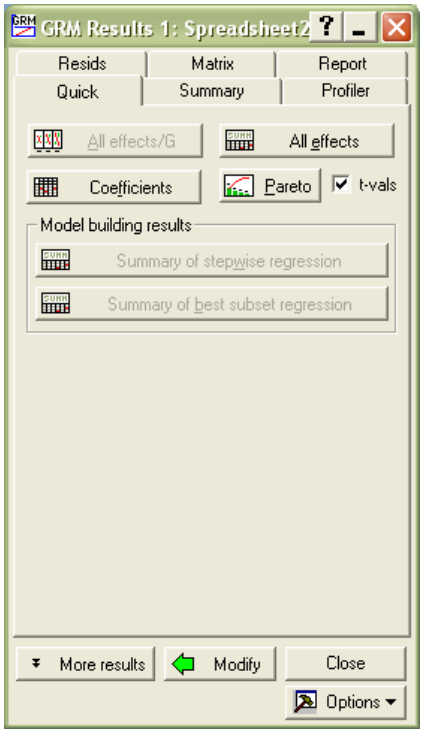
Вибір змінних здійснюється за допомогою кнопки **Змінні (Variables)**, що знаходиться в лівому верхньому куті панелі. Після того як кнопка буде

натиснута, діалогове вікно Вибрати списки залежних змінних, неперервних предикатів та необов’язкових факторів, що блокуються – **Select dependent variables, continuous predicators and optinal blocking variables**.

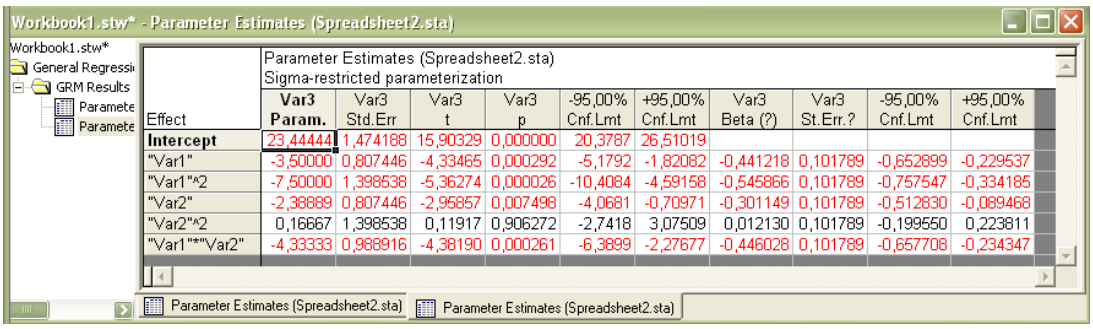


У лівій частині вікна вибираємо залежну змінну, а всередині - незалежні.

Далі з'явиться діалогове вікно **Результати (GRM Results 1)**. В даному вікні обираємо **Coefficients**.



На екрані з'являться результати розрахунку коефіцієнтів моделі та відповідні статистичні параметри.



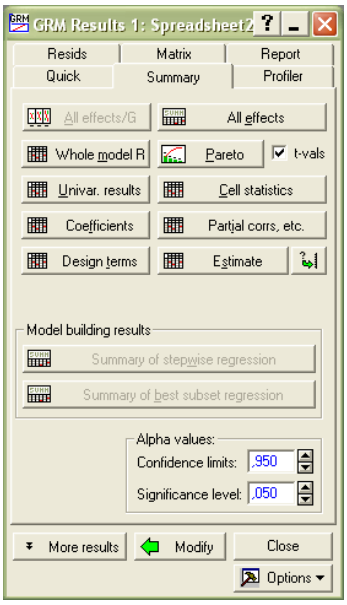
Workbook1.stw* - Parameter Estimates (Spreadsheet2.sta)

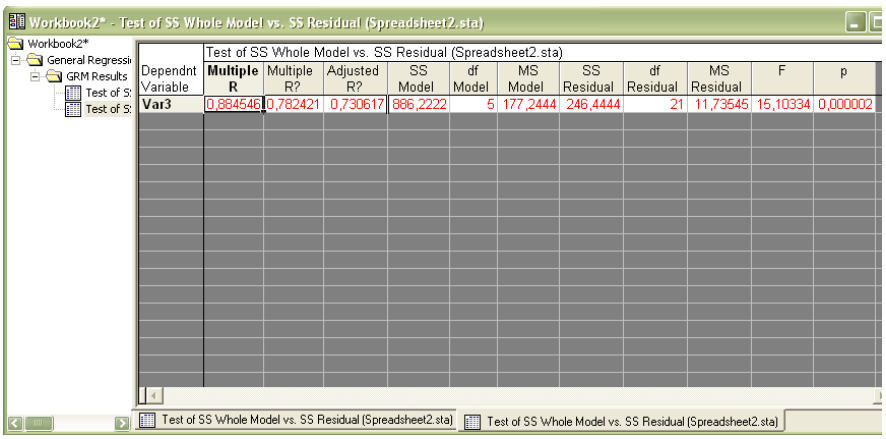
Parameter Estimates (Spreadsheet2.sta)
Sigma-restricted parameterization

Effect	Var3 Param.	Var3 Std.Err	Var3 t	Var3 p	-95,00% Cnf.Lmt	+95,00% Cnf.Lmt	Var3 Beta (?)	Var3 St.Err.?	-95,00% Cnf.Lmt	+95,00% Cnf.Lmt
Intercept	23,44444	1,474188	15,90329	0,000000	20,3787	26,51019				
"Var1"	-3,50000	0,807446	-4,33465	0,000292	-5,1792	-1,82082	-0,441218	0,101789	-0,652899	-0,229537
"Var1"^2	-7,50000	1,398538	-5,36274	0,000026	-10,4084	-4,59158	-0,545866	0,101789	-0,757547	-0,334185
"Var2"	-2,38889	0,807446	-2,95857	0,007498	-4,0681	-0,70971	-0,301149	0,101789	-0,512830	-0,089468
"Var2"^2	0,16667	1,398538	0,11917	0,906272	-2,7418	3,07509	0,012130	0,101789	-0,199550	0,223811
"Var1"*"Var2"	-4,33333	0,988916	-4,38190	0,000261	-6,3899	-2,27677	-0,446028	0,101789	-0,657708	-0,234347

Аналіз результатів: усі коефіцієнти окрім b_{22} статистично значимі. Найбільша міра впливу спостерігається у ефекту x_1^2.

Для того, щоб визначити, наскільки адекватно отримана модель описує експеримент, повернемось до вікна результатів та оберемо там вкладку **Whole model R** із закладки **Summary**.





Workbook2* - Test of SS Whole Model vs. SS Residual (Spreadsheet2.sta)

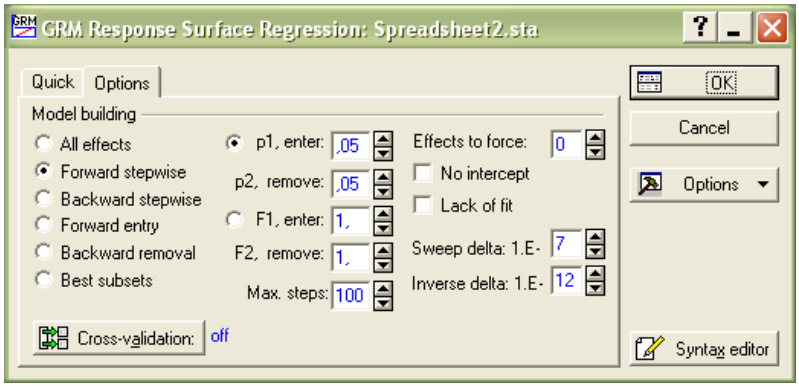
Test of SS Whole Model vs. SS Residual (Spreadsheet2.sta)

Dependnt Variable	Multiple R	Multiple R?	Adjusted R?	SS Model	df Model	MS Model	SS Residual	df Residual	MS Residual	F	p
Var3	0,884546	0,782421	0,730617	886,2222	5	177,2444	246,4444	21	11,73545	15,10334	0,000002

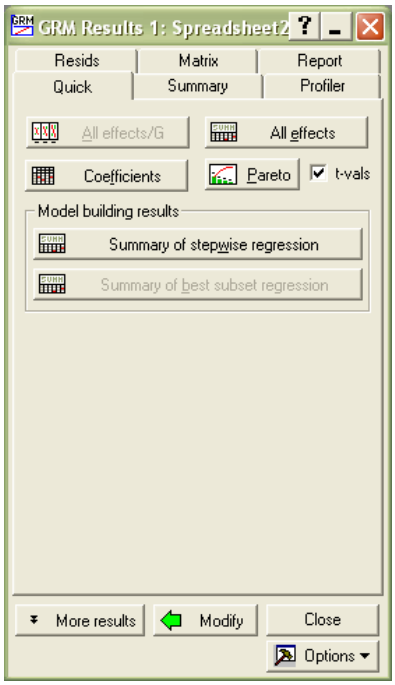
Аналіз результатів: отримані дані свідчать про те, що запропонована модель адекватно описує досліджуваний процес. Побудована регресія пояснює 78% варіації залежної змінної (**Multiple R**).

Для проведення пошагової регресії обираємо для аналізу **Response surface regresion**.

Після натискання кнопки ok, у вікні, що з'явиться обираємо змінні для аналізу. Після чого натискаємо **Options** та обираємо **Forward stepwise** (метод пошагового включення змінних в модель).



На екрані з’являється діалогове вікно **GRM Result** Результати.



В даному вікні вибираємо **All effects**.

Відкриється вікно результатів статистичного аналізу моделі, з якої виключено незначимий регресор (рис.9.10).

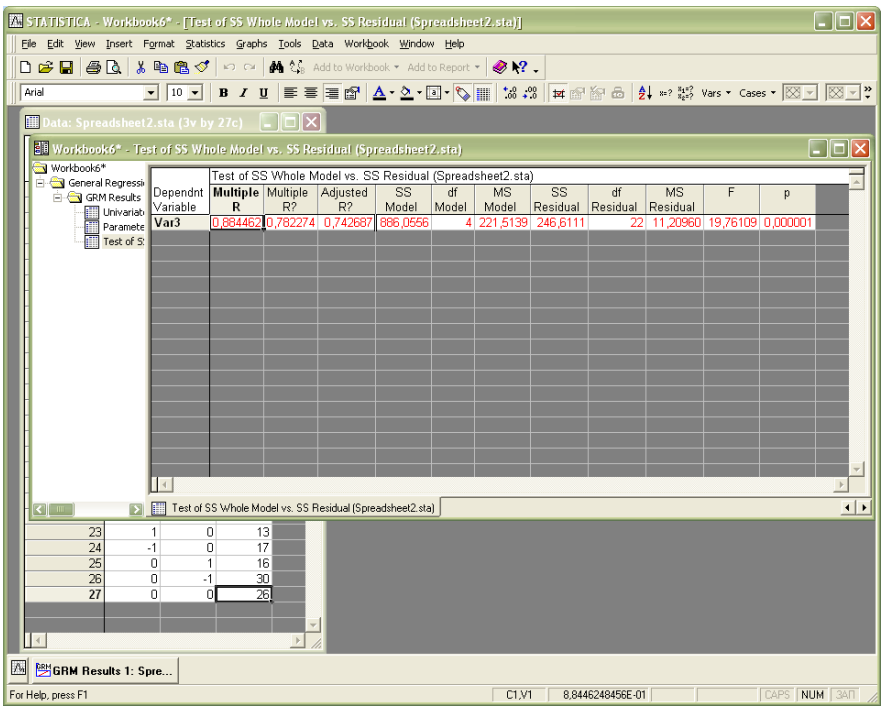


Рис. 9.10 – Вікно результатів статистичного аналізу моделі, з якої виключено незначимий регресор

Можна побачити, що скоригований коефіцієнт детермінації - 78 %, а залишкової дисперсія зменшилася до 11.2, тобто прогнозуюча якість моделі покращилася.

В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть скріншоти кожного етапу реалізації поставленого завдання. Зробіть висновки щодо отриманих значень результатів.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 9

1) З якою метою будують моделі другого порядку? Чому не можна обмежитись моделями першого порядку?

2) Що таке композиційний план? Центральний композиційний план?

3) Що таке критерій ортогональності? Як будують ЦКОП?

4) Які переваги та недоліки має ЕС-модель, побудована за результатами реалізації ЦКОП?

5) Опишіть загальний порядок дій для проведення покрокового регресійного аналізу в середовищі STATISTICA.

10. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ЦЕМЕНТАЦІЇ РТУТІ (ЦКРП)

Лабораторна робота № 10

ТЕМА: вивчення основних принципів алгоритму побудови й обробки результатів експерименту рототабельних планів другого порядку.

МЕТА: оволодіння методикою побудови експериментально-статистичних математичних моделей процесу цементації ртуті з використанням ЦКРП та придбання навичок побудови математичних моделей у середовищі Statistica.

10.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

10.1.1 Особливості побудови рототабельних планів

На початковому етапі розвитку теорії планування експерименту, Бокс і Уілсон запропонували для побудови моделей другого порядку виду (10.1) вважати оптимальними плани експерименту, що зберігають принцип ортогональності. Але ортогональні плани другого порядку не є рототабельними, тобто кількість інформації різна в точках, що знаходяться на однаковій відстані від центру плану. Бокс і Хантер запропонували вважати оптимальними для побудови моделі другого порядку виду центральні композиційні рототабельні плани (ЦКРП), дисперсійна матриця $(X^TX)^{-1}$ яких інваріантна до ортогонального обертання координат. Умова рототабельності для планів другого порядку виконується, якщо:

$$\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 = N\lambda_2;\ \sum_{u=1}^{N} x_{iu}^4 = 3\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 x_{ju}^2 = 3N\lambda_4;\ \frac{\lambda_4}{\lambda_2} > \frac{n}{n+2}, \qquad (10.1)$$

де λ_2, λ_4 – константи, N – загальна кількість точок плану.

Остання умова забезпечує невиродженість матриці (X^TX). За аналогією з ЦКОП, ЦКРП містить ядро плану та дві «зоряні» точки на кожен фактор.

Величина «зоряного плеча» рототабельних планів розраховується: $\alpha = 2^{n/4}$, якщо ядром плану є ПФЕ 2^n і $\alpha = 2^{(n-1)/4}$, якщо ДФЕ 2^{n-1}. ЦКРП вимагає також проведення деякої кількості дослідів в центрі плану. Таким чином, загальна кількість точок плану – $N = N_я + 2n + N_0$. Числові показники деяких ЦКРП подані в табл. 10.1.

Таблиця 10.1

Числові показники рототабельних планів

Число факторів	2	3	4	5	5
Ядро плану	ПФЕ 2^2	ПФЕ 2^3	ПФЕ 2^4	ПФЕ 2^5	ДФЕ 2^{5-1}
α	1,414	1,682	2,000	2,378	2,000
N_0	5	6	7	10	6
N	13	20	31	52	32

Розширена матриця плану експерименту буде включати стовпці x_0, x_i, $x_i x_j$ і x_i^2, де $i, j = 1, 2, \ldots, n$, $i < j$.

Коефіцієнти моделі можна розрахувати за формулами:

$$b_0 = \frac{A}{N}\left[2\lambda_4^2(n+2)\sum_{u=1}^{N} x_{0u}\bar{y}_u - 2\lambda_4 C\sum_{i=1}^{n}\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2\bar{y}_u\right] \quad (10.2)$$

$$b_i = \frac{C}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{iu}\bar{y}_u \quad (10.3)$$

$$b_{ij} = \frac{C^2}{N\lambda_4}\sum_{u=1}^{N} x_{iu}x_{ju}y_u \quad (10.4)$$

$$b_{ii} = \frac{A}{N}\left\{C^2\left[(n+2)\lambda_4 - n\right]\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 y_u + C^2(1-\lambda_4)\sum_{i=1}^{n}\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 y_u - 2\lambda_4 C\sum_{u=1}^{N} x_{0u}y_u\right\} \quad (10.5)$$

де $C = \dfrac{N}{\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2}$; $A = \dfrac{1}{2\lambda_4\left[(n+2)\lambda_4 - n\right]}$; $\lambda_4 = \dfrac{(N_0+N_1)n}{(n+2)N_1}$; $N_1 = N - N_0$,

u – номер досліду, x_{iu} – значення i-го фактора в u-му досліді, y_u – значення вихідної змінної в u-му досліді.

Проте рекомендується виконувати розрахунки за МНК в матричній

формі, згідно:

$$B = \left(X^{\mathrm{T}} X\right)^{-1}\left(X^{\mathrm{T}} Y\right), \tag{10.6}$$

де B – матриця-стовпець коефіцієнтів моделі; X – розширена матриця плану експерименту; Y – матриця-стовпець середніх значень вихідної змінної.

10.1.2 Побудова ЦКРП процесу цементації ртуті

Процес цементації ртуті, що характеризується трьома факторами: x_1 - температура розчину, x_2 - швидкість його протікання через реактор; x_3 - кількість завантаженого алюмінію.

Ефективність процесу оцінювалася ступенем очистки розчину від ртуті, отож в якості вихідної змінної y була вибрана концентрація ртуті в розчині після очистки.

У відповідності з означеним варіантом, користуючись алгоритмом обробки результатів ЦКРП. Отримаємо рівняння регресії для процесу, що досліджується.

Порядок виконання розрахунків:

1) Розрахувати коефіцієнти рівняння регресії за формулами:

$$\begin{aligned}
&b_0 = 0{,}1663(0y) - 0.05679(iiy);\\
&b_i = 0{,}07322(iy);\\
&b_{ii} = 0{,}0625(iiy) + 0{,}006889\sum(iiy) - 0.05679(0y);\\
&b_{ij} = 0{,}125(ijy);
\end{aligned} \tag{10.7}$$

де

$$(0y) = \sum_{u=1}^{N} y_u;\ (iy) = \sum_{u=1}^{N} x_{iu} y_u;$$

$$(iiy) = \sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 y_u;\ (ijy) = \sum_{u=1}^{N} x_{iu} x_{ju} y_u.$$

2) Розрахувати дисперсію відтворюваності по N_0=6 дослідам в центрі плану:

$$S_0^2 = \frac{\sum_{u=1}^{N_0}(y_{0u} - \bar{y}_o)^2}{N_0 - l} \qquad (10.8)$$

3) Перевірити значимість коефіцієнтів рівняння регресії, для чого розрахувати їхні диспепсії за формулами:

$$\begin{aligned} S_{в0}^2 &= \frac{2 \cdot A \cdot \lambda_4^2 (n+2) S_0^2}{N} \\ S_{вi}^2 &= \frac{C S_0^2}{N} \\ S_{вii}^2 &= \frac{A[(n+1)\lambda_4 - (n-1)] C^2 S_0^2}{N} \\ S_{вij}^2 &= \frac{\tau^2 S_0^2}{N \lambda_4} \end{aligned} \qquad (10.9)$$

де $A = \frac{1}{2\lambda_4[(n+2)\lambda_4 - n]}$; $C = \frac{N}{\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2}$;

Після цього знайти значення критерію Стьюдента:

$$t_{bop} = \frac{|b_0|}{S_{b0}}; \quad t_{b0} = \frac{|b_i|}{S_{bi}}; \quad t_{bijp} = \frac{|b_{ij}|}{S_{bij}}; \quad t_{biip} = \frac{|b_{ii}|}{S_{bii}}; \qquad (10.10)$$

Визначивши табличне значення критерію Стьюдента при q = 5%, f_0=5, перевірить умову $t_P > t_T$ (*Додаток В, табл.В.1*). Коефіцієнти значущі, якщо вказана умова виконується (табличне значення критерію Стьюдента міститься у *Додатку В, табл. В.1*.

4) Перевірити адекватність рівняння регресії, для чого обчислити значення вихідної змінної y по отриманій моделі, після цього визначити залишкову дисперсію:

$$S_{îñò}^2 = \frac{\sum_{u=1}^{N}(y_u - \hat{y}_u)^2}{N - l} \qquad (10.11)$$

де l – число членів, що залишалися в рівнянні регресії.

Розрахунок дисперсії адекватності проводиться наступним чином:

$$S_{aд}^2 = \frac{S_{ост}^2 \cdot f_{ост} - S_0^2 \cdot f_0}{f_{aд}} \qquad (10.12)$$

де число ступенів вільності:

$$f_{ост} = N - l; \quad f_0 = N_0 - l; \quad f_{ад} = N_{ост} - f_0; \tag{10.13}$$

Значення критерію Фішера розраховується за співвідношенням:

$$F_P = \frac{S_{ад}^2}{S_0^2}. \tag{10.14}$$

Табличне значення критерію Фішера визначити при $q=5$ %, $f_{ад}=5$, $f_n=5$ *(див. Додаток В, табл.В.2).*

Якщо умова $F_p < F_T$ виконується, то знайдене рівняння регресії адекватно реальному процесу цементації ртуті алюмінієм з солянокислих розчинів, отриманих у результаті мокрого хлорування бідних шламів.

10.1.3 Особливості проведення експериментально-статистичне моделювання в середовищі STATISTICA

Отримаємо ЕС-модель процесу цементації ртуті та проведемо аналіз моделі в середовищі STATISTICA. Досліджувався вплив температури розчину та маси завантаженого алюмінію на якість процесу очищення – концентрацію ртуті у розчині після очищення, мг/л (y). В даній роботі використано ЦКРП (для n = 2 на основі ПФЕ), що наведено в нижче:

X_1	X_2	Y
+1	+1	92,4
-1	+1	78,6
+1	-1	88,5
-1	-1	86,7
+1,414(α)	0	93,6
-1,414(α)	0	85,2
0	+1,414(α)	79,6
0	-1,414(α)	85,1
0	0	83,3
0	0	85,6
0	0	85,4
0	0	83,5
0	0	85,9

Введемо вихідні дані в електронну таблицю STATISTICA. Для

виконання регресійного аналізу відкриємо модуль **Статистика**, виберемо опцію **Додаткові лінійні / Нелінійні моделі**, далі **Основні моделі регресії**, після чого натискаємо мишкою ОК. У лівій частині вікна обираємо залежну змінну, а в середені – незалежні (аналогічно 9 лабораторної роботи). Натискаємо кнопку ОК у правому куті стартової панелі. На екрані з'явиться діалогове вікно Результати. В даному вікні обираємо **Coefficients**. На екрані з'являться результати розрахунку коефіцієнтів моделі та відповідні статистичні параметри (рис.10.1).

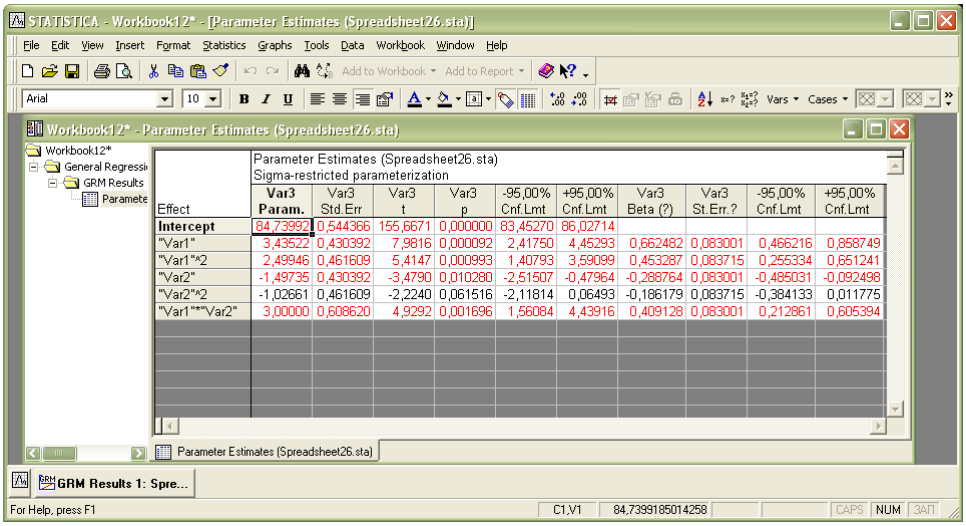


Рис.10.1 – Вікно результатів розрахунку коефіцієнтів моделі та відповідних статистичних параметрів.

В першому стовпчику наводяться значення оцінок коефіцієнтів моделі, де *Intercept* - вільний член. Статистично значимі коефіцієнти відмічаються червоним кольором (червоним кольором відмічаються ті параметри, для яких $p < 0.05$). Можна побачити, що всі коефіцієнти окрім b_{22} статистично значимі. Найбільша міра впливу спостерігається у ефекту x_1 (див. значення (бета) - коефіцієнтів).

Для того, щоб визначити, наскільки адекватно отримана модель описує експеримент, повернемось до вікна результатів та оберемо там вкладку **Whole model R** або **All effects**. Відкриється вікно результатів статистичного аналізу отриманої моделі (рис.10.2).

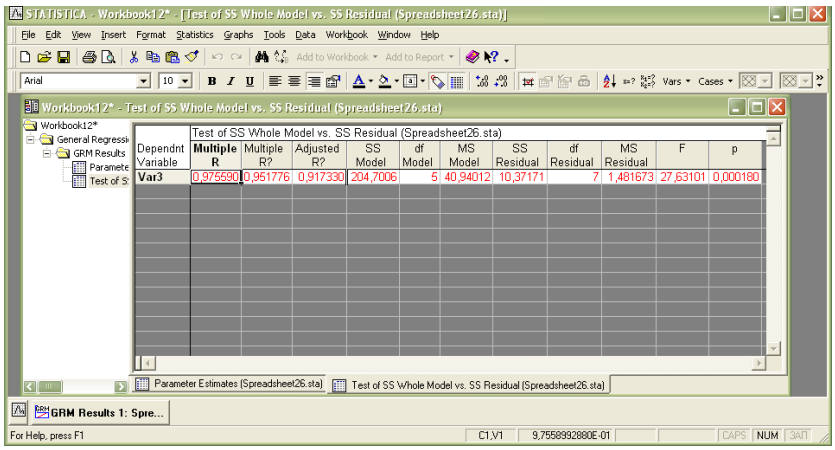


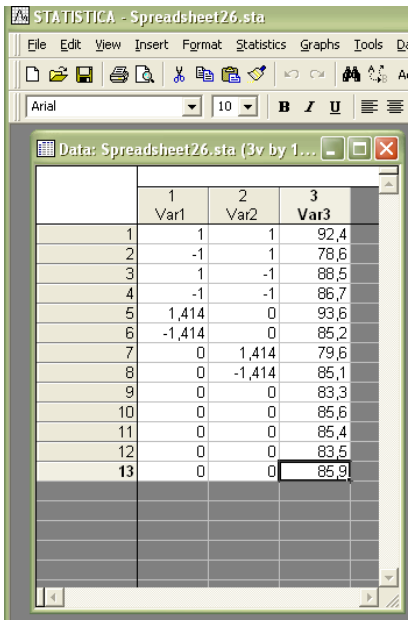
Рис.10.2 – Вікно результатів статистичного аналізу отриманої моделі

10.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи, вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання, побудувати ЕС-моделі досліджуваного процесу за даними свого варіанту.
3. Включити комп’ютер і запустити програму STATISTICA вказаним викладачем способом.
4. Створити електронну таблицю вихідних змінних в середовищі STATISTICA. Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища STATISTICA.
5. Отримати результати, перевірити адекватність побудованої моделі об’єкту дослідження.
6. Представити результати роботи на комп’ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

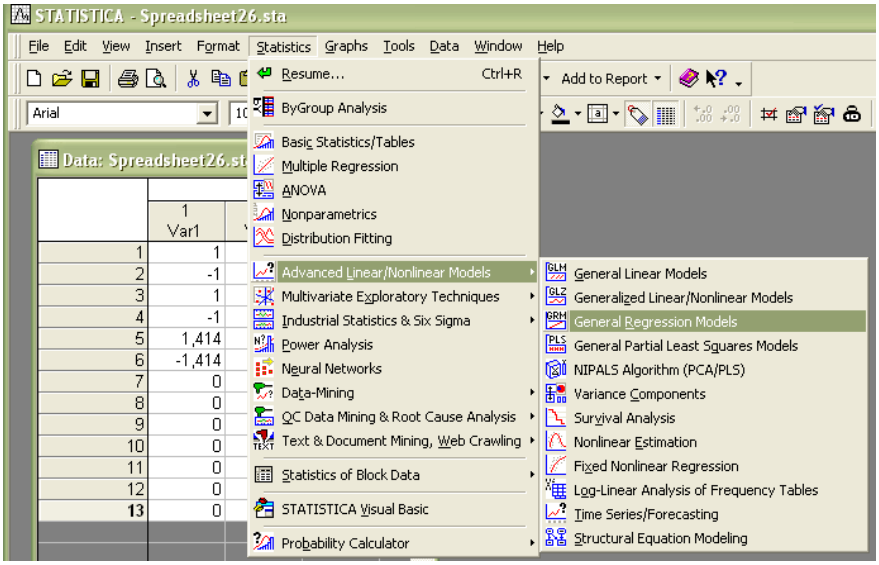
10.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТИ

Введемо вихідні дані в електронну таблицю STATISTICA.



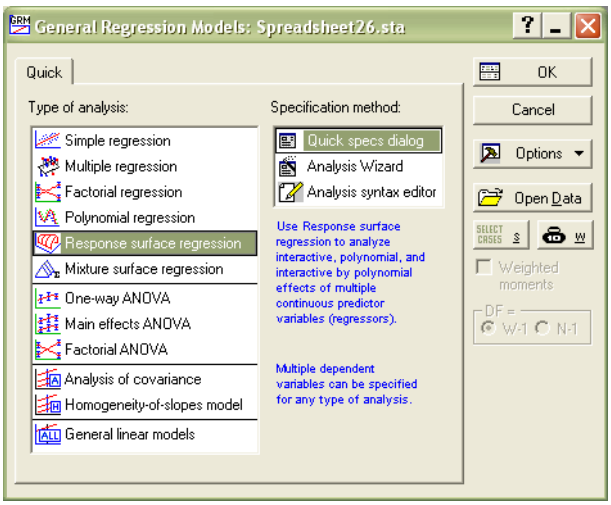
	1 Var1	2 Var2	3 Var3
1	1	1	92,4
2	-1	1	78,6
3	1	-1	88,5
4	-1	-1	86,7
5	1,414	0	93,6
6	-1,414	0	85,2
7	0	1,414	79,6
8	0	-1,414	85,1
9	0	0	83,3
10	0	0	85,6
11	0	0	85,4
12	0	0	83,5
13	0	0	85,9

Для виконання регресійного аналізу відкриємо модуль **Статистика**, виберемо опцію **Додаткові лінійні / Нелінійні моделі** (**Advanced Linear / Nonlinear Models**), далі **Основні моделі регресії (General Regression Models)**.

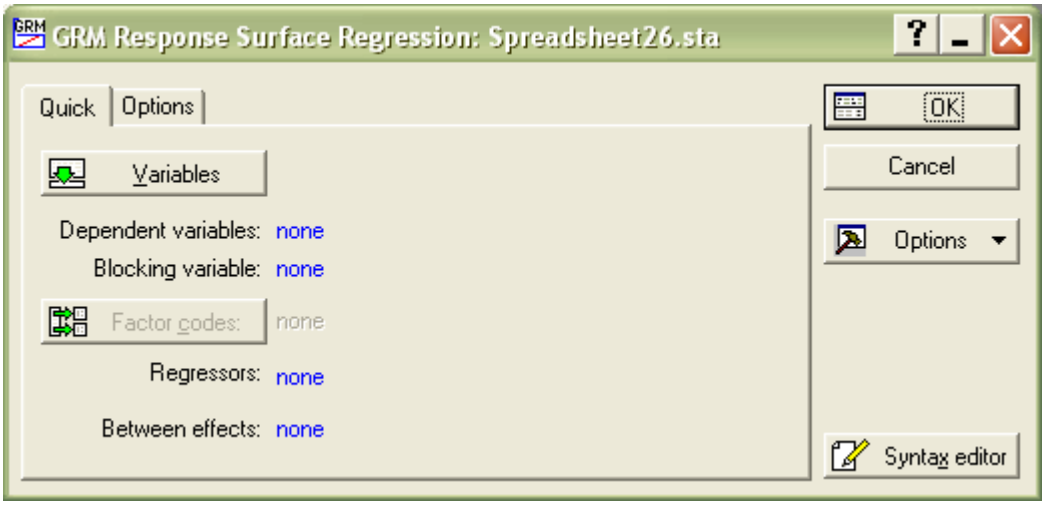


Цей діалог містить два списки **Type of analysis** (вид аналізу) і **Specification method** (завдання методу). У діалозі **Quick Specs Dialog** можна задати незалежні змінні та дві або більше залежних змінних.

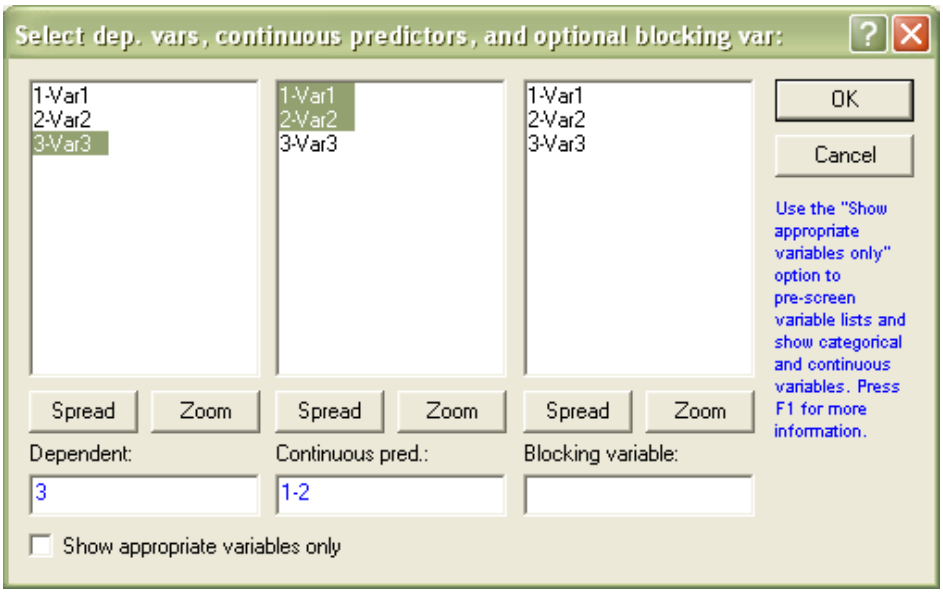
Обираємо для аналізу **Response surface regresion**:



Далі обираємо змінні **Variables**:

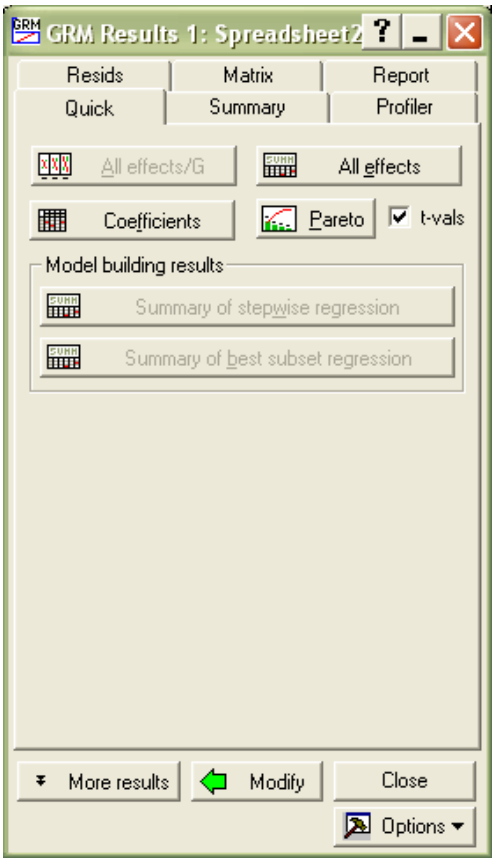


У лівій частині вікна обираємо залежну змінну, а всередині – незалежні.

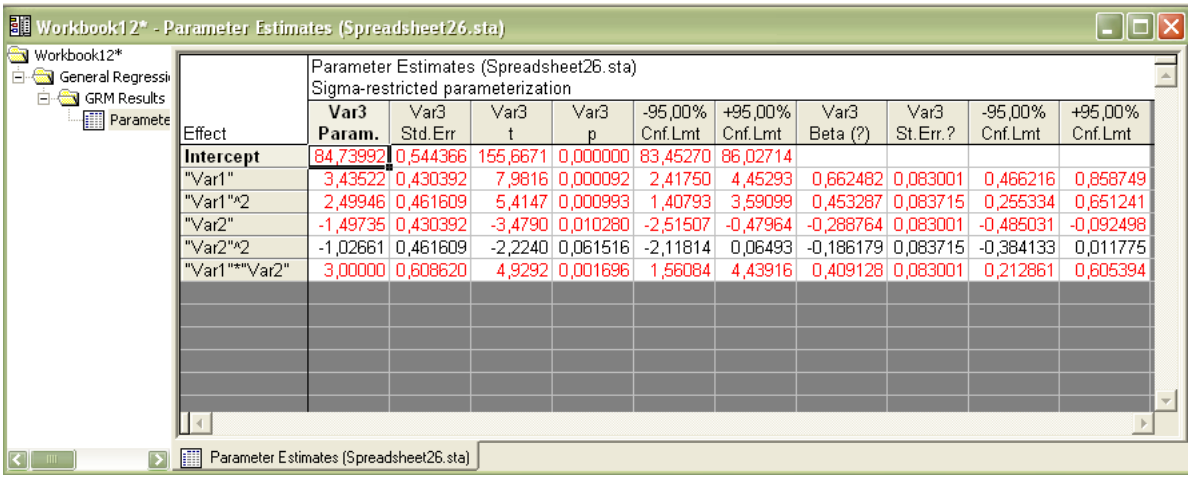


Натискаємо кнопку ОК у правому куті стартової панелі.

На екрані з'явиться діалогове вікно **Результати**. В даному вікні обираємо **Coefficients**.



На екрані з'являться результати розрахунку коефіцієнтів моделі та відповідні статистичні параметри.



Parameter Estimates (Spreadsheet26.sta)
Sigma-restricted parameterization

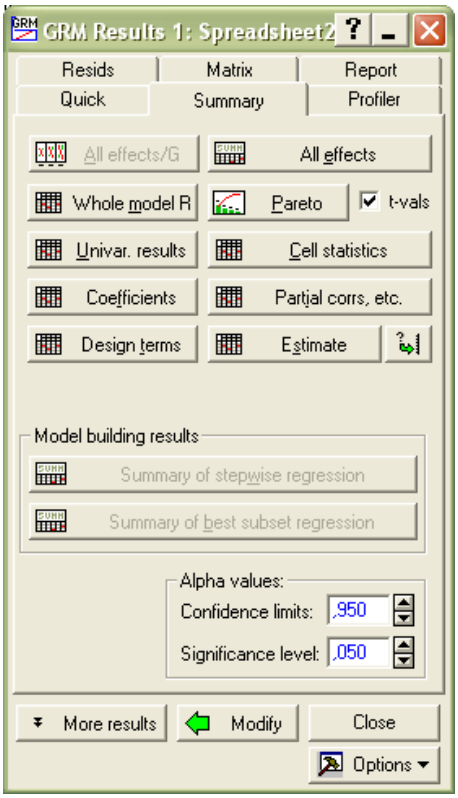
Effect	Var3 Param.	Var3 Std.Err	Var3 t	Var3 p	-95,00% Cnf.Lmt	+95,00% Cnf.Lmt	Var3 Beta (?)	Var3 St.Err.?	-95,00% Cnf.Lmt	+95,00% Cnf.Lmt
Intercept	84,73992	0,544366	155,6671	0,000000	83,45270	86,02714				
"Var1"	3,43522	0,430392	7,9816	0,000092	2,41750	4,45293	0,662482	0,083001	0,466216	0,858749
"Var1"^2	2,49946	0,461609	5,4147	0,000993	1,40793	3,59099	0,453287	0,083715	0,255334	0,651241
"Var2"	-1,49735	0,430392	-3,4790	0,010280	-2,51507	-0,47964	-0,288764	0,083001	-0,485031	-0,092498
"Var2"^2	-1,02661	0,461609	-2,2240	0,061516	-2,11814	0,06493	-0,186179	0,083715	-0,384133	0,011775
"Var1"*"Var2"	3,00000	0,608620	4,9292	0,001696	1,56084	4,43916	0,409128	0,083001	0,212861	0,605394

Рис.10.3 – Вікно результатів розрахунку коефіцієнтів моделі та відповідних статистичних параметрів

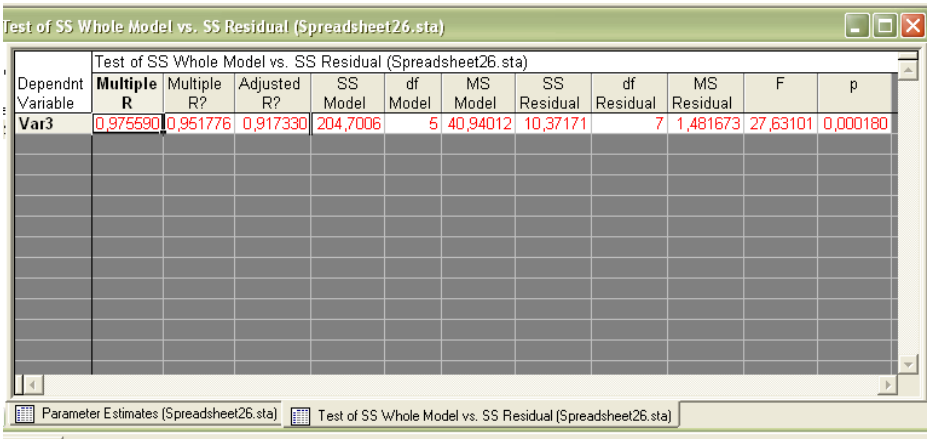
Аналіз результатів: усі коефіцієнти окрім b_{22} статистично значимі.

Найбільша міра впливу спостерігається у ефекту x_1 (значення (бета) - коефіцієнтів).

Для того, щоб визначити, наскільки адекватно отримана модель описує експеримент, повернемось до вікна результатів та оберемо там вкладку **Whole model R** або **All effects**.



Відкриється вікно результатів статистичного аналізу отриманої моделі (рис.10.4).



Dependnt Variable	Multiple R	Multiple R?	Adjusted R?	SS Model	df Model	MS Model	SS Residual	df Residual	MS Residual	F	p
Var3	0,975590	0,951776	0,917330	204,7006	5	40,94012	10,37171	7	1,481673	27,63101	0,000180

Рис.10.4 – Вікно результатів статистичного аналізу отриманої моделі

Аналіз результатів: запропонована модель адекватно описує досліджуваний процес, ймовірність помилки для критерію Фішера

становить 0,00018, що значно менше, ніж 0,05. Побудована регресія пояснює 95% варіації залежної змінної

В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть скріншоти кожного етапу реалізації поставленого завдання. Зробіть висновки щодо отриманих значень результатів.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 10

1) *Що таке критерій ротатабельності? Як будують ЦКРП?*
2) *Які переваги та недоліки має ЕС-модель, побудована за результатами реалізації ЦКРП?*
3) *В чому особливості побудови та регресійного аналізу моделі, побудованої за результатами реалізації ЦКРП?*
4) *Опишіть загальний порядок дій для проведення регресійного аналізу в середовищі STATISTICA .*

11. ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ НА ДІАГРАМАХ СКЛАД – ВЛАСТИВІСТЬ

Лабораторна робота № 11

ТЕМА: побудова залежностей властивостей багатокомпонентних систем від їхнього складу.

МЕТА: оволодіння методикою побудови залежностей властивостей багатокомпонентних систем від їхнього складу у інтегрованому програмному середовищі Mathcad.

11.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

11.1.1 Побудова залежностей властивостей багатокомпонентних систем від їхнього складу

При рішенні задач з хімії, хімічної технології, промисловості будівельних матеріалів і інших часто приходиться зіштовхуватися з питаннями вивчення властивостей сумішей, що залежать від співвідношення вихідних компонентів. Змінні x_i ($i= 1.2..., q$) таких систем пропорційні вмісту їх компонентів у суміші і задовольняють умові:

$$\sum_{i=1}^{q} x_i = 1 \qquad (x_i \geq 0) \qquad (11.1)$$

де q – кількість компонентів; x_i – концентрація компоненту.

Оскільки при побудові діаграм склад - властивість прийдеться оперувати факторним простором в вигляді симплексів, доцільно відзначити, що в симплексній системі координат відносний вміст кожного компоненту відкладаються вздовж відповідних сторін (ребер) симплексу.

Для двокомпонентних систем симплекс - пряма; при $q=3$ правильний симплекс - рівнобічний трикутник. Кожна точка трикутника відповідає одному певному складу трійній системи і, навпаки, кожний склад представляється однією певною точкою. Склад може бути виражений у

мольних, вагових або об'ємних частках або відсотках. Вершини трикутника відповідають чистим речовинам, сторони - подвійним системам.

При плануванні експерименту для рішення задач на діаграмах склад - властивість припускається, що властивість, яка вивчається, є безперервною функцією аргументів і може бути з достатньою точністю представлена поліномом. Використання засобів планування експерименту дозволяє значно зменшити кількість експериментів при вивченні багатокомпонентних систем, відпадає необхідність у просторовому поданні складних поверхонь, бо властивості можна визначати з рівнянь. При цьому забезпечується можливість графічної інтерпретації результатів.

Вперше задача побудови математичної моделі склад - властивість була вирішена Шеффе, що ввів канонічну форму полінома ступеня *n*.

Так, наприклад, поліном другого степеня в загальному випадку має вигляд:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \\ + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{33} x_3^2, \quad (11.2)$$

в наведеній формі з урахуванням умови:

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1 \quad (11.3)$$

запишеться наступним чином:

$$y = b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3, \quad (11.4)$$

де

$$\beta_1 = y_1; \beta_2 = y_2; \beta_3 = y_3;$$
$$\beta_{12} = 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2; \beta_{13} = 4y_{13} - 2y_1 - 2y_3;$$
$$\beta_{23} = 4y_{23} - 2y_2 - 2y_3;$$

Для q – компонентної суміші:

$$y_i = \sum_{1 \le i \le q} \beta_i x_i + \sum_{1 \le i \le j \le q} \beta_{ij} x_i x_j; \quad (11.5)$$

де $\beta_i = y_i;$

$$\beta_{ij} = 4y_{ij} - 2y_i - 2y_j.$$

Неповна кубічна модель:

для трикомпонентної суміші:

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \\ + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3, \quad (11.6)$$

де $\beta_1 = y_1$; т.д.

$$\beta_{12} = 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2 \text{ і т.д.}$$

$$\beta_{123} = 27y_{123} - 12(y_{12} + y_{13} + y_{23}) + 3(y_1 + y_2 + y_3);$$

для q - компонентної суміші

$$y = \sum_{1 \le i \le q} \beta_i x_i + \sum_{1 \le i \le j \le q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \le i \le j \le k \le q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k; \quad (11.7)$$

де $\beta_i = y_i$; і т.д.

$$\beta_{ij} = 4y_{ij} - 2y_i - 2y_j$$

$$\beta_{ijk} = 27y_{ijk} - 12(y_{ij} + y_{ik} + y_{jk}) + 3(y_i + y_j + y_k)$$

Для отримання наведених розрахункових формул у поліном послідовно підставляються координати всіх точок симплекс-решітчатих насичених планів (число експериментальних точок у плані дорівнює числу коефіцієнтів цього полінома), а замість виходів - відповідні даним точкам значення y.

У таблиці 11.1. наведений симплекс-решітчатий план другого порядку для трикомпонентної суміші, у таблиці 11.2 – план третього порядку.

Таблиця 11.1

Симплекс-решітчатий план другого порядку для трьохкомпонентної суміші

N п/п	x_1	x_2	x_3	$y_{экс}$	*N* п/п	x_1	x_2	x_3	$y_{экс}$
I	*1*	*0*	*0*	y_1	*4*	*1/2*	*1/2*	*0*	y_{12}
2	*0*	*1*	*0*	y_2	*5*	*1/2*	*0*	*1/2*	y_{13}
3	*0*	*0*	*1*	y_3	*6*	*0*	*1/2*	*1/2*	y_{23}

Таблиця 11.2

Симплекс-решітчатий план третього порядку для трьохкомпонентної суміші

№ п/п	x_1	x_2	x_3	y	№ п/п	x_1	x_2	x_3	y
1	1	0	0	y_1	6	0	2/3	1/3	y_{223}
2	0	1	0	y_2	7	0	1/3	2/3	y_{233}
3	0	0	1	y_3	8	2/3	0	1/3	y_{113}
4	2/3	1/3	0	y_{112}	9	1/3	0	2/3	y_{133}
5	1/3	2/3	0	y_{122}	10	1/3	1/3	1/3	y_{123}

Оскільки розглянуті плани є насиченими, для перевірки адекватності моделі проводиться декілька додаткових експериментів в деяких перевірочних точках. Ці точки вибираються або в найбільш цікавій для дослідника області факторного простору, або таким чином, щоб при необхідності їх можна було застосовувати для побудови полінома більш високого степеня.

Розрахункове значення критерію Стьюдента визначається співвідношенням:

$$t_p = \frac{|y_i - \hat{y}_i|\sqrt{r}}{\sqrt{S_0^2\sqrt{1+\xi}}} \qquad (11.8)$$

де y_i – експериментально визначене значення в *i-й* точці; $\hat{y}_i$ – відповідне йому розраховане значення; Z – кількість паралельних дослідів; S – оцінка дисперсій відтворення;

$$\xi = \sum \beta_i^2 + \sum \beta_{ij}^2$$

Обчислені за формулою (11.8) значення t_i - порівнюються з табличними значеннями критерію Стьюдента t_T (*Додаток В, табл.В.1.*):

$$t_P < t_T,\ f=N(r+1),\quad q=0,05 \qquad (11.9)$$

При виконанні умови (11.9) рівняння визнається адекватним. При невиконанні - переходять до рівнянь більш високого порядку, доповнюючи план експерименту новими точками.

11.1.2 Дослідження процесу зміни властивостей бісульфітної напівцюлелози зі змішаної хвойної деревини

Досліджувався процес зміни властивостей бісульфітної напівцюлелози зі змішаної хвойної деревини. Змінними факторами були вагові частки соснової x_1**,** листовної x_2**.,** і ялинкової x_3, фракцій у змішаній деревині. Експерименти проводилися у відповідності з планом Шеффе третього порядку; усі варки повторювалися двічі з рандомізацією в часі. Результати оцінювалися одним із показників механічною міцністю відливок - опором продавлюванню.

Породні склади деревини, що утворять матрицю планування, і результати експериментів (середні значення для двох варок).

Таблиця 11.3

Симплекс-решітчатий план 3-го порядку для 3-компонентної суміші

№	Масова частка деревини			Опір продавлюванню
	x_1	x_2	x_3	y
1	1	0	0	y_1
2	0	1	0	y_2
3	0	0	1	y_3
4	0,67	0,33	0	y_{112}
5	0,33	0,67	0	y_{122}
6	0,67	0	0,33	y_{223}
7	0,33	0	0,67	y_{233}
8	0	0,67	0,33	y_{113}
9	0	0,33	0,67	y_{133}
10	0,33	0,33	0,33	y_{123}

Побудова вигляду апроксимуючого поліному третього степеню:

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \\ + \beta_{123} x_1 x_2 x_3 + \gamma_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + \gamma_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \\ + \gamma_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) \qquad (11.10)$$

Розрахувати коефіцієнти моделі (11.10), що розраховуються згідно із залежностей (11.11):

$$\beta_1 = y_1;$$
$$\beta_2 = y_2;$$
$$\beta_3 = y_3;$$

$$\gamma_{12} = \frac{9}{4}\left(3y_{112} - 3y_{122} - y_1 + y_2\right)$$
$$\beta_{12} = \frac{9}{4}(y_{112} + y_{122} - y_1 - y_2);$$
$$\gamma_{23} = \frac{9}{4}\left(3y_{223} - 3y_{233} - y_2 + y_3\right)$$
$$\beta_{23} = \frac{9}{4}(y_{223} + y_{233} - y_2 - y_3); \qquad (11.11)$$
$$\gamma_{13} = \frac{9}{4}\left(3y_{113} - 3y_{133} - y_1 + y_3\right)$$
$$\beta_{13} = \frac{9}{4}(y_{113} + y_{133} - y_1 - y_3);$$

$$\beta_{123} = 27y_{123} - \frac{27}{4}(y_{112} + y_{122} + y_{113} + y_{133} + y_{223} + y_{233}) + \frac{9}{2}(y_1 + y_2 + y_3)$$

Перевірка адекватності моделі. Розрахункове значення критерію Стьюдента визначається співвідношенням:

$$t_p = \frac{\left|y_i - \hat{y}_i\right|\sqrt{r}}{S_0^2\sqrt{1+\xi}} \qquad (11.12)$$

де y_i – експериментально визначене значення в *i-й* точці; $\hat{y}_i$ – відповідне йому розраховане значення; r – кількість паралельних дослідів ($r=1$); S_0^2 – оцінка дисперсій відтворення (S_0^2=0,21);

$$\xi = \sum \alpha_i^2 + \sum \alpha_{ij}^2 \qquad (11.13)$$

$$\alpha_1 = x_1(2x_1 - 1), \alpha_2 = x_2(2x_2 - 1), \alpha_3 = x_3(2x_3 - 1),$$
$$\alpha_{12} = 4x_1x_2, \alpha_{13} = 4x_1x_3, \alpha_{23} = 4x_2x_3$$

Обчислені за формулою (11.12) значення t_i порівнюються з табличними значеннями критерію Стьюдента t_T =2,09

$$t_P < t_T,\ f=N(r+1)=20, \qquad q=0,05 \tag{11.14}$$

При виконанні умови (11.14) рівняння визнається адекватним. При невиконанні – переходять до рівнянь більш високого порядку, доповнюючи план експерименту новими точками.

11.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання, у відповідності з номером варіанту за результатами експерименту описаного прикладу отримати апроксимуючий поліном третьої степені.
3. Включити комп’ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.
4. Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.
5. Отримати результати та проаналізувати їх. Перевірити адекватність отриманої математичної моделі для рівня значимості *q=0,05*. Дисперсія відтворення досліду S_0^2= 0,21.
6. Представити результати роботи на комп’ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

11.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Вихідні дані:

$$X := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0.67 & 0.33 & 0 \\ 0.33 & 0.67 & 0 \\ 0.67 & 0 & 0.33 \\ 0.33 & 0 & 0.67 \\ 0 & 0.67 & 0.33 \\ 0 & 0.33 & 0.67 \\ 0.33 & 0.33 & 0.33 \end{pmatrix} \qquad Y := \begin{pmatrix} 3.6 \\ 2.78 \\ 4.59 \\ 4 \\ 2.99 \\ 3.86 \\ 3.50 \\ 3.3 \\ 3.58 \\ 3.65 \end{pmatrix} \begin{matrix} y1 \\ y2 \\ y3 \\ y112 \\ y122 \\ y223 \\ y233 \\ y113 \\ y133 \\ y123 \end{matrix}$$

X- масова частка деревини **Y**- опір продавлювання

Розрахуємо коефіцієнти моделі

$\beta 1 := Y_0$

$\beta 1 = 3.6$

$\beta 2 := Y_1$

$\beta 2 = 2.78$

$\beta 3 := Y_2$

$\beta 3 = 4.59$

$\gamma 12 := \left(\frac{9}{4}\right)\cdot\left(3\cdot Y_3 - 3\cdot Y_4 - Y_0 + Y_1\right)$

$\gamma 12 = 4.972$

$\beta 12 := \left(\frac{9}{4}\right)\cdot\left(Y_3 + Y_4 - Y_0 - Y_1\right)$

$\beta 12 = 1.373$

$\gamma 23 := \left(\frac{9}{4}\right)\cdot\left(3\cdot Y_5 - 3\cdot Y_6 - Y_1 + Y_2\right)$

$\gamma 23 = 6.503$

$\beta 23 := \left(\frac{9}{4}\right)\cdot\left(Y_5 + Y_6 - Y_1 - Y_2\right)$

$\beta 23 = -0.022$

$\gamma 13 := \left(\frac{9}{4}\right)\cdot\left(3\cdot Y_7 - 3\cdot Y_8 - Y_0 + Y_2\right)$

$\gamma 13 = 0.337$

$\beta 13 := \left(\frac{9}{4}\right)\cdot\left(Y_7 + Y_8 - Y_0 - Y_2\right)$

$\beta 13 = -2.948$

$$\beta 123 := 27\cdot Y_9 - \left(\frac{27}{4}\right)\cdot\left(Y_3 + Y_4 + Y_7 + Y_8 + Y_5 + Y_6\right) + \left(\frac{9}{2}\right)\cdot\left(Y_0 + Y_1 + Y_2\right)$$

$\beta 123 = 4.612$

Тоді, апроксимуючий поліном матиме вигляд

$$Y = \beta 1\cdot x1 + \beta 2\cdot x2 + \beta 3\cdot x3 + \beta 12\cdot x1\cdot x2 + \beta 13\cdot x1\cdot x3 + \beta 123\cdot x1\cdot x2\cdot x3 + \gamma 12\cdot x1\cdot x2(x1 - x2) + \gamma 13\cdot x1\cdot x3(x1 - x3) + \gamma 23\cdot x2\cdot x3(x2 - x3)$$

$$Y = 3.6\cdot x1 + 2.78\cdot x2 + 4.59\cdot x3 + 1.373\cdot x1\cdot x2 - 2.948\cdot x1\cdot x3 + 4.612\cdot x1\cdot x2\cdot x3 + 4.972\cdot x1\cdot x2(x1 - x2) + 0.337\cdot x1\cdot x3(x1 - x3) + 6.503\cdot x2\cdot x3(x2 - x3)$$

Перевірка адекватності моделі

$r := 1$ кількість паралельних дослідів

$tt := 2.09$ табличне значення критерію Стьюдента

$S02 := 0.21$ оцінка дисперсій відтворення

Для перевірки адекватності моделі оберемо декілька точок (4,5,6), обрахуємо необхідні значення ξ , $\hat{y}$ (підставивши значення коефіцієнтів у рівняння)

$$Xv := \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} x1 & x2 & x3 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0.67 & 0.33 & 0 \\ 0.33 & 0.67 & 0 \\ 0.67 & 0 & 0.33 \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{l} \\ 4\ \text{дослід} \\ 5\ \text{дослід} \\ 6\ \text{дослід} \end{array}$$

$$Y = 3.6\cdot x1 + 2.78\cdot x2 + 4.59\cdot x3 + 1.373\cdot x1\cdot x2 - 2.948\cdot x1\cdot x3 + 4.612\cdot x1\cdot x2\cdot x3 + 4.972\cdot x1\cdot x2(x1 - x2) + 0.337\cdot x1\cdot x3(x1 - x3) + 6.503\cdot x2\cdot x3(x2 - x3)$$

Для 4 досліду

$$yr41 := \beta 1\cdot Xv_{0,0} + \beta 2\cdot Xv_{0,1} + \beta 3\cdot Xv_{0,2} + \beta 12\cdot Xv_{0,0}\cdot Xv_{0,1} + \beta 13\cdot Xv_{0,0}\cdot Xv_{0,2} + \beta 123\cdot Xv_{0,0}\cdot Xv_{0,1}\cdot Xv_{0,2}$$

$$yr42 := \gamma 12\cdot Xv_{0,0}\cdot Xv_{0,1}\cdot\left(Xv_{0,0} - Xv_{0,1}\right) + \gamma 13\cdot Xv_{0,0}\cdot Xv_{0,2}\cdot\left(Xv_{0,0} - Xv_{0,2}\right) + \gamma 23\cdot Xv_{0,1}\cdot Xv_{0,2}\cdot\left(Xv_{0,1} - Xv_{0,2}\right)$$

$yr4 := yr41 + yr42$

$yr4 = 4.007$

Для 5 досліду

$$yr51 := \beta 1\cdot Xv_{1,0} + \beta 2\cdot Xv_{1,1} + \beta 3\cdot Xv_{1,2} + \beta 12\cdot Xv_{1,0}\cdot Xv_{1,1} + \beta 13\cdot Xv_{1,0}\cdot Xv_{1,2} + \beta 123\cdot Xv_{1,0}\cdot Xv_{1,1}\cdot Xv_{1,2}$$

$$yr52 := \gamma 12\cdot Xv_{1,0}\cdot Xv_{1,1}\cdot\left(Xv_{1,0} - Xv_{1,1}\right) + \gamma 13\cdot Xv_{1,0}\cdot Xv_{1,2}\cdot\left(Xv_{1,0} - Xv_{1,2}\right) + \gamma 23\cdot Xv_{1,1}\cdot Xv_{1,2}\cdot\left(Xv_{1,1} - Xv_{1,2}\right)$$

$yr5 := yr51 + yr52$

$yr5 = 2.98$

Для 6 досліду

$$yr61 := \beta 1\cdot Xv_{2,0} + \beta 2\cdot Xv_{2,1} + \beta 3\cdot Xv_{2,2} + \beta 12\cdot Xv_{2,0}\cdot Xv_{2,1} + \beta 13\cdot Xv_{2,0}\cdot Xv_{2,2} + \beta 123\cdot Xv_{2,0}\cdot Xv_{2,1}\cdot Xv_{2,2}$$

$$yr62 := \gamma 12\cdot Xv_{2,0}\cdot Xv_{2,1}\cdot\left(Xv_{2,0} - Xv_{2,1}\right) + \gamma 13\cdot Xv_{2,0}\cdot Xv_{2,2}\cdot\left(Xv_{2,0} - Xv_{2,2}\right) + \gamma 23\cdot Xv_{2,1}\cdot Xv_{2,2}\cdot\left(Xv_{2,1} - Xv_{2,2}\right)$$

$yr6 := yr61 + yr62$

$yr6 = 3.3$

Коефіцієнти α та значення ξ для 4 досліду

$\alpha 1 := Xv_{0,0}\cdot\left(2\cdot Xv_{0,0} - 1\right)$

$\alpha 1 = 0.228$

$\alpha 2 := Xv_{0,1}\cdot\left(2\cdot Xv_{0,1} - 1\right)$

$\alpha 2 = -0.112$

$\alpha 3 := Xv_{0,2}\cdot\left(2\cdot Xv_{0,2} - 1\right)$

$\alpha 3 = 0$

$\alpha 12 := 4 Xv_{0,0} \cdot Xv_{0,1}$

$\alpha 12 = 0.884$

$\alpha 13 := 4 Xv_{0,0} \cdot Xv_{0,2}$

$\alpha 13 = 0$

$\alpha 23 := 4 Xv_{0,2} \cdot Xv_{0,1}$

$\alpha 23 = 0$

$\alpha i := \alpha 1^2 + \alpha 2^2 + \alpha 3^2$

$\alpha i = 0.064$

$\alpha ii := \alpha 12^2 + \alpha 13^2 + \alpha 23^2$

$\alpha ii = 0.782$

$\xi 4 := (\alpha i) + (\alpha ii)$

$\xi 4 = 0.847$

Коефіцієнти α та значення ξ для 5 досліду

$\alpha 1 := Xv_{1,0} \cdot (2 \cdot Xv_{1,0} - 1)$

$\alpha 1 = -0.112$

$\alpha 2 := Xv_{1,1} \cdot (2 \cdot Xv_{1,1} - 1)$

$\alpha 2 = 0.228$

$\alpha 3 := Xv_{1,2} \cdot (2 \cdot Xv_{1,2} - 1)$

$\alpha 3 = 0$

$\alpha 12 := 4 Xv_{1,0} \cdot Xv_{1,1}$

$\alpha 12 = 0.884$

$\alpha 13 := 4 Xv_{1,0} \cdot Xv_{1,2}$

$\alpha 13 = 0$

$\alpha 23 := 4 Xv_{1,2} \cdot Xv_{1,1}$

$\alpha 23 = 0$

$\alpha i := \alpha 1^2 + \alpha 2^2 + \alpha 3^2$

$\alpha i = 0.064$

$\alpha ii := \alpha 12^2 + \alpha 13^2 + \alpha 23^2$

$\alpha ii = 0.782$

$\xi 5 := (\alpha i) + (\alpha ii)$

$\xi 5 = 0.847$

Коефіцієнти α та значення ξ для 6 досліду

$\alpha 1 := Xv_{2,0} \cdot (2 \cdot Xv_{2,0} - 1)$

$\alpha 1 = 0.228$

$\alpha 2 := Xv_{2,1} \cdot (2 \cdot Xv_{2,1} - 1)$

$\alpha 2 = 0$

$\alpha 3 := Xv_{2,2} \cdot (2 \cdot Xv_{2,2} - 1)$

$\alpha 3 = -0.112$

$\alpha 12 := 4 Xv_{2,0} \cdot Xv_{2,1}$

$\alpha 12 = 0$

$\alpha 13 := 4 Xv_{2,0} \cdot Xv_{2,2}$

$\alpha 13 = 0.884$

$\alpha 23 := 4 Xv_{2,2} \cdot Xv_{2,1}$

$\alpha 23 = 0$

$\alpha i := \alpha 1^2 + \alpha 2^2 + \alpha 3^2$

$\alpha i = 0.064$

$\alpha ii := \alpha 12^2 + \alpha 13^2 + \alpha 23^2$

$\alpha ii = 0.782$

$\xi 6 := (\alpha i) + (\alpha ii)$

$\xi 6 = 0.847$

Розрахуємо значення критерію Стьюдента:

$yi := \begin{pmatrix} 4 \\ 2.99 \\ 3.86 \end{pmatrix}$ вихідні значення y_i для 4,5,6 дослідів

$tr4 := \dfrac{|yi_0 - yr4| \cdot \sqrt{r}}{S02 \cdot \sqrt{1 + \xi 4}}$ розраховане значення критерію Стьюдента для 4 досліду

$tr4 = 0.023$

$tr5 := \dfrac{|yi_1 - yr5| \cdot \sqrt{r}}{S02 \cdot \sqrt{1 + \xi 5}}$ розраховане значення критерію Стьюдента для 5 досліду

$tr5 = 0.034$

$tr6 := \dfrac{|yi_2 - yr6| \cdot \sqrt{r}}{S02 \cdot \sqrt{1 + \xi 6}}$ розраховане значення критерію Стьюдента для 6 досліду

$tr6 = 1.961$

$$Adekvatnist := \begin{cases} 1 & \text{if } \begin{cases} tr4 < tt \\ tr5 < tt \\ tr6 < tt \end{cases} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$Adekvatnist = 1$

Якщо Adekvatnis=1, то модель є адекватною, тобто умова tr<tt виконується для усіх точок.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 11

1) *У чому суть методу симплексних решіток?*

2) *Які особливості планування експерименту для вирішення задач на діаграмах склад-властивість?*

3) *Як складаються симплекс – решітчасті плани Шеффе?*

12. ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЖИМУ РОБОТИ РЕАКТОРА

Лабораторна робота № 12

ТЕМА: використання математичних методів для визначення оптимальних технологічних параметрів хімічного процесу у реакторі.

МЕТА: набуття навичок розв'язання оптимізаційних задач для об'єктів хімічної технології, що мають цільову функцію, яка залежить від однієї змінної.

12.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Оптимізація – це цілеспрямована діяльність, яка полягає в отриманні найкращих результатів у відповідних умовах.

Постановка задачі оптимізації передбачає наявність об'єкта оптимізації (це може бути технологічний процес, будь-який виробничий комплекс та інше), можливість кількісної оцінки необхідної якості об'єкта оптимізації, наявність параметрів, за допомогою яких можна змінювати стан об'єкту оптимізації у відповідності з тими чи іншими вимогами.

Величина, максимальне чи мінімальне значення якої потрібно знайти, називається критерієм оптимальності. Для того, щоб можна було розв'язувати задачу оптимізації, потрібно критерій оптимальності записати як функцію параметрів, котрі впливають на його значення, тобто задати його аналітично.

Задача оптимізації, в якій критерій оптимальності є функцією однієї змінної (наприклад, вихід цільового компоненту в ізотермічному реакторі ідеального змішування є функцією часу перебування в апараті), належить до найбільш простого типу оптимізаційних задач.

Методи розв'язування таких задач часто використовуються при розв'язуванні багатовимірних задач оптимізації.

Найбільш поширеними одновимірними методами оптимізації задач хімічної технології є такі, як метод сканування, дихотомії, «золотого» перетину, із застосуванням чисел Фібоначі, з використанням квадратичної апроксимації. Сучасний рівень комп'ютерної техніки надає можливість розв'язувати оптимізаційні задачі, не зважаючи на складність об'єкту, що оптимізується.

12.1.1 Метод сканування

Інтервал $[a, b]$, на якому потрібно знайти мінімум $f(x)$, поділяється на n рівних відрізків довжини: $h = b - a/n$. Точками розподілу будуть : $x_0 = a,\ x_1 = x_0 + h,\ x_2 = x_0 + 2h, \dots, x_n = x_0 + n \cdot h = b.$ Послідовно обчислюються значення цільової функції $f(x)$ у цих точках, а найменше значення запам'ятовується. Екстремум може бути знайденим із точністю до кроку пошуку h. Обчислення продовжується до тих пір, поки не буде розглянуто весь інтервал $[a,\ b]$.Переваги методу: простота алгоритму та можливість пошуку глобального екстремуму. До недоліків методу слід віднести великий обсяг обчислень. Блок-схема алгоритму мінімізації функції $f(x)$ на відрізку $[a,\ b]$ наведена у *Додатку Г*.

12.1.2 Методи виключення інтервалів

Ці методи дозволяють визначити оптимум функції однієї змінної всередині заданого інтервалу $[a, b]$ шляхом послідовного виключення підінтервалів, а отже, шляхом зменшення інтервалу пошуку.

Досліджувана функція $f(x)$ на розглянотому інтервалі $[a,\ b]$ повина бути унімодальною. Функція $f(x)$ являється унімодальною на відрізку $[a,\ b]$ тільки в тому випадку, якщо вона монотонна по обидва боки від єдиної на цьому інтервалі точки оптимуму $\dot{x}$, тобто коли для точок x_1 та x_2 із цього інтервалу $\dot{x} \leq x_1 \leq x_2$ випливає, що $f(\dot{x}) \leq f(x_1) \leq f(x_2)$ та $\dot{x} \geq x_1 \geq x_2$ випливає, що $f(\dot{x}) \geq f(x_1) \geq f(x_2)$.

Унімодальна функція не обов'язково повинна бути неперервною. Для унімодальної функції $f(x)$ порівняння значень $f(x)$ у двох різних точках інтервалу пошуку дозволяє визначити, в якому із заданих двома вказаними точками підінтервалів точка оптимуму відсутня.

Методи виключення інтервалів можна використовувати для аналізу як неперервних, так і дискретних функцій, а також у випадках, коли змінні приймають значення із дискретної множини. Єдиною вимогою є можливість визначення значень функції $f(x)$ в заданних точках x за допомогою прямих розрахунків або імітаційних експерементів.

Ефективність цих методів пов'язана з тим, що це методи спрямованого пошуку.

У багатьох задачах умова унімодальності не виконується, або не може бути легко перевірена. Тоді можна вихідний інтервал визначеності (особливо якщо він великий) поділити на маленькі інтервали, знайти $\min f(x)$ на кожному з підінтервалів, а потім вибрати з них найменший.

12.1.3 Метод половинного ділення інтервалів (метод дихотомії)

Цей метод дозволяє виключити в точності половину інтервалу на кожній ітерації.

Для прикладу розглянемо проточний реактор із мішалкою, режим якого з достатнім наближенням відповідає умовам ідеального змішування. В реакторі протікає складна реакція. Необхідно визначити максимально можливу концентрацію C_B напівпродукту B, який є цільовим компонентом, і видповідний час перебування потоку в апараті τ_{opt}. При такій постановці задачі критерієм оптимальності є концентрація речовини B, а змінною - час перебування τ.

Для визначення τ_{opt}, зручно у даному випадку використати метод половинного ділення (дихотомії), який дозволяє зробити мінімальну кількість розрахунків згідно з моделлю для знаходження τ_{opt} і $C_{B_{max}}$.

Розглянемо алгоритм цього методу, припускаючи, що функція $C_B(\tau)$, яка оптимізується, має один максимум (див. рис. 12.1)

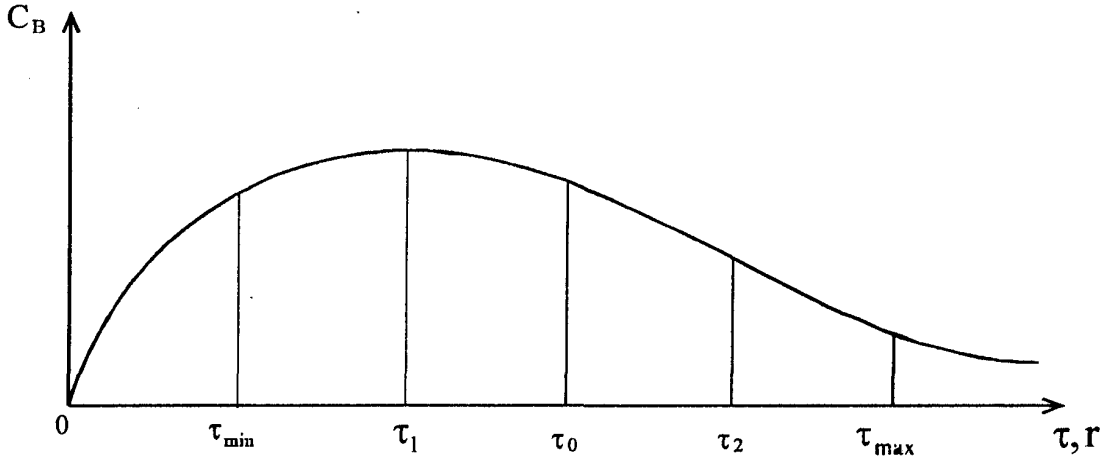


Рис.12.1 – Графік функції $C_B(\tau)$

Алгоритм методу дихотомії.

1. Розбиваємо інтервал (τ_{min}, τ_{max}) на два рівних підінтервала (точка τ_0), кожний з яких ділимо на дві рівних частини (т.т. τ_1, τ_2):

$\tau_0 = \frac{\tau_{min}+\tau_{max}}{2}$; $\tau_1 = \frac{\tau_{min}+\tau_0}{2}$; $\tau_2 = \frac{\tau_0+\tau_{max}}{2}$

2. Розраховуємо значення критерію оптимальності $C_B(\tau)$ на межах усіх підінтервалів, включаючи кінцеві точки τ_{min}, τ_{max}: $C_B(\tau_{min})$, $C_B(\tau_1)$, $C_B(\tau_2)$, $C_B(\tau_{max})$.

3. Серед отриманих значень C_B знаходимо найбільше, тобто те, яке відповідає типу екстремума (максимума), котрий потрібно знайти. Виходячи з певних уявлень (рис. 12.1) найбільше значення критерію C_B спостерігається у точці τ_1.

4. Вибираємо новий інтервал, який вміщує два підінтервали з найбільшим розрахованим значенням C_B на їх загальній межі. У даному випадку таким інтервалом є $[\tau_{min}, \tau_0]$.

5. Повторюємо процедуру розрахунків для нового інтервалу, починаючи з п.1 доки різниця між значеннями C_B в сусідніх точках не стане меншою за задану точність визначення екстремуму - ε.

Послідовність дій для знаходження мінімуму $f(x)$ цим методом зображена на блок-схемі (*Додаток Д*).

12.1.4 Постановка задачі оптимізації режиму роботи реактора ідеального перемішування

Необхідно визначити максимальний вихід цільового компоненту, що утворюється за схемою хімічної реакції в апараті.

У ізотермічному реакторі ідеального перемішування відбувається хімічний процес за схемою:

Цільовим компонентом є речовина *P*. Визначити максимальну концентрацію речовини P, що може бути досягнута, та відповідний оптимальний час перебування реакційної суміші в апараті, якщо цільова функція (за умови $C_{P0} = C_{D0} = 0$):

$$C_P = \frac{k_1 \tau C_{A0}}{(1+k_1\tau)(1+k_2\tau)}$$

де C_P – поточна концентрація речовини *P*, кмоль/м^3; $C_{A0} = C_{P0} = C_{D0}$ – початкова концентрація сировини компонентів *A*, *P*, *D* ; k_1, k_2, k_3 – константи хімічних реакцій, с$^{-1}$; τ – час перебування в апараті, с$^{-1}$.

Вихідні дані: $C_{A0} = 5{,}0$ кмоль/м^3; $C_{P0} = C_{D0} = 0$; $k_1 = 5{,}7 \cdot 10^{-3} c^{-1}$, $k_2 = 3{,}2 \cdot 10^{-3} c^{-1}$. Час перебування від 0 до 36000 с (10 год.).

12.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.
3. Включити комп’ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.
4. Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.
5. Отримати результати та проаналізувати їх.

6. Представити результати роботи на комп’ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

12.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Тексти програм мають бути такими, як наведено нижче.

Завдання роботи.

Знайти максимум функції F(x) на інтервалі [a,b], із заданою точністю ε.

$C0 := 5 \qquad k1 := 5.7\cdot 10^{-3} \qquad k2 := 3.2\cdot 10^{-3} \qquad F(x) := \dfrac{k1\cdot C0\cdot x}{(1 + k1\cdot x)\cdot(1 + k2\cdot x)}$

$a := 0 \qquad b := 1800 \qquad \varepsilon := 0.01$

1. Максимізація функції методом сканування:

Крок: $h := 0.1$

```
T1(a,b,E,h) := | x1 ← a
               | F1 ← F(x1)
               | x ← a
               | for i ∈ 1..(b − a)/h
               |   | x ← x + h
               |   | F2 ← F(x)
               |   | if F2 > F1
               |   |   | F1 ← F2
               |   |   | x1 ← x
               | [ x1 ; F1 ; (b − a)/h ]
```

$Arg_1 := T1(a,b,E,h)_0 \qquad Func_1 := T1(a,b,E,h)_1 \qquad Iter_1 := \dfrac{(b-a)}{h}$

Максимум заданої функції на заданому інтервалі знаходиться в точці аргументу:

$Arg_1 = 1.634$

Значення максимуму функції: $Func_1 = 234.1$

Знайдено за наступну кількість ітерацій: $Iter_1 = 1.8\times 10^4$

2. Максимізація функції методом діхотомії

```
T2(a,b,ε) := | Len ← b − a
             | x0 ← (a + b)/2
             | F0 ← F(x0)
             | k ← 1
             | while Len ≥ ε
             |   | x1 ← a + Len/4
             |   | x2 ← b − Len/4
             |   | F1 ← F(x1)
             |   | F2 ← F(x2)
             |   | k ← k + 2
             |   | if F1 = F2
             |   |   | a ← x1
             |   |   | b ← x2
             |   | otherwise
             |   |   | if F1 > F0
             |   |   |   | b ← x0
             |   |   |   | x0 ← x1
             |   |   |   | F0 ← F1
             |   |   | otherwise
             |   |   |   | a ← x0
             |   |   |   | x0 ← x2
             |   |   |   | F0 ← F2
             |   | Len ← b − a
             |   | q ← 1
             | (x0 F0 k)
```

$Arg_2 := T2(a,b,E)_0$ $\quad Func_2 := T2(a,b,E)_1$ $\quad Iter_2 := T2(a,b,\varepsilon)_2$

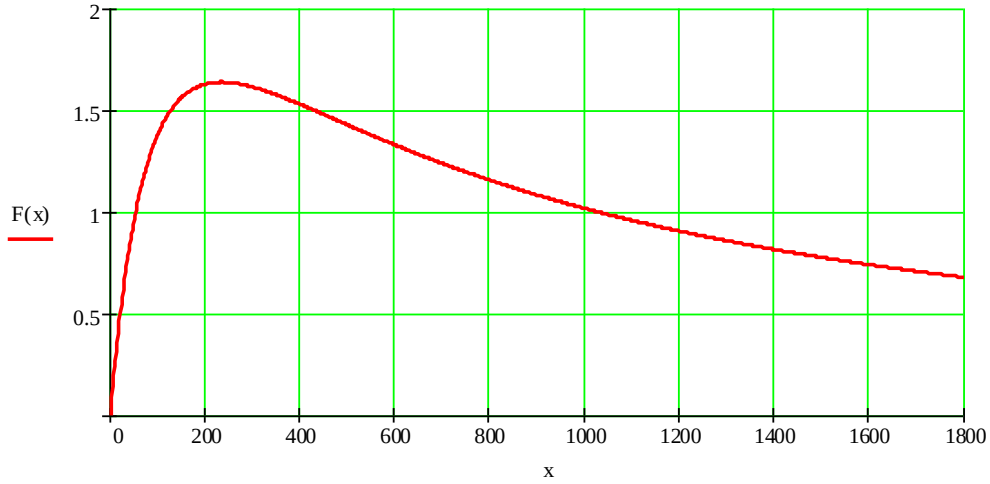
Максимум заданої функції на заданому інтервалі знаходиться в точці аргументу

$Arg_2 = 1.634$

Значення максимуму функції: $Func_2 = 234.232$

Знайдено за наступну кількість ітерацій: $Iter_2 = 37$

Графік функції F(x):



В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм для реалізації 3-х етапів роботи. Зробіть висновки щодо отриманих значень максимуму функції різними методами, їх ефективності та доцільності використання, а також особливостей застосування прийомів програмування в середовищі Mahtcad.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №12

1) Коли використовуються методи детермінованного одновимірного пошуку?

2) Яка функція називається унімодальною?

3) У чому полягає ідея методу сканування?

4) Дайте характеристику методам виключення інтервалів?

5) Наведіть приклад використання методу половинного ділення. У чому переваги цього метода?

13. КОМП'ЮТЕРНИЙ РОЗРАХУНОК ОПТИМАЛЬНИХ УМОВ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ З ЗАСТОСУВАННЯМ ГРАДІЄНТНИХ МЕТОДІВ БАГАТОВИМІРНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ

Лабораторна робота № 13

ТЕМА: використання математичних методів для визначення оптимальних умов хіміко-технологічного процесу варіння целюлози.

МЕТА: оволодіння методикою комп'ютерного розрахунку оптимальних умов хіміко-технологічних процесів з використанням градієнтних методів багатомірної оптимізації у інтегрованому програмному середовищі Mathcad.

13.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Градієнт – це вектор, який за напрямом співпадає з напрямом найшвидшого зростання цільової функції $f(x_1, x_2, ..., x_n)$. Елементами цього вектора є частинні похідні першого порядку по всіх незалежних змінних функції $f(\bar{x})$, де $\bar{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)$. Позначають так: $\nabla f(\bar{x}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, ..., \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$ (або $grad \quad f(\bar{x})$). Нехай потрібно знайти $\min f(\bar{x})$.

13.1.1. Метод релаксації

Алгоритм цього метода передбачає послідовність таких дій:

1. Задати:

n – розмірність задачі;

$\bar{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, ..., x_n^{(0)})$ – початкову точку;

h – величину інтервалу, в якому відбувається одномірний пошук;

δ – точність одновимірної оптимізації;

ε – точність багатовимірної оптимізації;

2. Обчислити значення похідних у точці $\bar{x}^{(0)}$: $\frac{\partial f(\bar{x}^{(0)})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\bar{x}^{(0)})}{\partial x_2}, ..., \frac{\partial f(\bar{x}^{(0)})}{\partial x_n}$.

знайти серед них максимальне по модулю. Нехай воно відповідає змінній x_i, тобто $\left|\frac{\partial f(\bar{x}^{(0)})}{\partial x_i}\right| = \max\left\{\left|\frac{\partial f(\bar{x}^{(0)})}{\partial x_1}\right|, \left|\frac{\partial f(\bar{x}^{(0)})}{\partial x_2}\right|, ..., \left|\frac{\partial f(\bar{x}^{(0)})}{\partial x_i}\right|, ..., \left|\frac{\partial f(\bar{x}^{(0)})}{\partial x_n}\right|\right\}$.

Змінна x_i визначає той осьовий напрямок, вздовж якого функція $f(\bar{x})$ змінюється найбільше. Якщо знак похідної $\frac{\partial f(\bar{x}^{(0)})}{\partial x_i}$ додатній, то функція $f(\bar{x})$ збільшується в обчисленому осьовому напрямку; якщо $\frac{\partial f(\bar{x}^{(0)})}{\partial x_i} \prec 0$, то в протилежному напрямку.

3. Для знайденого в п. 2 осьового напрямку визначити інтервал одновимірного пошуку оптимуму (в нашому випадку max). Якщо $\partial f(\overline{x^0})/\partial x_i > 0$, то $a = x_i^{(0)}$, $b = x_i^{(0)} + h$, якщо ж $\partial f(\overline{x^0})/\partial x_i < 0$ то $a = x_i^{(0)} - h$, $b = x_i^{(0)}$.

4. У знайденому інтервалі методом одновимірного пошуку(сканування, «Золотого перетину» та ін.) визначити максимальне значення цільової функції $f(\overline{x})$ (частковий максимум) з точністю δ. Нехай воно досягається в точці з координатами $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, ..., x_n^{(k)}$

5. Перевірити умову закінчення обчислень: якщо $\| \overline{x^{(k)}} - \overline{x^{(k-1)}} \| \le \varepsilon$ тобто $\sqrt{(x^{(k)}{}_1 - x^{(k-1)}{}_1)^2 + (x^{(k)}{}_2 - x^{(k-1)}{}_2)^2 + ... + (x^{(k)}{}_n - x^{(k-1)}{}_n)^2} \le \varepsilon$, то обчислення припинити, якщо ця умова не виконується, то перейти до п.2, в якому обчислити в останній отриманій точці $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, ..., x_n^{(k)}$ частинні похідні по всім змінним, окрім x_i, що визначала напрямок пошуку часткового оптимуму.

13.1.2. Метод градієнта

Алгоритм цього метода передбачає послідовність таких дій:

1. Задати:

n - розмірність задачі;

$\bar{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, ..., x_n^{(0)})$ - початкову точку;

ε – точність оптимізації;

$h^{(0)}$ – величину кроку в напрямку градієнта (для знаходження $\max f(\bar{x})$);

2. Покласти $k = 0$ (k – номер кроку оптимізації).

3. Обчислити $f(\bar{x}^{(k)})$ і $\nabla f(\bar{x}^{(k)})$, тобто значення частинних похідних по всіх змінних в точці $\bar{x}^{(k)}$: $\frac{\partial f(\bar{x}^{(k)})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\bar{x}^{(k)})}{\partial x_2}, ..., \frac{\partial f(\bar{x}^{(k)})}{\partial x_n}$.

4. Зробити крок в напрямку градієнта. Координати нової точки розраховувати за формулою:

$$x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)} + h^{(k)} \frac{\frac{\partial f(\bar{x}^{(k)})}{\partial x_j}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f(\bar{x}^{(k)})}{\partial x_i} \right)^2}} \quad (j = 1,2,...,n)$$

В цій формулі використовується нормалізований вектор градієнта, який вказує лише напрямок найшвидшої зміни цільової функції, але не вказує швидкість її зміни в цьому напрямку. Часто користуються формулою: $x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)} + h^{(k)} \frac{\partial f(\bar{x}^{(k)})}{\partial x_j}$ $(j = 1,2,...,n)$. При сталому значенні параметра $h^{(k)} = h$ величина $\Delta x_j^{(k)} = h \frac{\partial f(\bar{x}^{(k)})}{\partial x_j}$ змінюється у відповідності із зміною абсолютної величини градієнта.

5. Обчислити $f(\bar{x}^{(k+1)})$.

6. Порівняти $f(\bar{x}^{(k)})$ і $f(\bar{x}^{(k+1)})$:якщо $f(\bar{x}^{(k+1)}) > f(\bar{x}^{(k)})$, тобто зроблений крок у напрямку градієнта успішний, то перейти до п.7. Якщо

$f(\bar{x}^{(k+1)}) < f(\bar{x}^{(k)})$, то початкова величина кроку зменшується, наприклад, в 2 рази $h^{(k)} = \frac{h^{(k)}}{2}$ і розрахунки повторюються, починаючи з п.4.

7. Перевірити виконання нерівності: $\left|\bar{x}^{(k+1)} - \bar{x}^{(k)}\right| \le \varepsilon$. Якщо нерівність виконується, то обчислення припинити; якщо не виконується, то покласти $k = k+1, \quad h^{(k)} = h^{(0)}$ і перейти до п.3.

13.1.3 Постановка задачі оптимізації процесу варіння целюлози

Досліджувався процес варіння целюлози із лляного волокна з попереднім водяним гідролізом (ПВҐГ). Для варіння використовували відходи переробки льону з умістом луб'яного волокна 78%, попередній гідроліз і варіння целюлози здійснювали в автоклавах. Середній рівень та інтервали варіювання факторів процесу наведено у таблиці 13.1.

Таблиця 13.1

Середній рівень та інтервали варіювання факторів процесу варіння целюлози

Фактори	Визначення	Середній рівень	Інтервал варіювання
x1	Тривалість процесу, год	5,5	1,5
x2	Температура ПВГ, ^{0}C	160	10
x3	Температура варіння, ^{0}C	170	10

Вихідною змінною ***y*** обрано вихід целюлози. За результатами ЦКРП було отримано наступну модель (кодований вигляд):

$$y(x1, x2, x3) := 5.4 + 8.2 \cdot x1 + 5.8 \cdot x2 + 9.3 \cdot x3 - 86 \cdot x1^2 + 5.2 \cdot x1 \cdot x2 + 2.9 \cdot x1 \cdot x3 + 6.4 \cdot x2 \cdot x3 - 27. \cdot x2^2 - 18. \cdot x3^2$$

Необхідно встановити оптимальний режим протікання процесу варіння целюлози в області проведення експерименту (зміна факторів в

кодованому виді відбувається в інтервалі [-1, 1]) та визначити максимальний вихід целюлози.

13.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.
3. Включити комп'ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.
4. Розробити алгоритм оптимізації досліджуваного процесу відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.
5. Отримати результати та проаналізувати їх.
6. Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

13.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Метод релаксації

Оберемо інтервал одновимірного пошуку h=1, точність одновимірної оптимізації δ=0,001, точність багатомірної оптимізації E=0,001, приріст для розрахунку часткових похідних $\Delta x=10^{-4}$.

$$ORIGIN := 1$$

$$x0 := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad a := \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad b := \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\Delta x := 10^{-4}$ $\quad E := 0.001$ $\quad \delta := 0.001$ $\quad h := 1$

$$y(x) := 5.4 + 8.2\cdot x_1 + 5.8\cdot x_2 + 9.3\cdot x_3 - 86\cdot(x_1)^2 + 5.2\cdot x_1\cdot x_2 + 2.9\cdot x_1\cdot x_3 + 6.4\cdot x_2\cdot x_3 - 27\cdot(x_2)^2 - 18\cdot(x_3)^2$$

```
max_rel(a,b,x0,E,h,δ,Δx) := | if a1 ≤ x01 ≤ b1 ∧ a2 ≤ x02 ≤ b2 ∧ a3 ≤ x03 ≤ b3
                            |   it ← 0
                            |   M ← y(x0)
                            |   res ← 0
                            |   while res = 0
                            |     x ← x0
                            |     k ← 0
                            |     for i ∈ 1..3
                            |       x_i ← x0_i + Δx
                            |       P_i ← (y(x) − M)/Δx
                            |       x_i ← x0_i
                            |     for i ∈ 1..3
                            |       out_i ← 0
                            |       out_i ← 1 if x0_i ≤ a_i ∨ x0_i ≥ b_i ∨ i = k
                            |     Im ← 1 if out1 ≠ 1 ∧ (|P1| ≥ |P2| ∨ out2 = 1) ∧ (|P1| ≥ |P3| ∨ out3 = 1)
                            |     Im ← 2 if out2 ≠ 1 ∧ (|P2| ≥ |P1| ∨ out1 = 1) ∧ (|P2| ≥ |P3| ∨ out3 = 1)
                            |     Im ← 3 if out3 ≠ 1 ∧ (|P3| ≥ |P1| ∨ out1 = 1) ∧ (|P3| ≥ |P2| ∨ out2 = 1)
                            |     k ← Im
                            |     if P_Im > 0
                            |       a1_Im ← x0_Im
                            |       b1_Im ← x0_Im + h
                            |       x0_Im ← x0_Im + δ
                            |       M1 ← y(x0)
                            |       while x0_Im ≤ b1_Im ∧ M < M1 ∧ x0_Im ≤ b_Im
                            |         M ← M1
                            |         xm ← x0
                            |         it ← it + 1
                            |         x0_Im ← x0_Im + δ
                            |         M1 ← y(x0)
                            |     if P_Im < 0
                            |       b1_Im ← x0_Im
                            |       a1_Im ← x0_Im − h
                            |       x0_Im ← x0_Im − δ
                            |       M1 ← y(x0)
```

```
while x0_Im ≥ a1
    M ← M1
    xm ← x0
    it ← it + 1
    x0_Im ← x0_In
    M1 ← y(x0)
x0 ← xm
res ← 1  if  ||x − x
```

$$\begin{pmatrix} M \\ x0 \\ it \end{pmatrix}$$

$$\max_re(a, b, x0, E, h, \delta, \Delta x)_1 = 7.405$$

$$\max_re(a, b, x0, E, h, \delta, \Delta x)_2 = \begin{pmatrix} 0.057 \\ 0.147 \\ 0.289 \end{pmatrix}$$

$$\max_re(a, b, x0, E, h, \delta, \Delta x)_3 = 493$$

Визначимо оптимальні умови процесу градієнтним методом (з кроком h=1, точністю оптимізації E=0,001, приростом для розрахунку часткових похідних $\Delta x=10^{-4}$).

ORIGIN:= 1

$$x0 := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad a := \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad b := \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \Delta x := 10^{-4} \quad h := 1 \quad E := 0.00$$

$$y(x1, x2, x3) := 5.4 + 8.2 \cdot x1 + 5.8 \cdot x2 + 9.3 \cdot x3 - 86 \cdot x1^2 + 5.2 \cdot x1 \cdot x2 + 2.9 \cdot x1 \cdot x3 + 6.4 \cdot x2 \cdot x3 - 27 \cdot x2^2 - 18 \cdot x3^2$$

```
max_gr(a,b,x0,E,h,y,Δx) := if a_1 ≤ x0_1 ≤ b_1 ∧ a_2 ≤ x0_2 ≤ b_2 ∧ a_3 ≤ x0_3 ≤ b_3
    xm ← x0
    it ← 0
    M ← y(x0_1, x0_2, x0_3)
    h1 ← h
    res ← 0
    while res = 0
        x ← x0
        for i ∈ 1..3
            x_i ← x0_i + Δx
```

$$P \leftarrow \frac{y(x_1, x_2, x_3) - M}{\Delta x}$$

$$x_i \leftarrow x0_i$$

$$x1_i \leftarrow x0_i + h1 \cdot P$$

if $y(x1_1, x1_2, x1_3) > M$

$$xm_1 \leftarrow x1_1 \quad \text{if} \quad a_1 \le x1_1 \le b_1$$

$$xm_2 \leftarrow x1_2 \quad \text{if} \quad a_2 \le x1_2 \le b_2$$

$$xm_3 \leftarrow x1_3 \quad \text{if} \quad a_3 \le x1_3 \le b_3$$

$$xm_1 \leftarrow a_1 \quad \text{if} \quad x1_1 < a_1$$

$$xm_1 \leftarrow b_1 \quad \text{if} \quad x1_1 > b_1$$

$$xm_2 \leftarrow a_2 \quad \text{if} \quad x1_2 < a_2$$

$$xm_2 \leftarrow b_2 \quad \text{if} \quad x1_2 > b_2$$

$$xm_3 \leftarrow a_3 \quad \text{if} \quad x1_3 < a_3$$

$$xm_3 \leftarrow b_3 \quad \text{if} \quad x1_3 > b_3$$

$$M \leftarrow y(xm_1, xm_2, xm_3)$$

$$res \leftarrow 1 \quad \text{if} \quad ||xm - x0|| \le E$$

$$h1 \leftarrow h \quad \text{otherwise}$$

$$x0 \leftarrow xm$$

$$it \leftarrow it + 1$$

otherwise

$$res \leftarrow 1 \quad \text{if} \quad h1 \le E$$

$$h1 \leftarrow \frac{h1}{2}$$

$$\begin{pmatrix} M \\ x0 \\ it \end{pmatrix}$$

$$\text{max_gr}(a, b, x0, E, h, y, \Delta x)_1 = 7.405$$

$$\text{max_gr}(a, b, x0, E, h, y, \Delta x)_2 = \begin{pmatrix} 0.057 \\ 0.147 \\ 0.288 \end{pmatrix}$$

$$\text{max_gr}(a, b, x0, E, h, y, \Delta x)_3 = 13$$

Порівняємо отримані результати.

Таблиця 13.1

Результати оптимізації методом релаксації та градієнтним методом

Назва методу	x_1	x_2	x_3	$\max f(\bar{x})$	Кількість шагів в напрямку оптимуму
Метод релаксації	0.057	0.147	0.289	7.405	493
Градієнтний метод	0.057	0.147	0.288	7.405	13

Найменша кількість шагів в напрямку оптимуму спостерігається при застосуванні градієнтного методу, де пошук екстремального значення проводиться в напрямку найшвидшої зміни цільової функції.

В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм. Зробіть висновки щодо отриманих значень максимуму функції різними методами, їх ефективності та доцільності використання, а також особливостей застосування прийомів програмування в середовищі Mathcad.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №13

1) *Що таке градієнт і чим пояснюється його використання в теорії оптимізації?*
2) *В чому перевага методу градієнта в порівнянні з методом релаксації?*
3) *Які недоліки методів градієнта і релаксації?*
4) *Які умови завершення обчислень доцільно перевіряти в градієнтних методах?*

ЛІТЕРАТУРА

1. Бондарь, А. Г. Математическое моделирование в химической технологии [Текст] / А. Г. Бондарь.– К.: Вища школа, 1973. – 280 с.

2. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств [Текст] / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. – М.: Высшая школа,1991. – 400 с.

3. Кафаров, В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии [Текст] / В. В. Кафаров. – М.: Химия, 1995. – 448 с.

4. Закгейм, А. Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов [Текст] / А. Ю.Закгейм. – М.: Химия, 1982. – 288 с.

5. Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учеб. Пособие для вузов [Текст] / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – ИКЦ «Академкнига»,2006. – 416 с.

6. Статюха, Г. О. Вступ до планування оптимального експерименту [Текст]: навч. посіб. / Г. О. Статюха, Д.М. Складанний, О.С. Бондаренко. – К.: НТУУ «КПІ», 2011. – 124 с. – 300 пр. ISBN 978-966-622-408-1.

7. Банди, В. Методы оптимизации. Вводный курс [Текст] / В. Банди. – М.: Радио и связь,1988. – 125 с.

8. Ахназарова, С. Л., Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. Учеб. пособие [Текст] / С. Л. Ахназарова, В. В.Кафаров. 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Высш. шк, 1985. – 327 с.: ил.

9. Руководство пользователя Mathcad [Електрон. ресурс]. – Режим доступу: http://www.exponenta.ru/soft/Mathcad/Mathcad.asp

10. Руководство пользователя по базовой системе Statistics 20 [Електрон. ресурс]. – Режим доступу: http://www.exponenta.ru/soft/Statist/Statist.asp

ДОДАТКИ

Додаток А

Короткі відомості про середовище Mathcad

Mathcad – це інтегроване середовище для рішення різноманітних математичних задач. Основні функціональні компоненти Mathcad наведені на рис. А.1.

Mathcad має ієрархічну систему меню, що складається з головного меню і системи падаючих, спливаючих і контекстно-залежних меню (підменю). Після запуску система Mathcad готова до роботи.

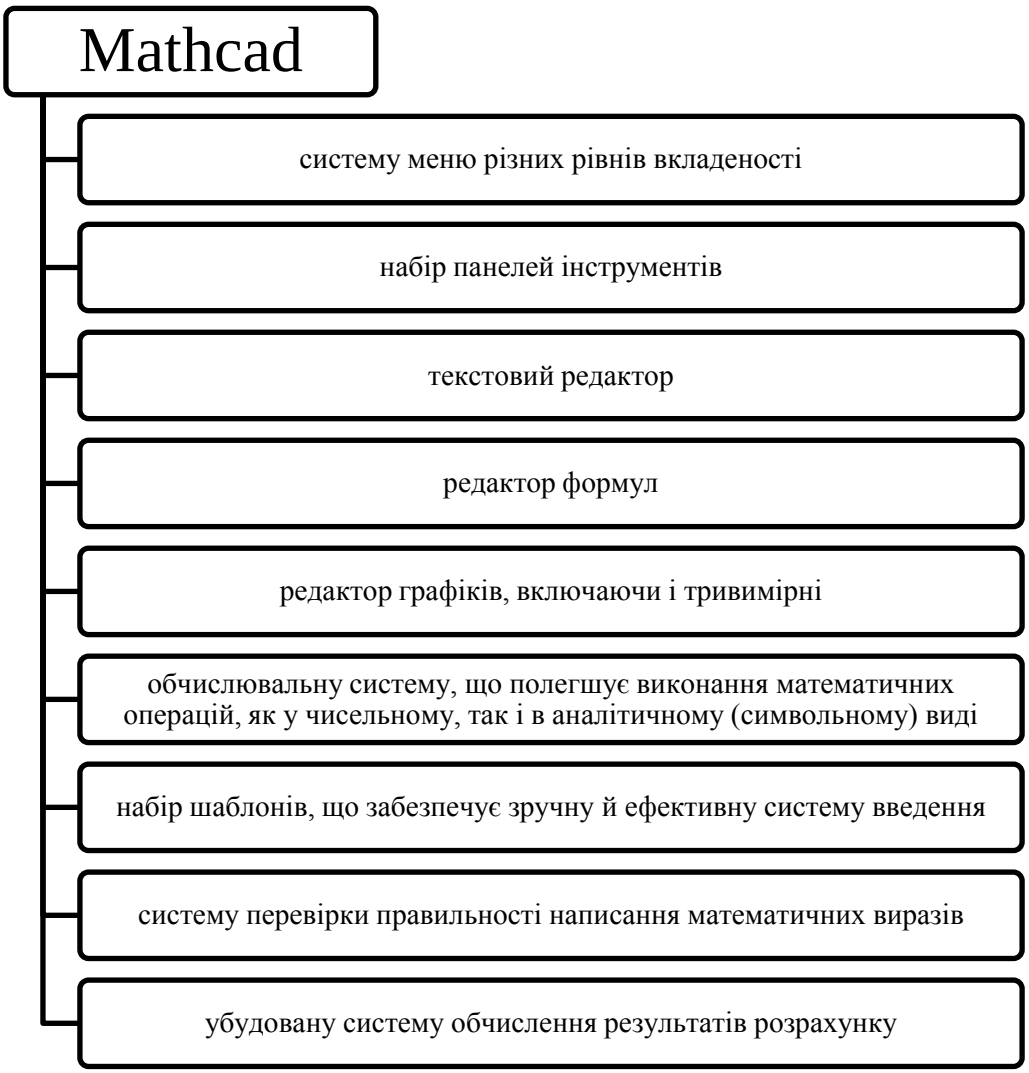


Рис. А.1 – Основні функціональні компоненти Mathcad

Кожний документ у Mathcad складається з окремих *блоків* різного типу: тексти (коментарі), формули, графіки, таблиці і т.д. Блок займає на робочому листі визначену область прямокутної форми. Розташування блоків у документі, крім текстового, має принципове значення. Виконання розрахунків у системі Mathcad відбувається з ліва на право, а потім згори до низу у суворій послідовності. Тому блоки не повинні перетинатися і мають бути розташовані у послідовності, яка необхідна для виконання розрахунків. При конструюванні блоків використовують три убудованих редактори - текстовий, формульний і графічний. Розрізняють:

1) *математичну область, яка* містить математичний вираз чи графік. Вона є робочою; це означає, що будь-яка зміна, зроблена в ній, відіб'ється на всіх інших математичних областях, розташованих нижче в робочому документі;
2) *текстова область* - це прямокутна область, зарезервована для розміщення тексту. Вона може мати довільні розміри і розташовуватися в будь-якім місці робочого документа. Текстові області використовуються для коротких пояснень. Текст у робочих документах може бути присутнім у двох формах: у виді текстових абзаців і текстових областей. Вибір придатного варіанта залежить від кількості тексту і від його бажаного представлення;
3) *текстовий абзац* – область, яка розташовується по всій ширині сторінки робочого документу і зарезервована для розміщення тексту

Алфавіт системи Mathcad містить: рядкові і прописні букви латинського алфавіту; рядкові і прописні букви грецького алфавіту; арабські цифри від 0 до 9; системні змінні; оператори; імена убудованих функцій; спецзнаки; рядкові і прописні букви російського алфавіту (при роботі з русифікованими документами).

До укрупнених елементів системи відносяться типи даних, оператори, функції користувача і керуючі структури. До типів даних

відносяться числові константи, звичайні і системні змінні, масиви (вектори і матриці) і дані файлового типу.

Для присвоєння значень змінним, константам та функціям у системі використовується символ := (оператор присвоєння). При цьому ліворуч від оператора присвоєння (:=) знаходиться вираз якому присвоюється значення, а праворуч – вираз, що треба присвоїти (наприклад, $x := 4$, $Y := x^2 + 3x + 5$). Для отримання результату розрахунку необхідно записати ім'я змінної чи функція та поставити знак = (дорівнює) після нього. Mathcad автоматично виконає розрахунок якщо ви клацнете мишею поза межами блоку або виберете команду *Розрахувати* на панелі керування.

Mathcad прочитує документ двічі, рухаючись щораз з ліва на право і зверху вниз. При першому проході виконуються всі дії, запропоновані глобальним оператором присвоювання ≡ (три риски). При другому виконуються всі дії, запропоновані локальним оператором присвоювання := (двокрапка + дорівнює), і відображаються необхідні результати обчислень.

При виникненні помилки, місце її можливого знаходження виділяється червоним кольором. Щоб дізнатися про характер помилки необхідно навести курсор миші на блок в якому вона виникла. При цьому з'явиться спливаюча підказка.

Кожен вираз має *точку прив'язки*. Mathcad використовує ці точки, щоб визначити порядок проходження виразів.

Далі пояснимо деякі визначення, що використовуються в середовищі Mathcad.

Операнд – число чи вираз, на яке діє оператор.

Функція - вираз, відповідно до якого проводяться деякі обчислення з його аргументами і визначається його числове значення. Функції в Mathcad можуть бути убудованими і визначеними користувачем.

Для того щоб визначити функцію, потрібно: ввести в робочий документ ім'я функції і ліву круглу дужку; ввести список аргументів, відокремлених один від одного комами, і закінчити його правою круглою дужкою; увести двокрапку, що приведе до появи знака присвоювання := і наступного за ним поля введення; надрукувати в полі введення (у правій частині) вираз, що відповідає даній функції.

Усі змінні, які використовуються у виразі, що записаний в полі введення, повинні бути визначені заздалегідь або входити в список аргументів. У іншому випадку змінні, що не мають значення, будуть відзначені на екрані дисплея червоним кольором.

Константами - називають пойменовані об'єкти, що зберігають деякі значення, які не можуть бути змінені. Числові константи задаються за допомогою арабських цифр, десяткової крапки (а не коми) і знака - (мінус).

Змінні є пойменованими об'єктами, що мають деяке значення, здатне змінюватися по ходу виконання програми.

Імена констант, змінних і інших об'єктів називають *ідентифікаторами*. Тип змінної визначається її значенням; змінні можуть бути *числовими, строковими, символьними* і т.д.

Ідентифікатори в системі Mathcad можуть мати практично будь-яку довжину, у них входять будь-які латинські і грецькі літери, а також цифри. Однак починатися ідентифікатор може тільки з літери і не повинний містити пробілів. Не можна використовувати для ідентифікаторів знаки операторів арифметичних дій. Рядкові і прописні літери в Mathcad розпізнаються як різні символи (наприклад, *x* та *X*). Ідентифікатори повинні бути унікальними, тобто не повинні повторюватись в межах одного документу. Mathcad містить також деякі системні змінні, що мають визначені системою початкові значення. Значення системних змінних можна при необхідності змінити шляхом присвоювання їм нових значень.

Оператори являють собою елементи мови, за допомогою яких можна створювати математичні вирази.

Робочі файли Mathcad мають розширення *.mcd і можуть бути відкриті тільки в середовищі Mathcad тієї версії, в якій були створені чи в новішій версії Mathcad. Для можливості відкриття вашого файлу у попередніх версіях Mathcad необхідно обрати пункт меню *File (Файл)* → *Save as… (Зберегти як…).* У діалоговому вікні що з'явится у полі *Save as type: (Тип файлу:)* вкажіть версію Mathcad в якій необходно буде відкрити файл (наприклад, *Mathcad 2000 Worksheet (*.mcd)*). Для можливості перегляду файлів, створених у середовищі Mathcad, на комп'ютері де Mathcad не встановлено, необхідно виконати дії описані вище, але у полі *Save as type: (Тип файлу:)* вказати *Rich Text Format File (*.rtf)*. Після цього файл можна переглядати у текстовому редакторі (наприклад, MS Word), але редагування файлу та зміни будуть неможливі. Тому перед цим треба обов'язково зберігати файл у форматі Mathcad при потребі подальшої роботи з ним.

У версії Mathcad 2000/2001 і вище було введено ряд нових функцій регресії:

- $expfit(VX, VY, Vg)$ - повертає вектор, що містить коефіцієнти $(a, b, c,)$ апроксимуючого виразу виду $a \cdot e^{(b \cdot x)+c}$, графік якого кращим чином наближається до точок, координати яких зберігаються у векторах VX та VY (вектор Vg містить перше наближене рішення);
- $lgsfit(VX, VY, Vg)$ - те ж, але для виразу $a/(1 + b \cdot e^{(-c \cdot x)})$;
- $logfit(VX, VY)$ - те ж, але для виразу $a \cdot \ln(x + b) + c$ (початкового наближення не);
- $medfit(VX, VY)$ - те ж, але для виразу $a + bx$ (початкового наближення не потрібно);

- $pwrfit(VX, VY, Vg)$ - те ж, але для виразу $a \cdot x^b + c$ (вектор Vg містить перше наближення до рішення);
- $sinfit(VX, VY, Vg)$ - те ж, але для виразу $a \cdot \sin(x + b) + c$.

Цілеспрямоване введення цих функцій викликає легкий сумнів. За допомогою алгоритму реалізації нелінійної регресії загального виду можна легко здійснити регресію будь-якого частинного виду, у тому числі і всіх тих видів, які реалізуються приведеними вище функціями. Неважко це зробити і за допомогою функції $Minerror$. Тим не менше якщо користувач потребує данні види регресії, то до його послуг тепер є і ряд функцій, які можна застосувати без «довгих роздумів».

Програмний блок в системі Mathcad являє собою самостійний модуль, який виділяється в тексті документу жирною вертикальною рискою. Модуль може себе вести як безіменна функція без параметрів та повертати результат (див. приклад обчислення квадратного кореня з числа 12). Програмний модуль може виконувати і роль тіла функції користувача з іменем та параметрами (див. приклад для обчислення функції FP).

ПРОГРАМНІ БЛОКИ

$x := 25$ Задане значення x

$\sqrt{x} = 5$ Обчислений квадратний корінь з x

$\left| \begin{array}{l} x \leftarrow 12 \\ \sqrt{x} \end{array} \right. = 3.464$ Локально задане x=12 і обчислений квадратний корінь з x=12

$x = 25$ За межами програмного блоку x зберегло значення 25

Приклад завдання функції звичним способом:

$$F(x, y, z) := \frac{x}{x + y \cdot z} + \frac{y}{x + y \cdot z} + \frac{z}{x + y \cdot z}$$

$F(2, 3, 5) = 0.588$ $F(1, 5, 3) = 0.563$

Програмним блоком:

$$FP(x,y,z) := \left| \begin{array}{l} a \leftarrow x + y \cdot z \\ \dfrac{x+y+z}{a} \end{array} \right.$$

$FP(2,3,5) = 0.588 \qquad FP(1,5,3) = 0.563$

Неважко помітити, що набір інструкцій для створення програмних модулів досить обмежений і містить наступні елементи наведені на рис. А.2.

Add line	•створює та при необхідності подовжує жирну вертикальну риску, праворуч від якої у місцях вводу виконується запис програмного блоку
←	•символ локального (в тілі модуля) присвоєння
if	•умовна інструкція
otherwise	•інструкція іншого вибору (зазвичай застосовується з if)
for	•інструкція задання циклу з фіксованим числом повторень
while	•інструкція задання циклу, який діє поки виконується деяка умова
break	•інструкція переривання
continue	•інструкція продовження
return	•інструкція повернення
on error	•інструкція обробки помилок

Рис.А.2 – Набір інструкцій для створення програмних модулів

Інструкція додавання ліній у модуль Add Line

Інструкція Add Line виконує функції розширення програмного блоку. Розширення фіксується подовженням вертикальної риси програмних блоків або їхнім деревоподібним розширенням. Завдяки цьому в принципі можна створювати як завгодно більші програми.

Оператор внутрішнього присвоювання

Оператор $\leftarrow$ виконує функції внутрішнього (локального) присвоювання. Наприклад, вираження $x \leftarrow 123$ привласнює змінної x значення 123. Локальний характер присвоювання означає, що таке значення змінної x зберігається тільки в тілі програмного модуля. За межами тіла програми значення змінної x може бути невизначеним або рівним значенню, що задається поза програмним блоком операторами локального $(:=)$ або глобального $(\equiv)$ присвоювання.

Примітка. Не варто плутати оператор внутрішнього присвоювання $\leftarrow$ з оператором символьного виводу $\rightarrow$, у якого стрілка спрямована в іншу сторону. Ці оператори вирішують зовсім різні завдання.

Умовна інструкція if

Інструкція if дозволяє будувати умовні вираження. Вона задається у вигляді:

Вираження *if* Умова

Якщо Умова виконується, то повертається значення Вираження, інакше - 0. Разом із цією інструкцією часто використаються інструкції переривання break й іншого вибору otherwise.

Інструкція організації циклу for

Інструкція for служить для організації циклів із заданим числом повторень. Вона записується у вигляді:

for Var $\in$ Nmin .. Nmax

Цей запис означає, що вираження, поміщене в розташоване нижче місце уведення, буде виконуватися для значень змінної Var, що міняються від Nmin до Nmax із кроком +1. Змінну лічильника Var можна використати у виразі, що виконується.

Інструкція організації циклу while

Інструкція while служить для організації циклів, що діють доти, поки виконується деяка умова. Вона записується у вигляді:

while Умова

В розташоване нижче місце уведення записується вираження, яке виконується.

Інструкція otherwise

Інструкція іншого вибору otherwise звичайно використається разом з інструкцією if. Це пояснює наступна програмна конструкція:

$$F(x) := \begin{cases} 1 \text{ if } x>0 \\ -1 \text{ otherwise} \end{cases}$$

Тобто функція F(x) повертає 1, якщо x>0 та -1 у всіх інших випадках.

Інструкція переривання break

Інструкція break викликає переривання виконання програми. Найчастіше ця інструкція використається разом з умовною інструкцією if й інструкціями циклів while й for, забезпечуючи перехід у кінець тіла циклу.

Інструкція continue

Інструкція continue використається для продовження роботи після переривання програми. Вона також найчастіше використається разом з інструкціями циклів while й for, забезпечуючи повернення в точку переривання й продовження обчислень.

Інструкція return

Особлива інструкція return перериває виконання програми й повертає значення операнда, що розташований слідом за нею. Наприклад, у наведеному нижче випадку буде повертатися значення 0 при $x < 0$.

return 0 if x<0

Інструкція on error і функція error

Інструкція on error дозволяє створювати процедури обробки помилок. Ця інструкція задається у вигляді:

Вираження_1 on error Вираження_2

Якщо при виконанні Вираження_1 виникає помилка, то виконується Вираження_2. Для обробки помилок корисна також функція error (S), що, будучи поміщеної в програмний модуль, при виникненні помилки виводить спливаючу підказку з повідомленням, що зберігається в символьній змінній S.

Зрозуміло, завдання, описані вище, можуть вирішуватися в системі Mathcad і без використання в явному виді програмних засобів. Однак ці засоби нерідко полегшують рішення складних завдань, особливо коли є опис їхньої програмної реалізації на якій-небудь мові програмування. У цьому випадку нескладно перевести реалізацію рішення завдання із цієї мови на мову програмування системи.

Взагалі треба відзначити, що проблема включення в документи Mathcad програмних блоків вирішені добірно й красиво - такі блоки часом просто прикрашають документи й дають можливість користуватися всіма способами не тільки математично орієнтованої вхідної мови Mathcad, але й класичного програмування.

Багато цікавих і повчальних прикладів завдання й застосування програмних модулів можна знайти в «швидких шпаргалках» (QuickSheets) центра ресурсів системи. Не можна не відзначити, що характер завдання програмних модулів в Mathcad досить удалий: модулі прекрасно вписуються в документи, виглядають просто й природно, чого не можна сказати про програми на звичайних мовах програмування.

У принципі в Mathcad 2001i/11 є можливість включення в систему функцій користувача, написаних мовою C або C++. Однак ситуація із цією можливістю дуже нагадує нашу крилату фразу «за що боролися, на те й напоролися», адже зміст розробки систем класу Mathcad і полягає в тім, щоб позбавити користувача від програмування на складних мовах високого рівня. У зв'язку із впровадженням у систему Mathcad основних програмних конструкцій потреба в програмуванні мовою C++ практично

відпала. Точніше, вона стала прерогативою «фанатів» системного програмування.

Нарешті, слід зазначити ще одну важливу можливість - застосування відкомпільованих додаткових бібліотек, що розширюють можливості ядра системи, а також спеціальних модулів, що виконуються, які обновляють версії системи. Їх можна одержати в розроблювача через Інтернет або електронну пошту. Ці модулі звичайно зберігаються в основній папці Mathcad і запускаються як самостійні програми. Після однократного виконання вони модифікують поточну версію Mathcad, перетворюючи її в чергову, могутнішу.

Аж до появи останніх версій системи Mathcad можливості програмування в них були вкрай обмеженими. Фактично система Mathcad допускає побудову лише лінійних програм, реалізуючи функціональне програмування, в основі якого лежить поняття функції. Функція *if* і ранжирувані змінних в окремих випадках могли замінити умовні вирази й цикли, але з істотними обмеженнями. Була відсутня можливість створення завершених програмних модулів.

Можливість завдання *програмних блоків (модулів)* з'явилася у версії Mathcad PLUS 6.0 й у розширеному варіанті підтримується у версіях Mathcad починаючи з 8.0/2000. Засоби програмування зосереджені в палітрі програмних елементів, показані на рис. А.3.

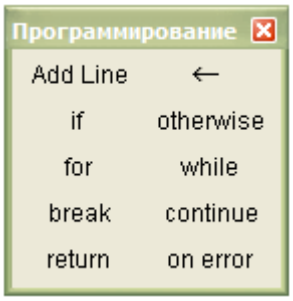


Рис.А.3 – Елементи для створення програмних модулів

Додаток Б

Короткі відомості про середовище STATISTICA

Система STATISTICA являє собою інтегровану систему статистичного аналізу та обробки даних. Вона складається з 5 компонентів:

1) електронних таблиць для введення і завдання вихідних даних, а також спеціальних таблиць для виведення результатів статистичного аналізу;

2) графічної системи візуалізації даних і результатів статистичного аналізу;

3) набору статистичних модулів, в яких зібрані групи логічно пов'язаних між собою статистичних процедур;

4) спеціального інструментарію для підготовки звітів;

5) вбудованих мов програмування, що дозволяють розширити стандартні можливості системи.

Процедури системи STATISTICA мають високу швидкості і точність розрахунків. Гнучка і потужна технологія доступу до даних дозволяє ефективно працювати як з таблицями даних на локальному диску, так із видаленими сховищами даних.

STATISTICA складається з набору модулів, у кожному з яких зібрані тематично пов’язані групи процедур. При перемиканні модулів можна або залишати відкритим тільки одне вікно в додатку STATISTICA, або всі визнані раніше модулі, оскільки кожен з них може виконуватися в окремому вікні як самостійний додаток Windows.

При використовуванні модулів STATISTICA як самостійних додатків в будь-який момент часу в будь-якому модулі міститься прямий доступ до «спільних» ресурсів (таблицям даних, мовам BASIK і SCL, графічним процедурам). При інсталяції системи програма установки **Setup** створює на робочому столі групу додатків під назвою STATISTICA і поміщає туди

значки вікна Перемикач модулів (піктограма STATISTICA– перша в групі), модулі Головні статистики і таблиці у деяких інших програм Help, Setup. Користувачу може здатися більш зручним запускати модулі, натискаючи на їх значки на робочому столі, замість того щоб користуватися вікном Перемикач модулів; тому користувач захоче створити додаткові піктограми для модулів, окрім тих, які будуть автоматично створені програмою установки **Setup**. Для того щоб створити ще один значок у даній групі, потрібно відповідати стандартній процедурі Windows вибрати пункт **Новий** в меню **Файл** у вікні Диспетчер програм та створити новий програмний елемент. В системі передбачена можливість настройки багатьох характеристик інтерфейсу програми у відповідності з запропонованими вимогами користувача. Можливо змінити процес запуску, відмінивши встановлений повно екранний режим, змінити стартової панелі інструментів, таблиць з даними та інші параметри.

Настройку спільних параметрів системи можливо змінити у будь-який момент роботи з програмою, наприклад, спільні аспекти поведінки програми, режим вода, вигляд вікна додатка. Ці параметри можливо змінити через меню Сервіс. При настройці користувацького інтерфейсу можливо використати різноманітні режими та умови роботи програми.

Для запуску програми STATISTICA (меню Windows «Пуск» або клацнути по відповідному ярлику на Робочому столі). За замовчуванням відкриється останній файл, з яким виконувалася робота в ході попереднього сеансу (якщо такий є) (рис.Б.1). Вгорі міститься заголовок, який вказує, якою модуль зараз відкрито. Далі розміщуються рядок меню і панель інструментів. Пункти меню **File - Файл**, **Edit – Редагування**, **View - Вид**, **Window – Вікно**. Вікно аналогічні пунктами в інших програмах. Пункт **Analysis - Аналіз** містить розділи статистичного аналізу, що входять у даний модуль, і перемикання на інші модулі **Other Statistics - Інші статистичні модулі.**

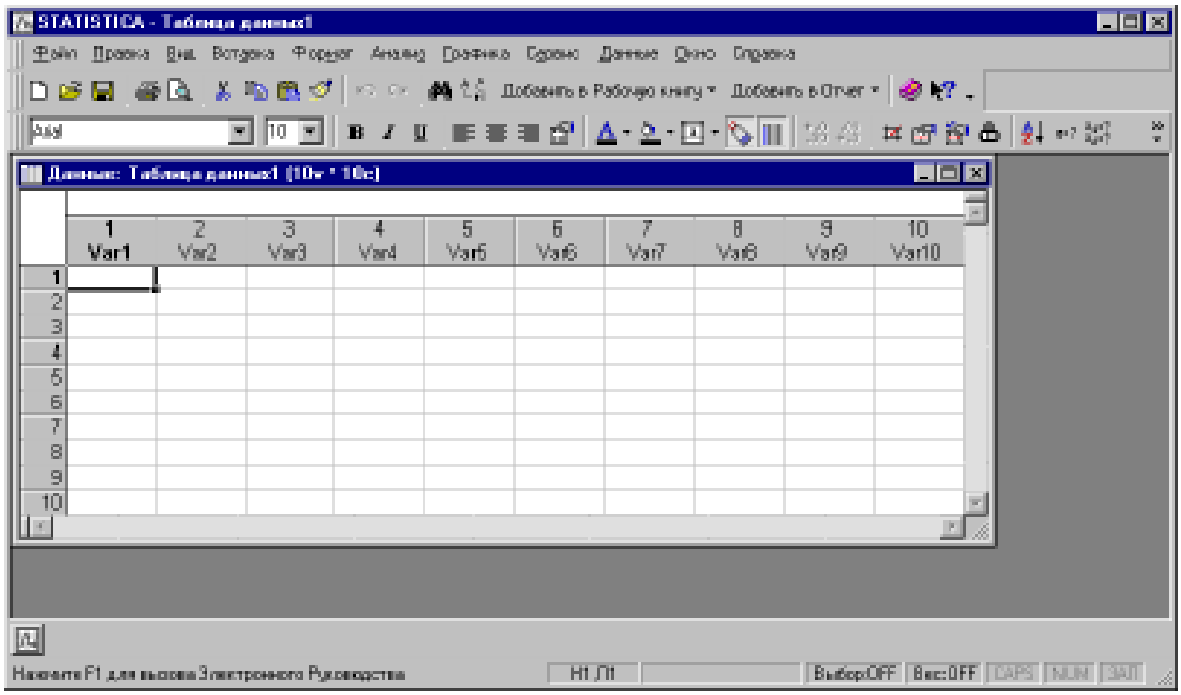


Рис. Б.1 – Робоче вікно STATISTICA

Розмір таблиці за умовчанням прийнятий 10 * 10 (10 змінних з іменами VAR1, VAR2, VAR3, ..., VAR10 і 10 пронумерованих випадків). Розмір таблиці (число рядків і стовпців) можна збільшувати і зменшувати. Стандартна процедура створення нової змінної полягає в наступному. Необхідно двічі натиснути лівою кнопкою миші по сірому полю праворуч від заголовка існуючої змінної. З'явиться діалогове вікно (рис. Б.2), Що пропонує додати змінні (**Add Variables**) або спостереження (**Add Cases**).

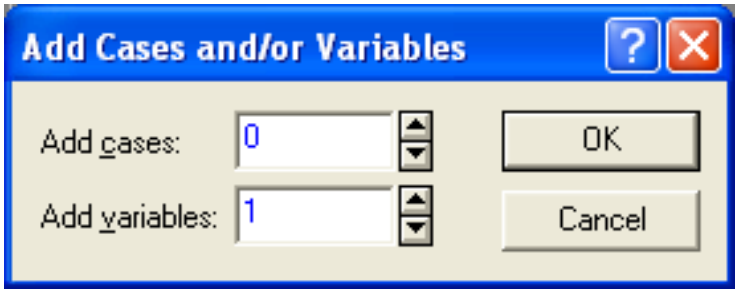


Рис. Б.2 – Вікно вибору параметрів створення змінної.

Можна задавати заголовок таблиці, імена змінних і випадків. В якості імен випадків можна використовувати або числа, або текст, або дату. У вікні специфікацій змінної можна змінити формат, ім'я змінної, ввести формулу для перерахунку її значень і т.д. Якщо текст в поле Long name починається з символу рівності (=), STATISTICA буде інтерпретувати його

як формулу (коментарі можуть слідувати за крапкою з комою (;)). Наприклад, можна ввести в полі Long name для першої змінної вираз = (v2 + v3 + v4) / 3 або = mean (v2: v4), тоді для кожного спостереження (рядки) електронної таблиці поточні значення цієї змінної заміняться на середнє значень другої, третьої та четвертої змінних.

Для збереження файлу використовують команду **Save – Сохранить** з меню **File – Файл.**

Додаток В

Статистичні критерії

Таблиця В.1

Процентні точки розподілення Стьюдента

f_0 \ q	10%	5%	2%	1%
1	6.31	12.71	31.82	63.66
2	2.92	4.30	6.96	9.92
3	2.35	3.18	4.54	5.84
4	2.13	2.78	3.75	4.60
5	2.02	2.57	3.36	4.03
6	1.94	2.45	3.14	3.71
7	1.89	2.36	3.00	3.50
8	1.86	2.31	2.90	3.36
9	1.83	2.26	2.82	3.25
10	1.81	2.23	2.76	3.17
11	1.80	2.20	2.72	3.11
12	1.78	2.18	2.68	3.05
13	1.77	2.16	2.65	3.01
14	1.76	2.14	2.62	2.98
15	1.76	2.13	2,60	2.95
16	1.75	2.12	2.58	2.92
17	1.74	2.11	2.57	2.90
18	1.73	2.10	2.55	2.88
19	1.73	2.09	2.54	2.86
20	1.72	2.09	2.53	2.85
21	1.72	2.08	2.52	2.83
22	1.72	2.07	2.51	2.82

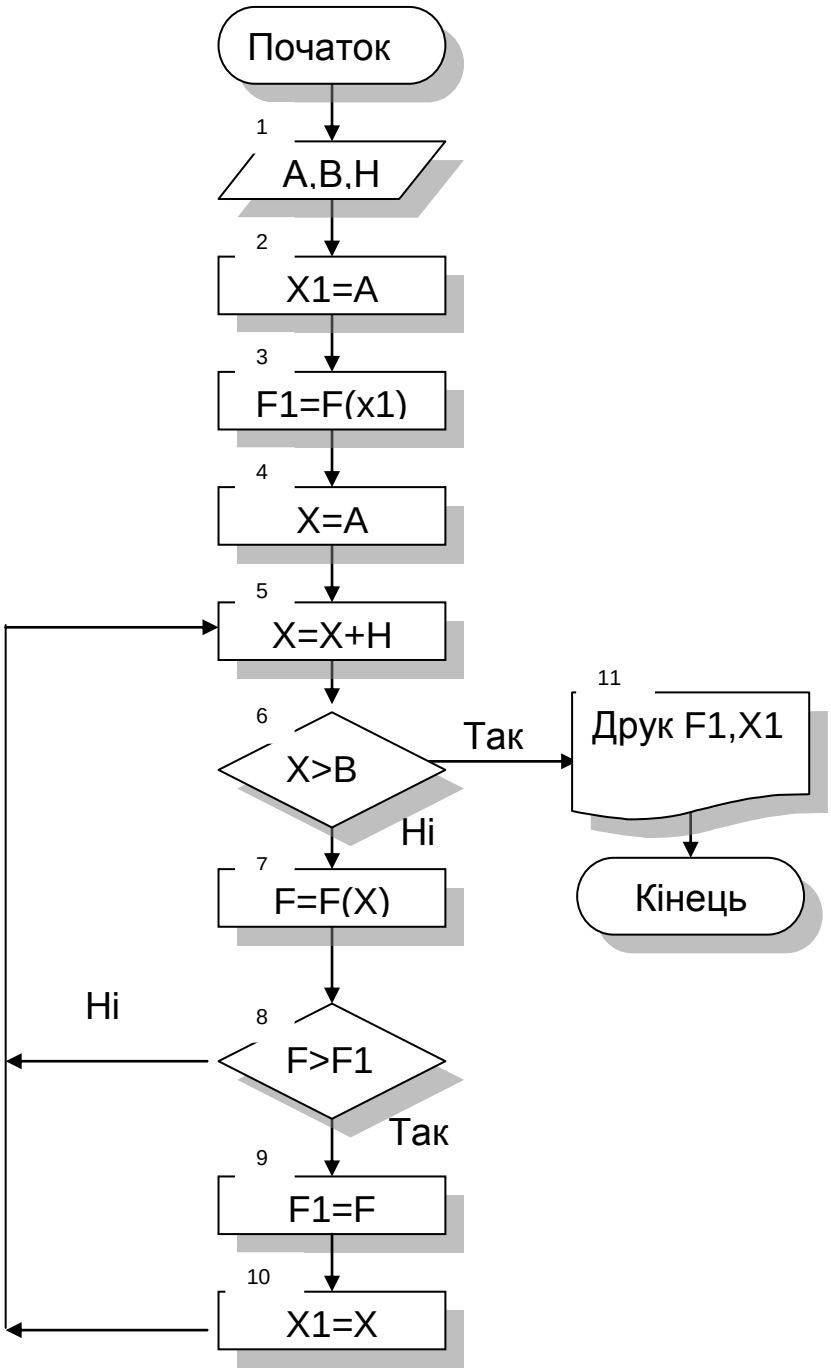
Таблиця В.2

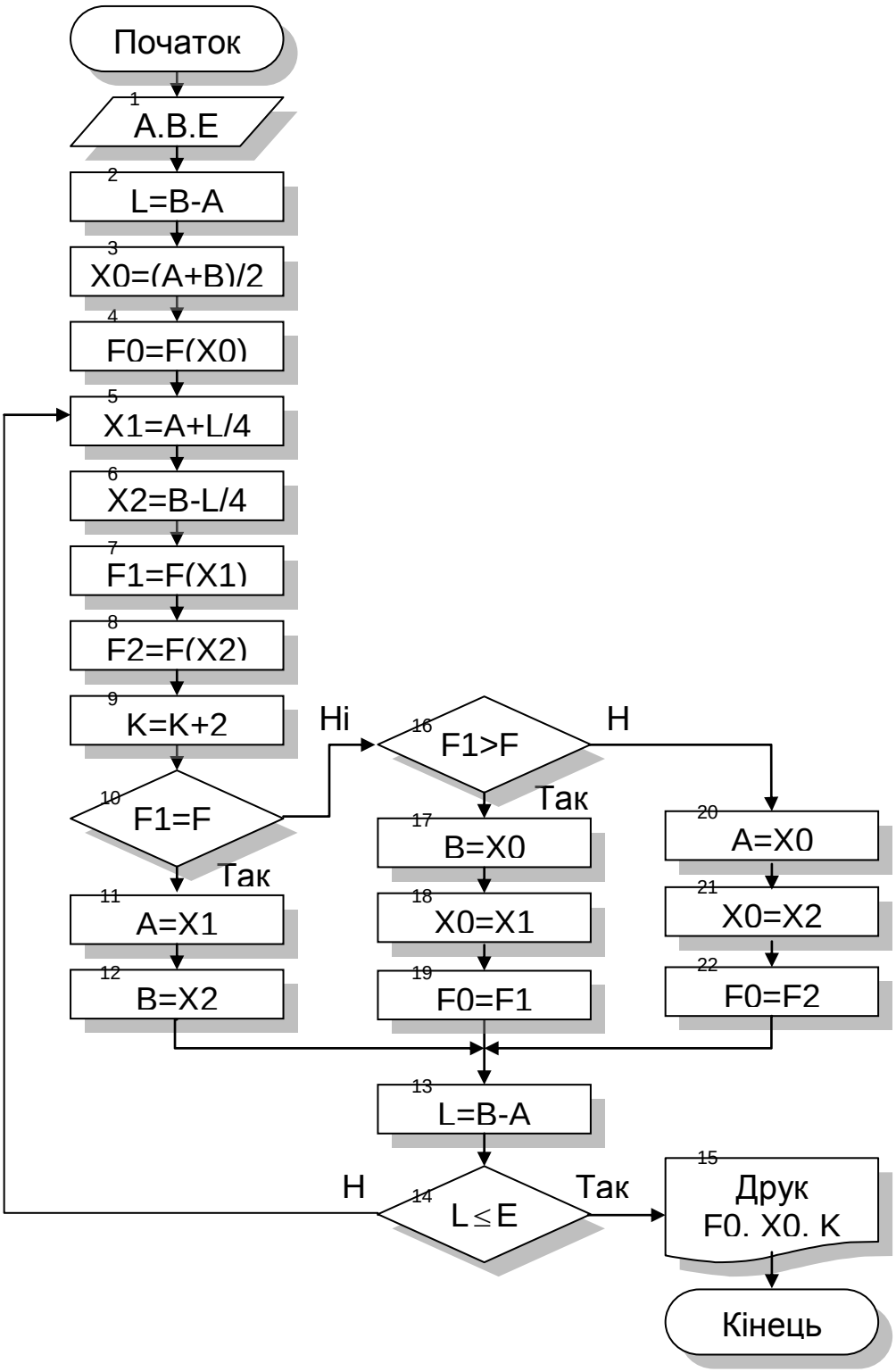
Критерій Фішера при *q=0.05*

f_2 \ f_1	1	2	3	4	5	6	8	12	24	∞
1	161.46	199.50	215.70	224.60	230.20	234.66	238.96	243.90	249.00	254.30
2	18.51	19.06	19.16	19.25	19.30	19.33	19,37	19.41	19.45	19.50
3	10.13	9.55	9.28	9.12	9.61	8.94	8.84	8.74	8.64	8.53
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.64	5.91	6.77	5.63
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.65	4.95	4.82	4.68	4.53	4.33
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.16	4.60	3.84	3.67
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.72	3.57	3.41	3.23
8	5.32	4.46	4.67	3.84	3.69	3.58	3.44	3.28	3.12	2.98
9	5.12	4.26	3.86	3.63	3.48	3.37	3.23	3.67	2.90	2.71
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.67	2.91	2.74	2.54
11	4.84	3.98	3.59	3.36	3.20	3.09	2.95	2.79	2.61	2.40
12	4.75	3.88	3.49	3.26	3.11	3.00	2.85	2.69	2.50	2.30
13	4.67	3.80	3.41	3.18	3.02	2.92	2.77	2.60	2.42	2.21
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.70	2.53	2.35	2.13

Додаток Г

Блок-схема алгоритму мінімізації функції f(x) методом сканування



Додаток Д

Блок-схема алгоритму мінімізації функції f(x) методом дихотомії