



Министерство образования и науки Российской Федерации

ФГБОУ ВПО "Тамбовский государственный технический университет"

КАРПУШКИН С.В.

ОСНОВЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ

*Утверждено Методическим советом ТГТУ в качестве учебного пособия
для студентов дневного и заочного отделения,
обучающихся по специальности*

*15.05.01 "Проектирование технологических машин и комплексов"
и направлению*

15.03.01 "Машиностроение"

Тамбов
2015

Рецензенты:

*Мариновская М.П. – к.т.н., ведущий инженер-конструктор
ОАО «ЗАВКОМ», г. Тамбов*

*Туголуков Е.Н. – д.т.н., профессор кафедры «Техника и технологии производства
нанопродуктов», ТГТУ*

**Утверждено Методическим советом ТГТУ
(протокол № 4 от 22.05.2015 г.)**

ОГЛАВЛЕНИЕ

1 ВВЕДЕНИЕ.....	5
1.1 Общая характеристика физического моделирования.....	5
1.2 Общая схема математического моделирования.....	6
2 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ МЕТОД МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	9
2.1 Сглаживание экспериментальных зависимостей.....	9
2.2 Порядок формирования математической модели.....	10
3 ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА.....	13
3.1 Алгебраический степенной полином как математическая модель объекта исследования.....	13
3.2 Полином регрессии и система условных уравнений.....	14
3.3 Проверка корректности проведения экспериментов.....	16
3.4 Проверка адекватности уравнения регрессии.....	18
3.5 Полный факторный эксперимент.....	20
3.6 Центральный композиционный план эксперимента.....	23
4 АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	26
4.1 Виды аналитических математических моделей.....	26
4.2 Уравнения основных химико-технологических процессов.....	27
4.3 Дополнительные соотношения аналитических математических моделей.....	31
4.4 Уравнения статики и динамики объектов химической технологии.....	32
5 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО–АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	37
5.1 Порядок составления экспериментально-аналитических математических моделей.....	37
5.2 Методика проведения экспериментов и обработки результатов.....	38
5.3 Область действия экспериментально-аналитических математических моделей.....	39
5.4 Основные проблемы, возникающие при разработке и использовании математических моделей.....	41
6 ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ.....	42
6.1 Методы решения нелинейных уравнений.....	42
6.2 Методы решения систем уравнений.....	45
6.3 Формулы численного интегрирования.....	48
6.4 Методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений.....	50
6.5 Методы решения дифференциальных уравнений в частных производных.....	53
6.6 Использование в математическом моделировании баз данных, баз знаний и экспертных оценок.....	56
7 ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ.....	57
<u>Лабораторная работа №1. Составление регрессионной математической модели по зависимости одной выходной характеристики объекта от одной входной.....</u>	<u>57</u>
<u>Лабораторная работа №2. Составление регрессионной математической модели с применением методики планирования эксперимента.....</u>	<u>59</u>
<u>Лабораторная работа №3. Составление аналитической математической модели</u>	

статистики объекта с сосредоточенными параметрами.....	62
<u>Лабораторная работа №4</u> . Составление экспериментально-аналитической математической модели кинетики объекта с сосредоточенными параметрами..	67
<u>Лабораторная работа №5</u> . Решение уравнений математических моделей в системе MathCAD.....	71
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	76
ЛИТЕРАТУРА.....	77
ПРИЛОЖЕНИЕ А Таблицы значений критериев Стьюдента, Кохрена и Фишера..	78
ПРИЛОЖЕНИЕ Б Зависимости теплофизических характеристик теплохладагентов от температуры.....	80

1 ВВЕДЕНИЕ

Модель – это упрощенная система, отражающая отдельные характеристики исследуемого объекта (процесса). Выбор характеристик определяется целью исследования. *Моделирование* – это изучение свойств исследуемого объекта (процесса) путем анализа соответствующих характеристик его модели. Различают два вида моделирования - физическое и математическое.

1.1 Общая характеристика физического моделирования

Физическое моделирование - это изучение того или иного явления на нем самом, путем воспроизведения его в уменьшенных масштабах и анализа влияния на него физических особенностей реализации и геометрических размеров.

Этот вид моделирования основан на применении принципа подобия объектов и процессов. Подобие объектов характеризуется постоянством отношения основных геометрических размеров, например, подобие двух горизонтальных цилиндрических емкостей (цистерн) определяется равенством: $D_1/D_2=L_1/L_2=h_1/h_2$, где D , L , h - диаметр, длина обечайки и высота эллиптической части боковой стенки. Подобие процессов характеризуется равенством значений безразмерных комплексов, называемых критериями подобия.

Связи между критериями подобия называют критериальными уравнениями. Например, одномерное установившееся движение жидкости характеризуется уравнением: $f(Fr, Eu, Re)=0$, где $Fr=w^2/g \cdot l$ - критерий Фруда (отношение силы инерции в потоке к силе тяжести), $Eu=\Delta p/\rho \cdot w^2$ - критерий Эйлера (отношение силы давления в потоке к силе инерции), $Re=w \cdot l \cdot \rho / \mu$ - критерий Рейнольдса (отношение силы инерции в потоке к силе трения), w - скорость потока, ρ, μ - плотность и динамическая вязкость жидкости, Δp - перепад давления; l - определяющий геометрический размер (например, диаметр трубы). Критериальное уравнение в общем виде можно получить двумя способами: преобразованием дифференциального уравнения процесса к безразмерному виду или путем анализа размерностей физических величин, оказывающих влияние на процесс (применяется в случаях, когда уравнение процесса неизвестно). Конкретный вид критериального уравнения может быть установлен только опытным путем в результате анализа результатов экспериментов на модельных установках. Целью экспериментов, как правило, является определение наиболее выгодных условий реализации процесса и перенос этих условий на промышленные объекты при соблюдении условий геометрического и физического подобия.

Таким образом, физическое моделирование сводится к воспроизведению постоянства определяющих критериев геометрического и физического подобия в модели и исследуемом объекте. Этот подход оправдан лишь при изучении сравнительно несложных процессов (гидродинамических или тепловых с одномерным потоком). При исследовании систем, характеризующихся комплексом гидродинамических, тепловых, массообменных и химических процессов (гетерогенная химическая реакция в трубчатом реакторе) физическое моделирование может

привести к большому набору критериев подобия, которые часто оказываются несовместимыми (равенство одних исключает равенство других). В настоящее время методы физического моделирования используются для нахождения доверительных интервалов изменения коэффициентов, входящих в уравнения математических моделей (например, констант скорости химических реакций), т.е. для оценки адекватности математических моделей объектам исследования.

1.2 Общая схема математического моделирования

Математическое моделирование - это представление закономерностей поведения объекта исследования в виде математических соотношений. Математической моделью называют систему уравнений и неравенств, которые включают наиболее значимые характеристики исследуемого объекта или процесса и упрощенно отражают взаимосвязи между ними. Математическая модель позволяет определить значения выходных и внутренних характеристик объекта или процесса по известным значениям входных характеристик с учетом возмущающих и управляющих воздействий без экспериментальных исследований (в том числе и при отсутствии самого объекта).

Общий вид математической модели: $\bar{y}=F(\bar{x},\bar{z},\bar{u})$, где $\bar{x}=(x_1,x_2,\dots,x_n)$ - входные параметры объекта исследования (независимые переменные), $\bar{y}=(y_1,y_2,\dots,y_m)$ - выходные параметры объекта (зависимые переменные), $\bar{z}=(z_1,z_2,\dots,z_k)$ - возмущающие воздействия, $\bar{u}=(u_1,u_2,\dots,u_l)$ - управляющие воздействия. Все величины, входящие в математические модели, имеют физические размерности.

Например, для кожухотрубчатого теплообменника *входными параметрами* могут быть требуемая тепловая нагрузка, виды теплоносителей, их начальные температуры; *выходными параметрами* - диаметр и длина корпуса, толщина стенки, число труб, конечные температуры теплоносителей; *возмущающими воздействиями* - наличие застойных зон, “проскока” теплоносителей, загрязнение поверхности теплообмена, *управлениями* - расходы теплоносителей.

Общая схема процесса математического моделирования:



Постановка задачи - это определение цели моделирования (например, прогноз поведения объекта в заданных условиях, поиск наиболее выгодных управляющих воздействий).

При *изучении объекта* выделяются происходящие в нем “элементарные” процессы (механические, гидромеханические, тепловые, массообменные, химические), наиболее существенные для целей моделирования. Какими-то процессами на этом этапе, как правило, пренебрегают, поэтому математические модели чаще всего являются моделями неполной аналогии.

Выбор вида *математического описания* “элементарных” процессов зависит от цели моделирования и представлений исследователя о характере изменения параметров объекта. Для описания процессов могут быть выбраны алгебраические уравнения и неравенства, дифференциальные уравнения (обыкновенные или в частных производных) и их системы.

Из уравнений “элементарных” процессов формируется *математическая модель объекта* как целого. Обычно модель объекта химической технологии включает следующие группы соотношений: 1) уравнения баланса масс и энергии, записанные с учетом гидродинамической структуры движения потоков; 2) уравнения “элементарных” процессов для локальных элементов потоков; 3) теоретические, полуэмпирические или эмпирические соотношения между параметрами различных “элементарных” процессов, например, зависимость коэффициента массопередачи от скоростей потоков фаз, зависимость теплоемкости раствора от его состава и т.п.; 4) объективно существующие ограничения на диапазон изменения параметров объекта (диапазон допустимых температур, давлений и т.п.).

Выбор метода решения зависит от вида соотношений модели (используются методы решения линейных, нелинейных, обыкновенных дифференциальных уравнений, уравнений в частных производных и их систем).

Решение математической модели - это процесс определения значений выходных характеристик объекта $y_i, i=1,2,\dots,m$ при заданных значениях входных характеристик $x_j, j=1,2,\dots,n$, известном уровне помех $z_p, p=1,2,\dots,k$ и управляющих воздействиях $u_q, q=1,2,\dots,l$.

Анализ результатов решения математической модели проводится с целью определения степени ее адекватности объекту исследования. Если объект не существует в природе, результаты оцениваются с точки зрения их соответствия физическому смыслу характеристик объекта (значения характеристик не должны быть явно недостоверными). Если же подобный объект существует, то результаты решения модели должны соответствовать результатам экспериментов на объекте. Анализ результатов может выявить необходимость изменения условий реализации некоторых предыдущих этапов моделирования и их повторного выполнения.

Преимущества математических моделей перед физическими: а) существенно меньшие затраты времени на моделирование; б) не требуют затрат материалов, сырья, энергоресурсов; в) за одинаковое время позволяют провести много большее количество «экспериментов» (пуск, изменения режима работы, останов модельной установки требуют значительных затрат времени); г) пригодны для описания целого класса подобных объектов. *Недостаток*: учесть и описать математически все явления, присущие объекту, невозможно.

Области практического использования математических моделей:

- изучение закономерностей протекания природных и производственных процессов (научные исследования);
- воспроизведение условий протекания процессов по известным результатам (косвенные измерения, медицинская диагностика);
- прогнозирование хода процессов и их результатов (автоматическое управление, метеорология, социология, военное дело);

- решение оптимизационных задач (оптимальное управление, оптимальное планирование, оптимальное конструирование).

Часто целью математического моделирования является определение оптимальной конструкции и режима функционирования исследуемого объекта. Задачи определения оптимальных значений характеристик режима функционирования или (и) конструктивных характеристик объектов химической технологии формулируются следующим образом:

найти такие значения $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$, что функция $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ достигает экстремума и одновременно выполняются условия:

$$g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq 0, i=1, 2, \dots, m$$

$$h_k(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, k=1, 2, \dots, p.$$

Параметры объекта x_1, x_2, \dots, x_n , определяющие качество его функционирования, могут быть входными, выходными, внутренними характеристиками объекта. Целевая функция $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ в подобных задачах, как правило, записывается неявно: для определения ее значения необходимо решить математическую модель объекта при фиксированных значениях x_1, x_2, \dots, x_n . Таким образом, в постановках задач оптимизации реальных промышленных объектов их математические модели используются для записи закономерностей функционирования объектов, вычисления целевых функций (критериев оптимальности), а также в качестве ограничений на изменение параметров объектов.

Методы математического моделирования:

1. Экспериментальный (метод “черного ящика”) - составление математического описания объекта путем обработки зависимостей его выходных характеристик от входных, получаемых при проведении экспериментов (применяется для существующих объектов в случаях, когда не удается сформировать математические соотношения, описывающие их свойства или в этом нет смысла).
2. Аналитический - составление математического описания объекта только на основе имеющихся представлений о протекающих в нем процессах и их взаимосвязи (характерно для проектируемых объектов).
3. Экспериментально-аналитический - выбор аналитических зависимостей, характеризующих процессы, которые протекают в объекте, и определение значений входящих в них констант с учетом результатов экспериментов на объекте или его физической модели (экспериментальное определение констант частично компенсирует неполную аналогию математического описания объекту).

2 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ МЕТОД МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Получаемые с помощью экспериментального метода математические соотношения устанавливают связь между изменяемыми случайно или целенаправленно входными характеристиками объекта и изменением его выходных характеристик без учета сущности явлений, происходящих в объекте.

Подготовка эксперимента на самом объекте или его физической модели включает следующие операции:

- выявление входных характеристик, подлежащих изменению (они должны надежно контролироваться), диапазонов их варьирования;
- определение выходных характеристик (их значения должны достаточно точно измеряться), способов их измерения;
- оценка точности эксперимента.

Различают пассивный и активный эксперимент. Пассивный эксперимент - это сбор статистического материала в режиме нормальной промышленной эксплуатации объекта. При активном эксперименте ставится серия опытов с поочередным варьированием каждой независимой переменной, либо с одновременным изменением группы независимых переменных для установления силы взаимодействия параметров объекта и сокращения необходимого числа опытов. В пассивном эксперименте чаще снимаются статические характеристики объекта (поведение в установившемся режиме), в активном - динамические (переходные процессы).

Результатом экспериментов являются зависимости вида $\bar{Y} = \Phi(\bar{X})$, представляемые в виде таблиц. В простейшем случае одной входной и одной выход-

ной переменной - $y_i = f(x_i)$:

x	x_0	x_1	x_2	...	x_N
y	y_0	y_1	y_2	...	y_N

2.1 Сглаживание экспериментальных зависимостей

В случаях, когда наблюдается существенный разброс значений выходных параметров, обусловленный влиянием помех, осуществляется операция их сглаживания. Один из популярных методов сглаживания - *метод скользящего среднего*, используемый для обработки экспериментальных зависимостей, снятых при *равноотстоящих* значениях входных параметров. Для зависимости $y_i = f(x_i)$, $i=1,2,\dots,n$, снятой при $\Delta x = x_i - x_{i-1} = const$, $i=1,2,\dots,N$ сглаженное значение y_i^* получается усреднением значений y_i , соответствующих значениям x_i , которые попадают в интервал усреднения $\delta x = \Delta x \cdot z$. Целое число z всегда выбирается чет-

ным, поэтому основное соотношение метода имеет вид: $y_{i+\frac{z}{2}}^* = \frac{1}{z+1} \sum_{j=0}^z y_{i+j}$,

например, при $z=2$: $y_{i+1}^* = \frac{1}{3} \sum_{j=0}^2 y_{i+j} = \frac{1}{3}(y_i + y_{i+1} + y_{i+2})$. Использование этого метода приводит к потере $z/2$ экспериментальных точек в начале диапазона $x \in [x_0; x_n]$ и стольких же в конце.

Пример. Сгладить зависимость:

x	0	1	2	3	4	5	6	7	8
y	2	5	3	3	2	1	1	4	2

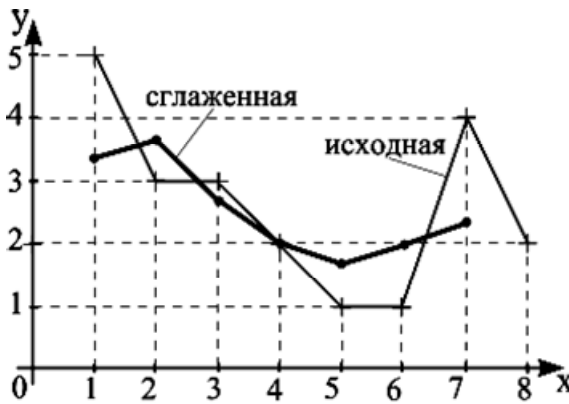


Рисунок 2.1 – Сглаживание экспериментальной зависимости

Потеряны две точки: $(x_0, y_0), (x_8, y_8)$, см. рис. 2.1.

$z=2$:

$$y_1^* = \frac{1}{3}(y_0 + y_1 + y_2) = \frac{1}{3}(2 + 5 + 3) = 3,333;$$

$$y_2^* = \frac{1}{3}(y_1 + y_2 + y_3) = \frac{1}{3}(5 + 3 + 3) = 3,667;$$

$$y_3^* = \frac{1}{3}(3 + 3 + 2) = 2,667; y_4^* = \frac{1}{3}(3 + 2 + 1) = 2;$$

$$y_5^* = \frac{1}{3}(2 + 1 + 1) = 1,667; y_6^* = \frac{1}{3}(1 + 1 + 4) = 2;$$

$$y_7^* = \frac{1}{3}(1 + 4 + 2) = 2,333;$$

2.2 Порядок формирования математической модели

Соотношения математической модели получаются в результате обработки зависимостей вида $\bar{Y} = \Phi(\bar{X})$, методами регрессионного анализа. Регрессионный анализ изучает методы формирования аналитических функций, называемых уравнениями регрессии, которые соответствуют экспериментальным зависимостям, а также методы оценки степени этого соответствия. В подавляющем большинстве случаев уравнения регрессии получают в результате аппроксимации экспериментальных зависимостей.

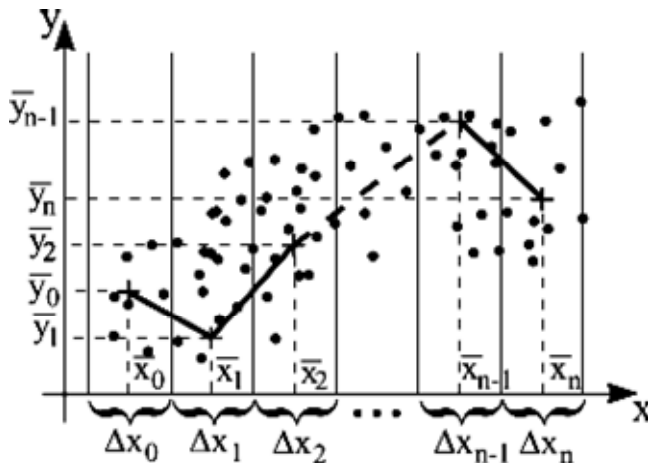


Рисунок 2.2 – Эмпирическая линия регрессии

При изучении зависимости одной выходной характеристики объекта исследования от одной входной $y_i = f(x_i)$, $i=0, 1, \dots, N$ выполняют следующие операции:

1. Построение так называемой эмпирической линии регрессии, см. рис. 2.2. Для этого:
 - а) весь диапазон изменения входной переменной $[x_0, x_N]$ разбивают на равные интервалы Δx_i , $i = 0, 1, \dots, n$;
 - б) все точки (x_{ij}, y_{ij}) , $j=0, 1, \dots, k_i$, попавшие в интервал Δx_i , относят к его

середине \bar{x}_i , а соответствующее ей значение \bar{y}_i , определяют усреднением значений y_{ij} для всех точек интервала, чаще всего $\bar{y}_i = \frac{1}{1+k_i} \sum_{j=0}^{k_i} y_{ij}$, т.е. \bar{y}_i - среднее арифметическое значений $y_{ij}, j = 0, 1, \dots, k_i$.

в) точки $(\bar{x}_i, \bar{y}_i), i = 0, 1, \dots, n$ соединяют отрезками прямой, т.е. осуществляют кусочно-линейную интерполяцию зависимости $\bar{y}_i = \psi(\bar{x}_i), i = 0, 1, \dots, n$.

2. Формирование многочлена $P_m(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_m\varphi_m(x)$, такого что среднеквадратичное отклонение $P_m(x)$ от эмпирической линии регрессии

$\delta = \sqrt{\frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^n [P_m(\bar{x}_i) - \bar{y}_i]^2}$ достигает минимально возможного значения. Порядок m

многочлена и вид элементарных функций $\varphi_j(x), j = 0, 1, \dots, m$ подбираются с учетом характера эмпирической линии регрессии. В качестве $\varphi_j(x)$ наиболее часто используются $x^j, e^{jx}, \sin(jx)$. Значения коэффициентов многочлена a_0, a_1, \dots, a_m могут быть определены методом наименьших квадратов, а при выборе $\varphi_j(x) = x^j, j = 0, 1, \dots, m$ - и методом ортогональных полиномов. Можно также осуществить поиск минимума функции

$$R(a_0, a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=0}^n (a_0\varphi_0(\bar{x}_i) + \dots + a_m\varphi_m(\bar{x}_i) - \bar{y}_i)^2$$

одним из методов поиска минимума функций многих переменных без ограничений (покоординатного спуска, наискорейшего спуска, многогранника). Функция $R(a_0, a_1, \dots, a_m)$ принимает неотрицательные значения при любых значениях аргументов и, следовательно, имеет хотя бы один минимум. Эта функция более простая и более гладкая, чем зависимость $\delta(a_0, a_1, \dots, a_m)$, а точки их минимумов совпадают.

3. Выявление степени соответствия полученного в результате уравнения регрессии $y = P_m(x)$ исходной экспериментальной зависимости $y_i = f(x_i), i = 0, 1, \dots, N$. Довольно популярным способом решения этой проблемы является вычисление

значения критерия Фишера: $F = \frac{s_{\text{ост}}^2}{s_{\text{воспр}}^2}$, где $s_{\text{ост}}^2 = \frac{l \cdot \sum_{i=0}^n [P_m(\bar{x}_i) - \bar{y}_i]^2}{n - m}$ - остаточная

дисперсия, $s_{\text{воспр}}^2 = \frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=1}^l (y_{ij} - \bar{y}_i)^2}{(n+1) \cdot (l-1)}$ - дисперсия воспроизводимости, l - число «параллельных опытов» (произвольное, равное для каждого интервала Δx_i , число точек (x_{ij}, y_{ij})).

В справочниках приводятся минимально допустимые значения критерия Фишера $F_p(f_1, f_2)$, где $f_1 = n - m, f_2 = l - 1$ - числа степеней свободы, p - уровень значимости - число, полученное вычитанием из единицы значения вероятности того, что выполняется условие $P_m(\bar{x}_i) - p \leq \bar{y}_i \leq P_m(\bar{x}_i) + p, i = 0, 1, \dots, n$ (чаще всего используется $p = 0.05$, т.е. вероятность выполнения условия составляет 0.95).

Уравнение регрессии тем эффективнее, чем больше полученное значение F превышает $F_p(f_1, f_2)$. Если полученное значение F окажется меньше минимально допустимого, необходимо изменить условия формирования уравнения регрессии:

- а) число интервалов Δx_i ;
- б) способ усреднения значений y_{ij} , принадлежащих каждому интервалу Δx_i ;
- в) порядок m многочлена $P_m(x)$;
- г) вид элементарных функций $\varphi_j(x)$, $j=0, 1, \dots, m$.

Можно также изменить число «параллельных опытов» l и уровень значимости p .

В случае, когда число измерений N невелико, эмпирическую линию регрессии получают кусочно-линейной интерполяцией всего множества точек (x_i, y_i) , $i=0, 1, \dots, N$, а значение критерия Фишера вычисляют следующим образом:

$$F = \frac{s_y^2}{s_{\text{ост}}^2}, \text{ где } s_y^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N (y_i - \bar{y})^2 - \text{дисперсия относительно } \bar{y} = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N y_i, \text{ т.е.}$$

$$\text{среднего арифметического значений } y_i, i = 0, 1, \dots, N, s_{\text{ост}}^2 = \frac{1}{N-n} \sum_{i=0}^N [P_m(x_i) - y_i]^2 -$$

остаточная дисперсия. Числа степеней свободы: $f_1 = N$, $f_2 = N - m$.

Значение s_y^2 характеризует степень рассеяния точек y_i , $i = 0, 1, \dots, N$ от их среднего арифметического (от прямой $y = \bar{y}$), а значение $s_{\text{ост}}^2$ - от соответствующих значений $P_m(x_i)$, $i=0, 1, \dots, N$ (от кривой $y = P_m(x)$). Т.е. в данном случае критерий Фишера показывает, во сколько раз рассеяние выходной характеристики объекта моделирования относительно полученного уравнения регрессии меньше рассеяния относительно среднего арифметического значения этой характеристики.

Математическая модель объекта, составленная экспериментальным методом, может включать несколько уравнений регрессии, составленных по снятым в ходе экспериментов зависимостям различных выходных переменных от одной или нескольких входных.

Недостатки уравнений регрессии: 1) ограниченная область применения (только для конкретного объекта и только в тех диапазонах изменения входных характеристик, где проводились эксперименты); 2) сложность формирования и оценки адекватности при изучении зависимости нескольких выходных характеристик объекта от нескольких входных.

3 ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Планирование эксперимента – это методика проведения и обработки результатов эксперимента, позволяющая получить корректную математическую зависимость *одного выходного* параметра исследуемого объекта от *нескольких входных* при минимальном числе опытов. Входные параметры x_1, x_2, \dots, x_m называются *факторами эксперимента*. Выходной параметр y называется *откликом объекта*.

Например, для исследования эффективности теплоотдачи газового котла можно выбрать четыре фактора: x_1 – давление пара, x_2 – его расход, x_3 – площадь поверхности теплообмена между продуктами сгорания топлива и паром, x_4 – вид топлива. Каждый фактор имеет практически допустимый диапазон значений, например, давление пара не должно превосходить давления его насыщения при указанной температуре.

При планировании эксперимента внутри диапазона допустимых изменений значения каждого фактора (от $x_{i \min}$ до $x_{i \max}$, $i = 1, 2, 3, 4$) необходимо выбрать ряд промежуточных значений, например, девять возможных значений каждого фактора, обозначив их номерами от $i1$ (для $x_{i \min}$) до $i9$ (для $x_{i \max}$). При каждом опыте значения разных факторов сочетаются случайным образом. Запланируем 50 опытов, при этом сочетания значений факторов для каждого опыта зададим случайным образом, и получим так называемую таблицу планирования эксперимента:

№ п/п	x_1	x_2	x_3	x_4	y
1	x_{18}	x_{22}	x_{33}	x_{47}	y_1
2	x_{11}	x_{29}	x_{34}	x_{44}	y_2
...	
50	x_{17}	x_{23}	x_{36}	x_{45}	y_{50}

Далее назначается период времени экспериментальной работы котла по режиму каждой строки таблицы, например, одна неделя. В течение этого периода фиксируется теплоотдача котла и усредненные за этот период ее показатели заносятся в таблицу в виде экспериментального значения величины y : y_i , $i = 1, \dots, 50$. Эту табличную, аналитически неизвестную зависимость между переменной y и переменными x_1, x_2, x_3, x_4 необходимо представить в виде математической модели, т.е. уравнения, которое "достаточно точно" согласовывало бы расчётные и табличные значения отклика объекта y .

3.1 Алгебраический степенной полином как математическая модель объекта исследования

Практика обработки экспериментальных данных показала, что результаты эксперимента в виде табличной функции в большинстве случаев с достаточной точностью приближаются так называемым полным кубическим полиномом:

$$y(x_1, x_2, \dots, x_m) = b_0 + \sum_{i=1}^m b_i \cdot x_i + \sum_{i=1}^{m-1} b_{i,i+1} \cdot x_i \cdot x_{i+1} + \sum_{i=1}^{m-2} b_{i,i+1,i+2} \cdot x_i \cdot x_{i+1} \cdot x_{i+2} + \sum_{i=1}^m b_{ii} \cdot x_i^2 + \sum_{i=1}^m b_{iii} \cdot x_i^3.$$

Часто третья степень полинома не только достаточна, но и избыточна, т.е. степень и количество членов полинома можно и уменьшить без существенной потери точности. Поэтому при построении и выборе аппроксимирующего полинома строят *систему альтернативных уравнений* из полного кубического полинома и его частей. Сравнивая степени соответствия этих уравнений таблице экспериментальных данных, выбирают наиболее приемлемое.

В качестве примера такого подхода рассмотрим кубическое уравнение для 3-х факторной задачи регрессии. Полный кубический трехфакторный полином будет иметь следующий вид: $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2 + b_{111}x_1^3 + b_{222}x_2^3 + b_{333}x_3^3$. Этот полином будет первым альтернативным уравнением регрессии.

Далее приведем альтернативные уравнения в виде частей этого полинома различных степеней. Линейное уравнение: $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_5x_5$. Неполное квадратичное уравнение, содержащее линейную часть и парные сочетания факторов: $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3$. Неполное кубическое уравнение, содержащее линейную часть, парные и тройное сочетания факторов: $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3$. Пятое и последнее уравнение – полный полином второй степени $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2$.

В этой системе из пяти альтернативных уравнений обычно удается найти приемлемое уравнение регрессии.

Замечание. Построение уравнений регрессии именно такой структуры – это **рекомендация**. Одинаково "правомочна" любая другая форма уравнений.

В уравнениях регрессии неизвестными являются значения коэффициентов ***b*** (т.к. значения факторов и откликов известны из таблицы экспериментальных данных). Для нахождения значения каждого коэффициента ***b*** необходима одна строка таблицы экспериментальных данных, т.е. при десяти факторах и недельной продолжительности одного опыта построение полного кубического регрессионного полинома займет более 20 лет. Поэтому на практике всегда стремятся максимально укоротить полином регрессии.

Следовательно, по результатам эксперимента будет сформирована *приближенная* модель в условиях недостатка информации об изучаемом объекте.

3.2 Полином регрессии и система условных уравнений

Процедура обработки экспериментальных данных начинается с подстановки в выбранное уравнение регрессии значений факторов x_{kn} в соответствии со строками таблицы данных, где n – номер строки таблицы, k – номер фактора. В результате будет сформирована система уравнений, каждое из которых соответствует одной строке таблицы экспериментальных данных.

Например, если таблицу данных с двумя факторами x_1 и x_2 при числе строк $N=7$ решено приблизить уравнением $b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + b_{11} \cdot x_1^2 + b_{22} \cdot x_2^2 = y$, то сформированная система уравнений будет следующей:

$$\begin{aligned} b_0 + b_1 x_{11} + b_2 x_{21} + b_{12} x_{11} x_{21} + b_{11} x_{11} x_{11} + b_{22} x_{21} x_{21} &= y_1; \\ b_0 + b_1 x_{12} + b_2 x_{22} + b_{12} x_{12} x_{22} + b_{11} x_{12} x_{12} + b_{22} x_{22} x_{22} &= y_2; \\ &\dots\dots\dots \\ b_0 + b_1 x_{17} + b_2 x_{27} + b_{12} x_{17} x_{27} + b_{11} x_{17} x_{17} + b_{22} x_{27} x_{27} &= y_7. \end{aligned}$$

Здесь индексы при коэффициентах b соответствуют комбинации взаимодействующих факторов.

Однако, при воздействии на объект исследования факторами x , наличие и значение которых определяется экспериментатором, значение отклика y формируется как за счет факторов x , так и за счет неучтенных в эксперименте факторов w (т.н. шума).

Если многократно повторять наблюдения, задавая **одинаковые** значение факторов $x_{1n}, x_{2n}, \dots, x_{kn}$ для одной и той же n -ой строки таблицы экспериментальных данных, значения откликов при этом из-за наличия шума будут разными, т.е. значение ошибки наблюдения при повторных опытах не будет одинаковым.

В связи со случайным характером отклика y левая и правая часть полученной выше системы уравнений неравны, система является несовместной, т.е. не существует такой комбинации неизвестных коэффициентов b , которая отвечала бы всем уравнениям системы. Поэтому такие системы носят название системы *условных* уравнений.

Представим эту систему в другом виде

$$\begin{aligned} y_1 - (b_0 + b_1 x_{11} + b_2 x_{21} + b_{12} x_{11} x_{21} + b_{11} x_{11} x_{11} + b_{22} x_{21} x_{21}) &= e_1; \\ y_2 - (b_0 + b_1 x_{12} + b_2 x_{22} + b_{12} x_{12} x_{22} + b_{11} x_{12} x_{12} + b_{22} x_{22} x_{22}) &= e_2; \\ &\dots\dots\dots \\ y_7 - (b_0 + b_1 x_{17} + b_2 x_{27} + b_{12} x_{17} x_{27} + b_{11} x_{17} x_{17} + b_{22} x_{27} x_{27}) &= e_7, \end{aligned}$$

где $e_n, n = 1, \dots, 7$ – разности между левыми и правыми частями исходных уравнений. Эту невязку можно трактовать как отклонения расчетного значения отклика от экспериментального. Суммарной характеристикой этих отклонений является *остаточная сумма* SUM_{ost} :

$$SUM_{ost} = \sum_{n=1}^N (y_n - yr_n)^2 = \sum_{n=1}^N e_n^2,$$

где $yr_n = b_0 + b_1 x_{1n} + b_2 x_{2n} + b_{12} x_{1n} x_{2n} + b_{11} x_{1n} x_{1n} + b_{22} x_{2n} x_{2n}, n = 1, 2, \dots, N$ – расчетные значения отклика.

Величина SUM_{ost} позволяет сформулировать понятие *наилучшего* решения системы условных уравнений, которое минимизирует остаточную сумму. Такой подход называется *методом наименьших квадратов*. В точке минимума функции SUM_{ost} ее производные $\partial SUM_{ost} / \partial b_j$ равны нулю. Дифференцируя функцию $SUM_{ost}(b)$ по всем коэффициентам уравнения регрессии и приравнявая производные нулю, получим систему *нормальных* уравнений, которая имеет единственное решение, минимизирующее SUM_{ost} .

Нахождение вектора коэффициентов b , т.е. формирование уравнения регрессии, составляет первую часть процедуры регрессионного анализа. Далее сле-

дует оценить его адекватность функции истинного отклика, т.е. точность, с которой уравнение регрессии приближает таблицу экспериментальных данных.

Нахождению коэффициентов уравнения регрессии должна предшествовать процедура проверки корректности проведения экспериментов.

3.3 Проверка корректности проведения экспериментов

Реальное количество факторов, влияющих на состояние и функционирование сложных промышленных объектов, практически не поддается определению, однако в модель объекта вводится ограниченное количество факторов, оказывающих, по мнению исследователя, существенное влияние на объект. Чаще всего это вынужденная мера – для упрощения реализации эксперимента и процесса обработки его результатов. Таким образом, с одной стороны, исследователь не включает часть известных ему факторов в эксперимент, а с другой – всегда существуют факторы, о которых он не знает, например, изменение химического состава сырья, ошибки измерения и т.д.

Следовательно, принятая модель объекта по факторам практически всегда является неполной, а реальное поведение объекта складывается под влиянием всех факторов – и включенных в эксперимент, и не включенных, и известных экспериментатору, и неизвестных. Тогда значение отклика

$$y = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_m, w_1, w_2, \dots, w_k) = \varphi(\mathbf{x}) + \delta(\mathbf{w}),$$

где $\varphi(\mathbf{x})$ – функция истинного отклика, отражающая влияние включенных в модель факторов; $w_j, j = 1, \dots, k$ – неучтенные факторы; $\delta(\mathbf{w})$ – функция неучтенных факторов (шума) или просто *шум*. Неизвестное влияние шума делает отклик объекта *y* случайной величиной. Поэтому обработка экспериментальных данных осуществляется с применением аппарата математической статистики, которая любой объект реальности моделирует как *случайную величину* – массив численных данных, называемый *генеральной совокупностью*.

Оперировать с данными всей совокупности часто невозможно, поэтому их заменяют *выборками* (ряд значений данной случайной величины, извлеченных из генеральной совокупности случайным образом). Представительная выборка обладает такими же свойствами, что и генеральная совокупность, т.е. является как бы ее "мини-моделью". Именно выборки являются объектами работы с данной случайной величиной.

Полученные в опыте значения случайной величины непредсказуемы, но не произвольны: они имеют определенный *диапазон* и *массив допустимых значений*. Характеристикой случайной величины x является *математическое ожидание*, которое обозначается как $M\{x\}$. Для выборки эквивалентной характеристикой является *выборочное среднее*, которое является статистической оценкой математического ожидания:

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^n x_i / n,$$

где n – количество элементов в выборке (объем выборки).

Еще одной характеристикой случайной величины является рассеяние отклонений ее текущих значений от центра, т.е. разностей $(x_i - M\{x\})$ для генеральной совокупности и $(x_i - \bar{x})$ для выборок. Коллективной оценкой этих разностей для всего массива значений является **дисперсия**, которая для дискретной случайной величины равна

$$\sigma^2 = D\{x\} = \sum_{i=1}^n (x_i - M\{x\})^2 / n \text{ (для генеральной совокупности)}$$

$$S^2 = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 / n \text{ (для выборки).}$$

Замечание. Величины $M\{x\}$ и σ^2 являются константами как однозначные характеристики всего массива данных, а \bar{x} и S^2 – случайными величинами в связи со случайным характером выборки.

Показателем ошибочности конкретного опыта в ходе эксперимента может служить величина его отклонения от других наблюдений. Сомнительными могут быть крайние отклонения от среднего – как в ту, так и в другую сторону. Тогда для крайнего элемента (x) выборки рабочей статистикой будет значение

$$t_{\text{раб}} = |x - \bar{x}| / S^2,$$

которое называется максимальным относительным отклонением. Значение x отбрасывается как грубо ошибочное при условии

$$|x - \bar{x}| / S^2 > t_{1-p},$$

где t_{1-p} – значение критерия ошибочности, в качестве которого на практике используется значение квантиля распределения Стьюдента при данном объеме выборки для уровня доверительной вероятности p (даются в справочниках в виде таблиц).

После исключения аномального значения статистические характеристики данной выборки пересчитываются для нового объема и новый крайний элемент подвергается новой проверке.

Ранее отмечалось, что в качестве j -го значения отклика объекта исследования следует брать среднее значение серии опытов

$$\bar{y}_j = \frac{1}{l_j} \cdot \sum_{i=1}^{l_j} y_{ij},$$

где l_j – число опытов по определению j -го значения отклика, y_{ij} – значение отклика в i -м опыте. *Дисперсию воспроизводимости* при определении j -го значения отклика можно оценить значением

$$S_j^2 = \frac{1}{l_j - 1} \cdot \sum_{i=1}^{l_j} (y_{ij} - \bar{y}_j)^2.$$

Наличие значений S_j^2 дает возможность проверить соблюдение условия применимости процедуры регрессионного анализа: равенства дисперсий всех значений отклика. Проверка выполнения этого условия осуществляется с помощью критерия Кохрена:

$$G_p = \frac{\max_j \{S_j^2\}}{\sum_{j=1}^n S_j^2},$$

где n – число строк в таблице экспериментальных данных.

Расчетное значение критерия Кохрена G_p сравнивается с табличным G_T для выбранного уровня доверительной вероятности (обычно 0.95) и числа степеней свободы

$$f = \frac{1}{n} \cdot \sum_{j=1}^n l_j - 1.$$

Если $G_p \leq G_T$, то опыты воспроизводимы (гипотеза о равенстве дисперсий воспроизводимости не отвергается). В противном случае следует попытаться добиться выполнения условия воспроизводимости путем выявления и устранения источников нестабильности откликов объекта исследования, например, использовать более точные средства и методы измерений. Иногда бывает достаточно повторить неудавшуюся серию опытов.

3.4 Проверка адекватности уравнения регрессии

Эту проверку можно осуществить лишь в том случае, когда число опытов n превосходит число определяемых коэффициентов уравнения регрессии $(k+1)$ хотя бы на 1.

Для определения степени соответствия регрессионного уравнения отклику объекта исследования можно вычислить коэффициент корреляции между ними:

$$r(\mathbf{y}, \mathbf{y}\mathbf{r}) = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}) \cdot (y_{r_i} - \bar{y}_r)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_{r_i} - \bar{y}_r)^2}},$$

где \bar{y} , \bar{y}_r – средние арифметические значения в эксперименте и по расчету. Величина $r(\mathbf{y}, \mathbf{y}\mathbf{r})$ могут изменяться в пределах $[-1, 1]$ и характеризует как наличие, так и силу стохастической связи между \mathbf{y} и $\mathbf{y}\mathbf{r}$: чем больше абсолютная величина коэффициента корреляции, тем сильнее корреляция (степень соответствия) между \mathbf{x} и \mathbf{y} . При $|r(\mathbf{y}, \mathbf{y}\mathbf{r})| > 0,8$ можно считать, что степень соответствия достаточна.

Замечания. 1. Процедуре получения уравнения регрессии обычно предшествует вычисление коэффициентов корреляции между факторами. При $|r(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_m)| > 0.95$ любой из двух анализируемых факторов (\mathbf{x}_k или \mathbf{x}_m) можно исключить из рассмотрения как не содержащий дополнительной информации об объекте. Исключают обычно тот фактор, который труднее измерить, или тот, физический смысл которого менее ясен.

2. Коэффициент корреляции характеризует не всякую зависимость, а **только линейную**, т.е. вероятность того, что при возрастании одной случайной величины другая имеет тенденцию возрастать (или убывать) по линейному закону.

Для универсальной оценки силы стохастической связи между y и yr используются две дисперсии: дисперсия воспроизводимости определения всех значений отклика объекта исследования, входящих в таблицу экспериментальных данных

$$S_{\{y\}}^2 = \frac{1}{n} \cdot \sum_{j=1}^n S_j^2$$

(среднее арифметическое дисперсий всех значений отклика) и остаточная дисперсия уравнения регрессии (характеристика рассеивания наблюдений относительно оценки математической модели объекта исследования)

$$S_{\text{ост}}^2 = \text{SUM}_{\text{ост}} / (n - k + 1) = \frac{1}{n - k + 1} \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - yr_i)^2,$$

где $k + 1$ – количество коэффициентов b в уравнении регрессии. Число степеней свободы дисперсии воспроизводимости равно сумме чисел степеней свободы дисперсий всех откликов

$$f_{\{y\}} = \sum_{j=1}^n (l_j - 1),$$

а число степеней свободы остаточной дисперсии $f_{\text{ост}} = n - k + 1$.

Поскольку коэффициенты полинома регрессии вычислены по результатам эксперимента, а эти результаты являются случайными величинами, то случайными величинами являются и сами коэффициенты b . Предполагается, что оценки дисперсий всех коэффициентов равны друг другу и определяются по формуле:

$$S_{\{b\}}^2 = \frac{S_{\{y\}}^2}{n}.$$

Для выявления значимости коэффициентов полинома регрессии для каждого из них рассчитывается значение критерия Стьюдента:

$$t_p = \frac{|b|}{\sqrt{S_{\{b\}}^2}},$$

которое сравнивается с табличным значением $t_{\text{таб}}$ для выбранного уровня доверительной вероятности (обычно 0.95) и числа степеней свободы $f_{\{y\}}$. Если $t_p < t_{\text{таб}}$, то соответствующий коэффициент полинома регрессии может быть приравнен нулю, т.е. соответствующее слагаемое может быть исключено из полинома, а значения оставшихся коэффициентов необходимо определить заново.

После получения окончательного вида полинома регрессии проверяется степень его адекватности объекту исследования: проверяется, значимо ли статистически различие между $S_{\{y\}}^2$ и $S_{\text{ост}}^2$. Эта значимость проверяется по критерию Фишера: ошибка уравнения регрессии признается значимой, если

$$F = S_{\text{ост}}^2 / S_{\{y\}}^2 > F_{1-p},$$

где F_{1-p} – табличное значение квантиля распределения Фишера при принятой доверительной вероятности p и степенях свободы $f_{\{y\}}$ и $f_{\text{ост}}$.

Замечание: при использовании эмпирической линии регрессии критерий Фишера рассчитывается как величина, обратная значению F .

Для моделирования промышленных объектов при $p = 0.95$ и $n = 50$ критической границей доверительного интервала ориентировочно можно считать $F_{1-p} = 1.5$: если отношение дисперсий не превосходит 1.5, то они статистически неразличимы, т.е. их можно считать находящимися в одном доверительном интервале, а полином регрессии – адекватным функции истинного отклика $\varphi(x)$. Факт статистической незначимости различия между $S_{\{y\}}^2$ и $S_{\text{ост}}^2$ является **абсолютным** показателем точности найденного уравнения регрессии, т.е. того факта, что найденное уравнение следует "принять в эксплуатацию". Если же отношение дисперсий превосходит 1.5, уравнение регрессии имеет ошибку и необходимо взвесить – приемлем ли уровень этой ошибки или нужно искать другое уравнение.

Таким образом, процедура оценки статистической корректности результатов эксперимента и уравнения регрессии предусматривает:

- вычисление значений коэффициентов корреляции между каждой парой факторов и исключение из рассмотрения факторов, не содержащих дополнительной информации об объекте исследования;
- предварительная обработка экспериментальных данных;
- проверка условия воспроизводимости опытов путем вычисления значения критерия Кохрена
- получение уравнения регрессии выбранного вида;
- проверка значимости коэффициентов уравнения регрессии по критерию Стьюдента, исключение из уравнения незначимых коэффициентов;
- определение уровня стохастической связи между результатами эксперимента и уравнением регрессии путем вычисления коэффициента корреляции ($|r(\mathbf{y}, \mathbf{y}\mathbf{r})| > 0,8$);
- проверка адекватности уравнения регрессии объекту исследования путем вычисления значения критерия Фишера и сравнения с табличным значением.

3.5 Полный факторный эксперимент

При планировании эксперимента значения факторов кодируются путем линейного преобразования координат факторного пространства с переносом начала координат в нулевую точку и приведением интервалов варьирования факторов к отрезкам $[-1; +1]$:

$$c_i = \frac{2 \cdot (x_i - x_i^0)}{x_i^{\max} - x_i^{\min}},$$

где c_i – кодированное значение i -го фактора (безразмерная величина);

x_i – натуральное значение i -го фактора;

x_i^0 – натуральное значение i -го фактора в середине интервала его варьирования;

x_i^{\max}, x_i^{\min} – границы интервала варьирования i -го фактора.

Расположение интервалов варьирования кодированных факторов при $m = 2$ (квадрат) и $m = 3$ (куб) показано на рис. 3.1. Номерами обозначены граничные точки факторного пространства. По аналогичному принципу располагаются экспериментальные области факторного пространства точки при $m > 3$.

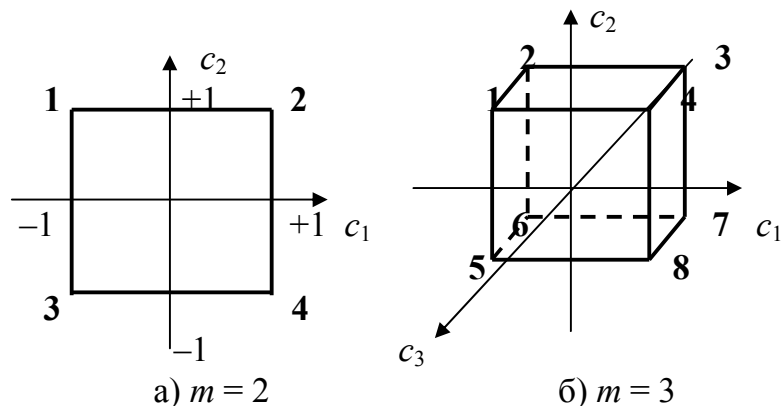


Рисунок 3.1 – Области факторного пространства

Первый этап планирования эксперимента (получение линейного уравнения регрессии) предусматривает два уровня варьирования каждого фактора, т.е. $n = 2^m$. **Полным факторным экспериментом** (ПФЭ) называется эксперимент, в котором реализуются все возможные сочетания выбранных уровней факторов. В таблице 3.1 приведены условия ПФЭ типа 2^m при двух факторах, в таблице 3.2 – при трех. Эти таблицы называются матрицами планирования эксперимента, при их заполнении значения уровней факторов обычно обозначают только знаками, а цифру 1 опускают.

Таблица 3.1 – Матрица планирования ПФЭ 2^2

Номер опыта	c_1	c_2	y
1	+	+	y_1
2	+	-	y_2
3	-	+	y_3
4	-	-	y_4

Таблица 3.2 – Матрица планирования ПФЭ 2^3

Номер опыта	c_1	c_2	c_3	y
1	+	+	+	y_1
2	+	-	+	y_2
3	-	+	+	y_3
4	-	-	+	y_4
5	+	+	-	y_5
6	+	-	-	y_6
7	-	+	-	y_7
8	-	-	-	y_8

При $m = 2$ все возможные комбинации уровней факторов легко найти перебором, а с ростом числа факторов используют следующий прием, основанный на переходе от матрицы меньшей размерности к матрице большей: исходный план вначале записывается для одного уровня нового фактора, а затем повторяется для другого (см. табл. 3.1, 3.2).

Свойства ПФЭ типа 2^m :

1) симметричность относительно центра эксперимента, т.е. алгебраическая сумма элементов вектора-столбца каждого фактора равна нулю – $\sum_{j=1}^n c_{ij} = 0$;

2) "условие нормировки" – сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу опытов, т.е. $\sum_{j=1}^n c_{ij}^2 = n$ (следствие того, что значения факторов в матрице планирования задаются как +1 и –1);

3) ортогональность матрицы планирования, т.е. сумма почленных произведений любых двух ее векторов-столбцов равна нулю – $\sum_{j=1}^n c_{ij} \cdot c_{kj} = 0, j \neq k$. Свойство ортогональности позволяет получать независимые оценки коэффициентов уравнения регрессии, т.е. замена нулем любого из них не изменит оценок остальных коэффициентов;

4) "ротатабельность" матрицы планирования, т.е. ее вектора-строки формируются так, что соответствующие экспериментальные точки находятся на равных расстояниях от центра эксперимента и точность предсказаний значений отклика объекта исследования для всех точек одинакова.

Выполнение этих условий обеспечивает минимальную дисперсию коэффициентов полинома регрессии, для расчета значений которых выведены следующие соотношения:

- свободный член – $b_0 = \frac{1}{n} \cdot \sum_{j=1}^n y_j$;

- коэффициенты при одиночных факторах – $b_i = \frac{1}{n} \cdot \sum_{j=1}^n y_j \cdot c_{ij}$;

- коэффициенты при парах факторов – $b_{ik} = \frac{1}{n} \cdot \sum_{j=1}^n y_j \cdot c_{ij} \cdot c_{kj}$ и т.д.

Для оценки точности ПФЭ для каждого сочетания уровней факторов (для каждой j -й строки матрицы планирования) проводят l_j опытов. В результате получают l_j значений исследуемого отклика, которые затем усредняются:

$$\bar{y}_j = \frac{1}{l_j} \cdot \sum_{k=1}^{l_j} y_{jk}.$$

При этом опыты для определения значений y_{jk} проводят не под-

ряд, а обходят все строки матрицы планирования в первой серии опытов, затем во второй, и так далее. Для уменьшения влияния внешней среды и неконтролируемых факторов внутри каждой серии строки матрицы планирования обходят случайным образом – *рандомизируют* последовательность опытов с применением генератора случайных чисел. Например, в случае постановки двух серий опытов для ПФЭ типа 2^3 могут быть использованы такие последовательности: 4, 2, 3, 7, 8, 1, 5, 6 (1-я серия) и 2, 4, 6, 8, 5, 7, 3, 1 (2-я серия).

По окончании проведения всех серий измерений всех значений y_{jk} проверяют воспроизводимость опытов с применением критерия Кохрена. Затем определяют значения коэффициентов уравнения регрессии и проверяется гипотеза их статистической значимости (отличия от нуля). При этом учитывают, что благодаря одинаковой удаленности всех экспериментальных точек, соответствующих строкам матрицы планирования, от центра эксперимента, оценки всех коэффициентов

уравнения регрессии независимо от их величины вычисляются с одинаковой погрешностью (при выполнении условия воспроизводимости опытов).

Замечание. Необходимо помнить, что незначимость коэффициента может быть обусловлена неверным выбором интервала варьирования фактора. Поэтому рекомендуется расширить интервал варьирования и провести новый эксперимент.

Заключительным этапом обработки данных ПФЭ является проверка адекватности полученного уравнения регрессии с использованием критерия Фишера. Как правило, вначале проверяют адекватность линейного уравнения регрессии. Если предположение об адекватности подтверждается, то это уравнение фиксируется как окончательное, а если отклоняется – добавляют слагаемые взаимодействия факторов и вновь проверяют гипотезу, и так до тех пор, пока существуют степени свободы (число коэффициентов уравнения меньше числа опытов). Если в результате уравнение все же оказалась неадекватным, значит его форма выбрана неудачно и при данном уровне шума и классе точности измерительных приборов.

Для записи уравнения регрессии *в реальных физических величинах* производят обратный переход от стандартизированного масштаба факторов к натуральному: $x_i = x_i^0 + 0.5 \cdot c_i \cdot (x_i^{\max} - x_i^{\min})$, после чего записывают окончательный вид уравнения.

3.6 Центральный композиционный план эксперимента

В результате выполнения и обработки результатов ПФЭ получается уравнение регрессии в виде неполного квадратичного полинома, который содержит линейную часть и сочетания факторов, и, как правило, не имеет выраженного экстремума. Если целью эксперимента является *определение значений факторов, соответствующих экстремуму поверхности отклика объекта* следует формировать центральный композиционный план эксперимента, например, ортогональный центральный композиционный план (ОЦКП), позволяющий получить уравнение регрессии в виде полного квадратичного полинома.

В ОЦКП к опытам ПФЭ добавляются опыты в так называемых "звездных точках" и в центре плана. Число опытов $n = n_0 + 2 \cdot m + 1$, где n_0 – число опытов исходного ПФЭ (2^m), $2 \cdot m$ – это число опытов в "звездных" точках, имеющих координаты: $(\pm\alpha, 0, \dots, 0)$, $(0, \pm\alpha, 0, \dots, 0)$, ..., $(0, \dots, 0, \pm\alpha)$, где α – величина "звездного плеча". Заключительный опыт ставится в центре плана – в точке с координатами $(0, 0, \dots, 0)$. Иллюстрации ОЦКП для $m = 2$ и $m = 3$ представлены на рис. 3.2.

Выполнение условия ортогональности плана $\sum_{j=1}^n c_{ij} = 0$ для векторов столбцов матрицы планирования, соответствующих квадратам факторов требует преобразования их элементов: замены значений c_{ij}^2 на $c_{ij}^2 - a$, причем значение a можно определить из условия ортогональности $\sum_{j=1}^n (c_{ij}^2 - a) = \sum_{j=1}^n c_{ij}^2 - N \cdot a = 0$, т.е.

$$a = \frac{1}{N} \cdot \sum_{j=1}^n c_{ij}^2.$$

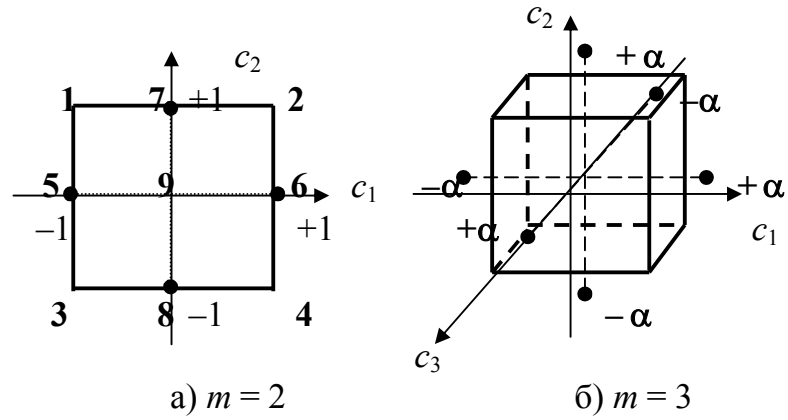


Рисунок 4.2 – Иллюстрации ОЦКП ("звездные" точки помечены жирными точками)

В общем случае матрица ОЦКП для трех факторов имеет вид:

	№ опыта	c_1	c_2	c_3	$c_1 \cdot c_2$	$c_1 \cdot c_3$	$c_2 \cdot c_3$	$c_1 \cdot c_2 \cdot c_3$	$c_1^2 - a$	$c_2^2 - a$	$c_3^2 - a$	y
Точки ПФЭ 2^3	1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	$1 - a$	$1 - a$	$1 - a$	y_1
	2	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	$1 - a$	$1 - a$	$1 - a$	y_2
	3	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	$1 - a$	$1 - a$	$1 - a$	y_3
	4	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	$1 - a$	$1 - a$	$1 - a$	y_4
	5	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	$1 - a$	$1 - a$	$1 - a$	y_5
	6	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	$1 - a$	$1 - a$	$1 - a$	y_6
	7	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	$1 - a$	$1 - a$	$1 - a$	y_7
	8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	$1 - a$	$1 - a$	$1 - a$	y_8
"Звездные" точки	9	$-\alpha$	0	0	0	0	0	0	$\alpha^2 - a$	$-a$	$-a$	y_9
	10	$+\alpha$	0	0	0	0	0	0	$\alpha^2 - a$	$-a$	$-a$	y_{10}
	11	0	$-\alpha$	0	0	0	0	0	$-a$	$\alpha^2 - a$	$-a$	y_{11}
	12	0	$+\alpha$	0	0	0	0	0	$-a$	$\alpha^2 - a$	$-a$	y_{12}
	13	0	0	$-\alpha$	0	0	0	0	$-a$	$-a$	$\alpha^2 - a$	y_{13}
	14	0	0	$+\alpha$	0	0	0	0	$-a$	$-a$	$\alpha^2 - a$	y_{14}
Нулевая точка	15	0	0	0	0	0	0	0	$-a$	$-a$	$-a$	y_{15}

Как видно из матрицы, в ОЦКП каждый фактор фиксируется, в общем случае, на пяти уровнях: $(-\alpha, -1, 0, +1, +\alpha)$.

Из условия ортогональности векторов-столбцов $(c_1^2 - a)$ и $(c_2^2 - a)$ следует:

$$\frac{1}{n} \cdot [n_0 - 2 \cdot a \cdot (n_0 + 2 \cdot \alpha^2)] + a^2 = 0. \text{ Соотношение для определения } a \text{ для столбца } (c_1^2 - a): a = \frac{1}{n} \cdot \sum_{j=1}^n c_{1j}^2 = \frac{1}{n} \cdot (n_0 + 2 \cdot \alpha^2). \text{ Из этих двух уравнений следует: } a = \sqrt{n_0/n},$$

$$\alpha = \sqrt{0.5 \cdot (\sqrt{n \cdot n_0} - n_0)}. \text{ Например, для ОЦКП при } m = 3:$$

$$n_0 = 2^3 = 8, n = 8 + 6 + 1 = 15, a = \sqrt{8/15} \approx 0.73, \alpha = \sqrt{0.5 \cdot (\sqrt{15 \cdot 8} - 8)} \approx 1.215.$$

По результатам опытов ОЦКП формируется полином:

$$y = b_0 + b_1 c_1 + b_2 c_2 + b_3 c_3 + b_{12} c_1 c_2 + b_{13} c_1 c_3 + b_{23} c_2 c_3 + b_{123} c_1 c_2 c_3 + b_{11} (c_1^2 - a) + b_{22} (c_2^2 - a) + b_{33} (c_3^2 - a),$$

коэффициенты которого определяются по формулам:

$$b_0 = \frac{1}{n} \cdot \sum_{j=1}^n y_j, b_l = \frac{\sum_{j=1}^n e_{lj} \cdot y_j}{\sum_{j=1}^n e_{lj}^2},$$

где l – индекс вектора-столбца матрицы ОЦКП, e_{lj} – значение j -го элемента этого столбца.

Иногда этот полином записывают в виде:

$$y = d_0 + b_1 c_1 + b_2 c_2 + b_3 c_3 + b_{12} c_1 c_2 + b_{13} c_1 c_3 + b_{23} c_2 c_3 + b_{123} c_1 c_2 c_3 + b_{11} c_1^2 + b_{22} c_2^2 + b_{33} c_3^2,$$

где $d_0 = b_0 - a \cdot (b_{11} + b_{22} + b_{33})$.

Экстремум поверхности отклика объекта исследования может не совпадать с экстремумом полинома регрессии, найденного в результате проведения и обработки результатов эксперимента (экстремум может находиться и за пределами предварительно выбранной экспериментальной области факторного пространства: стремление к минимизации интервалов варьирования факторов может привести к потере экстремума). Поэтому после определения экспериментальной области факторного пространства рекомендуется найти экстремум полученной функции $y^r(x_1, \dots, x_m)$.

Чаще всего ОЦКП применяется для построения полиномов регрессии второго порядка. Однако эти планы, кроме двухфакторных, являются избыточными как по числу экспериментальных точек (число экспериментов превосходит число коэффициентов полинома регрессии), так и по числу уровней варьирования факторов (пять вместо трех). Следовательно, ОЦКП при числе факторов более двух может быть использован для построения неполных полиномов регрессии третьего порядка (с добавлением членов $b_{iii} c_i^3$).

4 АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Аналитический метод предусматривает вывод соотношений математического описания объекта исследования на основе теоретического анализа реализуемых в нем процессов с учетом его конструктивных характеристик и свойств перерабатываемых веществ. При использовании этого метода математические модели объектов химической технологии формируются на основе фундаментальных законов сохранения вещества и энергии, закономерностей процессов химических превращений, переноса тепла и массы.

Применение аналитических моделей позволяет определять конструкцию вновь создаваемого объекта и выбирать наиболее приемлемые условия реализации проходящих в нем процессов, то есть определять его оптимальные конструктивные и режимные характеристики на стадии проектирования. Критерием оптимальности обычно является себестоимость готового продукта.

Точность аналитических математических моделей редко бывает достаточно высокой, т.к. практически невозможно учесть все явления и взаимодействия, характеризующие объекты химической технологии.

4.1 Виды аналитических математических моделей

Вид математического описания объекта зависит от характера изменения его параметров в пространстве и времени, формы представления имеющейся информации об объекте. Различают объекты *с сосредоточенными параметрами*, рассматриваемые характеристики которых неизменны в пространстве, и *с распределенными параметрами*, в каждой точке объема которых значения характеристик различны. Примером объекта с сосредоточенными параметрами может служить емкостной реактор непрерывного действия с турбинной мешалкой. Трубчатый реактор непрерывного действия, - объект с распределенными параметрами.

Процессы, реализуемые в моделируемых объектах, подразделяют на *стационарные* (установившиеся) и *нестационарные* (переходные). Параметры первых неизменны во времени, вторых – принимают различные значения в разные моменты времени. Допущения о характере объекта и реализуемых в нем процессов определяют виды аналитических математических моделей и типы уравнений, входящих в их состав.

Модель статики объекта характеризует закономерности реализации стационарных процессов. Для объектов с сосредоточенными параметрами она представляет собой систему алгебраических уравнений (чаще всего нелинейных), а для объектов с распределенными параметрами – систему дифференциальных уравнений. Если параметры объекта меняются вдоль одной пространственной координаты, то для описания его статики используются обыкновенные дифференциальные уравнения (изменение температуры по длине тонкого стержня). Если же параметры объекта изменяются в пространстве, то его статика моделируется дифференциальными уравнениями в частных производных (поле температур в комнате с батареями и окнами в отопительный сезон).

Модель кинетики объекта характеризует закономерности реализации нестационарных процессов в объектах с сосредоточенными параметрами. Она включает обыкновенные дифференциальные уравнения, в которых независимой переменной является время (τ). Например, модель кинетики химической реакции – это система обыкновенных дифференциальных уравнений, характеризующих изменения концентраций реагентов во времени.

Модель динамики объекта характеризует закономерности реализации нестационарных процессов в объектах с распределенными параметрами. Она включает дифференциальные уравнения в частных производных, в которых независимыми переменными являются время (τ) и пространственные координаты (x, y, z). Модель динамики химического превращения – это система уравнений в частных производных, характеризующих изменение концентраций реагентов во времени в каждой точке объема реактора.

Аналитические математические модели подразделяют также на *детерминированные* и *стохастические*. Первые формируются в случаях, когда зависимости выходных переменных от входных можно считать однозначными. Вторые моделируют ситуации, когда одинаковое изменение входных переменных может привести к различным значениям выходных и можно говорить лишь о вероятностях тех или иных связей между ними. Стохастические модели формируются с использованием аппарата теории вероятности и математической статистики.

Если независимые параметры моделируемого объекта принимают только фиксированные значения, т.е. процесс их изменения представляет собой последовательность отдельных событий, то полученная математическая модель называется *дискретной*. Если же независимые переменные могут принимать любые допустимые значения, то модель объекта является *непрерывной*.

Рассмотрим уравнения основных химико-технологических процессов, которые часто входят в аналитические математические модели.

4.2 Уравнения основных химико-технологических процессов

Уравнения гидродинамики. Большинство химико-технологических процессов включают движение однофазного или многофазного потока вещества. Движение однофазного потока характеризует система дифференциальных уравнений, содержащая:

- уравнение материального баланса в элементарном объеме dV (уравнение неразрывности потока), которое для несжимаемой жидкости имеет вид:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0;$$

- уравнения движения (уравнения Навье-Стокса), для вязкой капельной жидкости имеющие вид:

$$\rho \cdot \frac{dv_z}{d\tau} = -g \cdot \rho - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \cdot \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right),$$

$$\rho \cdot \frac{dv_y}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \cdot \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right),$$

$$\rho \cdot \frac{dv_x}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \cdot \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right).$$

Здесь ρ, μ - плотность и динамическая вязкость жидкости, p - давление в потоке, v_x, v_y, v_z - составляющие скорости потока.

На практике поток обрабатываемой в аппарате среды обычно неоднороден по сечению и имеется диффузия вещества вдоль направления его оси. При разработке математических моделей движение среды в аппаратах и трубопроводах, как правило, сводят к одному из трех гидродинамических режимов:

1) идеальное смешение, когда физико-химические характеристики одинаковы во всех точках потока (поток жидкости в емкостном аппарате с мешалкой при отношении высоты его заполнения к диаметру, равном $1 \div 3$, и значении центробежного критерия Рейнольдса $Re_{\Omega} = \frac{n \cdot d_m^2 \cdot \rho}{\mu} > 1000$, где n - частота вращения

мешалки, d_m - ее диаметр);

2) «ячеечная модель», когда объем аппарата делится на ряд одинаковых секций (ячеек), в каждой из которых предполагается режим идеального смешения, а между ними перемешивание отсутствует;

3) идеальное вытеснение (поршневой режим), когда перемешивание вдоль оси потока полностью отсутствует, а в плоскости, перпендикулярной оси, поток абсолютно однороден (движение жидкости по трубе при отношении ее длины к диаметру, большем 100).

Уравнения теплопередачи. Подвод или отвод тепла из зоны обработки продукта сопровождается большинством процессов химической технологии и часто является необходимым условием их реализации (экзо- и эндотермические химические реакции). В большинстве случаев тепло передается через разделяющую теплоносители стенку, реже - при их непосредственном смешении.

Движущей силой теплопередачи является разность температур теплоносителей Δt . Уравнение теплопередачи: $q_T = k_T \cdot \Delta t \cdot F$, где q_T - тепловой поток;

F - поверхность теплообмена; $k_T = \left(\frac{1}{\alpha_1} + \sum_i R_i + \frac{1}{\alpha_2} \right)^{-1}$ - коэффициент теплопередачи;

α_1, α_2 - коэффициенты теплоотдачи от взаимодействующих сред; $\sum_i R_i$ -

сумма термических сопротивлений (разделяющей стенки и слоев загрязнений).

Перенос тепла теплопроводностью характеризуется законом Фурье :

$dq_T = -\lambda \frac{\partial t}{\partial \delta} \cdot dF$, - а конвекцией - законом Ньютона : $dq_T = \alpha \cdot \Delta t \cdot dF$. В этих

уравнениях δ - пространственная координата (толщина стенки), λ - коэффициент теплопроводности (материала стенки). На основании законов Фурье и Ньютона

выводится дифференциальное уравнение конвективного переноса тепла Фурье-Кирхгофа:

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} = \frac{\lambda}{c \cdot \rho} \cdot \left(\frac{\partial^2 t}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial z^2} \right) - \left(\frac{\partial t}{\partial x} v_x + \frac{\partial t}{\partial y} v_y + \frac{\partial t}{\partial z} v_z \right),$$

где c – удельная теплоемкость (материала стенки). При описании конкретных тепловых процессов это уравнение чаще всего упрощают, пренебрегая либо теплопроводностью, либо конвекцией.

Уравнения массопереноса. Целью многих химико-технологических процессов (кристаллизации, абсорбции, сушки и др.) является перенос вещества из одной фазы в другую. Основными формами массопереноса являются молекулярная и конвективная диффузия. Поток вещества q_c , передаваемого молекулярной диффузией через элементарную площадку поверхностью dF , характеризуется законом Фика: $dq_c = -D \cdot \frac{\partial c_i}{\partial x} \cdot dF$, где c_i – концентрация i -го вещества, участвующего в процессе; D – коэффициент диффузии. На основе этого закона выводится уравнение изменения концентрации i -го вещества за счет молекулярной диффузии в элементарном объеме $dV = dx \cdot dy \cdot dz$:

$$\frac{\partial c_i}{\partial \tau} = D \cdot \left(\frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} \right).$$

При наличии интенсивного вынужденного движения перенос вещества осуществляется главным образом за счет конвективной диффузии: $dq_c = v_x \cdot \frac{\partial c_i}{\partial x} \cdot dF$,

где v_x – средняя линейная скорость движения вдоль оси x . Уравнение конвективной диффузии в элементарном объеме: $\frac{\partial c_i}{\partial \tau} = - \left(\frac{\partial c_i}{\partial x} \cdot v_x + \frac{\partial c_i}{\partial y} \cdot v_y + \frac{\partial c_i}{\partial z} \cdot v_z \right)$.

В случаях, когда потоки вещества за счет молекулярной и конвективной диффузии соизмеримы, в правой части уравнения процесса переноса вещества записывают сумму правых частей уравнений молекулярной и конвективной диффузии.

Уравнения скорости химических превращений. Наиболее сложными процессами химической технологии являются химические реакции. Количественное и качественное представление о поведении исходных веществ и продуктов реакций дает раздел физической химии, называемый химической кинетикой.

Скорость расходования или образования i -го вещества r_i характеризуется дифференциальным уравнением: $r_i = \frac{dc_i}{d\tau} = f_i(c_1(\tau), c_2(\tau), \dots, c_n(\tau), P, T)$, где $c_j(\tau)$ – концентрация j -го компонента реакции в момент времени τ , $j=1, 2, \dots, n$; P, T – давление и абсолютная температура в зоне реакции. Математическая модель кинетики химической реакции, в которой участвуют (образуются и расходуются) n веществ, должна включать n подобных уравнений, причем для исходных веществ перед правой частью ставится знак “–”. Конкретный механизм реакций чаще всего неизвестен и функции f_i аппроксимируют степенными зависимостями.

Различают гомогенные (однофазные) и гетерогенные (многофазные) химические реакции. Скорость гомогенной реакции определяется количеством i -го компонента, образовавшегося (израсходованного) в единице объема за единицу времени : $\frac{dc_i}{d\tau} = K_i \cdot \prod_{j=1}^n (c_j(\tau))^{v_j}$, где $c_j(\tau)$ - объемная концентрация j -го компонента, K_i - константа скорости i -й реакции, v_j - порядок реакции по j -му компоненту (число молекул вещества, участвующих в реакции согласно стехиометрическому уравнению).

Замечание: В случаях, когда реакции складываются из последовательных стадий, идущих с разными скоростями, и когда отдельные компоненты берутся в большом избытке, порядок реакции может не совпадать со стехиометрическим коэффициентом.

Константа скорости характеризует процесс взаимодействия молекул веществ, участвующих в реакции. Ее значение обычно определяется из уравнения

Аррениуса: $K_i = K_{i0} \cdot e^{\frac{-E_i}{R \cdot T}}$, где $K_{i0} = \text{const}$ - множитель, зависящий от числа столкновений реагирующих молекул, R - универсальная газовая постоянная, E_i - энергия активации для молекул i -го вещества. Уравнение гомогенной реакции

$$\text{1-го порядка: } \frac{dc_i}{d\tau} = -K_i \cdot c_i(\tau) \text{ (для исходного вещества),}$$

$$\text{2-го порядка: } \frac{dc_i}{d\tau} = K_i \cdot (c_i(\tau))^2 \text{ (для продукта реакции).}$$

Скорость гетерогенной реакции определяется количеством i -го компонента, образовавшимся (израсходованным) в единицу времени на единице поверхности раздела фаз (например, на единице поверхности твердого пористого катализатора парофазной реакции). При математическом описании гетерогенных процессов используются закономерности химической адсорбции (хемосорбции), согласно которым скорость поверхностной реакции $\frac{dc_i}{d\tau} = K_i \cdot \prod_{j=1}^n \Theta_j^{v_j}$, где Θ_j - доля поверхности раздела фаз, занятая молекулами j -го вещества. Значение Θ_j трудно поддается определению, поэтому устанавливается связь между Θ_j и c_j , например уравнение изотермы $f(\Theta, C, T) = 0$, характеризующее равновесный режим адсорбции на поверхности твердого тела. Чаще всего на практике используется изотерма

$$\text{Лангмюра : } \Theta_j = \frac{b_j(T) \cdot c_j}{1 + \sum_{k=1}^n b_k(T) \cdot c_k}, b_j(T) = b_{j0} \cdot e^{\frac{E_{Xj}}{R \cdot T}}, \text{ где } E_{Xj} \text{ - теплота хемосорбции}$$

j -го вещества, $b_{j0} = \text{const}$. С использованием изотермы Лангмюра уравнение скоро-

$$\text{сти поверхностной реакции имеет вид : } \frac{dc_i}{d\tau} = K_i \cdot \prod_{j=1}^n \left(\frac{b_j(T) \cdot c_j(\tau)}{1 + \sum_{k=1}^n b_k(T) \cdot c_k(\tau)} \right)^{v_j}.$$

Полное математическое описание химической реакции, сопровождающейся изменением теплового режима и вынужденным движением потока ее компонентов, включает: уравнения скорости реакции по исходным веществам и продуктам; уравнения изменения концентраций компонентов за счет массопереноса; уравнения теплопередачи, используемые для определения значения температуры в зоне реакции; уравнения гидродинамики, позволяющие определить значения составляющих скорости потока. На практике в математическую модель включают только соотношения, характеризующие лимитирующие (наиболее медленные) процессы, например изменение концентрации только за счет молекулярной, только конвективной диффузии или только химической реакции, изменение температуры только за счет теплопроводности или только за счет конвекции, а режим движения потока среды сводят к идеальному смешению, «ячеечной модели» или идеальному вытеснению.

4.3 Дополнительные соотношения аналитических математических моделей

Кроме уравнений, характеризующих основные свойства и закономерности функционирования моделируемых объектов, аналитические математические модели включают дополнительные соотношения, которые могут иметь вид ограничений, связей и условий однозначности.

Ограничения записываются в виде неравенств, определяющих пределы изменения отдельных параметров объекта, а также функций одного или нескольких параметров (диапазон температур, допустимых для реализации процесса; предельно допустимая тепловая нагрузка аппарата).

Связи представляют собой равенства, определяющие соотношения между параметрами объекта и функциями параметров (формулы расчета значений коэффициента теплоотдачи по известной разности температур и характеристикам теплоносителя).

Условия однозначности включают в математические модели, содержащие дифференциальные уравнения. Для обыкновенных дифференциальных уравнений – это начальные или краевые условия. Первые задают значения параметров уравнения в начале процесса ($\tau = 0$) – начальные температуры, концентрации и т.п., вторые – в начале и конце (начальные и конечные концентрации веществ, участвующих в реакции). Для уравнений в частных производных – это начальные и граничные условия. Граничные условия определяют значения параметров объекта на границе его рабочего объема, а также их зависимость от времени (изменение температуры внутренней поверхности формы при выпечке буханки хлеба).

Пример: разработать и проанализировать кинетическую математическую модель вентиляции производственного помещения.

Постановка задачи. Смоделировать процесс вентиляции помещения при обнаружении в воздухе токсичного летучего вещества, концентрация которого C_0 ($\text{м}^3/\text{м}^3$) превосходит предельно допустимую $C_{\text{пр}}$.

Изучение объекта моделирования. Объект представляет собой помещение объемом V (м^3). Для его принудительной вентиляции используется вентилятор производительностью V_B ($\text{м}^3/\text{с}$), который включается только в ситуациях $C_0 > C_{\text{пр}}$. Основным параметром процесса вентиляции является текущая концентрация токсичного летучего вещества $C(\tau)$, $\text{м}^3/\text{м}^3$.

Допущения: 1) распределение концентрации вещества по объему помещения равномерно, т.е. характер движения воздуха в помещении соответствует режиму идеального смешения; 2) температура воздуха постоянна в течение всего процесса, т.е. тепловые процессы отсутствуют.

Математическое описание объекта (в данном случае единственного процесса – изменения концентрации токсичного летучего вещества во времени). В произвольный момент времени τ за бесконечно малый период $d\tau$ вентилятор удалит из помещения объем воздуха, равный $dV_B = V_B \cdot d\tau$ м^3 . При этом объем удаленного вещества $dV_T = C(\tau) \cdot dV_B$. Следовательно, изменение концентрации вещества за время $d\tau$ составит $dC(\tau) = -dV_T/V$, т.е.

$$dC(\tau) = -C(\tau) \cdot dV_B/V = -C(\tau) \cdot V_B \cdot d\tau/V = -K \cdot C(\tau) \cdot d\tau,$$

где $K = V_B/V$ – коэффициент воздухообмена (обратная величина времени полного обновления воздуха в помещении). Таким образом, уравнение процесса вентиляции имеет вид: $\frac{dC(\tau)}{d\tau} + K \cdot C(\tau) = 0$, с его начальное условие – $C(0) = C_0$.

Решение математической модели. Составленная модель может быть решена аналитически: $C(\tau) = A \cdot e^{-K \cdot \tau}$. Используя начальные условия, получим: $C(0) = C_0 = A \cdot 1 \implies A = C_0$, т.е. $C(\tau) = C_0 \cdot e^{-K \cdot \tau}$.

Анализ результатов решения. Используя найденное решение математической модели, можно определить следующие характеристики процесса:

1) время изменения концентрации вещества от C_0 до $C_{\text{пр}}$ – $C_{\text{пр}} = C_0 \cdot e^{-K \cdot \tau_B}$, т.е.

$$\tau_B = -\frac{1}{K} \cdot \ln \frac{C_{\text{пр}}}{C_0} = \frac{1}{K} \cdot \ln \frac{C_0}{C_{\text{пр}}};$$

2) общий объем выброса загрязненного воздуха – $V_B \cdot \tau_B$;

3) объем выброса токсичного летучего вещества – $(C_0 - C_{\text{пр}}) \cdot V_B \cdot \tau_B$;

4) энергозатраты на вентиляцию – $N_B \cdot \tau_B$, где N_B – мощность электродвигателя вентилятора;

5) средняя концентрация вещества в выбросе – $\frac{1}{\tau_B} \cdot \int_0^{\tau_B} C(\tau) \cdot d\tau = \frac{C_0}{\tau_B} \cdot \left(1 - \frac{e^{-K \cdot \tau_B}}{K}\right)$.

Замечание: если допустить возможность изменения температуры откачиваемого воздуха, то математическое описание процесса существенно усложнится – параметры V и V_B станут функциями температуры.

4.4 Уравнения статики и динамики объектов химической технологии

Уравнения статики объекта – это математические соотношения, характеризующие связь между его параметрами в установившемся во времени режиме

функционирования. Решения уравнений статики называются *статическими характеристиками* объекта. Именно статические характеристики используются для определения оптимальных значений параметров, характеризующих режим функционирования и конструкцию исследуемого объекта, т.к. большую часть времени он работает в установившемся режиме.

Для описания статики объектов с сосредоточенными параметрами используются алгебраические уравнения вида: $y_i = f_i(\bar{x}, \bar{y}, \bar{a}, \bar{b})$, $i=1,2,\dots,n$, где

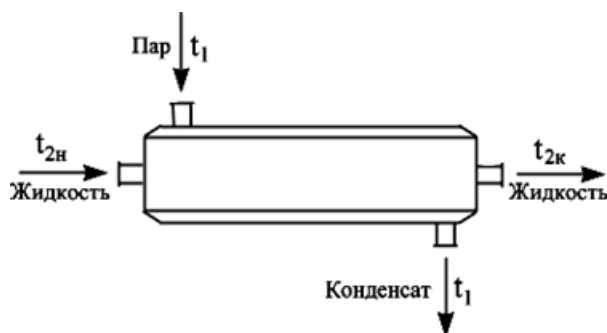


Рисунок 4.1 – Теплообменник «труба в трубе»

$\bar{x} = (x_1, \dots, x_m)$, $\bar{y} = (y_1, \dots, y_n)$ - векторы входных и выходных параметров объекта; $\bar{a} = (a_1, \dots, a_k)$ - вектор параметров, зависящих от конструкции аппарата, $\bar{b} = (b_1, \dots, b_l)$ - вектор параметров, определяемых условиями реализации процессов и физико-химическими свойствами обрабатываемых веществ.

Рассмотрим в качестве примера моделируемого объекта теплообменник типа «труба в трубе», см. рис. 4.1. При допущении об идеальном смешении жидкости во внутренней трубе уравнение его

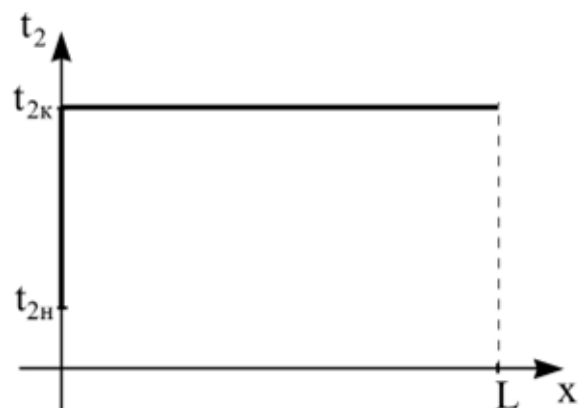


Рисунок 4.2 – Статическая характеристика при идеальном смешении

статики имеет вид:

$G_2 \cdot c_2 \cdot (t_{2к} - t_{2н}) = K_t \cdot F \cdot (t_1 - t_{2к})$, где G_2, c_2 - массовый расход и удельная теплоемкость жидкости, K_t - коэффициент теплопередачи через стенку трубы, F - площадь поверхности теплообмена. Решение уравнения (статическая характеристика теплообменника):

$$t_{2к} = \frac{K_t \cdot F \cdot t_1 + G_2 \cdot c_2 \cdot t_{2н}}{K_t \cdot F + G_2 \cdot c_2}, \text{ (см. рис. 4.2).}$$

Если допущение о режиме идеального смешения во всем объеме моделируемого объекта выглядит малодостоверным, можно использовать представление об идеальном смешении в пределах его равных долей - ячеек, и отсутствии перемешивания между ними (так называемую «ячеечную модель»). В случае представления внутренней трубы рассматриваемого теплообменника состоящей из p последовательно расположенных ячеек его статика будет характеризоваться системой уравнений:

$$\begin{aligned} G_2 \cdot c_2 \cdot (t_2^{(1)} - t_{2н}) &= K_t \cdot (F/p) \cdot (t_1 - t_2^{(1)}) \\ G_2 \cdot c_2 \cdot (t_2^{(2)} - t_2^{(1)}) &= K_t \cdot (F/p) \cdot (t_1 - t_2^{(2)}) \\ &\dots \dots \dots \\ G_2 \cdot c_2 \cdot (t_{2к} - t_2^{(p-1)}) &= K_t \cdot (F/p) \cdot (t_1 - t_{2к}) \end{aligned}$$

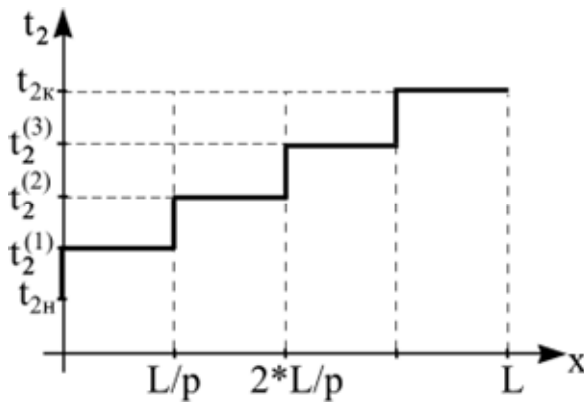


Рисунок 4.3 – Статическая характеристика при "ячеечной модели"

Решение этой системы (статическая характеристика теплообменника) представляет собой вектор $(t_2^{(1)}, t_2^{(2)}, \dots, t_2^{(p-1)}, t_{2K})$, характеризующий изменение значения t_2 по ячейкам, см. рис. 4.3

Статика объектов с *распределенными параметрами* характеризуется дифференциальными уравнениями. В простейшем случае изменения параметров объекта вдоль одной пространственной координаты - дифференци-

альными уравнениями вида: $\frac{dy_i}{dx} = f_i(\bar{x}, \bar{y}, \bar{a}, \bar{b})$, $i=1, 2, \dots, n$. Например, уравнение

статики рассматриваемого теплообменника в условиях постоянства температуры жидкости в его поперечном сечении и отсутствии продольного перемешивания

(модель идеального вытеснения) имеет вид:

$$G_2 \cdot c_2 \cdot \frac{dt_2(x)}{dx} = K_t \cdot \Pi \cdot (t - t_2(x)), \text{ где } \Pi$$

– периметр поперечного сечения поверхности теплообмена. Решением уравнения статики в данном случае является функция $t_2(x)$ – функция распределения температуры жидкости по длине трубы. Для нахождения этой функции необходимо начальное условие: $t_2(0) = t_{2H}$. Вид статической харак-

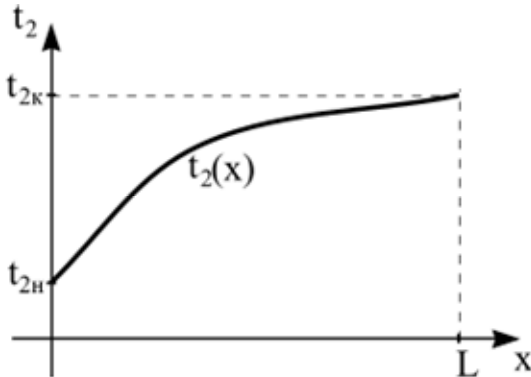


Рисунок 4.4 – Статическая характеристика при идеальном вытеснении

теристики теплообменника для этого случая представлен на рис. 4.4.

Если же параметры объекта изменяются вдоль нескольких пространственных координат, то его статика характеризуется уравнениями в частных производных. Например, если допустить, что температура жидкости изменяется не только по длине рассматриваемого теплообменника, но и по радиусу трубы, то уравнение его статики (диффузионная модель) будет иметь вид:

$$v_2 \cdot \frac{\partial t_2(x, r)}{\partial x} - \frac{D_r}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \frac{\partial t_2(x, r)}{\partial r} \right) = \frac{K_t \cdot \Pi \cdot [t_1 - t_2(x, r)]}{S \cdot c_2 \cdot \rho_2},$$

где D_r – коэффициент радиальной диффузии, S – площадь поперечного сечения поверхности теплообмена, v_2, ρ_2 – скорость течения и плотность жидкости. Для решения этого уравнения необходимо не только начальное условие $t_2(0, r) = t_{2H}$, но и граничное условие $t_2(x, 0) = \varphi(x)$, характеризующее распределение температуры по длине теплообменника на оси потока (при $r = 0$). Статическая характеристика теплообменника в данном случае будет представлять собой поверхность $t_2(x, r)$, см. рис. 4.5.

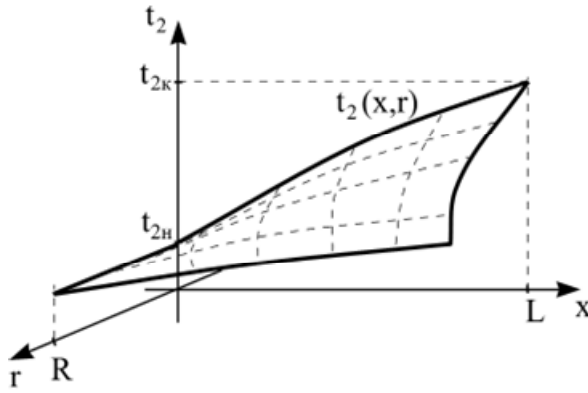


Рисунок 4.5 – Статическая характеристика при диффузионной модели

Математические модели статики, учитывающие возможность медленного дрейфа характеристик объекта во времени (старение катализатора, накопление отложений на поверхности теплообмена), называются квазистационарными. Их структура, как правило, аналогична чисто стационарным моделям, но значения некоторых коэффициентов в разные моменты времени не являются одинаковыми.

Уравнения динамики - это математическое описание изменения параметров объекта во времени. Они используются для определения динамических характеристик объекта, т.е. его реакций на управляющие воздействия, и устойчивости к действию помех. Универсальной формой математического описания динамики объектов химической технологии являются дифференциальные уравнения, причем уравнения динамики содержат в явной или неявной форме уравнения статики соответствующего объекта.

Объекты с сосредоточенными параметрами характеризуются обыкновенными дифференциальными уравнениями, например уравнение динамики теплообменника «труба в трубе» при допущении об идеальном смешении жидкости имеет вид:

$$G_2 \cdot c_2 \cdot \frac{dt_2(\tau)}{d\tau} = K_t \cdot F \cdot (t_1 - t_2(\tau)) \frac{V_2}{V_c},$$

где $V_2 = G_2 / \rho_2$ – объемный расход жидкости, $V_c = S \cdot L$ - объем внутренней трубы, L - длина поверхности теплообмена. Учитывая, что $F = \Pi \cdot L$, получим:

$$c_2 \cdot \rho_2 \cdot \frac{dt_2(\tau)}{d\tau} = K_t \cdot \frac{\Pi}{S} \cdot (t_1 - t_2(\tau)).$$

Начальное условие: $t_2(0) = t_{2н}$. Решением этого уравнения является зависимость $t_2(\tau)$, $\tau \in [0, V_c / V_2]$ - динамическая характеристика теплообменника.

При использовании «ячеечной модели» теплообменника его динамика будет характеризоваться системой аналогичных дифференциальных уравнений с начальными условиями: $t_2^{(1)}(0) = t_{2н}$, $t_2^{(q)}(0) = t_2^{(q-1)} \left(\frac{S \cdot \rho_2 \cdot L}{G_2 \cdot p} \right)$, $q = 2, \dots, p$. Динамическая характеристика теплообменника в данном случае представляет собой совокупность функций $t_2^{(q)}(\tau)$, $\tau \in [\tau_{q-1}, \tau_q]$, $q = 1, \dots, p$.

Для математического описания динамики объектов с *распределенными параметрами* используются дифференциальные уравнения в частных производных, например в случае реализации режима идеального вытеснения жидкости уравнение динамики рассматриваемого теплообменника будет иметь вид:

$$c_2 \cdot \rho_2 \cdot S \frac{\partial t_2(\tau, x)}{\partial \tau} + G_2 \cdot c_2 \frac{\partial t_2(\tau, x)}{\partial x} = K_t \cdot \Pi \cdot (t_1 - t_2(\tau, x)).$$

Начальное условие в данном случае определяет значение температуры на входе в теплообменник в любой момент времени: $t_2(\tau, 0) = t_{2н}$, а граничное - распределение температуры по длине теплообменника в начале процесса: $t_2(0, x) = \varphi(x)$.

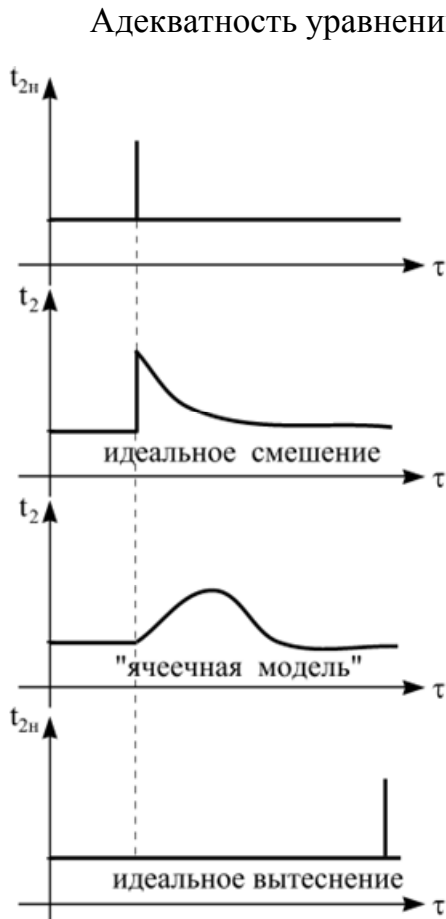


Рисунок 4.6 – Кривые отклика теплообменника

Адекватность уравнений статики объекту исследования оценивают, сопоставляя результаты расчетов значений выходных параметров объекта по соответствующей модели и результаты экспериментов на объекте или его физической модели, а уравнений динамики - по соответствию расчетных и экспериментальных *кривых отклика* объекта на стандартное возмущающее воздействие, обычно ступенчатое или импульсное. На рис. 4.6 показаны кривые отклика рассмотренных моделей теплообменника «труба в трубе» на импульсное возмущение (ввод элементарного объема жидкости повышенной температуры) при отсутствии нагрева паром.

На степень адекватности аналитических математических моделей объектам исследования оказывают влияние присущие им погрешности: 1) погрешности представлений о природе объекта и происходящих в нем процессов; 2) погрешности математического описания (ошибки в уравнениях, условиях однозначности, связях и ограничениях); 3) погрешности, связанные с принятыми допущениями (исключение из рассмотрения факторов, оказывающих существенное влияние на моделируемые явления).

С понятием адекватности тесно связано понятие устойчивости аналитической математической модели. Говорят, что модель устойчива, если конечным изменениям независимых переменных соответствуют аналогичные (того же порядка) изменения зависимых переменных. Неустойчивость модели (несоответствие уровня изменения выходных параметров уровню изменения входных), как правило, связана с влиянием той или иной погрешности, например, с принятием необоснованных допущений.

5 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Этот метод предусматривает:

- составление аналитических уравнений статики или динамики объекта исследования;
- проведение экспериментов по снятию характеристик объекта (статических или динамических);
- определение значений параметров уравнений модели.

Значения параметров подбираются так, чтобы решение математической модели как можно более полно соответствовало экспериментальным характеристикам.

5.1 Порядок составления экспериментально-аналитических математических моделей

После составления математического описания статики (например, $y_i = f_i(\bar{x}, \bar{y}, \bar{a}, \bar{b}), i=1,2,\dots,n$) или динамики объекта (например, $\frac{dy_i}{d\tau} = f_i(\bar{x}, \bar{y}, \bar{a}, \bar{b}), i=1,2,\dots,n$), из числа аргументов функций $f_i(\bar{x}, \bar{y}, \bar{a}, \bar{b}), i=1,2,\dots,n$, исключаются те параметры $a_j, j \in (1,2,\dots,k)$ и $b_q, q \in (1,2,\dots,l)$, значения которых можно определить по справочникам и в результате расчетов, а остальные сводят в вектор определяемых параметров объекта $\bar{g} = (g_1, g_2, \dots, g_s)$. В качестве выходных характеристик стремятся использовать те параметры объекта, которые легко поддаются измерению. Параметры $y_i, i \in (1,2,\dots,n)$, значения которых не поддаются измерению или измеряются с большим трудом, также включаются в число определяемых параметров $g_k, k \in (1,2,\dots,s)$. В результате математическое описание объекта с сосредоточенными параметрами примет вид:

$$\text{уравнение статики - } y_i = f_i(\bar{x}, \bar{y}, \bar{g}), i = 1, 2, \dots, n;$$

$$\text{уравнение динамики - } \frac{dy_i}{d\tau} = f_i(\bar{x}, \bar{y}, \bar{g}), i = 1, 2, \dots, n.$$

Исходя из структуры уравнений химической кинетики, тепло-массообмена и гидродинамики можно сделать следующие выводы о свойствах функций $f_i, i = 1, 2, \dots, n$, характеризующих объекты химической технологии:

- 1) функции f_i представляют собой непрерывные алгебраические и трансцендентные зависимости;
- 2) решение уравнений математического описания $y_i(\tau), i = 1, 2, \dots, n$ почти всегда существует и единственно для любых начальных условий $y_i(0)$;
- 3) функции f_i как правило нелинейны, поэтому аналитическое решение составленных уравнений возможно очень редко.

5.2 Методика проведения экспериментов и обработки результатов

В ходе экспериментов определяются зависимости вида $y_{ie} = f_i(x_e)$, $y_{ieq} = f_i(x_e, \tau_q)$, $i=1,2,\dots,n$, $e=1,2,\dots,d$, $q=1,2,\dots,u$, т.е. статические или динамические характеристики объекта (его физической модели). Здесь d - число опытов, u - число измерений в одном опыте.

Целью экспериментов является определение значений $g_k, k=1,2,\dots,s$, например предэкспоненциальных множителей K_{i0} и энергий активации E_i в уравнениях Аррениуса, энергий хемосорбции E_{Xj} и множителей b_{j0} в изотермах Лангмюра, коэффициентов диффузии и теплоотдачи, при которых решение математической модели достаточно точно совпадает с результатами экспериментов.

Перед началом опытов проводят стабилизацию параметров объекта: выводят его на установившийся режим, устраняют или ослабляют действие помех, которые не учитываются составленными уравнениями. На вход объекта подается возмущающее воздействие $\bar{x}^3(\tau) = (x_1^3(\tau), x_2^3(\tau), \dots, x_m^3(\tau))$, а с выхода на интервале времени $\tau \in [0, \tau_n]$ снимаются кривые отклика $\bar{y}^3(\tau) = (y_1^3(\tau), y_2^3(\tau), \dots, y_n^3(\tau))$. Интервал наблюдений τ_n и интервал времени между опытами устанавливается в зависимости от длительности переходного процесса τ_y : при снятии динамических характеристик $\tau_n < \tau_y$, статических - $\tau_n \gg \tau_y$. Нелинейность функций f_i , вероятность наличия внутренних связей в объекте исследования диктуют необходимость постановки следующих серий опытов:

- 1) с поочередным изменением всех входных параметров $x_j, j=1,2,\dots,m$;
- 2) с одновременным изменением всех входных параметров;
- 3) с возмущениями разной амплитуды, формы и длительности;
- 4) при различных начальных условиях.

Результаты экспериментов сводят в таблицы соответствия значений выходных параметров объекта входным. При необходимости может быть осуществлена операция их сглаживания.

В отличие от экспериментального метода построения математических моделей в данном случае структура уравнений модели и вид функций $f_i, i=1,2,\dots,n$ определяются заранее. Обработка результатов экспериментов на объекте исследования сводится к поиску таких значений определяемых параметров $g_k, k=1,2,\dots,s$, что решения $y_i(\tau), i=1,2,\dots,n$ аналитических уравнений при возмущающих воздействиях $x_j(\tau) = x_j^3(\tau), j=1,2,\dots,m$ и начальных условиях $y_i(0) = y_i^3(0), i=1,2,\dots,n$ наилучшим образом совпадают с кривыми отклика $y^3(\tau), i=1,2,\dots,n$. В большинстве случаев для этого осуществляется поиск минимума функции $\Phi(g_1, g_2, \dots, g_s)$, которая имеет вид:

$$\text{- при составлении модели статики объекта: } \Phi(g_1, \dots, g_s) = \sum_{i=1}^n \sum_{e=1}^d (y_{ie}^3 - y_{ie})^2;$$

- при составлении модели динамики:
$$\Phi(g_1, \dots, g_s) = \sum_{i=1}^n \sum_{e=1}^d \sum_{q=1}^u (y_{ieq}^3 - y_{ie}(\tau_q))^2.$$

Записать функцию $\Phi(g_1, \dots, g_s)$ в виде явной зависимости значения Φ от значений определяемых параметров объекта, как правило, не удастся. Вычисление значений Φ в процессе поиска ее минимума требует определение значений y_{ie} или $y_{ie}(\tau_q)$, соответствующих некоторым фиксированным значениям g_1, g_2, \dots, g_s , т.е. решения уравнений математической модели. Значения $g_k^*, k = 1, 2, \dots, s$, соответствующие минимуму функции $\Phi(g_1, \dots, g_s)$, могут отличаться от значений тех же параметров, найденных в результате лабораторных исследований процессов, реализуемых в рассматриваемом объекте. Возможные причины различий:

- 1) значения $g_k, k = 1, 2, \dots, s$ чаще всего определяются численными методами, т.е. приближенно;
- 2) функция $\Phi(g_1, \dots, g_s)$ недостаточно представительна, т.е. зависит от числа экспериментов и условий их проведения;
- 3) получаемые значения g_1, g_2, \dots, g_s учитывают и влияние факторов, имеющих место в объекте исследования, но не нашедших отражения в уравнениях его математической модели.

5.3 Область действия экспериментально-аналитических математических моделей

Использование полученной таким образом математической модели объекта для оптимизации его конструкции и режима функционирования возможно с учетом следующих ограничений:

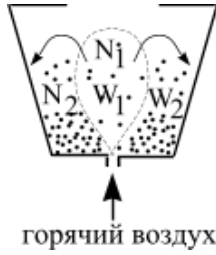
1. Модель применима только в диапазонах изменения входных параметров объекта, исследованных в экспериментах: $x_j \in [x_j^{\min}; x_j^{\max}]$, $j = 1, 2, \dots, m$.

2. Полученные экспериментально-аналитическим методом уравнения динамики объекта применимы только при начальных условиях $y_i(0) = y_i^3(0)$, $i = 1, 2, \dots, n$. Для того, чтобы обосновать их адекватность объекту при других начальных условиях, необходимо проверить условие корректности математической модели по начальным условиям: бесконечно малым изменениям $y_i(0)$ должны соответствовать бесконечно малые изменения $y_i(\tau) \forall \tau \in [0, \tau_H]$, $i = 1, 2, \dots, n$. Обычно считают, что если математическая модель корректна при некоторых значениях $y_i(0)$ из диапазона $[y_i^3(0)_{\min}; y_i^3(0)_{\max}]$, то она корректна и при любых значениях $y_i(0) \in [y_i^3(0)_{\min}; y_i^3(0)_{\max}]$, $i = 1, 2, \dots, n$.

3. Математическая модель, полученная экспериментально-аналитическим методом, справедлива только для того объекта, на котором проводился эксперимент. Для однотипных объектов структура математической модели сохраняется, а значения g_1, g_2, \dots, g_s необходимо определять по результатам экспериментов на

каждом объекте. Это недостаток экспериментально-аналитического метода, но это же и его достоинство, т.к. определение значений g_1, g_2, \dots, g_s по результатам экспериментов на конкретном объекте позволяет учесть все его индивидуальные особенности, которые не учитываются уравнениями математической модели.

Пример. Построить экспериментально-аналитическую математическую модель динамики аэрофонтанной сушилки периодического действия.



1. *Изучение объекта.* Корпус сушилки имеет форму усеченного конуса, обращенного широкой частью вверх. Снизу через сопло подается горячий воздух со скоростью, достаточной для образования фонтана воздуха с захваченными частицами материала. Влажные частицы вовлекаются в струю и при движении в ней подсушиваются. На верхнем участке струи скорость воздуха падает и частицы возвращаются в слой. Благодаря конической форме корпуса, частицы материала постепенно смещаются вниз, подхватываются струей и т. д. Влажность материала меняется во времени, поэтому составляется модель динамики (кинетическая модель).

2. *Структурная схема объекта.* Выделим два звена:
1) струя: $N_1, W_2 \rightarrow N_1 \rightarrow N_1, W_1$; 2) слой: $N_1, W_1 \rightarrow N_2 \rightarrow N_1, W_2$. Здесь N_1, W_1 - число частиц в струе в момент времени dt и их влагосодержание, N_2, W_2 - число частиц в слое и их влагосодержание.

Допущения : 1) оба выделенных звена являются объектами сосредоточенными параметрами; 2) изменение влагосодержания частиц материала происходит только в струе; 3) N_2 много больше N_1 .

Следствия из допущений: а) число частиц в слое N_2 и их влагосодержание в любой момент времени одинаковы; б) число частиц, попадающих в струю за время dt равно числу частиц, покидающих ее за то же время и равно N_1 ; в) все частицы, одновременно покидающие струю, имеют влагосодержание W_1 ; г) общее число частиц материала в сушилке $N \approx N_2$.

3. *Составление уравнений динамики звеньев* :

для струи: $N_1 \frac{dW_1}{d\tau} = -N_1 \cdot K \cdot W_1$ с начальным условием $W_1(\tau) = W_2(\tau)$;

для слоя: $N_2 \frac{dW_2}{d\tau} = N_1 \cdot W_1 - N_1 \cdot W_2$ с начальным условием $W_2(0) = W_n$.

Поскольку $N_2 \approx N$ и поддается контролю, определяемыми параметрами уравнений модели являются N_1 и K - коэффициент изменения влагосодержания частиц в струе (коэффициент скорости сушки).

4. *Проведение экспериментов на реальной сушилке*: взятие проб из слоя высушиваемого материала в разные моменты времени $\tau_r \in [0, \tau_n]$ и определение их влагосодержания; проведение серий опытов при разных W_n, N, τ_n . Каждой серии опытов соответствует таблица:

W_2	W_n	$W_2^{(1)}$	$W_2^{(2)}$...	$W_2^{(u)}$
τ	0	τ_1	τ_2	...	τ_n

При необходимости полученные зависимости $W_2^{(r)}(\tau_r)$ подвергают сглаживанию.

5. *Определение значений параметров*: значения K и N_1 определяют в результате решения задачи поиска минимума функции

$$\Phi(K, N_1) = \sum_{e=1}^d \sum_{r=1}^u (W_{2e}(\tau_r) - W_{2e}^{(r)})^2$$
 одним из методов условной оптимизации. Здесь $W_{2e}(\tau_r)$ - результат интегрирования уравнений математической модели сушки при условиях (W_n, N, τ_n) опыта номер e .

5.4 Основные проблемы, возникающие при разработке и использовании математических моделей

1. Каждая математическая модель уникальна. Предложить какие-то общие рекомендации, конкретные универсальные приемы их разработки невозможно.
2. Необходимость глубоких, профессиональных знаний в предметной области моделирования (химия, биология, астрономия), в математике, компьютерной технике, программировании.
3. Трудности определения основных и второстепенных факторов, обоснования допущений, выбора вида математического описания и метода решения модели.
4. Трудности разработки, тестирования и оптимизации оригинальных расчетных методик, алгоритмов и программ решения и анализа моделей.
5. Необходимость учета погрешностей выбранных методов решения, компьютерного счета, ошибок в исходных и справочных данных.
6. Отсутствие необходимой информации о моделируемом объекте и реализуемых процессах или ее неоднозначность.

6 ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Наиболее предпочтительным методом решения уравнений математических моделей является *аналитический метод*. Он применяется во всех случаях, когда структура и состав модели таковы, что возможно ее аналитическое решение.

Достоинства метода: малый объем вычислений, точность, наглядность и устойчивость решения, возможность его анализа методами теории функций.

Недостатки: высокие требования к квалификации исследователя в области математического анализа, отсутствие универсальных процедур решения моделей (задача решения каждой конкретной модели уникальна).

Аналитические решения уравнений модели можно получить и *приближенным методом*. Эти методы предусматривают замену уравнений математического описания объекта моделирования, не допускающих аналитического решения, упрощенными зависимостями, которые можно решить аналитически (разложение сложных функций в ряды, введение дополнительных допущений).

Достоинство приближенных методов – возможность получения аналитических решений, *недостаток*: появление систематических погрешностей (следствие упрощений).

Наиболее популярны в вычислительной практике *численные методы* решения уравнений математических моделей, подавляющее большинство которых предусматривают замену исходной задачи другой задачей (математически более простой). Например:

- замена дифференциальных операторов на алгебраические для малых диапазонов изменения аргументов: $\frac{dy(x)}{dx} \approx \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x}$, где $\Delta x = \text{const}$ – шаг по координате x ;

- дискретизация функциональных зависимостей, т.е. их замена кусочно-постоянными функциями (разбиение области пространства или времени на малые интервалы, внутри которых функция неизменна).

Эти методы оперируют только числами и используют простейшие арифметические действия (сложение, умножение, логарифмирование). *Достоинства численных методов*: универсальность, простота компьютерной реализации. *Недостатки*: большой объем вычислений, погрешности методов, необходимость определения степени соответствия решения упрощенной задачи решению исходной.

Рассмотрим численные методы решения уравнений математических моделей более подробно.

6.1 Методы решения нелинейных уравнений.

Нелинейное уравнение чаще всего записывается в так называемом "нормальном" виде: $f(x)=0$.

Постановка задачи: найти такое действительное число (числа) x^* , что $f(x^*)\equiv 0$. При численном решении осуществляется поиск точки, отстоящей от x^* не более чем на заданную величину ε .

- Процесс численного решения уравнений вида $f(x)=0$ включает два этапа:
- 1) отделение искомого корня, т.е. определение отрезка $[a, b]$ оси x , содержащего этот корень;
 - 2) уточнение корня до заданной степени точности ε – поиск точки x , такой что $|x - x^*| < \varepsilon$.

Теоретической основой отделения корней уравнения $f(x)=0$ является *вторая теорема Вейерштрасса*: внутри отрезка $[a, b]$ оси x имеется единственный корень уравнения $f(x)=0$, если:

- 1) функция $f(x)$ непрерывна внутри отрезке $[a, b]$;
- 2) на концах отрезка $f(x)$ принимает значения разных знаков: $f(a) \cdot f(b) < 0$;
- 3) $f'(x)$ знакопостоянна на отрезке $[a, b]$, т.е. $\forall x \in [a, b]$ имеет один и тот же знак.

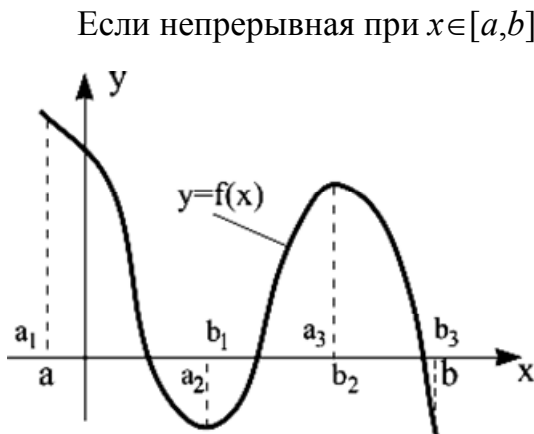


Рисунок 6.1 – Иллюстрация к теореме Вейерштрасса

Если непрерывная при $x \in [a, b]$ функция $f(x)$ на концах отрезка имеет значения разных знаков, то её график по крайней мере один раз пересекает ось x , см. рис. 6.1. Точка пересечения будет единственной, если $f(x)$ на всём отрезке $[a, b]$ только возрастает ($f'(x) > 0$) или только убывает ($f'(x) < 0$).

Для отделения корней в настоящее время чаще всего используется графический способ:

- 1) строится график функции $f(x)$ (например, средствами MathCAD);
- 2) выделяются отрезки оси x , включающие абсциссы точек пересечения графика с осью;

3) для найденных отрезков проверяется выполнение условия теоремы Вейерштрасса.

К числу наиболее популярных методов уточнения корня уравнения $f(x)=0$ внутри отрезка $[a, b]$ оси x относятся метод бисекции, метод Ньютона и метод простых итераций.

Метод бисекции (деления отрезка пополам). Для уточнения корня используется условие 2) теоремы Вейерштрасса, см. рис. 6.2:

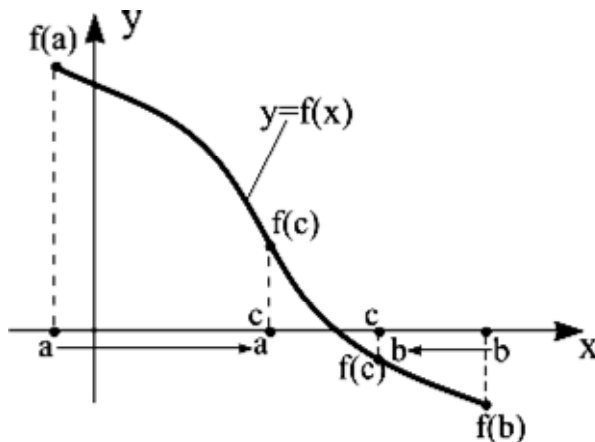


Рисунок 6.2 – Иллюстрация к методу бисекции

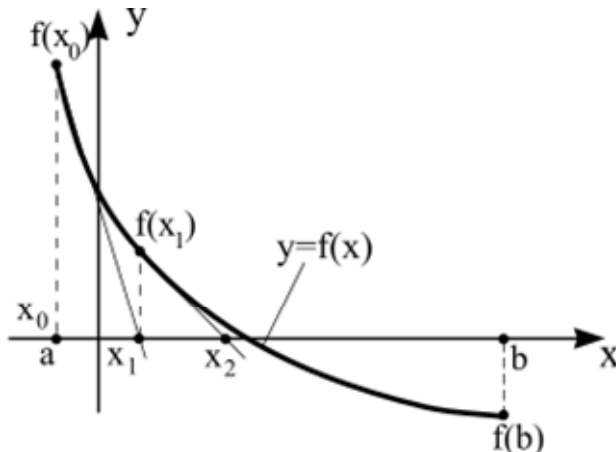
используется условие 2) теоремы Вейерштрасса, см. рис. 6.2:

- а) отрезок $[a, b]$ оси x , содержащий искомый корень уравнения, делится пополам и вычисляется значение $f(x)$ в точке $c=(a+b)/2$; если $f(c)=0$, то корень найден: $x^*=c$;
- б) при $f(c) \neq 0$ и $f(a) \cdot f(c) < 0$ от отрезка $[a, b]$ отсекается правая половина, т.е. $b=c$, а если $f(b) \cdot f(c) < 0$, то - левая, т.е. $a=c$;
- в) если $|b - a| \geq \varepsilon$ (заданная точ-

ность), то для нового отрезка $[a, b]$ вновь выполняются п.п. а), б), в противном случае процесс уточнения корня прекращается и принимается $x^* \approx (b + a)/2$ (середина последнего отрезка).

Алгоритм метода бисекции сходится для любой функции, непрерывной на отрезке $[a, b]$ оси x , за $N = \log_2[(b - a)/\varepsilon]$ шагов. Несмотря на малую скорость сходимости, он широко применяется на практике, т.к. абсолютно надёжен.

Метод Ньютона (касательных). Корень уточняется следующим образом,



см. рис. 6.3: 1) внутри отрезка $[a, b]$ оси x , содержащего искомый корень уравнения $f(x)=0$, выбирается точка x_0 - начальное приближение; 2) в точке $(x_0, f(x_0))$ проводится касательная к графику функции $f(x)$:

$y - f(x_0) = f'(x_0) \cdot (x - x_0)$, - и определяется точка её пересечения с осью x : в этой точке $y=0$, поэтому

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)};$$

Рисунок 6.3 – Иллюстрация к методу Ньютона

и определения точек их пересечения с осью x по правилу

$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$, $k = 0, 1, 2, \dots$ продолжается до тех пор, пока не выполнится усло-

вие: $(x_{k+1} - x_k)^2 < \varepsilon \cdot \frac{2m_1}{M_2}$, где $m_1 = \min_{x \in [a, b]} |f'(x)|$, $M_2 = \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|$ (на практике

$(x_{k+1} - x_k)^2 < \varepsilon$); при этом $x^* \approx x_{k+1}$.

Условие применимости метода: функция $f(x)$ не имеет внутри отрезка $[a, b]$ оси x точек перегиба (либо выпукла, либо вогнута), то есть $f''(x)$ - знакопостоянна $\forall x \in [a, b]$. В этом случае все касательные лежат по одну сторону графика функции $f(x)$, следовательно знаки $f(x_k), k=0, 1, 2, \dots$ одинаковы и нет необходимости проверять смену знака $f(x)$ на $[a, x_k]$ и $[x_k, b]$.

С учетом условия применимости метода рекомендуется выбирать начальное приближение следующим образом: $x_0=a$, если $f(a) \cdot f''(a) > 0$ и $x_0=b$, если $f(b) \cdot f''(b) > 0$ (при $f(x_0) \cdot f''(x_0) < 0$ касательная может пересечь ось x за пределами отрезка $[a, b]$, где не проверялись условия отделения).

По скорости алгоритм метода Ньютона существенно превосходит алгоритм метода бисекции, но область его применения ограничена функциями, не имеющими внутри отрезка $[a, b]$ точек перегиба.

6.2 Методы решения систем уравнений

Постановка задачи: найти такие действительные числа $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$, что все

$$\text{уравнения системы} \quad \begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \quad (6.1)$$

одновременно обращаются в тождества.

$$\text{Часто систему (6.1) записывают в виде: } f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, i=1, 2, \dots, n. \quad (6.2)$$

Соотношения (6.1), (6.2) - это запись системы уравнений в *нормальном* виде.

Наиболее популярные численные методы решения систем уравнений:

метод простых итераций, *метод Зейделя* (используются для решения как систем линейных, так и нелинейных уравнений), различные модификации *метода Гаусса* (для решения систем линейных уравнений), *метод Ньютона* (для решения систем нелинейных уравнений).

Метод Гаусса - прямой метод решения систем линейных уравнений. С его помощью можно получить абсолютно точное решение системы (без учета ошибок округления, свойственных компьютеру). В основе этого метода лежит идея последовательного исключения неизвестных из уравнений системы:

$$\begin{cases} a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + \dots + a_{1n} \cdot x_n = b_1 \\ a_{21} \cdot x_1 + a_{22} \cdot x_2 + \dots + a_{2n} \cdot x_n = b_2 \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ a_{n1} \cdot x_1 + a_{n2} \cdot x_2 + \dots + a_{nn} \cdot x_n = b_n \end{cases}, \quad (6.3)$$

где $a_{ij}, b_i, i, j=1, 2, \dots, n$ - действительные числа.

Наиболее распространенная схема решения систем вида (6.3) методом Гаусса предусматривает два этапа: *прямой ход*, в результате которого матрица системы преобразуется в треугольную, и *обратный ход* - вычисление неизвестных, начиная с x_n до x_1 . Прямой ход начинается с вычисления для системы (6.3) множителей $m_i^{(1)} = -a_{i1}/a_{11}, i=2, 3, \dots, n$ и сложения каждого i -го уравнения с первым, умноженным на $m_i^{(1)}$. Система примет вид:

$$\begin{cases} a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + a_{13} \cdot x_3 + \dots + a_{1n} \cdot x_n = b_1 \\ 0 \cdot x_1 + a_{22}^{(1)} \cdot x_2 + a_{23}^{(1)} \cdot x_3 + \dots + a_{2n}^{(1)} \cdot x_n = b_2^{(1)} \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ 0 \cdot x_1 + a_{n2}^{(1)} \cdot x_2 + a_{n3}^{(1)} \cdot x_3 + \dots + a_{nn}^{(1)} \cdot x_n = b_n^{(1)} \end{cases}, \text{ где } a_{ij}^{(1)} = a_{ij} + m_i^{(1)} \cdot a_{1j}, b_i^{(1)} = b_i + m_i^{(1)} \cdot b_1,$$

$i=2, 3, \dots, n, j=1, 2, \dots, n$, т.е. неизвестное x_1 , будет исключено из всех уравнений, кроме первого. Аналогично x_2 исключается из всех уравнений, кроме 1-го и 2-го, x_3 - из всех, кроме первых трех и т.д.: при исключении x_k формируются множители $m_i^{(k)} = -a_{ik}^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)}, i=k+1, k+2, \dots, n$ и производится пересчет значений $a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} + m_i^{(k)} \cdot a_{kj}^{(k-1)}, b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} + m_i^{(k)} \cdot b_k^{(k-1)}, i=k+1, k+2, \dots, n, j=k, k+1, \dots, n$. После исключения x_{n-1} из последнего уравнения система примет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + a_{13} \cdot x_3 + \dots + a_{1n} \cdot x_n = b_1 \\ a_{22}^{(1)} \cdot x_2 + a_{23}^{(1)} \cdot x_3 + \dots + a_{2n}^{(1)} \cdot x_n = b_2^{(1)} \\ a_{33}^{(2)} \cdot x_3 + \dots + a_{3n}^{(2)} \cdot x_n = b_3^{(2)} \\ \dots \\ a_{nn}^{(n-1)} \cdot x_n = b_n^{(n-1)} \end{array} \right. , \text{ ее матрица станет треугольной.}$$

Обратный ход:

$$x_n = b_n^{(n-1)} / a_{nn}^{(n-1)}, \quad x_{n-1} = (b_{n-1}^{(n-2)} - a_{n,n-1}^{(n-2)} \cdot x_n) / a_{n-1,n-1}^{(n-2)},$$

$$x_j = (b_j^{(j-1)} - a_{jn}^{(j-1)} \cdot x_n - \dots - a_{j,j+1}^{(j-1)} \cdot x_{j+1}) / a_{jj}^{(j-1)}, \quad j = n-2, n-3, \dots, 1.$$

Довольно популярен алгоритм решения систем линейных уравнений, основанный на *схеме метода Гаусса без обратного хода*: при исключении неизвестных матрица системы преобразуется не к треугольному, а к диагональному виду. Для этого выполняются следующие действия:

- цикл по $k=1, 2, \dots, n$,
- цикл по $i=1, 2, \dots, k-1, k+1, \dots, n$,
- внутри цикла по i : $m = -a_{ik}/a_{kk}$, $a_{ik} = 0$, $b_i = b_i + m \cdot b_k$;
- цикл по $j=1, 2, \dots, k-1, k+1, \dots, n$,
- внутри цикла по j : $a_{ij} = a_{ij} + m \cdot a_{kj}$;
- окончание циклов по j, i, k .

Вычисление неизвестных: $x_i = b_i / a_{ii}$ в цикле по $i=1, 2, \dots, n$.

Замечания: 1. Метод Гаусса можно использовать, если ни один из диагональных коэффициентов матрицы системы не равен нулю.

2. Если в процессе исключения неизвестных какой-либо диагональный коэффициент обратится в 0, значит одно из уравнений системы является линейной комбинацией других и рассматриваемая система вырождена.

Рекомендация: при решении систем линейных уравнений методом Гаусса на компьютере для уменьшения ошибки округления уравнения следует переставить таким образом, чтобы диагональные коэффициенты матрицы системы были наибольшими по абсолютной величине в соответствующих столбцах.

Метод Ньютона – наиболее популярный численный метод решения систем нелинейных уравнений. Он предусматривает выделение из уравнений системы линейных частей, которые играют определяющую роль при малых приращениях аргументов. В результате решение системы нелинейных уравнений сводится к решению последовательности систем линейных уравнений. Рассмотрим схему метода Ньютона на примере системы двух уравнений, приведенной к нормальному виду:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = 0 \\ f_2(x_1, x_2) = 0 \end{cases}, \text{ причем предполагается, что функции } f_1(x_1, x_2) \text{ и } f_2(x_1, x_2) -$$

непрерывно-дифференцируемы в заданной области изменения значений x_1, x_2 и начальные значения неизвестных $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}$ принадлежат этой области.

Выделение линейных частей уравнений системы осуществляется путем разложения функций $f_1(x_1, x_2), f_2(x_1, x_2)$ в ряд Тейлора в окрестности имеющегося приближения к решению системы $(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})$, $k = 0, 1, \dots$ и отбрасывания слагаемых

второго и более высоких порядков:

$$\begin{cases} \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} \cdot (x_1 - x_1^{(k)}) + \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \cdot (x_2 - x_2^{(k)}) = -f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) \\ \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} \cdot (x_1 - x_1^{(k)}) + \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \cdot (x_2 - x_2^{(k)}) = -f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) \end{cases}$$

Решением этой системы линейных уравнений (например, по правилу Крамера), будет следующее приближение к решению исходной системы $(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)})$:
 $x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} + \Delta_1^{(k)} / \Delta^{(k)}$, $x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} + \Delta_2^{(k)} / \Delta^{(k)}$, где

$$\Delta^{(k)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \end{vmatrix},$$

$$\Delta_1^{(k)} = \begin{vmatrix} -f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) & \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \\ -f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) & \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \end{vmatrix}, \quad \Delta_2^{(k)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} & -f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) \\ \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} & -f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) \end{vmatrix}.$$

Новые приближения вычисляются до тех пор, пока не выполнится условие: $\max\{(x_1^{(k+1)} - x_1^{(k)})^2, (x_2^{(k+1)} - x_2^{(k)})^2\} < \varepsilon$. Решение исходной системы с точностью ε будет найдено, если все последовательно формируемые системы линейных уравнений будут невырождены, т.е. $\Delta^{(k)} \neq 0$, $k = 0, 1, \dots$

При использовании метода Ньютона для решения системы (6.1) придется последовательно формировать и решать системы линейных уравнений вида:

$$\begin{cases} \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_1} \cdot (x_1 - x_1^{(k)}) + \dots + \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_n} \cdot (x_n - x_n^{(k)}) = -f_1(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \\ \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_1} \cdot (x_1 - x_1^{(k)}) + \dots + \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_n} \cdot (x_n - x_n^{(k)}) = -f_2(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \\ \dots \\ \frac{\partial f_n(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_1} \cdot (x_1 - x_1^{(k)}) + \dots + \frac{\partial f_n(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_n} \cdot (x_n - x_n^{(k)}) = -f_n(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \end{cases}, k=0, 1, \dots \quad (6.4)$$

Для их решения обычно используется метод Гаусса.

Алгоритм метода Ньютона предусматривает формирование и решение систем уравнений вида (6.4) до выполнения условия: $\max_{i=1, 2, \dots, n} \{(x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)})^2\} < \varepsilon$.

6.3 Формулы численного интегрирования

При решении уравнений математических моделей нередко приходится вычислять определенные интегралы вида:

$$I = \int_a^b f(x) dx. \quad (6.5)$$

Постановка задачи: найти приближенное значение интеграла (6.5) по значениям подынтегральной функции $f(x)$ в некоторых точках отрезка $[a, b]$ оси x .

Определение: упомянутые точки отрезка $[a, b]$ называют *узлами*, а проходящие через них перпендикуляры к оси x - *ординатами*.

Общая схема численного интегрирования. Если значения a и b конечны, а

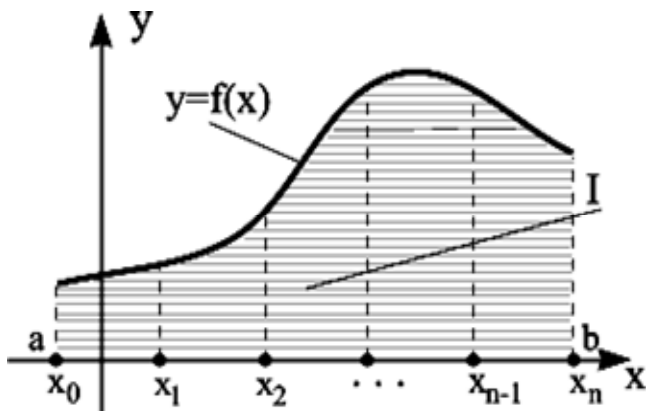


Рисунок 6.4 – Иллюстрация к схеме численного интегрирования

функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$, то интеграл I есть площадь плоской фигуры, ограниченной кривой $y=f(x)$, осью x и ординатами $x=a, x=b$, см. рис. 6.4. Приближенное вычисление интеграла сводится к разбиению отрезка $[a, b]$ на множество более мелких отрезков, приближенному определению площади каждой получившейся криволинейной трапеции и суммированию этих площадей.

Определение: в литературе численное определение однократного интеграла называют *квадратурой*, а соответствующие формулы - *квадратурными*.

Наиболее распространенные разновидности квадратурных формул предусматривают разбиение отрезка $[a, b]$ на равные микроотрезки $[x_{i-1}, x_i], i=1, 2, \dots, n$ ($x_0=a, x_n=b$) длиной $h=(b-a)/n$ (формулы прямоугольников, трапеций и Симпсона).

Следовательно $I = \int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx$. Для приближенного вычисления инте-

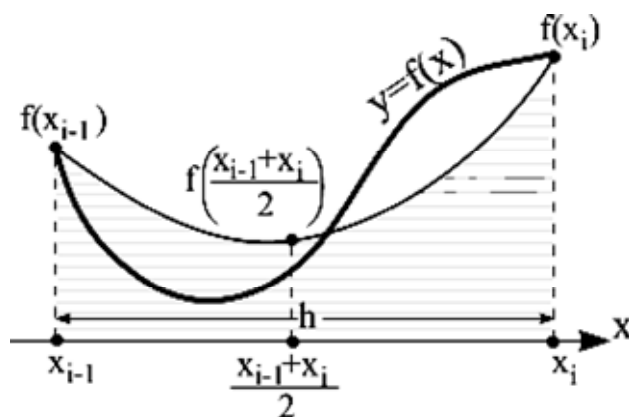


Рисунок 6.5 – Иллюстрация к формуле Симпсона

гралов $I_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx, i=1, 2, \dots, n$ на каж-

дом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ подынтегральная функция $f(x)$ заменяется элементарной функцией.

Формула Симпсона. На отрезке $[x_{i-1}, x_i], i=1, 2, \dots, n$ кривая $y=f(x)$ заменяется квадратичной параболой, график которой проходит через точки:

$[x_{i-1}, f(x_{i-1})]$, $\left[\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right), f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right)\right]$, $[x_i, f(x_i)]$, см. рис. 6.5. По формуле Лагранжа уравнение этой параболы можно представить в виде:

$$P_2(x) = \frac{(x - z_i) \cdot (x - x_i)}{(x_{i-1} - z_i) \cdot (x_{i-1} - x_i)} \cdot f(x_{i-1}) + \frac{(x - x_{i-1}) \cdot (x - x_i)}{(z_i - x_{i-1}) \cdot (z_i - x_i)} \cdot f(z_i) + \frac{(x - x_{i-1}) \cdot (x - z_i)}{(x_i - x_{i-1}) \cdot (x_i - z_i)} \cdot f(x_i), \text{ где } z_i = (x_{i-1} + x_i)/2.$$

Учитывая, что $x_i - x_{i-1} = h$, а $z_i - x_{i-1} = x_i - z_i = h/2$, можно записать:

$$I_i \approx 2 \cdot \frac{f(x_{i-1})}{h^2} \cdot \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - z_i) \cdot (x - x_i) dx - 4 \cdot \frac{f(z_i)}{h^2} \cdot \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1}) \cdot (x - x_i) dx + 2 \cdot \frac{f(x_i)}{h^2} \cdot \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1}) \cdot (x - z_i) dx, \quad i=1, 2, \dots, n.$$

Взяв интегралы по частям, получим: $I_i \approx \frac{h}{6} \cdot [f(x_{i-1}) + 4 \cdot f(z_i) + f(x_i)]$, $i=1, 2, \dots, n$, следовательно:

$$I \approx \frac{h}{6} \cdot \sum_{i=1}^n \left[f(x_{i-1}) + 4 \cdot f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) + f(x_i) \right]. \quad (6.6)$$

Формулу Симпсона называют иногда *формулой парабол*.

Формула Симпсона дает абсолютно точный результат при интегрировании не только квадратичных, но и кубических полиномов для любого числа n . Эта формула соединяет в себе достоинства простоты и высокой точности.

Основой алгоритма вычисления интегралов вида (6.5) по формуле (6.6) является прием последовательного удвоения числа микроотрезков n и сравнения получаемых значений интеграла. Начальное число n обычно равно $10 \div 20$. Процесс удвоения n и пересчета значения интеграла заканчивают при выполнении неравенства: $|I^{(n)} - I^{(2n)}| < \varepsilon \cdot K_\phi$, где ε - заданная точность (обычно $10^{-4} \div 10^{-5}$), K_ϕ - коэффициент, зависящий от используемой формулы (для формулы Симпсона $K_\phi = 16$). Увеличивать точность не имеет смысла, т.к. с ростом n и уменьшением ошибки ограничения увеличивается ошибка округления.

Вычисление несобственных интегралов. Интеграл $I = \int_a^\infty f(x) dx$, где $f(x)$ - непрерывна на $[a, \infty)$ может быть вычислен по формуле (7.6), если он является сходящимся. Общая схема вычисления:

- а) выбирается большое число b и вычисляется $\int_a^b f(x) dx$ с точностью $\varepsilon/2$ (используется прием последовательного удвоения числа микроотрезков n);
- б) значение b удваивается и вновь вычисляется $\int_a^b f(x) dx$;

в) если $|I^b - I^{2b}| \geq \varepsilon/2$, то вновь выполняется п. б) ; иначе I^{2b} - значение искомого интеграла с точностью ε .

6.4 Методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений

Постановка задачи: найти решение $y = y(x)$ уравнения $y' = f(x, y)$, удовлетворяющее условию $y(x_0) = y_0$. Условие $y(x_0) = y_0$ называется начальным условием и используется для выделения одной конкретной интегральной кривой $y(x)$ из множества решений уравнения $y' = f(x, y)$. Эта задача называется *задачей Коши*. На практике она обычно решается для заданного интервала значений аргумента $[x_0, x_n]$.

Решение задачи Коши можно представить в виде: $y(x) = \int_{x_0}^x f(x, y)dx + c$.

Поскольку $y(x_0) = y_0$, $y_0 = \int_{x_0}^{x_0} f(x, y) + c \Rightarrow c = y_0$ и $y(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(x, y)dx$.

Разбив отрезок $[x_0, x_n]$ точками x_1, x_2, \dots, x_{n-1} на n равных микроотрезков $[x_i, x_{i+1}]$ $i = 1, 2, \dots, n-1$ длиной $h = (x_n - x_0)/n$, запишем правило определения соответствующих значений y_1, y_2, \dots, y_{n-1} : $y_1 = y_0 + \int_{x_0}^{x_1} f(x, y)dx + c$;

$$y_2 = y_0 + \int_{x_0}^{x_2} f(x, y)dx = y_0 + \int_{x_0}^{x_1} f(x, y)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x, y)dx = y_1 + \int_{x_1}^{x_2} f(x, y)dx ;$$

$$y_n = y_0 + \int_{x_0}^{x_n} f(x, y)dx = y_0 + \int_{x_0}^{x_1} f(x, y)dx + \dots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x, y)dx = y_{n-1} + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x, y)dx .$$

$$\text{В общем, виде: } y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y)dx , \quad i = 1, 2, \dots, n-1 \quad (6.7)$$

Используя для приближенного вычисления $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y)dx$ различные квадратурные формулы, можно получить различные методы численного решения задачи Коши. Наиболее популярны метод Эйлера и его модификации, метод Рунге-Кутты. Для достижения необходимой точности решения используют прием уменьшения длины микроотрезков и сравнения значений y_i , соответствующих одним и тем же точкам x_i .

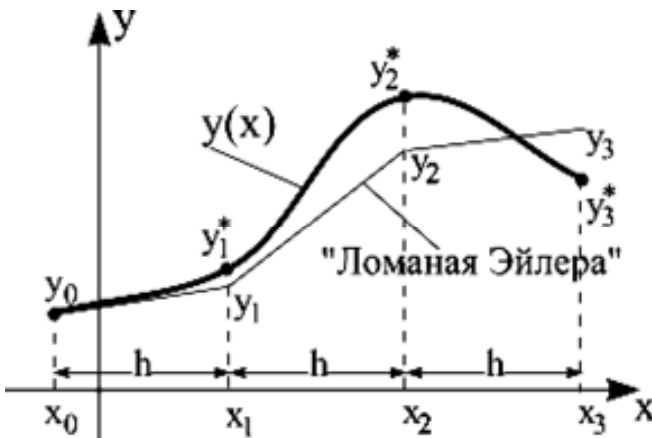


Рисунок 6.6 – Иллюстрация к методу Эйлера

сравнения значений y_i , соответствующих одним и тем же точкам x_i .

Классический метод Эйлера использует для вычисления интеграла $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y)dx$ “формулу прямоугольников для лентяев” (высота прямоугольника принимается равной значению подынтегральной функции на левой границе микроотрезка $[x_i, x_{i+1}]$). Следовательно:

$$y_{i+1} = y_0 + h \cdot f(x_i, y_i), i = 0, 1, \dots, n-1. \quad (6.8)$$

Геометрическая интерпретация: линии соединяющие точки (x_i, y_i) и (x_{i+1}, y_{i+1}) , $i = 0, 1, \dots, n-1$ - это касательные к кривой $y(x)$ в точках (x_i, y_i) , см. рис. 6.6. Ошибки, возникающие при определении значений y_1, y_2, \dots, y_n , приводят к тому, что каждая следующая касательная проводится к какой-то другой интегральной кривой из семейства решений уравнения. Такое свойство метода называют накоплением ошибки.

Метод Рунге-Кутты основан на использовании для вычисления интегралов $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y) dx$, $i = 0, 1, \dots, n-1$ формулы Симпсона:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y) dx = \frac{h}{6} \left\{ f(x_i, y_i) + 4 \cdot f\left[x_i + \frac{h}{2}, y\left(x_i + \frac{h}{2}\right)\right] + f[x+h, y(x+h)] \right\}. \text{ Используя}$$

для вычисления значений $y(x_i + h/2)$, $y(x_i + h)$ метод Эйлера, получим:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6} \cdot (k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4), \quad i = 0, 1, 2, \dots, n-1, \text{ где} \quad (6.9)$$

$$k_1 = f(x_i, y_i), k_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} \cdot k_1\right), k_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} \cdot k_2\right), k_4 = f(x_i + h, y_i + h \cdot k_3)$$

Соотношение (6.9) характеризует метод Рунге-Кутты 4-го порядка, применяемый в вычислительной практике чрезвычайно широко.

Рассмотренные методы решения задачи Коши называются *одношаговыми* т.к. каждая следующая точка (x_{i+1}, y_{i+1}) искомой интегральной кривой определяется на основе информации только об одной предыдущей точке (x_i, y_i) . Число микроотрезков $[x_i, x_{i+1}]$, на которые разбивается исходный отрезок $[x_0, x_n]$, определяется требуемой точностью вычислений. Для достижения нужной точности задача решается несколько раз с последовательно удваиваемым числом микроотрезков n . Точность считается достигнутой, если при начальном и удвоенном числе n значения y_i и y_{2i} (в совпадающих точках x) отличаются не более чем на заданную величину: $\max_{i=1, 2, \dots, n} |y_i^{(n)} - y_{2i}^{(2n)}| < \varepsilon$.

Для решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений используются те же методы, что и для решения одного уравнения. В качестве примера рассмотрим задачу решения системы двух обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} y_1' = f_1(x, y_1, y_2) \\ y_2' = f_2(x, y_1, y_2) \end{cases} \quad (6.10)$$

Задача заключается в нахождении интегральных кривых $y_1(x)$ и $y_2(x)$, удовлетворяющих начальным условиям: $y_1(x_0) = y_{10}$, $y_2(x_0) = y_{20}$ (6.11)

Задача (6.10)-(6.11) также называется задачей Коши и на практике обычно решается для фиксированного отрезка $[x_0, x_n]$ оси x , который в ходе решения раз-

бывается на микроотрезки $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \dots, n-1$ длиной $h = (x_n - x_0)/n$. Необходимое число микроотрезков n определяется заданной точностью решения.

Классический метод Эйлера предусматривает определение положения следующих точек искомым интегральных кривых $y_1(x)$ и $y_2(x)$ как точек пересечения прямой $x = x_i + h$ с касательными к соответствующим кривым в точках (x_i, y_{1i}) и (x_i, y_{2i}) , $i = 0, 1, \dots, n-1$, то есть:

$$\begin{cases} y_{1,i+1} = y_{1i} + h \cdot f_1(x_i, y_{1i}, y_{2i}) \\ y_{2,i+1} = y_{2i} + h \cdot f_2(x_i, y_{1i}, y_{2i}) \end{cases} \quad i = 0, 1, \dots, n-1 \quad (6.12)$$

Основные соотношения *метода Рунге-Кутты* для решения задачи (6.10)-(6.11) имеют вид:

$$\begin{cases} y_{1,i+1} = y_{1i} + \frac{h}{6} \cdot (k_{11} + 2 \cdot k_{12} + 2 \cdot k_{13} + k_{14}) \\ y_{2,i+1} = y_{2i} + \frac{h}{6} \cdot (k_{21} + 2 \cdot k_{22} + 2 \cdot k_{23} + k_{24}) \end{cases}, \quad i=0, 1, \dots, n-1, \quad (6.13)$$

где $k_{11} = f_1(x_i, y_{1i}, y_{2i})$, $k_{21} = f_2(x_i, y_{1i}, y_{2i})$,

$$k_{12} = f_1\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1i} + \frac{h}{2} \cdot k_{11}, y_{2i} + \frac{h}{2} \cdot k_{21}\right), \quad k_{22} = f_2\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1i} + \frac{h}{2} \cdot k_{11}, y_{2i} + \frac{h}{2} \cdot k_{21}\right),$$

$$k_{13} = f_1\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1i} + \frac{h}{2} \cdot k_{12}, y_{2i} + \frac{h}{2} \cdot k_{22}\right), \quad k_{23} = f_2\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{1i} + \frac{h}{2} \cdot k_{12}, y_{2i} + \frac{h}{2} \cdot k_{22}\right),$$

$$k_{14} = f_1(x_i + h, y_{1i} + h \cdot k_{13}, y_{2i} + h \cdot k_{23}), \quad k_{24} = f_2(x_i + h, y_{1i} + h \cdot k_{13}, y_{2i} + h \cdot k_{23}).$$

Заданная точность аппроксимации искомым интегральных кривых $y_1(x)$ и $y_2(x)$ ломаными Эйлера или кривыми, состоящими из отрезков квадратичных парабол, достигается в результате использования приёма последовательного удвоения числа и элементарных интервалов интегрирования. Точность считается достигнутой, если при начальном и удвоенном n значения y_{1i}, y_{2i} в совпадающих точках x отличаются друг от друга не более чем на заданную величину:

$\max_{i=1,2,\dots,n} \left\{ \left| y_{1i}^{(n)} - y_{1i}^{(2n)} \right|, \left| y_{2i}^{(n)} - y_{2i}^{(2n)} \right| \right\} < \varepsilon$. При неудачном выборе начального значения n достижения нужной точности может потребовать значительных затрат времени.

Рассмотренные методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений могут быть использованы и для решения уравнений высоких порядков.

Например, задача решения уравнения $y'' = f(x, y', y)$ при условиях $\begin{cases} y(x_0) = y_0 \\ y'(x_0) = y'_0 \end{cases}$

заменой переменных $z = y' \rightarrow y'(x_0) = y'_0 = z_0$ сведётся к задаче решения системы

двух уравнений первого порядка: $\begin{cases} z' = f(x, z, y) \\ y' = z \end{cases}$ при условиях $\begin{cases} y(x_0) = y_0 \\ z(x_0) = z_0 \end{cases}$.

6.5 Методы решения дифференциальных уравнений в частных производных

Рассмотрим одну из наиболее простых задач решения дифференциальных уравнений в частных производных - задачу решения линейного уравнения 2-го порядка с двумя независимыми переменными: найти решение $U=U(x,y)$ уравнения

$$A(x,y) \cdot \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + B(x,y) \cdot \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} + C(x,y) \cdot \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + D(x,y) \cdot \frac{\partial U}{\partial x} + E(x,y) \cdot \frac{\partial U}{\partial y} + F(x,y) \cdot U = G(x,y), \quad (6.14)$$

удовлетворяющее условиям: $U(x, y_0) = \varphi(x); \quad \frac{\partial U(x, y_0)}{\partial y} = \psi(x).$ (6.15)

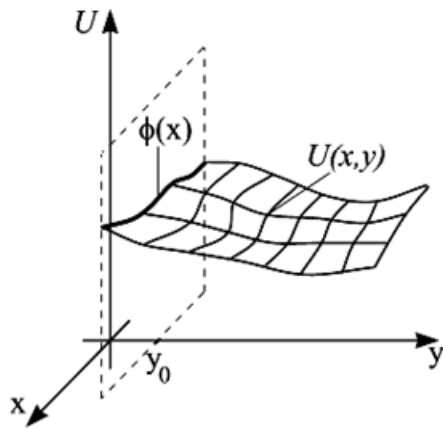


Рисунок 6.7 – Иллюстрация к задаче (6.14)-(6.15)

Здесь $A(x,y), B(x,y), C(x,y), D(x,y), E(x,y), F(x,y), G(x,y)$ – известные функции x и y (часто константы).

Решение уравнения (6.14) - это поверхность $U(x,y)$, линия пересечения которой с плоскостью $y = y_0$ соответствует функции $\varphi(x)$, см. рис. 6.7, а скорость изменения вдоль оси y при $y = y_0$ - функции $\psi(x)$. Условия (6.15) называются начальными условиями, а задача (6.14) - (6.15) - задачей Коши. Часто при записи подобных задач производные изображаются упрощённо:

$U''_{xx}, U''_{xy}, U''_{yy}, U'_x, U'_y$. На практике такие задачи как правило решаются численно с помощью разновидностей *метода конечных разностей* (более распространённое жаргонное название - *метод сеток*).

Условия (6.15) и им подобные определяют некоторую область плоскости x, y ,

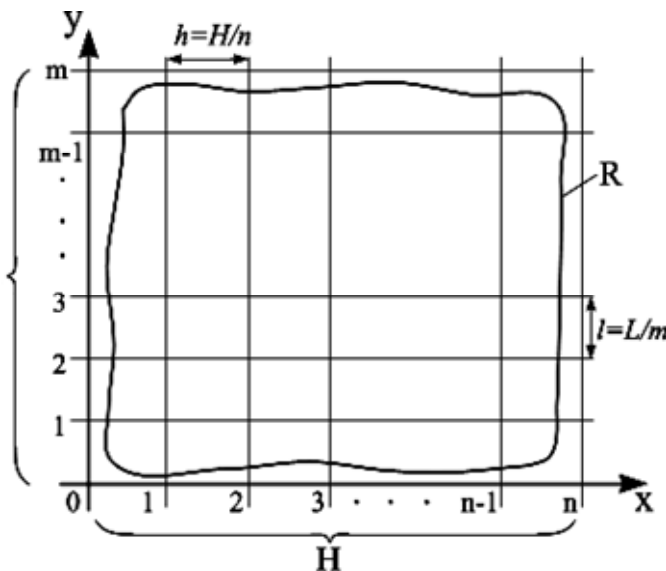


Рисунок 6.8 – Иллюстрация к методу сеток

всем точкам которой требуется поставить в соответствие значения $U(x,y)$, удовлетворяющие уравнению (6.14). Предположим, что граница этой области R образована прямыми, параллельными осям x и y . Сетка формируется в результате разбиения отрезка H оси x на n микроотрезков длиной $h=H/n$, а отрезка L оси y - на m микроотрезков длиной $l=L/m$, см. рис. 6.8. Внутри области образуется $(n-1) \cdot (m-1)$ пересечений границ микроотрезков, называемых узлами сетки. В каждом из них необходимо определить значение искомой функции

$U(x_i, y_j) = U(i \cdot h, j \cdot l) = U_{ij}$, $i=1, 2, \dots, (n-1)$, $j=1, 2, \dots, (m-1)$. При достаточно больших значениях n и m найденные значения U_{ij} позволяют судить о характере искомой поверхности $U(x, y)$. Значения $U(x, y)$ на границе области: U_{0j} , U_{i0} , U_{nj} , U_{im} , $i=1, \dots, (n-1)$, $j=1, \dots, (m-1)$, - определяются из условий (6.15), а внутри области - путём замены производных в уравнении (6.14) конечно-разностными отношениями:

$$U'_x(x_i, y_j) \approx \frac{U(x_i+h, y_j) - U(x_i, y_j)}{h} \approx \frac{U_{(i+1),j} - U_{ij}}{h} \approx \frac{U(x_i, y_j) - U(x_i-h, y_j)}{h} = \frac{U_{ij} - U_{(i-1),j}}{h} \quad (6.16)$$

(правая конечная разность) (левая конечная разность)

$$U''_{xx}(x_i, y_j) \approx \frac{U'_x(x_i+h, y_j) - U'_x(x_i, y_j)}{h} \approx \frac{(U_{(i+1),j} - U_{ij})/h - (U_{ij} - U_{(i-1),j})/h}{h} = \frac{U_{(i-1),j} - 2U_{ij} + U_{(i+1),j}}{h^2} \quad (6.17)$$

Формула (6.17), полученная путём вычисления первых производных как левых, а второй - как правой (или наоборот), симметрична относительно т. (x_i, y_j) и называется центрально-разностным отношением. Именно такие выражения обычно используются для аппроксимации вторых производных. Производные U''_{yy}, U'_y в уравнении (6.14) заменяются выражениями:

$$U'_y(x_i, y_j) \approx \frac{U_{i,(j+1)} - U_{ij}}{l} \approx \frac{U_{ij} - U_{i,(j-1)}}{l}, \quad (6.18)$$

$$U''_{yy}(x_i, y_j) \approx \frac{U_{i,(j-1)} - 2U_{ij} + U_{i,(j+1)}}{l^2}. \quad (6.19)$$

При вычислении приближённых значений производной U''_{xy} используются формулы (6.16), (6.18), причём если по x берётся правая производная, то по y - левая и наоборот. Такая замена производных функции $U(x, y)$ в уравнении (6.14) и условиях (6.15) для каждого узла (i, j) сформированной сетки приведёт к замене задачи (6.14)-(6.15) задачей решения $(n+1) \cdot (m+1)$ линейных уравнений с $(n+1) \cdot (m+1)$ неизвестными $U_{ij} = U(x_i, y_j)$, $i=0, 1, \dots, n$, $j=0, 1, \dots, m$. Заданная точность решения достигается в результате использования приёма последовательного удвоения предварительно выбранных значений n и m .

Замечание: в практических задачах граница области, определённой условиями (6.15) редко бывает прямоугольной и как правило аппроксимируется ломаной линией, непрерывные фрагменты которой параллельны осям x и y .

Рассмотрим метод конечных разностей более подробно на примере решения уравнения теплопроводности $\frac{\partial T(x, \tau)}{\partial \tau} = a \cdot \frac{\partial^2 T(x, \tau)}{\partial x^2}$, характеризующего процесс распространения тепла в бесконечной пластине толщиной R , расположенной перпендикулярно оси x . В этом уравнении $a = \frac{\lambda}{c \cdot \rho}$ - температуропроводность материала пластины.

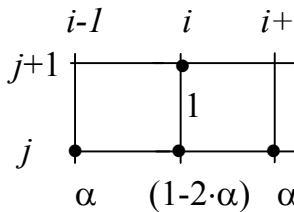
Предполагая, что на поверхности пластины, т.е. при $x = 0$ и $x = R$ поддерживается температура T_n , распределение температуры внутри пластины в начальный момент времени $\tau = 0$ характеризуется функцией $f(x)$ и $a = \text{const} > 0$, получим

задачу: решить уравнение $T'_\tau = a \cdot T''_{xx}$ при условиях: $T(0,\tau) = T(R,\tau) = T_\pi$ (граничные); $T(x,0) = f(x)$, $0 \leq x \leq R$ (начальное).

Для решения этой задачи методом конечных разностей разобьём отрезок $[0;R]$ оси x на n микроотрезков длиной $h=R/n$. Значение τ в постановке задачи не ограничено сверху, поэтому вдоль оси τ , начиная с $\tau = 0$, будем последовательно откладывать микроотрезки произвольно выбранной длины l . При переходе к разностной форме записи граничные условия примут вид: $T_{0j} = T_{nj} = T_\pi$; $j = 1, 2, 3, \dots$, - начальное условие - вид: $T_{i0} = f(ih)$, $i = 1, 2, \dots, (n-1)$, - а уравнение переписется в виде:
$$\frac{T_{i,(j+1)} - T_{ij}}{l} = a \cdot \frac{T_{(i-1),j} - 2T_{ij} + T_{(i+1),j}}{h^2}.$$

Обозначив $\alpha = a \cdot l/h^2$, после преобразований получим:

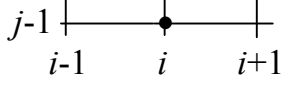
$$T_{i,(j+1)} = \alpha \cdot T_{(i-1),j} + (1 - 2 \cdot \alpha) \cdot T_{ij} + \alpha \cdot T_{(i+1),j}, \quad i=1, 2, \dots, n-1, j=0, 1, 2, \dots \quad (6.20)$$

 Способ аппроксимации дифференциального уравнения разностным принято иллюстрировать так называемым трафаретом, где показано, сколько узлов сетки включает уравнение и каковы значения коэффициентов при соответствующих T_{ij} .

При выбранном способе преобразования задачи к разностной форме она решается по так называемой явной схеме: значения $T(x,\tau)$ в узлах нижней строки сформированной сетки (значения T_{i0} , $i = 1, 2, \dots, (n-1)$) заданы начальным условием, а в узлах второй и последующих строк - определяются непосредственно из уравнения (6.20) через значения $T(x,\tau)$ в 3-х ближайших узлах предыдущей строки, например при $j = 0$: $T_{i,1} = \alpha \cdot T_{(i-1),0} + (1 - 2 \cdot \alpha) \cdot T_{i0} + \alpha \cdot T_{(i+1),0}$, $i = 1, \dots, (n-1)$.

Если же при переходе от дифференциального уравнения к разностному определить T'_τ не через правую, а через левую разность, то вместо (1.51) получим уравнение:
$$T_{i,(j-1)} = -\alpha \cdot T_{(i-1),j} + (1 + 2 \cdot \alpha) \cdot T_{ij} - \alpha \cdot T_{(i+1),j}, \quad i=1, \dots, n-1, j=1, 2, \dots, \quad (6.21)$$

которое приведёт к неявной схеме решения задачи. Для первой строки по оси τ ($j=1$), используя граничные и начальные условия, получим:



$$\begin{aligned} T_{10} &= -\alpha \cdot T_{01} + (1 + 2 \cdot \alpha) \cdot T_{11} - \alpha \cdot T_{21} & \rightarrow & \left\{ \begin{aligned} (1 + 2 \cdot \alpha) \cdot T_{11} - \alpha \cdot T_{21} &= f(h) + \alpha \cdot T_\pi \\ -\alpha \cdot T_{11} + (1 + 2 \cdot \alpha) \cdot T_{21} - \alpha \cdot T_{31} &= f(2h) \\ -\alpha \cdot T_{21} + (1 + 2 \cdot \alpha) \cdot T_{31} - \alpha \cdot T_{41} &= f(3h) \end{aligned} \right. \\ T_{20} &= -\alpha \cdot T_{11} + (1 + 2 \cdot \alpha) \cdot T_{21} - \alpha \cdot T_{31} & \rightarrow & \\ T_{30} &= -\alpha \cdot T_{21} + (1 + 2 \cdot \alpha) \cdot T_{31} - \alpha \cdot T_{41} & \rightarrow & \\ \dots & & \rightarrow & \dots \\ T_{(n-1),0} &= -\alpha \cdot T_{(n-2),1} + (1 + 2 \cdot \alpha) \cdot T_{(n-1),1} - \alpha \cdot T_{n1} & \rightarrow & \left\{ \begin{aligned} -\alpha \cdot T_{(n-2),1} + (1 + 2 \cdot \alpha) \cdot T_{(n-1),1} &= f(nh-h) + \alpha \cdot T_\pi \end{aligned} \right. \end{aligned} \quad (6.22)$$

то есть систему $(n-1)$ линейных уравнений с $(n-1)$ неизвестными T_{11} , $T_{21}, \dots, T_{(n-1),1}$. Формируя и решая подобные системы, можно найти значения T_{ij} в узлах второй и последующих строк сетки по оси τ .

На первый взгляд кажется, что явная схема предпочтительнее неявной, однако решение, получаемое с использованием системы (6.22) устойчиво и сходится при $h \rightarrow 0$, $l \rightarrow 0$ к решению исходной задачи при любом соотношении значений

шагов по осям x и τ , а получаемое с использованием уравнения (6.20) - лишь при $l < h^2/2$, что не всегда удобно (при неявной схеме можно делать большие шаги по времени, а при явной приходится делать чрезвычайно мелкие).

Замечание. Если, согласно трафарету, в разностном уравнении один неизвестный узел, оно решается по явной схеме, если более одного – по неявной.

6.6. Использование в математическом моделировании баз данных, баз знаний и экспертных оценок

Аналитические и экспериментально-аналитические математические модели оперируют большим количеством переменных величин и сложными зависимостями между ними. Большинство переменных сами являются функциями каких-то параметров (свойства жидкостей и газов, энергии активации и константы скорости химических реакций сильно зависят от температуры, архимедовы силы – от давления, сила гравитации – от расстояния между объектами и т.п.). Поэтому разработка и решение моделей связаны с использованием справочной информации.

До последнего времени (середины 80-х годов XX века) исследователи имели дело, главным образом, со справочниками, таблицами и диаграммами. Трудности поиска необходимой информации усугублялись неудобствами ее использования в таком виде для расчетов с помощью компьютера.

В настоящее время активно разрабатываются компьютерные базы данных, в частности, электронные таблицы свойств веществ в зависимости от температуры и давления (иногда с коэффициентами аппроксимирующих многочленов), электронные справочники характеристик химических реакций (константы скорости, энергии активации, тепловые эффекты), электронные каталоги типового технологического оборудования. Автоматический поиск нужной справочной информации в базе данных существенно упрощает процесс математического моделирования.

Компьютерные базы знаний содержат информацию о методиках решения задач, в том числе регламентированных нормативными документами (ГОСТ, РД, СТП). Они могут также содержать эмпирические закономерности реализации технологических процессов, рекомендации по действиям в конкретных ситуациях и экспертные оценки – неформализованные (словесные) правила, выработанные на основе анализа мнений специалистов в конкретной области. Экспертные оценки используются в случаях, когда невозможно найти однозначные решения, например, явные зависимости между параметрами исследуемого объекта (медицинские экспертные системы, системы диагностики оборудования).

7 ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ

Лабораторная работа №1. Составление регрессионной математической модели по зависимости одной выходной характеристики объекта от одной входной.

Задание: Сформировать регрессионную математическую модель объекта по полученной в результате эксперимента зависимости $y_i = f(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, N$, см. табл. 7.1, так, чтобы значение критерия Фишера превышало минимально допустимое для уровня значимости $p=0.05$.

Таблица 7.1 Зависимости, полученные в результате экспериментов

№ п/п	Зависимость выходной характеристики объекта y от входной x									
1	2									
1	x: -12	-10	-8	-6	-4	-2	0	2	4	6
	y: 3.76	7.82	6.25	2.11	-0.83	-3.11	-2.05	0.43	-0.35	-1.13
2	x: -11	-8	-5	-2	1	4	7	10	13	16
	y: -4.65	-2.43	-2.88	-1.15	-0.68	1.49	2.25	3.34	3.44	6.75
3	x: -9	-7	-5	-3	-1	1	3	5	7	9
	y: 5.95	6.25	4.08	3.85	3.44	0.81	-0.12	-3.11	-2.48	-4.72
4	x: -8	-6	-4	-2	0	2	4	6	8	10
	y: -3.95	-3.71	-3.18	-0.54	5.34	12.87	25.71	42.95	78.63	125.55
5	x: -11	-8	-5	-2	1	4	5	8	9	11
	y: 182.5	81.23	44.23	16.47	9.4	4.14	1.47	0.28	-0.12	-0.35
6	x: -9	-6	-3	-2	0	1	3	5	7	9
	y: -91.92	-33.42	-12.27	-7.48	-1.56	1.41	2.63	2.91	3.21	3.43
7	x: -12	-9	-6	-3	0	3	6	9	12	15
	y: 132.5	125.6	113.3	95.63	66.48	31.82	-0.17	-36.35	-79.43	-116.6
8	x: -14	-11	-8	-5	-2	1	4	7	10	13
	y: -62.45	-58.93	-56.88	-46.82	-25.62	1.4	30.62	44.62	49.38	50.85
9	x: -11	-10	-7	-4	-1	2	5	8	11	13
	y: -3.45	-5.89	-2.05	0.84	4.43	2.29	-0.84	-2.1	-1.45	1.87
10	x: -10	-8	-6	-4	-2	0	2	4	6	8
	y: -4.78	-4.44	-2.86	0.54	1.99	2.43	4.21	5.63	6.26	5.92
11	x: -10	-8	-6	-4	-2	0	2	4	6	8
	y: 7.32	4.18	2.59	2.82	-0.11	-4.41	-4.32	-5.08	-6.86	-6.00
12	x: -11	-9	-7	-5	-3	-1	1	3	5	7
	y: -0.25	-0.11	-0.035	1.06	3.62	8.49	15.32	37.41	80.42	157.5
13	x: -10	-8	-6	-5	-2	0	2	5	7	10
	y: 148.2	88.74	51.67	38.76	13.45	4.87	1.14	-0.77	-1.39	-2.34
14	x: -10	-7	-4	-1	0	2	5	8	10	12
	y: -114.6	-49.52	-25.46	-11.48	-7.96	1.57	6.03	6.85	6.63	6.71
15	x: -13	-10	-7	-4	-1	2	5	8	11	14
	y: 97.62	91.53	83.68	72.93	56.82	33.85	2.95	-34.49	-71.35	-106.4
16	x: -15	-12	-9	-6	-3	0	3	6	9	12
	y: -28.74	-27.15	-22.85	-18.68	-6.59	2.87	10.53	16.43	18.36	20.24
17	x: -14	-11	-8	-5	-2	1	4	7	10	13
	y: 37.32	24.18	22.59	12.82	10.11	-0.41	-5.32	-9.08	-16.86	-26.00
18	x: 0	3	7	9	13	16	19	23	25	29
	y: -3.25	-1.11	0.35	2.06	0.62	-1.49	-3.32	-3.41	-2.42	-1.5

<i>I</i>	<i>2</i>										
19	x:	-30	-27	-24	-20	-17	-14	-10	-7	-3	-1
	y:	14.2	8.74	1.67	-3.76	-6.45	-4.87	-1.14	0.77	2.39	7.34
20	x:	-19	-16	-14	-11	-7	-2	3	8	12	17
	y:	-174.6	-159.52	-125.46	-99.48	-71.96	-31.57	-16.03	-0.85	1.63	5.71
21	x:	-3	-1	1	3	5	7	9	11	13	15
	y:	7.62	3.3	-0.18	-0.3	0.21	2.5	5.35	4.9	1.5	0.64
24	x:	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
	y:	195.8	160.7	124.4	115.6	109.9	127.5	158.1	132.2	90.02	32.24
25	x:	0	25	50	75	100	125	150	175	200	225
	y:	0	1.12	32.65	110.5	125.3	48.68	104.2	171.1	283.7	401.9

Порядок выполнения работы:

- 1) построить эмпирическую линию регрессии;
- 2) выбрать порядок m многочлена $P_m(x) = a_0 \cdot \varphi_0(x) + a_1 \cdot \varphi_1(x) + a_2 \cdot \varphi_2(x) + \dots + a_m \cdot \varphi_m(x)$ и вид элементарных функций $\varphi_j(x)$, $j=0,1,\dots,m$; определить значения коэффициентов многочлена a_0, a_1, \dots, a_m , доставляющие минимум функции

$$R(a_0, a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=0}^N (a_0 \varphi_0(x_i) + \dots + a_m \varphi_m(x_i) - y_i)^2, \text{ т.е. составить и решить систему}$$

нелинейных уравнений: $\frac{\partial R(a_0, a_1, \dots, a_m)}{\partial a_j} = 0, j = 0, 1, \dots, m;$

- 3) вычислить значение среднеквадратичного отклонения $P_m(x)$ от $y_i = f(x_i)$,

$$i=0, \dots, N: \delta = \sqrt{\frac{1}{N+1} \cdot \sum_{i=0}^N [P_m(x_i) - y_i]^2} \text{ и среднего значения } y: \bar{y} = \sum_{i=0}^N y_i / (N+1);$$

- 4) вычислить значение дисперсии относительно среднего $s_y^2 = \sum_{i=0}^N (y_i - \bar{y})^2 / N$, ос-

таточной дисперсии $s_{\text{ост}}^2 = \sum_{i=0}^N [P_m(x_i) - y_i]^2 / (N - m)$ и критерия Фишера $F = s_y^2 / s_{\text{ост}}^2;$

- 5) если вычисленное значение F окажется меньше табличного при уровне значимости $p = 0.05$ и числах степеней свободы $f_1 = N = 9, f_2 = N - m$:

$$\frac{N - m \mid 4 \mid 5 \mid 6 \mid 7 \mid 8 \mid}{F_{0.05} \mid 6.05 \mid 4.85 \mid 4.15 \mid 3.75 \mid 3.45 \mid}, \text{ - изменить порядок } m \text{ многочлена } P_m(x) \text{ или}$$

- (и) элементарные функции $\varphi_j(x)$, $j=0,1,\dots,m$ и повторить действия п.п. 2)-5).

Контрольные вопросы:

1. Сущность экспериментального метода математического моделирования объектов химической технологии. Почему эти модели называют регрессионными?
2. Организация эксперимента на объекте исследования, основания для выбора входной и выходной характеристики. Виды экспериментов.
3. Порядок и цель построения эмпирической линии регрессии.
4. Способы определения значений коэффициентов аппроксимирующего многочлена $P_m(x)$.
5. Физический смысл критерия Фишера.

Лабораторная работа №2. Составление регрессионной математической модели по зависимости отклика объекта от трех факторов с применением методики планирования эксперимента.

Задание: сформировать математическую модель влияния трех технологических факторов на силу резания древесного сырья при цилиндрическом фрезеровании с применением ортогонального центрального композиционного плана эксперимента (ОЦКП), найти натуральные значения факторов, которым соответствует условный минимум полинома регрессии. Наименования факторов и уровни их варьирования приведены в табл. 7.2., варианты заданий – в табл. 7.3.

Таблица 7.2. Наименования факторов и уровни их варьирования

Факторы	Уровни варьирования				
	-1.215	-1	0	+1	+1.215
Ширина фрезерования – x_1 , мм	78.5	100	200	300	321.5
Время фрезерования – x_2 , мин.	34	60	180	300	326
Скорость подачи сырья – x_3 , м/мин.	6.28	8.0	16.0	24.0	25.72

Таблица 7.3. Результаты эксперимента

№ вар-та	№ от-клика	Сила резания, Н (при трех сериях опытов)														
		№ опыта согласно ОЦКП														
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>	<i>8</i>	<i>9</i>	<i>10</i>	<i>11</i>	<i>12</i>	<i>13</i>	<i>14</i>	<i>15</i>	<i>16</i>	<i>17</i>
1	y_1	17.67	51.74	18.9	78.58	24.69	97.15	23.86	142.63	16.93	86.03	47.08	62.63	38.59	81.2	63.71
	y_2	2.15	50.72	23.15	79.01	41.0	92.37	43.05	114.66	20.13	80.61	52.19	55.7	39.76	93.72	64.79
	y_3	5.51	86.2	6.57	56.19	4.13	95.44	32.28	109.06	26.4	119.14	54.49	63.37	56.46	88.55	66.93
2	y_1	7.78	48.49	43.64	82.28	61.82	96.01	50.64	160.25	13.28	118.74	30.41	81.46	52.6	95.48	71.36
	y_2	36.56	46.14	17.48	57.57	40.53	85.38	39.76	129.01	29.81	122.1	50.37	88.51	28.08	76.7	66.88
	y_3	40.85	44.96	34.32	76.02	24.49	122.44	67.85	119.49	45.05	100.46	42.23	84.11	39.43	53.15	54.72
3	y_1	17.67	51.74	18.9	78.58	24.69	97.15	23.86	142.63	16.93	86.03	47.08	62.63	38.59	81.2	63.71
	y_2	2.15	50.72	23.15	79.01	41.0	92.37	43.05	114.66	20.13	80.61	52.19	55.7	39.76	93.72	64.79
	y_3	7.78	48.49	43.64	82.28	61.82	96.01	50.64	160.25	13.28	118.74	30.41	81.46	52.6	95.48	71.36
4	y_1	17.67	51.74	18.9	78.58	24.69	97.15	23.86	142.63	16.93	86.03	47.08	62.63	38.59	81.2	63.71
	y_2	5.51	86.2	6.57	56.19	4.13	95.44	32.28	109.06	26.4	119.14	54.49	63.37	56.46	88.55	66.93
	y_3	7.78	48.49	43.64	82.28	61.82	96.01	50.64	160.25	13.28	118.74	30.41	81.46	52.6	95.48	71.36
5	y_1	2.15	50.72	23.15	79.01	41.0	92.37	43.05	114.66	20.13	80.61	52.19	55.7	39.76	93.72	64.79
	y_2	5.51	86.2	6.57	56.19	4.13	95.44	32.28	109.06	26.4	119.14	54.49	63.37	56.46	88.55	66.93
	y_3	7.78	48.49	43.64	82.28	61.82	96.01	50.64	160.25	13.28	118.74	30.41	81.46	52.6	95.48	71.36
6	y_1	17.67	51.74	18.9	78.58	24.69	97.15	23.86	142.63	16.93	86.03	47.08	62.63	38.59	81.2	63.71
	y_2	2.15	50.72	23.15	79.01	41.0	92.37	43.05	114.66	20.13	80.61	52.19	55.7	39.76	93.72	64.79
	y_3	36.56	46.14	17.48	57.57	40.53	85.38	39.76	129.01	29.81	122.1	50.37	88.51	28.08	76.7	66.88
7	y_1	2.15	50.72	23.15	79.01	41.0	92.37	43.05	114.66	20.13	80.61	52.19	55.7	39.76	93.72	64.79
	y_2	5.51	86.2	6.57	56.19	4.13	95.44	32.28	109.06	26.4	119.14	54.49	63.37	56.46	88.55	66.93
	y_3	36.56	46.14	17.48	57.57	40.53	85.38	39.76	129.01	29.81	122.1	50.37	88.51	28.08	76.7	66.88

Продолжение таблицы 7.3

<i>l</i>		2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
8	y_1	17.67	51.74	18.9	78.58	24.69	97.15	23.86	142.63	16.93	86.03	47.08	62.63	38.59	81.2	63.71	
	y_2	5.51	86.2	6.57	56.19	4.13	95.44	32.28	109.06	26.4	119.14	54.49	63.37	56.46	88.55	66.93	
	y_3	36.56	46.14	17.48	57.57	40.53	85.38	39.76	129.01	29.81	122.1	50.37	88.51	28.08	76.7	66.88	
9	y_1	7.78	48.49	43.64	82.28	61.82	96.01	50.64	160.25	13.28	118.74	30.41	81.46	52.6	95.48	71.36	
	y_2	36.56	46.14	17.48	57.57	40.53	85.38	39.76	129.01	29.81	122.1	50.37	88.51	28.08	76.7	66.88	
	y_3	17.67	51.74	18.9	78.58	24.69	97.15	23.86	142.63	16.93	86.03	47.08	62.63	38.59	81.2	63.71	
10	y_1	17.67	51.74	18.9	78.58	24.69	97.15	23.86	142.63	16.93	86.03	47.08	62.63	38.59	81.2	63.71	
	y_2	2.15	50.72	23.15	79.01	41.0	92.37	43.05	114.66	20.13	80.61	52.19	55.7	39.76	93.72	64.79	
	y_3	36.56	46.14	17.48	57.57	40.53	85.38	39.76	129.01	29.81	122.1	50.37	88.51	28.08	76.7	66.88	
11	y_1	2.15	50.72	23.15	79.01	41.0	92.37	43.05	114.66	20.13	80.61	52.19	55.7	39.76	93.72	64.79	
	y_2	5.51	86.2	6.57	56.19	4.13	95.44	32.28	109.06	26.4	119.14	54.49	63.37	56.46	88.55	66.93	
	y_3	40.85	44.96	34.32	76.02	24.49	122.44	67.85	119.49	45.05	100.46	42.23	84.11	39.43	53.15	54.72	
12	y_1	17.67	51.74	18.9	78.58	24.69	97.15	23.86	142.63	16.93	86.03	47.08	62.63	38.59	81.2	63.71	
	y_2	5.51	86.2	6.57	56.19	4.13	95.44	32.28	109.06	26.4	119.14	54.49	63.37	56.46	88.55	66.93	
	y_3	40.85	44.96	34.32	76.02	24.49	122.44	67.85	119.49	45.05	100.46	42.23	84.11	39.43	53.15	54.72	
13	y_1	7.78	48.49	43.64	82.28	61.82	96.01	50.64	160.25	13.28	118.74	30.41	81.46	52.6	95.48	71.36	
	y_2	40.85	44.96	34.32	76.02	24.49	122.44	67.85	119.49	45.05	100.46	42.23	84.11	39.43	53.15	54.72	
	y_3	17.67	51.74	18.9	78.58	24.69	97.15	23.86	142.63	16.93	86.03	47.08	62.63	38.59	81.2	63.71	
14	y_1	36.56	46.14	17.48	57.57	40.53	85.38	39.76	129.01	29.81	122.1	50.37	88.51	28.08	76.7	66.88	
	y_2	40.85	44.96	34.32	76.02	24.49	122.44	67.85	119.49	45.05	100.46	42.23	84.11	39.43	53.15	54.72	
	y_3	17.67	51.74	18.9	78.58	24.69	97.15	23.86	142.63	16.93	86.03	47.08	62.63	38.59	81.2	63.71	
15	y_1	7.78	48.49	43.64	82.28	61.82	96.01	50.64	160.25	13.28	118.74	30.41	81.46	52.6	95.48	71.36	
	y_2	36.56	46.14	17.48	57.57	40.53	85.38	39.76	129.01	29.81	122.1	50.37	88.51	28.08	76.7	66.88	
	y_3	2.15	50.72	23.15	79.01	41.0	92.37	43.05	114.66	20.13	80.61	52.19	55.7	39.76	93.72	64.79	
16	y_1	7.78	48.49	43.64	82.28	61.82	96.01	50.64	160.25	13.28	118.74	30.41	81.46	52.6	95.48	71.36	
	y_2	40.85	44.96	34.32	76.02	24.49	122.44	67.85	119.49	45.05	100.46	42.23	84.11	39.43	53.15	54.72	
	y_3	2.15	50.72	23.15	79.01	41.0	92.37	43.05	114.66	20.13	80.61	52.19	55.7	39.76	93.72	64.79	
17	y_1	36.56	46.14	17.48	57.57	40.53	85.38	39.76	129.01	29.81	122.1	50.37	88.51	28.08	76.7	66.88	
	y_2	40.85	44.96	34.32	76.02	24.49	122.44	67.85	119.49	45.05	100.46	42.23	84.11	39.43	53.15	54.72	
	y_3	2.15	50.72	23.15	79.01	41.0	92.37	43.05	114.66	20.13	80.61	52.19	55.7	39.76	93.72	64.79	
18	y_1	7.78	48.49	43.64	82.28	61.82	96.01	50.64	160.25	13.28	118.74	30.41	81.46	52.6	95.48	71.36	
	y_2	36.56	46.14	17.48	57.57	40.53	85.38	39.76	129.01	29.81	122.1	50.37	88.51	28.08	76.7	66.88	
	y_3	5.51	86.2	6.57	56.19	4.13	95.44	32.28	109.06	26.4	119.14	54.49	63.37	56.46	88.55	66.93	
19	y_1	7.78	48.49	43.64	82.28	61.82	96.01	50.64	160.25	13.28	118.74	30.41	81.46	52.6	95.48	71.36	
	y_2	40.85	44.96	34.32	76.02	24.49	122.44	67.85	119.49	45.05	100.46	42.23	84.11	39.43	53.15	54.72	
	y_3	5.51	86.2	6.57	56.19	4.13	95.44	32.28	109.06	26.4	119.14	54.49	63.37	56.46	88.55	66.93	
20	y_1	36.56	46.14	17.48	57.57	40.53	85.38	39.76	129.01	29.81	122.1	50.37	88.51	28.08	76.7	66.88	
	y_2	40.85	44.96	34.32	76.02	24.49	122.44	67.85	119.49	45.05	100.46	42.23	84.11	39.43	53.15	54.72	
	y_3	5.51	86.2	6.57	56.19	4.13	95.44	32.28	109.06	26.4	119.14	54.49	63.37	56.46	88.55	66.93	

Порядок выполнения работы:

1. Сформировать столбцы кодированных значений факторов согласно матрице ОЦКП

$$c_i = \text{col}(c_{ij} = 2 \cdot (x_{ij} - x_i^0) / (x_i^{\max} - x_i^{\min}) \mid j = 0, \dots, 14), i = 0, 1, 2,$$

где c_{ij} – кодированное j -е значение i -го фактора;

x_{ij} – натуральное j -е значение i -го фактора;

x_i^0 – натуральное значение i -го фактора в середине интервала варьирования;

x_i^{\max}, x_i^{\min} – границы интервала варьирования i -го фактора.

Сформировать столбцы значений откликов: $y_j = \text{col}(y_{ij} \mid i = 0, 1, 2), j = 0, \dots, 14$.

2. Определить усредненные значения откликов

$$\bar{y}_j = \sum_{i=0}^2 y_{ij} / 3, j = 0, \dots, 14,$$

оценки дисперсий значений откликов

$$S_j^2 = 0.5 \cdot \sum_{i=0}^2 (y_{ij} - \bar{y}_j)^2, j = 0, \dots, 14.$$

Проверить ошибочность опытов по критерию Стьюдента

$$t_{p_j}^1 = \left| \max_{i=0,1,2} \{y_{ij}\} - \bar{y}_j \right| / \sqrt{S_j^2} \leq t_T, t_{p_j}^2 = \left| \min_{i=0,1,2} \{y_{ij}\} - \bar{y}_j \right| / \sqrt{S_j^2} \leq t_T, j = 0, \dots, 14,$$

где t_T – табличное значение критерия Стьюдента для уровня значимости 0.05 при пятнадцати опытах, см. табл. 1А в приложениях.

Проверить воспроизводимость опытов по критерию Кохрена

$$G_p = \max_{j=0, \dots, 14} \{S_j^2\} / \sum_{j=0}^{14} S_j^2 \leq G_T,$$

где G_T – табличное значение критерия Кохрена для трех серий из пятнадцати опытов, см. табл. 2А в приложениях.

3. Оценить дисперсию воспроизводимости опытов

$$S_y^2 = \frac{1}{15} \cdot \sum_{j=0}^{14} S_j^2,$$

рассчитать значения коэффициентов полинома регрессии

$$b_0 = \frac{1}{15} \cdot \sum_{j=0}^{14} \bar{y}_j, b_l = \sum_{j=0}^{14} c_{lj} \cdot \bar{y}_j / \sum_{j=0}^{14} c_{lj}^2, l = 1, \dots, 10,$$

где l – индекс вектора-столбца матрицы ОЦКП,

c_{lj} – значение j -го элемента этого столбца.

Пересчитать значение b_0 :

$$b_0 = b_0 - a \cdot (b_{11} + b_{22} + b_{33}),$$

определить среднеквадратичное отклонение коэффициентов полинома регрессии

$$S_b^2 = \sqrt{S_y^2 / n},$$

и выбрать незначимые коэффициенты по условию:

$$t_{p_l} = |b_l| / \sqrt{S_b^2} \leq t_T, l \in (0, \dots, 10).$$

4. Записать полином регрессии со значимыми коэффициентами и определить расчетные значения отклика объекта. Рассчитать остаточную дисперсию

$$S_{\text{ост}}^2 = \frac{1}{f_{\text{ост}}} \cdot \sum_{j=1}^{14} (yr_j - \bar{y}_j)^2,$$

где yr_j – расчетное значение отклика для j -го опыта,

$f_{\text{ост}} = 15 - L + 1$ – число степеней свободы полинома,

L – число значимых коэффициентов полинома регрессии.

Оценить адекватность полинома регрессии по условию

$$F = S_{\text{ост}}^2 / S_y^2 > F_{0.95},$$

где $F_{0.95}$ – табличное значение критерия Фишера при доверительной вероятности 0.95 (уровне значимости 0.05) и степенях свободы $f_y = 15 \cdot (3-1) = 30$ и $f_{\text{ост}}$, см.

табл. 3А в приложениях.

5. Найти кодированные значения факторов, которым соответствует условный минимум отклика объекта. Перейти от кодированных значений факторов к натуральным: $x_i^{\text{опт}} = x_i^0 + 0.5 \cdot c_i^{\text{опт}} \cdot (x_i^{\text{max}} - x_i^{\text{min}})$, $i = 0, 1, 2$.

Контрольные вопросы:

1. Перечислите виды слагаемых, входящих в полный полином регрессии. Постройте полный полином регрессии для заданного числа факторов.
2. Способ и цель кодирования значений факторов эксперимента?
3. Способ и цель проверки значимости коэффициентов полинома регрессии?
4. Каков вид полинома регрессии, формируемого по результатам ОЦКП при числе факторов $m = 3$?
5. Порядок проверки адекватности полинома регрессии объекту исследования?

Лабораторная работа №3. Составление аналитической математической модели статики объекта с сосредоточенными параметрами.

Задание: сформировать математическую модель статики процесса теплопередачи в вертикальном емкостном аппарате с механической мешалкой аналитическим методом, произвести расчет максимального теплового потока, который может обеспечить теплообменное устройство, для пяти значений параметра модели, заданного диапазоном значений, построить график статической характеристики процесса. Варианты заданий приведены в табл. 7.4.

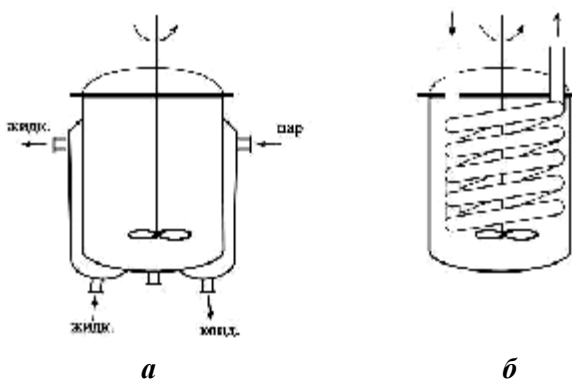


Рисунок 7.1 – Схема объекта моделирования
 а) аппарат с цилиндрической рубашкой,
 б) аппарат с встроенным концентрическим змеевиком

Схема вертикального емкостного аппарата с механической мешалкой и цилиндрической рубашкой представлена на рис. 7.1а, с встроенным концентрическим змеевиком – на рис. 7.1б.

Краткое описание процесса

Максимальный тепловой потока, который может обеспечить теплообменное устройство вертикального емкостного аппарата с механической мешалкой, определяется из основного уравнения теплопередачи: $\Phi_{\max} = K \cdot F_T \cdot \Delta t_{\text{ср}}$,

где $K = \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{\delta_{\text{ст}}}{\lambda_{\text{ст}}} + \frac{1}{\alpha_T} \right)^{-1}$ – коэффициент теплопередачи;

α, α_T – коэффициенты теплоотдачи от рабочей среды и теплоносителя, Вт/(м²·К);

F_T – площадь поверхности теплообмена, м²;

$\delta_{\text{ст}}$ – толщина стенки между теплоносителем и рабочей средой (стенки корпуса аппарата или трубы змеевика), м;

$\lambda_{\text{ст}}$ – коэффициент теплопроводности материала стенки, Вт/(м·К),

$\Delta t_{\text{ср}}$ – средняя разность температур теплоносителя и перемешиваемой среды °С.

Согласно РД 26-01-90-85 "Механические перемешивающие устройства. Метод расчета", при турбулентном режиме перемешивания коэффициент теплоотдачи от перемешиваемой среды не зависит от типа мешалки и определяется теплофизическими свойствами среды и затратами мощности на перемешивание N :

$$\alpha = 0.267 \cdot \left(\frac{N \cdot c \cdot \rho^2 \cdot \lambda^3}{V \cdot \mu^2} \right)^{0.25},$$

где c – удельная теплоемкость среды при средней температуре среды t , Дж/(кг·К);

μ – динамическая вязкость среды при температуре t , Па·с;

λ – коэффициент теплопроводности среды при температуре t , Вт/(м·К).

Методика расчета значений α_T и $\Delta t_{\text{ср}}$ зависит от типа теплообменного устройства и вида теплоносителя (жидкость, пар):

При нагревании или охлаждении среды путем подачи жидкости в цилиндрическую рубашку

$$\alpha_T = A \cdot \frac{\lambda_T}{H_T} \cdot (\text{Gr} \cdot \text{Pr})^f,$$

$$\Delta t_{\text{ср}} = (\Delta t_{\delta} - \Delta t_M) \cdot [\ln(\Delta t_{\delta} / \Delta t_M)]^{-1},$$

где $\text{Gr} = \frac{H_T^3 \cdot |t_o - t_T| \cdot g \cdot \beta_T \cdot \rho_T^2}{\mu_T^2}$ – критерий Грасгофа для теплоносителя;

$\text{Pr} = \mu_T \cdot c_T / \lambda_T$ – критерий Прандтля для теплоносителя;

H_T – высота рубашки, м;

t_T – средняя температура теплоносителя, °С;

$t_o = (t_T + t_{\text{ст1}}) / 2$ – определяющая температура, °С;

$t_{\text{ст1}}$ – температура стенки аппарата со стороны рубашки, °С;

$\Delta t_{\delta} = \max\{|t_{T1} - t|, |t_{T2} - t|\}$, $\Delta t_M = \min\{|t_{T1} - t|, |t_{T2} - t|\}$;

t_{T1}, t_{T2} – начальная и конечная температура теплоносителя, °С;

g – ускорение свободного падения, м/сек²;

β_T – коэффициент объемного расширения теплоносителя при температуре t_o , 1/К;

ρ_T – плотность теплоносителя при температуре t_o , кг/м³;

c_T – удельная теплоемкость теплоносителя при температуре t_o , Дж/(кг·К);

μ_T – динамическая вязкость теплоносителя при температуре t_o , Па·с;

λ_T – коэффициент теплопроводности теплоносителя при температуре t_0 , Вт/(м·К);

A, f – константы, значения которых зависят от значения $Gr \cdot Pr$:

если $Gr \cdot Pr > 2 \cdot 10^7$, то $A = 0.135, f = 0.33$,

если $500 < Gr \cdot Pr \leq 2 \cdot 10^7$, то $A = 0.54, f = 0.25$,

если $Gr \cdot Pr \leq 500$, то $A = 1.18, f = 0.125$.

При нагревании среды путем подачи конденсирующегося пара в цилиндрическую рубашку

$$\Delta t_{cp} = |t_k - t|,$$

$$\alpha_T = 0.943 \cdot \left[\frac{\lambda_k^3 \cdot \rho_k \cdot (\rho_k - \rho_n) \cdot g \cdot r_k}{\mu_k \cdot H_T \cdot |t_k - t_{ct1}|} \right]^{0.25},$$

если параметр $R = \frac{r_k}{c_k \cdot |t_k - t_{ct1}|} \geq 5$ (случай невозмущенного ламинарного стекания

пленки при отсутствии градиента температуры по ее толщине).

Здесь t_k – температура конденсации пара, °С;

r_k – удельная теплота конденсации пара при температуре t_k , Дж/кг;

ρ_k – плотность конденсата при температуре t_k , кг/м³;

c_k – удельная теплоемкость конденсата при температуре t_k , Дж/(кг·К);

μ_k – динамическая вязкость конденсата при температуре t_k , Па·с;

λ_k – коэффициент теплопроводности конденсата при температуре t_k , Вт/(м·К);

ρ_n – плотность пара при температуре t_k , кг/м³.

Если же параметр $R < 5$ и число Рейнольдса для пленки конденсата

$Re_n = \frac{\Phi}{\pi \cdot D \cdot r_k \cdot \mu_k} \leq 1$, то значение α_T , рассчитанное по вышеприведенной формуле, умножается на

$$\varepsilon_T = \left[\left(\frac{\lambda_{kct}}{\lambda_k} \right)^3 \cdot \frac{\mu_k}{\mu_{kct}} \right]^{0.125} \cdot \left[1 + 0.4 \cdot |t_k - t_{ct1}| \cdot \frac{c_k}{r_k} \right]^{0.6},$$

где μ_{kct} – динамическая вязкость конденсата при температуре t_{ct1} , Па·с;

λ_{kct} – коэффициент теплопроводности конденсата при температуре t_{ct1} , Вт/м·К.

При $R < 5$ и $1 < Re_n \leq 250$ скорректированное значение α_T умножается на

$$\varepsilon_B = Re_n^{0.4},$$

а при $R < 5$ и $Re_n > 250$ определяется по формуле

$$\alpha_T = \frac{Re_n \cdot [g \cdot (1 - \rho_n / \rho_k)]^{1/3} \cdot \lambda_k \cdot \rho_k^{2/3}}{\mu_k^{2/3} \cdot [2300 + 41 \cdot Pr_k^{-0.5} \cdot (Re_n^{0.75} - 89) \cdot (Pr_k / Pr_{kct})^{0.25}]},$$

где $Pr_k = \mu_k \cdot c_k / \lambda_k$ – число Прандтля для конденсата при температуре t_k ;

$Pr_{kct} = \mu_{kct} \cdot c_{kct} / \lambda_{kct}$ – число Прандтля для конденсата при температуре t_{ct1} .

При нагревании или охлаждении среды путем подачи жидкости во встро-
енный змеевик

$$\alpha_T = 0.023 \cdot \frac{\lambda_T}{d_{3M}} \cdot Re^{0.8} \cdot Pr^{0.33} \cdot \left(\frac{\mu_T}{\mu_{Tct}} \right)^{0.25} \cdot \left(1 + 3.6 \cdot \frac{d_{3M}}{D_{3M}} \right), \quad (1.58)$$

$$\Delta t_{cp} = (\Delta t_0 - \Delta t_M) \cdot [\ln(\Delta t_0 / \Delta t_M)]^{-1},$$

где $Re = \frac{\rho_T \cdot w_T \cdot d_{3M}}{\mu_T}$ – число Рейнольдса для теплоносителя при температуре t_T ;

$$w_T = \frac{4 \cdot V_T}{\pi \cdot d_{3M}^2} \text{ – скорость течения теплоносителя, м/с;}$$

$$V_T = \frac{\Phi}{|t_{T1} - t_{T2}| \cdot \rho_T \cdot c_T} \text{ – объемный расход теплоносителя, м}^3\text{/с;}$$

Φ – тепловой поток, который необходимо обеспечить, Вт;

d_{3M}, D_{3M} – внешний диаметр трубы змеевика и диаметр его навивки, м;

λ_T – коэффициент теплопроводности теплоносителя при температуре t_T , Вт/(м·К);

μ_T – динамическая вязкость теплоносителя при температуре t_T , Па·с;

μ_{CT1} – динамическая вязкость теплоносителя при температуре t_{CT1} , Па·с;

t_{CT1} – температура теплоносителя вблизи внутренней стенки змеевика, °С.

При нагревании среды путем подачи конденсирующегося пара во встроеныый змеевик

$$\alpha_T = \begin{cases} 0.555 \cdot \left\{ \frac{\lambda_K^3 \cdot \rho_K \cdot (\rho_K - \rho_{II}) \cdot g \cdot [r_K + 0.68 \cdot c_K \cdot (t_K - t_{CT})]}{\mu_K \cdot d_{3M} \cdot (t_K - t_{CT})} \right\}^{0.25}, & Re_{II} < 35000 \\ 0.086 \cdot \frac{\lambda_K}{d_{3M}} \cdot \left[\left(\sqrt{\frac{\rho_K}{\rho_{II}}} + 1 \right) \cdot \frac{w_K \cdot d_{3M}}{\mu_K} \right]^{0.8} \cdot Pr_K^{0.33}, & Re_{II} \geq 35000 \end{cases},$$

$$\Delta t_{cp} = |t_K - t|,$$

где $Re_{II} = \frac{4 \cdot G_K}{\pi \cdot d_{3M} \cdot r_K \cdot \mu_K}$ – число Рейнольдса для пленки конденсата;

$G_K = \Phi / r_K$ – массовый расход конденсата, кг/с;

$w_K = \frac{4 \cdot G_K}{\pi \cdot d_{3M}^2}$ – массовая скорость конденсата, кг/м²/с.

Область применения этих формул ограничена выполнением условия

$$\Phi \leq \Phi_{пред},$$

где $\Phi_{пред} = 2600 \cdot r_K \cdot d_{3M}^{2.67} \cdot \sqrt{\frac{h_{3M}}{\pi \cdot D_{3M}}}$ – предельный тепловой поток, при котором

змеевик заполняется конденсатом, Вт.

Для определения значений α_T , зависящих от температур теплоносителя вблизи внутренней стенки t_{CT1} и температур рабочей среды вблизи внешней стенки теплообменного устройства t_{CT2} необходимо составить и решить уравнения баланса тепла, переданного от теплоносителя к рабочей среде конвекцией и теп-

$$\alpha_T |t_T - t_{CT1}| = \alpha(t_{CT2} - t);$$

лопроводностью:

$$\alpha_T |t_T - t_{CT1}| = \frac{\lambda_{CT}}{\delta_{CT}} |t_{CT1} - t_{CT2}|.$$

Таблица 8.4. Характеристики процесса теплообмена в вертикальном емкостном аппарате

№ вар-та	Объект моделир-я	Характеристики процесса и аппарата														
		$V, \text{ м}^3$	$t, \text{ }^\circ\text{C}$	$\rho, \text{ кг/м}^3$	$c, \text{ Дж/(кг}\cdot\text{K)}$	$\lambda, \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$	$\mu, \text{ Па}\cdot\text{с}$	$\Phi, \text{ Вт}$	$N, \text{ кВт}$	$H, \text{ м}$	$F, \text{ м}^2$	$\delta_{\text{ст}}, \text{ м}$	$\lambda_{\text{ст}}, \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$	$t_{\text{T1}}, \text{ }^\circ\text{C}$	$t_{\text{T2}}, \text{ }^\circ\text{C}$	
1	Аппарат с рубашкой, обратная вода	2.8	60–72	1950	1350	0.35	0.08	78640	1.23	2.2	11.5	0.012	17.5	20	26	
2		2.4–3.2	70	1950	1350	0.35	0.08	78640	1.23	2.2	11.5	0.012	17.5	20	26	
3		2.8	70	1950	1350	0.35	0.08	78640	1.0–3.0	2.2	11.5	0.012	17.5	20	26	
4		2.8	70	1950	1350	0.35	0.08	78640	1.23	2.2	11.5	0.012	17.5	20	26–34	
5		2.8	70	1950	1350	0.35	0.08	78640	1.23	2.2	11.5	0.012	17.5	16–24	26	
	Аппарат с рубашкой, пар CH_3OH	$V, \text{ м}^3$	$t, \text{ }^\circ\text{C}$	$\rho, \text{ кг/м}^3$	$c, \text{ Дж/(кг}\cdot\text{K)}$	$\lambda, \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$	$\mu, \text{ Па}\cdot\text{с}$	$\Phi, \text{ Вт}$	$N, \text{ Вт}$	$D, \text{ м}$	$H, \text{ м}$	$F, \text{ м}^2$	$\delta_{\text{ст}}, \text{ м}$	$\lambda_{\text{ст}}, \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$	$P, \text{ МПа}$	
6		2.8	70–90	981	2283	0.16	0.000564	178200	1.23	1.8	2.2	11.5	0.008	46.5	0.4	
7		2.4–3.2	80	981	2283	0.16	0.000564	178200	1.23	1.8	2.2	11.5	0.008	46.5	0.4	
8		2.8	80	981	2283	0.16	0.000564	178200	1.0–3.0	1.8	2.2	11.5	0.008	46.5	0.4	
9		2.8	80	981	2283	0.16	0.000564	178200	1.23	1.8	2.2	11.5	0.006–0.014	46.5	0.4	
10	2.8	80	981	2283	0.16	0.000564	178200	1.23	1.8	2.2	11.5	0.008	46.5	0.3–0.7		
	Аппарат со змеевиком, холодильный рассол	$V, \text{ м}^3$	$t, \text{ }^\circ\text{C}$	$\rho, \text{ кг/м}^3$	$c, \text{ Дж/(кг}\cdot\text{K)}$	$\lambda, \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$	$\mu, \text{ Па}\cdot\text{с}$	$\Phi, \text{ Вт}$	$N, \text{ Вт}$	$D_3, \text{ м}$	$d_3, \text{ м}$	$\delta_{\text{ст}}, \text{ м}$	$z_3, \text{ шт.}$	$\lambda_{\text{ст}}, \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$	$t_{\text{T1}}, \text{ }^\circ\text{C}$	$t_{\text{T2}}, \text{ }^\circ\text{C}$
11		2.8	15–27	1950	1350	0.35	0.08	78640	1.23	1.2	0.057	0.003	8	17.5	-12	-3
12		2.4–3.2	20	1950	1350	0.35	0.08	78640	1.23	1.2	0.057	0.003	8	17.5	-12	-3
13		2.8	20	1950	1350	0.35	0.08	78640	1.0–3.0	1.2	0.057	0.003	8	17.5	-12	-3
14		2.8	20	1950	1350	0.35	0.08	78640	1.23	1.2	0.057	0.003	8	17.5	-12	-8–0
15	2.8	20	1950	1350	0.35	0.08	78640	1.23	1.2	0.057	0.003	8	17.5	-15 – -7	-3	
	Аппарат со змеевиком, водяной пар	$V, \text{ м}^3$	$t, \text{ }^\circ\text{C}$	$\rho, \text{ кг/м}^3$	$c, \text{ Дж/(кг}\cdot\text{K)}$	$\lambda, \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$	$\mu, \text{ Па}\cdot\text{с}$	$\Phi, \text{ Вт}$	$N, \text{ Вт}$	$D_3, \text{ м}$	$d_3, \text{ м}$	$z_3, \text{ шт.}$	$\delta_{\text{ст}}, \text{ м}$	$\lambda_{\text{ст}}, \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$	$P, \text{ МПа}$	
16		2.8	70–90	981	2283	0.16	0.000564	278200	1.23	1.2	0.057	8	0.003	17.5	0.3	
17		2.4–3.2	80	981	2283	0.16	0.000564	278200	1.23	1.2	0.057	8	0.003	17.5	0.3	
18		2.8	80	981	2283	0.16	0.000564	278200	1.0–3.0	1.2	0.057	8	0.003	17.5	0.3	
19		2.8	80	981	2283	0.16	0.000564	278200	1.23	1.2	0.057	8	0.003	17.5	0.2–0.6	
20	2.8	80	981	2283	0.16	0.000564	278200	1.23	1.2	0.057	4–12	0.003	17.5	0.3		

Порядок выполнения работы:

1. Записать зависимости свойств указанного теплохладагента от температуры, см. приложение Б.
2. Записать соотношения для расчета величин α , α_t , Δt_{cp} .
3. Решить систему уравнений баланса тепла, переданного от теплоносителя к рабочей среде конвекцией и теплопроводностью, для одного из значений параметра процесса, заданного диапазоном значений.
4. Определить значения K и Φ_{max} .
5. Выполнить действия п.п. 2,3 для пяти значений параметра модели, заданного диапазоном значений. Построить график зависимости значения Φ_{max} от изменений этого параметра (статической характеристики процесса).

Контрольные вопросы:

1. Сущность аналитического метода построения математических моделей объектов химической технологии, последовательность построения аналитической модели.
2. Понятия объекта с сосредоточенными и распределенными параметрами, модели статики и динамики объекта, соответствие этих понятий виду математического описания объекта.
3. Группы математических соотношений аналитической модели.
4. Способы проверки адекватности аналитических математических моделей.
5. Преимущества и недостатки аналитических моделей по сравнению с регрессионными.

Лабораторная работа №4. Составление экспериментально-аналитической математической модели кинетики объекта с сосредоточенными параметрами.

Задание: составить математическую модель кинетики периодического процесса фильтрования. Найти значение указанного параметра модели с использованием полученной в результате эксперимента кинетической характеристики фильтра, построить график экспериментальной и расчетной кинетической характеристики фильтра. Варианты заданий приведены в табл. 7.5.

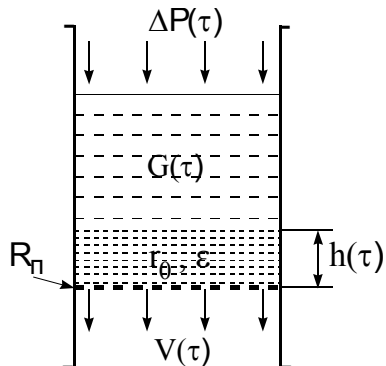


Рисунок 7.2 – Схема процесса периодического фильтрования

Схема процесса периодического фильтрования представлена на рис. 7.2. Обозначения к рисунку: $\Delta P(\tau)$ - зависимость перепада давления на фильтре от времени; $G(\tau)$ - масса обработанной суспензии на момент времени τ ; $V(\tau)$ - объем полученного фильтрата к моменту времени τ ; $h(\tau)$ - толщина образовавшегося за время τ осадка; R_{π} - сопротивление фильтрующей ткани; r_o - удельное сопротивление осадка (сопротивление слоя осадка толщиной 1 м); ε - порозность слоя осадка (доля пустот).

Допущения:

1. Изменение перепада давления во времени $\Delta P(\tau)$ характеризуется известной аналитической функцией.

2. Сопротивление фильтрующей перегородки неизменно в течение всего периода фильтрования.
3. Осадок несжимаем, его сопротивление определяется только толщиной слоя.
4. Жидкая фаза в осадке занимает только объем его пустот.
5. Унос твердой фазы суспензии с фильтратом отсутствует.

Порядок выполнения работы:

1. Зафиксировать начальное значение искомого параметра (r_0 , R_n или ε);
2. Записать зависимость сопротивления слоя осадка от объема полученного

фильтрата: $R_o(V) = h(V) \cdot r_o$, где $r_o = \frac{110 \cdot \mu \cdot (1 - \varepsilon)^2}{d^2 \cdot \Phi^2 \cdot \varepsilon^3}$, μ - динамическая вязкость

жидкой фазы суспензии, d - средний диаметр частиц твердой фазы суспензии, Φ - коэффициент формы частиц, $h(V) = V_o(V)/F$, где F - площадь поверхности фильт-

рования, $V_o(V) = \frac{G(V) \cdot x}{\rho \cdot (1 - \varepsilon)}$ - объем образовавшегося осадка. Объем фильтрата ра-

вен разности объема жидкой фазы суспензии $V_{ж}(V) = [G(V) \cdot (1 - x)]/\rho_{ж}$ и объема жидкости, оставшейся в пустотах осадка, $V_{жо}(V) = V_o(V) \cdot \varepsilon$, т.е.

$G(V) = V \cdot \left[\frac{1 - x}{\rho_{ж}} - \frac{x \cdot \varepsilon}{\rho \cdot (1 - \varepsilon)} \right]^{-1}$, где $\rho_{ж}$ - плотность жидкой фазы суспензии.

3. Решить основное уравнение фильтрования $\frac{dV}{d\tau} = \frac{\Delta P(\tau) \cdot F}{R_n + R_o(V)}$, получить

расчетную кинетическую характеристику фильтра $V(\tau)$, $h(\tau)$ или $G(\tau)$ (две последние получаются из $V(\tau)$ по формулам п. 2));

4. Определить значение среднеквадратичного отклонения расчетной кинетической характеристики от экспериментальной;
5. Подобрать значение искомого параметра модели, которому соответствует минимум среднеквадратичного отклонения, построить графики экспериментальной и расчетной кинетической характеристики фильтра.

Контрольные вопросы:

1. Сущность экспериментально-аналитического метода построения математических моделей.
2. Принцип формирования вектора определяемых параметров модели.
3. Перечень необходимых серий опытов, правило выбора интервала наблюдений при снятии статических и динамических характеристик объекта.
4. Причины получения значений параметров экспериментально-аналитической модели, существенно отличающихся от справочных.
5. Ограничения на использование экспериментально-аналитических моделей.

Таблица 7.5. Характеристики процесса фильтрования

№ п/п	Содержание твердой фазы в суспензии (x , масс.%)	Диаметр частиц твердой фазы (d , мкм)	Коэффициент формы частиц (Φ)	Плотность твердой фазы (ρ , кг/м ³)	Порозность слоя осадка (ϵ)	Температура суспензии (t , °С)	Сопротивление фильтрующей ткани (R_n , кг/м ² ·с)	Площадь поверхности фильтрования (F , м ²)	Длительность фильтрования (τ_k , ч)	Перепад давления на фильтре ($\Delta P(\tau)$, кг/м ²)	Кинетическая характеристика фильтра, полученная в результате эксперимента	Определяемый параметр
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1	8	-	-	2500	0.4	40	$6 \cdot 10^6$	10	1	1, $\tau < \tau_k/2$ 2, $\tau_k/2 < \tau < \tau_k$	$V, \text{м}^3$: 20 29 36 47 56 64 $\tau, \text{мин}$: 10 20 30 40 50 60	r_o
2	5	12	0.7	3500	0.75	30	-	6	1.5	$1 + \tau$	$h, \text{см}$: 9.5 20.5 29 38 47 56 $\tau, \text{мин}$: 15 30 45 60 75 90	R_n
3	10	15	0.75	3000	-	50	$1.2 \cdot 10^8$	5	1.2	$4 + \tau^2$	$G, \text{т}$: 7.5 12.5 19 23 29 33 $\tau, \text{мин}$: 12 24 36 48 60 72	ϵ
4	12	-	-	1800	0.45	20	$5 \cdot 10^6$	3	2	1, $\tau < \tau_k/4$ 2, $\tau_k/4 < \tau < \tau_k$	$h, \text{см}$: 21 34 46 54 62 69 $\tau, \text{мин}$: 20 40 60 80 100 120	r_o
5	8	20	0.85	2000	0.65	60	-	7	0.8	$1 + 2 \cdot \tau$	$G, \text{т}$: 12 23 32 43 52 61 $\tau, \text{мин}$: 8 16 24 32 40 48	R_n
6	5	10	0.9	3000	-	50	$9 \cdot 10^7$	8	1.3	$3.5 + \tau^{1.5}$	$V, \text{м}^3$: 9 15 20 25 28 32 $\tau, \text{мин}$: 13 26 39 52 65 78	ϵ
7	7	-	-	4500	0.6	10	$3 \cdot 10^6$	10	2	1, $\tau < \tau_k/3$ 2, $\tau_k/3 < \tau < \tau_k$	$G, \text{т}$: 17 22 32 40 46 51 $\tau, \text{мин}$: 20 40 60 80 100 120	r_o
8	5	14	0.95	3700	0.5	70	-	12	1.6	$1 + 1.5 \cdot \tau$	$V, \text{м}^3$: 5 12 21 30 42 53 $\tau, \text{мин}$: 16 32 48 64 80 96	R_n
9	11	18	0.8	2300	-	30	$9.1 \cdot 10^6$	6	1.5	$0.5 + 2 \cdot \tau^2$	$h, \text{см}$: 7 11 18 22 30 37 $\tau, \text{мин}$: 15 30 45 60 75 90	ϵ
10	10	-	-	2800	0.35	25	$4 \cdot 10^6$	11	1	1, $\tau < \tau_k/5$ 2, $\tau_k/5 < \tau < \tau_k$	$V, \text{м}^3$: 17 28 37 44 51 56 $\tau, \text{мин}$: 10 20 30 40 50 60	r_o
11	6	25	0.7	2500	0.5	45	-	6	0.8	$1 + 4 \cdot \tau$	$h, \text{см}$: 6.5 11.5 18 22.5 29 34 $\tau, \text{мин}$: 8 16 24 32 40 48	R_n

Продолжение таблицы 7.5

<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>	<i>8</i>	<i>9</i>	<i>10</i>	<i>11</i>	<i>12</i>	<i>13</i>
12	9	15	1.0	3600	-	50	$8 \cdot 10^7$	2	1.8	$5 + \tau^{0.5}$	G, т: 5 10 13.5 18 20 22 τ, мин: 18 36 54 72 90 108	ϵ
13	10	-	-	3000	0.3	50	$1 \cdot 10^7$	3	1.2	$0.5 + \tau^2/2$	h, см: 10 17 22 29 34 41 τ, мин: 12 24 36 48 60 72	r_o
14	12	20	0.75	1800	0.65	20	-	5	2	1, $\tau < \tau_K/2$ 2, $\tau_K/2 < \tau < \tau_K$	G, т: 10 16 20 27 32 37 τ, мин: 20 40 60 80 100 120	R_n
15	8	10	0.95	2000	-	60	$7 \cdot 10^7$	9	0.8	$4.5 + \exp(\tau)$	V, м³: 10 18 24 30 35 40 τ, мин: 8 16 24 32 40 48	ϵ
16	5	-	-	3000	0.25	50	$9 \cdot 10^6$	7	1.3	$0.5 + 3 \cdot \tau$	G, т: 12 21 30 40 48 57 τ, мин: 13 26 39 52 65 78	r_o
17	7	18	0.75	4500	0.55	15	-	12	2	1, $\tau < \tau_K/4$ 2, $\tau_K/4 < \tau < \tau_K$	V, м³: 13 28 42 56 68 77 τ, мин: 20 40 60 80 100 120	R_n
18	5	20	0.7	3700	-	65	$1.2 \cdot 10^7$	10	1.6	$1.8 + 1.5 \cdot \tau^{2.5}$	h, см: 5 10 12 15 18 20 τ, мин: 16 32 48 64 80 96	ϵ
19	11	-	-	2300	0.5	30	$1.1 \cdot 10^7$	4	1.5	$1.5 + \tau^3/4$	V, м³: 7.5 10.5 12 15 18 20 τ, мин: 15 30 45 60 75 90	r_o
20	10	8	0.95	2800	0.45	25	-	6	1.4	1.2, $\tau < \tau_K/3$ 2, $\tau_K/3 < \tau < \tau_K$	h, см: 1 2.5 10 15 20 23 τ, мин: 14 28 42 56 70 84	R_n
21	6	15	0.8	2500	-	45	$7 \cdot 10^7$	2	1	$4.2 + 2.5 \cdot \tau$	G, т: 3.5 6 8 11 12.5 16 τ, мин: 10 20 30 40 50 60	ϵ
22	9	-	-	3600	0.55	50	$8 \cdot 10^6$	4	1.5	$1 + \exp(\tau/2)$	h, см: 18 27 33 40 47 52 τ, мин: 15 30 45 60 75 90	r_o
23	11	17	0.75	1500	0.35	55	-	11	1.8	1.1, $\tau < \tau_K/5$ 2, $\tau_K/5 < \tau < \tau_K$	G, т: 1.5 7.5 12 18 22 26 τ, мин: 18 36 54 72 90 108	R_n
24	7	9	0.9	2200	-	35	$6 \cdot 10^6$	9	1.6	$3.6 + 2.5 \cdot \tau^{0.5}$	V, м³: 12 18 24 29 32 36 τ, мин: 16 32 48 64 80 96	ϵ
25	9	-	-	3200	0.4	75	$5 \cdot 10^6$	8	1.4	$1 + \exp(\tau/3)$	G, т: 12 18 22 27 30 32 τ, мин: 14 28 42 56 70 84	r_o

Лабораторная работа №5. Решение уравнений математических моделей в среде MathCAD.

Задание: 1) отделить минимальный положительный корень нелинейного уравнения из табл. 7.6 и найти его с применением команды **root**;

2) решить систему линейных уравнений из табл. 7.7 с методом обращения матрицы системы;

3) решить систему нелинейных уравнений из табл. 7.8 с применением блока **Given/Find**;

4) Решить задачу Коши для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка из табл. 7.9 с применением программы **Rkadapt**;

5) Решить уравнение теплопроводности или молекулярной диффузии из табл. 7.10, 7.11 для бесконечной пластины толщиной R с применением программы **numol**. Определить зависимость от времени указанного дополнительного параметра процесса.

Таблица 7.6 Нелинейные уравнения

№ п/п	У р а в н е н и е
1	$1.018 \cdot x - \sqrt{8.977 + 1.18 \cdot x} + 0.978 \cdot x^2 + 2.071 = 0$
2	$0.111 \cdot \text{Sin}(1.022 \cdot x) + 0.491 \cdot x^3 - 1.103 = 0$
3	$1.009 \cdot x^2 - 1.107 \cdot x \cdot \ln(0.987 \cdot x + 1.131) = 0$
4	$1.114 \cdot e^{1.312 \cdot x} + 1.011 \cdot \text{Sin}^2(0.929 \cdot x) - 1.387 = 0$
5	$3.125 - 0.991 \cdot e^{0.492 \cdot x} - 1.981 \cdot (0.927 \cdot x - 1.025)^2 = 0$
6	$1.978 \cdot x^2 - 1.247 \cdot \ln(1.065 \cdot x + 1.311) - 1.256 = 0$
7	$1.047 \cdot e^{0.487 \cdot x} \cdot (1.971 - 1.033 \cdot x) - 1.137 = 0$
8	$1.116 \cdot x^2 - 0.951 \cdot \sqrt{\ln(0.975 \cdot x + 2.012)} = 0$
9	$0.843 \cdot \text{tg}^2(0.995 \cdot x - 0.751) - 1.152 \cdot x + 0.868 = 0$
10	$1.432 \cdot e^{-0.895 \cdot x} - 0.295 \cdot x^3 + 0.234 \cdot x + 0.847 = 0$
11	$0.613 \cdot x^3 + 5.522 \cdot \sqrt{0.697 \cdot x + 1.123} - 9.467 = 0$
12	$1.102 \cdot \ln(1.071 \cdot x + 1.979) - 0.457 \cdot x^3 + 0.321 = 0$
13	$1.137 - 1.081 \cdot x^2 - 0.417 \cdot e^{0.972 \cdot x} = 0$
14	$\sqrt{9.981 - 0.988 \cdot x^2} - 0.257 \cdot x^3 - 1.965 = 0$
15	$\ln(7.611 \cdot x + 1.996) - 2.687 \cdot x^2 + 1.142 = 0$
16	$0.572 \cdot \text{Sin}(1.178 \cdot x) - 0.751 \cdot x^2 + 0.063 = 0$
17	$e^{1.192 \cdot x} - \sqrt{1.121 \cdot x + \sqrt{0.297 \cdot x + 0.997}} - 1.182 = 0$
18	$\ln(\sqrt{e^{1.011 \cdot x - 3.028}} + e^{-1.979 \cdot x} + 9.872 \cdot x) - 2.292 = 0$
19	$0.728 \cdot \text{Sin}(1.031 \cdot x^2) - 1.148 \cdot x + 1.211 = 0$

1	2
20	$1.968 \cdot x \cdot (0.752 \cdot x - 1.388)^2 - \sqrt{8.611 - 0.877 \cdot x^2} + 1.881 = 0$
21	$0.732 \cdot \text{Cos}(1.439 \cdot x^2 + 0.727) + 1.093 \cdot x^2 - 0.781 = 0$
22	$2.309 \cdot \ln(0.872 \cdot x + 2.029) + e^{0.568 \cdot x + 0.313} - 0.281 \cdot x^3 - 2.83 = 0$
23	$2.321 \cdot \text{Sin}(0.719 \cdot x + 1.048) - e^{-0.298 \cdot x} - 1.471 \cdot x - 0.919 = 0$
24	$\ln(1.019 \cdot x + 2.739) - 0.568 \cdot x^2 + 0.641 \cdot \text{Sin}(1.211 \cdot x) - 0.978 = 0$
25	$1.842 \cdot (0.809 + 1.331 \cdot e^{1.211 \cdot x})^{-1} - 0.862 \cdot e^{0.748 \cdot x} + 1.222 \cdot x^2 - 0.332 = 0$

Таблица 7.7. Системы линейных уравнений

№ п/п	Система уравнений	№ п/п	Система уравнений
1	$-2.2 \cdot x_1 + 12.1 \cdot x_2 + 4.3 \cdot x_3 - 4.3 \cdot x_5 = 26.3$ $-1.2 \cdot x_1 + 4.2 \cdot x_2 - 2.2 \cdot x_3 - 10.8 \cdot x_4 = -42.6$ $3.1 \cdot x_1 + 2.2 \cdot x_2 + 13.4 \cdot x_3 - 4.1 \cdot x_4 - 3.3 \cdot x_5 = 24.7$ $2.4 \cdot x_1 + 3.2 \cdot x_2 - 1.2 \cdot x_3 - 1.4 \cdot x_4 + 9.2 \cdot x_5 = 18$ $10.2 \cdot x_1 + 2.1 \cdot x_2 - 3.2 \cdot x_3 - 2.2 \cdot x_4 = -4$	2	$-3.1 \cdot x_1 + 2.6 \cdot x_2 - 23.6 \cdot x_3 + 6.9 \cdot x_4 - 0.6 \cdot x_5 = -180.5$ $-13.5 \cdot x_1 - 4.3 \cdot x_2 + 2.4 \cdot x_3 + 4.3 \cdot x_5 = 19.4$ $0.5 \cdot x_1 - 16.4 \cdot x_2 - 7.8 \cdot x_3 + 2.3 \cdot x_4 - 1.4 \cdot x_5 = 5.9$ $4.3 \cdot x_1 + 5.2 \cdot x_2 - 0.7 \cdot x_3 + 4.7 \cdot x_4 - 11.3 \cdot x_5 = -93.8$ $2.9 \cdot x_1 - 0.9 \cdot x_2 + 3.6 \cdot x_3 - 19.4 \cdot x_4 + 3.7 \cdot x_5 = 178$
3	$-1.5 \cdot x_1 + 6.3 \cdot x_2 - 1.8 \cdot x_3 + 12.4 \cdot x_4 = -62.9$ $9.4 \cdot x_1 - 2.4 \cdot x_2 + 2.9 \cdot x_3 - 4.3 \cdot x_5 = 115.5$ $-3.4 \cdot x_2 + 10.9 \cdot x_3 - 3.7 \cdot x_4 + 4.2 \cdot x_5 = 40.2$ $3.7 \cdot x_1 - 1.4 \cdot x_2 + 0.1 \cdot x_3 + 2.9 \cdot x_4 - 9.7 \cdot x_5 = 76.9$ $2.3 \cdot x_1 + 15.2 \cdot x_2 - 4.3 \cdot x_4 + 2 \cdot x_5 = -28.6$	4	$17.2 \cdot x_1 + 4.3 \cdot x_3 - 6.4 \cdot x_4 = 71$ $-4.3 \cdot x_1 + 2.1 \cdot x_2 + 1.1 \cdot x_3 - 13.4 \cdot x_4 + 4.8 \cdot x_5 = -68.3$ $2.7 \cdot x_1 + 0.3 \cdot x_2 - 9.9 \cdot x_3 + 2.4 \cdot x_5 = -26.7$ $9.4 \cdot x_2 + 2.4 \cdot x_3 - 3.9 \cdot x_4 - 4.3 \cdot x_5 = 2.8$ $8.8 \cdot x_1 - 5.4 \cdot x_2 + 0.2 \cdot x_3 + 3.1 \cdot x_4 - 13.5 \cdot x_5 = 149.4$
5	$3 \cdot x_1 - 1.4 \cdot x_2 - 8.3 \cdot x_3 + 4.3 \cdot x_5 = 62.1$ $5.4 \cdot x_1 + 2.1 \cdot x_2 + 0.9 \cdot x_3 - 16.4 \cdot x_5 = -98.9$ $10.3 \cdot x_1 + 2.9 \cdot x_2 + 3.4 \cdot x_3 - 0.3 \cdot x_4 - 6.3 \cdot x_5 = -12.6$ $9 \cdot x_1 + 2.1 \cdot x_2 + 2.6 \cdot x_3 - 9.9 \cdot x_4 + 2.1 \cdot x_5 = 78$ $2.1 \cdot x_1 - 11.3 \cdot x_2 - 4.7 \cdot x_4 + 2.1 \cdot x_5 = 98.6$	6	$8 \cdot x_1 - 5.2 \cdot x_2 + 13.7 \cdot x_4 - 4.8 \cdot x_5 = 49.9$ $-4.3 \cdot x_1 + 12.4 \cdot x_2 + 3.2 \cdot x_3 - 2.9 \cdot x_4 = -69.9$ $-2.1 \cdot x_1 - 1.9 \cdot x_2 + 0.2 \cdot x_3 - 2.4 \cdot x_4 + 10.3 \cdot x_5 = -2.7$ $3 \cdot x_2 - 5.7 \cdot x_3 + 1.4 \cdot x_4 + 5.3 \cdot x_5 = -3.1$ $8.3 \cdot x_1 - 4.2 \cdot x_2 - 5.3 \cdot x_4 + 1.9 \cdot x_5 = 27.6$
7	$2.1 \cdot x_1 - 8.3 \cdot x_2 - 2.4 \cdot x_4 + 3.7 \cdot x_5 = 44.3$ $8.7 \cdot x_1 - 2.7 \cdot x_2 - 5.4 \cdot x_3 + 1.2 \cdot x_4 + 0.2 \cdot x_5 = 64.7$ $2.3 \cdot x_1 - 4.1 \cdot x_2 + 0.3 \cdot x_3 + 2.1 \cdot x_4 - 11.4 \cdot x_5 = -28.9$ $0.7 \cdot x_2 - 7.4 \cdot x_3 + 3.2 \cdot x_4 = 17.6$ $-3.2 \cdot x_1 - 1.9 \cdot x_3 + 10.3 \cdot x_4 - 5.4 \cdot x_5 = -42.2$	8	$8.4 \cdot x_1 - 3.2 \cdot x_2 - 4.8 \cdot x_4 - 3.2 \cdot x_5 = -24.8$ $-3.1 \cdot x_1 + 1.8 \cdot x_2 - 3.9 \cdot x_3 + 1.8 \cdot x_4 + 9.3 \cdot x_5 = -33.7$ $2.9 \cdot x_1 - 10.5 \cdot x_2 + 0.8 \cdot x_3 - 4.3 \cdot x_4 + 0.2 \cdot x_5 = 19.2$ $-2.4 \cdot x_2 - 0.3 \cdot x_3 + 12.9 \cdot x_4 = 101.1$ $-0.4 \cdot x_1 + 6.4 \cdot x_3 + 0.3 \cdot x_4 - 4.3 \cdot x_5 = 41.4$
9	$-6.2 \cdot x_1 - 2.4 \cdot x_3 + 1.9 \cdot x_4 - 10.7 \cdot x_5 = 45.8$ $-1.7 \cdot x_1 - 0.8 \cdot x_2 + 12.1 \cdot x_3 - 1.4 \cdot x_4 - 2.3 \cdot x_5 = 10.3$ $-3.7 \cdot x_1 + 10.8 \cdot x_2 - 3.8 \cdot x_3 - 4.2 \cdot x_4 = -65.9$ $-4.3 \cdot x_2 + 1.8 \cdot x_3 - 9.6 \cdot x_4 + 1.8 \cdot x_5 = -65.8$ $-13.4 \cdot x_1 - 2.4 \cdot x_3 - 3.7 \cdot x_5 = -24.1$	10	$-1.8 \cdot x_1 - 0.3 \cdot x_4 + 9.4 \cdot x_5 = 3.4$ $2.1 \cdot x_1 + 9.8 \cdot x_2 + 0.9 \cdot x_3 - 2.4 \cdot x_4 + 2.1 \cdot x_5 = 47.3$ $9.3 \cdot x_1 + 2.4 \cdot x_2 + 0.3 \cdot x_3 + 0.9 \cdot x_4 + 3.4 \cdot x_5 = 44.2$ $1.8 \cdot x_2 + 6.3 \cdot x_3 - 1.4 \cdot x_4 - 1.9 \cdot x_5 = 34$ $-3.2 \cdot x_1 + 0.9 \cdot x_3 - 1.4 \cdot x_4 + 8.6 \cdot x_5 = 4.2$

Таблица 7.8. Системы нелинейных уравнений

№ п/п	Система уравнений	Пределы изменения значений x_1 и x_2
1	$1.191 \cdot x_1^2 - 0.978 \cdot x_2^2 = 1.034$ $1.211 \cdot x_1 \cdot (x_2 - 1.142) = 0.934$	$x_1 \in [0,3]; x_2 \in [0,3]$
2	$1.182 \cdot x_1 - 0.478 \cdot \sin(1.313 \cdot x_2) = 1.002$ $0.981 \cdot x_2 - 0.289 \cdot \ln(1.202 \cdot x_1) = 1.122$	$x_1 \in [0.5,3.5]; x_2 \in [0,3]$
3	$1.893 \cdot x_1 - 0.581 \cdot \ln(1.039 \cdot x_2) = 2.768$ $1.452 \cdot x_2 - 1.578 \cdot e^{-0.976 \cdot x_1} = 0.652$	$x_1 \in [0.5,3.5]; x_2 \in [0.5,3.5]$
4	$3.811 \cdot x_1^2 + 0.419 \cdot x_2^2 = 3.972$ $0.932 \cdot x_1^3 + 19.771 \cdot x_1^2 \cdot x_2 = 0.779$	$x_1 \in [0,4]; x_2 \in [0,4]$
5	$2.273 \cdot x_1 - 1.003 \cdot \sin(0.477 \cdot x_2) = 1.221$ $1.879 \cdot x_2 + e^{-0.372 \cdot x_1} = 1.932$	$x_1 \in [0.5,3.5]; x_2 \in [-0.5,3]$
6	$19.962 \cdot x_1 \cdot x_2^3 - 1.091 \cdot x_2^2 = 3.889$ $0.181 \cdot x_1^3 - 1.272 \cdot x_2^2 = -1.063$	$x_1 \in [-1,3]; x_2 \in [-0.5,3.5]$
7	$5.469 \cdot x_1^2 - 0.633 \cdot x_2^2 = 1.111$ $e^{-3.671 \cdot (x_2 - 2.339)} - 1.442 \cdot x_1 = -0.568$	$x_1 \in [-0.5,3.5]; x_2 \in [1,3]$
8	$3.911 \cdot x_1^3 - 1.132 \cdot x_2^3 - 5.792 \cdot x_1^2 = 1.952$ $1.882 \cdot x_2 - 0.998 \cdot \sin(1.467 \cdot x_1) = -0.373$	$x_1 \in [0,3]; x_2 \in [0,3]$
9	$2.881 \cdot \ln(0.878 \cdot x_2 + 1.109) - 1.232 \cdot x_1^2 = 0.249$ $0.172 \cdot x_1^3 + 0.941 \cdot x_2^3 - 6.068 \cdot x_1 = -3.112$	$x_1 \in [-1,3]; x_2 \in [0,3]$
10	$0.934 \cdot x_1 + 0.891 \cdot \sin(1.007 \cdot x_2 - 1.156) = 1.373$ $0.927 \cdot \sin(0.997 \cdot x_1 + 0.942) - 1.143 \cdot x_2 = -0.792$	$x_1 \in [-0.5,2.5]; x_2 \in [1,3]$

Таблица 7.9 Дифференциальные уравнения

№ п/п	Уравнение	Отрезок оси x	Начальные условия
1	$y'' - 1.28 \cdot y' + 0.972 \cdot x^2 \cdot y = 0$	$x \in [0,3]$	$y(0)=0, y'(0)=0.211$
2	$y'' - 0.41 \cdot x \cdot y' + 1.122 \cdot y = 0$	$x \in [1,4]$	$y(1)=0, y'(1)=0.513$
3	$y'' + 0.98 \cdot y' + 1.88 \cdot y - 2.07 \cdot x + 3.17 = 0$	$x \in [0,3]$	$y(0)=1.07, y'(0)=2.12$
4	$y'' - 2.94 \cdot e^{-0.48 \cdot x} + 1.97 \cdot y' + 2.03 \cdot y = 0$	$x \in [0.5,3.5]$	$y(0.5)=0.03, y'(0.5)=-0.01$
5	$y'' + 0.93 \cdot x^2 - 1.06 \cdot x + 0.91 \cdot y - 2.011 = 0$	$x \in [-0.5,2.5]$	$y(-0.5)=0.9, y'(-0.5)=0.01$
6	$y'' - 1.17 \cdot \sin(2.87 \cdot x) + 4.09 \cdot y = 0$	$x \in [0,3]$	$y(0)=0.789, y'(0)=1.981$
7	$y'' - 0.893 \cdot e^{-1.08 \cdot x} + 1.18 \cdot y' + 2.98 \cdot y = 0$	$x \in [1,4]$	$y(1)=0.04, y'(1)=-0.02$
8	$y'' - \frac{2.47 \cdot y' \cdot x - 1.04 \cdot y}{2.08 \cdot (x^2 + 0.12)} = 0$	$x \in [-0.5,2.5]$	$y(-0.5)=0.2, y'(-0.5)=0.48$
9	$y'' + \frac{0.34 \cdot x + 1.11 \cdot y' \cdot y + 4.13}{2.18 \cdot x^2 + 0.948} = 0$	$x \in [0.5,3.5]$	$y(0.5)=0.54, y'(0.5)=0.47$
10	$y'' - 0.94 \cdot \sin(3.22 \cdot x) + 1.18 \cdot y' + 0.71 = 0$	$x \in [-1,2]$	$y(-1)=0.79, y'(-1)=2.17$

Таблица 7.10 Параметры уравнения теплопроводности

№ варианта	Материал пластины	Толщина пластины R , см	Начальная температура, t_0 , °С	Температура поверхности, t_n , °С	Дополнительный параметр
1	Древесина	6	20	50	средняя температура
2	Кирпич	12	60	20	теплосодержание
3	Бетон	10	10	40	тепловой поток у пов.
4	Текстолит	2	20	50	средняя температура
5	Винипласт	4	60	20	теплосодержание
6	Стекло	3	10	40	тепловой поток у пов.
7	Резина	2	20	50	средняя температура
8	Асбест	3	60	20	теплосодержание
9	Сталь	10	10	40	тепловой поток у пов.
10	Текстолит	6	50	10	средняя температура
11	Древесина	12	60	20	теплосодержание
12	Стекло	4	70	30	тепловой поток у пов.

Таблица 7.11 Параметры уравнения молекулярной диффузии

№ варианта	Коэфф. диффузии, D , м ² /с	Толщина пластины R , см	Начальная концентрация C_0 кг/м ³	Концентрация у пов., C_n , кг/м ³	Дополнительный параметр
13	$1,5 \cdot 10^{-6}$	6	2	5	средняя концентрация
14	$2,5 \cdot 10^{-6}$	8	4	1	влажносодержание
15	$1 \cdot 10^{-6}$	12	1	4	массовый поток у пов.
16	$5 \cdot 10^{-5}$	2	3	6	средняя концентрация
17	$1,2 \cdot 10^{-6}$	8	6	2	влажносодержание
18	$3 \cdot 10^{-5}$	4	1	4	массовый поток у пов.
19	$8 \cdot 10^{-5}$	2	2	5	средняя концентрация
20	$1,1 \cdot 10^{-6}$	4	5	2	влажносодержание
21	$3 \cdot 10^{-6}$	10	3	6	массовый поток у пов.
22	$2,5 \cdot 10^{-6}$	6	5	1	средняя концентрация
23	$4 \cdot 10^{-6}$	10	6	2	влажносодержание
24	$2 \cdot 10^{-6}$	12	4	1	массовый поток у пов.

Порядок выполнения работы:

1. Отделить минимальный положительный корень указанного нелинейного уравнения графическим методом и уточнить его с применением команды *root*.

2. Записать матрицу указанной системы линейных уравнений и столбец свободных членов, переставив уравнения так, чтобы максимальные по абсолют-

ной величине коэффициенты оказались на главной диагонали матрицы. Решить систему обращения матрицы системы.

3. Записать систему нелинейных уравнений по правилам использования блока **Given/Find**. Найти решение системы.

4. Записать указанное обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка в виде системы двух уравнений первого порядка и решить для нее задачу Коши с применением программы **Rkadapt**. Построить графики функций $y(x)$ и $y'(x)$.

5. Записать указанное уравнение теплопроводности или молекулярной диффузии по правилам использования программы **numol**. Получить поле температур или концентраций пластины, построить его график. Разработать и реализовать алгоритм определения зависимости дополнительного параметра от времени: а) среднего значения температуры или концентрации (p) в объеме пластины

$$p_{cp}(\tau) = R^{-1} \cdot \int_0^R p(x, \tau) dx; \text{ б) удельного (на единицу поверхности) теплового}$$

$q_n(\tau) = \lambda \cdot \partial t(R, \tau) / \partial x$ или массового $m_n(\tau) = D \cdot \partial C(R, \tau) / \partial x$ потока у поверхности пластины (λ - коэффициент теплопроводности материала пластины); в) удельного (на единицу поверхности) теплосодержания $i(\tau) = c \cdot \rho \cdot t_{cp}(\tau)$ или влагосодержания $l(\tau) = R \cdot C_{cp}(\tau)$ пластины (c, ρ - теплоемкость и плотность материала пластины). Построить график зависимости дополнительного параметра от времени.

Контрольные вопросы:

1. При каких условиях отрезок $[a, b]$ оси x содержит единственный корень уравнения $f(x)=0$?

2. Схема решения системы линейных уравнений методом Гаусса, условия применимости метода.

3. Основная идея и порядок решения системы нелинейных уравнений методом Ньютона, условие сходимости итераций.

4. Постановка задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения и общая схема ее численного решения одношаговым методом.

5. Общая схема метода конечных разностей для решения уравнений в частных производных.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предлагаемое пособие включает основные сведения о методах и алгоритмах математического моделирования технических систем. Несмотря на то, что методика моделирования рассмотрена, главным образом, на примерах объектов химического и нефтехимического профиля, представленный в пособии материал будет полезным и для специалистов, работающих в сфере машиностроения и металлообработки.

В пособии рассмотрены:

- экспериментальный метод математического моделирования и основы теории планирования эксперимента;
- аналитический и экспериментально-аналитический метод математического моделирования;
- методы решения соотношений математических моделей: нелинейных уравнений, систем линейных и нелинейных уравнений, обыкновенных дифференциальных уравнений и их систем, дифференциальных уравнений в частных производных.

Лабораторный практикум содержит формулировки заданий, исходные данные, рекомендации по выполнению и контрольные вопросы к пяти лабораторным работам:

- составление регрессионной математической модели по зависимости одной выходной характеристики объекта от одной входной;
- составление регрессионной математической модели по зависимости отклика объекта от трех факторов с применением методики планирования эксперимента;
- составление аналитической математической модели статистики объекта с сосредоточенными параметрами;
- составление экспериментально-аналитической математической модели кинетики объекта с сосредоточенными параметрами;
- решение уравнений математических моделей;

В качестве основного инструмента моделирования и решения математических моделей студентам предложено использовать систему инженерных расчетов MathCAD.

Автор надеется, что предлагаемое пособие будет полезно для студентов, обучающихся по специальности 15.05.01 "Проектирование технологических машин и комплексов" и направлению 15.03.01 "Машиностроение" дневной и заочной формы обучения, а также работников проектно-конструкторских отделов предприятий химического и машиностроительного профиля.

ЛИТЕРАТУРА

1. Б.Я. Советов, С.А. Яковлев. Моделирование систем: учебник для вузов. – М.: Высш.шк., 2005. – 343 с.
2. Методы и алгоритмы создания виртуальных моделей химико-технологических систем / В.А. Немтинов, С.В. Карпушкин, В.Г. Мокрозуб и др. – Тамбов: Издательский дом ТГУ им. Г.Р. Державина, 2011. – 282 с.
3. А.Н. Пахомов, В.И. Коновалов, Н.Ц. Гатапова, А.Н. Колиух. Основы моделирования химико-технологических систем: учебное пособие. – Тамбов: Изд-во ТГТУ, 2008 – 80 с.
4. С.И. Дворецкий, С.В. Матвеев, С.Б. Путин, Е.Н. Туголуков. Основы математического моделирования и оптимизации процессов и систем очистки и регенерации воздуха: учебное пособие. – Тамбов, ТГТУ, 2008. – 324 с.
5. С.И. Дворецкий, А.Ф. Егоров, Д.С. Дворецкий. Компьютерное моделирование и оптимизация технологических процессов и оборудования: Учеб. пособие. – Тамбов: Изд-во ТГТУ, 2003. – 224 с.
6. Е.Н. Малыгин, С.В. Карпушкин, Е.Н. Туголуков. Прикладное программирование: Учебное пособие. – Тамбов: Изд-во ТГТУ, 2000. – 116 с.
7. С.В. Карпушкин, М.Н. Краснянский, А.Б. Борисенко. Расчеты и выбор механических перемешивающих устройств вертикальных емкостных аппаратов: учебное пособие. – Тамбов: Изд-во ТГТУ, 2009. – 168 с.
8. С.Л. Ахназарова, В.В. Кафаров Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. М.: Высш. шк., 1985. – 327 с.
9. Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. Численные методы. М.: Наука, 2002. – 632 с.
10. А.И. Бояринов, В.В. Кафаров. Методы оптимизации в химической технологии. М.: Химия, 1975. – 564 с.
11. А.Ю. Закгейм. Введение в моделирование химико-технологических процессов. М.: Химия, 1982. – 288 с.
12. П.Г. Романков, В.Ф. Фролов, О.М. Флисюк, М.И. Курочкина. Методы расчета процессов и аппаратов химической технологии. СПб: Химия, 1998. – 496 с.
13. Р. Фрэнкэ. Математическое моделирование в химической технологии. М.: Химия, 1971. – 270 с.
14. С.В. Брановицкая, Р.Б. Медведев, Ю.Я. Фиалков Вычислительная математика в химии и химической технологии. Киев: Вища шк., 1986. – 216 с.

Приложение А. Таблицы значений критериев Стьюдента, Кохрена и Фишера

Таблица 1А. Значения критерия Стьюдента t для уровня значимости 0.05 и числа степеней свободы f

f	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
t	12.71	4.3	3.18	2.78	2.57	2.45	2.36	2.31	2.26	2.23	2.2	2.18	2.16	2.15	2.13	2.12	2.11	2.1	2.09
f	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	40	50	60	80	100	120	200	≥50
t	2.09	2.08	2.07	2.07	2.06	2.06	2.06	2.05	2.05	2.04	2.04	2.02	2.01	2	1.99	1.98	1.98	1.97	1.96

Таблица 2А. Значения критерия Кохрена при уровне значимости 0.05 для объема выборки N и числа степеней свободы f

N	f														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	16	36	144	∞	
2	0.99	0.98	0.94	0.91	0.88	0.85	0.83	0.82	0.80	0.79	0.73	0.66	0.58	0.50	
3	0.97	0.87	0.80	0.75	0.71	0.68	0.65	0.63	0.62	0.60	0.55	0.47	0.40	0.33	
4	0.91	0.77	0.68	0.63	0.59	0.56	0.54	0.52	0.50	0.49	0.44	0.37	0.31	0.25	
5	0.84	0.68	0.60	0.54	0.51	0.48	0.46	0.44	0.42	0.41	0.36	0.31	0.25	0.20	
6	0.78	0.62	0.53	0.48	0.44	0.42	0.40	0.38	0.37	0.36	0.31	0.26	0.21	0.17	
7	0.73	0.56	0.48	0.43	0.40	0.37	0.35	0.34	0.33	0.32	0.28	0.23	0.18	0.14	
8	0.68	0.52	0.44	0.39	0.36	0.34	0.32	0.30	0.29	0.28	0.25	0.20	0.16	0.13	
9	0.64	0.48	0.40	0.36	0.33	0.31	0.29	0.28	0.27	0.26	0.22	0.18	0.14	0.11	
10	0.60	0.45	0.37	0.33	0.30	0.28	0.27	0.25	0.24	0.24	0.20	0.17	0.13	0.10	
12	0.54	0.39	0.33	0.29	0.26	0.24	0.23	0.22	0.21	0.20	0.17	0.14	0.11	0.08	
15	0.47	0.33	0.28	0.24	0.22	0.20	0.19	0.18	0.17	0.17	0.14	0.11	0.09	0.07	
20	0.39	0.27	0.22	0.19	0.17	0.16	0.15	0.14	0.14	0.13	0.11	0.09	0.07	0.05	
24	0.34	0.24	0.19	0.17	0.15	0.14	0.13	0.12	0.12	0.11	0.09	0.07	0.06	0.04	
30	0.29	0.20	0.16	0.14	0.12	0.11	0.11	0.10	0.10	0.09	0.08	0.06	0.05	0.03	
40	0.24	0.16	0.13	0.11	0.10	0.09	0.08	0.08	0.07	0.07	0.06	0.05	0.03	0.03	
60	0.17	0.11	0.09	0.09	0.07	0.06	0.06	0.06	0.05	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	
120	0.10	0.06	0.05	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	

Таблица 3А. Значения критерия Фишера для уровня значимости 0.05 при числах степеней свободы f_1 (для остаточной дисперсии) и f_2 (для дисперсии воспроизводимости)

f_2	f_1														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	15	20	30	∞
1	161.0	200.0	216.0	225.0	230.0	234.0	237.0	239.0	241.0	242.0	244.0	246.0	248.0	250.0	254.0
2	18.51	19.00	19.16	19.25	19.30	19.33	19.35	19.37	19.38	19.40	19.41	19.43	19.45	19.46	19.50
3	10.13	9.55	9.28	9.12	9.01	8.94	8.89	8.85	8.81	8.79	8.74	8.70	8.66	8.62	8.53
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.09	6.04	6.00	5.94	5.91	5.86	5.80	5.75	5.63
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.05	4.95	4.88	4.82	4.77	4.74	4.68	4.62	4.56	4.50	4.36
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.21	4.15	4.10	4.06	4.00	3.94	3.87	3.81	3.67
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.79	3.73	3.68	3.64	3.57	3.51	3.44	3.38	3.23
8	5.32	4.46	4.07	3.84	3.69	3.58	3.50	3.44	3.39	3.35	3.28	3.22	3.15	3.08	2.93
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.14	3.07	3.02	2.98	2.91	2.85	2.77	2.70	2.54
12	4.75	3.89	3.49	3.26	3.11	3.00	2.91	2.85	2.80	2.75	2.69	2.62	2.54	2.47	2.30
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.76	2.70	2.65	2.60	2.53	2.46	2.39	2.31	2.13
16	4.49	3.63	3.24	3.01	2.85	2.74	2.66	2.59	2.54	2.49	2.42	2.35	2.28	2.19	2.01
18	4.41	3.55	3.16	2.93	2.77	2.66	2.58	2.51	2.46	2.41	2.34	2.27	2.19	2.11	1.92
20	4.35	3.49	3.10	2.87	2.71	2.60	2.51	2.45	2.39	2.35	2.28	2.20	2.12	2.04	1.84
22	4.30	3.44	3.05	2.82	2.66	2.55	2.46	2.40	2.34	2.30	2.23	2.15	2.07	1.98	1.78
24	4.26	3.40	3.01	2.78	2.62	2.51	2.42	2.36	2.30	2.25	2.18	2.11	2.03	1.94	1.73
26	4.23	3.37	2.98	2.74	2.59	2.47	2.39	2.32	2.27	2.22	2.15	2.07	1.99	1.90	1.69
28	4.20	3.34	2.95	2.71	2.56	2.45	2.36	2.29	2.24	2.19	2.12	2.04	1.96	1.87	1.65
30	4.17	3.32	2.92	2.69	2.53	2.42	2.33	2.27	2.21	2.16	2.09	2.01	1.93	1.84	1.62
40	4.08	3.23	2.84	2.61	2.45	2.34	2.25	2.18	2.12	2.08	2.00	1.92	1.84	1.74	1.51
60	4.00	3.15	2.76	2.53	2.37	2.25	2.17	2.10	2.04	1.99	1.92	1.84	1.75	1.65	1.39
120	3.92	3.07	2.68	2.45	2.29	2.17	2.09	2.02	1.96	1.91	1.83	1.75	1.66	1.55	1.25
∞	3.84	3.00	2.60	2.37	2.21	2.10	2.01	1.94	1.88	1.83	1.75	1.67	1.57	1.46	1.00

Приложение Б. Зависимости теплофизических характеристик теплохладагентов от температуры

Вода оборотная		25%-ный раствор CaCl ₂ (холодильный рассол)	
$\rho(t)$, кг/м ³	$(3.885 \cdot 10^{-9} \cdot t^2 + 5.2424 \cdot 10^{-8} \cdot t + 9.9979 \cdot 10^{-4})^{-1}$	$\rho(t)$, кг/м ³	$(-1124.7 \cdot t + 1.5345 \cdot 10^6)^{0.5}$
$c(t)$, Дж/(кг·К)	$(150.368 \cdot t^2 - 1.4883 \cdot 10^4 \cdot t + 1.7805 \cdot 10^7)^{0.5}$	$c(t)$, Дж/(кг·К)	$(-1.91703 \cdot 10^{-9} \cdot t^2 - 2.0513 \cdot 10^{-7} \cdot t + 3.4704 \cdot 10^{-4})^{-1}$
$\lambda(t)$, Вт/(м·К)	$0.01 \cdot (-0.21593 \cdot t^2 + 39.484 \cdot t + 2804.8)^{0.5}$	$\lambda(t)$, Вт/(м·К)	$(8.7882 \cdot 10^{-5} \cdot t^2 - 8.8829 \cdot 10^{-3} \cdot t + 2.0012)^{-1}$
$\mu(t)$, Па·с	$\exp(1.0444 \cdot 10^{-4} \cdot t^2 - 0.028631 \cdot t + 2.8789) \cdot 10^{-4}$	$\mu(t)$, Па·с	$0.001 \cdot (7.8981 \cdot 10^{-3} \cdot t + 0.27397)^{-1}$
$\beta(t)$, 1/К	$0.001 \cdot \ln(0.010555 \cdot t + 1.0493)$	$\beta(t)$, 1/К	$0.001 \cdot (-9.857 \cdot 10^{-3} \cdot t + 2.7441)^{-1}$
Насыщенный водяной пар и конденсат		Насыщенный пар и конденсат метанола	
характеристики пара		характеристики пара	
$\rho_n(t)$, кг/м ³	$\exp(2.9702 \cdot \ln(t) + 5.4157 \cdot 10^{-3} \cdot t - 14.759)$	$\rho_n(t)$, кг/м ³	$\exp(2.8155 \cdot \ln(t) - 11.432)$
$r_n(t)$, Дж/кг	$10^6 \cdot (-9.3332 \cdot 10^{-6} \cdot t^2 - 0.054906 \cdot \ln(t) + 2.6051)$	$r_n(t)$, Дж/кг	$10^5 \cdot (-0.059412 \cdot t + 20.259)^{0.5}$
$P_n(t)$, МПа	$\exp(4.7583 \cdot \ln(t) + 111.91 \cdot t^{-1} - 25.296)$	$P_n(t)$, МПа	$\exp(6.5553 \cdot 10^{-5} \cdot t^2 - 168.91 \cdot t^{-1})$
характеристики конденсата		характеристики конденсата	
$\rho_k(t)$, кг/м ³	$-0.0031352 \cdot t^2 + 988.38$	$\rho_k(t)$, кг/м ³	$9.7033 \cdot 10^8 \cdot \exp(-t) - 0.0025 \cdot t^2 - 0.65 \cdot t + 804$
$c_k(t)$, Дж/(кг·К)	$(-3.3517 \cdot 10^{-9} \cdot t^2 + 0.013104 \cdot t^{-1} + 1.4617 \cdot 10^{-6} \cdot t)^{-1}$	$c_k(t)$, Дж/(кг·К)	$4.2158 \cdot t + 2421.9$
$\lambda_k(t)$, Вт/(м·К)	$(-3.5579 \cdot 10^{-6} \cdot t^2 + 0.10937 \cdot \ln(t))^{0.5}$	$\lambda_k(t)$, Вт/(м·К)	$(0.12682 \cdot t + 4.8174)$
$\mu_k(t)$, Па·с	$10^{-4} \cdot (9.9284 \cdot 10^{-6} \cdot t^2 - 16.602 \cdot t^{-1} + 0.4221)^{-1}$	$\mu_k(t)$, Па·с	$10^{-4} \cdot \exp(2.0284 \cdot 10^{-5} \cdot t^2 - 0.01485 \cdot t + 2.0914)$

Для заметок