

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ НАЦІОНАЛЬНИЙ
ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ «КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ
ІНСТИТУТ імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології

Лабораторний практикум

Рекомендовано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
як навчальний посібник для студентів,
які навчаються за спеціальністю G1 «Хімічні технології та інженерія»

Електронне мережне навчальне видання

Київ
КПІ ім. Ігоря Сікорського
2026

Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології. Лабораторний практикум [Електронний ресурс]: навч. посіб. для студ. спеціальності G1 «Хімічні технології та інженерія» / КПІ ім. Ігоря Сікорського; уклад.: Ю. А. Запорожець, О.О. Квітка. С.В. Плашихін—Електронні текстові данні (1 файл: 2 Мбайт). – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2026. – 86 с.

Гриф надано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського (протокол № 4 від 05.02.2026 р.)

за поданням Вченої ради факультету автоматизації, промислової інженерії та екології (протокол № 1 від 27.01.2026 р.)

Електронне мережне навчальне видання

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ОБ'ЄКТІВ ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ

Укладачі: *Запорожець Юлія Анатоліївна, канд. техн. наук, доц.*
 Квітка Олександр Олександрович, канд. техн. наук, доц.
 Плашихін Сергій Володимирович, канд. техн. наук, доц

Відповідальний

редактор: *Тюріна Євгенія Олександрівна, доктор філософії*

Рецензент: *Трус Інна Миколаївна, док. техн. наук, доц*

Навчальний посібник розроблено відповідно до програми підготовки бакалаврів за спеціальністю G1 «Хімічні технології та інженерія». У навчальному посібнику наведено завдання, виконувані протягом лабораторних робіт. Видання забезпечує вивчення студентами теоретичного матеріалу, підготовку до виконання лабораторних робіт та буде корисним для самостійної роботи.

© КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2026

ЗМІСТ

1. МОДЕЛЮВАННЯ ГІДРОДИНАМІКИ ПОТОКУ У НАСАДКОВІЙ КОЛОНІ ЗА ДОПОМОГОЮ КОМІРКОВОЇ МОДЕЛІ	7
1.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ	7
1.1.1 Дослідження гідродинаміки потоку за допомогою методу СТАНДАРТНИХ ЗБУРЕНЬ	7
1.1.2 ОПИС НАСАДКОВОГО КОЛОННОГО АБСОРБЕРА ЗА ДОПОМОГОЮ КОМІРКОВОЇ МОДЕЛІ.....	9
1.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	11
1.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	11
2. ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕПЛООБМІННИХ АПАРАТІВ НА ОСНОВІ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ	17
2.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ	17
2.1.1 Моделі ідеального витіснення та ідеального змішування при ДОСЛІДЖЕННІ ТЕПЛООБМІННИХ АПАРАТІВ.....	17
2.1.2 РОЗРАХУНОК ТЕПЛООБМІННОГО АПАРАТУ ДЛЯ МОДЕЛІ «ВИТІСНЕННЯ-ВИТІСНЕННЯ».....	19
2.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	21
2.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	22
3. КОМП'ЮТЕРНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НА ЕОМ КОНСТАНТ ШВИДКОСТІ ЗВОРОТНОЇ ХІМІЧНОЇ РЕАКЦІЇ	24
3.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ	25
3.1.1 ПРИКЛАД РОЗРАХУНКУ КОНСТАНТ ШВИДКОСТІ РЕАКЦІЇ ЕТЕРИФІКАЦІЇ ЕТИЛОВОГО СПИРТУ ТА ОЦТОВОЇ КИСЛОТИ.....	25
3.1.2 АЛГОРИТМ РОЗРАХУНКУ КІНЕТИЧНИХ КОНСТАНТ	27
3.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	28
3.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	29
4 КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІЗОТЕРМІЧНОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ (РІЗ) БЕЗПЕРЕРВНОЇ ДІЇ	32
4.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ	32
4.1.1 Моделювання проточного реактора ідеального змішування	32
4.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	35
4.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	35
5. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІЗОТЕРМІЧНОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ВИТІСНЕННЯ (РІВ) БЕЗПЕРЕРВНОЇ ДІЇ	38
5.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ	38

5.1.1 МАТЕМАТИЧНИЙ ОПИС І РОЗРАХУНОК ІЗОТЕРМІЧНОГО ТРУБЧАТОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ВИТІСНЕННЯ.....	38
5.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	40
5.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	40
 6 КОМП'ЮТЕРНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕМПЕРАТУРНИХ РЕЖИМІВ РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ ПЕРІОДИЧНОЇ ДІЇ	43
6.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ	43
6.1.1 МАТЕМАТИЧНИЙ ОПИС РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ ПЕРІОДИЧНОЇ ДІЇ.....	43
6.1.2 ПРИКЛАД РОЗРАХУНКУ ПРОТОЧНОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ ПЕРІОДИЧНОЇ ДІЇ.....	44
6.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	48
6.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	48
 7 МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ АБСОРБЦІЇ	55
7.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ	55
7.1.1 МАТЕМАТИЧНИЙ ОПИС ПРОЦЕСУ АБСОРБЦІЇ.....	55
7.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	58
7.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	59
 8 ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЖИМУ РОБОТИ РЕАКТОРА	62
8.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ	62
8.1.1 МЕТОД СКАНУВАННЯ	63
8.1.2 МЕТОД ПОЛОВИННОГО ДІЛЕННЯ ІНТЕРВАЛІВ (МЕТОД ДИХОТОМІЇ).....	63
8.1.3 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ОПТИМІЗАЦІЇ РЕЖИМУ РОБОТИ РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ПЕРЕМІШУВАННЯ.....	65
8.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	65
8.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	66
 9 РОЗРОБЛЕННЯ СТАТИСТИЧНОЇ МОДЕЛІ ПРОЦЕСУ ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ МЕТОДОМ ПОВНОГО ФАКТОРНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ	70
9.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ	70
9.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	80
9.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	81
 СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ	83
 Додаток А СТАТИСТИЧНІ КРИТЕРІЇ	84

ВСТУП

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

Основною метою курсу «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології» є формування навичок використання системного підходу та методів математичного моделювання в хімічній інженерії. Лабораторні роботи виконуються згідно з навчальним планом підготовки бакалаврів спеціальності G1 «Хімічні технології та інженерія».

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

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

Навчальний посібник орієнтований на виконання комплексу лабораторних робіт, що поєднують установлені на даний час методи і прийоми

розробки та застосування математичного моделювання в хімічній технології. Викладання і послідовність відповідає лекційному курсу та матеріалу, що виведено на самостійне вивчення. При виконанні лабораторних робіт в якості програмного забезпечення застосовуються програмний комплекс Mathcad. Виконання лабораторного практикуму орієнтовано на індивідуальну роботу.

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

Лабораторна робота № 1

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

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

1.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

1.1.1 Дослідження гідродинаміки потоку за допомогою методу стандартних збурень

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

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

Основні параметрами гідродинамічних моделей реальних процесів зображені на рисунок 1.1.

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

Імпульсний метод полягає у визначенні параметра n через статистичні оцінки диференціальної функції розподілу часу перебування речовини. Цю

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

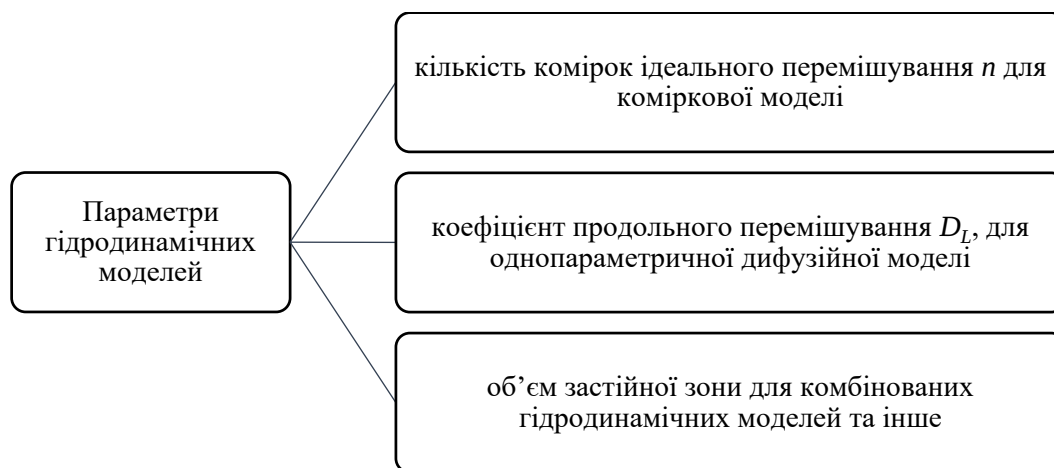


Рисунок 1.1 – Основні параметрами гідродинамічних моделей реальних процесів

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

У певні моменти часу після вводу індикатора відбирають проби з вихідного потоку та аналізують вміст трасера в них. Згідно з експериментальними даними будують F - або C - криві відгуку. На основі форми експериментальної кривої припускають можливий вигляд гідродинамічної моделі (наприклад коміркової) і проводять математичну обробку кривої, в результаті чого розраховують значення параметрів моделі і

роблять висновки про адекватність прийнятої моделі реальному об'єкту. При цьому у загальному випадку час перебування τ часток речовини в апараті розглядають як випадкову величину, що має диференційну функцію розподілення - $C_{кр}(t)$.

1.1.2 Опис насадкового колонного абсорбера за допомогою коміркової моделі

Розглядається насадковий колонний апарат (абсорбер), який описується до проведення експерименту комірковою моделлю. На вхід колони (наприклад в потік рідини) вводиться у вигляді імпульсу індикатора - розчин KCl . Результати аналізу вихідного потоку від вмісту індикатору наведені у завданні. Потрібно визначити кількість комірок n порівнянням експериментально одержаної кривої відгуку з кривими, розрахованими згідно з рівнянням коміркової моделі при різноманітних значеннях кількості комірок:

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

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

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

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

Під безрозмірними величинами (час і диференційна крива $Z(\theta)$) розуміють:

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

Таким чином, для порівняння експериментальної кривої з теоретичними кривими (рисунок 1.1) необхідно вирахувати τ згідно із залежністю (1.2) і зробити відповідні перерахунки згідно з формулою (1.3). Необхідно також

провести нормування експериментальних значень концентрації $C_{\text{вих}}(i)$ до загальної енергії імпульсу індикатора KCl , введеного у колону:

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

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

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

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

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

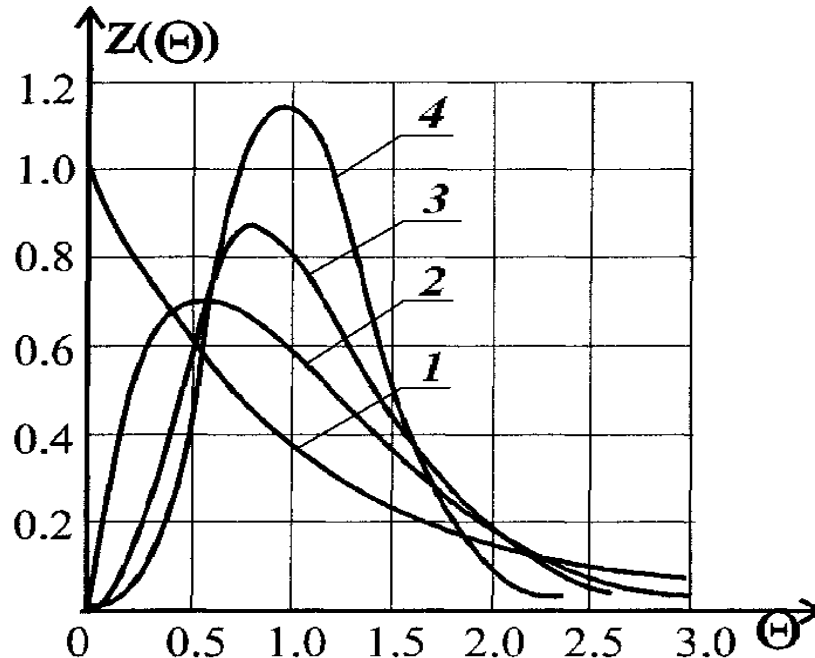


Рисунок 1.2 – Порівняння експериментальної кривої з теоретичними кривими при різних кількості комірок (відповідно 1,2,6,8)

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

1.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

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

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

1.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

*Приклад результатів програмування задачі і геометричної інтерпретації
результатів*

Вихідні дані:

1 стовпчик – значення часу,

2 – концентрація трасера на виході.

$$Cv := \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0.25 \\ 2 & 1.8 \\ 3 & 2.7 \\ 4 & 2.8 \\ 5 & 2.1 \\ 6 & 1.3 \\ 7 & 0.6 \\ 8 & 0.3 \\ 9 & 0.1 \end{bmatrix}$$

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

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

$$C = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.021 \\ 0.151 \\ 0.227 \\ 0.235 \\ 0.176 \\ 0.109 \\ 0.05 \\ 0.025 \\ 0.008 \end{bmatrix}$$

Визначимо середній час перебування потоку в ОХТ:

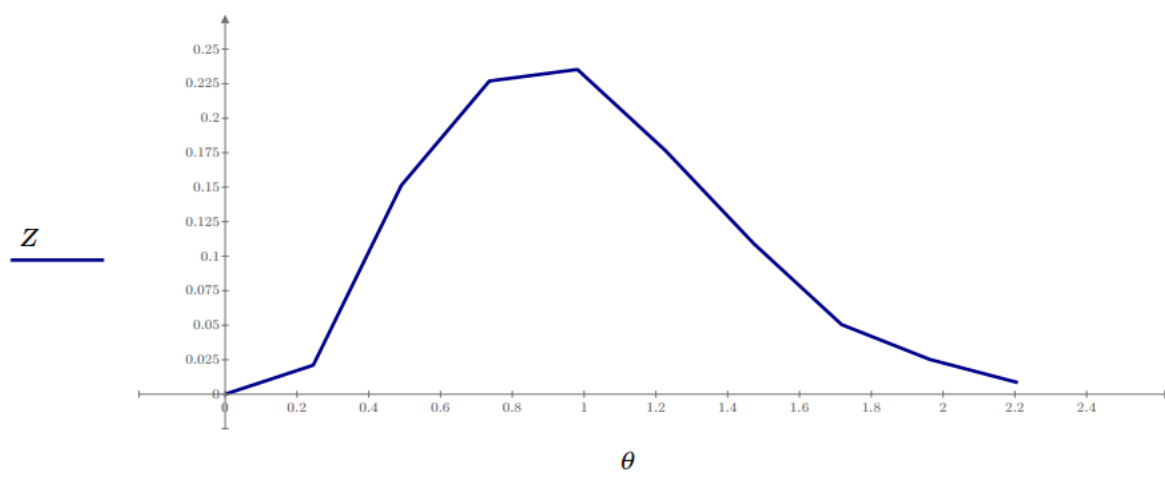
$$\tau := \frac{2 \cdot Cv^{(0)} \cdot C - Cv_{0,0} \cdot C_0 - Cv_{9,0} \cdot C_9}{2}$$

$$\tau = 4.076$$

Визначимо безрозмірні величини:

$$\theta := \frac{Cv^{(0)}}{\tau} \quad Z := C$$

Графік у безрозмірних координатах має вигляд:

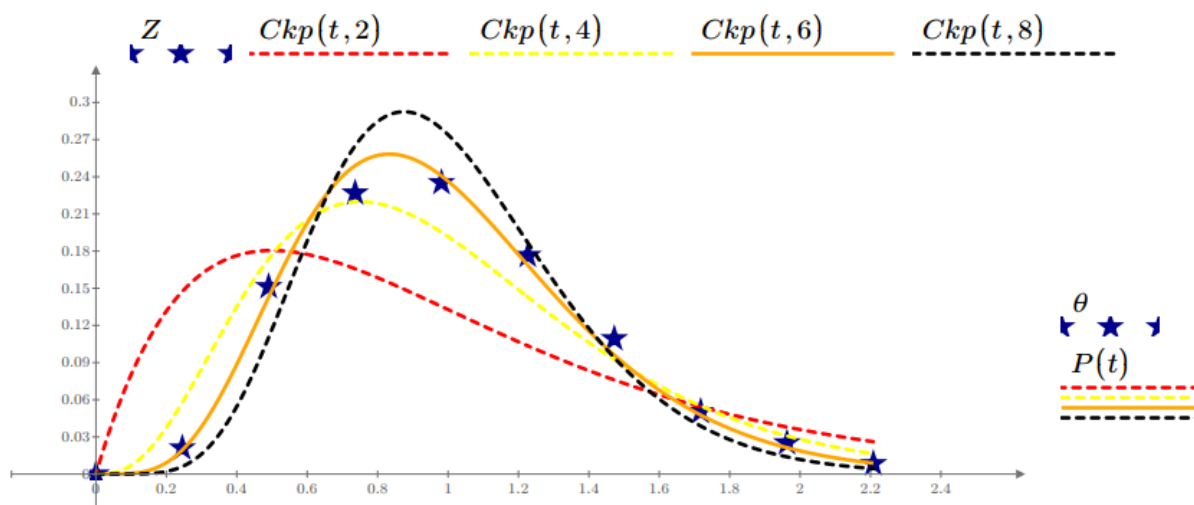


Розраховуємо теоретичну С-криву для різних значень кількості комірок (2,4,6,8), оцінюючи результат за величиною середньо квадратичного відхилення, фіксуючи це у таблиці.

$n := 2, 4 \dots 8$

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

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



Перевіримо адекватність моделі:

$$n := 2$$

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

$$Ckpt := \begin{bmatrix} Ckp(Cv_{0,0}) \\ Ckp(Cv_{1,0}) \\ Ckp(Cv_{2,0}) \\ Ckp(Cv_{3,0}) \\ Ckp(Cv_{4,0}) \\ Ckp(Cv_{5,0}) \\ Ckp(Cv_{6,0}) \\ Ckp(Cv_{7,0}) \\ Ckp(Cv_{8,0}) \\ Ckp(Cv_{9,0}) \end{bmatrix} \quad Ckpt = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.147 \\ 0.18 \\ 0.166 \\ 0.135 \\ 0.104 \\ 0.076 \\ 0.054 \\ 0.038 \\ 0.026 \end{bmatrix}$$

$$\sigma := \sqrt{\frac{\sum (Ckpt - C)^2}{9}} \quad \sigma = 0.065$$

$$n := 4$$

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

$$Ckpt := \begin{bmatrix} Ckp(Cv_{0,0}) \\ Ckp(Cv_{1,0}) \\ Ckp(Cv_{2,0}) \\ Ckp(Cv_{3,0}) \\ Ckp(Cv_{4,0}) \\ Ckp(Cv_{5,0}) \\ Ckp(Cv_{6,0}) \\ Ckp(Cv_{7,0}) \\ Ckp(Cv_{8,0}) \\ Ckp(Cv_{9,0}) \end{bmatrix} \quad Ckpt = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.058 \\ 0.174 \\ 0.22 \\ 0.195 \\ 0.143 \\ 0.093 \\ 0.055 \\ 0.031 \\ 0.016 \end{bmatrix}$$

$$\sigma := \sqrt{\frac{\sum (Ckpt - C)^2}{9}} \quad \sigma = 0.024$$

$$\boxed{n} := 6 \quad \boxed{Ckp}(t) := \frac{n^n \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^{n-1} \cdot e^{-n \cdot \frac{t}{\tau}}}{\tau \cdot (n-1)!}$$

$$\boxed{Ckpt} := \begin{bmatrix} Ckp(Cv_{0,0}) \\ Ckp(Cv_{1,0}) \\ Ckp(Cv_{2,0}) \\ Ckp(Cv_{3,0}) \\ Ckp(Cv_{4,0}) \\ Ckp(Cv_{5,0}) \\ Ckp(Cv_{6,0}) \\ Ckp(Cv_{7,0}) \\ Ckp(Cv_{8,0}) \\ Ckp(Cv_{9,0}) \end{bmatrix} \quad Ckpt = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.019 \\ 0.143 \\ 0.249 \\ 0.241 \\ 0.169 \\ 0.096 \\ 0.048 \\ 0.021 \\ 0.009 \end{bmatrix}$$

$$\boxed{\sigma} := \sqrt{\frac{\sum (Ckpt - C)^2}{9}} \quad \sigma = 0.01$$

$$\boxed{n} := 8 \quad \boxed{Ckp}(t) := \frac{n^n \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^{n-1} \cdot e^{-n \cdot \frac{t}{\tau}}}{\tau \cdot (n-1)!}$$

$$\boxed{Ckpt} := \begin{bmatrix} Ckp(Cv_{0,0}) \\ Ckp(Cv_{1,0}) \\ Ckp(Cv_{2,0}) \\ Ckp(Cv_{3,0}) \\ Ckp(Cv_{4,0}) \\ Ckp(Cv_{5,0}) \\ Ckp(Cv_{6,0}) \\ Ckp(Cv_{7,0}) \\ Ckp(Cv_{8,0}) \\ Ckp(Cv_{9,0}) \end{bmatrix} \quad Ckpt = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.006 \\ 0.11 \\ 0.265 \\ 0.279 \\ 0.187 \\ 0.094 \\ 0.039 \\ 0.014 \\ 0.004 \end{bmatrix}$$

$$\boxed{\sigma} := \sqrt{\frac{\sum (Ckpt - C)^2}{9}} \quad \sigma = 0.025$$

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

$$res := \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 & 8 \\ 0.065 & 0.024 & 0.01 & 0.025 \end{bmatrix}$$

Таким чином, параметр моделі $n=6$

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 1

- 1) Які типові гідродинамічні моделі ви знаєте?*
- 2) Назвіть основні параметри гідродинамічних моделей.*
- 3) Для яких моделей розподіл часу перебування речовини можна розглядати як випадкову величину?*
- 4) Надайте характеристику комірковій моделі.*
- 5) Як визначається передавальна функція коміркової моделі?*
- 6) Який вигляд мають F- та C- криві для коміркової моделі з різною кількістю комірок?*
- 7) Яка послідовність експериментального визначення параметрів гідродинамічних моделей?*
- 8) Для чого і яким чином проводиться нормування експериментально одержаних даних?*
- 9) Надайте характеристику ідеальним гідродинамічним моделям, які є поодинокими випадками коміркової моделі (при $n = 1$ та $n = \infty$).*

2. ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕПЛООБМІННИХ АПАРАТІВ НА ОСНОВІ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ

Лабораторна робота № 2

ТЕМА: дослідження теплообмінних апаратів на основі математичної моделі.

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

2.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

2.1.1 Моделі ідеального витіснення та ідеального змішування при дослідженні теплообмінних апаратів

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

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

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

- модель змішування:

$$Vc_T \frac{dT}{dt} = \mathcal{Q}_{c_T} (T_{ex} - T) \pm FK_T \Delta T \quad (2.1)$$

- модель витіснення:

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

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

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

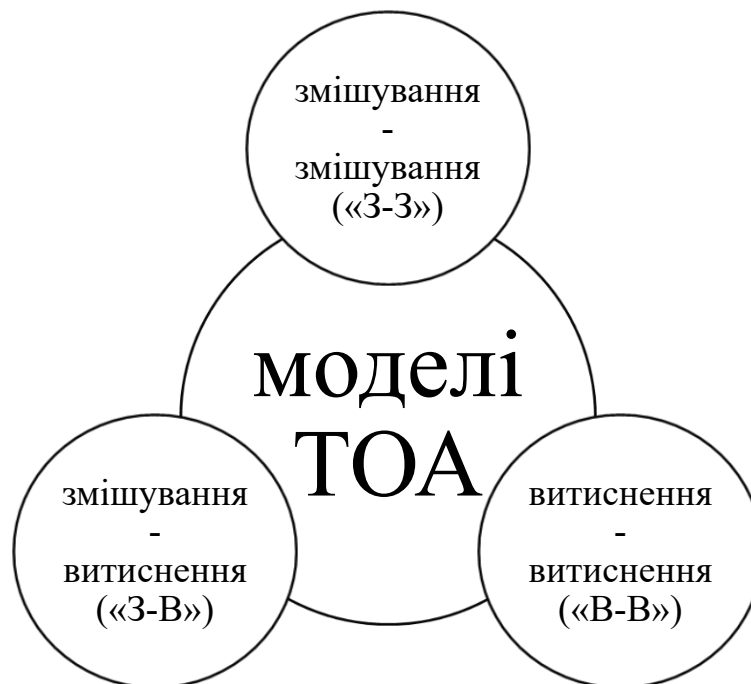


Рисунок. 2.1 – Види моделей ТОА в залежності від вигляду моделі структури потоку

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

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

де індекс 1 – відповідає гарячому, а 2 – холодному теплоносіям; $+g_2$ – противотік; $-g_1$ – прямотік.

2.1.2 Розрахунок теплообмінного апарату для моделі «витіснення-витіснення»

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

$$\begin{cases} -g_1 c_{T_1} \frac{dT_1}{dl} - \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0 \\ g_2 c_{T_2} \frac{dT_2}{dl} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0. \end{cases} \quad (2.4)$$

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

Хай потрібно отримати розподіл температур по довжині проточного кожухотрубного ТОА.

У цьому випадку початковими даними, наприклад можуть бути: $g_1 = 0,267 \text{ м}^3/\text{с}$; $T_{1п} = 76 \text{ }^\circ\text{C}$; $T_{2п} = 16 \text{ }^\circ\text{C}$; $F = 13 \text{ м}^2$; $L = 1,5 \text{ м}$; $K = 60 \text{ Вт/м}^2\text{град}$; $c_{T_1} = 1670 \text{ Дж/м}^3\text{град}$; $c_{T_2} = 4185 \cdot 10^3 \text{ Дж/м}^3\text{град}$; $V_2 = 0,26 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$.

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

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

Для наведених початкових даних $T_2(\tau_K) = T_{2\Pi} = 16\text{ }^{\circ}\text{C}$. Схема потоків для розв'язання рівнянь відповідно для заданих граничних умов надана на рисунок 2.2.

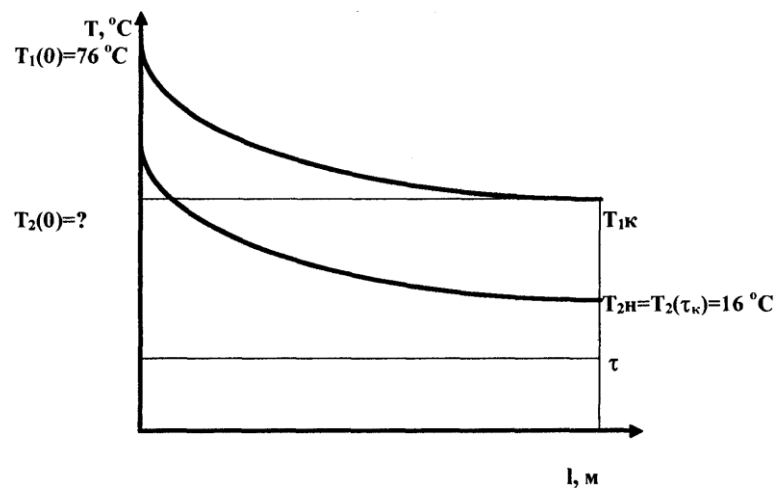


Рисунок 2.2 – Профілі температур

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

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

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

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

Після закінчення розрахунків необхідно нанести на графік одержані температурні профілі.

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

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

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

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

2.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.
3. Включити комп'ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.

4. Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.
5. Отримати результати та їх проаналізувати.
6. Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

2.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

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

Вихідні дані:

$$\begin{array}{llll}
 Ct1 := 1670 & Ct2 := 4185 \cdot 10^3 & & \\
 v1 := 0.267 & T1h := 75 & F := 13 & K := 60 \\
 v2 := 0.26 \cdot 10^{-3} & T2h := 10 & L := 1.5 & h := 0.15
 \end{array}$$

Розв'язання задачі:

(матриця температур теплоносіїв у точці входу гарячого теплоносія).

(матриця правих частин диференціальних рівнянь математичної моделі ТОА).

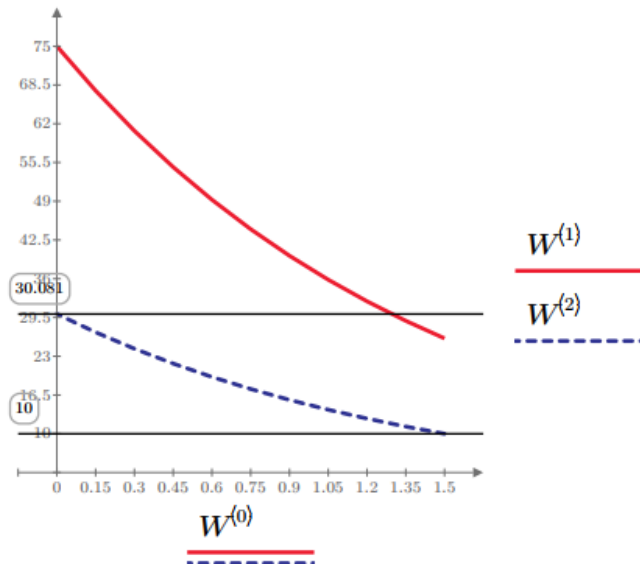
Рішення математичної моделі

$$T \equiv \begin{bmatrix} 75 \\ 30.081 \end{bmatrix}$$

$$G(t, T) := \begin{bmatrix} -F \cdot K \cdot \frac{(T_0 - T_1)}{L \cdot v1 \cdot Ct1} \\ -F \cdot K \cdot \frac{(T_0 - T_1)}{L \cdot v2 \cdot Ct2} \end{bmatrix}$$

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

Профілі розрахованих температур наведені на графіку:

$$W = \begin{bmatrix} 0 & 75 & 30.081 \\ 0.15 & 67.534 & 27.022 \\ 0.3 & 60.801 & 24.262 \\ 0.45 & 54.728 & 21.774 \\ 0.6 & 49.251 & 19.529 \\ 0.75 & 44.311 & 17.505 \\ 0.9 & 39.856 & 15.679 \\ 1.05 & 35.838 & 14.033 \\ 1.2 & 32.214 & 12.548 \\ 1.35 & 28.945 & 11.208 \\ 1.5 & 25.997 & 10 \end{bmatrix}$$


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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 2

- 1) Які типові моделі використовуються для опису гідродинаміки теплоносіїв у теплообмінних апаратах? Навести приклади.
- 2) Охарактеризуйте основні коефіцієнти і змінні, які входять у математичний опис ТОА, та їх розмірність.
- 3) Який вигляд має блочний принцип при побудові математичної моделі ТОА?
- 4) Охарактеризуйте математичний опис протиточного теплообмінного апарату у стаціонарному режимі, межові умови?
- 5) У чому полягає особливість рішення моделі ТОА у випадку протиточного руху теплоносіїв?
- 6) Які припущення приймають при урахування тепlopередачі в математичній моделі ТОА?

3. КОМП'ЮТЕРНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НА ЕОМ КОНСТАНТ ШВИДКОСТІ ЗВОРотної ХІМІЧНОЇ РЕАКЦІЇ

Лабораторна робота № 3

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

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

3.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

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

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

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

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

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

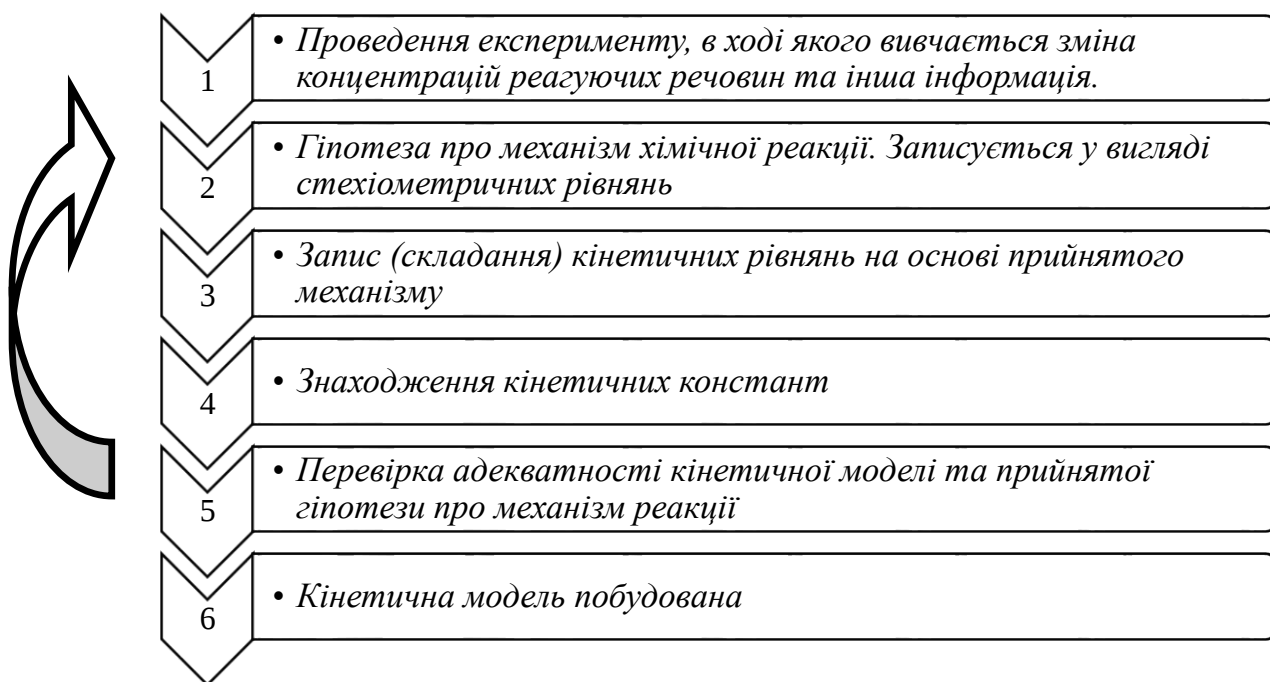


Рисунок 3.1 – Основні етапи побудови кінетичної моделі

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

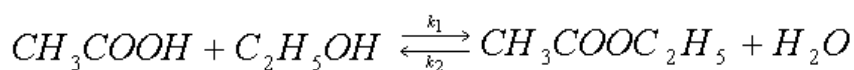
3.1.1 Приклад розрахунку констант швидкості реакції етерифікації етилового спирту та оцтової кислоти

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

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

$$K_p = k_1/k_2 = 4 \quad (3.1)$$

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



або у загальному вигляді:



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

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A C_B + k_2 C_R C_S. \quad (3.3)$$

Початкові умови:

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

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

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

Після підстановки останніх співвідношень у (3.3) маємо:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A^2 + k_2 C_R C_S.$$

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

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_2 (3C_A^2 + 2C_A - 1) \quad (3.4)$$

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

3.1.2 Алгоритм розрахунку кінетичних констант

Алгоритм розрахунку кінетичних констант може бути таким:

- 1) Задається орієнтовне (довільне) значення k_2 (рекомендується 0,01 або 0,02).

- 2) Кінетичну модель (3.4) із прийнятим значенням константи чисельно інтегрують на інтервалі від 0 до 1, використовуючи, наприклад, методи Ейлера або Рунге-Кутта. Результат інтегрування на ЕОМ - розрахункові значення концентрації C_A у різні моменти часу.
- 3) Розраховується на ЕОМ значення критерію середньоквадратичного відхилення S для перевірки адекватності моделі:

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

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

- 4) Початкове значення S рекомендується задати рівним нулеві.
- 5) Змінюється (наприклад, збільшується) значення константи k_2 (наприклад, на 0,01). Розрахунок повторюють відповідно з п.п. 2 та 3.
- 6) Порівнюють попереднє та останнє значення критерію S . Якщо значення S зменшилося, то продовжують змінювати константу k_2 у тому ж напрямку. Якщо значення S збільшилося – у зворотному.
- 7) Розрахунки виконують у діалоговому режимі з ЕОМ; константи змінюють, доки не буде одержано мінімальне значення критерію S .
- 8) У цьому випадку пошук k_2 припиняється. На графік наносять залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості реакції k_2 , на якому відзначають мінімум S та знайдене значення константи k_2 (рисунок 3.2).
- 9) Значення константи прямої реакції k_1 розраховують згідно з формулою константи рівноваги (3.1): $k_1 = 4k_2$.

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

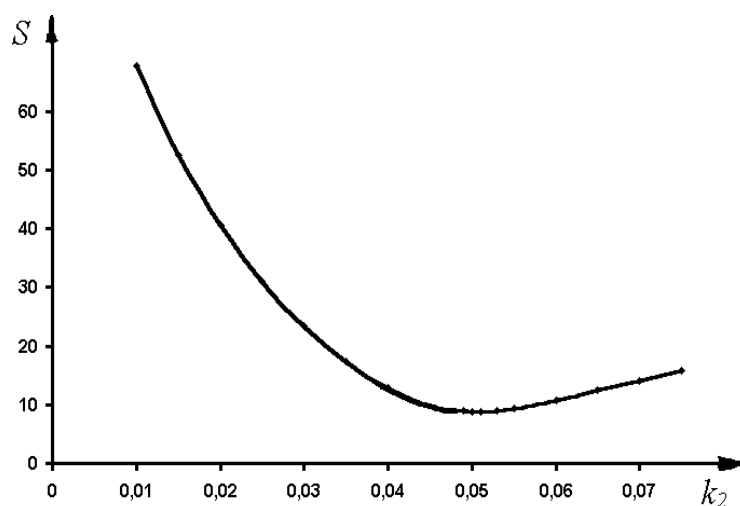


Рисунок 3.2 – Залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості реакції k_2

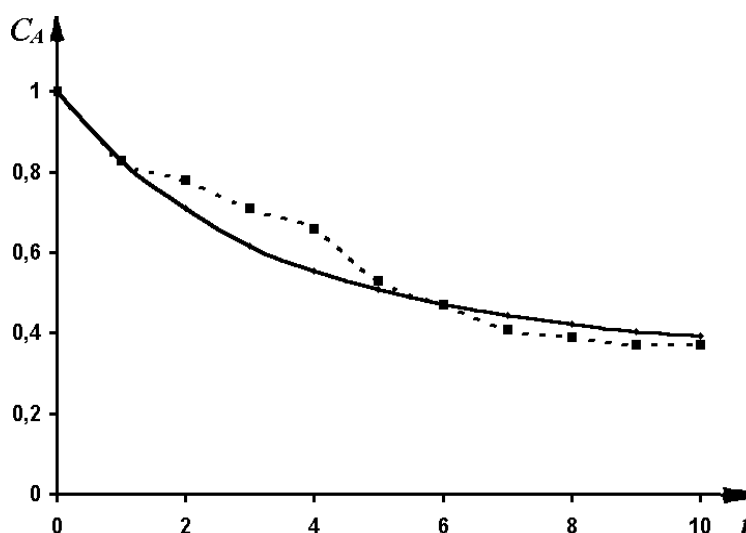


Рисунок 3.3 – Залежність концентрації компоненту A від часу

3.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

5. Отримати результати та їх проаналізувати.
6. Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

3.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Початкові дані:

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

Пошук адекватного рівняння кінетичної моделі:

$$K_p := 4$$

Прийняте значення константи швидкості зворотної реакції k_2 :

$$k_2 := 0.045$$

$$C_a := \begin{bmatrix} C_{ae_{0,1}} \\ C_{ae_{0,1}} \end{bmatrix}$$

$$D(t, C_a) := -k_2 \cdot (3 \cdot C_a^2 + 2 \cdot C_a - 1)$$

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

$$C := \text{rkfixed}(C_a, 0, 10, 10, D)$$

$$C_{ap} := C^{(1)}$$

$$C_{ap} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0.848 \\ 0.737 \\ 0.655 \\ 0.592 \\ 0.542 \\ 0.504 \\ 0.473 \\ 0.448 \\ 0.428 \\ 0.411 \end{bmatrix}$$

Середньоквадратичне відхилення розрахункових значень концентрації від експериментальних:

$$S := \sqrt{\frac{\sum (C_{ae}^{(1)} - C_{ap})^2}{11}} \quad S = 0.042$$

Значення константи швидкості прямої реакції k_1 :

$$k_1 := K_p \cdot k_2$$

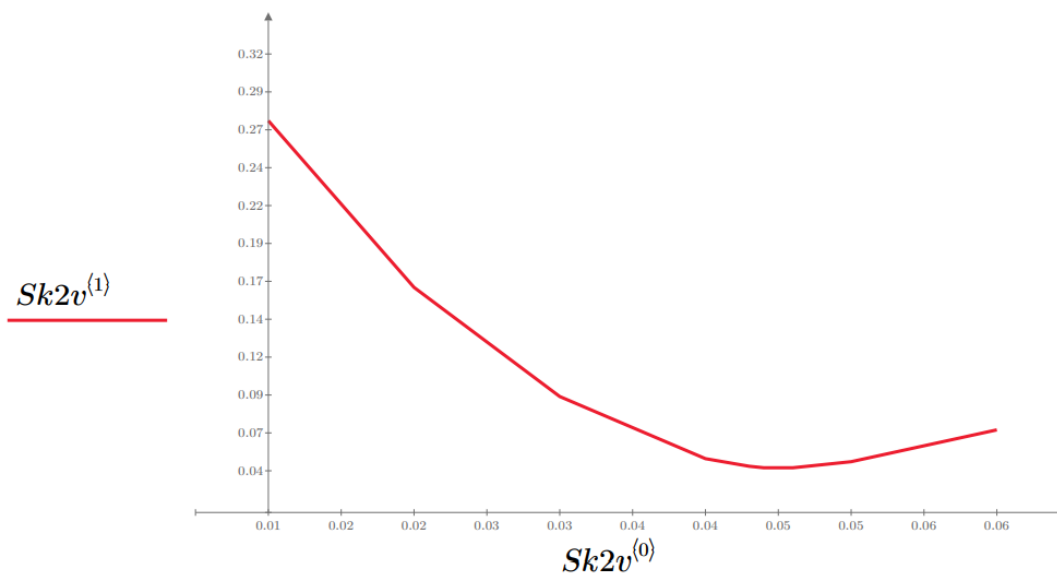
$$k_1 = 0.18$$

Розраховані значення константи швидкості зворотної реакції k_2 (1-й рядок)
та відповідне їй значення середньоквадратичного відхилення (2-й рядок)

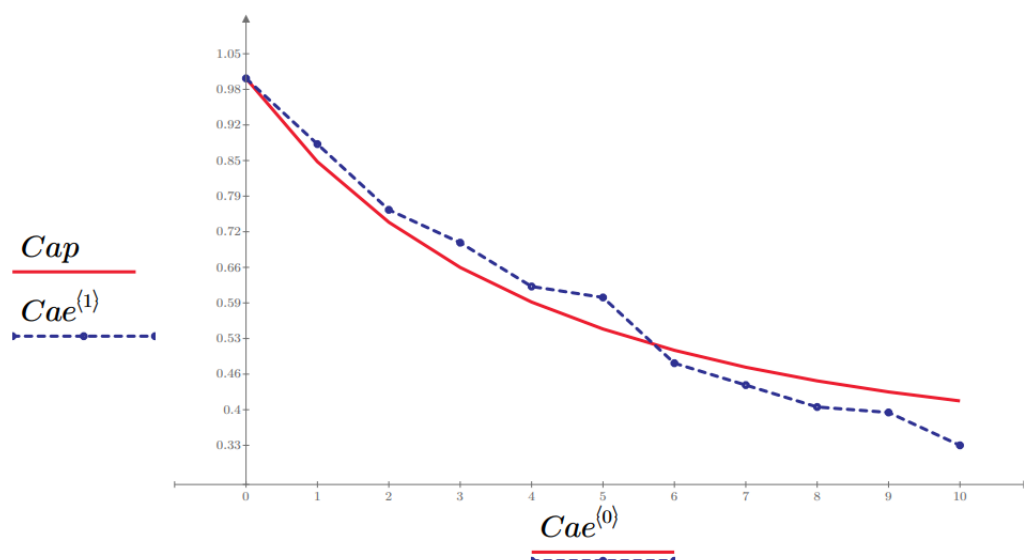
$$Sk2 := \begin{bmatrix} 0.01 & 0.02 & 0.03 & 0.04 & 0.043 & 0.044 & 0.045 & 0.046 & 0.047 & 0.048 & 0.05 & 0.06 \\ 0.271 & 0.161 & 0.089 & 0.048 & 0.043 & 0.042 & 0.042 & 0.042 & 0.043 & 0.044 & 0.046 & 0.067 \end{bmatrix}$$

Транспонуємо матрицю отриманих значень для можливості побудови графічної залежності:

$$Sk2v := Sk2^T$$



Залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості зворотної реакції k_2



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

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №3

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

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

Лабораторна робота № 4

ТЕМА: математичне моделювання хімічних процесів в системах автоматизованого проектування.

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

4.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

4.1.1 Моделювання проточного реактора ідеального змішування

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

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

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

де $i = 1, 2, \dots, n$ – кількість компонентів реакції; τ, τ_x – середній час перебування потоку в реакторі та холодоагенту в сорочці; $C_{\text{вх}i}, C_i$ – вхідна, поточна (вихідна) концентрація i -го компонента; $T_{\text{вх}}, T, T_x$ – вхідна, поточна (вихідна) температури потоку та температура холодоагенту, відповідно; C_T, C_x

– об'ємна теплоємність реакційної суміші та холодоагенту, відповідно; V, V_x – робочий об'єм реактора та сорочки; K_T, F – коефіцієнт та поверхня теплопередачі; W_{r_i} – швидкість перетворення i -го компонента в хімічній реакції; $\pm\Delta H$ – сумарний тепловий ефект; W_r – сумарна швидкість реакції для усіх стадій.

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

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

$$\frac{1}{\tau}(C_{\text{вх}i} - C_i) + W_{r_i} = 0 \quad (4.2)$$

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



Відомі: концентрації компонентів у вхідному потоці: $C_{A_{\text{вх}}} = 1 \text{ кмоль/м}^3$;

$C_{B_{\text{вх}}} = C_{P_{\text{вх}}} = C_{S_{\text{вх}}} = 0$, константи швидкостей окремих стадій реакції: $k_1 = 0,5 \text{ год}^{-1}$; $k_2 = 0,4 \text{ год}^{-1}$; $k_3 = k_4 = 0,3 \text{ год}^{-1}$; τ – час перебування потоку в реакторі.

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

$$\begin{cases} W_{r_A} = \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \\ W_{r_B} = \frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S \\ W_{r_S} = \frac{dC_S}{dt} = k_2 C_B - k_3 C_S \\ W_{r_P} = \frac{dC_P}{dt} = k_4 C_B \end{cases} \quad (4.4)$$

Тоді модель ізотермічного реактора у статиці запишемо так:

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

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

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

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

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

$$C_{\text{вх}} = K \cdot C, \quad (4.7)$$

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

$$C = \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \\ C_S \\ C_P \end{pmatrix}, C_{\text{вх}} = \begin{pmatrix} C_{A_{\dot{\alpha}\dot{\alpha}}} \\ C_{B_{\dot{\alpha}\dot{\alpha}}} \\ C_{S_{\dot{\alpha}\dot{\alpha}}} \\ C_{P_{\dot{\alpha}\dot{\alpha}}} \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} (1 + k_1 \tau) & 0 & 0 & 0 \\ -k_1 \tau & 1 + (k_2 + k_4) \tau & -k_3 \tau & 0 \\ 0 & -k_2 \tau & (1 + k_3 \tau) & 0 \\ 0 & -k_4 \tau & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{— матриця коефіцієнтів} \quad (4.8)$$

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

$$C = K^{-1} \cdot C_{\text{вх}} \quad (4.9)$$

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

4.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

4.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Моделювання проточного реактору ідеального змішування

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

$$C_{\text{inp}} := \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad k := \begin{bmatrix} 0.4 \\ 0.5 \\ 0.3 \\ 0.1 \end{bmatrix}$$

$$\tau := \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix}$$

Час перебування: $i := 0 \dots 5$

Матриці коефіцієнтів:

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

Розв'язання системи матричним методом при різних термінах перебування:

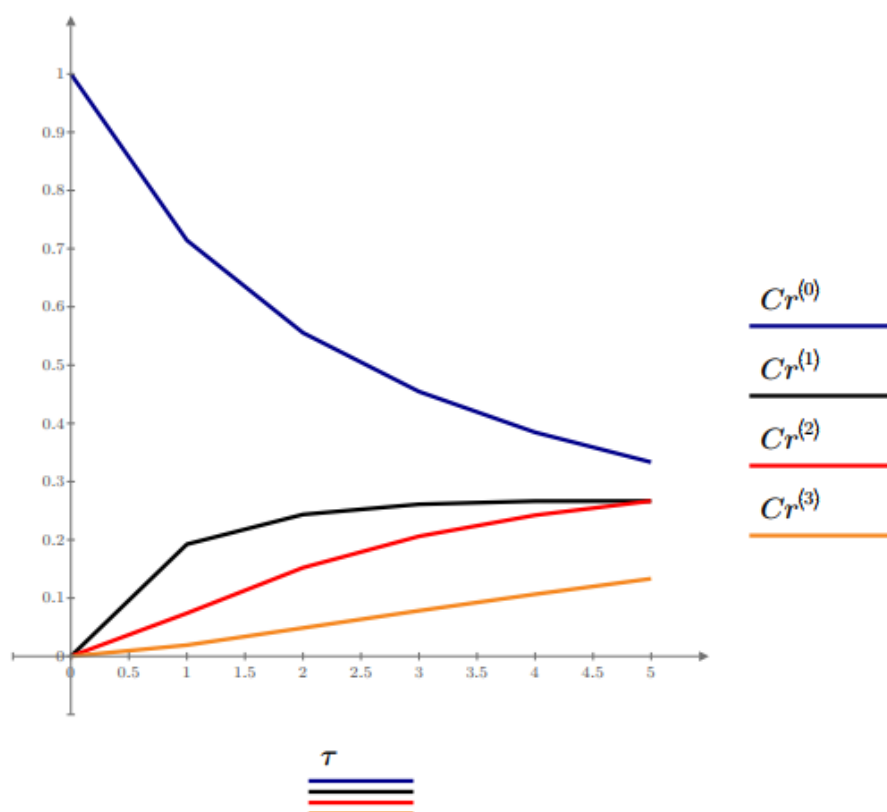
$$C^{(i)} := K(\tau_i)^{-1} \cdot C_{inp}$$

Поточні концентрації знайдені:

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 0.714 & 0.556 & 0.455 & 0.385 & 0.333 \\ 0 & 0.192 & 0.244 & 0.261 & 0.267 & 0.267 \\ 0 & 0.074 & 0.152 & 0.206 & 0.242 & 0.267 \\ 0 & 0.019 & 0.049 & 0.078 & 0.107 & 0.133 \end{bmatrix}$$

$$Cr := C^T \quad Cr = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.714 & 0.192 & 0.074 & 0.019 \\ 0.556 & 0.244 & 0.152 & 0.049 \\ 0.455 & 0.261 & 0.206 & 0.078 \\ 0.385 & 0.267 & 0.242 & 0.107 \\ 0.333 & 0.267 & 0.267 & 0.133 \end{bmatrix}$$

Тоді, 1-й стовпчик матриці C - початкова концентрація, 2, 3, 4, 5 - поточні значення компонентів А, В, S, Р.



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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 4

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

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

Лабораторна робота № 5

ТЕМА: математичне моделювання хімічних процесів в системах автоматизованого проектування.

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

5.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

5.1.1 Математичний опис і розрахунок ізотермічного трубчатого реактора ідеального витіснення

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

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

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \frac{\partial C_i}{\partial l} + W r_i \quad (5.1)$$

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

$$-u \frac{\partial C_i}{\partial l} + W r_i = 0, \quad (5.2)$$

$$C_i(0) = C_{\text{ex}_i}$$

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

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

$$\frac{dC_i}{d\tau} = Wr_i, \quad (5.3)$$

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

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

Розглянемо проточний реактор із мішалкою, в якому протікає ізотермічна хімічна реакція типу (5.3).

В цьому випадку математична модель РІВ буде мати вигляд системи звичайних диференціальних рівнянь з відповідними граничними умовами:

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

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

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

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

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

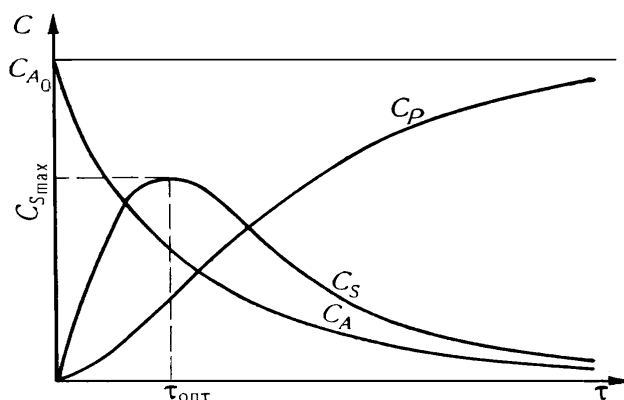


Рисунок 5.1 – Графічна залежність $C_i = f(\tau)$

5.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

5.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Моделювання ізотермічного трубчатого реактору ідеального витіснення

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

$$C_{inp} := \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} C_{inp}(A) \\ C_{inp}(B) \\ C_{inp}(S) \\ C_{inp}(P) \end{matrix} \quad k := \begin{bmatrix} 0.4 \\ 0.5 \\ 0.3 \\ 0.1 \end{bmatrix} \begin{matrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \\ k_4 \end{matrix}$$

Час перебування: $i := 0 \dots 5$

$$\tau := \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix}$$

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

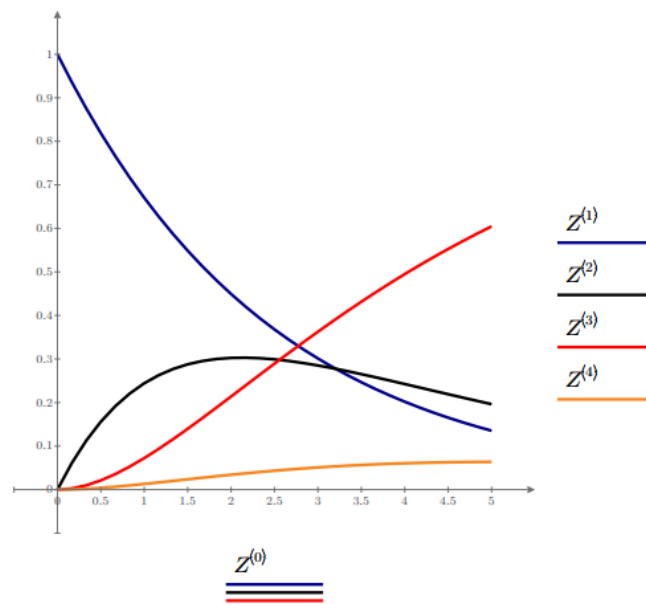
$$D(t, Cinp) := \begin{bmatrix} -k_0 \cdot Cinp_0 \\ (k_0) \cdot Cinp_0 + (k_2) \cdot Cinp_3 - (k_1 + k_3) \cdot Cinp_1 \\ k_1 \cdot Cinp_1 \\ k_3 \cdot Cinp_1 - k_2 \cdot Cinp_3 \end{bmatrix}$$

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

$$Z := \text{rkfixed}(Cinp, 0, 5, 30, D) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.167 & 0.936 & 0.061 & 0.003 & 5.169 \cdot 10^{-4} \\ 0.333 & 0.875 & 0.113 & 0.01 & 0.002 \\ 0.5 & 0.819 & 0.156 & 0.021 & 0.004 \\ 0.667 & 0.766 & 0.192 & 0.036 & 0.007 \\ 0.833 & 0.717 & 0.221 & 0.053 & 0.01 \\ 1 & 0.67 & 0.244 & 0.072 & 0.013 \\ 1.167 & 0.627 & 0.263 & 0.094 & 0.017 \\ 1.333 & 0.587 & 0.277 & 0.116 & 0.02 \\ 1.5 & 0.549 & 0.288 & 0.14 & 0.024 \\ 1.667 & 0.513 & 0.295 & 0.164 & 0.027 \\ 1.833 & 0.48 & 0.3 & 0.189 & 0.031 \\ \vdots & & & & \end{bmatrix}$$

Тоді, з першого по четвертий стовпчик матриці-розв'язку міститиметься концентрація компонентів А, В, S та Р відповідно:

Графічна інтерпретація розв'язку матиме вигляд:



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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 5

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

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

Лабораторна робота № 6

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

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

6.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

6.1.1 Математичний опис реактора ідеального змішування періодичної дії

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

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

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

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

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

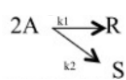
де $i = \overline{1, p}$ – індекс потоків; верхній індекс «0» відноситься до вхідних потоків;
 $j = \overline{1, k}$ – індекс компонентів; n_j, N_j – відповідно число моль і молярна частка j -го компонента; V – об'єм реакційної суміші, м^3 ; ρ – молярна густина, $\text{кмоль}/\text{м}^3$; v – об'ємна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

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

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

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

6.1.2 Приклад розрахунку проточного реактора ідеального змішування періодичної дії

Для різних теплових режимів проведення ендотермічної реакції типу  у РІЗ-П, обладнаному теплообмінним пристроєм типу сорочка-термостат, визначити час закінчення реакції. Результати рішення представити в чисельному і графічному виді.

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

$$\sum F_{A_\Sigma} = f_{A,V} \cdot V = W_A \cdot V = (-k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_A) \cdot V; \quad (6.5)$$

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

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

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

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

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

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

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

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_A; \quad (6.11)$$

$$\frac{dC_R}{dt} = k_1 \cdot C_A \quad (6.12)$$

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

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

Для адіабатичного теплового режиму рівняння (6.14) прийме вигляд:

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

Ізотермічний тепловий режим забезпечується рівністю теплоприходу і тепловитрат, тобто:

$$\frac{dT}{dt} = 0. \quad (6.16)$$

Таким чином, математична модель в ізотермічних умовах буде така:

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

При початкових умовах:

$$C_A(0) = C_{A_0}, C_R(0) = C_{R_0}, C_S(0) = C_{S_0}, T(0) = T_0.$$

Таким чином, математична модель в адіабатичних умовах буде така:

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

При початкових умовах:

$$C_A(0) = C_{A_0}, C_R(0) = C_{R_0}, C_S(0) = C_{S_0}, T(0) = T_0.$$

Таким чином, математична модель в політропічних умовах буде така:

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

При початкових умовах:

$$C_A(0) = C_{A_0}, C_R(0) = C_{R_0}, C_S(0) = C_{S_0}, T(0) = T_0, T_T(0) = T_{T_0}.$$

Математичний опис РІЗ-П для розглянутих теплових режимів (6.17) - (6.19) являє собою систему звичайних диференціальних рівнянь першого

порядку. Для їх рішення скористаємося методом Ейлера з постійним кроком інтегрування. Сутність методу полягає в тому, що похідна замінюється відношенням кінцевих різниць. Тоді чисельне інтегрування зводиться до обчислення за рекурентним співвідношенням:

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

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

Для узгодження розмірностей у вихідній інформації необхідно розмірність теплоти реакції представити в $\text{Дж/кмоль } S$ (по речовині S):

$$Q_p = 88000 \text{ кДж/кмоль } S \cdot 1000 = 880 \cdot 10^5 \text{ Дж/кмоль } S.$$

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

Розв'яжемо задачу при наступних початкових даних. Початкові концентрації реагуючих компонентів, кмоль/м^3 : $C_{A_0} = 1,37$; $C_{R_0} = 0$; $C_{S_0} = 0$. Теплота реакції $Q_p = 88000 \text{ кДж/кмоль } S$. Температурні залежності констант швидкості мають вигляд:

$$k_1 = 10^9 \cdot \exp\left(-\frac{61860}{R \cdot T}\right), \text{ с}^{-1};$$

$$k_2 = 10^7 \cdot \exp\left(-\frac{53240}{R \cdot T}\right), \text{ с}^{-1}.$$

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

Припущення і рекомендації:

- 1) Гідродинамічний режим в апараті і теплообмінному пристрої типу сорочка - ідеальне змішування.
- 2) Густина, теплоємність реакційної суміші і теплота реакції від температури не залежать.

3) Реакція протікає без зміни об'єму.

Інструкції по роботі з інтегрованим програмним середовищем Mathcad надаються при роботі в лабораторії обчислювальної техніки. Робота виконується у програмному середовищі Mathcad на персональному комп'ютері.

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

6.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

6.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

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

Вихідні дані:

Константи швидкості реакції, 1/с:

$$k1(tem) := 10^9 \cdot e^{\left(\frac{61860}{8.31 \cdot tem}\right)}$$

$$k2(tem) := 10^7 \cdot e^{\left(\frac{53240}{8.31 \cdot tem}\right)}$$

$i := 1 \dots 5000$ кроки інтегрування

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

Концентрації речовин (кмоль/м³) і температура (К) у початковий момент часу

$$t_0 := 0 \quad tem_0 := 303 \quad Ca_0 := 1.37 \quad Cr_0 := 0 \quad Cs_0 := 0$$

$Qps := 88000000$ - тепловий ефект реакції по речовині S, Дж/кмоль

$cp := 1850$ - питома теплоємність реакційної суміші, Дж/(кг*К)

$p := 910$ - густина реакційної суміші, кг/м³

$V := 5$ - об'єм реакційної суміші, м³

$Ft := 9$ - поверхня теплопередачі, м²

$Kt := 250$ - коефіцієнт теплопередачі, Вт/(м²·К)

$Tt := 293$ - температура теплоносія, К

Ліві частини системи диференціальних рівнянь матеріального балансу:

$$FCa(Ca, tem) := -2 \cdot ((k1(tem) + k2(tem)) \cdot Ca^2)$$

$$FCr(Ca, tem) := k1(tem) \cdot Ca^2$$

$$FCs(Ca, tem) := k2(tem) \cdot Ca^2$$

Модельовання РІЗ-П (ізотермічний режим)

Реалізація методу Ейлера

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

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

0.103

0.102

0.1

0.099

0.097

0.096

0.094

0.093

0.092

0.09

0.089

0.088

$\vdots$

$$\Delta =$$

0

0.103

0.102

0.1

0.099

0.097

0.096

0.094

0.093

0.092

0.09

0.089

$\vdots$

$$t =$$

0

0.1

0.2

0.3

0.4

0.5

0.6

0.7

0.8

0.9

1

1.1

$\vdots$

$$Ca =$$

1.37

1.36

1.349

1.339

1.329

1.319

1.309

1.3

1.29

1.281

1.272

1.263

$\vdots$

$$Cr =$$

0

0.004

0.008

0.012

0.016

0.019

0.023

0.027

0.03

0.034

0.038

0.041

$\vdots$

$$Cs =$$

0

0.001

0.002

0.004

0.005

0.006

0.007

0.008

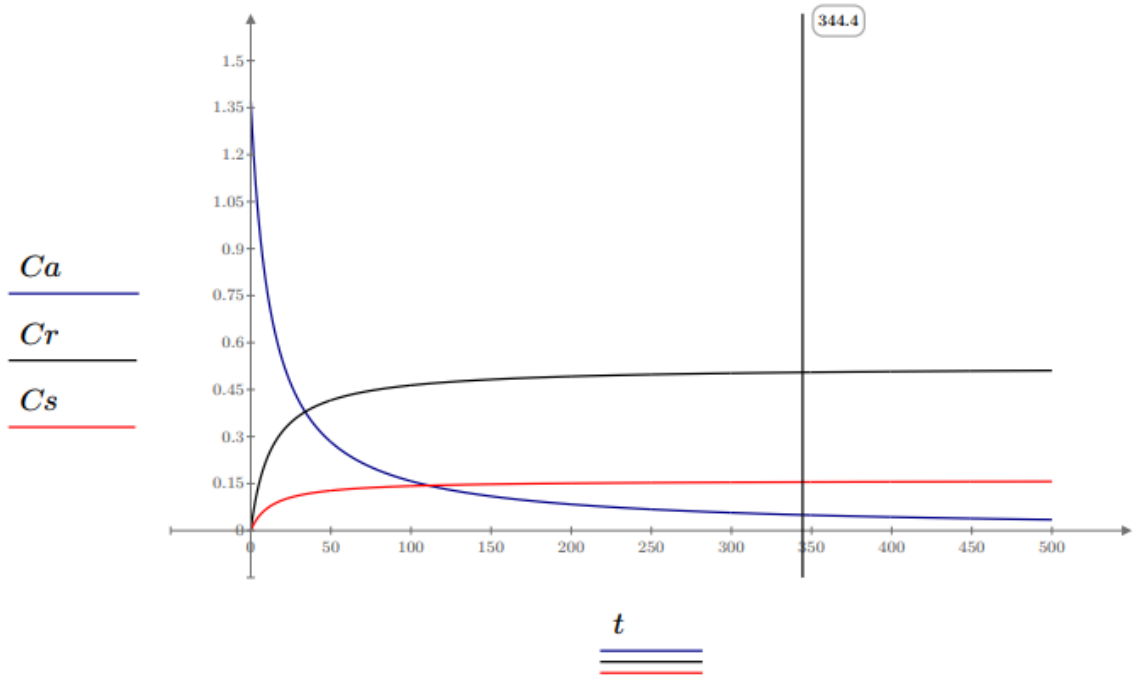
0.009

0.01

0.012

0.013

$\vdots$



$$Ca_{3444} = 0.04998$$
$$t_{3444} = 344.4$$

Час закінчення реакції: $t=344.4$ c

Моделювання РІЗ-ІІ (адіабатичний режим)

$$Ftem(Ca, tem) := \frac{Q_{ps}}{cp \cdot p} \cdot |FCs(Ca, tem)|$$

Ліва частина диференційного рівняння теплового балансу

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

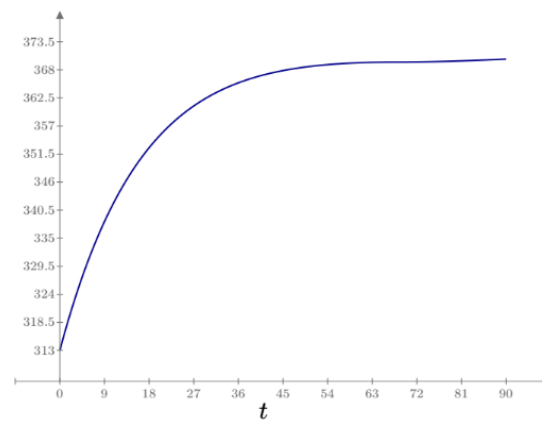
$$\Delta_i := |FCa(Ca_i, tem_i)|$$

$$\Delta = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.104 \\ 0.103 \\ 0.102 \\ 0.101 \\ 0.1 \\ 0.099 \\ 0.098 \\ 0.097 \\ 0.096 \\ 0.095 \\ 0.094 \\ 0.093 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad t = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.1 \\ 0.2 \\ 0.3 \\ 0.4 \\ 0.5 \\ 0.6 \\ 0.7 \\ 0.8 \\ 0.9 \\ 1 \\ 1.1 \\ 1.2 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad Ca = \begin{bmatrix} 1.37 \\ 1.36 \\ 1.349 \\ 1.339 \\ 1.329 \\ 1.319 \\ 1.309 \\ 1.299 \\ 1.289 \\ 1.279 \\ 1.27 \\ 1.26 \\ 1.251 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad Cr = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.004 \\ 0.008 \\ 0.012 \\ 0.016 \\ 0.02 \\ 0.023 \\ 0.027 \\ 0.031 \\ 0.035 \\ 0.038 \\ 0.042 \\ 0.046 \\ 0.049 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad Cs = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.001 \\ 0.002 \\ 0.004 \\ 0.005 \\ 0.006 \\ 0.007 \\ 0.008 \\ 0.009 \\ 0.011 \\ 0.012 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$Ca_{2002} = 0.04998$$

$$t_{2002} = 200.2$$

Час закінчення реакції: $t=200.2$ с



Модельовання РІЗ-П (політропічний режим)

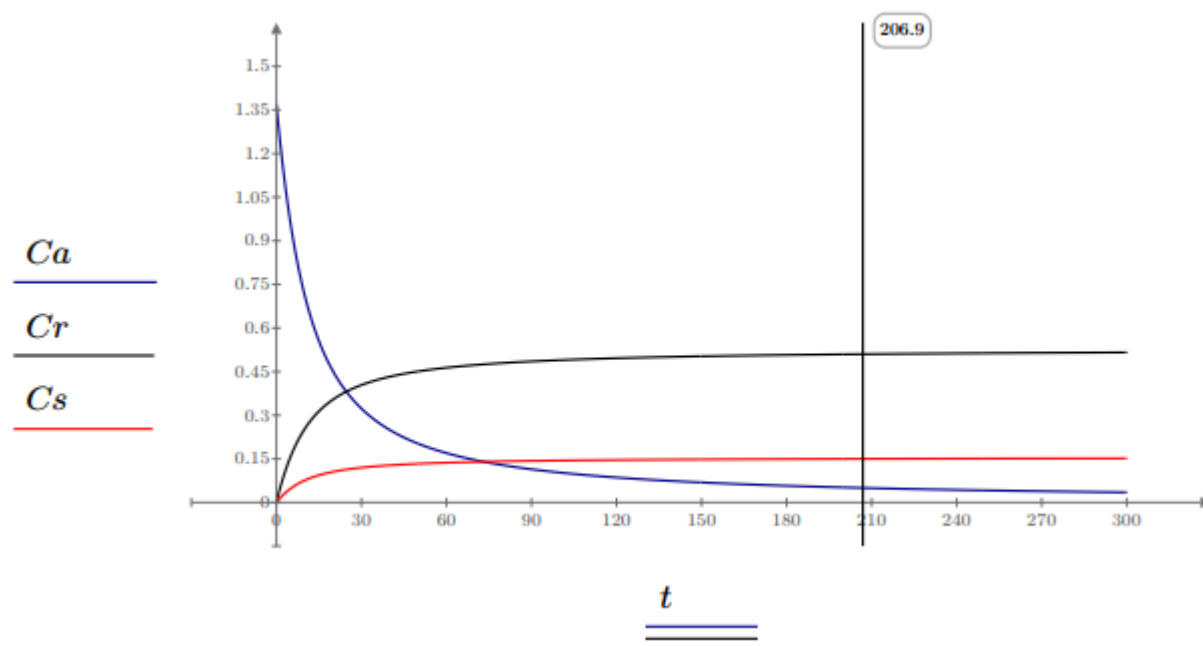
$$Ftem(Ca, tem) := \frac{Qps}{cp \cdot p} \cdot |FCs(Ca, tem)| + \frac{Kt \cdot Ft \cdot (Tt - tem)}{V \cdot cp \cdot p}$$

Ліва частина диференційного рівняння теплового балансу

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

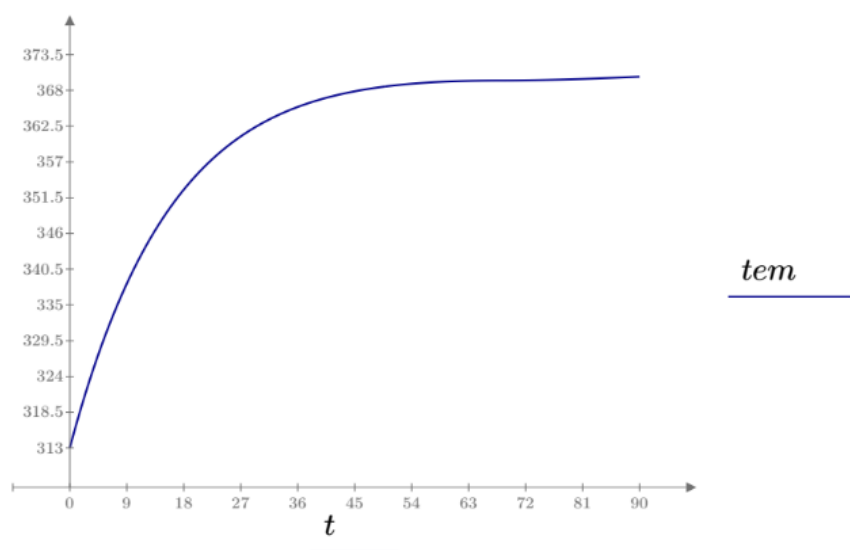
$$\Delta_i := |FCa(Ca_i, tem_i)|$$

$$\Delta = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.104 \\ 0.103 \\ 0.102 \\ 0.101 \\ 0.1 \\ 0.099 \\ 0.098 \\ 0.097 \\ 0.096 \\ 0.095 \\ 0.094 \\ 0.093 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad t = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.1 \\ 0.2 \\ 0.3 \\ 0.4 \\ 0.5 \\ 0.6 \\ 0.7 \\ 0.8 \\ 0.9 \\ 1 \\ 1.1 \\ 1.2 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad Ca = \begin{bmatrix} 1.37 \\ 1.36 \\ 1.349 \\ 1.339 \\ 1.329 \\ 1.319 \\ 1.309 \\ 1.299 \\ 1.289 \\ 1.279 \\ 1.27 \\ 1.26 \\ 1.251 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad Cr = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.004 \\ 0.008 \\ 0.012 \\ 0.016 \\ 0.02 \\ 0.023 \\ 0.027 \\ 0.031 \\ 0.035 \\ 0.038 \\ 0.042 \\ 0.046 \\ 0.049 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad Cs = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.001 \\ 0.002 \\ 0.004 \\ 0.005 \\ 0.006 \\ 0.007 \\ 0.008 \\ 0.009 \\ 0.011 \\ 0.012 \\ \vdots \end{bmatrix}$$



$$Ca_{2069} = 0.04999 \quad t_{2069} = 206.9$$

Час закінчення реакції: $t=206.9$ с



Досліджено ендотермічну реакцію, що протікає в РІЗ-П, в різних теплових режимах. Визначено час закінчення реакції: в ізотермічному режимі – 344.4 с; адіабатичному – 200.2 с; політропічному – 206.9 с. Отримані результати свідчать про те, що найбільш ефективним для ендотермічної реакції в заданих умовах є політропічний режим.

На графіках приведено характерні для досліджуваної реакції кінетичні залежності і зміна температури в часі. Екстремальний характер кінетичної залежності за проміжним продуктом R обумовлюється тим, що в початковий момент, коли концентрація продукту R мізерно мала, швидкість першої стадії (одержання продукту R) переважає над швидкістю другої стадії (витрата продукту R). Потім при зменшенні концентрації A швидкість витрати R стає більше швидкості утворення, і концентрація R зменшується. Якщо цільовим продуктом є R , то в нашому випадку процес доцільно припинити в момент часу 200 с, коли концентрація R досягає свого максимуму.

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 6

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

7. МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ АБСОРБЦІЇ

Лабораторна робота № 7

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

МЕТА: набути умінь математичного моделювання процесу абсорбції.

7.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

7.1.1 Математичний опис процесу абсорбції

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

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

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

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

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

$$y_p = f(x), \quad (7.1)$$

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

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

$$y_p = K_g \cdot x, \quad (7.2)$$

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

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

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

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

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

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

З урахуванням того, що:

- газ і поглинач не взаємодіють один з одним,
- потоки рідини і газу рухаються назустріч один одному у поршневого режимі,
- масові витрати і швидкості відповідних потоків постійні,
- процес абсорбції відбувається в ізотермічному режимі.

Математичну модель статичного процесу абсорбції в насадковій колоні (рисунок 7.1) можна представити як:

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

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

де L, G – витрати газу та рідини відповідно, кмоль/год; dl – координата висоти шару насадки, м; Kv – об'ємний коефіцієнт масопередачі, кмоль/(год·м³); S – площа поперечного перетину ($\pi D^2/4$), м²; D – внутрішній діаметр колони, м; x – концентрація компонента в рідині, відносні одиниці; y – концентрація компонента у газі, відносні одиниці; y_p – концентрація компонента в газовій фазі рівноважної з рідиною, відносні одиниці.

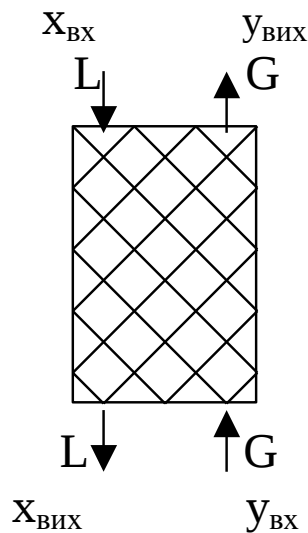


Рисунок 7.1 – Схема насадкового абсорбера

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

- газ і поглинач не взаємодіють один з одним,
- гідродинаміка потоків описується комірковою моделлю, згідно з якою відбувається ідеальне перемішування в межах комірки і відсутнє перемішування між комірками,
- масові витрати і швидкості відповідних потоків постійні,
- процес абсорбції відбувається в ізотермічному режимі.

Математичну модель статичного процесу абсорбції в i -й комірці можна представити як:

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

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

де K – коефіцієнт масопередачі, кмоль/(год·м²); S_T – робоча площа тарілки, м².

7.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

7.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Вихідні дані:

$Kv := 0.059$ Середній об'ємний коефіцієнт масопередачі, $\text{кмоль}/(\text{год} \cdot \text{м}^3)$

$G := 0.3$ Витрата повітря, $\text{кмоль}/\text{год}$

$L := 0.7$ Витрата води, $\text{кмоль}/\text{год}$

$D := 1.7$ Внутрішній діаметр колони, м

$H := 11.5$ Висота шару насадки, м

$xv := 0.265$ Вміст ацетону у воді, покидаючого абсорбер, $\text{кмоль}/\text{кмоль}$ води

$yv := 0.108$ Вміст ацетону у повітрі, поступаючого в абсорбер, $\text{кмоль}/\text{кмоль}$ повітря

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

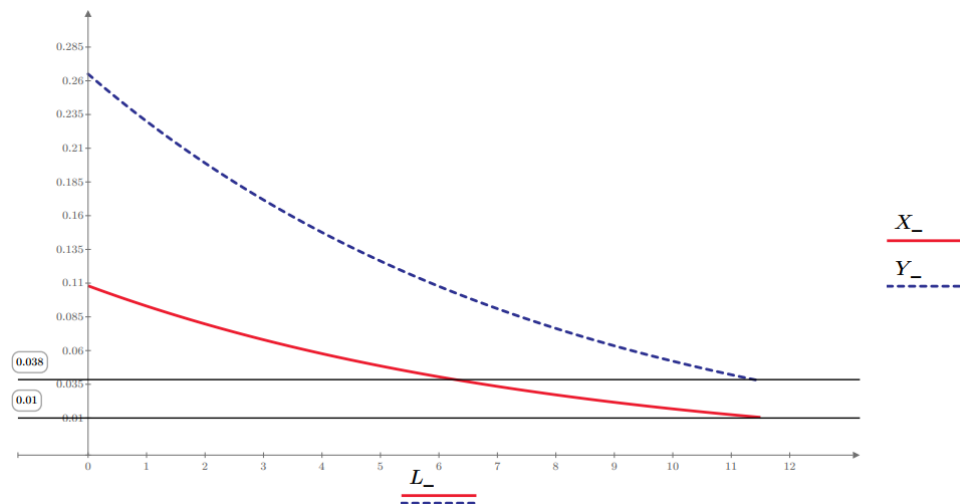
Розв'язання моделі ідеального витіснення з допомогою функції rkfixed

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

$$U := \text{rkfixed}\left(\begin{bmatrix} yv \\ xv \end{bmatrix}, 0, H, 100, Func\right)$$

$$Y_- := U^{(2)} \quad L_- := U^{(0)} \quad X_- := U^{(1)}$$

$$U = \begin{bmatrix} 0 & 0.108 & 0.265 \\ 0.115 & 0.106 & 0.261 \\ 0.23 & 0.104 & 0.257 \\ 0.345 & 0.103 & 0.252 \\ 0.46 & 0.101 & 0.248 \\ 0.575 & 0.099 & 0.244 \\ 0.69 & 0.097 & 0.24 \\ 0.805 & 0.096 & 0.236 \\ 0.92 & 0.094 & 0.233 \\ 1.035 & 0.092 & 0.229 \\ 1.15 & 0.091 & 0.225 \\ 1.265 & 0.089 & 0.221 \\ & & \vdots \end{bmatrix}$$



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

Розв'язання коміркової моделі ітераційним методом

$$K := 0.1 \quad a := \frac{yv - \langle U^{(2)} \rangle_{100}}{yv} = 0.653 \quad \text{ORIGIN} := 0$$

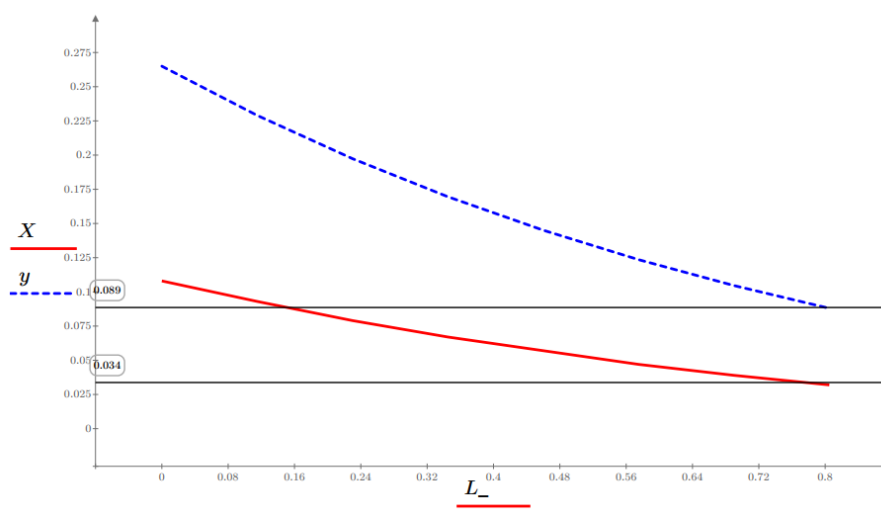
$$\text{tower}(xout, yin, K, a) := \left\| \begin{array}{l} i \leftarrow 1 \\ x_i \leftarrow xout \\ y_0 \leftarrow yin \\ \text{while } \frac{y_0 - y_{i-1}}{y_0} < a \wedge i < 100 \\ \quad \left\| \begin{array}{l} y_i \leftarrow \frac{G \cdot y_{i-1} + 1.68 \cdot K \cdot S \cdot x_i}{G + K \cdot S}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

Кількість тарілок:

$$n := \text{tower}(yv, xv, K, a)_{0,0} = 8$$

$$x := \text{tower}(yv, xv, K, a)_{0,1} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.108 \\ 0.093 \\ 0.079 \\ 0.067 \\ 0.057 \\ 0.047 \\ 0.039 \\ 0.032 \end{bmatrix} \quad X := \begin{bmatrix} 0.108 \\ 0.093 \\ 0.079 \\ 0.067 \\ 0.057 \\ 0.047 \\ 0.039 \\ 0.032 \end{bmatrix}$$

$$y := tower(yv, xv, K, a)_{0,2} = \begin{bmatrix} 0.265 \\ 0.229 \\ 0.197 \\ 0.17 \\ 0.145 \\ 0.124 \\ 0.105 \\ 0.088 \end{bmatrix}$$



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

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 7

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

8. ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЖИМУ РОБОТИ РЕАКТОРА

Лабораторна робота № 8

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

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

8.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

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

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

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

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

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

Найбільш поширеними одновимірними методами оптимізації задач хімічної технології є такі, як метод сканування, дихотомії, «золотого» перетину, із застосуванням чисел Фібоначі, з використанням квадратичної

апроксимації. Сучасний рівень комп'ютерної техніки надає можливість розв'язувати оптимізаційні задачі, не зважаючи на складність об'єкту, що оптимізується.

8.1.1 Метод сканування

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

8.1.2 Метод половинного ділення інтервалів (метод дихотомії)

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

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

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

Розглянемо алгоритм цього методу, припускаючи, що функція $C_B(\tau)$, яка оптимізується, має один максимум (див. рисунок 8.1)

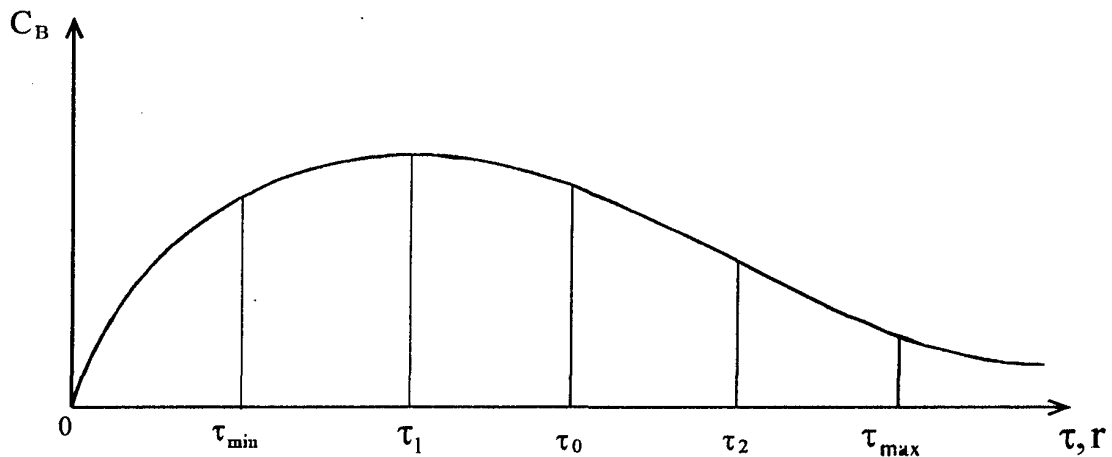


Рисунок 8.1 – Графік функції $C_B(\tau)$

Алгоритм методу дихотомії.

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

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

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

3. Серед отриманих значень C_B знаходимо найбільше, тобто те, яке відповідає типу екстремума (максимуму), котрий потрібно знайти. Виходячи з певних уявлень (рисунок 8.1) найбільше значення критерію C_B спостерігається у точці τ_1 .

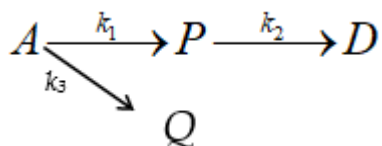
4. Вибираємо новий інтервал, який вміщує два підінтервали з найбільшим розрахованим значенням C_B на їх загальній межі. У даному випадку таким інтервалом є $[\tau_{min}, \tau_0]$.

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

8.1.3 Постановка задачі оптимізації режиму роботи реактора ідеального перемішування

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

У ізотермічному реакторі ідеального перемішування відбувається хімічний процес за схемою:



Цільовим компонентом є речовина P . Визначити максимальну концентрацію речовини P , що може бути досягнута, та відповідний оптимальний час перебування реакційної суміші в апараті, якщо цільова функція (за умови $C_{P0} = C_{D0} = C_{Q0} = 0$):

$$C_P = \frac{k_1 \cdot \tau \cdot C_{A0}}{(1 + k_2 \cdot \tau) \cdot (1 + (k_1 + k_3)\tau)}$$

де C_P – поточна концентрація речовини P , кмоль/м³; $C_{A0} = C_{P0} = C_{Q0} = C_{D0}$ – початкова концентрація сировини компонентів A, P, D, Q ; k_1, k_2, k_3 – константи хімічних реакцій, с⁻¹; τ – час перебування в апараті, с⁻¹.

Вихідні дані: $C_{A0} = 0,10$ кмоль/м³; $C_{P0} = C_{D0} = C_{Q0} = 0$; $k_1 = 3,7 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$, $k_2 = 2,4 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$, $k_3 = 1,2 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$. Час перебування від 900 до 21600 с (10 год.).

8.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

5. Отримати результати та проаналізувати їх.
6. Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.
7. Перейти до оформлення звіту.

8.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Тексти програм мають бути такими, як наведено нижче.

Завдання роботи.

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

$$Ca0 := 0.10 \quad k1 := 3.7 \cdot 10^{-3} \quad k2 := 2.4 \cdot 10^{-3} \quad k3 := 1.2 \cdot 10^{-3}$$

$$F(x) := \frac{k1 \cdot x \cdot Ca0}{(1 + k2 \cdot x) \cdot (1 + (k1 + k3) \cdot x)}$$

$$a := 900 \quad b := 21600 \quad E := 0.01$$

1. Максимізація функції методом сканування:

Крок:

$$h := 0.1$$

$$T1(a, b, E, h) := \left\| \begin{array}{l} x1 \leftarrow a \\ F1 \leftarrow F(x1) \\ x \leftarrow a \\ \text{for } i \in 1 \dots \frac{(b-a)}{h} \\ \quad \left\| \begin{array}{l} x \leftarrow x + h \\ F2 \leftarrow F(x) \\ \text{if } F2 > F1 \\ \quad \left\| \begin{array}{l} F1 \leftarrow F2 \\ x1 \leftarrow x \end{array} \right. \end{array} \right. \\ \left[\begin{array}{c} x1 \\ F1 \\ \frac{b-a}{h} \end{array} \right] \end{array} \right\|$$

$$Arg1 := T1(a, b, E, h)_0 \quad Func1 := T1(a, b, E, h)_1 \quad Iter1 := \frac{(b-a)}{h}$$

Максимум заданої функції на заданому інтервалі знаходиться в точці

аргументу:

$$Arg1 = 900$$

Значення максимуму функції:

$$Func1 = 0.019$$

Знайдено за наступну кількість ітерацій:

$$Iter1 = 2.07 \cdot 10^5$$

2. Максимізація функції методом діхотомії

```

T2(a, b, E) :=
  Len ← b - a
  x0 ← (a + b) / 2
  F0 ← F(x0)
  k ← 1
  while Len ≥ E
    x1 ← a + Len / 4
    x2 ← b - Len / 4
    F1 ← F(x1)
    F2 ← F(x2)
    k ← k + 2
    if F1 = F2
      a ← x1
      b ← x2
    else
      if F1 > F0
        b ← x0
        x0 ← x1
        F0 ← F1
      else
        a ← x0
        x0 ← x2
        F0 ← F2
    Len ← b - a
    q ← 1
  [
    x0
    F0
    k
  ]

```

$$Arg2 := T2(a, b, E)_0$$

$$Func2 := T2(a, b, E)_1$$

$$Iter2 := T2(a, b, E)_2$$

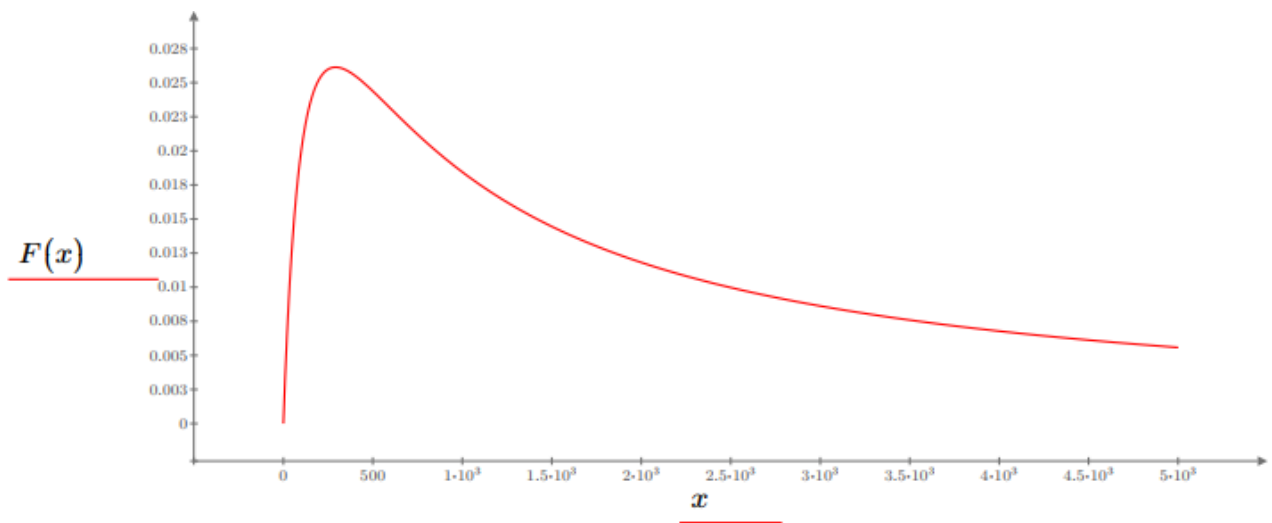
$$\text{Arg}_2 := T2(a, b, E)_0 \quad \text{Func}_2 := T2(a, b, E)_1 \quad \text{Iter}_2 := T2(a, b, \varepsilon)_2$$

Максимум заданої функції на заданому інтервалі знаходиться в точці аргументу $\text{Arg}_2 = 900.005$

Значення максимуму функції: $\text{Func}_2 = 0.019$

Знайдено за наступну кількість ітерацій: $\text{Iter}_2 = 43$

Графік функції $F(x)$:



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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №8

- 1) Коли використовуються методи детермінованого одновимірного пошуку?
- 2) Яка функція називається унімодальною?
- 3) У чому полягає ідея методу сканування?
- 4) Дайте характеристику методам виключення інтервалів?

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

9 РОЗРОБЛЕННЯ СТАТИСТИЧНОЇ МОДЕЛІ ПРОЦЕСУ ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ МЕТОДОМ ПОВНОГО ФАКТОРНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ

Лабораторна робота № 9

ТЕМА: розроблення статистичних математичних моделей ОХТ методом повного факторного експерименту

МЕТА: вивчення суті метода повного факторного експерименту та його алгоритму для одержання математичної моделі (у вигляді лінійного полінома) і виявлення їх адекватності а також являється вивчення методики складання матриць планування, набуття навичок обробки та аналізу результатів повного факторного експерименту.

(конкретизована тема)

9.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Суть метода повнофакторного експерименту (ПФЕ) полягає в одночасному змінюванні усіх факторів у дослідах, одержані математичної моделі (рівняння регресії) у вигляді лінійного полінома та дослідженні останнього методами математичної статистики. Рівняння регресії, яке одержано згідно з результатами ПФЕ, має вигляд:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_nx_n \quad (9.1)$$

Слід також відзначити, що у випадках можливої взаємодії між факторами рівняння регресії записують у формі неповного квадратичного полінома, наприклад, при $n=2$:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 \quad (9.2)$$

В рівняннях (1) та (2) b_0 – вільний член, b_1 – лінійні ефекти ($i=1, 2, 3, \dots, n$) b_{ij} – ефекти взаємодії ($i, j=1, 2, 3, \dots, k$) $i \neq j$, k – кількість факторів.

Вибір області експерименту. Для проведення дослідження обирається так звана область експерименту, тобто певна область факторного простору, за межі якої не будуть виходити значення факторів при проведенні дослідів.

При виборі області експерименту враховуються наступні обмеження:

1. Обмеження на область визначення факторів, які не можуть бути порушені при будь-яких обставинах;

2. Обмеження, пов'язані з техніко-економічними показниками (наприклад, якщо у досліді використовується коштовний продукт, то його витрата повинна бути обмежена, інакше вартість експерименту буде дуже великою).

3. Обмеження, пов'язані з конкретними умовами проведення процесу (технологічні обмеження). Враховуючи усі ці обмеження, можна вибрати достатньо вдалу область експерименту.

Область експерименту визначається наступними параметрами:

- основним (нульовим) рівнем факторів;
- інтервалами варіювання факторів.

За основні рівні приймаються ті величини факторів, які згідно з результатами попередніх досліджень визначають найкраще значення змінної стану.

Основна вимога до інтервалу варіювання полягає у тому, щоб він був вищим за подвійну середню квадратичну помилку фактора:

$$\Delta z > 2 | S_{x_i} | \quad (9.3)$$

Ця вимога обумовлена тим, що фактори, які мають близькі значення (знаходяться на сусідніх рівнях), повинні не випадковим чином впливати на змінну стану. Вдалий вибір інтервалів варіювання гарантує достовірність математичної моделі.

Найбільше розповсюдження одержало планування факторів на двох рівнях, де як рівні використовуються верхня й нижня межі інтервалу варіювання.

Побудова матриці планування. Матриця планування вдає із себе план експерименту, що утримує запис усіх комбінацій факторів або частини з них у кодованій формі.

Кодування значень факторів здійснюється за формулою:

$$x_j = \frac{z_i - z_{i0}}{\Delta z_i} \quad (9.4)$$

де x_j – кодоване значення фактору;

z_{i0} – нульовий рівень натуральної змінної;

z_i – верхній або нижній рівень натуральної змінної;

Δz_i – інтервал варіювання натуральної змінної.

Верхньому рівню натуральної змінної відповідає кодоване значення (+1), а нижньому – (-1). В матрицю включається також стовпець x_0 що складається з (+1), який знадобиться при розрахунку вільного члена поліному.

Складання матриці планування проводиться на основі певних принципів оптимальності. В інженерній практиці широко використовуються принципи рототабельності та ортогональності.

10. Принцип рототабельності передбачає мінімум дисперсії передбаченого значення змінної стану. У будь-якій точці факторного простору при рівності цих дисперсій на рівній відстані від центру плану;

2. Принцип ортогональності дозволяє при розрахунку коефіцієнтів рівняння регресії (математичної моделі) використати наступні властивості (див. матрицю планування, табл. 9.2):

$$\begin{aligned} \sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} &= 0; \\ \sum_{u=1}^N x_{iu} &= 0; \\ \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 &= N; \\ i &\neq j; i, j = 1, 2, \dots, k \end{aligned} \tag{9.5}$$

де N – кількість дослідів ;

u – номер дослідів ($u=1, 2, \dots, N$);

i – кількість факторів ($i=1, 2, \dots, k$).

Після побудови матриці планування приступають до проведення експерименту. Якщо попередньо було встановлено, що на зміну стану процесу значний вплив виявляють перешкоди (хімічні), то план експерименту реалізують декілька разів (паралельні дослідів) і одержують m значень вихідного параметра, які потім усереднюють (u – номер паралельного дослідів, $u=1, 2, \dots, m$).

Звичайно, за початкове приймають кількість паралельних дослідів m (частіше від 2 до 4). При перевірці відтворення кількість паралельних дослідів

уточнюється (якщо це необхідно). Після цього результати експериментів оброблюються та аналізуються.

Обробка та аналіз результатів повного факторного експерименту.

Розрахунок коефіцієнтів рівняння регресії та статистичний аналіз виявляються основними задачами обробки результатів активного експерименту. Алгоритм розв'язання цих задач може бути таким:

1) *Розрахунок коефіцієнтів рівняння регресії* проводиться згідно з формулами:

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{0u} \bar{y}_u \quad (9.6)$$

$$b_i = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu} \bar{y}_u, \quad (i = 1, 2, \dots, k) \quad (9.7)$$

$$b_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} \bar{y}_u, \quad (i \neq j, i, j = 1, 2, \dots, k) \quad (9.8)$$

де b_{ij} – коефіцієнт регресії, який характеризує взаємодію факторів $x_i \cdot x_j$;
 $\bar{y}_u$ – середнє значення y згідно з паралельними дослідженнями u -го рядка матриці планування.

2) *Перевірка однорідності дисперсій.* Перед розрахунком помилки дослідження необхідно переконатися, що розсіювання дослідів у кожній точці факторного простору не перевищує певної величини. Необхідно розрахувати порядкові дисперсії та перевірити їх однорідність.

Порядкові дисперсії S_u^2 розраховуються за формулою:

$$S_u^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \bar{y}_u)^2 \quad (9.9)$$

Перевірку однорідності дисперсій слід проводити згідно з критерієм Кохрена (G). Його розрахункове значення G_p визначають як відношення:

$$G_p = \frac{S_{u \max}^2}{\sum_{u=1}^N S_u^2} \quad (9.10)$$

де $S_{u \max}^2$ – максимальна з розрахованих порядкових дисперсій;

$\sum_{u=1}^N S_u^2$ – сума усіх дисперсій з N -рядків матриці планування.

Якщо виконується умова:

$$Gp < G_T. \quad (9.11)$$

то гіпотеза про однорідність дисперсій приймається. Табличне значення критерію Кохрена G_T знаходять у таблицях (Додаток А., табл. А.1) для чисел ступенів вільності $f_1 = m-1$; $f_2=N$ та рівня значимості q (у технічних розрахунках приймається 5% рівня значимості, або $q=0.05$). Якщо умова (9.11) не виконується, то слід збільшити число паралельних дослідів, тобто ще раз, або кілька разів необхідно реалізувати матрицю планування.

При виконанні умови (9.11) про однорідність порядкових дисперсій їх усереднюють згідно з формулою:

$$S_0^2 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N S_u^2 = \frac{1}{N(m-1)} \sum_{u=1}^N \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \bar{y}_u)^2, \quad (9.12)$$

де $f_0 = N(m-1)$ – число ступенів свободи.

Таким чином одержують помилку досліду S_0^2 , яка для хімічних процесів не повинна перевищувати 5%.

Необхідно відмітити, що неоднорідні дисперсії усереднювати не можна.

3) *Перевірка значимості коефіцієнтів регресії.* Відомо, що один фактор більше впливає на зміну стану, а другий менше. Для оцінки його впливу використовують перевірку значимості кожного коефіцієнту двома рівноцінними способами. В обох випадках спочатку знаходять дисперсію коефіцієнтів регресії згідно з формулою:

$$S_{bi}^2 = \frac{S_0^2}{N \cdot m}, \quad (9.13)$$

так як дисперсії усіх коефіцієнтів рівні, оскільки залежать тільки від помилки досліду S_0^2 та кількості рядків матриці планування N .

За першим способом, оцінку значимості коефіцієнтів проводять згідно з формулою (9.14), та умовою (9.15):

$$t_{ip} = \frac{|b_i|}{S_{bi}}, \quad (9.14)$$

$$t_{ip} > t_T, \quad (9.15)$$

де $|b_i|$ – абсолютне значення i -того коефіцієнту регресії;

$S_{bi} = \sqrt{S_{bi}^2}$ - середньоквадратичне відхилення;

t_{ip} – розрахункове значення критерію Стюдента для кожного коефіцієнту;

t_T – табличне значення критерію Стюдента, який знаходиться для чисел ступенів вільності $f_o = N(m-1)$ та рівня значимості $q=0,05$ (Додаток А, табл. А2).

За другим способом, для перевірки значимості коефіцієнтів регресії використовують довірчий інтервал Δb_i який унаслідок рівності S_{bi}^2 для усіх коефіцієнтів однаковий:

$$\Delta b_i = \pm t_t \cdot S_{bi} \quad (9.16)$$

В цьому випадку оцінку значимості проводять згідно з умовою порівняння значень коефіцієнтів та довірчого інтервалу (9.17):

$$|b_i| > \Delta b_i \quad (9.17)$$

Якщо виконуються умови (9.15) та (9.17), то i -тий коефіцієнт признається значимим. Якщо умова (9.15) або (9.17) не виконується для якого-небудь коефіцієнта, то відповідний фактор можна признати незначимим, і виключити його з рівняння регресії. Кількість значимих коефіцієнтів позначимо літерою l .

4) *Перевірка адекватності лінійного рівняння регресії.* Перевірка адекватності лінійного рівняння регресії реального процесу проводиться порівнянням дисперсій. Одна дисперсія характеризує розсіювання середніх дослідних даних змінної стану $\bar{y}_u$ відносно тих значень змінної стану $\hat{y}_u$, які передбачені одержаними лінійними рівняннями регресії. Ця дисперсія зветься дисперсією адекватності і знаходиться за допомогою формули (9.18):

$$S_{ad}^2 = \frac{m}{N-l} \sum_{u=1}^N \left(\bar{y}_u - \hat{y}_u \right)^2, \quad (9.18)$$

де m – кількість паралельних дослідів;

N – кількість рядків матриці планування;

l – кількість членів рівняння регресії, які залишилися після оцінки значення коефіцієнтів.

Друга дисперсія – це помилка досліду S_o^2 .

Перевірку адекватності проводять, оцінюючи відношення (9.19):

$$F_p = \frac{S_{ad}^2}{S_0^2} \quad (9.19)$$

Згідно з умовою:

$$F_p < F_T, \quad (9.20)$$

де F_p – розрахунковий критерій Фішера,
 F_T – табличний критерій Фішера, який знаходиться в додатку А, для числа ступенів вільності. $f_1 = f_{ad} = N - l$; $f_2 = f_0 = N(m - 1)$ та обраного рівня значимості $q = 0,05$.

Якщо виконується умова (9.20), то лінійне рівняння регресії вважається адекватним. У випадку невиконання умови адекватності (9.20) припустима модель неадекватна. Потрібно повторити досліди усі або частково за інших умов (наприклад, збільшити кількість паралельних дослідів, зменшити інтервали варіювання декількох факторів, врахувати нові фактори, тощо), або перейти до поліномів більш високих порядків.

9.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

9.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Приклад 1.

Тексти програм мають бути такими, як наведено нижче.

$m := 2$ Число паралельних дослідів
 $N := 8$ Число рядків матриці планування

Значення факторів у натуральному вигляді:

$$X1 := \begin{bmatrix} 40 \\ 40 \\ 40 \\ 40 \\ 45 \\ 45 \\ 45 \\ 45 \end{bmatrix} \quad X2 := \begin{bmatrix} 0.75 \\ 0.75 \\ 1.5 \\ 1.5 \\ 0.75 \\ 0.75 \\ 1.5 \\ 1.5 \end{bmatrix} \quad X3 := \begin{bmatrix} 5 \\ 10 \\ 5 \\ 10 \\ 5 \\ 10 \\ 5 \\ 10 \end{bmatrix}$$

Нульовий рівень:

$$X10 := \frac{\sum X1}{N} \quad X20 := \frac{\sum X2}{N} \quad X30 := \frac{\sum X3}{N}$$

Інтервал варьовання:

$$xx1 := |X10 - X1_1| \quad xx2 := |X20 - X2_1| \quad xx3 := |X30 - X3_1|$$

Кодування матриці:

$$i := 0 \dots 7 \quad M0_i := 1 \quad M1_i := \frac{X1 - X10}{xx1} \quad M2_i := \frac{X2 - X20}{xx2} \quad M3_i := \frac{X3 - X30}{xx3}$$

$$M12_i := M1_i \cdot M2_i \quad M13_i := M1_i \cdot M3_i \quad M23_i := M2_i \cdot M3_i$$

$$M := \text{augment}(M0, M1, M2, M3, M12, M13, M23)$$

Результати паралельних дослідів:

$$Y1 := \begin{bmatrix} 25 \\ 20 \\ 25 \\ 30 \\ 25 \\ 20 \\ 20 \\ 20 \end{bmatrix} \quad Y2 := \begin{bmatrix} 25.025 \\ 20 \\ 25.034 \\ 30.01 \\ 25 \\ 20 \\ 20.005 \\ 20 \end{bmatrix}$$

Розрахунок коефіцієнтів регресії:

$$F := \text{augment}(Y1, Y2) \quad G_i := \sum_{j=0}^1 \frac{F_{i,j}}{2}$$

$$G = \begin{bmatrix} 25.013 \\ 20 \\ 25.017 \\ 30.005 \\ 25 \\ 20 \\ 20.003 \\ 20 \end{bmatrix}$$

Коефіцієнти регресії:

$$B := (M^T \cdot M)^{-1} \cdot M^T \cdot G \quad B = \begin{bmatrix} 23.13 \\ -1.879 \\ 0.627 \\ -0.628 \\ -1.876 \\ -0.622 \\ 1.875 \end{bmatrix}$$

Знаходження порядкових дисперсії:

$$S_i := \frac{1}{m-1} \cdot \left((Y1_i - G_i)^2 + (Y2_i - G_i)^2 \right) \quad S = \begin{bmatrix} 0.0003125 \\ 0 \\ 0.000578 \\ 0.00005 \\ 0 \\ 0 \\ 0.0000125 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Перевірка однорідності дисперсії

$$SS := \sum S \quad S_{max} := \max(S) \quad Gp := \frac{S_{max}}{SS} \quad Gp = 0.607$$

Табличне значення критерія Кохрена обирається відповідно до додатку А

$$f1 := m - 1 = 1 \quad f2 := N = 8$$

$$K := 0.6788$$

$$Kochren := \begin{cases} 1 & \text{if } Gp < K \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad Kochren = 1$$

Якщо $Kochren=1$, то гіпотеза про однорідність дисперсій приймається, якщо $Kochren=0$ - не приймається.

Перевірка значимості коефіцієнтів регресії:

$$So := \frac{\sum S}{N} \quad So = 0.000119 \quad \text{Помилка досліду}$$

$$deltab := Tt \cdot So \quad i := 0..6$$

$$Sb := \frac{So}{N \cdot m} \quad Sb = 7.445 \cdot 10^{-6} \quad \text{Дисперсія коефіцієнтів регресії}$$

$$Su := \sqrt{Sb} \quad Su = 0.0027$$

$$B1_i := |B_i|$$

$$t := \frac{B1}{Su} \quad t = \begin{bmatrix} 8476.7061 \\ 688.629 \\ 229.6041 \\ 230.2912 \\ 687.4837 \\ 228.0465 \\ 687.0714 \end{bmatrix} \quad \text{Розраховане значення критерія Стюдента}$$

Табличне значення критерія Стюдента обирається відповідно до додатку А

$$f := N \cdot (m - 1) = 8$$

$$f0 := 0$$

$$Tt = 2.31$$

$$tt_i := \begin{cases} 1 & \text{if } t_i > Tt \\ 0 & \text{else} \\ 1 & \end{cases} \quad tt = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Якщо $tt=1$, то коефіцієнт значимий, якщо $tt=0$ – незначимий.

l - кількість членів рівняння регресії, які залишилися після оцінки значення коефіцієнтів.

$$l := 7$$

Перевірка адекватності рівняння регресії

$$u := 0..7$$

$$d := N - l = 1$$

$$o := N \cdot (m - 1) = 8$$

Модель із значимими коефіцієнтами:

$$YY_u := B_0 + B_1 M_{1u} + B_2 M_{2u} + B_3 M_{3u} + B_4 M_{12u} + B_5 M_{13u} + B_6 M_{23u}$$

$$Sad := \frac{m \cdot \sum (G - YY)^2}{N - l} \quad Sad = 98.139 \quad \text{Дисперсія адекватності}$$

Табличне значення критерія Фішера обирається відповідно до додатку А

$$FF := qF(0.05, o, d)$$

$$Ft := FF^{-1}$$

$$Ft = 5.318$$

Розрахункове значення критерія Фішера

$$Fp := \frac{Sad}{So} \quad Fp = 1.903 \cdot 10^6$$

Перевірка адекватності

$$R := \begin{cases} \text{if } Fp < Ft \\ \quad 1 \\ \text{else} \\ \quad 0 \end{cases} \quad R = 0$$

Якщо $R = 1$ - то модель адекватна,

Якщо $R = 0$ - то не адекватна

Модель неадекватна

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

	x0	x1	x2	x3	x1x2	x1x3	x2x3	y1	y2	ys	Su	b0	b1	b2	b3	b12	b13	b23	yy	(ys-yy)^2
1	1	1	1	1	1	1	1	93,18	92,62	92,9	0,16	92,9	92,9	92,9	92,9	92,9	92,9	92,9	91,19	2,92
2	1	-1	1	1	-1	-1	1	94,34	96,4	95,37	2,12	95,37	-95,37	95,37	95,37	-95,37	-95,37	95,37	94,91	0,21
3	1	1	-1	1	-1	1	-1	80,99	77,61	79,3	5,71	79,3	79,3	-79,3	79,3	-79,3	79,3	-79,3	80,63	1,76
4	1	-1	-1	1	1	-1	-1	84,2	82,8	83,5	0,98	83,5	-83,5	-83,5	83,5	83,5	-83,5	-83,5	84,34	0,71
5	1	1	1	-1	1	-1	-1	96,65	94,95	95,8	1,45	95,8	95,8	95,8	-95,8	95,8	-95,8	-95,8	96,38	0,33
6	1	-1	1	-1	-1	1	-1	99,07	97,93	98,5	0,65	98,5	-98,5	98,5	-98,5	-98,5	98,5	-98,5	100,09	2,54
7	1	1	-1	-1	-1	-1	1	89,25	82,75	86	21,13	86	86	-86	-86	-86	-86	86	85,81	0,04
8	1	-1	-1	-1	1	1	1	92,91	90,09	91,5	3,98	91,5	-91,5	-91,5	-91,5	91,5	91,5	91,5	89,53	3,90
											36,17	90,36	-1,86	5,28	-2,59	0,57	0,19	1,08		12,40

N	8
m	2
l	4

Gp	0,58
Gt	0,68
So	4,52
Sb	0,28

Sad	6,198
Fr	1,371
Ft	3,84

tr	169,99	-3,50	9,94	-4,87	1,07	0,36	2,04
tt	2,31	+	+	+	-	-	-

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 9

1. Суть методу повного факторного експерименту?
2. Що зветься областю факторного простору ?
3. Якими параметрами визначається область експерименту?
4. Які вимоги пред'являються до інтервалу варіювання?
5. В чому полягає суть принципів рототабельності та ортогональності?
6. Що являє собою матриця планування експерименту?
7. Які існують переваги повного факторного експерименту?
8. Який алгоритм обробки та аналіз результатів ПФЕ?
9. Як виконується розрахунок коефіцієнтів рівняння регресії?
10. Як виконується розрахунок помилки досліду?
11. Як виконується перевірка однорідності дисперсій?
12. Як виконується перевірка значимості коефіцієнтів регресії?
13. Як виконується перевірка адекватності рівняння регресії?
14. Які існують рекомендації у випадку неадекватної математичної моделі?

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Бондарь А.Г. Математическое моделирование в химической технологии.- К.: Вища школа, 1973.-280с.
2. Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учеб. Пособие для вузов [Текст] / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – ИКЦ» академкнига», 2006. –416с.
3. Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології : навчальний посібник / С.О. Кондратов, І.В. Сітак, Т.М. Матейко ; Міністерство освіти і науки України, Інститут хімічних технологій Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля (м. Рубіжне) - Харків : Видавництво "Лідер", 2019. - 564 сторінки : рисунки, таблиці.
4. Комп'ютерні технології в інженерній хімії [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» / КПІ ім. Ігоря Сікорського ; уклад.: А. О. Абрамова, Ю. А. Запорожець. – Електронні текстові дані (1 файл: 3 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. – 109 с.
5. Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології [Електронний ресурс] : методичні вказівки до виконання лабораторних робіт для студентів напряму підготовки 6.051301 «Хімічна технологія» / НТУУ «КПІ» ; уклад.: Т. В. Бойко, О. М. Фоглер, А. О. Абрамова. – Електронні текстові дані (1 файл: 3,21 Мбайт). – Київ, 2014. – 162 с.
6. Математичне моделювання та застосування ЕОМ в хімічній технології: Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт для студентів напряму підготовки «Хімічна технологія та інженерія» / Уклад.: Т.В. Бойко, В.І. Бендюг, І.О. Потяженко, О.М. Жигір, А.М. Шахновський, О.С.Бондаренко.- К.; НТУУ «КПІ», 2007. - 128с.
7. Теорія планування експерименту та приклади її застосування : навчальний посібник для студ. магістерського рівня підготовки / Є.В. Черемних, Т.М. Сало ; Міністерство освіти і науки України, Національний університет "Львівська Політехніка". - Львів : Видавництво Національного університету "Львівська Політехніка", 2005. - 148 с.
8. Теорія планування експерименту та приклади її застосування : навчальний посібник для студ. магістерського рівня підготовки / Є.В. Черемних, Т.М. Сало ; Міністерство освіти і науки України, Національний університет "Львівська Політехніка". - Львів : Видавництво Національного університету "Львівська Політехніка", 2005. - 148 с.

[illegible]

Таблиця А.2

Процентні точки розподілення Стьюдента.

$f_0 \backslash q$	10%	5%	2%	1%
1	6.31	12.71	31.82	63.66
2	2.92	4.30	6.96	9.92
3	2.35	3.18	4.54	5.84
4	2.13	2.78	3.75	4.60
5	2.02	2.57	3.36	4.03
6	1.94	2.45	3.14	3.71
7	1.89	2.36	3.00	3.50
8	1.86	2.31	2.90	3.36
9	1.83	2.26	2.82	3.25
10	1.81	2.23	2.76	3.17
11	1.80	2.20	2.72	3.11
12	1.78	2.18	2.68	3.05
13	1.77	2.16	2.65	3.01
14	1.76	2.14	2.62	2.98
15	1.76	2.13	2.60	2.95
16	1.75	2.12	2.58	2.92
17	1.74	2.11	2.57	2.90
18	1.73	2.10	2.55	2.88
19	1.73	2.09	2.54	2.86
20	1.72	2.09	2.53	2.85
21	1.72	2.08	2.52	2.83
22	1.72	2.07	2.51	2.82

Таблиця А.3

Критерій Фішера при $q=0.05$

$f_1 \backslash f_2$	1	2	3	4	5	6	8	12	24	∞
1	161.4	199.5	215.7	224.6	230.2	234.6	238.9	243.9	249.0	254.3
2	18.51	19.06	19.16	19.25	19.30	19.33	19,37	19.41	19.45	19.50
3	10.13	9.55	9.28	9.12	9.61	8.94	8.84	8.74	8.64	8.53
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.64	5.91	6.77	5.63
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.65	4.95	4.82	4.68	4.53	4.33
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.16	4.60	3.84	3.67
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.72	3.57	3.41	3.23
8	5.32	4.46	4.67	3.84	3.69	3.58	3.44	3.28	3.12	2.98
9	5.12	4.26	3.86	3.63	3.48	3.37	3.23	3.67	2.90	2.71
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.67	2.91	2.74	2.54
11	4.84	3.98	3.59	3.36	3.20	3.09	2.95	2.79	2.61	2.40
12	4.75	3.88	3.49	3.26	3.11	3.00	2.85	2.69	2.50	2.30
13	4.67	3.80	3.41	3.18	3.02	2.92	2.77	2.60	2.42	2.21
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.70	2.53	2.35	2.13