

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

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

*Рекомендовано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
як навчальний посібник для студентів,
які навчаються за спеціальністю 161 «Хімічні технології та інженерія»*

Київ
КПІ ім. Ігоря Сікорського
2023

Математичне моделювання хіміко-технологічних процесів. Комп'ютерний практикум [Електронний ресурс]: навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» / КПІ ім. Ігоря Сікорського; уклад.: А. О. Абрамова. – Електронні текстові данні (1 файл: 2,75 Мбайт). – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023. – 114 с.

Гриф надано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського (протокол №6 від 30.03.2023 р.) за поданням Вченої ради інженерно-хімічного факультету (протокол № 2 від 27.02.2023 р.)

Електронне мережне навчальне видання

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

Укладачі: *Абрамова Алла Олександрівна, канд. техн. наук, доц.*

Відповідальний

редактор: *Жученко Анатолій Іванович док. техн. наук, проф.*

Рецензенти: *Джигирей І. М. канд. техн. наук, доц.*

Навчальний посібник розроблено відповідно до програми підготовки бакалаврів за спеціальністю 161 «Хімічні технології та інженерія». У навчальному посібнику наведено завдання виконувати протягом практичних занять. Видання забезпечує вивчення студентами теоретичного матеріалу, підготовку до виконання практичних робіт та буде корисним для самостійної роботи.

© КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023

ЗМІСТ

ВСТУП.....	6
1. ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕСІВ З ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДУ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ (НЕЛІНІЙНА РЕГРЕСІЯ).....	8
1.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ.....	8
1.1.1 Лінійна регресія	8
1.1.2 Побудова нелінійної апроксимуючої залежності	10
1.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	14
1.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	14
2. МОДЕЛЮВАННЯ ГІДРОДИНАМІКИ ПОТОКУ У НАСАДКОВІЙ КОЛОНІ ЗА ДОПОМОГОЮ КОМІРКОВОЇ МОДЕЛІ.....	19
2.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ.....	19
2.1.1 Призначення й мета моделювання	19
2.1.2 Основні види моделей та їхні властивості	20
2.1.3 Основні принципи моделювання	21
2.1.4 Технологія моделювання.....	22
2.1.5 Основні методи рішення завдань моделювання.....	23
2.1.6 Контроль правильності моделі.....	26
2.1.7 Дослідження гідродинаміки потоку за допомогою методу стандартних збурень.....	28
2.1.8 Опис насадкового колонного абсорбера за допомогою коміркової моделі.....	29
2.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	31
2.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	32
3. ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕПЛООБМІННИХ АПАРАТІВ НА ОСНОВІ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ.....	37
3.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ.....	37
3.1.1 Моделі ідеального витіснення та ідеального змішування при дослідженні теплообмінних апаратів.....	37
3.1.2 Розрахунок теплообмінного апарату для моделі «витіснення-витіснення»	39
3.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	41
3.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	42
4. КОМП'ЮТЕРНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НА ЕОМ КОНСТАНТ ШВИДКОСТІ ЗВОРотної ХІМІЧНОЇ РЕАКЦІЇ.....	45
4.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ.....	45
4.1.1 Приклад розрахунку констант швидкості реакції етерифікації етилового спирту та оцтової кислоти.....	46

4.1.2 Алгоритм розрахунку кінетичних констант	47
4.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	49
4.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	50
5 КОМП'ЮТЕРНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕМПЕРАТУРНИХ РЕЖИМІВ РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ ПЕРІОДИЧНОЇ ДІЇ	53
5.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ.....	53
5.1.1 Математичний опис реактора ідеального змішування періодичної дії.....	53
5.1.2 Приклад розрахунку проточного реактора ідеального змішування періодичної дії.....	54
5.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	58
5.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	60
6 КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІЗОТЕРМІЧНОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ (РІЗ) БЕЗПЕРЕРВНОЇ ДІЇ.....	67
6.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ.....	67
6.1.1 Моделювання проточного реактора ідеального змішування.....	67
6.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	70
6.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	70
7. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІЗОТЕРМІЧНОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ВИТИСНЕННЯ (РІВ) БЕЗПЕРЕРВНОЇ ДІЇ	73
7.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ.....	73
7.1.1 Математичний опис і розрахунок ізотермічного трубчатого реактора ідеального витіснення	73
7.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	75
7.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	75
8 ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ НА ДІАГРАМАХ	78
СКЛАД – ВЛАСТИВІСТЬ.....	78
8.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ.....	78
8.1.1 Побудова залежностей властивостей багатокомпонентних систем від їхнього складу.....	78
8.1.2 Дослідження процесу зміни властивостей бісульфітної напівцелюлози зі змішаної хвойної деревини	82
8.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	84
8.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	85
9. ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЖИМУ РОБОТИ РЕАКТОРА.....	89
9.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ.....	89
9.1.1 Метод сканування	90
9.1.2 Метод половинного ділення інтервалів (метод дихотомії).....	90

9.1.3 Постановка задачі оптимізації режиму роботи реактора ідеального перемішування	92
9.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ	92
9.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ	93
ДОДАТКИ.....	98
Додаток А.....	98
Короткі відомості про середовище MATHCAD	98
Додаток Б	109
Статистичні критерії.....	109
Додаток В.....	112
Блок-схема алгоритму мінімізації функції $F(x)$ методом сканування	112
Додаток Г	113
Блок-схема алгоритму мінімізації функції $F(x)$ методом дихотомії ...	113

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.

Практичні роботи виконуються згідно з навчальним планом підготовки бакалаврів 161 спеціальності «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.

Математичне моделювання поєднує три взаємозв'язаних етапи:

- 1) складання математичного опису об'єкту, що вивчається;

- 2) вибір методу рішення системи рівнянь математичного опису та реалізація його у формі моделюючої програми;
- 3) встановлення відповідності (адекватності) моделі об'єкту.

Ці *Методичні вказівки* орієнтовані на виконання комплексу практичних робіт, що поєднують установлені на даний час методи і прийоми розроблення та застосування математичного моделювання в хімічній технології. Викладання і послідовність відповідає лекційному курсу та матеріалу, що виведено на самостійне вивчення. При виконанні практичних робіт в якості програмного забезпечення застосовуються програмний комплекс Mathcad.

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

Практична робота № 1

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

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

1.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

1.1.1 Лінійна регресія

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

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

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

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

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

значень y_i . Припустимо, що існує деяка залежність $f(x_i, a_0, a_1, \dots, a_k)$, яка може розглядатись як наближення до залежності $y(x)$, чії точки представлені як $y_i(x_i)$. Таким чином, ми маємо право записати:

$$y_i = f(x_i, a_0, a_1, \dots, a_k) + \xi_i$$

де ξ_i – незалежні випадкові величини із нормальним законом розподілення, які визначають похибку завдання y_i . Зазвичай їх вважають наслідком помилок експерименту. Задача регресії полягає у тому, щоб знайти параметри $a_0, a_1, \dots, a_k$ такими, при яких представлення $y(x)$ нашою функцією $f(x)$ мало найменшу середньоквадратичну похибку. Для цього треба мінімізувати функцію:

$$\Phi(a_0, a_1, \dots, a_k) = \sum (f(x_i, a_0, a_1, \dots, a_k) - y_i)^2$$

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

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

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

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

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

Функції системи Mathcad для проведення лінійної регресії наведені на рис. 1.1.

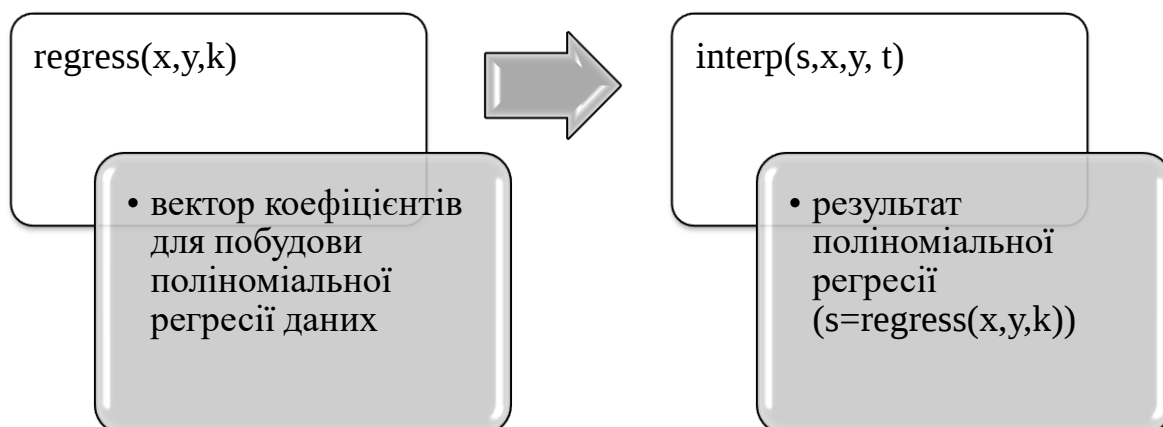


Рис. 1.1 – Функції системи Mathcad для проведення поліноміальної регресії

x – вектор дійсних даних аргументу, елементи якого розміщені у порядку зростання; y – вектор дійсних даних значень того ж розміру; k – ступінь поліному регресії (ціле позитивне число); t – значення аргументу поліному регресії.

1.1.2 Побудова нелінійної апроксимуючої залежності

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

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n \quad (1.1)$$

Застосування поліномів має ту перевагу, що невідомі коефіцієнти (параметри) a_i , входять у рівняння лінійно, що спрощує їх розрахунок. Крім того, збільшуючи степінь такого полінома, можна досягнути практично будь-якої міри наближення розрахункових даних до експериментальних аж до повного збігу.

Задача побудови математичного опису процесу у вигляді (1.1) зводиться до знаходження таких значень коефіцієнтів a_i , при яких досягається найкращий збіг експериментально одержаних y_e та розрахованих за допомогою апроксимуючої залежності вихідних значень y_p .

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

$$S = \sum_{i=1}^N [y_e(x_i) - y_p(x_i)]^2 = \sum [Y_{ei} - Y_{pi}] \rightarrow \min \quad (1.2)$$

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

$$S = \sum_{i=1}^N [Y_{ei} - (a_0x_i^0 + a_1x_i^1 + a_2x_i^2 + \dots + a_nx_i^n)] \rightarrow \min \quad (1.3)$$

де $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ – невідомі (ті, що потрібно знайти) коефіцієнти поліноміальної емпіричної моделі процесу; n – порядок поліному; N – кількість дослідних значень функції Y . Змінна x_i^0 вводиться у рівняння (1.3) для одноманітності запису.

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

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = \frac{\partial S}{\partial a_1} = \frac{\partial S}{\partial a_2} = \dots = \frac{\partial S}{\partial a_n} = 0 \quad (1.4)$$

чому відповідає наступна система:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N (y_{ei} - a_0 x_i^0 - a_1 x_i^1 - a_2 x_i^2 - \dots - a_n x_i^n) x_i^0 = 0 \\ \sum_{i=1}^N (y_{ei} - a_0 x_i^0 - a_1 x_i^1 - a_2 x_i^2 - \dots - a_n x_i^n) x_i^1 = 0 \\ \dots \\ \sum_{i=1}^N (y_{ei} - a_0 x_i^0 - a_1 x_i^1 - a_2 x_i^2 - \dots - a_n x_i^n) x_i^n = 0 \end{cases} \quad (1.5)$$

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

$$\begin{cases} a_0 \sum_i x_i^0 + a_1 \sum_i x_i^1 + \dots + a_n \sum_i x_i^n = \sum_i y_{ei} x_i^0 \\ a_0 \sum_i x_i^1 + a_1 \sum_i x_i^2 + \dots + a_n \sum_i x_i^{n+1} = \sum_s y_{ei} x_i^1 \\ \dots \\ a_0 \sum_i x_i^n + a_1 \sum_i x_i^{n+1} + \dots + a_n \sum_i x_i^{n+n} = \sum_i y_{ei} x_i^n \end{cases} \quad (1.6)$$

Розв'язуючи систему нормальних рівнянь (1.6) як лінійну відносно коефіцієнтів $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ знаходимо значення останніх, які задовольняють умові МНК.

Застосування ЕОМ для розв'язання таких задач значно полегшує обчислювальний процес, так як процедура складання системи нормальних рівнянь легко формалізується та виконується на ЕОМ. МНК придатний для розрахунку параметрів (коефіцієнтів) і більш складних залежностей ніж поліноміальні (наприклад, логарифмічних, показникових та інших) у тому випадку, якщо спеціальним перетворюванням цих залежностей можна привести їх до вигляду, що є аналогічним поліному (1.1).

В завданні наводяться початкові дані для побудови експериментально - статистичної моделі, тобто дослідні значення вхідної

змінної y_{ei} та відповідні значення вхідної змінної x_i . Потрібно за допомогою програмного комплексу Mathcad знайти поліноміальну залежність $y=f(x)$.

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

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

Максимальну відносну похибку апроксимації рекомендується прийняти $\varepsilon=5-10\%$. Якщо нанести експериментальні дані на графік, можна скласти уявлення про приблизне значення степені полінома, 1 чи 2 (крива близька до прямої), або 2 чи 3 (кривизна є достатньо великою). На рис. 1.2 нанесено результати обробки експериментальних даних для полінома 4-го порядку.

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

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

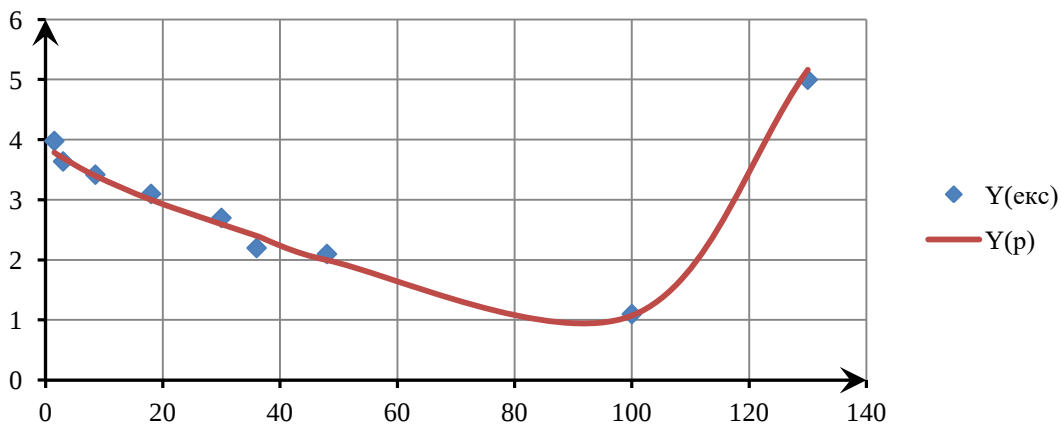


Рис. 1.2 – Експериментальні точки та розрахункова крива

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

1.2 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.

1.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Приклад результатів програмування задачі і геометричної інтерпретації результатів

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

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

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

Визначимо ступінь поліному, що задовольняє похибці

$$k := 4 \quad (k - \text{ступінь поліному})$$

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

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

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

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

$$E_p = 0.244 \quad (\text{розрахункова відносна похибка})$$

Реалізація методу МНК

Визначимо коефіцієнти поліному

$$X := \begin{pmatrix} \sum v^0 & \sum v^1 & \sum v^2 & \sum v^3 & \sum v^4 \\ \sum v^1 & \sum v^2 & \sum v^3 & \sum v^4 & \sum v^5 \\ \sum v^2 & \sum v^3 & \sum v^4 & \sum v^5 & \sum v^6 \\ \sum v^3 & \sum v^4 & \sum v^5 & \sum v^6 & \sum v^7 \\ \sum v^4 & \sum v^5 & \sum v^6 & \sum v^7 & \sum v^8 \end{pmatrix} \quad (\text{Розмір матриці } X \text{ дорівнює } k+1)$$

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

X та YX - це вектори системи $X \cdot AI = YX$, де AI - шукані коефіцієнти.

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

Знайдені коефіцієнти поліному

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

Перевіримо вірність обчислень:

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

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

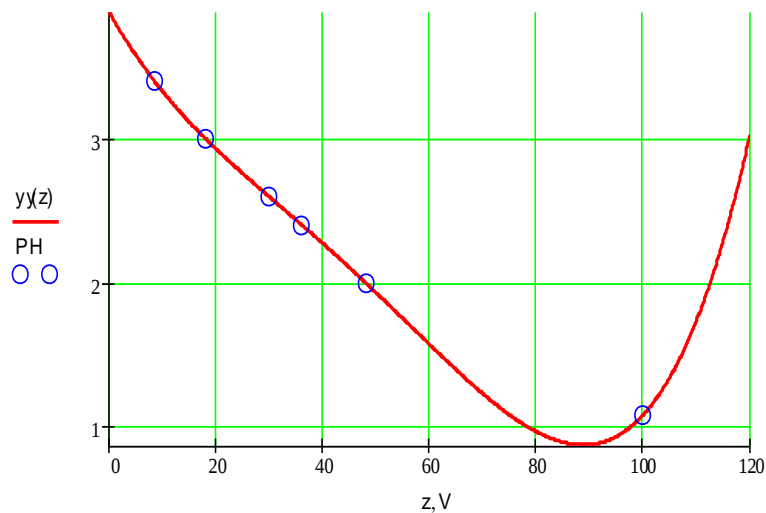
$$Y := \begin{pmatrix} yy(V_0) \\ yy(V_1) \\ yy(V_2) \\ yy(V_3) \\ yy(V_4) \\ yy(V_5) \end{pmatrix}$$

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

$$E_p := \frac{\sum \left(\frac{|PH - Y|}{PH} \right)^{100}}{6} \quad (\text{розрахункова відносна похибка})$$

$$E_p = 0.244$$

Відобразимо поліном графічно:



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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 1

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

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

Практична робота № 2

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.

2.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

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

2.1.1 Призначення й мета моделювання

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

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

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

Моделювання може здійснюватися із двома головними цілями:

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

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

2.1.2 Основні види моделей та їхні властивості

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.1.3 Основні принципи моделювання

Моделювання базується на декількох основних принципах. Розглянемо їх.

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

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

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

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

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

2.1.4 Технологія моделювання

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

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

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

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

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

2.1.5 Основні методи рішення завдань моделювання

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

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

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

$$\varepsilon = x - x_u$$

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

$$\Delta = \varepsilon / \chi_u$$

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

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

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

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

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

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

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

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

абсолютне число обумовленості або

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.1.6 Контроль правильності моделі

Для контролю правильності отриманої моделі може використатися ряд прийомів:

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

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

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

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

- 1) його рішення існує при будь-яких припустимих вхідних даних;
- 2) це рішення єдине (однозначно визначене);
- 3) рішення неперервно залежить від даних завдання - стійке стосовно малих збурень вхідних даних.

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

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

2.1.7 Дослідження гідродинаміки потоку за допомогою методу стандартних збурень

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

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

Основні параметри гідродинамічних моделей реальних процесів зображені на рис. 2.1.



Рис. 2.1 – Основні параметри гідродинамічних моделей реальних процесів

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

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

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

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

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

2.1.8 Опис насадкового колонного абсорбера за допомогою коміркової моделі

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

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

$$C_{кр}(t) = \frac{1}{\tau} \cdot \frac{n^n}{(n-1)!} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^{n-1} \cdot e^{-n \cdot t/\tau} \quad (2.1)$$

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

$$\tau = M[t] = \int_0^\infty t \cdot C_{кр}(t) dt \quad (2.2)$$

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 диференціальна крива $Z(\theta)$) розуміють:

$$\theta = t/\tau, \quad Z(\theta) = C_{кр}(t) \quad (2.3)$$

Таким чином, для порівняння експериментальної кривої з теоретичними кривими (рис. 2.1) необхідно вирахувати τ згідно із залежністю (2.2) і зробити відповідні перерахунки згідно з формулою (2.3). Необхідно також провести нормування експериментальних значень концентрації $C_{вих}(i)$ до загальної енергії імпульсу індикатора KCl , введеного у колону:

$$C_{кр}(t) = \frac{C_{вих}(t)}{\int_0^\infty C_{вих}(t) dt} \quad (2.4)$$

Чисельні значення визначних інтегралів, що входять у рівняння (1.2, 2.4) можна знайти, наприклад, за методом трапеції, який у загальному випадку має наступний вигляд:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{2} \cdot [y_0 + y_n + 2(y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1})] \quad (2.5)$$

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

Для виконання необхідних розрахунків доречно використати ЕОМ. Після цього потрібно нанести на один графік C - криві відгуку, розраховані згідно коміркової гідродинамічної моделі (див. рис. 2.2.), а також експериментальну C - криву у безрозмірній формі.

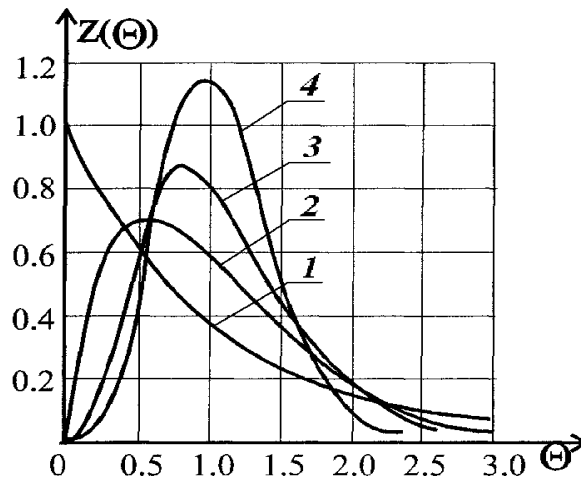


Рис. 2.2 – Порівняння експериментальної кривої з теоретичними кривими при різних кількості комірок (відповідно 1,2,6,8)

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

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

2.2 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.

2.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Приклад результатів програмування задачі і геометричної інтерпретації результатів

Вихідні дані: 1 стовпчик – значення часу, 2 – концентрація трасера на виході.

Розв'язок:

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

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

$$C_v := \frac{C_v^{(1)}}{2 \cdot \sum C_v^{(1)} - C_{v0,1} - C_{v9,1}}$$

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

Визначимо середній час перебування потоку в ОХТ:

$$\tau := \frac{2 \cdot C_v^{(0)} \cdot C - C_{v0,0} \cdot C_0 - C_{v9,0} \cdot C_9}{2}$$

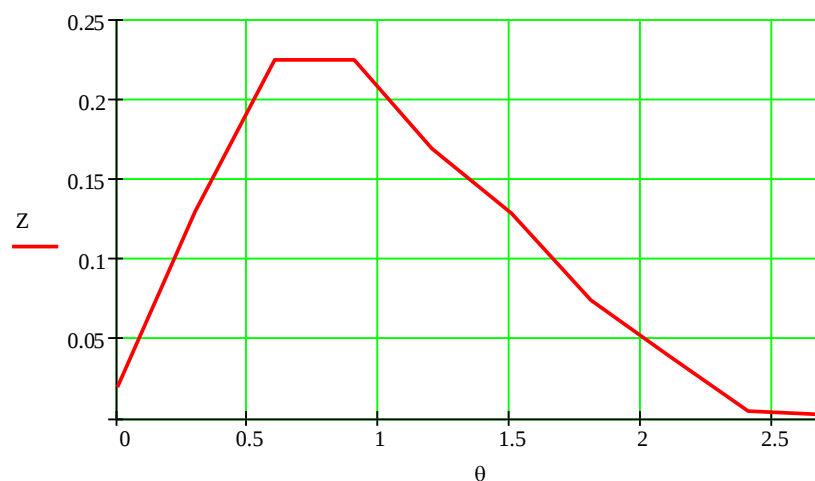
$$\tau = 3.321$$

Визначимо безрозмірні величини:

$$\theta := \frac{C_v^{(0)}}{\tau}$$

$$Z := C$$

Графік у безрозмірних координатах має вигляд:



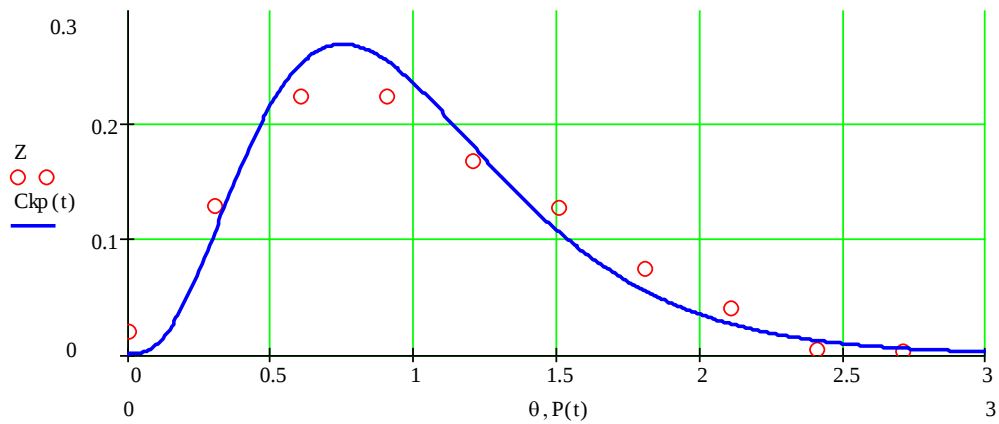
Розраховуємо теоретичну С-криву для різних значень кількості комірок (2,4,6,8), оцінюючи результат за величиною середньо квадратичного відхилення, фіксуючи це у таблиці.

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

$$n := 4$$

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

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



Перевіримо адекватність моделі:

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

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

Ckpt =

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

$$\sigma = 0.021$$

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

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

Таким чином, параметр моделі $n=4$

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 2

- 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 $n = \infty$).

3. ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕПЛООБМІННИХ АПАРАТІВ НА ОСНОВІ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ

Практична робота № 3

ТЕМА: дослідження теплообмінних апаратів на основі математичної моделі.

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

3.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

3.1.1 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:*

$$V_{c_T} \frac{dT}{dt} = \mathcal{Q}_{c_T} (T_{\text{вх}} - T) \pm FK_T \Delta T \quad (3.1)$$

- модель витиснення:

$$Sc_T \frac{\partial T}{\partial t} = \vartheta c_T \frac{\partial T}{\partial l} \pm \frac{F}{L} K_T \Delta T, \quad (3.2)$$

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 рис. 3.1.

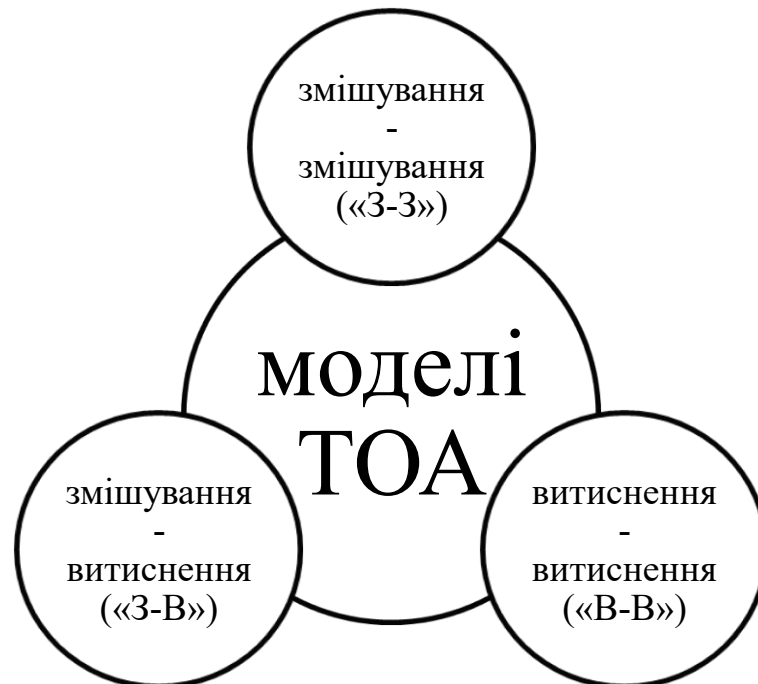


Рис. 3.1 – Види моделей ТОА в залежності від вигляду моделі структури потоку

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:

$$\begin{cases} S_1 c_{T_1} \frac{dT_1}{dt} = -\vartheta_1 c_{T_1} \frac{dT_1}{dl} - \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) \\ S_2 c_{T_2} \frac{dT_2}{dt} = \pm \vartheta_2 c_{T_2} \frac{dT_2}{dl} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2), \end{cases} \quad (3.3)$$

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

3.1.2 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 (3.3) можна записати:

$$\begin{cases} -\vartheta_1 c_{T_1} \frac{dT_1}{dl} - \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0 \\ \vartheta_2 c_{T_2} \frac{dT_2}{dl} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0. \end{cases} \quad (3.4)$$

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: $\vartheta_1 = 0,267 \text{ м}^3/\text{с}$; $T_{1П} = 76 \text{ }^\circ\text{C}$; $T_{2П} = 16 \text{ }^\circ\text{C}$; $F = 13 \text{ м}^2$; $L = 1,5 \text{ м}$; $K = 60 \text{ Вт/м}^2\text{град}$; $c_{T_1} = 1670 \text{ Дж/м}^3\text{град}$; $c_{T_2} = 4185 \cdot 10^3 \text{ Дж/м}^3\text{град}$; $V_2 = 0,26 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$.

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 виході.

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 рис. 3.2.

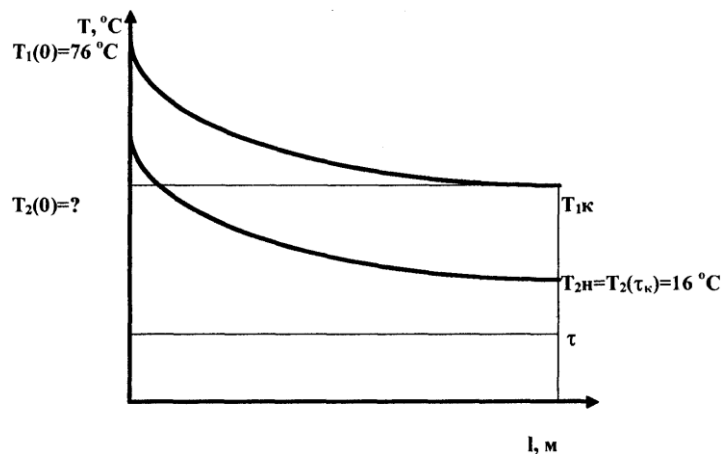


Рис. 3.2 – Профілі температур

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 (3.4) з допомогою ЕОМ, проводиться підбір $T_2(0)$ послідовно задаючись значеннями $T_{1К}$. Рекомендується починати з $T_{1К} = 20^{\circ}\text{C}$, 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 шуканих функцій; 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.

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

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

Вихідні дані:

Розв'язання задачі:

$$\begin{array}{lllll} \mathbf{v1} := 0.267 & \mathbf{T1h} := 90 & \mathbf{F} := 13 & \mathbf{K} := 60 & \mathbf{Ct2} := 4185 \cdot 10^3 \\ \mathbf{v2} := 0.26 \cdot 10^{-3} & \mathbf{T2h} := 40 & \mathbf{L} := 1.5 & \mathbf{Ct1} := 1670 & \mathbf{h} := 0.15 \end{array}$$

(матриця температур теплоносіїв у точці входу гарячого теплоносія).

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

(матриця правих частин диференціальних рівнянь математичної моделі ТОА)

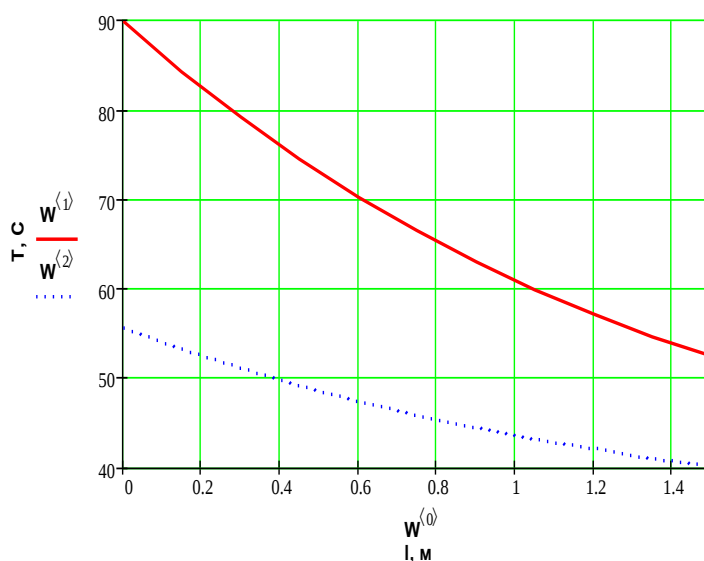
$$\mathbf{G}(\mathbf{t}, \mathbf{T}) := \begin{bmatrix} -\mathbf{F} \cdot \mathbf{K} \cdot \frac{(\mathbf{T}_0 - \mathbf{T}_1)}{\mathbf{L} \cdot \mathbf{v1} \cdot \mathbf{Ct1}} \\ -\mathbf{F} \cdot \mathbf{K} \cdot \frac{(\mathbf{T}_0 - \mathbf{T}_1)}{\mathbf{L} \cdot \mathbf{v2} \cdot \mathbf{Ct2}}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

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

Рішення математичної моделі

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

Профілі розрахованих температур наведені на графіку



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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 3

- 1) Які типові моделі використовуються для опису гідродинаміки теплоносіїв у теплообмінних апаратах? Навести приклади.
- 2) Охарактеризуйте основні коефіцієнти і змінні, які входять у математичний опис ТОА, та їх розмірність.
- 3) Який вигляд має блочний принцип при побудові математичної моделі ТОА?

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

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

Практична робота № 4

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

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

4.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Розрахунок кінетичних параметрів (констант, порядків реакції) є одним з етапів побудови кінетичної моделі хімічної реакції (див. рис. 4.1)

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.

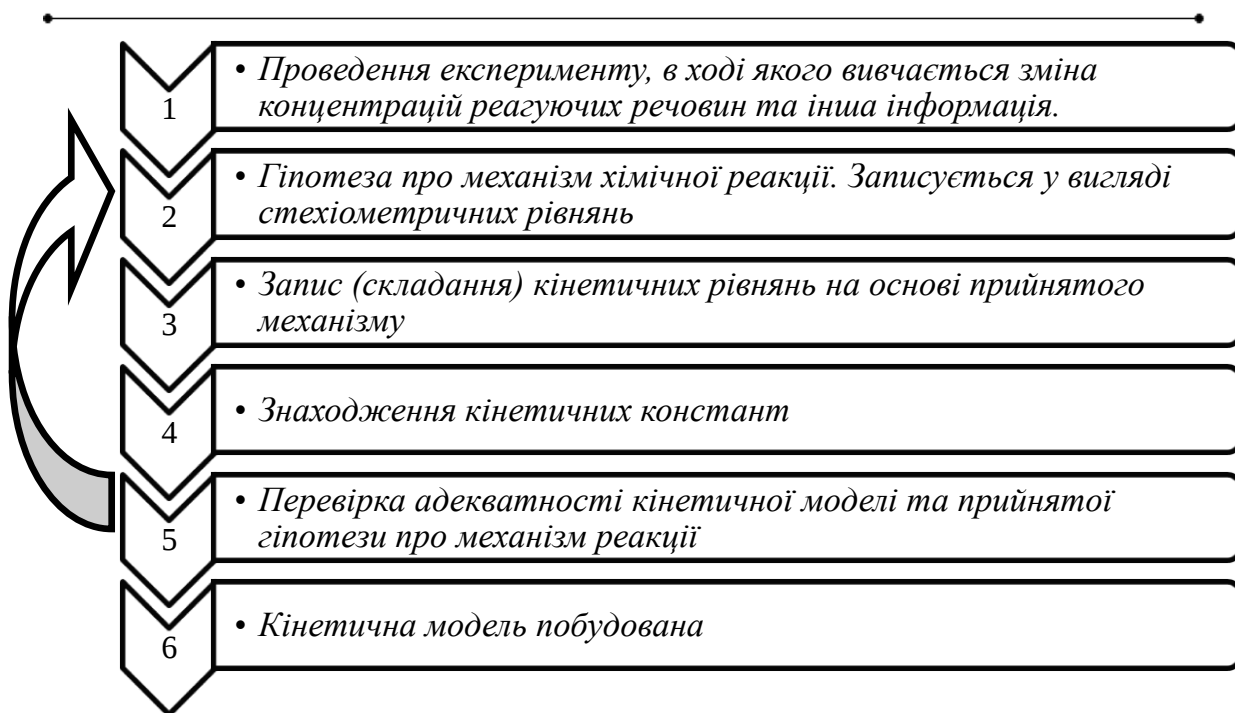


Рис 4.1 – Основні етапи побудови кінетичної моделі

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

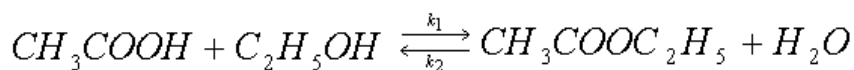
4.1.1 Приклад розрахунку констант швидкості реакції етерифікації етилового спирту та оцтової кислоти

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:

$$K_p = k_1/k_2 = 4 \quad (4.1)$$

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:

$$\frac{dC_a}{dt} = -k_1 C_A C_B + k_2 C_R C_S. \quad (4.3)$$

Початкові умови:

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

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

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

Після підстановки останніх співвідношень у (3.3) маємо:

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

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

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_2 (3C_A^2 + 2C_A - 1) \quad (4.4)$$

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.

4.1.2 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:

$$S = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_{A_e} - C_{A_p})^2}, \quad (4.5)$$

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

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

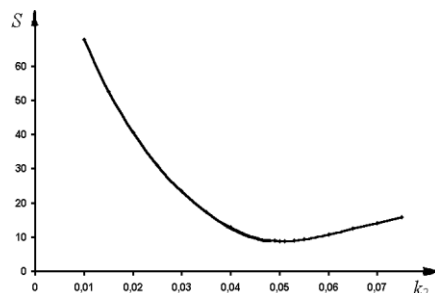


Рис. 4.2 – Залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості реакції k_2

Після закінчення розрахунку констант k_1 та k_2 необхідно нанести розрахункові та експериментальні залежності концентрації компонента A від часу на графік і провести візуальний аналіз збігу, тобто оцінити адекватність розробленої кінетичної моделі експериментальним даним (рис. 4.3).

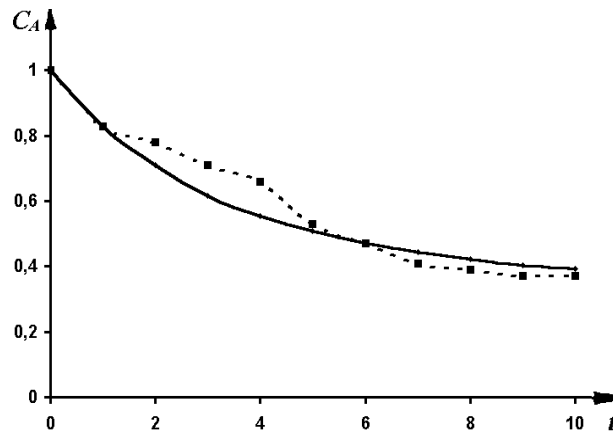


Рис. 4.3 – Залежність концентрації компонента A від часу

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

Початкові дані:

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

Пошук адекватного рівняння кінетичної моделі:

$$K_p := 4$$

Прийняте значення константи швидкості зворотної реакції k_2 :

$$k_2 := 0.04!$$

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

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

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

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

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

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

Середньоквадратичне відхилення розрахункових значень концентрації від експериментальних:

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

$$S = 0.042$$

Значення константи швидкості прямої реакції k_1 :

$$k_1 := K_p \cdot k_2$$

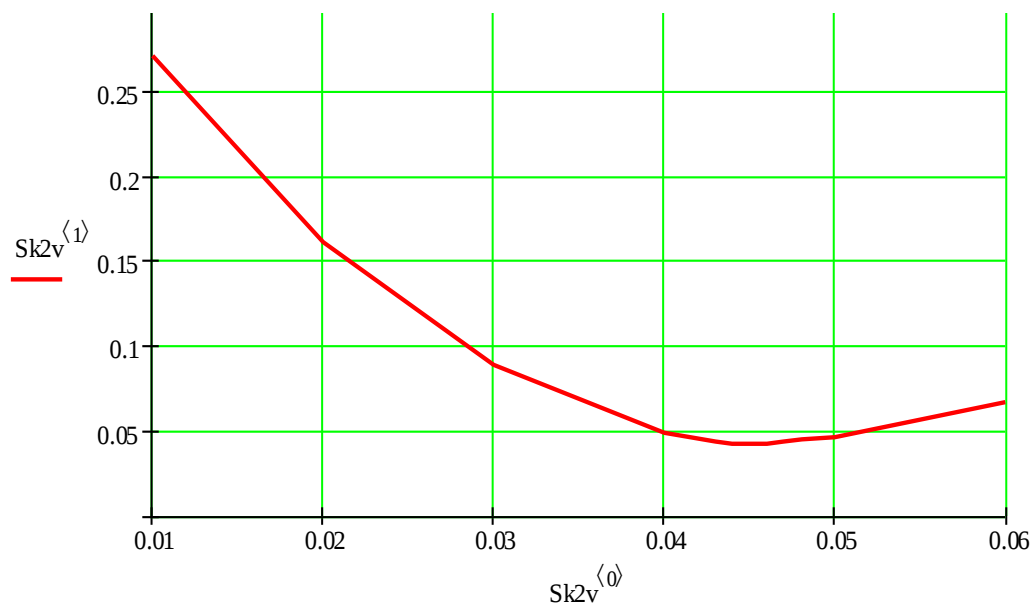
$$k_1 = 0.18$$

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

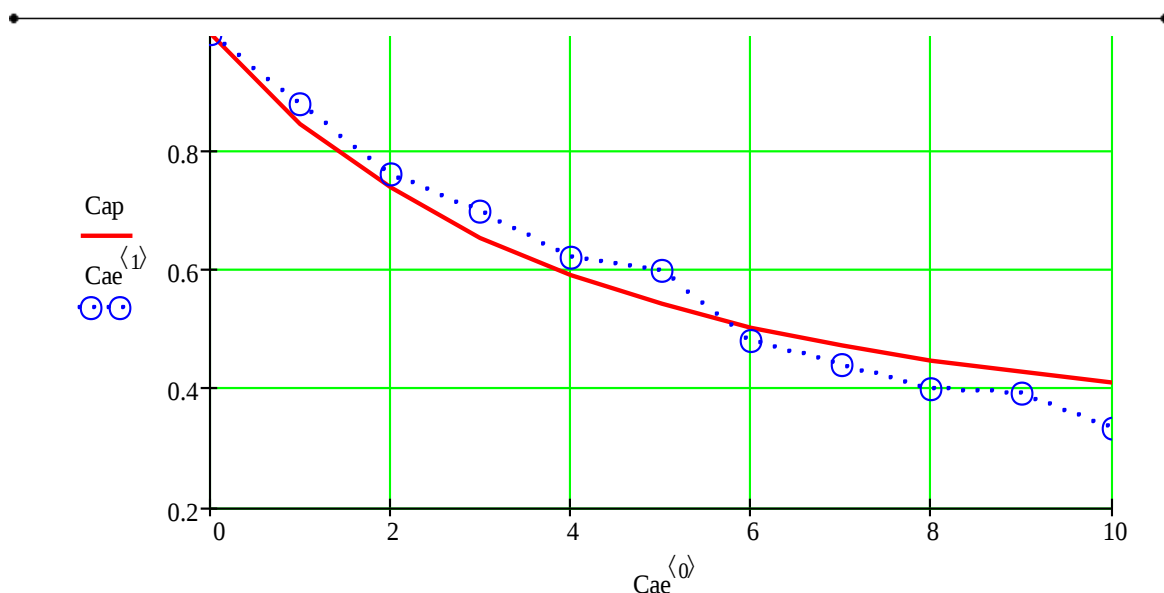
$$Sk_2 := \begin{pmatrix} 0.01 & 0.02 & 0.03 & 0.04 & 0.043 & 0.044 & 0.045 & 0.046 & 0.047 & 0.048 & 0.05 & 0.06 \\ 0.271 & 0.161 & 0.089 & 0.048 & 0.043 & 0.042 & 0.042 & 0.042 & 0.043 & 0.044 & 0.046 & 0.067 \end{pmatrix}$$

Транспонуємо матрицю отриманих значень для можливості побудови графічної залежності:

$$Sk_{2v} := Sk_2^T$$



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 №4

- 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 EOM?
- 4) Сформулюйте умову закінчення пошуку кінетичних констант.
- 5) Як складається кінетична модель для різних типів кінетичних реакцій?
- 6) Охарактеризуйте структурну схему побудови кінетичної моделі.

КОМП'ЮТЕРНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕМПЕРАТУРНИХ РЕЖИМІВ РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ЗМІШУВАННЯ ПЕРІОДИЧНОЇ ДІЇ

Практична робота № 5

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.

5.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

5.1.1 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:

$$\frac{dn_j}{dt} = \frac{d(V\rho N_j)}{dt} = \sum_{i=1}^p v_i^0 \cdot \rho_i^0 \cdot N_{ji}^0 - v \cdot \rho \cdot N_j + \sum F_{j_\Sigma}, \quad (5.1)$$

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{d(V\rho c_p T)}{dt} = \sum_{i=1}^p v_i^0 \cdot \rho_i^0 \cdot c_{p_i}^0 \cdot T_i^0 - v \cdot \rho \cdot c_p \cdot T + \sum F_{T_\Sigma}, \quad (5.2)$$

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, K ; c_p – теплоємність реакційної суміші, $\text{кДж}/(\text{кмоль} \cdot \text{K})$; $\sum F_{j_\Sigma}$ – 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 (5.1), (5.2). Тоді рівняння матеріального і теплового балансів приймають вигляд:

$$\frac{d(V\rho N_j)}{dt} = \sum F_{j_\Sigma}, \quad (5.3)$$

$$\frac{d(V\rho c_p T)}{dt} = \sum F_{T_\Sigma}. \quad (5.4)$$

5.1.2 Приклад розрахунку проточного реактора ідеального змішування періодичної дії

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

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

$$\sum F_{A_\Sigma} = f_{A,V} \cdot V = W_A \cdot V = -k_1 \cdot C_A \cdot V; \quad (5.5)$$

$$\sum F_{R_\Sigma} = f_{R,V} \cdot V = W_R \cdot V = (k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_R) \cdot V; \quad (5.6)$$

$$\sum F_{S_\Sigma} = f_{S,V} \cdot V = W_S \cdot V = k_2 \cdot C_R \cdot V; \quad (5.7)$$

$$\sum F_{T_\Sigma} = q_{T,V} \cdot V + q_{T,F} \cdot F_T = -Q_P \cdot W_S \cdot V + K_T \cdot (T_T - T) \cdot F_T; \quad (5.8)$$

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 (5.3), (5.4) залежності (5.5) - (5.8), температурні залежності констант швидкості і співвідношення $c_j = \rho \cdot N_j$ після нескладних перетворень отримаємо:

$$k_1 = k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T); \quad (5.9)$$

$$k_2 = k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T); \quad (5.10)$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A; \quad (5.11)$$

$$\frac{dC_R}{dt} = k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_R; \quad (5.12)$$

$$\frac{dC_S}{dt} = k_2 \cdot C_R; \quad (5.13)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{K_T \cdot F_T}{V \cdot \rho \cdot c_P} \cdot (T_T - T) - \frac{Q_P}{\rho \cdot c_P} \cdot k_2 \cdot C_R. \quad (5.14)$$

Для адіабатичного теплового режиму рівняння (5.14) прийме вигляд:

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{Q_P}{\rho \cdot c_P} \cdot k_2 \cdot C_R. \quad (5.15)$$

Ізотермічний тепловий режим забезпечується рівністю теплоприходу і тепловитрат, тобто:

$$\frac{dT}{dt} = 0. \quad (5.16)$$

Таким чином, математична модель в ізотермічних умовах буде така:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T) \cdot C_A, \\ \frac{dC_R}{dt} = k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T) \cdot C_A - k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R, \\ \frac{dC_S}{dt} = k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R. \end{cases} \quad (5.17)$$

При початкових умовах:

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

Таким чином, математична модель в адіабатичних умовах буде така:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T) \cdot C_A, \\ \frac{dC_R}{dt} = k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T) \cdot C_A - k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R, \\ \frac{dC_S}{dt} = k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R, \\ \frac{dT}{dt} = -\frac{Q_P}{\rho \cdot c_P} \cdot k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R. \end{cases} \quad (5.18)$$

При початкових умовах:

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

Таким чином, математична модель в політропічних умовах буде така:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T) \cdot C_A, \\ \frac{dC_R}{dt} = k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T) \cdot C_A - k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R, \\ \frac{dC_S}{dt} = k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R, \\ \frac{dT}{dt} = \frac{K_T \cdot F_T}{V \cdot \rho \cdot c_p} \cdot (T_T - T) - \frac{Q_p}{\rho \cdot c_p} \cdot k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T) \cdot C_R. \end{cases} \quad (5.19)$$

При початкових умовах:

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

Математичний опис РІЗ-П для розглянутих теплових режимів (5.17) - (5.19) 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:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot F(x, y), \quad (5.20)$$

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

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

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

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

Розв'яжемо задачу при наступних початкових даних. Початкові концентрації реагуючих компонентів, кмоль/м³: $C_{A_0} = 1,15$; $C_{R_0} = 0,01$; $C_{S_0} = 0$. Теплота реакції $Q_p = 13100 \text{ кДж/кмоль } S$. Температурні залежності констант швидкості мають вигляд:

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

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

Температура вихідної реакційної суміші 30 °C; температура теплоносія 110 °C. Щільність і теплоємність реакційної суміші відповідно рівні 810 кг/м³, 1600 Дж/кг·K. Обсяг реакційної суміші в РІЗ - П складає 0,8 м³; поверхня теплопередачі 2,1 м²; коефіцієнт теплопередачі 280 Вт/(м²·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 статистиці 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.

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. 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.

5.3 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:

$$k_1(\text{tem}) := 1.84 \cdot 10^9 \cdot e^{\frac{-60910}{8.31 \cdot \text{tem}}}$$

$$k_2(\text{tem}) := 1.93 \cdot 10^8 \cdot e^{\frac{-58100}{8.31 \cdot \text{tem}}}$$

$$i := 1..900 \quad \text{- кроки інтегрування}$$

$$\Delta t := 0.1 \quad \text{- величина кроку інтегрування, с}$$

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

$$t_0 := 0$$

$$\text{tem}_0 := 303$$

$$C_{A0} := 1.15$$

$$C_{r0} := 0.01$$

$$C_{S0} := 0$$

$$Q_{ps} := 1.31 \cdot 10^7 \quad \text{- тепловий ефект реакції по речовині S, Дж/кмоль}$$

$$c_p := 1600 \quad \text{- питома теплоємність реакційної суміші, Дж/(кг·K)}$$

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

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

$$F_t := 2.1 \quad \text{- поверхня теплопередачі, м}^2$$

$$K_t := 280 \quad \text{- коефіцієнт теплопередачі, Вт/(м}^2 \cdot K)$$

$$T_t := 383 \quad \text{- температура теплоносія, K}$$

Ліві частини системи диференціальних рівнянь матеріального балансу:

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

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

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

Моделювання РІЗ-II (ізотермічний режим)

Реалізація методу Ейлера

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

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

$$\Delta =$$

	0
0	0
1	0.066
2	0.065
3	0.065
4	0.065

$$t =$$

	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4

$$Ca =$$

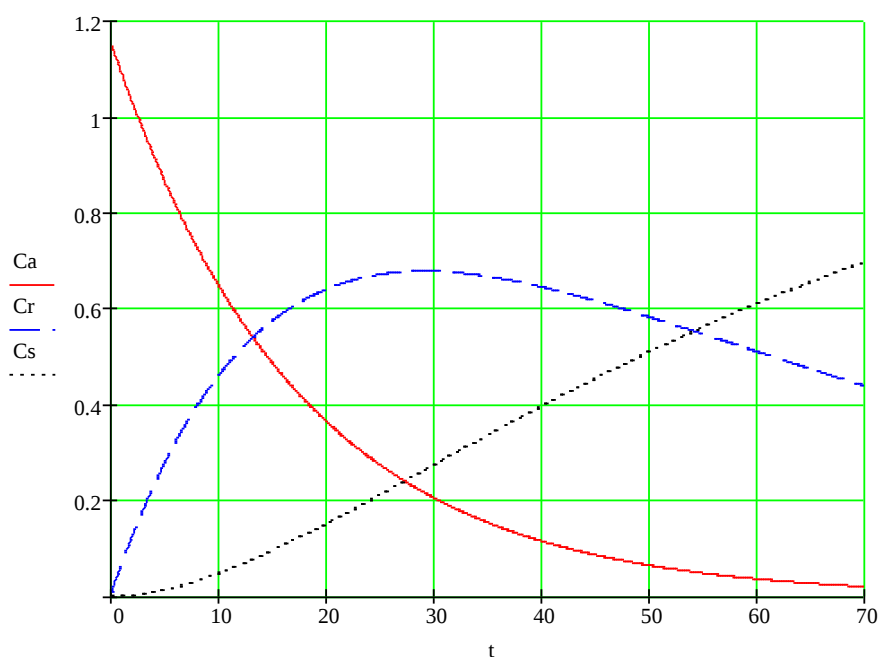
	0
0	1.15
1	1.143
2	1.137
3	1.13
4	1.124

$$Cr =$$

	0
0	0.01
1	0.017
2	0.023
3	0.03
4	0.036

$$Cs =$$

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



Час закінчення реакції: $t=54,02$ с

Модельовання РІЗ-П (адіабатичний режим)

$$F_{tem}(Cr, tem) := \frac{Q_{ps}}{c_p \cdot \rho} \cdot |FCs(Cr, tem)|$$

ліва частина диференційного рівняння теплового балансу

$$\begin{pmatrix} t_i \\ Ca_i \\ Cr_i \\ Cs_i \\ tem_i \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} t_{i-1} + \Delta t \\ Ca_{i-1} + F_{Ca}(Ca_{i-1}, tem_{i-1}) \cdot \Delta t \\ Cr_{i-1} + F_{Cr}(Ca_{i-1}, Cr_{i-1}, tem_{i-1}) \cdot \Delta t \\ Cs_{i-1} + F_{Cs}(Cr_{i-1}, tem_{i-1}) \cdot \Delta t \\ tem_{i-1} + F_{tem}(Cr_{i-1}, tem_{i-1}) \cdot \Delta t \end{pmatrix}$$

$$\Delta_i := |F_{Ca}(Ca_i, tem_i)|$$

$$\Delta =$$

	0
0	0
1	0.066
2	0.065
3	0.065
4	0.065

$$t =$$

	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4

$$Ca =$$

	0
0	1.15
1	1.143
2	1.137
3	1.13
4	1.124

	0
0	0.01
1	0.017
2	0.023
3	0.03
4	0.036

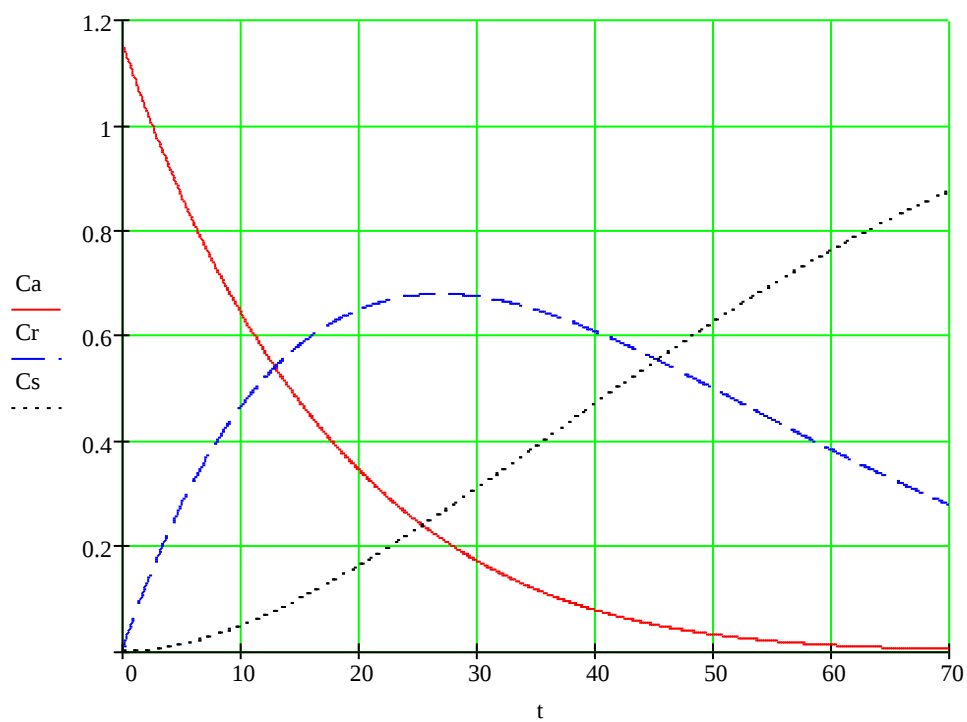
Cr =

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

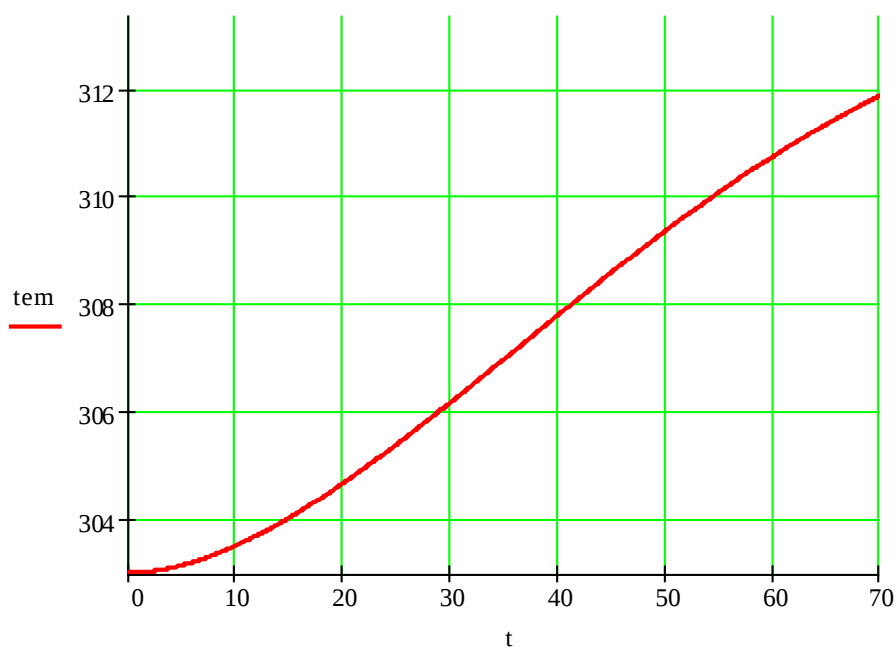
Cs =

	0
0	303
1	303
2	303
3	303.001
4	303.001

tem =



Час закінчення реакції: $t=45,136$ c



Модельовання РІЗ-П (політропічний режим)

$$F_{tem}(Cr, tem) := \frac{Q_{ps}}{c_p \cdot \rho} \cdot |FCs(Cr, tem)| + \frac{Kt \cdot Ft \cdot (Tt - tem)}{V \cdot c_p \cdot \rho}$$

ліва частина диференційного рівняння теплового балансу

$$\begin{pmatrix} t_i \\ Ca_i \\ Cr_i \\ Cs_i \\ tem_i \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} t_{i-1} + \Delta t \\ Ca_{i-1} + F_{Ca}(Ca_{i-1}, tem_{i-1}) \cdot \Delta t \\ Cr_{i-1} + F_{Cr}(Ca_{i-1}, Cr_{i-1}, tem_{i-1}) \cdot \Delta t \\ Cs_{i-1} + F_{Cs}(Cr_{i-1}, tem_{i-1}) \cdot \Delta t \\ tem_{i-1} + F_{tem}(Cr_{i-1}, tem_{i-1}) \cdot \Delta t \end{pmatrix}$$

$$\Delta_i := |F_{Ca}(Ca_i, tem_i)|$$

 $\Delta =$

	0
0	0
1	0.066
2	0.065
3	0.065
4	0.065

 $t =$

	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4

 $Ca =$

	0
0	1.15
1	1.143
2	1.137
3	1.13
4	1.124

 $Cr =$

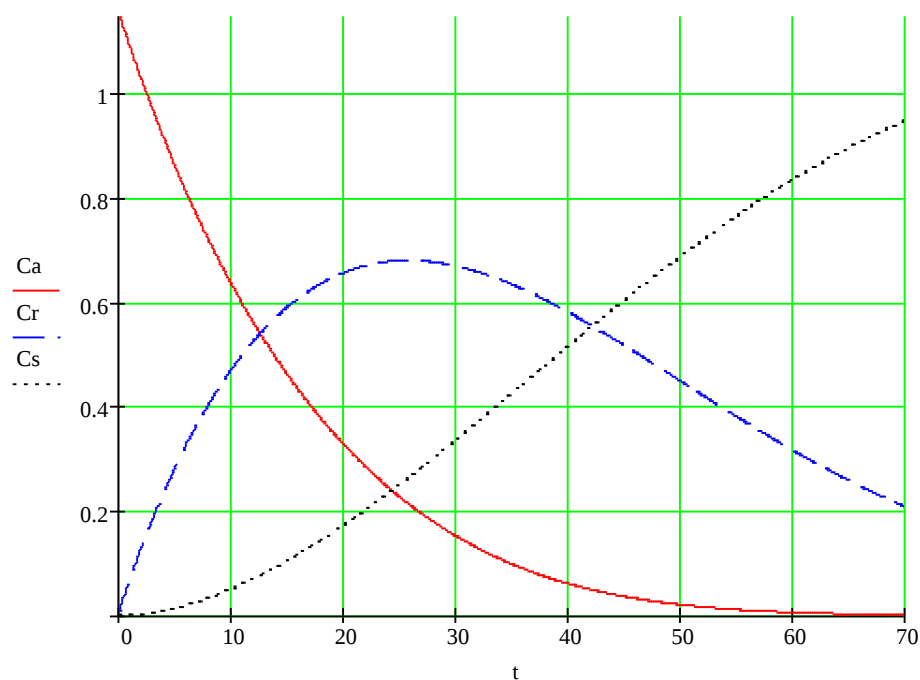
	0
0	0.01
1	0.017
2	0.023
3	0.03
4	0.036

 $Cs =$

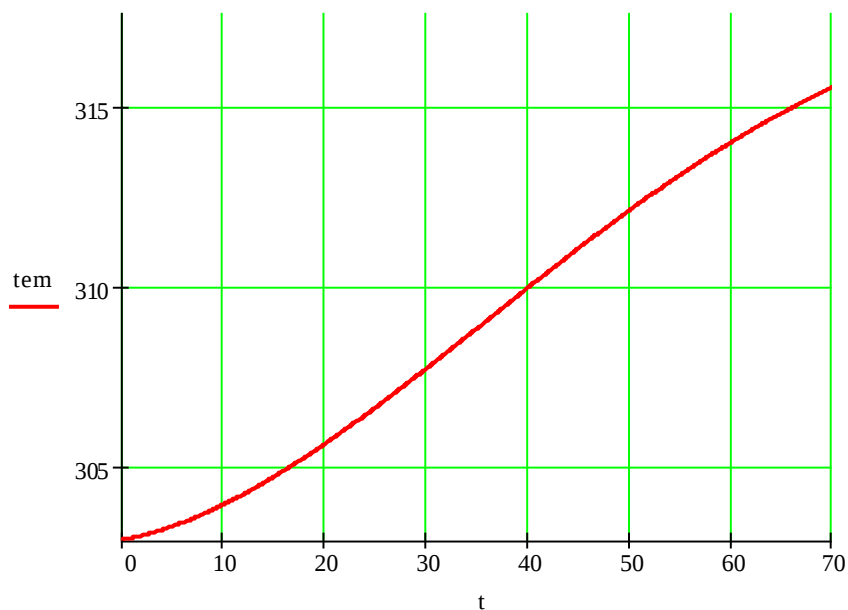
	0
0	0
1	$1.838 \cdot 10^{-5}$
2	$4.888 \cdot 10^{-5}$
3	$9.142 \cdot 10^{-5}$
4	$1.459 \cdot 10^{-4}$

 $tem =$

	0
0	303
1	303.005
2	303.01
3	303.015
4	303.02



Час закінчення реакції: $t=42,08$ с



Досліджено ендотермічну реакцію, що протікає в РІЗ-П, в різних теплових режимах. Визначено час закінчення реакції: в ізотермічному режимі – 54,02 с; адіабатичному – 45,136 с; політропічному – 42,08 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 30 с, коли концентрація R досягає свого максимуму.

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 5

- 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?*

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

Практична робота № 6

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).

6.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

6.1.1 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.

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau}(C_{\text{ex}i} - C_i) + W_{ri} = 0 \\ \frac{1}{\tau}(T_{\text{ex}} - T) + \frac{1}{C_T}(\pm\Delta H)|W_r| - \frac{K_T F}{C_T V}(T - T_x) = 0 \\ \frac{1}{\tau}(T_{\text{ex}} - T_x) + \frac{K_T F}{C_x V_x}(T - T_x) = 0 \end{cases} \quad (6.1)$$

де $i = 1, 2, \dots, n$ – кількість компонентів реакції; τ, τ_x – середній час перебування потоку в реакторі та холодоагенту в сорочці; C_{exi}, C_i – вхідна, поточна (вихідна) концентрація i -го компонента; T_{ex}, 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_{ri} – 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:

$$\frac{1}{\tau}(C_{exi} - C_i) + W r_i = 0 \quad (6.2)$$

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



Відомі: концентрації компонентів у вхідному потоці: $C_{A_{ex}} = 1 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{B_{ex}} = C_{P_{ex}} = C_{S_{ex}} = 0$, 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:

$$\begin{cases} Wr_A = \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \\ Wr_B = \frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S \\ Wr_S = \frac{dC_S}{dt} = k_2 C_B - k_3 C_S \\ Wr_P = \frac{dC_P}{dt} = k_4 C_B \end{cases} \quad (6.4)$$

Тоді модель ізотермічного реактора у статиці запишемо так:

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau} (C_{A_{\hat{a}\hat{o}}} - C_A) - k_1 C_A = 0 \\ \frac{1}{\tau} (C_{B_{\hat{a}\hat{o}}} - C_B) + k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S = 0 \\ \frac{1}{\tau} (C_{S_{\hat{a}\hat{o}}} - C_S) + k_2 C_B - k_3 C_S = 0 \\ \frac{1}{\tau} (C_{P_{\hat{a}\hat{o}}} - C_P) + k_4 C_B = 0 \end{cases} \quad (6.5)$$

Зробивши перегрупування відносно початкових концентрацій, приведемо систему (6.5) до вигляду:

$$\begin{cases} C_{A_{\hat{a}\hat{o}}} = (1 + k_1 \tau) C_A \\ C_{B_{\hat{a}\hat{o}}} = -k_1 \tau C_A + [1 + (k_2 + k_4) \tau] C_B - k_3 \tau C_S \\ C_{S_{\hat{a}\hat{o}}} = -k_2 \tau C_B - (1 + k_3 \tau) C_S \\ C_{P_{\hat{a}\hat{o}}} = -k_4 \tau C_B + C_P \end{cases} \quad (6.6)$$

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:

$$C_{ex} = K \cdot C, \quad (6.7)$$

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

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

коефіцієнтів (6.8)

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

$$C = K^{-1} \cdot C_{B_{\text{ex}}} \quad (6.9)$$

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

6.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні положення.
2. Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.
3. 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.

6.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Моделювання проточного реактору ідеального змішування

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

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

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

Матриці коефіцієнтів:

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

Розв'язання системи матричним методом при різних термінах перебування:

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

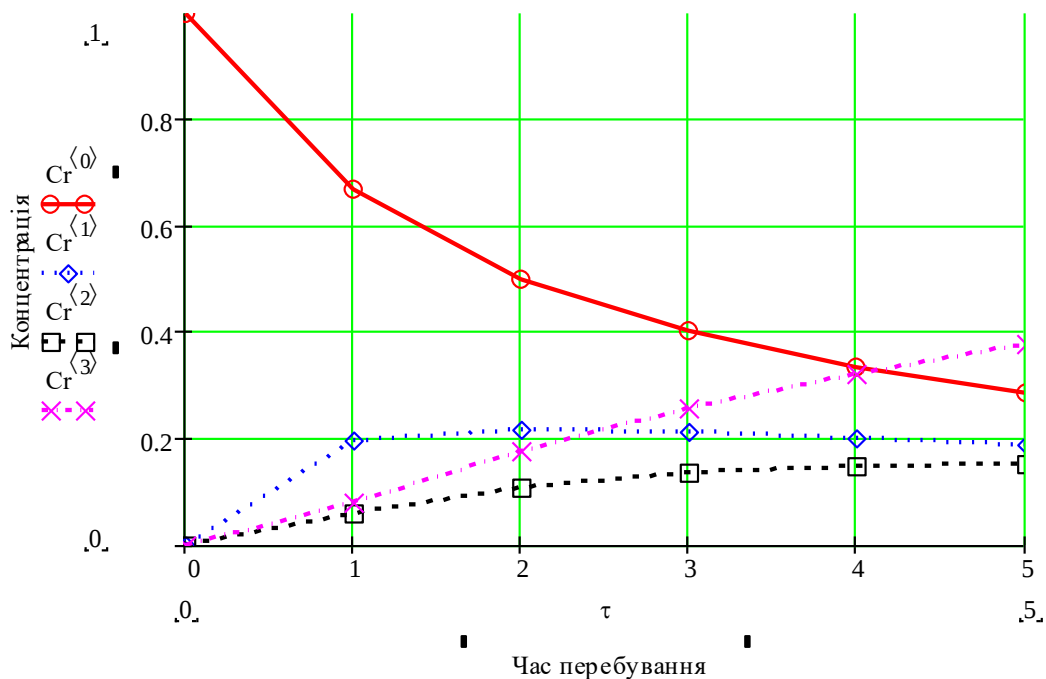
Поточні концентрації знайдені:

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

$$C_r := C^T$$

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

Тоді, 1-й стовпчик матриці C - початкова концентрація, 2, 3, 4, 5 - поточні значення компонентів 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 № 6

- 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?

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

Практична робота № 7

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).

7.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

7.1.1 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:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \frac{\partial C_i}{\partial l} + W r_i \quad (7.1)$$

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

$$-u \frac{\partial C_i}{\partial l} + W r_i = 0, \quad (7.2)$$

$$C_i(0) = C_{\text{вх}i}$$

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

Враховуючи, що $dl/u = d\tau$, систему (7.2) запишемо так:

$$\frac{dC_i}{d\tau} = W r_i, \quad (7.3)$$

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 (7.3).

В цьому випадку математична модель РІВ буде мати вигляд системи звичайних диференціальних рівнянь (7.4) 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 $C_{A_{ex}} = 1 \text{ кмоль/м}^3$; $C_{B_{ex}} = C_{S_{ex}} = C_{P_{ex}} = 0$.

Система диференціальних рівнянь (7.4) описує зміну концентрацій реагуючих речовин від часу перебування в РІВ (або по його довжині).

Для розв'язання системи (7.4) можна скористатися яким-небудь із відомих чисельних методів, наприклад, методом Ейлера чи метод Рунге-Кутта.

Результати рішення моделі РІВ на ЕОМ потрібно накреслити як графічну залежність $C_i = f(\tau)$ (див. рис. 7.1)

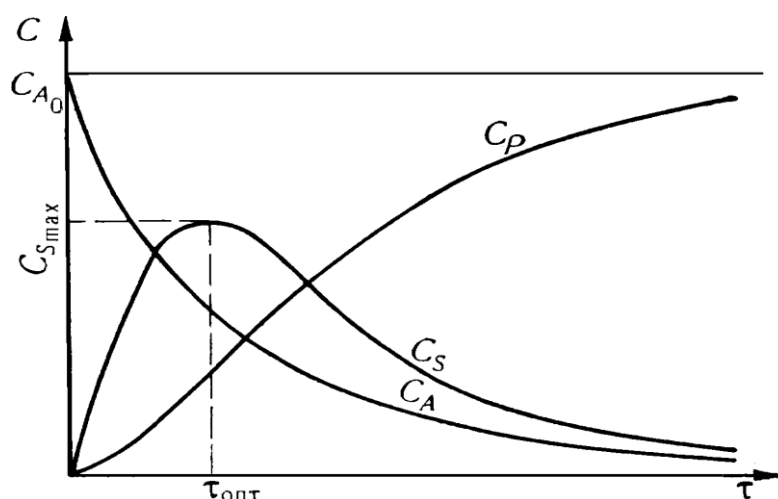


Рис. 7.1 – Графічна залежність $C_i = f(\tau)$

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. 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.

7.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Моделювання ізотермічного трубчатого реактору ідеального витіснення

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

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

Час перебування:

$$i := 0..5$$

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

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

$$D(t, C_{\text{inp}}) := \begin{bmatrix} -k_0 \cdot C_{\text{inp}_0} \\ k_0 \cdot C_{\text{inp}_0} - (k_1 + k_3) \cdot C_{\text{inp}_1} + k_2 \cdot C_{\text{inp}_2} \\ k_1 \cdot C_{\text{inp}_1} - k_2 \cdot C_{\text{inp}_2} \\ k_3 \cdot C_{\text{inp}_1} \end{bmatrix}$$

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

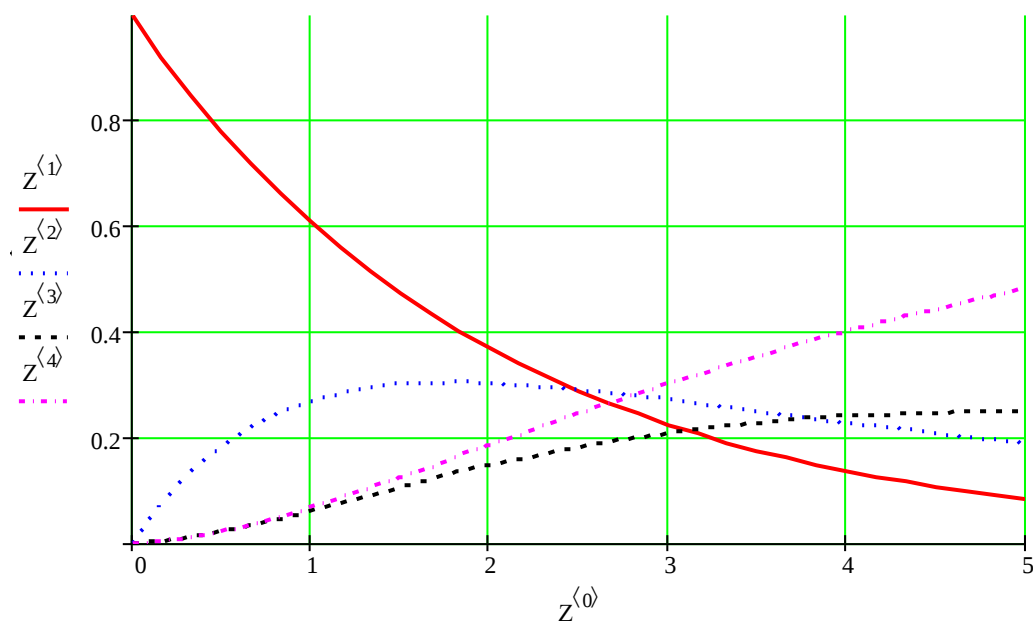
$$Z := \text{rkfixed}(C_{\text{inp}}, 0, 5, 30, D)$$

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

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

Z =

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 № 7

- 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?

8 ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ НА ДІАГРАМАХ СКЛАД – ВЛАСТИВІСТЬ

Практична робота № 8

ТЕМА: побудова залежностей властивостей багатокomпонентних систем від їхнього складу.

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

8.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

8.1.1 Побудова залежностей властивостей багатокomпонентних систем від їхнього складу

При рішенні задач з хімії, хімічної технології, промисловості будівельних матеріалів і інших часто приходиться зіштовхуватися з питаннями вивчення властивостей сумішей, що залежать від співвідношення вихідних компонентів. Змінні x_i ($i = 1, 2, \dots, q$) таких систем пропорційні вмісту їх компонентів у суміші і задовольняють умові:

$$\sum_{i=1}^q x_i = 1 \quad (x_i \geq 0) \quad (8.1)$$

де q – кількість компонентів; x_i – концентрація компоненту.

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

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

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

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

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

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

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{33} x_3^2, \quad (8.2)$$

в наведеній формі з урахуванням умови:

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1 \quad (8.3)$$

запишеться наступним чином:

$$y = b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3, \quad (8.4)$$

де

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

Для q – компонентної суміші:

$$y_i = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} x_i x_j; \quad (8.5)$$

де

$$\beta_i = y_i;$$

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

Неповна кубічна модель:

для трикомпонентної суміші:

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3, \quad (8.6)$$

де $\beta_1 = y_1$; Т.Д.

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

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

для q - компонентної суміші

$$y = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k; \quad (8.7)$$

де $\beta_i = y_i$; і т.д.

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

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

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

У таблиці 11.1. наведений симплекс-решітчатий план другого порядку для трикомпонентної суміші, у таблиці 8.2 – план третього порядку.

Таблица 8.1

Симплекс-решітчатий план другого порядку для трьохкомпонентної суміші

N п/п	x_1	x_2	x_3	$y_{\text{екс}}$	N п/п	x_1	x_2	x_3	$y_{\text{екс}}$
1	1	0	0	y_1	4	1/2	1/2	0	y_{12}
2	0	1	0	y_2	5	1/2	0	1/2	y_{13}
3	0	0	1	y_3	6	0	1/2	1/2	y_{23}

Таблиця 8.2

Симплекс-решітчатий план третього порядку для трьохкомпонентної суміші

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

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

Розрахункове значення критерію Стюдента визначається співвідношенням:

$$t_p = \frac{|y_i - \hat{y}_i| \sqrt{r}}{\sqrt{S_0^2} \sqrt{1 + \xi}} \quad (8.8)$$

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

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

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

$$t_p < t_T, \quad f=N(r+1), \quad q=0,05 \quad (8.9)$$

При виконанні умови (8.9) рівняння визнається адекватним. При невиконанні - переходять до рівнянь більш високого порядку, доповнюючи план експерименту новими точками.

8.1.2 Дослідження процесу зміни властивостей бісульфітної напівцелюлози зі змішаної хвойної деревини

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

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

Таблиця 8.3

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

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

Побудова вигляду апроксимуючого поліному третього степеню:

$$\begin{aligned}\hat{y} = & \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \\ & + \beta_{123} x_1 x_2 x_3 + \gamma_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + \gamma_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \\ & + \gamma_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3)\end{aligned}\quad (8.10)$$

Розрахувати коефіцієнти моделі (8.10), що розраховуються згідно із залежностей (8.11):

$$\begin{aligned}\beta_1 &= y_1; \\ \beta_2 &= y_2; \\ \beta_3 &= y_3; \\ \gamma_{12} &= \frac{9}{4}(3y_{112} - 3y_{122} - y_1 + y_2) \\ \beta_{12} &= \frac{9}{4}(y_{112} + y_{122} - y_1 - y_2); \\ \gamma_{23} &= \frac{9}{4}(3y_{223} - 3y_{233} - y_2 + y_3) \\ \beta_{23} &= \frac{9}{4}(y_{223} + y_{233} - y_2 - y_3); \\ \gamma_{13} &= \frac{9}{4}(3y_{113} - 3y_{133} - y_1 + y_3) \\ \beta_{13} &= \frac{9}{4}(y_{113} + y_{133} - y_1 - y_3); \\ \beta_{123} &= 27y_{123} - \frac{27}{4}(y_{112} + y_{122} + y_{113} + y_{133} + y_{223} + y_{233}) + \frac{9}{2}(y_1 + y_2 + y_3)\end{aligned}\quad (8.11)$$

Перевірка адекватності моделі. Розрахункове значення критерію Стьюдента визначається співвідношенням:

$$t_p = \frac{|y_i - \hat{y}_i| \sqrt{r}}{S_0^2 \sqrt{1 + \xi}} \quad (8.12)$$

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

$$\xi = \sum \alpha_i^2 + \sum \alpha_{ij}^2 \quad (8.13)$$

$$\alpha_1 = x_1(2x_1 - 1), \alpha_2 = x_2(2x_2 - 1), \alpha_3 = x_3(2x_3 - 1),$$

$$\alpha_{12} = 4x_1x_2, \alpha_{13} = 4x_1x_3, \alpha_{23} = 4x_2x_3$$

Обчислені за формулою (8.12) значення t_i порівнюються з табличними значеннями критерію Стюдента $t_T = 2,09$

$$t_p < t_T, f = N(r+1) = 20, \quad q = 0,05 \quad (8.14)$$

При виконанні умови (8.14) рівняння визнається адекватним. При невиконанні – переходять до рівнянь більш високого порядку, доповнюючи план експерименту новими точками.

8.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

8.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Вихідні дані:

$$X := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0.67 & 0.33 & 0 \\ 0.33 & 0.67 & 0 \\ 0.67 & 0 & 0.33 \\ 0.33 & 0 & 0.67 \\ 0 & 0.67 & 0.33 \\ 0 & 0.33 & 0.67 \\ 0.33 & 0.33 & 0.33 \end{pmatrix} \quad Y := \begin{pmatrix} 3.6 \\ 2.78 \\ 4.59 \\ 4 \\ 2.99 \\ 3.86 \\ 3.50 \\ 3.3 \\ 3.58 \\ 3.65 \end{pmatrix} \begin{matrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_{112} \\ y_{122} \\ y_{223} \\ y_{233} \\ y_{113} \\ y_{133} \\ y_{123} \end{matrix}$$

X- масова частка деревини

Y- опір продавлювання

Розрахуємо коефіцієнти моделі

$$\beta_1 := Y_0$$

$$\beta_1 = 3.6$$

$$\beta_2 := Y_1$$

$$\beta_2 = 2.78$$

$$\beta_3 := Y_2$$

$$\beta_3 = 4.59$$

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

$$\gamma_{12} = 4.972$$

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

$$\beta_{12} = 1.373$$

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

$$\gamma_{23} = 6.503$$

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

$$\beta_{23} = -0.022$$

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

$$\gamma_{13} = 0.337$$

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

$$\beta_{13} = -2.948$$

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

$$\beta_{123} = 4.612$$

Тоді, апроксимуючий поліном матиме вигляд

$$Y = \beta_1 \cdot x_1 + \beta_2 \cdot x_2 + \beta_3 \cdot x_3 + \beta_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + \beta_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + \beta_{123} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 + \gamma_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 (x_1 - x_2) + \gamma_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 (x_1 - x_3) + \gamma_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 (x_2 - x_3)$$

$$Y = 3.6 \cdot x_1 + 2.78 \cdot x_2 + 4.59 \cdot x_3 + 1.373 \cdot x_1 \cdot x_2 - 2.948 \cdot x_1 \cdot x_3 + 4.612 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 + 4.972 \cdot x_1 \cdot x_2 (x_1 - x_2) + 0.337 \cdot x_1 \cdot x_3 (x_1 - x_3) + 6.503 \cdot x_2 \cdot x_3 (x_2 - x_3)$$

Перевірка адекватності моделі

$r := 1$ кількість паралельних дослідів

$tt := 2.09$ табличне значення критерію Стюдента

$S_{02} := 0.21$ оцінка дисперсій відтворення

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

$$X_v := \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ 0.67 & 0.33 & 0 \\ 0.33 & 0.67 & 0 \\ 0.67 & 0 & 0.33 \end{pmatrix} \begin{matrix} 4 \text{ дослід} \\ 5 \text{ дослід} \\ 6 \text{ дослід} \end{matrix}$$

$$Y = 3.6 \cdot x_1 + 2.78 \cdot x_2 + 4.59 \cdot x_3 + 1.373 \cdot x_1 \cdot x_2 - 2.948 \cdot x_1 \cdot x_3 + 4.612 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 + 4.972 \cdot x_1 \cdot x_2 (x_1 - x_2) + 0.337 \cdot x_1 \cdot x_3 (x_1 - x_3) + 6.503 \cdot x_2 \cdot x_3 (x_2 - x_3)$$

Для 4 дослідів

$$yr_{41} := \beta_1 \cdot X_{v0,0} + \beta_2 \cdot X_{v0,1} + \beta_3 \cdot X_{v0,2} + \beta_{12} \cdot X_{v0,0} \cdot X_{v0,1} + \beta_{13} \cdot X_{v0,0} \cdot X_{v0,2} + \beta_{123} \cdot X_{v0,0} \cdot X_{v0,1} \cdot X_{v0,2}$$

$$yr_{42} := \gamma_{12} \cdot X_{v0,0} \cdot X_{v0,1} (X_{v0,0} - X_{v0,1}) + \gamma_{13} \cdot X_{v0,0} \cdot X_{v0,2} (X_{v0,0} - X_{v0,2}) + \gamma_{23} \cdot X_{v0,1} \cdot X_{v0,2} (X_{v0,1} - X_{v0,2})$$

$$yr_4 := yr_{41} + yr_{42}$$

$$yr_4 = 4.007$$

Для 5 дослідів

$$yr_{51} := \beta_1 \cdot X_{v1,0} + \beta_2 \cdot X_{v1,1} + \beta_3 \cdot X_{v1,2} + \beta_{12} \cdot X_{v1,0} \cdot X_{v1,1} + \beta_{13} \cdot X_{v1,0} \cdot X_{v1,2} + \beta_{123} \cdot X_{v1,0} \cdot X_{v1,1} \cdot X_{v1,2}$$

$$yr_{52} := \gamma_{12} \cdot X_{v1,0} \cdot X_{v1,1} (X_{v1,0} - X_{v1,1}) + \gamma_{13} \cdot X_{v1,0} \cdot X_{v1,2} (X_{v1,0} - X_{v1,2}) + \gamma_{23} \cdot X_{v1,1} \cdot X_{v1,2} (X_{v1,1} - X_{v1,2})$$

$$yr_5 := yr_{51} + yr_{52}$$

$$yr_5 = 2.98$$

Для 6 дослідів

$$yr_{61} := \beta_1 \cdot X_{v2,0} + \beta_2 \cdot X_{v2,1} + \beta_3 \cdot X_{v2,2} + \beta_{12} \cdot X_{v2,0} \cdot X_{v2,1} + \beta_{13} \cdot X_{v2,0} \cdot X_{v2,2} + \beta_{123} \cdot X_{v2,0} \cdot X_{v2,1} \cdot X_{v2,2}$$

$$yr_{62} := \gamma_{12} \cdot X_{v2,0} \cdot X_{v2,1} (X_{v2,0} - X_{v2,1}) + \gamma_{13} \cdot X_{v2,0} \cdot X_{v2,2} (X_{v2,0} - X_{v2,2}) + \gamma_{23} \cdot X_{v2,1} \cdot X_{v2,2} (X_{v2,1} - X_{v2,2})$$

$$yr_6 := yr_{61} + yr_{62}$$

$$yr_6 = 3.3$$

Коефіцієнти α та значення ξ для 4 дослідів

$$\alpha_1 := X_{v0,0} \cdot (2 \cdot X_{v0,0} - 1)$$

$$\alpha_1 = 0.228$$

$$\alpha_2 := X_{v0,1} \cdot (2 \cdot X_{v0,1} - 1)$$

$$\alpha_2 = -0.112$$

$$\alpha_3 := X_{v0,2} \cdot (2 \cdot X_{v0,2} - 1)$$

$$\alpha_3 = 0$$

$$\alpha_{12} := 4X_{v_0,0} \cdot X_{v_0,1}$$

$$\alpha_{12} = 0.884$$

$$\alpha_{13} := 4X_{v_0,0} \cdot X_{v_0,2}$$

$$\alpha_{13} = 0$$

$$\alpha_{23} := 4X_{v_0,2} \cdot X_{v_0,1}$$

$$\alpha_{23} = 0$$

$$\alpha_i := \alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2$$

$$\alpha_i = 0.064$$

$$\alpha_{ii} := \alpha_{12}^2 + \alpha_{13}^2 + \alpha_{23}^2$$

$$\alpha_{ii} = 0.782$$

$$\xi_4 := (\alpha_i) + (\alpha_{ii})$$

$$\xi_4 = 0.847$$

Коефіцієнти α та значення ξ для 5 дослідів

$$\alpha_1 := X_{v_1,0} \cdot (2 \cdot X_{v_1,0} - 1)$$

$$\alpha_1 = -0.112$$

$$\alpha_2 := X_{v_1,1} \cdot (2 \cdot X_{v_1,1} - 1)$$

$$\alpha_2 = 0.228$$

$$\alpha_3 := X_{v_1,2} \cdot (2 \cdot X_{v_1,2} - 1)$$

$$\alpha_3 = 0$$

$$\alpha_{12} := 4X_{v_1,0} \cdot X_{v_1,1}$$

$$\alpha_{12} = 0.884$$

$$\alpha_{13} := 4X_{v_1,0} \cdot X_{v_1,2}$$

$$\alpha_{13} = 0$$

$$\alpha_{23} := 4X_{v_1,2} \cdot X_{v_1,1}$$

$$\alpha_{23} = 0$$

$$\alpha_i := \alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2$$

$$\alpha_i = 0.064$$

$$\alpha_{ii} := \alpha_{12}^2 + \alpha_{13}^2 + \alpha_{23}^2$$

$$\alpha_{ii} = 0.782$$

$$\xi_5 := (\alpha_i) + (\alpha_{ii})$$

$$\xi_5 = 0.847$$

Коефіцієнти α та значення ξ для 6 дослідів

$$\alpha_1 := X_{v_2,0} \cdot (2 \cdot X_{v_2,0} - 1)$$

$$\alpha_1 = 0.228$$

$$\alpha_2 := X_{v_2,1} \cdot (2 \cdot X_{v_2,1} - 1)$$

$$\alpha_2 = 0$$

$$\alpha_3 := X_{v_2,2} \cdot (2 \cdot X_{v_2,2} - 1)$$

$$\alpha_3 = -0.112$$

$$\alpha_{12} := 4X_{v_2,0} \cdot X_{v_2,1}$$

$$\alpha_{12} = 0$$

$$\alpha_{13} := 4X_{v2,0} \cdot X_{v2,2}$$

$$\alpha_{13} = 0.884$$

$$\alpha_{23} := 4X_{v2,2} \cdot X_{v2,1}$$

$$\alpha_{23} = 0$$

$$\alpha_i := \alpha_{12}^2 + \alpha_{13}^2 + \alpha_{23}^2$$

$$\alpha_i = 0.064$$

$$\alpha_{ii} := \alpha_{12}^2 + \alpha_{13}^2 + \alpha_{23}^2$$

$$\alpha_{ii} = 0.782$$

$$\xi_6 := (\alpha_i) + (\alpha_{ii})$$

$$\xi_6 = 0.847$$

Розрахуємо значення критерію Стюдента:

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

$$tr_4 := \frac{|y_4 - y_{r4}| \cdot \sqrt{r}}{S_{02} \cdot \sqrt{1 + \xi_4}} \text{ розраховане значення критерію Стюдента для 4 дослідів}$$

$$tr_4 = 0.023$$

$$tr_5 := \frac{|y_5 - y_{r5}| \cdot \sqrt{r}}{S_{02} \cdot \sqrt{1 + \xi_5}} \text{ розраховане значення критерію Стюдента для 5 дослідів}$$

$$tr_5 = 0.034$$

$$tr_6 := \frac{|y_6 - y_{r6}| \cdot \sqrt{r}}{S_{02} \cdot \sqrt{1 + \xi_6}} \text{ розраховане значення критерію Стюдента для 6 дослідів}$$

$$tr_6 = 1.961$$

$$Adekvatnist := \begin{cases} 1 & \text{if } \begin{cases} tr_4 < tt \\ tr_5 < tt \\ tr_6 < tt \end{cases} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$Adekvatnist = 1$$

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 8

- 1) У чому суть методу симплексних решіток?
- 2) Які особливості планування експерименту для вирішення задач на діаграмах склад-властивість?
- 3) Як складаються симплекс – решітчасті плани Шеффе?

9. ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЖИМУ РОБОТИ РЕАКТОРА

Практична робота № 9

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.

9.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

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

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

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

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

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

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

9.1.1 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. Блок-схема алгоритму мінімізації функції $f(x)$ на відрізку $[a, b]$ наведена у Додатку В.

9.1.2 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. рис.9.1)

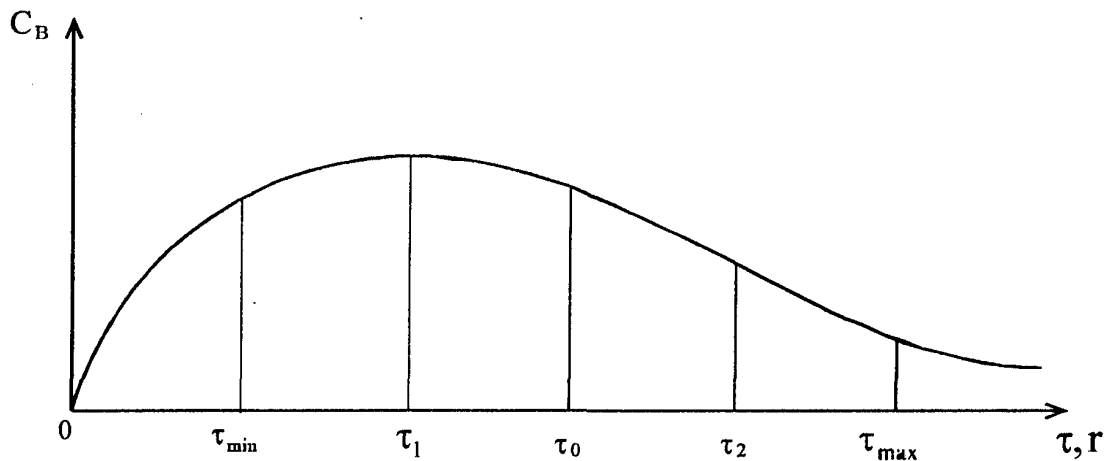


Рис.9.1 – Графік функції $C_B(\tau)$

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 (рис. 9.1) найбільше значення критерію C_B спостерігається у точці τ_1 .

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

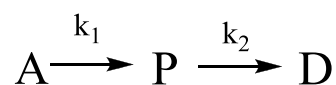
5. Повторюємо процедуру розрахунків для нового інтервалу, починаючи з п.1 доки різниця між значеннями C_B в сусідніх точках не стане меншою за задану точність визначення екстремуму - ε .

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

9.1.3 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 $C_{P0} = C_{D0} = 0$):

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

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

Вихідні дані: $C_{A0} = 5,0$ кмоль/м³; $C_{P0} = C_{D0} = 0$; $k_1 = 5,7 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$, $k_2 = 3,2 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$. Час перебування від 0 до 36000 с (10 год.).

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

Тексти програм мають бути такими, як наведено нижче.

Завдання роботи.

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

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

$$a := 0 \quad b := 180 \quad \varepsilon := 0.01$$

1. Максимізація функції методом сканування:

Крок: $h := 0.1$

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

$$\text{Arg}_1 := T1(a, b, E, h)_0 \quad \text{Func}_1 := T1(a, b, E, h)_1 \quad \text{Iter}_1 := \frac{(b - a)}{h}$$

Максимум заданої функції на заданому інтервалі знаходиться в точці аргументу:

$$\text{Arg}_1 = 1.634$$

Значення максимуму функції:

$$\text{Func}_1 = 234.1$$

Знайдено за наступну кількість ітерацій:

$$\text{Iter}_1 = 1.8 \times 10^4$$

2. Максимізація функції методом діхотомії

```

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

```

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

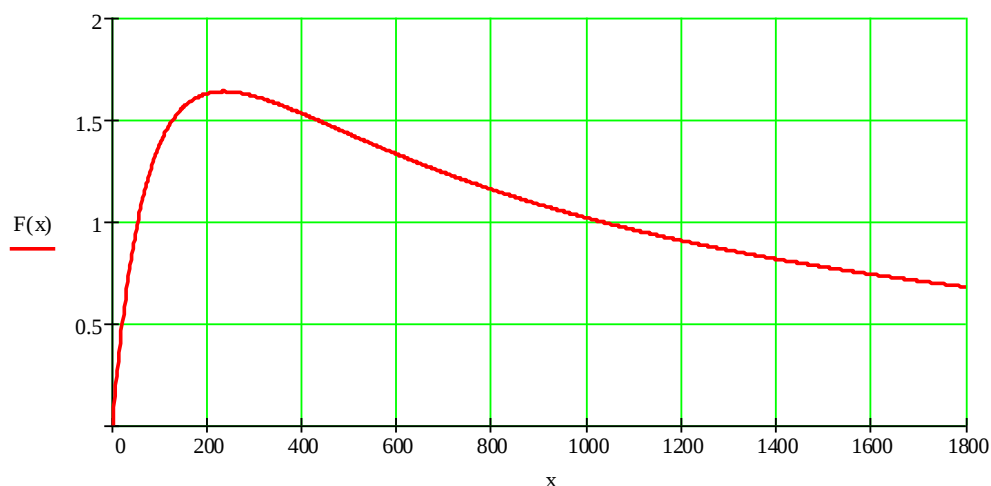
Максимум заданої функції на заданому інтервалі знаходиться в точці аргументу

$$\text{Arg}_2 = 1.634$$

Значення максимуму функції: $\text{Func}_2 = 234.232$

Знайдено за наступну кількість ітерацій: $\text{Iter}_2 = 37$

Графік функції $F(x)$:



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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №9

- 1) *Коли використовуються методи детермінованного одновимірного пошуку?*
- 2) *Яка функція називається унімодальною?*
- 3) *У чому полягає ідея методу сканування?*
- 4) *Дайте характеристику методам виключення інтервалів?*
- 5) *Наведіть приклад використання методу половинного ділення. У чому переваги цього метода?*

ЛІТЕРАТУРА

1. 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.
2. 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.
3. Остапенко, Ю. О. Ідентифікація та моделювання технологічних об'єктів керування : підручник для студ. ВНЗ за напр. "Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології" / Ю. О. Остапенко. - Київ : Задруга, 1999. - 424 с.
4. Математичне моделювання теплофізичних процесів : підручник для здобувачів ступеня бакалавра за спеціальністю 144 "Теплофізика"] / В.К. Щербаков, Н.Л. Лебедь ; Міністерство освіти і науки України, Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського". - Харків : О.В. Бровін, 2020. - 342 сторінки : рисунки (деякі кольорові), кольорові схеми.
5. Моделювання складних систем і процесів : навчальний посібник для студентів старших курсів і аспірантів університетів / В.П. Мельник. - Івано-Франківськ : НАІР, 2018. - 258 с. : іл.
6. Зорін, Юрій Михайлович. Методи та алгоритми обчислень : навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів, які навчаються за спеціальностями "Комп'ютерна інженерія" та "Програмна

-
- інженерія" / Ю.М. Зорін, В.П. Тарасенко ; М-во освіти і науки України, НТУУ "КПІ". - Київ : Видавництво "Корнійчук", 2016. - 168 с.
7. Математичні методи моделювання : навчальний посібник / О.П. Чорний [та ін.] ; загальна редакція : О.П. Чорний. - Кременчук : О.В. Щербатих, 2016. - 232 с. : іл., табл.
 8. Жученко, Анатолій Іванович. Оцінювання параметрів та перевірка статистичних гіпотез. Теорія та практика роботи з MathCAD, MatLab, MS Excel : навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів, які навчаються за спеціальністю "Автоматизоване управління технологічними процесами" / А.І. Жученко, Л.Д. Ярошук ; М-во освіти і науки, молоді та спорту України, НТУУ "КПІ". - Київ : НТУУ "КПІ", 2012. - 154 с.
 9. Вступ до планування оптимального експерименту : навч. посіб. для студ. вищ. навч. закл., які навч. за напрямом підготовки "Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології" / Г.О. Статюха, Д.М. Складанний, О.С. Бондаренко ; Мін-во освіти і науки, молоді та спорту України, НТУУ "КПІ". - Київ : НТУУ "КПІ", 2011. - 124 с.
 10. Методи оптимізації в прикладах і задачах : навчальний посібник для вищих навчальних закладів/ Ю.М. Нефьодов, Т.Ю. Балицька ; Міністерство освіти і науки України ; Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля. - Київ : Кондор, 2018. - 324 с. : схем.
 11. 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. : іл.
 12. Методи оптимізації та моделювання : навчальний посібник / С. В. Панченко, М. П. Медиченко, В. П. Лисечко ; Міністерство освіти і науки України, Українська державна академія залізничного транспорту. - Харків: Укр ДАЗТ, 2015. Ч.1. – 128 с., рис. 35, табл. 45. ISBN 978-617-654-023-6

ДОДАТКИ

Додаток А

Короткі відомості про середовище Mathcad

Mathcad – це інтегроване середовище для рішення різноманітних математичних задач. Основні функціональні компоненти Mathcad наведені на рис. А.1.

Mathcad має ієрархічну систему меню, що складається з головного меню і системи падаючих, спливаючих і контекстно-залежних меню (підменю). Після запуску система Mathcad готова до роботи.

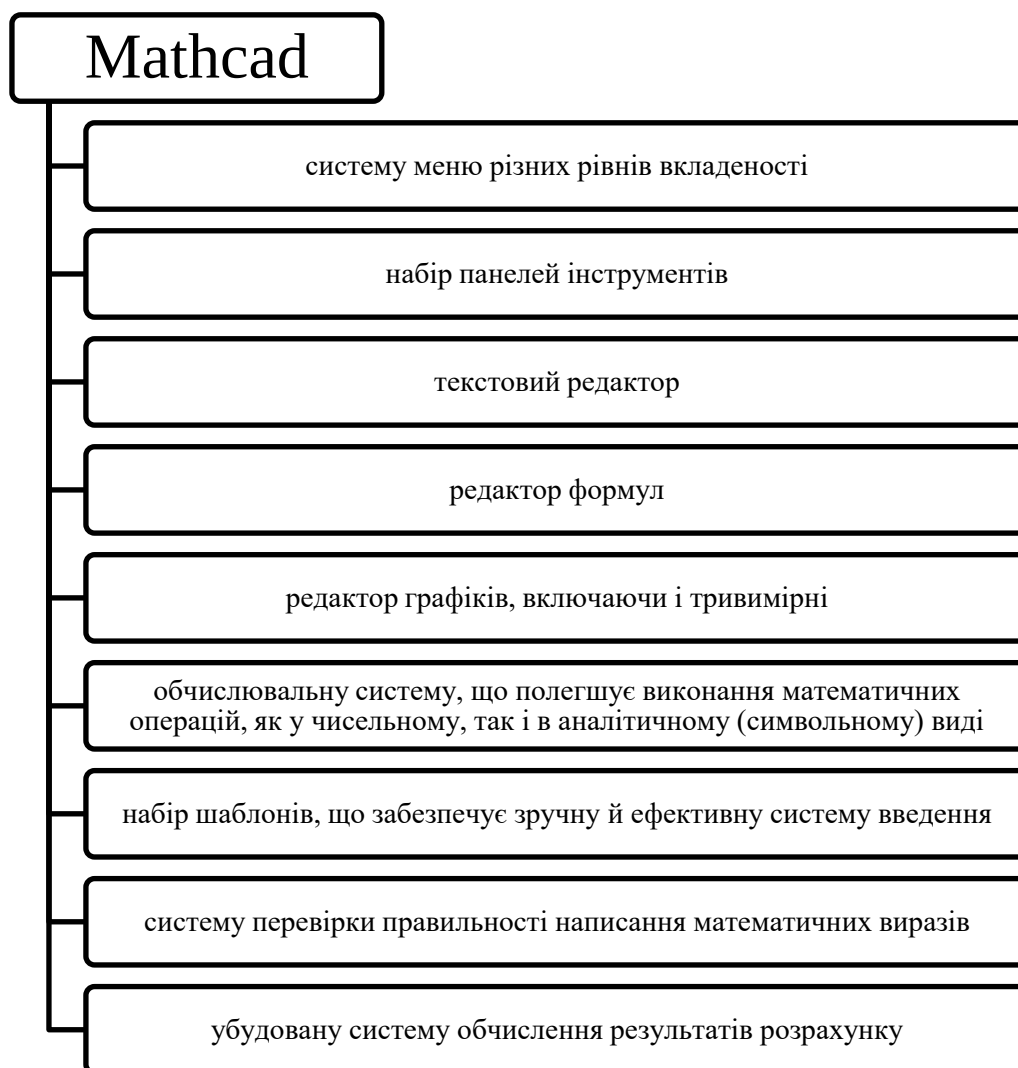


Рис. А.1 – Основні функціональні компоненти Mathcad

Кожний документ у Mathcad складається з окремих *блоків* різного типу: тексти (коментарі), формули, графіки, таблиці і т.д. Блок займає на робочому листі визначену область прямокутної форми. Розташування блоків у документі, крім текстового, має принципове значення. Виконання розрахунків у системі Mathcad відбувається з ліва на право, а потім згори до низу у суворій послідовності. Тому блоки не повинні перетинатися і мають бути розташовані у послідовності, яка необхідна для виконання розрахунків. При конструюванні блоків використовують три убудованих редактори - текстовий, формульний і графічний. Розрізняють:

- 1) *математичну область*, яка містить математичний вираз чи графік. Вона є робочою; це означає, що будь-яка зміна, зроблена в ній, відіб'ється на всіх інших математичних областях, розташованих нижче в робочому документі;
- 2) *текстова область* - це прямокутна область, зарезервована для розміщення тексту. Вона може мати довільні розміри і розташовуватися в будь-якій місці робочого документа. Текстові області використовуються для коротких пояснень. Текст у робочих документах може бути присутнім у двох формах: у виді текстових абзаців і текстових областей. Вибір придатного варіанта залежить від кількості тексту і від його бажаного представлення;
- 3) *текстовий абзац* – область, яка розташовується по всій ширині сторінки робочого документа і зарезервована для розміщення тексту

Алфавіт системи Mathcad містить: рядкові і прописні букви латинського алфавіту; рядкові і прописні букви грецького алфавіту; арабські цифри від 0 до 9; системні змінні; оператори; імена убудованих функцій; спецзнаки; рядкові і прописні букви російського алфавіту (при роботі з русифікованими документами).

До укрупнених елементів системи відносяться типи даних, оператори, функції користувача і керуючі структури. До типів даних відносяться числові константи, звичайні і системні змінні, масиви (вектори

і матриці) і дані файлового типу.

Для присвоєння значень змінним, константам та функціям у системі використовується символ $:=$ (оператор присвоєння). При цьому ліворуч від оператора присвоєння ($:=$) знаходиться вираз якому присвоюється значення, а праворуч – вираз, що треба присвоїти (наприклад, $x := 4$, $Y := x^2 + 3x + 5$). Для отримання результату розрахунку необхідно записати ім'я змінної чи функція та поставити знак $=$ (дорівнює) після нього. Mathcad автоматично виконає розрахунок якщо ви клацнете мишею поза межами блоку або виберете команду *Розрахувати* на панелі керування.

Mathcad прочитує документ двічі, рухаючись щораз з ліва на право і зверху вниз. При першому проході виконуються всі дії, запропоновані глобальним оператором присвоювання $\equiv$ (три риси). При другому виконуються всі дії, запропоновані локальним оператором присвоювання $:=$ (двокрапка + дорівнює), і відображаються необхідні результати обчислень.

При виникненні помилки, місце її можливого знаходження виділяється червоним кольором. Щоб дізнатися про характер помилки необхідно навести курсор миші на блок в якому вона виникла. При цьому з'явиться спливаюча підказка.

Кожен вираз має *точку прив'язки*. Mathcad використовує ці точки, щоб визначити порядок проходження виразів.

Далі пояснимо деякі визначення, що використовуються в середовищі Mathcad.

Операнд – число чи вираз, на яке діє оператор.

Функція - вираз, відповідно до якого проводяться деякі обчислення з його аргументами і визначається його числове значення. Функції в Mathcad можуть бути убудованими і визначеними користувачем.

Для того щоб визначити функцію, потрібно: ввести в робочий

документ ім'я функції і ліву круглу дужку; ввести список аргументів, відокремлених один від одного комами, і закінчити його правою круглою дужкою; увести двокрапку, що приведе до появи знака присвоювання $:=$ і наступного за ним поля введення; надрукувати в полі введення (у правій частині) вираз, що відповідає даній функції.

Усі змінні, які використовуються у виразі, що записаний в полі введення, повинні бути визначені заздалегідь або входити в список аргументів. У іншому випадку змінні, що не мають значення, будуть відзначені на екрані дисплея червоним кольором.

Константами - називають поймаєменовані об'єкти, що зберігають деякі значення, які не можуть бути змінені. Числові константи задаються за допомогою арабських цифр, десяткової крапки (а не коми) і знака - (мінус).

Змінні є поймаєменованими об'єктами, що мають деяке значення, здатне змінюватися по ходу виконання програми.

Імена констант, змінних і інших об'єктів називають *ідентифікаторами*. Тип змінної визначається її значенням; змінні можуть бути *числовими, строковими, символьними* і т.д.

Ідентифікатори в системі Mathcad можуть мати практично будь-яку довжину, у них входять будь-які латинські і грецькі літери, а також цифри. Однак починатися ідентифікатор може тільки з літери і не повинний містити пробілів. Не можна використовувати для ідентифікаторів знаки операторів арифметичних дій. Рядкові і прописні літери в Mathcad розпізнаються як різні символи (наприклад, x та X). Ідентифікатори повинні бути унікальними, тобто не повинні повторюватись в межах одного документу. Mathcad містить також деякі системні змінні, що мають визначені системою початкові значення. Значення системних змінних можна при необхідності змінити шляхом присвоювання їм нових значень.

Оператори являють собою елементи мови, за допомогою яких можна створювати математичні вирази.

Робочі файли Mathcad мають розширення *.mcd і можуть бути відкриті тільки в середовищі Mathcad тієї версії, в якій були створені чи в новішій версії Mathcad. Для можливості відкриття вашого файлу у попередніх версіях Mathcad необхідно обрати пункт меню *File (Файл) → Save as... (Зберегти як...)*. У діалоговому вікні що з'явиться у полі *Save as type: (Тип файлу:)* вкажіть версію Mathcad в якій необхідно буде відкрити файл (наприклад, *Mathcad 2000 Worksheet (*.mcd)*). Для можливості перегляду файлів, створених у середовищі Mathcad, на комп'ютері де Mathcad не встановлено, необхідно виконати дії описані вище, але у полі *Save as type: (Тип файлу:)* вказати *Rich Text Format File (*.rtf)*. Після цього файл можна переглядати у текстовому редакторі (наприклад, MS Word), але редагування файлу та зміни будуть неможливі. Тому перед цим треба обов'язково зберігати файл у форматі Mathcad при потребі подальшої роботи з ним.

У версії Mathcad 2000/2001 і вище було введено ряд нових функцій регресії:

- *expfit(VX, VY, Vg)* - повертає вектор, що містить коефіцієнти $(a, b, c,)$ апроксимуючого виразу виду $a \cdot e^{(b \cdot x) + c}$, графік якого кращим чином наближається до точок, координати яких зберігаються у векторах *VX* та *VY* (вектор *Vg* містить перше наближене рішення);
- *lgffit(VX, VY, Vg)* - те ж, але для виразу $a / (1 + b \cdot e^{(-c \cdot x)})$;
- *logfit(VX, VY)* - те ж, але для виразу $a \cdot \ln(x + b) + c$ (початкового наближення не);
- *medfit(VX, VY)* - те ж, але для виразу $a + bx$ (початкового наближення не потрібно);
- *pwrfit(VX, VY, Vg)* - те ж, але для виразу $a \cdot x^b + c$ (вектор *Vg* містить перше наближення до рішення);
- *sinfit(VX, VY, Vg)* - те ж, але для виразу $a \cdot \sin(x + b) + c$.

Цілеспрямоване введення цих функцій викликає легкий сумнів. За допомогою алгоритму реалізації нелінійної регресії загального виду можна легко здійснити регресію будь-якого частинного виду, у тому числі і всіх тих видів, які реалізуються приведеними вище функціями. Незавжди це зробити і за допомогою функції *Minerror*. Тим не менше якщо користувач потребує данні види регресії, то до його послуг тепер є і ряд функцій, які можна застосувати без «довгих роздумів».

Програмний блок в системі Mathcad являє собою самостійний модуль, який виділяється в тексті документу жирною вертикальною рисою. Модуль може себе вести як безіменна функція без параметрів та повертати результат (див. приклад обчислення квадратного кореня з числа 12). Програмний модуль може виконувати і роль тіла функції користувача з іменем та параметрами (див. приклад для обчислення функції FP).

ПРОГРАМНІ БЛОКИ

$x := 25$ Задане значення x

$\sqrt{x} = 5$ Обчислений квадратний корінь з x

$\left| \begin{array}{l} x \leftarrow 12 \\ \sqrt{x} \end{array} \right| = 3.464$ Локально задане $x=12$ і обчислений квадратний корінь з $x=12$

$x = 25$ За межами програмного блоку x зберегло значення 25

Приклад завдання функції звичним способом:

$$F(x, y, z) := \frac{x}{x + y \cdot z} + \frac{y}{x + y \cdot z} + \frac{z}{x + y \cdot z}$$

$$F(2, 3, 5) = 0.588 \quad F(1, 5, 3) = 0.563$$

Програмним блоком:

$$FP(x, y, z) := \left| \begin{array}{l} a \leftarrow x + y \cdot z \\ \frac{x + y + z}{a} \end{array} \right|$$

$$FP(2,3,5) = 0.588 \quad FP(1,5,3) = 0.563$$

Неважко помітити, що набір інструкцій для створення програмних модулів досить обмежений і містить наступні елементи наведені на рис. А.2.

Add line	•створює та при необхідності подовжує жирну вертикальну риску, праворуч від якої у місцях вводу виконується запис програмного блоку
←	•символ локального (в тілі модуля) присвоєння
if	•умовна інструкція
otherwise	•інструкція іншого вибору (зазвичай застосовується з if)
for	•інструкція задання циклу з фіксованим числом повторень
while	•інструкція задання циклу, який діє поки виконується деяка умова
break	•інструкція переривання
continue	•інструкція продовження
return	•інструкція повернення
on error	•інструкція обробки помилок

Рис.А.2 – Набір інструкцій для створення програмних модулів

Інструкція додавання ліній у модуль Add Line

Інструкція Add Line виконує функції розширення програмного блоку. Розширення фіксується подовженням вертикальної риси програмних блоків або їхнім деревоподібним розширенням. Завдяки цьому в принципі можна створювати як завгодно більші програми.

Оператор внутрішнього присвоювання

Оператор ← виконує функції внутрішнього (локального) присвоювання. Наприклад, вираження $x \leftarrow 123$ привласнює змінної x значення 123. Локальний характер присвоювання означає, що таке

значення змінної x зберігається тільки в тілі програмного модуля. За межами тіла програми значення змінної x може бути невизначеним або рівним значенню, що задається поза програмним блоком операторами локального $(:=)$ або глобального $(\equiv)$ присвоювання.

Примітка. Не варто плутати оператор внутрішнього присвоювання $\leftarrow$ з оператором символічного виводу $\rightarrow$, у якого стрілка спрямована в іншу сторону. Ці оператори вирішують зовсім різні завдання.

Умовна інструкція if

Інструкція if дозволяє будувати умовні вираження. Вона задається у вигляді:

Вираження if Умова

Якщо Умова виконується, то повертається значення Вираження, інакше - 0. Разом із цією інструкцією часто використовуються інструкції переривання break й іншого вибору otherwise.

Інструкція організації циклу for

Інструкція for служить для організації циклів із заданим числом повторень. Вона записується у вигляді:

for Var $\in$ Nmin .. Nmax

Цей запис означає, що вираження, поміщене в розташоване нижче місце уведення, буде виконуватися для значень змінної Var, що міняються від Nmin до Nmax із кроком +1. Змінну лічильника Var можна використати у виразі, що виконується.

Інструкція організації циклу while

Інструкція while служить для організації циклів, що діють доти, поки виконується деяка умова. Вона записується у вигляді:

while Умова

В розташоване нижче місце уведення записується вираження, яке виконується.

Інструкція otherwise

Інструкція іншого вибору *otherwise* звичайно використовується разом з інструкцією *if*. Це пояснює наступна програмна конструкція:

$$F(x) := \begin{cases} 1 & \text{if } x > 0 \\ -1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

Тобто функція $F(x)$ повертає 1, якщо $x > 0$ та -1 у всіх інших випадках.

Інструкція переривання *break*

Інструкція *break* викликає переривання виконання програми. Найчастіше ця інструкція використовується разом з умовною інструкцією *if* й інструкціями циклів *while* й *for*, забезпечуючи перехід у кінець тіла циклу.

Інструкція *continue*

Інструкція *continue* використовується для продовження роботи після переривання програми. Вона також найчастіше використовується разом з інструкціями циклів *while* й *for*, забезпечуючи повернення в точку переривання й продовження обчислень.

Інструкція *return*

Особлива інструкція *return* перериває виконання програми й повертає значення операнда, що розташований слідом за нею. Наприклад, у наведеному нижче випадку буде повертатися значення 0 при $x < 0$.

return 0 if $x < 0$

Інструкція *on error* і функція *error*

Інструкція *on error* дозволяє створювати процедури обробки помилок. Ця інструкція задається у вигляді:

Вираження_1 on error Вираження_2

Якщо при виконанні Вираження_1 виникає помилка, то виконується Вираження_2. Для обробки помилок корисна також функція *error* (S), що, будучи поміщеною в програмний модуль, при виникненні помилки виводить спливаючу підказку з повідомленням, що зберігається в символьній змінній S.

Зрозуміло, завдання, описані вище, можуть вирішуватися в системі Mathcad і без використання в явному виді програмних засобів. Однак ці засоби нерідко полегшують рішення складних завдань, особливо коли є опис їхньої програмної реалізації на якій-небудь мові програмування. У цьому випадку нескладно перевести реалізацію рішення завдання із цієї мови на мову програмування системи.

Взагалі треба відзначити, що проблема включення в документи Mathcad програмних блоків вирішені добірно й красиво - такі блоки часом просто прикрашають документи й дають можливість користуватися всіма способами не тільки математично орієнтованої вхідної мови Mathcad, але й класичного програмування.

Багато цікавих і повчальних прикладів завдання й застосування програмних модулів можна знайти в «швидких шпаргалках» (QuickSheets) центра ресурсів системи. Не можна не відзначити, що характер завдання програмних модулів в Mathcad досить удалий: модулі прекрасно вписуються в документи, виглядають просто й природно, чого не можна сказати про програми на звичайних мовах програмування.

У принципі в Mathcad 2001i/11 є можливість включення в систему функцій користувача, написаних мовою C або C++. Однак ситуація із цією можливістю дуже нагадує нашу крилату фразу «за що боролися, на те й напорілися», адже зміст розробки систем класу Mathcad і полягає в тім, щоб позбавити користувача від програмування на складних мовах високого рівня. У зв'язку із впровадженням у систему Mathcad основних програмних конструкцій потреба в програмуванні мовою C++ практично відпала. Точніше, вона стала прерогативою «фанатів» системного програмування.

Нарешті, слід зазначити ще одну важливу можливість - застосування відкомпільованих додаткових бібліотек, що розширюють можливості ядра системи, а також спеціальних модулів, що виконуються, які обновляють версії системи. Їх можна одержати в розроблювача через Інтернет або

електронну пошту. Ці модулі звичайно зберігаються в основній папці Mathcad і запускаються як самостійні програми. Після однократного виконання вони модифікують поточну версію Mathcad, перетворюючи її в чергову, могутнішу.

Аж до появи останніх версій системи Mathcad можливості програмування в них були вкрай обмеженими. Фактично система Mathcad допускає побудову лише лінійних програм, реалізуючи функціональне програмування, в основі якого лежить поняття функції. Функція *if* і ранжирувані змінних в окремих випадках могли замінити умовні вирази й цикли, але з істотними обмеженнями. Була відсутня можливість створення завершених програмних модулів.

Можливість завдання *програмних блоків (модулів)* з'явилася у версії Mathcad PLUS 6.0 й у розширеному варіанті підтримується у версіях Mathcad починаючи з 8.0/2000. Засоби програмування зосереджені в палітрі програмних елементів, показані на рис. А.3.

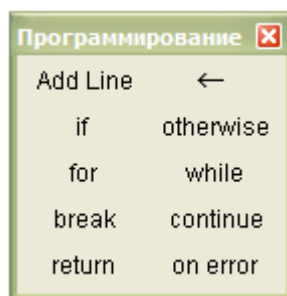


Рис.А.3 – Елементи для створення програмних модулів

Додаток Б

Статистичні критерії

Таблиця Б.1

Критерій Кохрена (при $q=0,05$)

f2 \ f1	1	2	4	4	5	6	7	8	9	10	∞
2	0.9985	0.9750	0.9392	0.9057	0.8584	0.8534	0.8332	0.8159	0.8100	0.7880	0.500
3	0.9669	0.8709	0.7977	0.7457	0.7071	0.6771	0.6530	0.6333	0.6167	0.6025	0.3333
4	0.9065	0.7679	0.6841	0.6287	0.5895	0.5598	0.5365	0.5175	0.5017	0.4884	0.2500
5	0.8412	0.6838	0.5981	0.5440	0.5063	0.4783	0.4564	0.4387	0.4241	0.4118	0.2000
6	0.7808	0.6161	0.5321	0.4803	0.4447	0.4184	0.3980	0.3817	0.3682	0.3568	0.1667
7	0.7271	0.5612	0.4800	0.4807	0.3907	0.3726	0.3726	0.3555	0.3384	0.3254	0.1429
8	0.6788	0.5157	0.4377	0.3910	0.3595	0.3362	0.3185	0.3043	0.2926	0.2829	0.1250
9	0.6385	0.4775	0.4027	0.3584	0.3286	0.3067	0.2901	0.2768	0.2659	0.2568	0.1111
10	0.6020	0.4459	0.3733	0.3311	0.3029	0.2823	0.2666	0.2541	0.2439	0.2353	0.1000
12	0.5410	0.3924	0.2880	0.2624	0.2439	0.2299	0.2187	0.2098	0.2020	0.2020	0.0833
15	0.4708	0.3346	0.278	0.2419	0.2195	0.2034	0.1911	0.1815	0.1736	0.1671	0.0667
20	0.3894	0.2705	0.2205	0.1921	0.1735	0.1602	0.1501	0.1422	0.1357	0.1303	0.0500
24	0.3434	0.2354	0.1907	0.1656	0.1493	0.1374	0.1286	0.1216	0.1160	0.1113	0.0417
30	0.2929	0.1980	0.1593	0.1377	0.1237	0.1137	0.1061	0.1002	0.0958	0.0921	0.0333
40	0.2370	0.1576	0.1259	0.1082	0.0968	0.0887	0.0827	0.0780	0.0745	0.0713	0.0250
50	0.1737	0.1131	0.089	0.0766	0.0766	0.0623	0.0583	0.0552	0.0520	0.0497	0.0167
120	0.0998	0.0632	0.0496	0.0419	0.0371	0.0337	0.0312	0.0292	0.0297	0.0266	0.0083
∞	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Процентні точки розподілення Стюдента

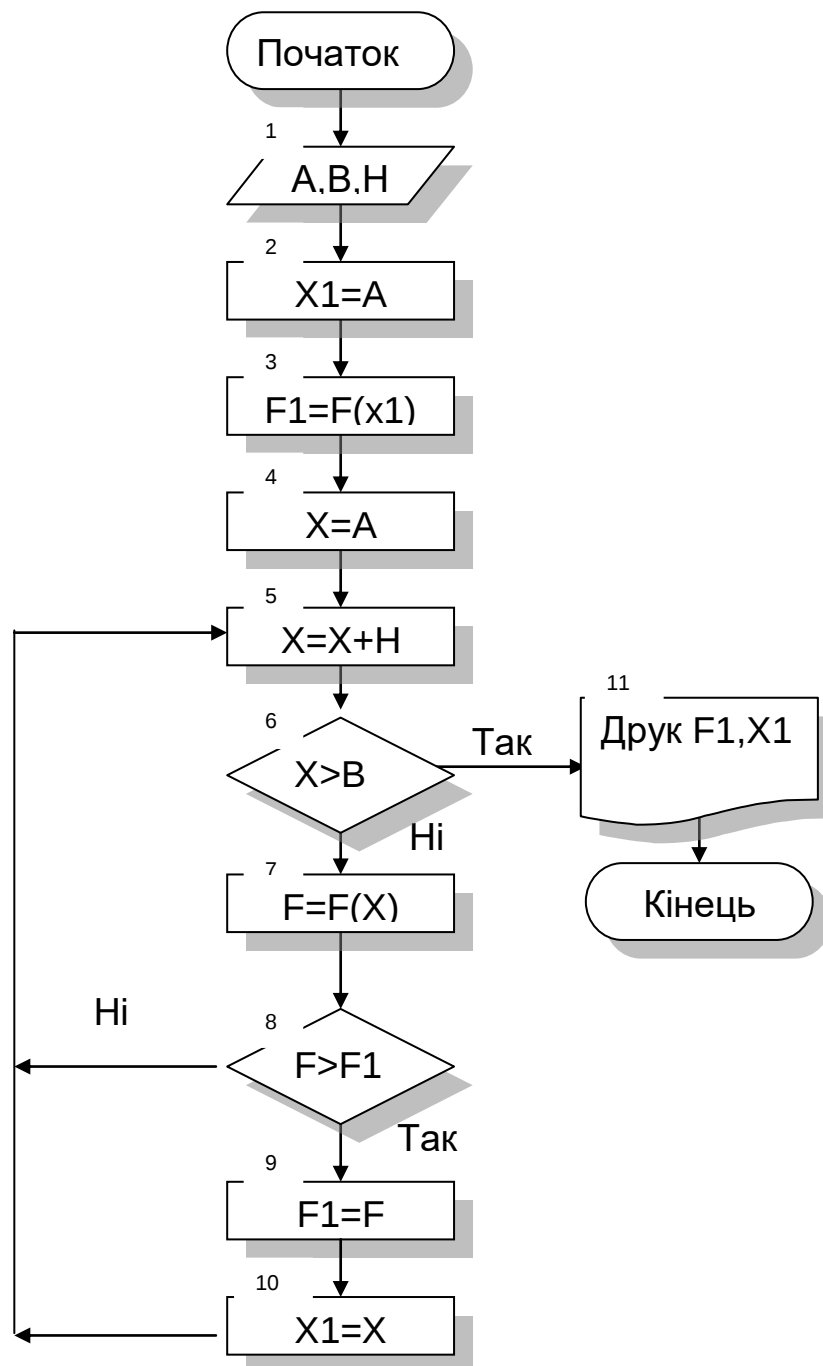
$f_0 \backslash q$	10%	5%	2%	1%
1	6.31	12.71	31.82	63.66
2	2.92	4.30	6.96	9.92
3	2.35	3.18	4.54	5.84
4	2.13	2.78	3.75	4.60
5	2.02	2.57	3.36	4.03
6	1.94	2.45	3.14	3.71
7	1.89	2.36	3.00	3.50
8	1.86	2.31	2.90	3.36
9	1.83	2.26	2.82	3.25
10	1.81	2.23	2.76	3.17
11	1.80	2.20	2.72	3.11
12	1.78	2.18	2.68	3.05
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

Критерій Фішера при $q=0.05$

$f_1 \backslash f_2$	1	2	3	4	5	6	8	12	24	∞
1	161.46	199.50	215.70	224.60	230.20	234.66	238.96	243.90	249.00	254.30
2	18.51	19.06	19.16	19.25	19.30	19.33	19.37	19.41	19.45	19.50
3	10.13	9.55	9.28	9.12	9.61	8.94	8.84	8.74	8.64	8.53
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.64	5.91	6.77	5.63
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.65	4.95	4.82	4.68	4.53	4.33
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.16	4.60	3.84	3.67
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.72	3.57	3.41	3.23
8	5.32	4.46	4.67	3.84	3.69	3.58	3.44	3.28	3.12	2.98
9	5.12	4.26	3.86	3.63	3.48	3.37	3.23	3.67	2.90	2.71
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.67	2.91	2.74	2.54
11	4.84	3.98	3.59	3.36	3.20	3.09	2.95	2.79	2.61	2.40
12	4.75	3.88	3.49	3.26	3.11	3.00	2.85	2.69	2.50	2.30
13	4.67	3.80	3.41	3.18	3.02	2.92	2.77	2.60	2.42	2.21
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.70	2.53	2.35	2.13

Додаток В

Блок-схема алгоритму мінімізації функції $f(x)$ методом сканування



Додаток Г

Блок-схема алгоритму мінімізації функції $f(x)$ методом дихотомії

