

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

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ ПРАКТИЧНІ ЗАНЯТТЯ

Навчальний посібник

Рекомендовано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
як навчальний посібник для здобувачів ступеня бакалавра
за освітньою програмою «Технічні та програмні засоби автоматизації»
спеціальності 151 «Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології»

Укладач: О. О. Квітка

Електронне мережне навчальне видання

Київ
КПІ ім. Ігоря Сікорського
2023

Рецензент *Джигирей І.М.*, канд. техн. наук, доцент,
доцент кафедри штучного інтелекту Навчально-наукового інституту
прикладного системного аналізу НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського»

Відповідальний
редактор *Складанний Д.М.*, канд. техн. наук, доцент

*Гриф надано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
(протокол № 4 від 19.01.2023 р.)
за поданням Вченої ради інженерно-хімічного факультету
(протокол № 11 від 28.11.2022 р.)*

Навчальний посібник розроблено відповідно до програми підготовки здобувачів ступеня бакалавр за спеціальністю 151 «Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології». У навчальному посібнику наведено завдання для практичних робіт з даної дисципліни. Видання забезпечує вивчення студентами відповідного теоретичного матеріалу та підготовку до виконання практичних робіт. Також воно буде корисним для самостійної роботи.

Реєстр. № НП 22/23-335. Обсяг 3,9 авт. арк.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
проспект Перемоги, 37, м. Київ, 03056
<https://kpi.ua>

Свідоцтво про внесення до Державного реєстру видавців, виготовлювачів
і розповсюджувачів видавничої продукції ДК № 5354 від 25.05.2017 р.

© КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023

ЗМІСТ

Передмова	5
<i>Практична робота №1</i>	6
Використання методів інтерполяції та апроксимації для побудови моделей.....	6
1. Методи інтерполяції.....	7
2. Метод найменших квадратів.....	11
3. Сплайн-інтерполяція.....	19
Завдання для практичної роботи №1	28
<i>Практична робота №2.....</i>	30
Використання методів розв'язання диференціальних рівнянь.....	30
Чисельні методи розв'язання звичайних диференціальних рівнянь.....	30
1. Постановка задачі.....	30
2. Метод Ейлера.....	31
3. Метод Рунге-Кутти	34
4. Розв'язування систем звичайних диференціальних рівнянь.....	40
Завдання для практичної роботи №2	43
<i>Практична робота №3.....</i>	44
Використання методів чисельного інтегрування та диференціювання для ідентифікації динамічних характеристик.....	44
1. Чисельні методи розв'язання визначених інтегралів.....	44
1.1. Постановка задачі.....	44
1.2. Формула трапецій.....	44
1.3. Формула парабол (Сімпсона).....	46
1.4. Приклади.....	47
2. Чисельне диференціювання	53
Завдання для практичної роботи №3	54
<i>Практична робота №4.....</i>	55
Комп'ютерне моделювання ізотермічних реакторів ідеального змішування та ідеального витиснення безперервної дії	55
1. Реактор ідеального змішування (РІЗ).....	55
2. Реактор ідеального витиснення (РІВ).....	59
Завдання для практичної роботи №4	63
<i>Практична робота №5.....</i>	65
Складання математичних моделей та дослідження технологічних об'єктів керування.....	65
1. Технологічний об'єкт – збірник рідини.....	65
1.1. Збірник рідини як об'єкт керування рівня.....	65
1.2. Рівняння матеріального балансу.....	66
1.3. Лінеаризація та перетворення за Лапласом змінної часу в рівнянні балансу	66
1.4. Передатні функції за каналами збурень і керування	68
Завдання для практичної роботи №5 (частина 1)	69
2. Технологічний об'єкт – парорідинний теплообмінник.....	70
2.1. Парорідинний теплообмінник як технологічний об'єкт керування.....	70
2.2. Рівняння теплового балансу.....	71

2.3. Лінеаризація та перетворення за Лапласом змінної часу в рівняннях балансів	71
2.4. Передатні функції за каналами збурень і керування	73
Завдання для практичної роботи №5 (частина 2)	74
<i>Практична робота №6</i>	76
Складання математичної моделі та дослідження випарного апарату як технологічного об'єкту керування	76
1. Аналіз випарної установки як технологічного об'єкту керування	76
2. Рівняння балансів	77
3. Лінеаризація та перетворення за Лапласом змінної часу у рівняннях балансів	78
4. Передатні функції за каналами збурення і керування	79
Завдання для практичної роботи №6	81
Список рекомендованої літератури.....	83

Передмова

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

Основною метою дисципліни «Комп'ютерне моделювання процесів і систем» є формування у студентів професійних знань і умінь щодо загальних питань використання методів математичного, комп'ютерного моделювання в хімічній інженерії, вироблення здатностей застосовувати методи системного аналізу, математичного моделювання, ідентифікації та числових методів для розроблення математичних моделей технологічних об'єктів та їх систем керування, для аналізу якості їх функціонування із використанням новітніх комп'ютерних технологій. Предметом вивчення дисципліни є поняття, визначення, положення і методи теорії ідентифікації, алгоритмів апроксимації, застосування їх при розв'язанні різноманітних наукових та інженерних задач за допомогою програмних засобів, фізичні та математичні моделі, моделювання теплообмінних апаратів та інших об'єктів ХТП.

Даний навчальний посібник є частиною інформаційно-методичного забезпечення навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання процесів і систем» і розроблений відповідно до програми підготовки бакалаврів спеціальності 151 «Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології». Зазначена дисципліна відноситься до циклу загальної підготовки і є базовою у підготовці бакалаврів вказаної спеціальності.

Метою цього навчального посібника є допомога студентами у підготовці та виконанні практичних робіт з даної дисципліни. З цією метою у кожній практичній роботі, крім завдання, наведено необхідний теоретичний матеріал з відповідними прикладами. Завдяки цьому даний посібник також може бути корисним і для самостійної роботи.

Практична робота №1

Використання методів інтерполяції та апроксимації для побудови моделей.

Теоретичні відомості

При проектуванні комп'ютерно-інтегрованих систем керування різними об'єктами або процесами, в тому числі хіміко-технологічними, достатньо часто застосовуються методи наближення функцій. Задача наближення функції полягає в тому, щоб для деякої функції $f(x)$ (найчастіше ця функція відображує певні експериментальні дані і має табличний вигляд (табл. 1.1)) побудувати деяку функцію $F(x)$, яка може замінити її в розрахунках з необхідною точністю. Точкові значення аргументу x_i , в яких задані значення функції y_i , називаються *вузлами*. Тобто розглядається випадок (рис. 1.1), коли деяка функціональна залежність $y = f(x)$ задається рядом точок (*вузлів*) на площині XOY (нумерація точок загальному випадку може бути довільною), тобто маємо множину пар значень x_i, y_i для $0 \leq i \leq m$.

Таблиця 1.1. Значення функції $y = f(x)$

x	x_0	x_1	x_2	...	x_m
y	y_0	y_1	y_2	...	y_m

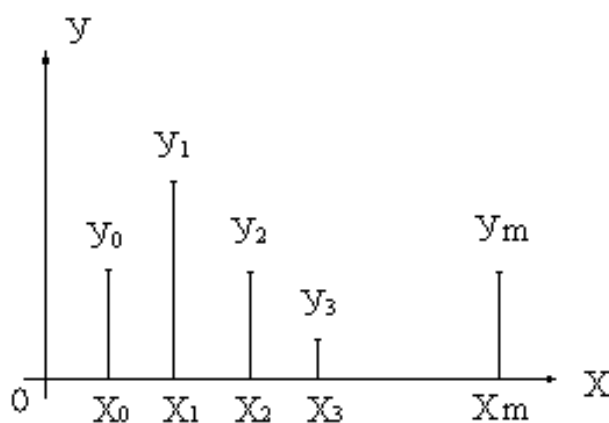


Рис. 1.1 – Функція $y = f(x)$, задана своїми значеннями у вузлах

Найчастіше в якості наближеної функції використовують поліноми виду (1.1):

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

де a_i – невідомі коефіцієнти.

В залежності від того, як сформульовано умову побудови шуканого поліному, можна отримати різні варіанти наближеної функції.

1. Методи інтерполяції

Якщо умовою побудови наближеної функції є збіг її значень з відповідними значеннями вихідної функції у вузлах (1.2), то така функція називається *інтерполуючою*.

$$\begin{cases} P_n(x_0) = y_0, \\ P_n(x_1) = y_1, \\ \dots\dots\dots \\ P_n(x_m) = y_m, \end{cases} \quad (1.2)$$

або:

$$\begin{cases} a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \dots + a_nx_0^n = y_0 \\ a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \dots + a_nx_1^n = y_0 \\ \dots\dots\dots \\ a_0 + a_1x_m + a_2x_m^2 + \dots + a_nx_m^n = y_0 \end{cases}$$

Методи, які застосовують такий підхід до наближення функцій називаються методами *інтерполяції*. **Задача інтерполяції** полягає в тому, щоб знайти якийсь спосіб знаходження значень функції у проміжках між вузлами. Зрозуміло, що за замовчуванням, приймається, що інтерполуюча функція має бути неперервною.

Найпростішим варіантом вирішення задачі інтерполяції є, так звана, **кусково-лінійна інтерполяція** (рис. 1.2). Такий вид інтерполяції полягає в тому, що на кожному окремому інтервалі (x_i, x_{i+1}) функція $f(x)$ наближається лінійною функцією (назвемо її $g_i(x)$), яка проходить через дві точки (x_i, y_i) та (x_{i+1}, y_{i+1}) . Легко перевірити, що

$$g_i(x) = \frac{(x - x_{i+1})}{(x_i - x_{i+1})} \cdot y_i + \frac{(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} \cdot y_{i+1} \quad (1.3)$$

Таким чином, при використанні кусково-лінійної інтерполяції для функції, що задана таблицею, при обчисленні наближеного значення функції $f(x)$ у деякій довільній точці x , яка знаходиться в межах відомого інтервалу $[x_0, x_n]$ дотримуються наступного алгоритму. Спочатку знаходять інтервал (x_i, x_{i+1}) , якому належить точка x , а потім обчислюють наближене значення функції $f(x)$ в цій точці за формулою (1.3).

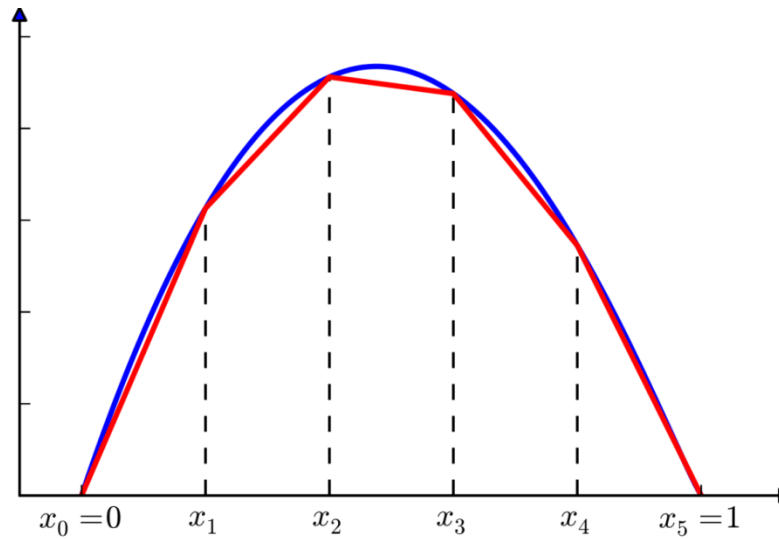


Рис. 1.2 – Приклад кусково-лінійної інтерполяції

Але наближення функцій за допомогою лінійної інтерполяції є достатньо грубим і не завжди задовольняє необхідній точності.

Приклад. Функція задана таблицею 1.2.

Таблиця 1.2. Значення функції $y = f(x)$

x	-3,0	-2,0	-1,0	0,0	1,0	2,0	3,0
y	-62,0	-21,0	-4,00	1,00	6,00	23,0	64,0

Розрахунки наближених значень функції $f(x)$ в довільних точках наявних інтервалів виконані в MS Excel за формулою (1.3):

x	-2,5	-1,7	-0,3	0,5	1,4	2,6
y_y	-41,50	-15,90	-0,50	3,50	12,80	47,60

Формула (1.3)

Результати отримані шляхом кусково-лінійної інтерполяції наведені на рисунку 1.3 (синім кольором позначена вихідна функція, наближені значення, отримані за формулою (1.3) – червоними ромбами).

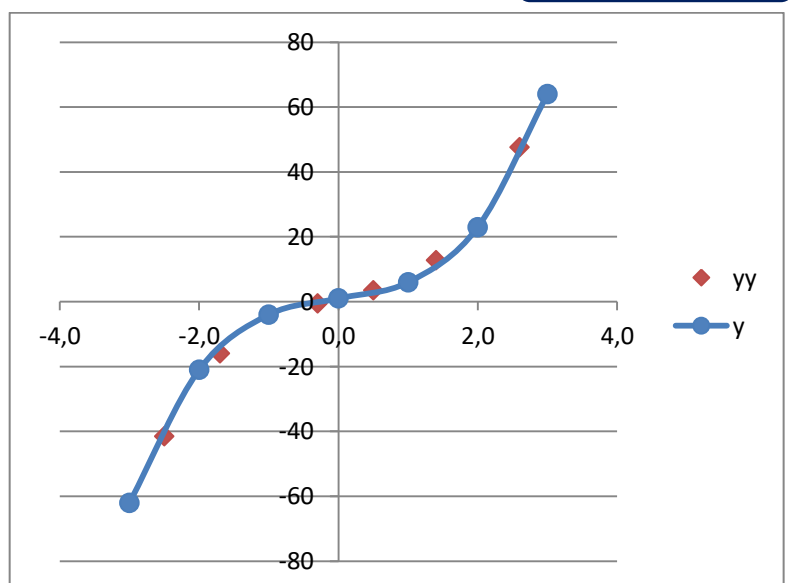


Рис. 1.3 – Приклад кусково-лінійної інтерполяції

Інтерполяційний поліном Лагранжа є найбільш загальною формулою параболічної інтерполяції. Її загальний вигляд такий:

$$\begin{aligned}
 P_n(x) = & y_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)\dots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)\dots(x_0-x_n)} + \\
 & + y_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)\dots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)\dots(x_1-x_n)} + \dots \\
 & \dots + y_i \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)} + \dots \\
 & \dots + y_n \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)(x_n-x_2)\dots(x_n-x_{n-1})}
 \end{aligned} \tag{1.4}$$

або:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)} y_i \tag{1.5}$$

При $n = 1$ формула Лагранжа набуває вигляду:

$$P_1(x) = \frac{x-x_1}{x_0-x_1} y_0 + \frac{x-x_0}{x_1-x_0} y_1 \tag{1.6}$$

Це формула лінійної інтерполяції.

При $n = 2$ отримаємо формулу квадратичної інтерполяції:

$$P_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} y_1 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} y_2 \tag{1.7}$$

Приклад. Об'єм 1 кг газу при $t = 0$ залежно від тиску змінюється відповідно до наведеної таблиці. Необхідно визначити об'єм 1 кг газу при $p = 500$ мм рт.ст.

P , мм рт. ст.	673	473,1	361,6
V , л	60	65	70

Відповідно до формули (1.7) маємо:

$$\begin{aligned}
 P_2(500) = & 60 \frac{(500-473,1)(500-361,6)}{(673-473,1)(673-361,6)} + \\
 & + 65 \frac{(500-673)(500-361,6)}{(473,1-673)(473,1-361,6)} + \\
 & + 70 \frac{(500-673)(500-473,1)}{(361,6-673)(361,6-473,1)} = 64,03
 \end{aligned}$$

Отже, отриманий результат інтерполяції не суперечить вихідній таблиці:

P , мм рт. ст.	673	500	473,1	361,6
V , л	60	64,3	65	70

Таким чином, об'єм 1 кг газу при $p = 500$ мм рт. ст. дорівнює 64,03 л.

Зворотна інтерполяція. Задача зворотної інтерполяції полягає в тому, щоб за заданим значенням функції y визначити відповідне значення аргументу x . Формула Лагранжа в цьому випадку набуває вигляду:

$$x = \sum_{i=0}^n x_i \frac{(y-y_0)(y-y_1)\dots(y-y_{i-1})(y-y_{i+1})\dots(y-y_n)}{(y_i-y_0)(y_i-y_1)\dots(y_i-y_{i-1})(y_i-y_{i+1})\dots(y_i-y_n)} \quad (1.8)$$

Приклад. Задана таблична функція:

x	2	5	9
y	10	20	30

Необхідно визначити, при якому значенні x функція приймає значення $y = 15$.

Формула (1.8) набуває вигляду:

$$P_2(y) = x_0 \frac{(y-y_1)(y-y_2)}{(y_0-y_1)(y_0-y_2)} + x_1 \frac{(y-y_0)(y-y_2)}{(y_1-y_0)(y_1-y_2)} + x_2 \frac{(y-y_0)(y-y_1)}{(y_2-y_0)(y_2-y_1)}$$

Після підстановки вихідних значень маємо:

$$P_2(15) = 2 \cdot \frac{(15-20)(15-30)}{(10-20)(10-30)} + 5 \cdot \frac{(15-10)(15-30)}{(20-10)(20-30)} + 9 \cdot \frac{(15-10)(15-20)}{(30-10)(30-20)} \approx 3.375$$

Реалізація в пакеті MathCad.

В математичному пакеті є своя вбудована функція для процесу інтерполяції: $linterp(x, y, t)$, де x – вектор-значення аргументу, y – вектор-значення функції, t – значення аргументу при яких обраховується функція.

В разі використання лінійної інтерполяції із застосуванням засобів *MathCad*, процес інтерполяції виглядає як показано на рис. 1.4.

$x :=$	$\begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 6 \\ 8 \\ 10 \\ 12 \\ 14 \\ 16 \\ 18 \\ 20 \end{pmatrix}$	$y :=$	$\begin{pmatrix} 2 \\ 7 \\ 3 \\ 6.5 \\ 1 \\ 8.7 \\ 5.7 \\ 0.18 \\ 3.6 \\ -0.67 \end{pmatrix}$	Інтерполяція (лінійна) $n := 10$ $t := 2, 5 \dots 20$ $z := 2 \dots 20$
--------	--	--------	---	--

$Y1(t) := \text{linterp}(x, y, t)$ $Y2(z) := \text{linterp}(x, y, z)$

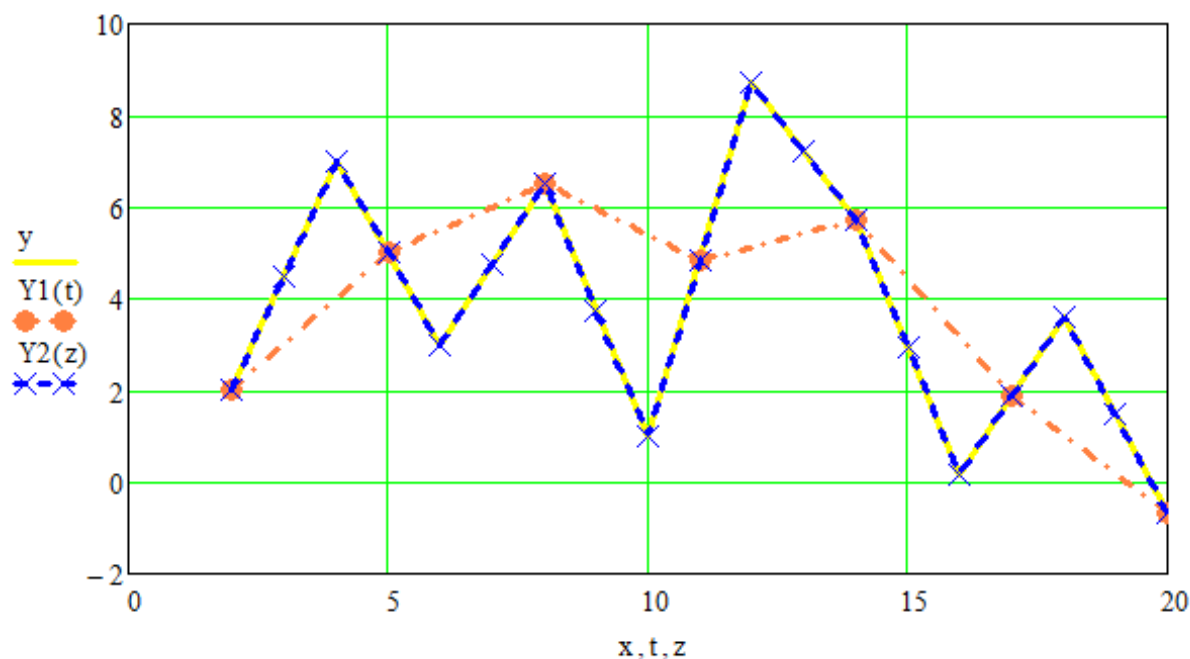


Рис. 1.4 – Приклад інтерполяції функції

2. Метод найменших квадратів

Точки (x_i, y_i) , $0 \leq i \leq m$, що задають досліджувану функцію $y = f(x)$, можуть бути відомі з похибками, або ж апроксимуючу функцію бажано було б мати по можливості більш простою ніж інтерполяційна. Згідно **методу найменших квадратів** (МНК) найкращими коефіцієнтами a_0, a_1, \dots, a_m наближуючого поліному (1.1) вважаються ті, для яких сума квадратів відхилень буде мінімальною:

$$E = \sum_{i=0}^m \left(a_0 + a_1 x_i^1 + a_2 x_i^2 + \dots + a_n x_i^n - y_i \right)^2 \rightarrow \min. \quad (1.9)$$

При такій постановці задачі n і m можуть задаватись довільно. Чим більше n тим, можна сподіватись, буде кращою якість апроксимації (менше значення E). Чим менше n – тим більш згладженою буде апроксимуюча функція (при $n=0$ – це буде константа, при $n=1$ – пряма лінія, при $n=2$ – квадратна парабола і т.д.).

З вищевказаної умови МНК (1.9) випливає, що коефіцієнти апроксимуючої функції можна отримати розв'язав систему рівнянь:

$$\begin{cases} a_0 \sum_i x_i^0 + a_1 \sum_i x_i^1 + \dots + a_n \sum_i x_i^n = \sum_i y_{ei} x_i^0 \\ a_0 \sum_i x_i^1 + a_1 \sum_i x_i^2 + \dots + a_n \sum_i x_i^{n+1} = \sum_s y_{ei} x_i^1 \\ \dots \\ a_0 \sum_i x_i^n + a_1 \sum_i x_i^{n+1} + \dots + a_n \sum_i x_i^{n+n} = \sum_i y_{ei} x_i^n \end{cases} \quad (1.10)$$

У випадку *лінійної апроксимації* коефіцієнти апроксимуючої прямої знаходять шляхом розв'язання системи рівнянь:

$$\begin{cases} a_0 \sum x_i^0 + a_1 \sum x_i = \sum y_i \\ a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 = \sum y_i x_i \end{cases} \quad (1.11)$$

Після розв'язання системи (1.11) отримуємо апроксимуючу функцію виду:

$$\hat{y} = P_1(x) = a_0 + a_1 x$$

Середньоквадратичну похибку апроксимації визначають за формулою:

$$\delta = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2}{n-1}} \quad (1.12)$$

Приклад. Залежність вмісту CO_2 в газовій фазі (в об'ємних процентах) від вмісту його в розчині (y г/л) виражається наступною таблицею:

x_i	2	6,2	10,7	14,9	20,5
y_i	0,95	2,9	5,1	6,8	9,6

Необхідно підібрати для цієї залежності лінійну апроксимуючу функцію.

Для побудови системи (1.11) в наступній таблиці знайдемо відповідні суми:

x_i	y_i	x_i^2	$x_i * y_i$
2	0,95	4	1,90
6,2	2,9	38,44	17,98
10,7	5,1	114,49	54,57
14,9	6,8	222,01	101,32
20,5	9,6	420,25	196,80
54,3	25,35	799,19	372,57

Отримуємо систему (1.11):

$$\begin{cases} 5a_0 + 54,3a_1 = 25,35 \\ 54,3a_0 + 799,19a_1 = 372,57 \end{cases}$$

Розв'яжемо її за правилом Крамера:

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} 25,35 & 54,3 \\ 372,57 & 799,19 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 5 & 54,3 \\ 54,3 & 799,19 \end{vmatrix}} = \frac{28,916}{1047,46} \approx 0,0276$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 5 & 25,35 \\ 54,3 & 372,57 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 5 & 54,3 \\ 54,3 & 799,19 \end{vmatrix}} = \frac{486,345}{1047,46} \approx 0,4643$$

Таким чином ми отримали апроксимуючу функцію:

$$\hat{y} = 0,0276 + 0,4643x$$

Для перевірки отриманої апроксимуючої функції необхідно порівняти розраховані за нею значення функції у вузлах з вихідними (експериментальними) значеннями (табл. 1.3). Також за цими значеннями треба побудувати графік (рис. 1.5).

Середньоквадратична похибка за формулою (1.12) дорівнює:

$$\delta = \sqrt{\frac{0,03514}{(5-1)}} \approx 0,094$$

Таблиця 1.3. Перевірка результатів апроксимації.

x_i	y_i	y_i'	$y_i' - y_i$	$(y_i' - y_i)^2$
2	0,95	0,95622	0,0062	3,9E-05
6,2	2,9	2,90632	0,0063	4E-05
10,7	5,1	4,99571	-0,1043	0,01088
14,9	6,8	6,94581	0,1458	0,02126
20,5	9,6	9,54594	-0,0541	0,00292
				0,03514

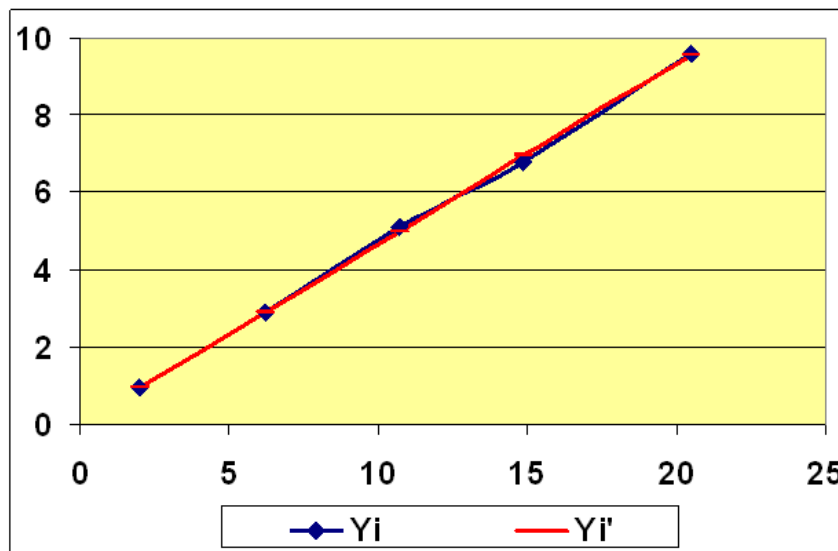


Рис. 1.5 – Результати апроксимації прямою.

При *параболічній апроксимації* коефіцієнти апроксимуючої параболи (1.13)

$$\hat{y} = \varphi(x, a_0, a_1, a_2) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \quad (1.13)$$

за МНК знаходять шляхом розв'язання системи рівнянь (відповідно до (1.10)):

$$\begin{cases} a_0 \sum x_i^0 + a_1 \sum x_i + a_2 \sum x_i^2 = \sum y_i \\ a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 + a_2 \sum x_i^3 = \sum x_i y_i \\ a_0 \sum x_i^2 + a_1 \sum x_i^3 + a_2 \sum x_i^4 = \sum x_i^2 y_i \end{cases} \quad (1.14)$$

Приклад. Залежність вмісту води в суміші ефіру з водою від температури кипіння виражається наступною таблицею:

x_i	0	20	40	60	80	100
y_i	0,59	0,95	1,43	2,05	2,78	3,65

Необхідно підібрати для цієї залежності квадратичну апроксимуючу функцію. Для побудови системи (1.14) в наступній таблиці знайдемо відповідні суми:

x_i	y_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$x_i^2 y_i$	$x_i^3 y_i$
0	0,59	0	0	0	0,00	0,00
20	0,95	400	8000	160000	19,00	380,00
40	1,43	1600	64000	2560000	57,20	2288,00
60	2,05	3600	216000	12960000	123,00	7380,00
80	2,78	6400	512000	40960000	222,40	17792,00
100	3,65	10000	1000000	100000000	365,00	36500,00
300	11,45	22000	1800000	156640000	786,6	64340

Отримуємо систему (1.14):

$$\begin{cases} 6a_0 + 300a_1 + 22000a_2 = 11,45 \\ 300a_0 + 22000a_1 + 1800000a_2 = 786,6 \\ 22000a_0 + 1800000a_1 + 156640000a_2 = 64340 \end{cases}$$

Після розв'язання системи маємо: $a_0 = 0,5904$; $a_1 = 0,01474$; $a_2 = 0,000158$

Отже, апроксимуюча функція має вид:

$$\hat{y} = 0,5904 + 0,0147x + 0,000158x^2$$

Для перевірки отриманої апроксимуючої функції побудуємо таблицю для порівняння у вузлах значень цієї функції з експериментальними (табл. 1.4) та відповідний графік (рис. 1.6).

Таблиця 1.4. Перевірка результатів апроксимації.

x_i	y_i	y_i'	$y_i' - y_i$	$(y_i' - y_i)^2$
0	0,59	0,5904	0,00036	0,0000001
20	0,95	0,9485	-0,00150	0,0000023
40	1,43	1,4334	0,00343	0,0000118
60	2,05	2,0451	-0,00486	0,0000236
80	2,78	2,7836	0,00364	0,0000133
100	3,65	3,6489	-0,00107	0,0000011
				0,0000521

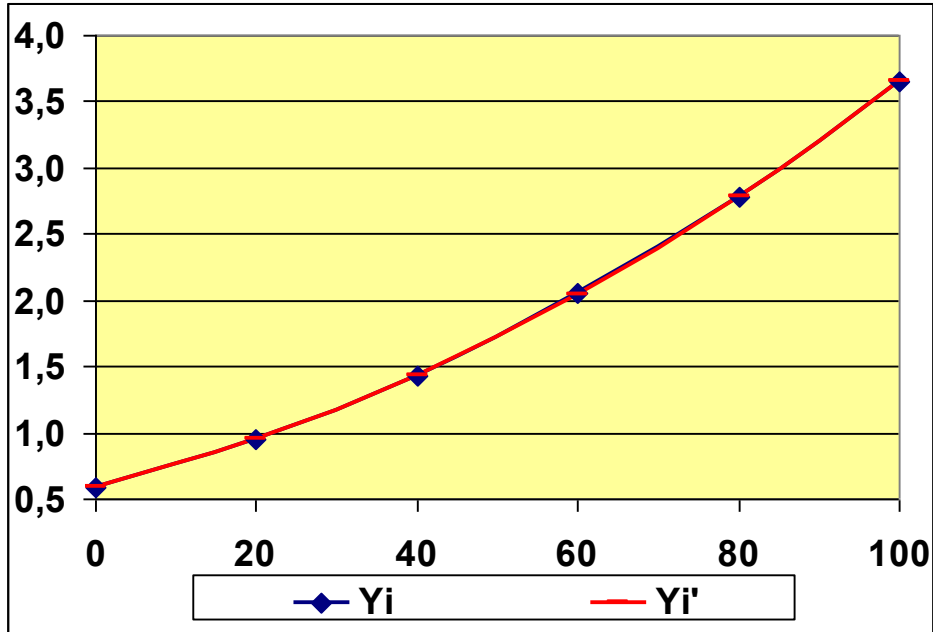


Рис. 1.6 – Результати апроксимації параболою.

Середньоквадратична похибка за формулою (1.12) дорівнює:

$$\delta = \sqrt{\frac{0,000052}{(6-1)}} \approx 0,0032$$

Реалізація в пакеті MathCad.

При лінійній апроксимації в пакеті *MathCad* використовуються функції лінійної регресії *intercept* та *slope*, яким передається масив вузлів апроксимації по вісі абсцис та ординат. Ці функції повертають значення коефіцієнти апроксимуючої прямої ($Y = A + Bx$) – *intercept* повертає скалярне значення просунення по вісі координат лінії регресії, а функція *slope* – повертає скалярне значення нахилу лінії регресії. Нижче наведений приклад лінійної апроксимації з використанням даних з попереднього прикладу.

Апроксимація даних Методом найменших квадратів

```

A := intercept(x, y)      B := slope(x, y)
D1(k) := A + B·k          A = 5.589   B = -0.172

1 := 0, 2 .. xlast(x)    +

```

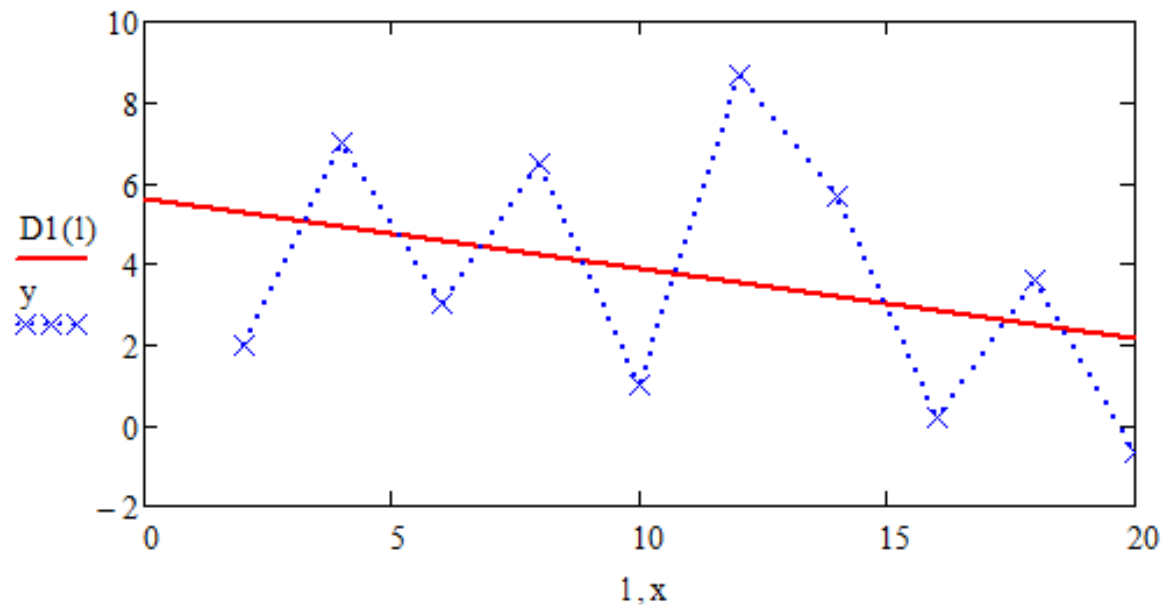


Рис. 1.7 – Приклад лінійної апроксимації функції

Для апроксимації поліномом вищого порядку використовується функція *regress*, якій необхідно передати масиви вузлів апроксимації та порядок апроксимуючого полінома. Вона повертає вектор для функції *interp*:

interp(v, x, y, t) – повертає інтерпольоване значення,

де $v = \text{regress}(x, y, n)$, x, y – масиви вузлів апроксимації, t – значення аргументу при яких обраховується функція.

На рисунку 1.8 наведено приклади апроксимації поліномами 2-го та 3-го степеня.

`vs2 := regress(x, y, 2)`

`vs3 := regress(x, y, 3)`

`Y2(z) := interp(vs2, x, y, z)`

`Y3(z) := interp(vs3, x, y, z)`

`coef2 := submatrix(vs2, 3, длина(vs2) - 1, 0, 0)` `coef3 := submatrix(vs3, 3, длина(vs3) - 1, 0, 0)`

$$\text{coef2} = \begin{pmatrix} 1.472 \\ 0.858 \\ -0.047 \end{pmatrix}$$

`z := 0 .. xlast(x)`

$$\text{coef3} = \begin{pmatrix} 2.029 \\ 0.61 \\ -0.02 \\ -8.12 \times 10^{-4} \end{pmatrix}$$

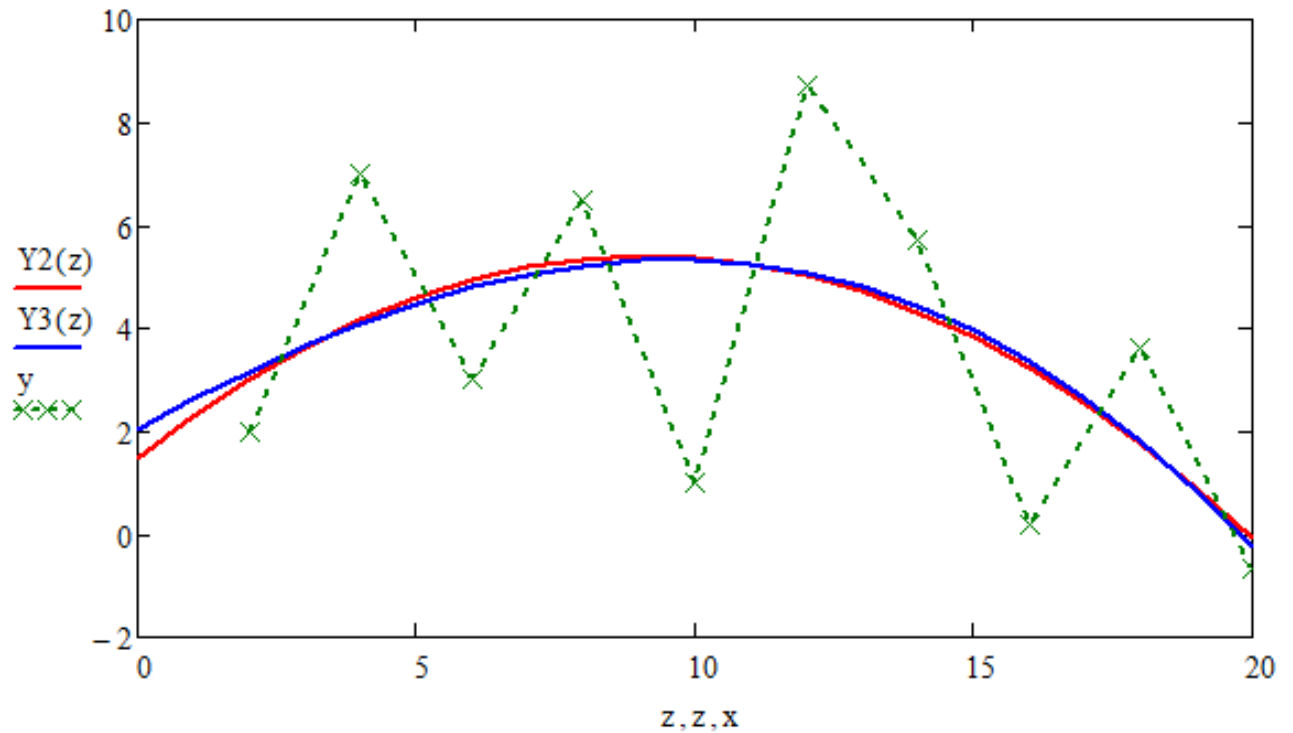


Рис. 1.8 – Приклад апроксимації функції поліномами 2-го та 3-го степеня

Якщо у версії *MathCad* відсутня функція **regress**, то для апроксимації поліномом довільного степеня можна використати функцію **linfit**. На рисунку 1.9 наведений приклад використання функції **linfit** для апроксимації поліномами 1-го та 2-го степеня.

$$\begin{aligned}
 F1(x) &:= \begin{pmatrix} 1 \\ x \end{pmatrix} & k1 &:= \text{linfit}(x, y, F1) & k1 &= \begin{pmatrix} 5.589 \\ -0.172 \end{pmatrix} \\
 F2(x) &:= \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix} & k2 &:= \text{linfit}(x, y, F2) & k2 &= \begin{pmatrix} 1.472 \\ 0.858 \\ -0.047 \end{pmatrix} \\
 f1(x) &:= k1_0 + k1_1 \cdot x & f2(x) &:= k2_0 + k2_1 \cdot x + k2_2 \cdot x^2
 \end{aligned}$$

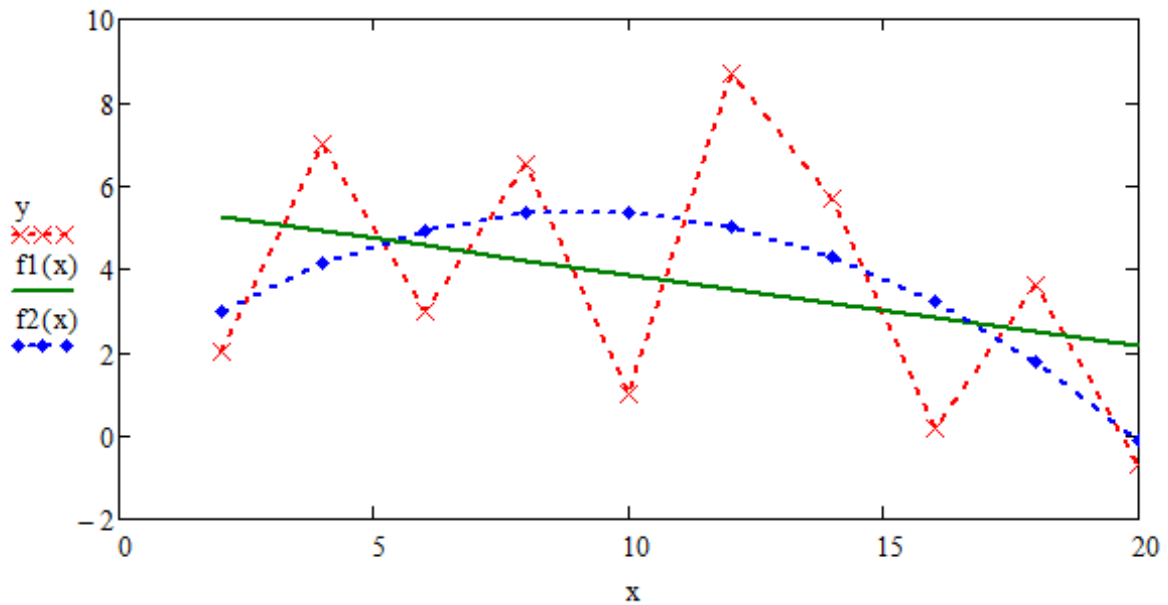


Рис. 1.9 – Приклад використання функції *linfit*

Також коефіцієнти апроксимуючого полінома можна знайти шляхом розв'язання системи рівнянь, отриманої з умови методу найменших квадратів, наприклад – методом оберненої матриці. На рисунку 1.10 наведено приклад побудови апроксимуючої параболи.

$$\underset{\text{www}}{A} := \begin{pmatrix} \sum x^0 & \sum x^1 & \sum x^2 \\ \sum x^1 & \sum x^2 & \sum x^3 \\ \sum x^2 & \sum x^3 & \sum x^4 \end{pmatrix} \quad \underset{\text{www}}{B} := \begin{pmatrix} y \cdot x^0 \\ y \cdot x^1 \\ y \cdot x^2 \end{pmatrix} \quad \text{Alfa} := A^{-1} \cdot B = \begin{pmatrix} 1.472 \\ 0.858 \\ -0.047 \end{pmatrix}$$

3. Сплайн-інтерполяція

Це особливий вид кусково-поліноміальної інтерполяції. Ним зручно користуватись, коли необхідно знайти наближуючу функцію для вихідної функції, яка на досить великому інтервалі зміни аргументу характеризується складною поведінкою (рис. 1.11).

Сплайн-інтерполяція дозволяє провести криву через набір точок таким чином, що на кожному з відрізків будується окремий поліном і загальна крива створюється за рахунок плавного переходу від одного поліному до наступного. Ця плавність переходу досягається за рахунок того, у вузлах (стикових точках) не тільки значення обох сусідніх поліномів дорівнюють одне одному (а також і

вихідній функції), а і значення їх перших і других похідних повинні бути однаковими.

$$\text{Poly2}(z) := \text{Alfa}_0 + \text{Alfa}_1 \cdot z + \text{Alfa}_2 \cdot z^2$$

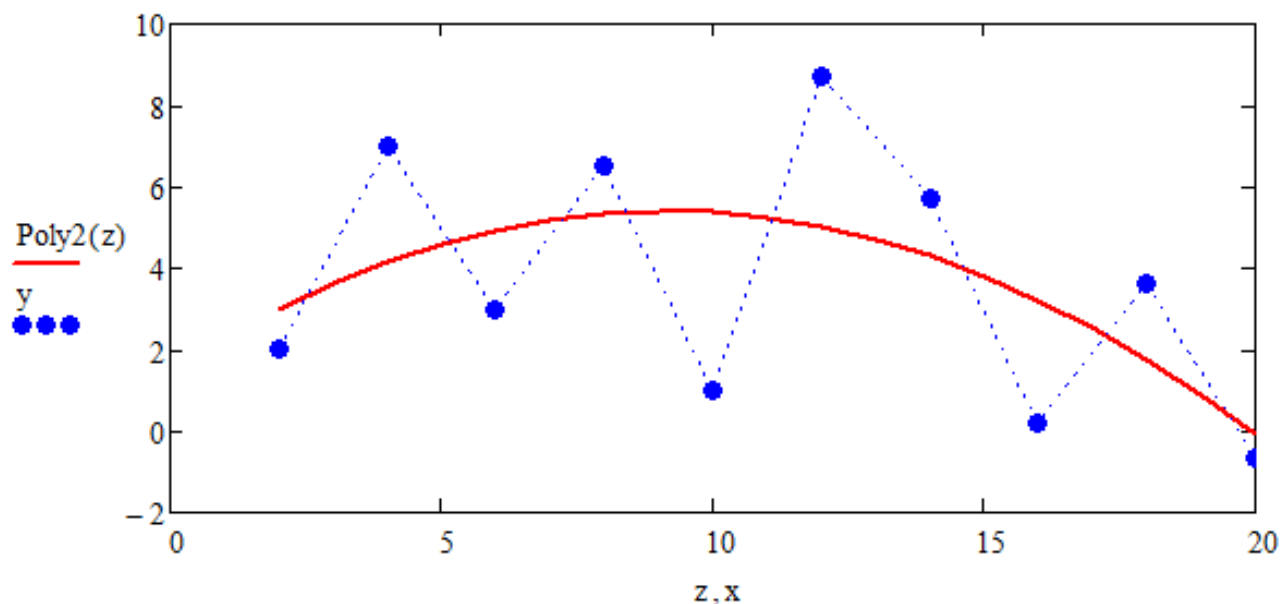


Рис. 1.10 – Приклад побудови апроксимуючого полінома шляхом обчислення коефіцієнтів методом оберненої матриці

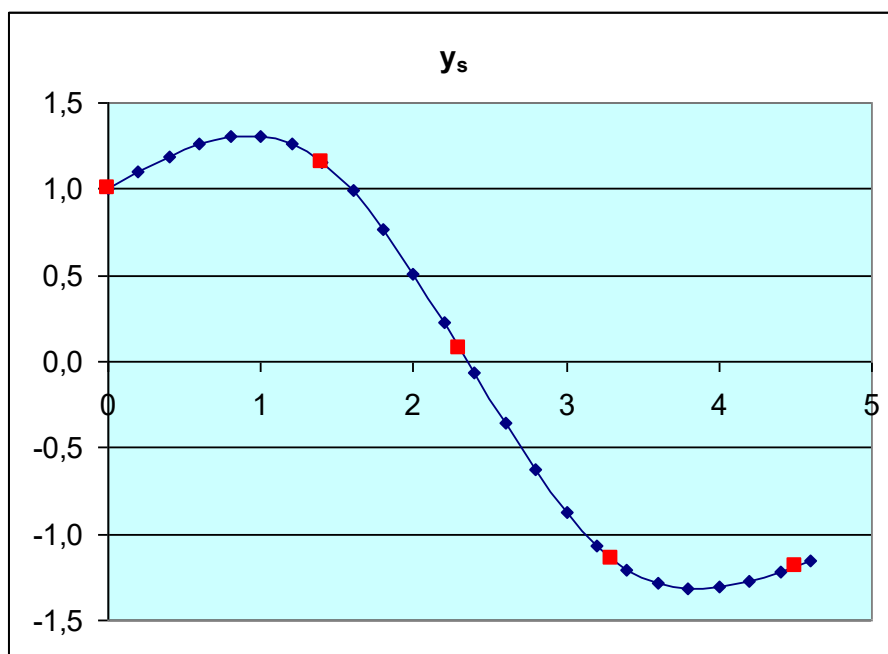


Рис. 1.11 – Приклад обчислення наближеної функції методом сплайн-інтерполяції

Доведено, що задача побудови кубічного сплайну має єдиний розв'язок.
Нехай $x = x_{i-1}$, тоді

$$S_i(x_{i-1}) = y_{i-1} = a_i,$$

звідки маємо:

$$a_i = y_{i-1} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (1.22)$$

Запишемо сплайн (1.15) для $x = x_i$ з урахуванням того, що довжина i -го відрізка $x_i - x_{i-1} = h_i$:

$$S_i(x_i) = a_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3$$

З урахуванням (1.18) та (1.22) маємо:

$$y_i = y_{i-1} + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3$$

Звідси:

$$b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = y_i - y_{i-1} \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (1.23)$$

Виходячи з того, що

$$S'_i(x) = b_i + 2c_i(x - x_{i-1}) + 3d_i(x - x_{i-1})^2,$$

відповідно до умови (1.19) запишемо:

$$S'_i(x_i) = b_i + 2c_i h_i + 3d_i h_i^2 \qquad S'_{i+1}(x_i) = b_{i+1}$$

Отже:

$$b_{i+1} - b_i - 2c_i h_i - 3d_i h_i^2 = 0 \quad (i=1, 2, \dots, n-1) \quad (1.24)$$

Аналогічно для других похідних:

$$S''_i(x) = 2c_i + 6d_i(x - x_{i-1}),$$

і з умови (1.20):

$$S''_i(x_i) = 2c_i + 6d_i h_i \qquad S''_{i+1}(x_i) = 2c_{i+1}$$

Отже:

$$c_{i+1} - c_i - 3d_i h_i = 0 \quad (i=1, 2, \dots, n-1) \quad (1.25)$$

Відповідно до умов (1.21) запишемо:

$$S''_1(x_0) = 2c_1 + 6d_1(x_0 - x_0) = 0 \quad (1.26)$$

Отже, $c_1 = 0$

$$S_n''(x_n) = 2c_n + 6d_n h_n = 0 \quad (1.27)$$

$$\text{Отже, } c_n + 3d_n h_n = 0$$

З рівнянь (1.23)–(1.27) маємо систему $3n$ рівнянь з $3n$ невідомими ($b_i, c_i, d_i; i = 0, 1, 2, \dots, n-1$):

$$\begin{cases} b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = y_i - y_{i-1} & (i = 1, 2, \dots, n) \\ b_{i+1} - b_i - 2c_i h_i - 3d_i h_i^2 = 0 & (i = 1, 2, \dots, n-1) \\ c_{i+1} - c_i - 3d_i h_i = 0 & (i = 1, 2, \dots, n-1) \\ c_1 = 0 \\ c_n + 3d_n h_n = 0 \end{cases} \quad (1.28)$$

Розв'язавши систему (1.28) будь-яким відомим методом, отримаємо шукані коефіцієнти сплайну (коефіцієнти a_i обчислюються за умовою (1.22)).

Систему (1.28) можна записати так, щоб до неї входили тільки невідомі c_i :

$$c_{i-1} h_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i) c_i + c_{i+1} h_i = 3 \left[\frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - \frac{y_{i-1} - y_{i-2}}{h_{i-1}} \right] \quad (1.29)$$

$$2 \leq i \leq n$$

При $i = n$ в (1.29) покладаємо $c_{n+1} = 0$ (враховуємо умову вільного кінця сплайна); $c_1 = 0$. В кожне з рівнянь системи (1.29) входять тільки 3 невідомі c_{i-1}, c_i, c_{i+1} . Матриця цієї системи є трихдіагональною, тобто має елементи відмінні від нуля тільки на головній і двох діагоналях, що примикають до неї. Для розв'язання такої системи зручно використовувати метод прогонки.

Введемо для спрощення такі позначення для (1.29):

$$m_i = 2(h_{i-1} + h_i)$$

$$k_i = 3 \left[\frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - \frac{y_{i-1} - y_{i-2}}{h_{i-1}} \right] \quad (1.30)$$

Тоді система (1.30) набуде вигляду:

$$c_{i-1} h_{i-1} + m_i c_i + c_{i+1} h_i = k_i \quad 2 \leq i \leq n \quad (1.31)$$

З (1.30) при $i = 2$, враховуючи, що $c_1 = 0$, маємо: $m_2 c_2 + c_3 h_2 = k_2$, звідки

$$c_2 = \frac{k_2}{m_2} - \frac{h_2}{m_2} c_3.$$

Позначимо: $\alpha_2 = \frac{k_2}{m_2}$ і $\beta_2 = \frac{h_2}{m_2}$. Тоді:

$$c_2 = \alpha_2 - \beta_2 c_3 \quad c_3 = \alpha_3 - \beta_3 c_4 \quad \dots \quad c_i = \alpha_i - \beta_i c_{i+1}$$

α_i і β_i – прогоночні коефіцієнти:

$$\alpha_i = \frac{k_i - h_{i-1} \alpha_{i-1}}{m_i - h_{i-1} \beta_{i-1}} \quad \beta_i = \frac{h_i}{m_i - h_{i-1} \beta_{i-1}} \quad (1.32)$$

Оскільки $c_1 = 0$ і $c_1 = \alpha_1 - \beta_1 c_2$, покладаючи $c_2 \neq 0$, задаємо початкові коефіцієнти $\alpha_1 = \beta_1 = 0$. Потім за формулами (1.31) знаходимо всі n пар прогоночних коефіцієнтів α_i і β_i . В цьому полягає «*прямий хід*» методу прогонки.

На основі співвідношення $c_n = \alpha_n - \beta_n c_{n+1}$ і граничної умови $c_{n+1} = 0$ маємо $c_n = \alpha_n$. Застосовуючи послідовно формулу

$$c_i = \alpha_i - \beta_i c_{i+1} \quad (i = n-1, n-2, \dots, 2), \quad (1.33)$$

обчислюємо значення шуканих величин $c_{n-1}, c_{n-2}, \dots, c_2$. Це є «*зворотний хід*» методу прогонки.

Інші коефіцієнти сплайнів b_i, d_i знаходимо за формулами:

$$d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i} \quad b_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - \frac{(c_{i+1} + 2c_i)h_i}{3} \quad (1.34)$$

Приклад. Побудувати кубічний сплайн для функції заданої таблицею:

i	0	1	2	3	4
x	0	1,4	2,3	3,3	4,5
y	1	1,155	0,079	-1,145	-1,188

Так як ми маємо чотири відрізки $[0; 1,4]$, $[1,4; 2,3]$, $[2,3; 3,3]$, $[3,3; 4,5]$, необхідно знайти:

$$\begin{cases} S_1(x) = a_1 + b_1(x - x_0) + c_1(x - x_0)^2 + d_1(x - x_0)^3 \\ S_2(x) = a_2 + b_2(x - x_1) + c_2(x - x_1)^2 + d_2(x - x_1)^3 \\ S_3(x) = a_3 + b_3(x - x_2) + c_3(x - x_2)^2 + d_3(x - x_2)^3 \\ S_4(x) = a_4 + b_4(x - x_3) + c_4(x - x_3)^2 + d_4(x - x_3)^3 \end{cases}$$

Будемо виконувати розрахунки у вигляді таблиці (під кожним стовпчиком вказаний номер формули, за якою обчислюються значення в ньому):

i	x	y	h	$\frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$	m	k
0	0	1	-	-	-	-
1	1,4	1,155	1,4	0,1107	-	-
2	2,3	0,079	0,9	-1,196	4,6	-3,91881
3	3,3	-1,145	1	-1,224	3,8	-0,08533
4	4,5	-1,188	1,2	-0,036	4,4	3,5645
					1.30	

i	α	β	c	d	b	a
0	-	-	-	-	-	
1	0	0	0	-0,201	0,5048	1
2	-0,852	0,1957	-0,845	0,2987	-0,677	1,155
3	0,188	0,2759	-0,038	0,2855	-1,472	0,079
4	0,8187	0,291	0,8187	-0,227	-0,691	-1,145

1.32

1.33

1.24

1.22

Шуканий сплайн має вигляд:

$$P_3(x) = \begin{cases} 1,0 + 0,5048(x - 0) + 0(x - 0)^2 - 0,2011(x - 0)^3 & 0 \leq x \leq 1,4 \\ 1,155 - 0,6775(x - 1,4) - 0,8445(x - 1,4)^2 + 0,2987(x - 1,4)^3 & 1,4 \leq x \leq 2,3 \\ 0,079 - 1,4716(x - 2,3) - 0,0379(x - 2,3)^2 + 0,2855(x - 2,3)^3 & 2,3 \leq x \leq 3,3 \\ -1,145 - 0,6908(x - 3,3) + 0,8187(x - 3,3)^2 - 0,2274(x - 3,3)^3 & 3,3 \leq x \leq 4,5 \end{cases}$$

Перевірка. Для перевірки вірності отриманого сплайну необхідно побудувати таблицю значень кожного локального сплайну та його перших і других

похідних у вузлових точках (табл. 1.5). Якщо у кожному вузлі відповідні значення для сусідніх поліномів збігаються, це свідчить, що умови побудови сплайн-функції виконуються, що ми бачимо в даному прикладі.

Таблиця 1.5. Перевірка результатів апроксимації.

i	x	y	$S_i(x)$	$S_{i+1}(x)$	$S'_i(x)$	$S'_{i+1}(x)$	$S''_i(x)$	$S''_{i+1}(x)$
0	0	1	1	-	0,5048	-	0	-
1	1,4	1,155	1,155	1,155	-0,677	-0,677	-1,689	-1,689
2	2,3	0,079	0,079	0,079	-1,472	-1,472	-0,076	-0,076
3	3,3	-1,145	-1,145	-1,145	-0,691	-0,691	1,6375	1,6375
4	4,5	-1,188	-	-1,188	-	0,2916	-	0

Для наочності побудуємо графік наближеної функції за допомогою отриманого сплайну (рис. 1.12).

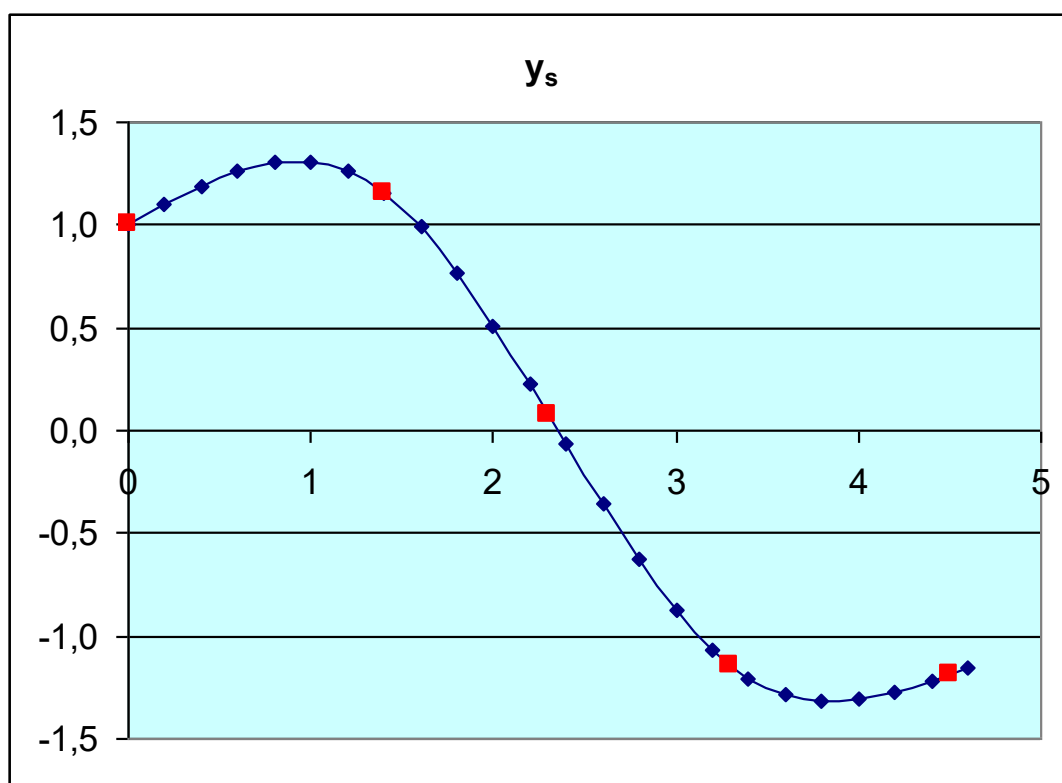


Рис. 1.12 – Порівняння значень функції, обчислених за допомогою отриманого сплайну, з експериментальними.

Як бачимо з графіка, отриманий сплайн гарно описує надані експериментальні значення (вказані червоними маркерами).

Реалізація в пакеті MathCad.

В математичному пакеті є вбудовані функції, які реалізують процедуру сплайн-інтерполяції. Функція $cspline(x, y)$ повертає вектор (vsc) , який містить

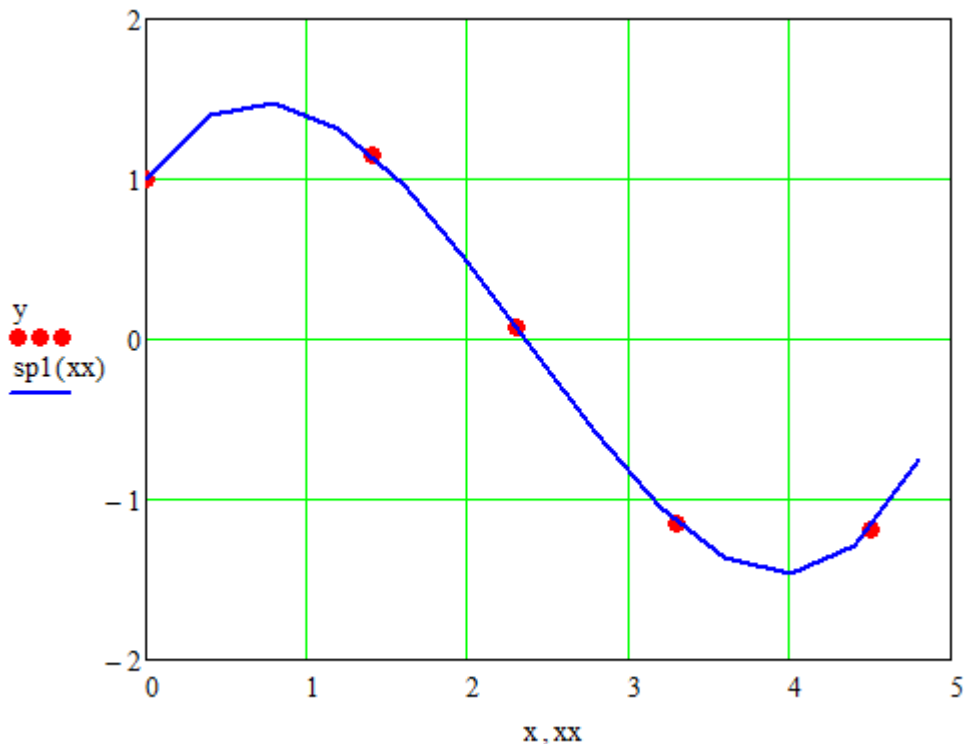
другі похідні інтерполяційної кривої в точках, що розглядаються. Користуючись отриманим вектором vsc за допомогою функції $interp(vsc, x, y, xx)$ можна отримати інтерпольоване значення функції в довільній точці xx .

Наприклад:

$$\begin{array}{l}
 x := \begin{pmatrix} 0 \\ 1.4 \\ 2.3 \\ 3.3 \\ 4.5 \end{pmatrix} \quad y := \begin{pmatrix} 1 \\ 1.155 \\ 0.079 \\ -1.145 \\ -1.188 \end{pmatrix} \\
 \\
 \begin{array}{l}
 vsc := cspline(x, y) \\
 interp(vsc, x, y, 2) = 0.481 \\
 interp(vsc, x, y, 3.5) = -1.304 \\
 interp(vsc, x, y, 0.8) = 1.48
 \end{array}
 \end{array}$$

Якщо потрібно знайти інтерпольовані значення функції в кількох точках змінна xx може бути представлена відповідним вектором. Покажемо це на прикладі, який розглянуто вище.

$$\begin{array}{l}
 x := \begin{pmatrix} 0 \\ 1.4 \\ 2.3 \\ 3.3 \\ 4.5 \end{pmatrix} \quad y := \begin{pmatrix} 1 \\ 1.155 \\ 0.079 \\ -1.145 \\ -1.188 \end{pmatrix} \\
 \\
 xx := 0, 0.4..5
 \end{array}$$



Крім функції $cspline(x, y)$ в MathCad є ще дві функції: $pspline(x, y)$ та $lspline(x, y)$. Всі вони працюють схожим чином, а відмінність полягає в різних граничних умовах, що прийняті при побудові сплайну:

- функція $lspline$ генерує криву сплайну, що наближається до прямої лінії у граничних точках;
- функція $pspline$ генерує криву сплайну, що наближається до параболи у граничних точках;
- функція $cspline$ генерує криву сплайну, яка може бути кубічним поліномом у граничних точках.

Завдання для практичної роботи №1

Мета: Набути навичок використання методів інтерполяції та апроксимації для побудови моделей.

Методи інтерполяції.

Завдання 1. Відповідно до варіанту завдання знайти за наданими експериментальними даними значення функції y , яке відповідає вказаним значенням аргументу x , користуючись:

- 1) методом кусково-лінійної інтерполяції;
- 2) методом Лагранжа.

Порівняти результати отримані різними методами. Зробити висновки

Завдання 2. Відповідно до варіанту завдання знайти за наданими експериментальними даними значення аргументу x , яке відповідає заданому значенню функції y , користуючись:

- 1) методом кусково-лінійної інтерполяції;
- 2) методом Лагранжа.

Порівняти результати отримані різними методами. Зробити висновки
Перевірити результати розрахунків у викладача.

Метод найменших квадратів.

Завдання 3. Відповідно до варіанту завдання побудувати за допомогою МНК апроксимуючі поліноми 1-го та 2-го степеня, навести відповідні графіки та перевірити похибки.

Сплайн-інтерполяція.

Завдання 4. Відповідно до варіанту завдання побудувати кубічний сплайн для заданої функції. Навести отриманий сплайн, виконати його перевірку та побудувати графік.

Практична робота №2

Використання методів розв'язання диференціальних рівнянь

Теоретичні відомості

Достатньо велика кількість математичних описів як технологічних об'єктів, так і систем керування представлені системами звичайних диференціальних рівнянь або окремими такими рівняннями. Деякі з цих рівнянь можуть бути розв'язані аналітично, але не завжди. Тому найчастіше застосовують чисельні методи розв'язання диференціальних рівнянь. При цьому слід враховувати щоб похибка такого наближеного розв'язку не перевищувала припустимої.

Чисельні методи розв'язання звичайних диференціальних рівнянь

1. Постановка задачі

Дано звичайне диференціальне рівняння першого порядку

$$y' = f(x, y) \quad (2.1)$$

Потрібно знайти розв'язок $y = y(x)$ цього рівняння, що задовольняє початкову умову:

$$y(x_0) = y_0 \quad (2.2)$$

Таку задачу називають задачею Коші. Геометричний зміст розв'язку цієї задачі полягає у знаходженні інтегральної кривої $y = y(x)$, яка проходить через задану точку $A_0(x_0, y_0)$ (рис. 2.1).

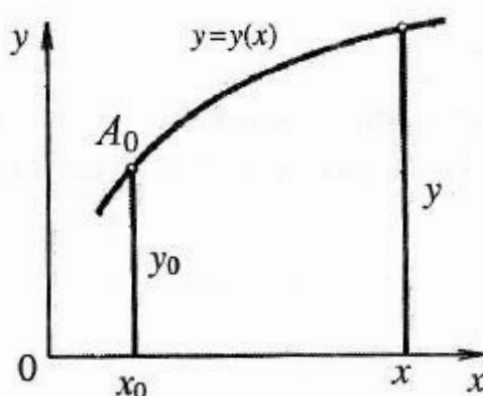


Рис. 2.1 – Графік інтегральної кривої $y = y(x)$, яка проходить через задану точку $A_0(x_0, y_0)$

Розв'язати диференціальне рівняння $y' = f(x, y)$ числовим методом – це значить для заданої послідовності значень x (x_0, x_1, \dots, x_n) і числа y_0 отримати таблицю значень функції y (y_1, y_2, \dots, y_n).

x	x_0	x_1	x_2	\dots	x_n
y	y_0	y_1	y_2	\dots	y_n

2. Метод Ейлера

Нехай дано диференціальне рівняння першого порядку (2.1) з початковою умовою (2.2). Необхідно знайти розв'язок рівняння (2.1) $y = y(x)$ на відрізку $[a, b]$.

Поділимо відрізок $[a, b]$ на n рівних частин і отримаємо послідовність вузлів x_0, x_1, \dots, x_n де $x_i = x_0 + ih$ ($i = 0, 1, 2, \dots, n$), а $h = (b - a) / n$ – крок інтегрування.

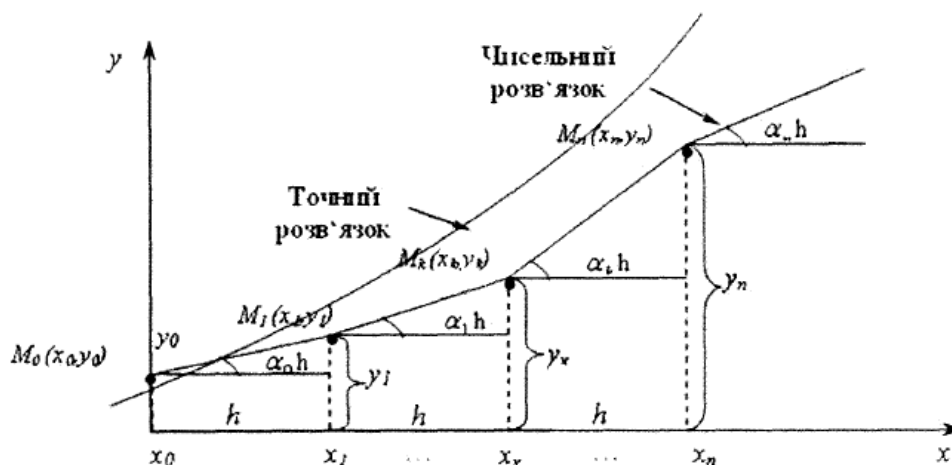


Рис. 2.2 – Геометрична інтерпретація розв'язку диференціального рівняння за методом Ейлера

Сенс цього методу полягає в тому, що малому проміжку (h) зміни незалежної змінної x

$$x_0 \leq x \leq x_0 + h = x_1$$

інтегральна крива диференціального рівняння $y' = f(x, y)$ замінюється відрізком прямої (дотичної):

$$y_1 - y_0 = f(x_0, y_0) (x_1 - x_0) \rightarrow$$

$$y_1 = y_0 + f(x_0, y_0) (x_1 - x_0) \rightarrow$$

$$y_1 = y_0 + f(x_0, y_0) h$$

Отже, відповідно до методу Ейлера послідовні значення шуканих значень функції визначають за формулою:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i) \quad (2.3)$$

$$(i=0, 1, 2, \dots, n-1)$$

Приклад 1. Дано диференціальне рівняння $y' = x + y$ з початковою умовою $y(0) = 0,5$. Потрібно знайти чисельне рішення даного диференційного рівняння на відрізку $[0, 1]$ із кроком $h = 0,2$. Всі обчислення вести із чотирма десятковими знаками. Скористаємось методом Ейлера.

Розв'язок.

З початкових умов маємо $x_0 = 0$, $y_0 = 0,5$. Знайдемо перше наближення за формулою (3)

$$y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0) = 0,5 + 0,2 \cdot (0 + 0,5) = 0,5 + 0,1 = 0,6.$$

Потім друге

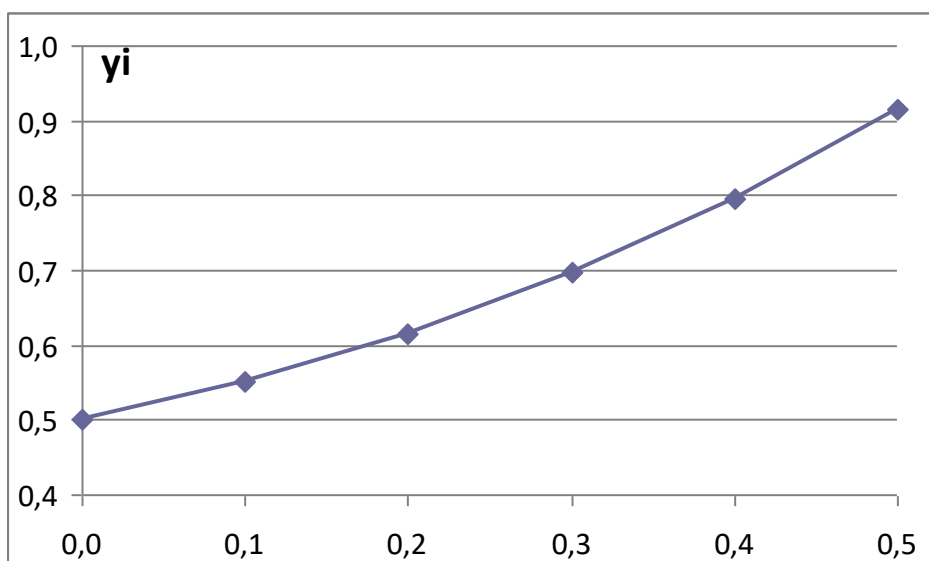
$$y_2 = y_1 + h \cdot f(x_1, y_1) = 0,6 + 0,2 \cdot (0,2 + 0,6) = 0,6 + 0,16 = 0,76$$

і т.д. Для зручності складемо таблицю 1.

Таблиця 2.1. Розв'язок рівняння за методом Ейлера

i	x_i	y_i	$f(x_i, y_i)$	$Dy_i = h \cdot f(x_i, y_i)$
0	0,00	0,5000	0,5000	0,1000
1	0,20	0,6000	0,8000	0,1600
2	0,40	0,7600	1,1600	0,2320
3	0,60	0,9920	1,5920	0,3184
4	0,80	1,3104	2,1104	0,4221
5	1,00	1,7325		

Такий вигляд в даному випадку має Ламана Ейлера:



Порівняємо отримані результати з розрахунком, який виконано з вдвічі меншим кроком ($h = 0,1$):

Таблиця 2.2. Розв'язок рівняння за методом Ейлера ($h = 0,1$)

i	x_i	y_i	$f(x_i, y_i)$	$Dy_i = h * f(x_i, y_i)$	y_i	
0	0,00	0,5000	0,50000	0,05000	0,5000	
1	0,10	0,5500	0,65000	0,06500		
2	0,20	0,6150	0,81500	0,08150	0,6000	0,0150
3	0,30	0,6965	0,99650	0,09965		
4	0,40	0,7962	1,19615	0,11962	0,7600	0,0362
5	0,50	0,9158	1,41577	0,14158		
6	0,60	1,0573	1,65734	0,16573	0,9920	0,0653
7	0,70	1,2231	1,92308	0,19231		
8	0,80	1,4154	2,21538	0,22154	1,3104	0,1050
9	0,90	1,6369	2,53692	0,25369		
10	1,00	1,8906			1,7325	0,1581
		$h = 0,1$			$h = 0,2$	

Отже, як видно з таблиці 2.2, крок впливає на точність результату – в останньому вузлі різниця складає приблизно 8,3%.

Розв'язок в пакеті MathCAD

Метод Ейлера

ORIGIN := 0
Диференціальне рівняння та початкові умови:

$f(x, y) := x + y$

$a := 0$ $b := 1$ $n := 10$ $y_0 := 0.5$

Розв'язок

$h := \frac{b - a}{n}$ $h = 0.1$ - крок інтегрування

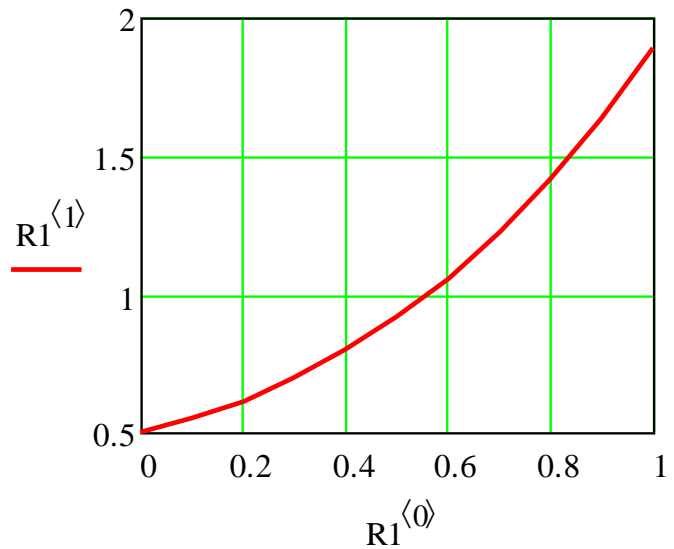
$i := 1..n$ $j := 0..n$

$R_{10,0} := a$ $R_{10,1} := y_0$ - початкові умови

$R_{i,0} := a + i \cdot h$ - стовпець значень аргументу

$R_{i,1} := R_{i-1,1} + h \cdot f(R_{i-1,0}, R_{i-1,1})$ - розрахунок значень функції за Ейлером

	0	1
0	0	0.5
1	0.1	0.55
2	0.2	0.615
3	0.3	0.6965
4	0.4	0.7962
5	0.5	0.9158
6	0.6	1.0573
7	0.7	1.2231
8	0.8	1.4154
9	0.9	1.6369
10	1	1.8906



Розрахунок також може бути оформлений у вигляді програмного блоку

```

R :=
| h ← (b - a) / n
| x ← a
| y ← y0
| R0,0 ← x
| R0,1 ← y
| for i ∈ 1..n
|   | y ← y + h * f(x, y)
|   | x ← a + i * h
|   | Ri,0 ← x
|   | Ri,1 ← y
| R

```

3. Метод Рунге-Кутти

Цей метод є одним із числових методів підвищеної точності. Відповідно до нього послідовні значення шуканого розв'язку визначають за формулою

$$y_{i+1} = y_i + \Delta y_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n-1) \quad (2.4)$$

де

$$\Delta y_i = \frac{1}{6} (k_1^{(i)} + 2k_2^{(i)} + 2k_3^{(i)} + k_4^{(i)}) \quad (2.5)$$

Значення коефіцієнтів k_1, k_2, k_3, k_4 визначаються за формулами:

$$\begin{cases} k_1^{(i)} = hf(x_i, y_i) \\ k_2^{(i)} = hf(x_i + h/2, y_i + k_1^{(i)}/2) \\ k_3^{(i)} = hf(x_i + h/2, y_i + k_2^{(i)}/2) \\ k_4^{(i)} = hf(x_i + h, y_i + k_3^{(i)}) \end{cases} \quad (2.6)$$

де $x_i = x_0 + ih$ ($i = 0, 1, 2, \dots, n$), $h = (b - a) / n$ – крок інтегрування, n – число рівних відрізків, на які ділиться заданий відрізок $[a, b]$.

Обчислення за методом Рунге-Кутти зручно розташовувати за схемою, яка наведена у таблиці 2.3.

Таблиця 2.3. Схема табличних розрахунків за методом Рунге-Кутти

i	x	y	$y' = f(x, y)$	$k = hf(x, y)$	Δy
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
0	x_0	y_0	$f(x_0, y_0)$	$k_1^{(0)}$	$k_1^{(0)}$
	$x_0 + \frac{h}{2}$	$y_0 + \frac{k_1^{(0)}}{2}$	$f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_1^{(0)}}{2}\right)$	$k_2^{(0)}$	$2k_2^{(0)}$
	$x_0 + \frac{h}{2}$	$y_0 + \frac{k_2^{(0)}}{2}$	$f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_2^{(0)}}{2}\right)$	$k_3^{(0)}$	$2k_3^{(0)}$
	$x_0 + h$	$y_0 + k_3^{(0)}$	$f(x_0 + h, y_0 + k_3^{(0)})$	$k_4^{(0)}$	$k_4^{(0)}$
					$\frac{1}{6} \sum = \Delta y_0$
1	x_1	$y_1 = y_0 + \Delta y_0$	$f(x_1, y_1)$	$k_1^{(1)}$	$k_1^{(1)}$
	$x_1 + \frac{h}{2}$	$y_1 + \frac{k_1^{(1)}}{2}$	$f\left(x_1 + \frac{h}{2}, y_1 + \frac{k_1^{(1)}}{2}\right)$	$k_2^{(1)}$	$2k_2^{(1)}$
	$x_1 + \frac{h}{2}$	$y_1 + \frac{k_2^{(1)}}{2}$	$f\left(x_1 + \frac{h}{2}, y_1 + \frac{k_2^{(1)}}{2}\right)$	$k_3^{(1)}$	$2k_3^{(1)}$
	$x_1 + h$	$y_1 + k_3^{(1)}$	$f(x_1 + h, y_1 + k_3^{(1)})$	$k_4^{(1)}$	$k_4^{(1)}$
					$\frac{1}{6} \sum = \Delta y_1$
2	x_2	$y_2 = y_1 + \Delta y_1$

Таблиця 2.3 заповнюється в такий спосіб.

Крок 1. У стовпці (2) і (3) поточного рядка записують потрібні значення x і y (у перший рядок записують початкові значення x_0 і y_0).

Крок 2. Значення x і y поточного рядка підставляють у праву частину диференціального рівняння (2.1), розраховують і записують у стовпець (4) цього ж рядка.

Крок 3. Отримане значення $y'_i = f(x_i, y_i)$ стовпця (4) множать на крок інтегрування h , (обчислюють $k = hf(x, y)$) і записують у стовпець (5) цього ж рядка.

Крок 4. Знайдені значення k множать згідно формули (2.5) на відповідний коефіцієнт (на 1, якщо це k_1 або k_4 , або на 2, якщо це k_2 або k_3), результат записують у стовпець (6) поточного рядка.

Кроки 1, 2, 3, 4 повторюють для знаходження кожного k в i -ому розв'язку.

Результати шостого стовпця сумують, ділять на 6 згідно рівняння (2.5), і визначають Δy_i , а далі

$$y_{i+1} = y_i + \Delta y_i .$$

Потім всі обчислення повторюють, починаючи із кроку 1, доти, доки не буде пройдений весь відрізок $[a, b]$, на якому потрібно знайти числовий розв'язок рівняння (2.1).

Метод Рунге-Кутти має четвертий порядок точності h^4 на всьому відрізку $[a, b]$.

Якщо ε – задана точність розв'язку, то значення n (число відрізків) для визначення кроку інтегрування h вибирається таким чином, щоб $h^4 < \varepsilon$.

Приклад розв'язку. Розв'яжемо диференціальне рівняння з прикладу 1 – $y' = x + y$ за допомогою методу Рунге-Кутти (табл. 2.4).

Таблиця 2.4. Розв'язок рівняння за методом Рунге-Кутта

i	x_i	y_i	y_i'	$k(i)$	dy_i
0	0	0,5000	0,5000	0,0500	0,0500
	0,05	0,5250	0,5750	0,0575	0,1150
	0,05	0,5288	0,5788	0,0579	0,1158
	0,1	0,5579	0,6579	0,0658	0,0658
					0,0578

Продовження таблиці 2.4

1	0,1	0,5578	0,6578	0,0658	0,0658
	0,15	0,5906	0,7406	0,0741	0,1481
	0,15	0,5948	0,7448	0,0745	0,1490
	0,2	0,6322	0,8322	0,0832	0,0832
					0,0743
2	0,2	0,6321	0,8321	0,0832	0,0832
	0,25	0,6737	0,9237	0,0924	0,1847
	0,25	0,6783	0,9283	0,0928	0,1857
	0,3	0,7249	1,0249	0,1025	0,1025
					0,0927
3	0,3	0,7248	1,0248	0,1025	0,1025
	0,35	0,7760	1,1260	0,1126	0,2252
	0,35	0,7811	1,1311	0,1131	0,2262
	0,4	0,8379	1,2379	0,1238	0,1238
					0,1129
4	0,4	0,8377	1,2377	0,1238	0,1238
	0,45	0,8996	1,3496	0,1350	0,2699
	0,45	0,9052	1,3552	0,1355	0,2710
	0,5	0,9733	1,4733	0,1473	0,1473
					0,1353
5	0,5	0,9731	1,4731	0,1473	0,1473
	0,55	1,0467	1,5967	0,1597	0,3193
	0,55	1,0529	1,6029	0,1603	0,3206
	0,6	1,1334	1,7334	0,1733	0,1733
					0,1601
6	0,6	1,1332	1,7332	0,1733	0,1733
	0,65	1,2198	1,8698	0,1870	0,3740
	0,65	1,2267	1,8767	0,1877	0,3753
	0,7	1,3208	2,0208	0,2021	0,2021
					0,1875
7	0,7	1,3206	2,0206	0,2021	0,2021
	0,75	1,4217	2,1717	0,2172	0,4343
	0,75	1,4292	2,1792	0,2179	0,4358
	0,8	1,5385	2,3385	0,2339	0,2339
					0,2177
8	0,8	1,5383	2,3383	0,2338	0,2338
	0,85	1,6552	2,5052	0,2505	0,5010
	0,85	1,6636	2,5136	0,2514	0,5027
	0,9	1,7897	2,6897	0,2690	0,2690
					0,2511

Продовження таблиці 2.4

9	0,9	1,7894	2,6894	0,2689	0,2689
	0,95	1,9239	2,8739	0,2874	0,5748
	0,95	1,9331	2,8831	0,2883	0,5766
	1	2,0777	3,0777	0,3078	0,3078
					0,2880
10	1	2,0774			

Таблиця 2.5. Порівняння результатів

i	x	$y_{Ейл}$	y_{P_K}
0	0	0,5000	0,5000
1	0,1	0,5500	0,5578
2	0,2	0,6150	0,6321
3	0,3	0,6965	0,7248
4	0,4	0,7962	0,8377
5	0,5	0,9158	0,9731
6	0,6	1,0573	1,1332
7	0,7	1,2231	1,3206
8	0,8	1,4154	1,5383
9	0,9	1,6369	1,7894
10	1,0	1,8906	2,0774

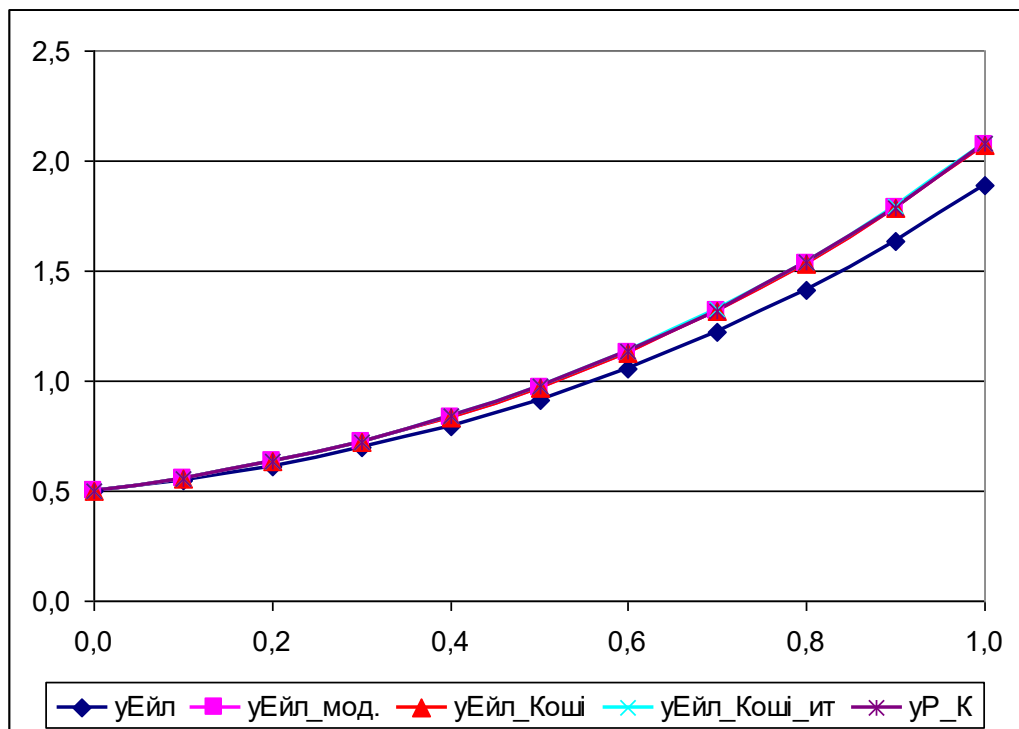


Рис. 2.3 – Порівняння результатів розв'язку диференціального рівняння з прикладу 1, отриманих різними методами

Як видно з порівняння результатів (табл. 2.5, рис. 2.3), є достатньо помітна різниця між розв'язками даного диференціального рівняння, отриманими методами Рунге-Кутти та Ейлера.

Розв'язок у MathCAD

Mathcad має ряд вбудованих функцій, призначених для вирішення ЗДР. Кожна з цих функцій призначена для чисельного рішення диференціального рівняння. В результаті рішення виходить матриця, що містить значення функції, обчислені на деякій множині точок (на деякій сітці значень). Для кожного алгоритму, який використовується при вирішенні диференціальних рівнянь, Mathcad має різні вбудовані функції. Незважаючи на різні методи пошуку рішення, кожна з цих функцій вимагає, щоб були задані принаймні наступні величини, необхідні для пошуку рішення:

- початкові умови.
- набір точок, в яких потрібно знайти рішення.

Саме диференціальне рівняння, записане в деякому спеціальному вигляді.

Найбільш часто використовують функцію *rkfixed*. Ця функція повертає таблицю результатів рішення заданої системи звичайних диференціальних рівнянь методом Рунге-Кутта четвертого порядку з фіксованим кроком інтегрування.

Функція *rkfixed*(y, x_1, x_2, n, F) має п'ять аргументів:

- y – вектор початкових значень шуканої функції;
- x_1 – початкове значення незалежної змінної;
- x_2 – кінцеве значення незалежної змінної;
- n – фіксоване число кроків інтегрування;
- F – праві частини системи рівнянь, записані у векторі в символному вигляді.

Функція *rkfixed*(y, x_1, x_2, n, F) повертає таблицю результатів рішень з $(m + 1)$ стовпцями і n рядками (m – число рівнянь у системі). Нульовий стовець таблиці – це поточні значення незалежної змінної (аргументу) x . Вони визначаються через x_1, x_2, \dots, x_n . Наступні стовпці рішення визначають значення ординат шуканих $y_1(x), y_2(x), \dots$ для відповідних поточних значень аргументу x .

Метод Рунге-Кутта:

ORIGIN := 0

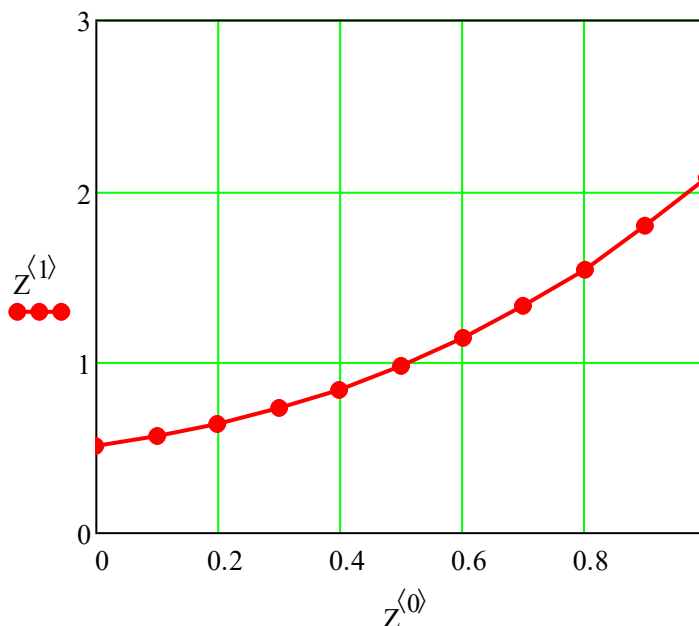
y := 0.5 x1 := 0 xk := 1 - початкові умови

D(x,y) := x + y - диференціальне рівняння

Z := rkfixed(y,x1,xk,10,D)

Z =

	0	1
0	0	0.5
1	0.1	0.5578
2	0.2	0.6321
3	0.3	0.7248
4	0.4	0.8377
5	0.5	0.9731
6	0.6	1.1332
7	0.7	1.3206
8	0.8	1.5383
9	0.9	1.7894
10	1	2.0774



4. Розв'язування систем звичайних диференціальних рівнянь

Нехай дана система диференціальних рівнянь 1-го порядку

$$\begin{cases} y' = f(x, y, z), \\ z' = \varphi(x, y, z) \end{cases} \quad (2.7) \quad \begin{matrix} \text{з початковими умовами} \\ x = x_0, y(x_0) = y_0, z(x_0) = z_0. \end{matrix} \quad (2.8)$$

Відповідно до методу Ейлера розв'язок можемо знайти за формулами:

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i, z_i) \\ z_{i+1} = z_i + h \cdot \varphi(x_i, y_i, z_i) \end{cases} \quad (i=0, 1, 2, \dots, n-1) \quad (2.9)$$

Система m диференціальних рівнянь 1-го порядку має вигляд:

$$\begin{cases} y'_1 = F_1(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \\ y'_2 = F_2(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \\ \dots \dots \dots \\ y'_m = F_m(x, y_1, y_2, \dots, y_m) \end{cases} \quad (2.10)$$

Така форма запису системи m диференціальних рівнянь є більш універсальною.

В загальному вигляді розв'язок системи з n звичайних диференціальних рівнянь 1-го порядку:

$$\begin{cases} \frac{dy_j}{dx} = f_j(x, y_m) \\ j = 1, 2, \dots, n; m = 1, 2, \dots, n \end{cases} \quad (2.16)$$

відповідно до методу Рунге-Кутти обчислюється за рівняннями:

$$\begin{cases} y_j^{(i+1)} = y_j^{(i)} + (k_{j,1}^{(i)} + 2k_{j,2}^{(i)} + 2k_{j,3}^{(i)} + k_{j,4}^{(i)}) \\ j = 1, 2, \dots, n \\ k_{j,1}^{(i)} = h \cdot f_j(x_i, y_m^{(i)}); m = 1, 2, \dots, n \\ k_{j,2}^{(i)} = h \cdot f_j\left(x_i + \frac{h}{2}, y_m^{(i)} + \frac{k_{m,1}^{(i)}}{2}\right); m = 1, 2, \dots, n \\ k_{j,3}^{(i)} = h \cdot f_j\left(x_i + \frac{h}{2}, y_m^{(i)} + \frac{k_{m,2}^{(i)}}{2}\right); m = 1, 2, \dots, n \\ k_{j,4}^{(i)} = h \cdot f_j\left(x_i + h, y_m^{(i)} + k_{m,3}^{(i)}\right); m = 1, 2, \dots, n \end{cases} \quad (2.17)$$

Приклад 2. Розрахунок вихідних температур в прямоточному кожухотрубному теплообмінному апараті (за моделлю витіснення - витіснення)

ORIGIN := 1 Вихідні дані:
g1 := 2 g2 := 3 c1 := 4180
c2 := 3900 f := 24 K := 400
t10 := 95 t20 := 10 L := 3

Модель

$$\begin{cases} \frac{dt_1}{dl} = -\frac{Kf(t_1 - t_2)}{g_1 c_1 L} \\ \frac{dt_2}{dl} = \frac{Kf(t_1 - t_2)}{g_2 c_2 L} \end{cases}$$

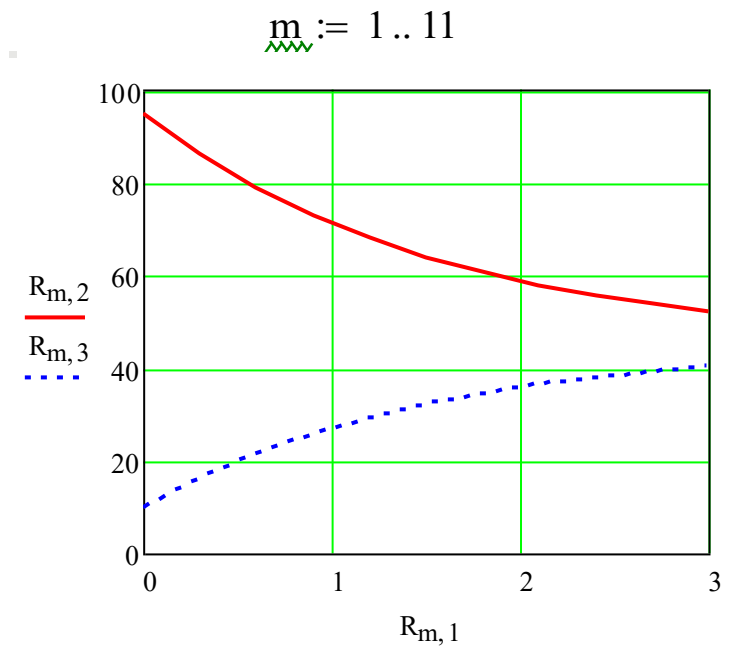
$t := \begin{pmatrix} t_{10} \\ t_{20} \end{pmatrix}$ $t = \begin{pmatrix} 95 \\ 10 \end{pmatrix}$ - початкові умови

$D(1, t) := \begin{bmatrix} \frac{-K \cdot f \cdot (t_1 - t_2)}{g_1 c_1 L} \\ \frac{K \cdot f \cdot (t_1 - t_2)}{g_2 c_2 L} \end{bmatrix}$ - матриця похідних

R := rkfixed(t, 0, L, 10, D) - рішення системи

$R =$

	1	2	3
1	0	95	10
2	0.3	86.14	16.331
3	0.6	78.864	21.53
4	0.9	72.888	25.8
5	1.2	67.979	29.307
6	1.5	63.948	32.187
7	1.8	60.638	34.553
8	2.1	57.919	36.496
9	2.4	55.686	38.091
10	2.7	53.852	39.402
11	3	52.346	40.478



Завдання для практичної роботи №2

Мета: Набути навичок використання методів для чисельного розв'язання звичайних диференціальних рівнянь і їх систем.

Завдання 1. Відповідно до варіанту завдання розв'язати методом Ейлера надане диференціальне рівняння з відповідною початковою умовою на інтервалі $[0, 1]$ з кроком $h = 0,1$. Результати розв'язку навести у вигляді таблиці та графіку.

Примітка. При виконанні завдання не дозволяється використовувати вбудовані функції математичних пакетів, готові програми тощо.

Завдання 2. Розв'язати надане диференціальне рівняння (див. завдання 1) методом Ейлера в середовищі MathCad. Результати розв'язку навести у вигляді таблиці та графіку. Порівняти результати завдань 1 та 2.

Завдання 3. Розв'язати надане диференціальне рівняння (див. завдання 1) методом Рунге-Кутти в середовищі MathCad. Результати розв'язку навести у вигляді таблиці та графіку. Порівняти результати, отримані різними методами.

Завдання 4. Відповідно до варіанту завдання розв'язати методом Рунге-Кутти надану систему диференціальних рівнянь з відповідною початковою умовою на заданому інтервалі. Результати розв'язку навести у вигляді таблиці та графіку. Дослідити вплив кроку (кількості відрізків, на які розбивається інтервал) на розв'язок системи.

Практична робота №3

Використання методів чисельного інтегрування та диференціювання для ідентифікації динамічних характеристик.

Теоретичні відомості

В процесі моделювання як технологічних об'єктів, так і систем керування доводиться вирішувати задачу розв'язування (обчислення) інтегралів. Наприклад, при ідентифікації деяких динамічних характеристик. Аналітичне розв'язання інтегралів використовувати не завжди зручно, не кажучи вже про інтеграли, що не беруться. Тому в таких випадках застосовують чисельні методи розв'язання визначених інтегралів.

1. Чисельні методи розв'язання визначених інтегралів

1.1. Постановка задачі

Потрібно знайти (обчислити) визначений інтеграл

$$I = \int_a^b f(x)dx. \quad (3.1)$$

Задача чисельного інтегрування полягає в знаходженні наближеного значення інтегралу (3.1) за заданими або обчисленими значеннями підінтегральної функції $f(x)$ в деяких точках (вузлах) відрізка $[a, b]$.

Обчислення визначеного інтеграла (3.1) геометрично зводиться до обчислення площі криволінійної трапеції, обмеженої графіком підінтегральної функції $f(x)$, відрізком $[a, b]$ вісі абсцис і прямими $x = a$ та $x = b$.

1.2. Формула трапецій

Ідея методу трапецій полягає в обчисленні площі звичайної трапеції замість криволінійної (рис. 3.1). Тоді:

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a) \frac{f(a)+f(b)}{2} \quad (3.2)$$

Похибка інтегралу, обчисленого за формулою (3.2) буде доволі значною (рис. 3.1-а) і дорівнюватиме різниці точного і наближеного значень інтегралу:

$$R = \int_a^b f(x)dx - (b-a) \frac{f(a)+f(b)}{2}$$

Для зменшення похибки розіб'ємо інтервал $[a, b]$ на n частин довжиною

$h = \frac{b-a}{n}$ (крок інтегрування) і отримуємо вузлові точки $x_0 = a$, $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h$, ..., $x_n = x_0 + nh = b$. Тоді значення підінтегральної функції у вузлах дорівнюють: $y_0 = f(x_0)$, $y_1 = f(x_1)$, ..., $y_n = f(x_n)$ (рис. 3.1-б). Застосуємо формулу (3.2) до кожного часткового відрізка $[x_i, x_{i+1}]$ ($i = 0, 1, \dots, n-1$). Тоді:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} (x_{i+1} - x_i)$$

а на всьому відрізку $[a, b]$ – маємо узагальнену формулу трапецій:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} [f(x_i) + f(x_{i+1})] (x_{i+1} - x_i)$$

або:

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1} \right). \quad (3.3)$$

де n – довільне додатне ціле число.

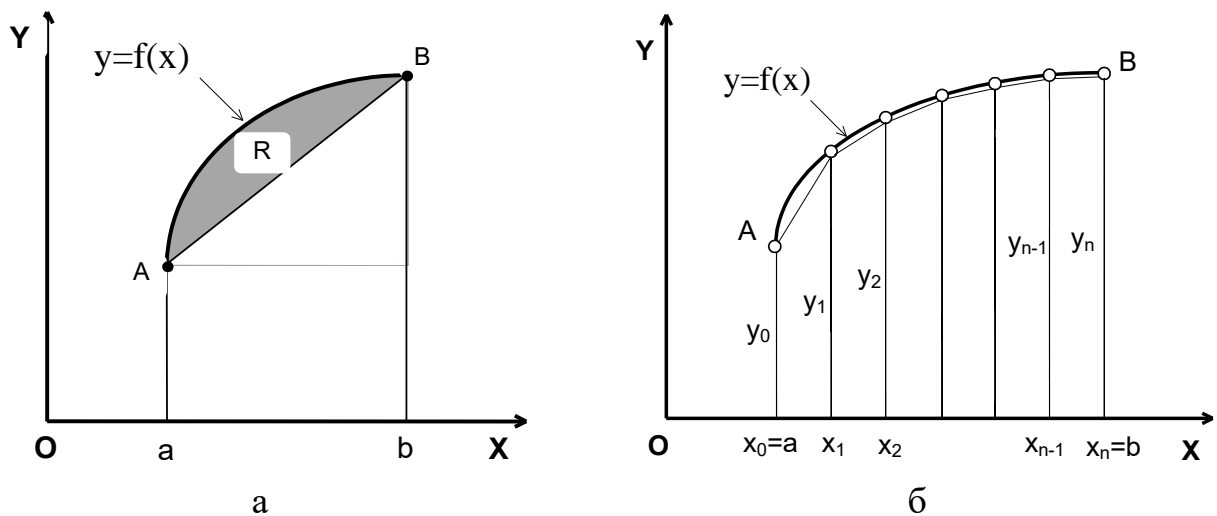


Рисунок 3.1 – Ілюстрація геометричного змісту формули трапецій
а – формула (3.2), б – формула (3.3).

Залишковий член, за яким визначають похибку значення інтегралу, має вигляд:

$$R \approx -\frac{(b-a) \cdot h^2}{12} f''(\xi) \quad \text{де } a < \xi < b \quad (3.4)$$

Або можна застосувати формулу:

$$|R| \leq \frac{|b-a|}{12} \max |\Delta^2 y| \quad (3.5)$$

де $\max |\Delta^2 y|$ – максимальне значення кінцевих різниць другого порядку.

На практиці доволі зручним (особливо за наявності комп'ютерної програми) є використання способу подвійного прорахунку, який полягає в тому, що інтеграл розраховується двічі – з поділом інтервалу $[a, b]$ на n та на $2n$ частин. Якщо різниця між цими значеннями не перевищує граничної похибки ε :

$$|I_n - I_{2n}| \leq \varepsilon \quad (3.6)$$

то останнє значення приймається в якості наближеного значення інтегралу. Похибка при цьому визначається за формулою:

$$\Delta = \frac{|I_n - I_{2n}|}{3} \quad (3.7)$$

Якщо ж умова (3.6) не виконується, тоді кількість частин поділу інтервалу $[a, b]$ збільшують ще вдвічі. Так відбувається поки не буде досягнуто потрібної точності.

1.3. Формула парабол (Сімпсона)

Розіб'ємо інтервал $[a, b]$ на n частин довжиною $h = \frac{b-a}{n}$ (крок інтегрування), де n – ціле **парне** число. Як і в методі трапецій отримаємо вузлові точки $x_0 = a$, $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h$, ..., $x_n = x_0 + nh = b$. Тоді значення підінтегральної функції y вузлах дорівнюють: $y_0 = f(x_0)$, $y_1 = f(x_1)$, ..., $y_n = f(x_n)$. На кожній парі відрізків (тому n обов'язково має бути парним) підінтегральну криву замінюють параболою. В результаті отримуємо формулу парабол (Сімпсона):

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} [y_0 + y_n + 4(y_1 + y_3 + y_5 + \dots + y_{n-1}) + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{n-2})] \quad (3.8)$$

або:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[(y_0 + y_n) + 4 \sum_{i=0}^{n-1} y_{2i+1} + 2 \sum_{i=1}^{n-1} y_{2i} \right] \quad (3.9)$$

Для оцінки похибки визначеного інтегралу за формулою Сімпсона застосовують формулу:

$$R \approx -\frac{(b-a) \cdot h^4}{180} f^{(IV)}(\xi) \quad \text{де } a < \xi < b \quad (3.10)$$

А для функції, заданої таблицею, оцінку похибки (залишкового члена) можна обчислити за формулою:

$$|R| \leq \frac{|b-a|}{180} \cdot \max|\Delta^4 y| \quad (3.11)$$

де $\max|\Delta^4 y|$ – максимальне значення кінцевих різниць четвертого порядку.

Також на практиці, як і для методу трапецій, зручно використовувати спосіб подвійного прорахунку. Але в разі виконання умови (3.6) похибка обчисленого наближеного значення визначається за формулою:

$$\Delta = \frac{|I_n - I_{2n}|}{15} \quad (3.12)$$

1.4. Приклади

Приклад 1. Необхідно обчислити значення інтегралу $\int_0^1 e^{x^2} dx$ за формулами: а) парабол; б) трапецій.

Розв'язок.

а) Скористаємося формулою парабол (3.8). Розіб'ємо інтервал $[0, 1]$ на 10 частин (парне число). Тоді крок становитиме $h = 0,1$. Дані запишемо в таблицю 3.1.

Таблиця 3.1. Обчислення прикладу 1 за формулою парабол

i	x_i	y_0, y_n	y_i – непарні	y_i – парні
0	0	1		
1	0,1		1,0101	
2	0,2			1,0408
3	0,3		1,0942	
4	0,4			1,1735
5	0,5		1,2840	
6	0,6			1,4333
7	0,7		1,6323	
8	0,8			1,8965
9	0,9		2,2479	
10	1,0	2,7183		
	Σ	3,7183	7,2685	5,5441

Тоді, відповідно до формули парабол (3.8), інтеграл дорівнює:

$$\int_0^1 e^{x^2} dx = \frac{0,1}{3} (3,7183 + 4 \cdot 7,2685 + 2 \cdot 5,5441) \approx 1,4627$$

б) Скористаємося формулою трапецій (3.3):

$$\int_0^1 e^{x^2} dx \approx h \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1} \right) = 0,1 \left(\frac{3,7183}{2} + 7,2685 + 5,5441 \right) \approx 1,4501$$

Отже, за формулою парабол $I \approx 1,4627$, а за формулою трапецій $I \approx 1,4501$.

Приклад 2. Обчислити значення інтегралу, якщо функція $f(x)$ задана таблицею 3.2.

Таблиця 3.2. Значення підінтегральної функції у вузлах

x	2,4	2,9	3,4	3,9	4,4	4,9
y	9,958	11,266	12,417	13,438	14,350	15,169
x	5,4	5,9	6,4	6,9	7,4	
y	15,909	16,581	17,194	17,755	18,271	

Розв'язок.

Визначимо з таблиці крок інтегрування та кількість відрізків: $h = 0,5; n = 10$.

1) Скористаємось формулою трапецій (3.3):

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1} \right) = 0,5 \left(\frac{9,958 + 18,271}{2} + 11,266 + 12,417 + \right. \\ \left. + 13,438 + 14,35 + 15,169 + 15,909 + 16,581 + 17,194 + 17,755 \right) \approx 74,10$$

Похибку рахуємо за формулою (3.5). Для цього обчислюємо кінцеві різниці:

x	y	Δy	$\Delta^2 y$
2,40	9,958	1,3080	-0,1567
2,90	11,266	1,1513	-0,1301
3,40	12,417	1,0212	-0,1092
3,90	13,438	0,9119	-0,0926
4,40	14,350	0,8193	-0,0792
4,90	15,169	0,7402	-0,0682
5,40	15,909	0,6719	-0,0592
5,90	16,581	0,6127	-0,0517
6,40	17,194	0,5610	-0,0454
6,90	17,755	0,5156	
7,40	18,271		

Тоді:

$$|R| \leq \frac{|b-a|}{12} \max|\Delta^2 y| = \frac{7.4-2.4}{12} \cdot 0.1567 \approx 0.065.$$

2) Скористаємось тепер формулою Сімпсона (3.9). Запишемо значення підінтегральної функції, згрупувавши їх для зручності складання:

<i>i</i>	<i>x_i</i>	<i>y_i</i>		
		<i>i</i> = 0, <i>n</i>	<i>i</i> = 1, 3, 5, ...	<i>i</i> = 2, 4, 6, ...
0	2,4	9,9577		
1	2,9		11,2656	
2	3,4			12,4169
3	3,9		13,4381	
4	4,4			14,3500
5	4,9		15,1693	
6	5,4			15,9095
7	5,9		16,5814	
8	6,4			17,1941
9	6,9		17,7551	
10	7,4	18,2707		
Σ		28,2284	74,2096	59,8706

Отже:

$$\int_{2.4}^{7.4} f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[(y_0 + y_n) + 4 \sum_{i=0}^{n-1} y_{2i+1} + 2 \sum_{i=1}^{n-1} y_{2i} \right] =$$

$$= \frac{0,5}{3} (28,2284 + 4 \cdot 74,2096 + 2 \cdot 59,8706) \approx 74,1346$$

Похибку рахуємо за формулою (3.11). Для цього обчислюємо кінцеві різниці:

<i>x</i>	<i>y</i>	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
2,40	9,9577	1,3080	-0,1567	0,0266	-0,0057
2,90	11,2656	1,1513	-0,1301	0,0209	-0,0042
3,40	12,4169	1,0212	-0,1092	0,0166	-0,0032
3,90	13,4381	0,9119	-0,0926	0,0134	-0,0025
4,40	14,3500	0,8193	-0,0792	0,0109	-0,0019
4,90	15,1693	0,7402	-0,0682	0,0090	-0,0015
5,40	15,9095	0,6719	-0,0592	0,0075	-0,0012
5,90	16,5814	0,6127	-0,0517	0,0063	
6,40	17,1941	0,5610	-0,0454		
6,90	17,7551	0,5156			
7,40	18,2707				

Тоді:

$$|R| \leq \frac{|b-a|}{180} \cdot \max|\Delta^4 y| = \frac{7.4-2.4}{180} \cdot 0.0057 \approx 0.00016.$$

Таким чином, можемо порівняти результати, отримані обома методами:

Формула	Значення інтегралу	R
трапецій	74,10	0,065
Сімпсона	74,1346	0,00016

Як видно з таблиці, похибка методу Сімпсона на два порядки менша, ніж в методі трапецій.

Приклад 3. Обчислити значення інтегралу $\int_{0,2}^{1,0} \frac{x}{\sqrt{x^2+3}} dx$ з точністю

$\varepsilon = 0,001$. Величину кроку h , що забезпечує задану точність, визначити за допомогою методу подвійного перерахунку.

Розв'язок.

1) Метод трапецій. Оберемо початкове значення кроку інтегрування $h = 0,2$ ($n = 4$). Дані запишемо в таблицю:

n	x	y	
0	0,2	0,1147	
1	0,4		0,2250
2	0,6		0,3273
3	0,8		0,4193
4	1,0	0,5000	
Σ		0,6147	0,9717

Обчислимо інтеграл за формулою трапецій (3.3):

$$\int_0^1 \frac{x}{\sqrt{x^2+3}} dx = 0,2 \cdot \left(\frac{0,6147}{2} + 0,9717 \right) \approx 0,2558$$

Збільшимо кількість відрізків вдвічі $n = 8$. Тоді $h = 0,1$. Обчислимо значення функції:

<i>n</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	
0	0,2	0,1147	
1	0,3		0,1707
2	0,4		0,2250
3	0,5		0,2774
4	0,6		0,3273
5	0,7		0,3747
6	0,8		0,4193
7	0,9		0,4611
8	1,0	0,5000	
Σ		0,6147	2,25546

Обчислимо інтеграл за формулою трапецій (3.3):

$$\int_0^1 \frac{x}{\sqrt{x^2+3}} dx = 0,1 \cdot \left(\frac{0,6147}{2} + 2,2555 \right) \approx 0,2563$$

Перевіримо виконання умови (3.6):

$$|I_{2n} - I| = |0,2563 - 0,2557| = 0,0005 < 0,001$$

Отже, умова виконується, розрахунок завершено. Похибка дорівнює (3.7):

$$\Delta = \frac{|I_n - I_{2n}|}{3} = \frac{0,0005}{3} \approx 0,00017$$

Відповідь: $I=0,2563$; $\Delta \approx 0,00017$; $n=8$; $h=0,1$.

2) Обчислимо інтеграл за формулою Сімпсона (3.9):

<i>i</i>	<i>x_i</i>	<i>y_i</i>		
		<i>i = 0, n</i>	<i>i = 1, 3, 5, ...</i>	<i>i = 2, 4, 6, ...</i>
0	0,2	0,1147		
1	0,4		0,2250	
2	0,6			0,3273
3	0,8		0,4193	
4	1,0	0,5000		
Σ		0,6147	0,6443	0,3273

Тоді:

$$\int_0^1 \frac{x}{\sqrt{x^2+3}} dx = \frac{0,2}{3} (0,6147 + 4 \cdot 0,6443 + 2 \cdot 0,3273) \approx 0,25643$$

Збільшимо кількість відрізків вдвічі $n=8$. Тоді $h=0,1$. Обчислимо значення функції:

i	xi	yi		
		$i = 0, n$	$i = 1, 3, 5, \dots$	$i = 2, 4, 6, \dots$
0	0,2	0,1147		
1	0,3		0,1707	
2	0,4			0,2250
3	0,5		0,2774	
4	0,6			0,3273
5	0,7		0,3747	
6	0,8			0,4193
7	0,9		0,4611	
8	1,0	0,5000		
Σ		0,6147	1,2838	0,9717

Обчислимо інтеграл за формулою Сімпсона (3.9):

$$\int_0^1 \frac{x}{\sqrt{x^2+3}} dx = \frac{0,1}{3} (0,6147 + 4 \cdot 1,2838 + 2 \cdot 0,9717) \approx 0,25644$$

Перевіримо виконання умови (3.6):

$$|I_{2n} - I| = |0,25643 - 0,25644| = 0,00001 < 0,001$$

Отже, умова виконується, розрахунок завершено. Похибка дорівнює (3.12):

$$\Delta = \frac{|I_n - I_{2n}|}{15} = \frac{0,00001}{15} \approx 0,67 \cdot 10^{-6}$$

Відповідь: $I = 0,2564$; $\Delta \approx 0,67 \cdot 10^{-6}$; $n = 8$; $h = 0,1$.

Порівняємо результати, отримані різними методами:

Формула	Значення інтегралу	$ R $
трапецій	0,2563	$0,17 \cdot 10^{-3}$
Сімпсона	0,2564	$0,67 \cdot 10^{-6}$

Як видно з таблиці, похибка методу Сімпсона на три порядки менша, ніж в методі трапецій.

2. Чисельне диференціювання

Задача чисельного диференціювання полягає в обчисленні значень похідних ($f'(x), f''(x)$) для функції $y = f(x)$, яка задана таблицею.

Для розв'язання цієї задачі вихідну функцію замінюють інтерполюючою, для якої знаходять похідні. Найчастіше для цього використовують інтерполяційні формули Ньютона.

Диференціювання в першій половині таблиці. Перша похідна від першої інтерполяційної формули Ньютона обчислюється за формулою:

$$f'(x) \approx \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 + \frac{2q-1}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{3q^2-6q+2}{6} \Delta^3 y_0 + \frac{2q^3-9q^2+11q-3}{12} \Delta^4 y_0 + \dots \right] \quad (3.13)$$

де $q = \frac{x-x_0}{h}$, а $\Delta y_0, \Delta^2 y_0, \Delta^3 y_0, \Delta^4 y_0$ – скінченні різниці відповідних порядків.

Диференціювання в другій половині таблиці. Перша похідна від другої інтерполяційної формули Ньютона обчислюється за формулою:

$$f'(x) \approx \frac{1}{h} \left[\Delta y_{n-1} + \frac{2q+1}{2} \Delta^2 y_{n-2} + \frac{3q^2+6q+2}{6} \Delta^3 y_{n-3} + \frac{2q^3+9q^2+11q+3}{12} \Delta^4 y_{n-4} + \dots \right] \quad (3.14)$$

де $q = \frac{x-x_n}{h}$, а $\Delta y_{n-1}, \Delta^2 y_{n-2}, \Delta^3 y_{n-3}, \Delta^4 y_{n-4}$ – скінченні різниці відповідних порядків.

Коли треба знайти похідні у вузлах, формули для обчислення похідних в першій і другій половинах таблиці, відповідно, спрощуються за рахунок того, що $q = 0$:

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} + \dots \right] \quad (3.15)$$

$$f'(x_n) \approx \frac{1}{h} \left[\Delta y_{n-1} + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2} + \frac{\Delta^3 y_{n-3}}{3} + \frac{\Delta^4 y_{n-4}}{4} + \dots \right] \quad (3.16)$$

У випадку, коли похідні можна поррахувати достатньо приблизно, користуються лінійною залежністю. Наприклад, маємо такі значення функції $y = f(x)$:

x	1,9	2	2,1
y	3,57	4,05	4,57

Для обчислення похідної в точці $x = 2$ використовують, так звану, центральну формулу числового диференціювання:

$$\frac{dy}{dx} \approx \frac{y_2 - y_0}{2h} = \frac{4,57 - 3,57}{2 \cdot 0,1} = \frac{1}{0,2} = 5$$

Для обчислення похідних у граничних точках використовують два сусідніх вузла:

$$x = 1,9 \quad \frac{dy}{dx} \approx \frac{y_1 - y_0}{h} = \frac{4,05 - 3,57}{0,1} = \frac{0,48}{0,1} = 4,8$$

$$x = 2,1 \quad \frac{dy}{dx} \approx \frac{y_2 - y_1}{h} = \frac{4,57 - 4,05}{0,1} = \frac{0,52}{0,1} = 5,2$$

Завдання для практичної роботи №3

Мета: Набути практичних навичок застосування формул чисельного інтегрування для різних способів завдання підінтегральних функцій.

Завдання 1.

1. Відповідно до свого варіанту завдання обчислити з точністю $\varepsilon=0,001$ значення визначеного інтегралу:

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad \text{а) методом трапецій;} \quad \text{б) методом Сімпсона.}$$

Для визначення точності застосувати метод подвійного перерахунку.

2. Проаналізувати яка кількість відрізків знадобилась при інтегруванні кожним з методів для досягнення заданої точності. Порівняти отримані результати.

Завдання 2.

3. Відповідно до свого варіанту завдання обчислити значення визначеного інтегралу, де підінтегральна функція задана таблицею значень, за допомогою формул трапецій та Сімпсона.
4. Оцінити похибки отриманих результатів.
5. Порівняти отримані результати.
6. Оформити звіт з практичної роботи. Звіт повинен включати всі розрахункові формули, хід розрахунків з необхідними поясненнями, результати розрахунків для кожного з використаних методів та висновки.

Практична робота №4

Комп'ютерне моделювання ізотермічних реакторів ідеального змішування та ідеального витиснення безперервної дії

Теоретичні відомості

Технологічні апарати, в яких відбуваються хімічні процеси, називаються реакторами і є одними з найбільш складних об'єктів для моделювання. В даній роботі досліджуються реактори з типовими структурами потоків – реактор ідеального змішування (РІЗ) та реактор ідеального витиснення (РІВ) в ізотермічних умовах.

1. Реактор ідеального змішування (РІЗ)

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

$$\frac{1}{\tau}(C_{\text{вх}i} - C_i) + W r_i = 0 \quad (4.1)$$

де $i = 1, 2, \dots, n$ – кількість компонентів реакції; τ – середній час перебування потоку в реакторі; $C_{\text{вх}i}$, C_i – вхідна, поточна (вихідна) концентрація i -го компонента; $W r_i$ – швидкість перетворення i -го компонента в хімічній реакції;

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



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

$$\begin{cases} W r_A = \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \\ W r_B = \frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S \\ W r_S = \frac{dC_S}{dt} = k_2 C_B - k_3 C_S \\ W r_P = \frac{dC_P}{dt} = k_4 C_B \end{cases} \quad (4.3)$$

У статичному режимі ($\frac{dC}{dt}=0$) модель ізотермічного реактора ідеального змішування набуває вигляду:

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau}(C_{A_{ex}} - C_A) - k_1 C_A = 0 \\ \frac{1}{\tau}(C_{B_{ex}} - C_B) + k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S = 0 \\ \frac{1}{\tau}(C_{S_{ex}} - C_S) + k_2 C_B - k_3 C_S = 0 \\ \frac{1}{\tau}(C_{P_{ex}} - C_P) + k_4 C_B = 0 \end{cases} \quad (4.4)$$

Зробивши перегрупування відносно початкових концентрацій, приведемо систему (4.4) до вигляду:

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

Отже, модель РІЗ статичному ізотермічному режимі набуває вигляду системи лінійних алгебраїчних рівнянь, де невідомими є поточні значення концентрацій кожного з компонентів (C_i , $i = 1, 2, \dots, n$, де n – кількість компонентів) в певний момент часу (τ). Розв'язавши цю систему лінійних рівнянь при заданих значеннях констант швидкостей реакції, часу перебування і вхідних концентрацій, можна одержати концентрації компонентів у вихідному потоці (у заданий момент часу τ).

Систему (4.5) зручно навести у матричному вигляді для подальшого розв'язання на ЕОМ:

$$C_{\text{вх}} = K \cdot C, \quad (4.6)$$

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

$$C = \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \\ C_S \\ C_P \end{pmatrix}, \quad C_{\text{ex}} = \begin{pmatrix} C_{A_{ex}} \\ C_{B_{ex}} \\ C_{S_{ex}} \\ C_{P_{ex}} \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

$$K = \begin{pmatrix} (1+k_1\tau) & 0 & 0 & 0 \\ -k_1\tau & 1+(k_2+k_4)\tau & -k_3\tau & 0 \\ 0 & -k_2\tau & (1+k_3\tau) & 0 \\ 0 & -k_4\tau & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ -- матриця коефіцієнтів}$$

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

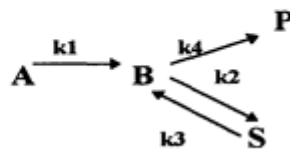
$$C = K^{-1} \cdot C_{B_{ex}} \quad (4.8)$$

Розв'язання задачі в середовищі Mathcad

Приклад розв'язання задачі для наступних вихідних даних:

- концентрації компонентів у вхідному потоці: $C_{A_{вх}} = 1 \text{ кмоль/м}^3$;
 $C_{B_{вх}} = C_{P_{вх}} = C_{S_{вх}} = 0$,
- константи швидкостей окремих стадій реакції: $k_1 = 0,5 \text{ год}^{-1}$; $k_2 = 0,4 \text{ год}^{-1}$;
 $k_3 = k_4 = 0,3 \text{ год}^{-1}$.

Схема хімічної реакції:



Початкова концентрація компонентів, кмоль/м³ та константи швидкості хімічної реакції, год⁻¹

$$C_{inp} := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} C_{inp}(A) \\ C_{inp}(B) \\ C_{inp}(S) \\ C_{inp}(D) \end{matrix} \quad k := \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.4 \\ 0.3 \\ 0.3 \end{pmatrix} \begin{matrix} k1 \\ k2 \\ k3 \\ k4 \end{matrix}$$

Час перебування:

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

Матриці коефіцієнтів:

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

Розв'язання системи матричним методом при різних термінах перебування:

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

Поточні концентрації знайдені:

$$\underline{C} = \begin{pmatrix} 1 & 0.667 & 0.5 & 0.4 & 0.333 & 0.286 \\ 0 & 0.207 & 0.238 & 0.237 & 0.228 & 0.216 \\ 0 & 0.064 & 0.119 & 0.15 & 0.166 & 0.173 \\ 0 & 0.062 & 0.143 & 0.213 & 0.273 & 0.325 \end{pmatrix}$$

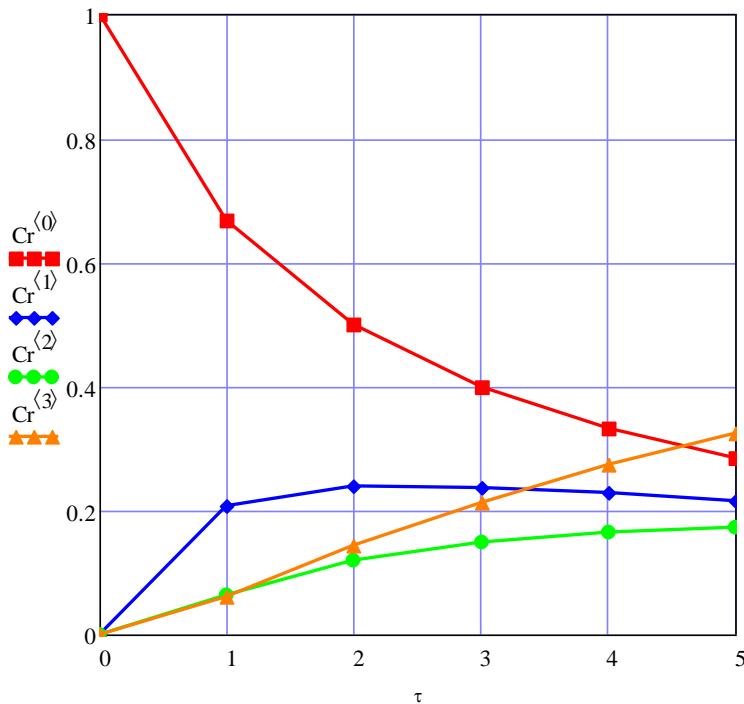
Для зручності побудови графіків транспонуємо отриману матрицю \underline{C} :

$$\underline{C}_T := \underline{C}^T$$

$$\underline{C}_T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.667 & 0.207 & 0.064 & 0.062 \\ 0.5 & 0.238 & 0.119 & 0.143 \\ 0.4 & 0.237 & 0.15 & 0.213 \\ 0.333 & 0.228 & 0.166 & 0.273 \\ 0.286 & 0.216 & 0.173 & 0.325 \end{pmatrix}$$

Тоді, 1-й стовпчик матриці \underline{C} (1-й рядок матриці \underline{C}_T) – початкова концентрація, 2, 3, 4, 5 – поточні значення концентрації компонентів А, В, S, D у відповідні моменти часу.

Кінетичні криві мають вигляд:



2. Реактор ідеального витиснення (РІВ)

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

$$-u \frac{\partial C_i}{\partial l} + W r_i = 0, \quad (4.9)$$

$$C_i(0) = C_{ex_i}$$

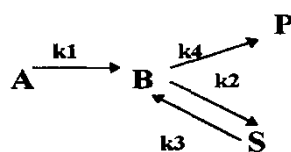
де u – середня лінійна швидкість потоку в РІВ; l – координата довжини реактора.

Враховуючи, що $dl/u = d\tau$, систему (4.9) запишемо так:

$$\frac{dC_i}{d\tau} = W r_i, \quad (4.10)$$

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

Розглянемо для прикладу реактор, в якому протікає та сама ізотермічна хімічна реакція (4.2), що і в РІЗ:



В цьому випадку математична модель РІВ буде мати вигляд системи звичайних диференціальних рівнянь (4.11) з відповідними граничними умовами:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{d\tau} = -k_1 C_A \\ \frac{dC_B}{d\tau} = k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S \\ \frac{dC_S}{d\tau} = k_2 C_B - k_3 C_S \\ \frac{dC_P}{d\tau} = k_4 C_B \end{cases} \quad (4.11)$$

Початкові умови: $C_{A_{ex}} = 1$ кмоль/м³; $C_{B_{ex}} = C_{S_{ex}} = C_{P_{ex}} = 0$.

Система диференціальних рівнянь (4.11) описує зміну концентрацій реагуючих речовин від часу перебування в РІВ (або по його довжині).

Для розв'язання системи (4.11) можна скористатися будь-яким з відомих чисельних методів, наприклад, методом Ейлера або методом Рунге-Кутти.

Результати рішення моделі РІВ на ЕОМ – кінетичні криві потрібно намалювати як графічну залежність $C_i = f(\tau)$:

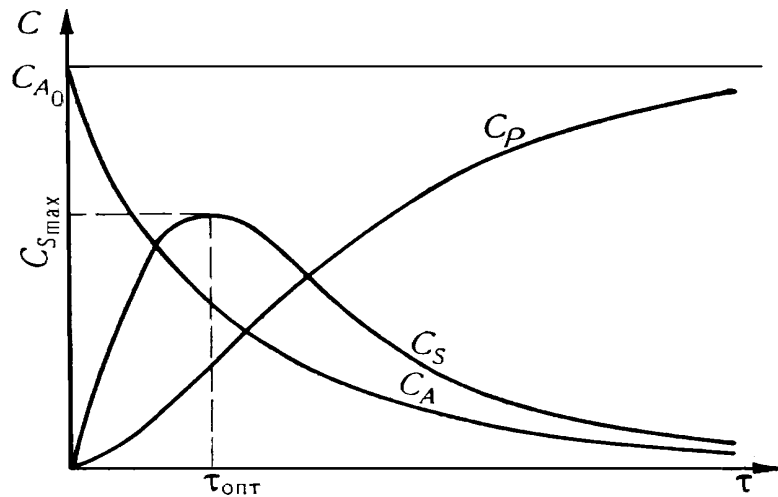
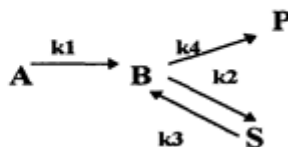


Рис. 4.1 – Приклад кінетичних кривих $C_i = f(\tau)$

Розв'язання задачі в середовищі Mathcad

Схема хімічної реакції:



Початкова концентрація компонентів, кмоль/м³ та константи швидкості хімічної реакції, год⁻¹

$$\text{Cinp} := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{Cinp(A)} \\ \text{Cinp(B)} \\ \text{Cinp(S)} \\ \text{Cinp(D)} \end{array} \quad \text{k} := \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.4 \\ 0.3 \\ 0.3 \end{pmatrix} \begin{array}{l} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \\ k_4 \end{array}$$

Час перебування:

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

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

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

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

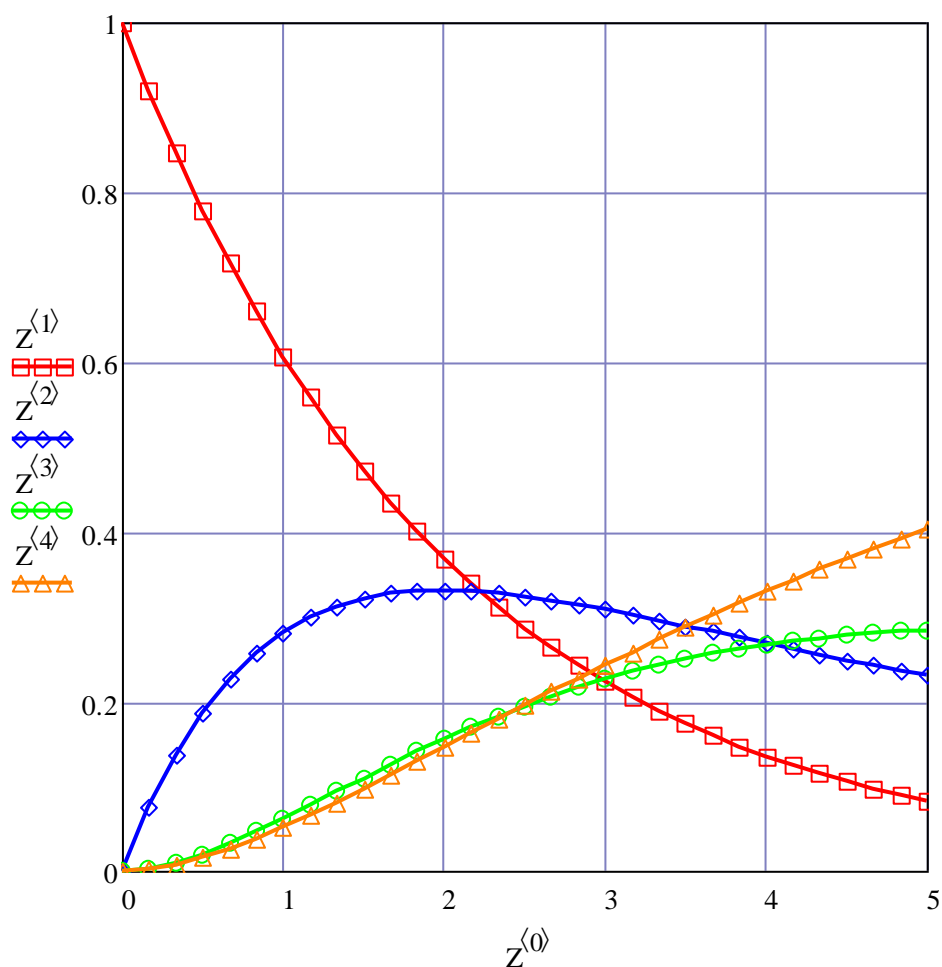
$$Z := \text{rkfixed}(\text{Cinp}, 0, 5, 30, D)$$

Тоді, з першого по четвертий стовпчик матриці-розв'язку **Z** міститиметься концентрації 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	$2.557 \cdot 10^{-3}$	$1.95 \cdot 10^{-3}$
2	0.333	0.846	0.137	$9.42 \cdot 10^{-3}$	$7.31 \cdot 10^{-3}$
3	0.5	0.779	0.186	0.02	0.015
4	0.667	0.717	0.226	0.032	0.026
5	0.833	0.659	0.257	0.046	0.038
6	1	0.607	0.281	0.061	0.051
7	1.167	0.558	0.299	0.077	0.066
8	1.333	0.513	0.312	0.093	0.081
9	1.5	0.472	0.321	0.11	0.097
10	1.667	0.435	0.327	0.125	0.113
11	1.833	0.4	0.33	0.141	0.13
12	2	0.368	0.331	0.155	0.146
13	2.167	0.338	0.33	0.169	0.163
14	2.333	0.311	0.327	0.182	0.179
15	2.5	0.287	0.324	0.194	...

	0	1	2	3	4
15	2.5	0.287	0.324	0.194	0.195
16	2.667	0.264	0.319	0.206	0.211
17	2.833	0.243	0.314	0.216	0.227
18	3	0.223	0.308	0.226	0.243
19	3.167	0.205	0.302	0.235	0.258
20	3.333	0.189	0.295	0.243	0.273
21	3.5	0.174	0.289	0.25	0.288
22	3.667	0.16	0.282	0.256	0.302
23	3.833	0.147	0.275	0.262	0.316
24	4	0.135	0.268	0.267	0.329
25	4.167	0.125	0.262	0.271	0.343
26	4.333	0.115	0.255	0.275	0.356
27	4.5	0.105	0.249	0.278	0.368
28	4.667	0.097	0.243	0.28	0.38
29	4.833	0.089	0.236	0.282	0.392
30	5	0.082	0.23	0.283	...

Графічна інтерпретація розв'язку (кінетичні криві) матиме вигляд:



Завдання для практичної роботи №4

Мета: Набути практичних навичок побудови та розв'язання математичних моделей об'єктів хімічної технології, в яких відбуваються хімічні перетворення, – РІЗ та РІВ.

1. Повторити: Математичний опис процесів хімічних перетворень (кінетичні моделі).

Завдання 1.

2. Відповідно до наданого варіанту завдання (механізму реакції) скласти статичну математичну модель ізотермічного РІЗ у статиці.
3. Обчислити залежності концентрацій кожного компонента від часу перебування речовин у потоці та побудувати відповідні графіки.
4. Проаналізувати отримані результати. Зробити висновки.

Завдання 2.

5. Відповідно до наданого варіанту завдання (механізму реакції) скласти статичну математичну модель ізотермічного **РІВ** у статиці.
6. Обчислити залежності концентрацій кожного компонента від часу перебування речовин у потоці та побудувати відповідні графіки.
7. Проаналізувати отримані результати. Зробити висновки.
8. Оформити звіт з практичної роботи.

Практична робота №5 (частина 1)

Складання математичних моделей та дослідження технологічних об'єктів керування

1. Технологічний об'єкт – збірник рідини

Теоретичні відомості

1.1. Збірник рідини як об'єкт керування рівня

Нехай у процесі проектування виникає потреба в регулюванні рівня рідини в збірнику. Для створення такої системи керування треба мати конкретну математичну модель збірника рідини як структурного елементу системи регулювання. В цьому ТОК може також бути потреба в керуванні і іншими технологічними параметрами, але в цій роботі ми будемо розглядати тільки регулювання рівня в збірнику рідини.

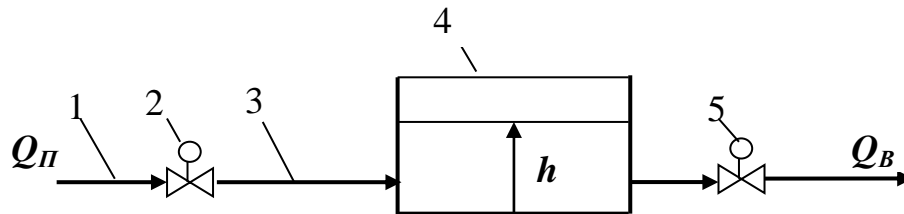


Рис. 5.1 – Розрахункова схема збірника рідини:
1, 3 – ділянки трубопроводів; 2, 5 – регулюючі органи;
4 – збірник рідини; $Q_{\text{п}}$ – витрата вхідного потоку;
 $Q_{\text{в}}$ – витрата вихідного потоку.

Система включає трубопровід 1-3 та регулюючий орган (РО) 2, через які рідина подається в збірник рідини 4, з якого через РО-5 вона передається на виробництво.

За допомогою РО-2 та РО-5 у збірнику встановлюється певний рівень рідини h . Якщо на виробництві потрібна збільшена витрата рідини $Q_{\text{в}}$ то відкривається РО-5, що викличе зменшення рівня h рідини в збірнику 4. Зменшення рівня рідини в збірнику приведе до необхідності відкриття РО-2 і збільшення витрати вхідного потоку $Q_{\text{п}}$. Таким чином рівень рідини h в збірнику реагує як на положення РО-2, так і на положення РО-5.

Надалі будемо вважати зміну вхідного потоку $Q_{\text{п}}$ внаслідок зміни положення РО-2 керуючою дією (керуванням), а зміну положення РО-5, в результаті чого змінюється поперечний переріз потоку і витрата $Q_{\text{в}}$ – збурюючою дією (збуренням). Рівень h – регульована величина.

1.2. Рівняння матеріального балансу

Якщо РО-2 розташований недалеко від збірника 4 так що акумулюючою ємністю ділянки 3 трубопроводу можна знехтувати, то перехідний режим роботи збірника рідини можна описати на основі матеріального балансу рідини.

Нехай РО-2 (рис. 5.1) розміщено біля збірника рідини 4. У цьому випадку перехідний режим роботи системи можна описати так:

$$\frac{dV}{dt} = Q_{\Pi} - Q_B \quad (5.1)$$

де Q_{Π} , Q_B та V – витрата рідини, що подається до збірника, витрата рідини, яка відводиться зі збірника та об'єм рідини у збірнику, відповідно.

Об'єм рідини у збірнику

$$V = F \cdot h, \quad (5.2)$$

де F і h – площа поперечного перерізу збірника і рівень рідини в ньому. Витрата рідини, що проходить через РО-5:

$$Q_B = \alpha \cdot f \cdot \sqrt{2g \cdot h}, \quad (5.3)$$

де f – площа поперечного перерізу РО; g – прискорення сили тяжіння, α – витратний коефіцієнт.

Після підставлення виразів (5.2) і (5.3) у рівняння (5.1), маємо:

$$F \frac{dh}{dt} + \alpha \cdot f \cdot \sqrt{2g \cdot h} = Q_{\Pi} \quad (5.4)$$

Диференціальне рівняння (5.4) є нелінійним диференціальним рівнянням, оскільки змінна h входить під знак радикала. Таке рівняння дає математичний опис збірника, але воно не придатне для подальшого аналізу й використання. Для отримання лінійного диференціального рівняння, за допомогою якого можна встановити відповідні властивості збірника, треба лінеаризувати нелінійне диференціальне рівняння (5.4).

1.3. Лінеаризація та перетворення за Лапласом змінної часу в рівнянні балансу

Для цього запишемо рівняння (5.1) у відхиленнях

$$\frac{d\Delta V}{dt} = \Delta Q_{\Pi}(t) - \Delta Q_B(t), \quad (5.5)$$

де ΔV , $\Delta Q_{\Pi}(t)$, $\Delta Q_B(t)$ – відхилення змінних $V(t)$, $Q_{\Pi}(t)$, $Q_B(t)$ від їх усталених значень V^0 , Q_{Π}^0 , Q_B^0 , тобто

$$V(t) = V^0 + \Delta V$$

$$Q_{II}(t) = Q_{II}^0 + \Delta Q_{II}(t)$$

$$Q_B(t) = Q_B^0 + \Delta Q_B(t)$$

Оскільки витрата рідини $Q_B(t) = \varphi[h(t), f(t)]$, то

$$Q_B(t) = \left(\frac{\partial Q_B}{\partial h} \right)^0 \Delta h(t) + \left(\frac{\partial Q_B}{\partial f} \right)^0 \Delta f(t). \quad (5.6)$$

З формули (5.3) визначаємо частинні похідні, що входять до виразу (5.6):

$$\left(\frac{\partial Q_B}{\partial h} \right)^0 = \alpha \cdot f^0 \frac{1}{2} (2g \cdot h^0)^{\frac{1}{2}-1}$$

або

$$\left(\frac{\partial Q_B}{\partial h} \right)^0 = \alpha \cdot f^0 \frac{2g}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2g \cdot h^0}}. \quad (5.7)$$

де f^0 і h^0 – усталені значення, відповідно, площі поперечного перерізу РО і рівня рідини. Індекс «0» вказує на статичний режим, тобто значення частинних похідних беруться в точці статичного режиму.

Помножимо чисельник і знаменник виразу (5.7) на $\sqrt{2g \cdot h^0}$. Тоді перша похідна:

$$\left(\frac{\partial Q_B}{\partial h} \right)^0 = \alpha \cdot f^0 \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2g \cdot h^0}}{\sqrt{2g \cdot h^0}} \cdot \frac{2g}{\sqrt{2g \cdot h^0}} = \frac{1}{2} \frac{Q_B^0}{h^0}. \quad (5.8)$$

Аналогічним методом визначаємо і іншу частинну похідну:

$$\left(\frac{\partial Q_B}{\partial f} \right)^0 = \alpha \sqrt{2g \cdot h^0} \frac{f^0}{f^0} = \frac{Q_B^0}{f^0}. \quad (5.9)$$

Підставимо вирази (5.8) і (5.9) у рівняння (5.6). Тоді

$$Q_B(t) = \frac{1}{2} \frac{Q_B^0}{h^0} \cdot \Delta h(t) + \frac{Q_B^0}{f^0} \cdot \Delta f(t). \quad (5.10)$$

Підставимо вираз (5.10) у рівняння (5.5) з урахуванням (5.2):

$$F \frac{d\Delta h}{dt} = \Delta Q_{II}(t) - \frac{1}{2} \frac{Q_B^0}{h^0} \cdot \Delta h(t) - \frac{Q_B^0}{f^0} \cdot \Delta f(t)$$

Після алгебраїчного перетворення отримаємо:

$$F \frac{d\Delta h}{dt} + \frac{1}{2} \frac{Q_B^0}{h^0} \cdot \Delta h(t) = \Delta Q_{II}(t) - \frac{Q_B^0}{f^0} \cdot \Delta f(t), \quad (1.11)$$

Рівняння (5.11) зведемо до стандартної (канонічної) форми, тобто до такої, коли коефіцієнт при вихідній змінній дорівнює одиниці. Отже,

$$T_0 \frac{d\Delta h}{dt} + \Delta h(t) = k_0 \cdot \Delta Q_{II}(t) + k_f \cdot \Delta f(t), \quad (5.12)$$

де $T_0 = \frac{2F \cdot h^0}{Q_B^0}$ – стала часу збірника рідини;

$k_0 = \frac{2h^0}{Q_B^0}$ – коефіцієнт підсилення каналу керування;

$k_f = \frac{-2h^0}{f^0}$ – коефіцієнт підсилення каналу збурення.

Лінійне диференціальне рівняння (5.12) у відхиленнях (від значень статичного режиму) у загальному вигляді записують так:

$$T_0 \frac{dy}{dt} + y(t) = k_0 u(t) + k_f f(t), \quad (5.13)$$

де $\Delta h(t) = y(t)$; $\Delta Q_{II}(t) = u(t)$; $\Delta f(t) = f(t)$.

Диференціальне рівняння (5.13) описує поведінку системи у динамічному режимі. Якщо керуюча дія $u(t)$ збільшується, то рівень рідини $y(t)$ зростає. Якщо збурююча дія (збурення) $f(t)$ збільшується, то рівень падає. Це видно із знаків перед відповідними складовими і відповідає фізичній сутності процесу.

Для подання системи відповідними передатними функціями треба диференціальне рівняння (5.13) записати в операторній формі: тобто перетворити за Лапласом змінну часу $t \rightarrow p$:

$$(T_0 + 1)y(p) = k_0 u(p) + k_f f(p), \quad (5.14)$$

де $y(p)$, $u(p)$ і $f(p)$ – зображення за Лапласом вихідної змінної, керувальної і збурювальної дій, відповідно; p – оператор Лапласа.

1.4. Передатні функції за каналами збурень і керування

Тоді передатна функція каналу керування «витрата рідини $Q_{II} \rightarrow$ рівень рідини h » (канал 11):

$$W_{11}(p) = \frac{y(p)}{u(p)} = \frac{k_0}{1 + T_0 p}. \quad (5.15)$$

Відповідно, **передатна функція каналу збурення «площа поперечного перерізу РО-5 $f \rightarrow$ рівень рідини h »** (канал 21):

$$W_{21}(p) = \frac{y(p)}{f(p)} = \frac{k_f}{1 + T_0 p} \quad (5.16)$$

Передатна функція розширеного ТОК за каналом керування:

$$W_{p11}(p) = W_d(p) \cdot W_{11}(p) \cdot W_{BM2}(p) \quad (5.17)$$

де $W_d(p)$, і $W_{BM2}(p)$ – передатні функції датчика рівня і виконавчого механізму регулюючого органу РО-2.

Аналогічно **передатна функція розширеного ТОК за каналом збурення:**

$$W_{p21}(p) = W_d(p) \cdot W_{21}(p) \cdot W_{BM5}(p) \quad (5.18)$$

де $W_d(p)$, і $W_{BM5}(p)$ – передатні функції датчика рівня і виконавчого механізму регулюючого органу РО-5.

Завдання для практичної роботи №5 (частина 1)

Мета: навчитись отримувати модель ТОК аналітичним шляхом.

Завдання 1.

1) Ознайомитися з об'єктом дослідження:

- Визначити межі ТОК, встановити перелік величин, що його характеризують і будуть присутні в математичній моделі;
- ввести спрощуючі припущення;
- ввести позначення основних параметрів ТОК та скласти розрахункову схему ТОК.

2) Побудувати математичну модель ТОК, для чого:

- скласти рівняння статики ТОК у вигляді балансного рівняння, виходячи з фізичної природи визначальних параметрів ємності, перетворити його у рівняння динаміки, отримавши таким чином *модель динаміки об'єкту в розмірних величинах*;
- лінеаризувати рівняння динаміки, отримавши *математичну модель динаміки об'єкту у відхиленнях*;
- записати рівняння динаміки ТОК *в канонічній формі*;
- записати *рівняння динаміки об'єкту в безрозмірних величинах*;
- перевірити розмірність усіх складових рівнянь динаміки об'єкту;

- для отримання *рівняння динаміки ТОК в зображеннях* використати перетворення за Лапласом змінної часу $t \rightarrow p$ в рівнянні динаміки об'єкту при нульових початкових умовах відносно входів і виходів ТОК;
- отримати передатні функції за досліджуваними каналами впливу.
- записати передатні функції розширеного ТОК (з урахуванням передатних функцій датчика і виконавчого механізму) за каналами керування і збурення.

2. Технологічний об'єкт – парорідинний теплообмінник

Теоретичні відомості

2.1. Парорідинний теплообмінник як технологічний об'єкт керування

Процеси нагріву рідин парою в теплообмінниках широко застосовуються в хімічній технології для підготовки основного потоку до наступної стадії перетворення, що повинна відбуватися при певній температурі (випарювання, ректифікація, хімічні реакції).

Розглянемо випадок, коли необхідно подавати на випарювання розчин NaOH при температурі 120°C (температура в першому випарному апараті), тобто температура рідини на виході з теплообмінника повинна бути 120°C і вона є регульованою величиною, а нагрівання відбувається практично насиченою водяною парою. Тобто витрата пари є керуючою дією.

Основними акумулюючими теплоємностями є теплова ємність конденсату та теплова ємність розчину (рідини). Для них будемо складати рівняння теплових балансів.

Збуреннями при цьому можуть бути: температура і витрата розчину на вході в теплообмінник, параметри пари (питома вага пароутворення, тиск, температура; для насиченої пари вони взаємопов'язані).

Припущення:

1. Вся пара в теплообміннику (ТО) перетворюється в конденсат.
2. Конденсат в ТО утворює плівку на поверхні, що передає тепло, яка рівномірно покриває всю поверхню.
3. Температура плівки конденсату на вході в ТО дорівнює температурі пари і змінюється в часі однаково по всій поверхні теплопередачі та на виході з ТО.
4. Зміна температури розчину по довжині ТО носить лінійний характер.
5. Тепловою ємністю стінки нехтуємо.
6. Втратами тепла в навколишнє середовище нехтуємо.

Визначальним параметром (вихідною регульованою величиною) такого ТО є температура рідини на виході з ТО.

Керуючою дією є витрата гріючої насиченої пари.

В якості **збурень** будемо розглядати витрату рідини та її температуру на вході в ТО.

Параметрами стану будуть температура рідини на виході з ТО та температура конденсату.

2.2. Рівняння теплового балансу

Прийmemo наступні позначення:

G_n, G_k, G_p – витрати гріючої пари, конденсату і рідини відповідно;

$\theta_k, \theta_{ex}, \theta_{eux}$ – температури конденсату та рідини на вході та виході з ТО;

c_k, c – питомі теплоємності конденсату та рідини;

K_T – коефіцієнт теплопередачі;

S – поверхня теплопередачі;

r – питома теплота пароутворення гріючої пари;

V_k, V – об'єми конденсату та рідини в ТО;

ρ_k, ρ – густини конденсату та рідини в ТО.

Тепловий баланс для акумулюючої ємності плівки конденсату:

$$G_n \cdot r - G_k \cdot c_k \cdot \theta_k - K_T \cdot S \cdot \left(\theta_k - \frac{\theta_{ex} + \theta_{eux}}{2} \right) = V_k \cdot \rho_k \cdot c_k \cdot \frac{d\theta_k}{dt}, \quad (5.19)$$

Тепловий баланс для акумулюючої ємності рідини (розчину NaOH) в ТО:

$$G_p \cdot c \cdot (\theta_{ex} - \theta_{eux}) + K_T \cdot S \cdot \left(\theta_k - \frac{\theta_{ex} + \theta_{eux}}{2} \right) = V \cdot \rho \cdot c \cdot \frac{d}{dt} \left(\frac{\theta_{ex} + \theta_{eux}}{2} \right). \quad (5.20)$$

Система рівнянь (5.19)-(5.20) є математичною моделлю парорідинного ТО при наведених вище припущеннях.

2.3. Лінеаризація та перетворення за Лапласом змінної часу в рівняннях балансів

Змінні, які підлягають лінеаризації: $\theta_k, \theta_{ex}, \theta_{eux}, G_n, G_p$.

Рівняння (5.19) після лінеаризації вказаних змінних

$$r \cdot \Delta G_n - (G_k \cdot c_k + K_T \cdot S) \cdot \Delta \theta_k + \frac{K_T \cdot S}{2} \Delta \theta_{ex} + \frac{K_T \cdot S}{2} \Delta \theta_{eux} = V_k \cdot \rho_k \cdot c_k \cdot \frac{d\Delta \theta_k}{dt}. \quad (5.21)$$

Введемо наступні позначення:

$$\begin{aligned}
T_k &= \frac{V_k \cdot \rho_k \cdot c_k}{G_k \cdot c_k + K_T \cdot S} \\
k_{G_n \theta_k} &= \frac{r}{G_k \cdot c_k + K_T \cdot S} \\
k_{\theta_{ex} \theta_k} &= k_{\theta_{eux} \theta_k} = \frac{K_T \cdot S}{2(G_k \cdot c_k + K_T \cdot S)}
\end{aligned} \tag{5.22}$$

Після перетворенням за Лапласом змінної часу $t \rightarrow p$, тобто

$$\begin{aligned}
\Delta \theta_k(t) &\rightarrow \theta_k(p), \\
\Delta \theta_{ex}(t) &\rightarrow \theta_{ex}(p), \\
\Delta \theta_{eux}(t) &\rightarrow \theta_{eux}(p), \\
\Delta G_n(t) &\rightarrow G_n(p), \\
\Delta G_p(t) &\rightarrow G_p(p)
\end{aligned}$$

рівняння (5.21) з урахуванням (5.22) набуде вигляду:

$$(T_k \cdot p + 1) \cdot \theta_k(p) - k_{\theta_{eux} \theta_k} \cdot \theta_{eux}(p) = k_{G_n \theta_k} \cdot G_n(p) + k_{\theta_{ex} \theta_k} \cdot \theta_{ex}(p), \tag{5.23}$$

Рівняння (5.20) після лінеаризації прийме вигляд

$$\begin{aligned}
c(\theta_{ex} - \theta_{eux}) \Delta G_p + (G_p c - \frac{K_T S}{2}) \Delta \theta_{ex} - (G_p c + \frac{K_T S}{2}) \Delta \theta_{eux} + K_T S \Delta \theta_k &= \\
= \frac{V \rho c}{2} \left(\frac{d \Delta \theta_{ex}}{dt} + \frac{d \Delta \theta_{eux}}{dt} \right) &
\end{aligned} \tag{5.24}$$

Введемо наступні позначення:

$$\begin{aligned}
T &= \frac{V \cdot \rho \cdot c}{2G_p \cdot c + K_T \cdot S} \\
k_{G_p \theta_{eux}} &= \frac{2c \cdot (\theta_{ex} - \theta_{eux})}{2G_p \cdot c + K_T \cdot S} \\
k_{\theta_{ex} \theta_{eux}} &= \frac{2G_p \cdot c - K_T \cdot S}{2G_p \cdot c + K_T \cdot S} \\
k_{\theta_k \theta_{eux}} &= \frac{2K_T \cdot S}{2G_p \cdot c + K_T \cdot S}
\end{aligned} \tag{5.25}$$

Після перетворенням за Лапласом змінної часу $t \rightarrow p$, тобто

$$\begin{aligned}
\Delta \theta_k(t) &\rightarrow \theta_k(p), \\
\Delta \theta_{ex}(t) &\rightarrow \theta_{ex}(p), \\
\Delta \theta_{eux}(t) &\rightarrow \theta_{eux}(p),
\end{aligned}$$

$$\Delta G_n(t) \rightarrow G_n(p),$$

$$\Delta G_p(t) \rightarrow G_p(p)$$

рівняння (5.24) з урахуванням (5.25) набуде вигляду:

$$(T \cdot p + 1) \cdot \theta_{\text{вих}}(p) - k_{\theta_k \theta_{\text{вих}}} \cdot \theta_k(p) = k_{G_p \theta_{\text{вих}}} \cdot G_p(p) - (T \cdot p - k_{\theta_{\text{вх}} \theta_{\text{вих}}}) \cdot \theta_{\text{вх}}(p) \quad (5.26)$$

2.4. Передатні функції за каналами збурень і керування

Лінійна система рівнянь (5.23), (5.26) складає математичну модель парорідинного теплообмінника у формі перетвореного за Лапласом часу. Для отримання передатних функцій необхідно з цієї системи рівнянь визначити регульовану величину $\theta_{\text{вих}}(p)$ як функцію збурень $G_p(t)$ і $\theta_{\text{вх}}(p)$ та керуючої дії $G_n(p)$:

$$\theta_{\text{вих}}(p) = W_{G_n \theta_{\text{вих}}} \cdot G_n(p) + W_{G_p \theta_{\text{вих}}} \cdot G_p(p) + W_{\theta_{\text{вх}} \theta_{\text{вих}}} \cdot \theta_{\text{вх}}(p) \quad (5.27)$$

Рішення цієї системи рівнянь отримуємо за методом Крамера.

Детермінант системи рівнянь (5.23), (5.26):

$$\Delta = \begin{vmatrix} -k_{\theta_{\text{вх}} \theta_k} & T_k \cdot p + 1 \\ T \cdot p + 1 & -k_{\theta_k \theta_{\text{вих}}} \end{vmatrix} = k_{\theta_{\text{вх}} \theta_k} \cdot k_{\theta_k \theta_{\text{вих}}} - (T_k \cdot p + 1) \cdot (T \cdot p + 1) \quad (5.28)$$

Вектор-стовпці керуючої дії та збурень:

$$G_n = \begin{vmatrix} k_{G_n \theta_k} \\ 0 \end{vmatrix}; G_p = \begin{vmatrix} 0 \\ k_{G_p \theta_{\text{вих}}} \end{vmatrix}; \theta_{\text{вх}} = \begin{vmatrix} k_{\theta_{\text{вх}} \theta_k} \\ -(T \cdot p - k_{\theta_{\text{вх}} \theta_{\text{вих}}}) \end{vmatrix}. \quad (5.29)$$

Доповнення для G_n :

$$\Delta G_n = \begin{vmatrix} k_{G_n \theta_k} & T_k \cdot p + 1 \\ 0 & -k_{\theta_k \theta_{\text{вих}}} \end{vmatrix} = -k_{G_n \theta_k} \cdot k_{\theta_k \theta_{\text{вих}}} \quad (5.30)$$

Доповнення для G_p :

$$\Delta G_p = \begin{vmatrix} 0 & T_k \cdot p + 1 \\ k_{G_p \theta_{\text{вих}}} & -k_{\theta_k \theta_{\text{вих}}} \end{vmatrix} = -k_{G_p \theta_{\text{вих}}} \cdot (T_k \cdot p + 1) \quad (5.31)$$

Доповнення для $\theta_{\text{вх}}$:

$$\Delta \theta_{\text{вх}} = \begin{vmatrix} k_{\theta_{\text{вх}} \theta_k} & T_k \cdot p + 1 \\ -(T \cdot p - k_{\theta_{\text{вх}} \theta_{\text{вих}}}) & -k_{\theta_k \theta_{\text{вих}}} \end{vmatrix} = -k_{\theta_{\text{вх}} \theta_k} \cdot k_{\theta_k \theta_{\text{вих}}} + (T_k \cdot p + 1) \cdot (T \cdot p - k_{\theta_{\text{вх}} \theta_{\text{вих}}}) \quad (5.32)$$

Передатна функція за каналом керування $Gn \rightarrow \theta_{вих}$:

$$W_{G_n \theta_{вих}}(p) = \frac{\theta_{вих}(p)}{G_n(p)} = \frac{\Delta G_n}{\Delta} = \frac{k_{G_n \theta_k} \cdot k_{\theta_k \theta_{вих}}}{(T_k \cdot p + 1) \cdot (T \cdot p + 1) - k_{\theta_{вих} \theta_k} \cdot k_{\theta_k \theta_{вих}}} \quad (5.33)$$

Передатна функція за каналом збурення $Gp \rightarrow \theta_{вих}$:

$$W_{G_p \theta_{вих}}(p) = \frac{\theta_{вих}(p)}{G_p(p)} = \frac{\Delta G_p}{\Delta} = \frac{k_{G_p \theta_{вих}} \cdot (T_k \cdot p + 1)}{(T_k \cdot p + 1) \cdot (T \cdot p + 1) - k_{\theta_{вих} \theta_k} \cdot k_{\theta_k \theta_{вих}}} \quad (5.34)$$

Передатна функція за каналом збурення $\theta_{вх} \rightarrow \theta_{вих}$:

$$W_{\theta_{вх} \theta_{вих}}(p) = \frac{\theta_{вих}(p)}{\theta_{вх}(p)} = \frac{\Delta \theta_{вих}}{\Delta} = \frac{(T_k \cdot p + 1) \cdot (T \cdot p - k_{\theta_{вх} \theta_{вих}}) - k_{\theta_{вх} \theta_k} \cdot k_{\theta_k \theta_{вих}}}{-(T_k \cdot p + 1) \cdot (T \cdot p + 1) + k_{\theta_{вих} \theta_k} \cdot k_{\theta_k \theta_{вих}}} \quad (5.35)$$

Завдання для практичної роботи №5 (частина 2)

Мета: навчитись отримувати модель ТОК аналітичним шляхом.

Завдання 2.

1) Ознайомитися з об'єктом дослідження:

- Визначити межі ТОК, встановити перелік величин, що його характеризують і будуть присутні в математичній моделі;
- скласти структурно-параметричну схему ТОК
- визначити внутрішню структуру ТОК, ввести спрощуючі припущення;
- ввести позначення основних параметрів ТОК та його акумулюючих ємностей
- скласти розрахункову схему ТОК.

2) Побудувати математичну модель ТОК, для чого:

- скласти для кожної акумулюючої ємності рівняння статички у вигляді балансних рівнянь, виходячи з фізичної природи визначальних параметрів ємності;
- розв'язати рівняння статички, визначити числові значення всіх констант та змінних, що задовольняють рівнянням статички;
- скласти таблицю числових значень констант та змінних, що входять в рівняння статички, тобто таблицю основного статичного режиму;
- рівняння статички ТОК перетворити в систему рівнянь динаміки акумулюючих ємностей шляхом врахування нагромадження (акумулювання) в них речовин чи енергії, отримавши таким чином *модель динаміки об'єкту в розмірних величинах*;

- лінеаризувати рівняння динаміки, отримавши *математичну модель динаміки об'єкту у відхиленнях*;
- записати рівняння динаміки ТОК *в канонічній формі*;
- записати *рівняння динаміки об'єкту в безрозмірних величинах*;
- перевірити розмірність усіх складових рівнянь динаміки об'єкту;
- для отримання *рівняння динаміки ТОК в зображеннях* використати перетворення за Лапласом змінної часу $t \rightarrow p$ системі рівнянь динаміки об'єкту при нульових початкових умовах і одержати *систему зображуючих рівнянь відносно входів і виходів ТОК*;
- розв'язати одержану систему зображуючих рівнянь відносно досліджуваного виходу та входів ТОК (бажано використовувати метод Крамера);
- отримати передатні функції за досліджуваними каналами впливу.
- записати передатні функції розширеного ТОК (з урахуванням передатних функцій датчика і виконавчого механізму) за каналами керування і збурення.

Практична робота №6

Складання математичної моделі та дослідження випарного апарату як технологічного об'єкту керування

Теоретичні відомості

1. Аналіз випарної установки як технологічного об'єкту керування

Випарюванням називається концентрування розчинів практично не летючих, чи мало летючих речовин в рідких летючих розчинниках. При випарюванні відбувається видалення розчинника із всього об'єму розчину при його температурі кипіння.

Основним параметром, який необхідно стабілізувати в певних межах при автоматизації роботи випарних апаратів (ВА), є концентрація розчину на виході.

У всіх випадках цю задачу можна вирішити дією на ті чи інші величини, до яких слід віднести витрату розчину на вході та виході, кількість пари, яка використовується для нагрівання розчину, тиск вторинної пари.

Оскільки у випарних установках (ВУ) випаровується велика кількість води, то витрату пари знижують, проводячи випарювання в багатокорпусній випарній установці. Принцип її дії зводиться до багаторазового використання тепла грючої пари, що надходить в перший корпус установки, шляхом обігріву кожного наступного корпусу вторинною (соковою) парою із попереднього корпусу.

Розглянемо ВУ, що складається з трьох корпусів. Початковий розчин луку NaOH, нагрітий до температури кипіння, надходить в перший корпус ВУ, що обігрівається свіжою первинною парою. Вторинна пара (W_1) з цього корпусу направляється як грюча пара в другий корпус, де внаслідок зниженого тиску розчин кипить при температурі, нижчій, ніж у першому.

Аналогічно упарений розчин з другого корпусу перетікає самотоком (внаслідок більш низького тиску) в третій корпус, який обігрівається вторинною парою із другого корпусу (W_2).

В процесі випарювання, на виході апарату третього корпусу отримуємо деякий концентрований розчин NaOH, і вихідною величиною для трьохкорпусної ВУ є концентрація розчину на виході з третього корпусу .

Кількість випареної води (розчинника) буде залежати від температури в корпусі та від температури і кількості грючої пари, що надходить в корпус.

Якість випарювання буде також залежати від кількості розчину, що проходить через корпус, але цей вплив не такий значний, як вплив температури. Кількість розчину, що надходить на випарювання, можна розглядати як збурюючий вплив або керуючу дію.

Кожен корпус ВУ можна розглядати, як об'єкт із зосередженими параметрами, тобто такий, в якому концентрація і температура розчину в кожній точці однакові.

ВУ є досить складним тепловим об'єктом керування, що має зв'язки між окремими регульованими параметрами.

Для спрощення моделі, приймаємо наступні припущення:

- 1) Нехтуємо втратами тепла в навколишнє середовище, виносом луку з вторинною парою і зміною теплоти пароутворення в межах апарату;
- 2) Приймаємо лінійну залежність температури кипіння розчину від концентрації при незмінному тиску;
- 3) Вважаємо постійним об'єм розчину в апараті V , тобто об'єм, що займає в ньому рідка фаза;
- 4) Температура розчину, що надходить на випарку, дорівнює температурі кипіння розчину в апараті, а коефіцієнт теплопередачі залишається незмінним.
- 5) ВА використовується для випарювання $F_0 = 40000$ кг/год (11,12 кг/с) водного розчину NaOH від початкової концентрації $x_0 = 5\%$ до кінцевої $x_1 = 6,88\%$.
- 6) Витрата випареної води $W_1 = 3,04$ кг/с.
- 7) Випарювання відбувається за принципом прямотоку.
- 8) Відбір екстрапару відсутній.
- 9) Розчин поступає у ВА підігрітим до температури кипіння.

Визначальним параметром (вихідною регульованою величиною) ВА є концентрація x_1 упареного розчину NaOH в ньому (і на виході з нього).

Керуючою дією (керуючим впливом) є витрата F_0 розчину NaOH на вході у ВА.

Збуренням при регулюванні x_1 за допомогою F_0 є концентрація NaOH x_0 на вході у ВА.

Додаткові проміжні змінні (***параметри стану***) – кількість випареного розчинника (води) W_1 та температура кипіння розчину θ .

2. Рівняння балансів

- 1) Рівняння матеріального балансу ВА при припущенні $V = \text{const}$:

$$F_0 - F_1 - W_1 = 0, \quad (6.1)$$

де F_1 – витрата упареного розчину з ВА.

З (6.1) знаходимо:

$$F_1 = F_0 - W_1 \quad (6.2)$$

2) Рівняння матеріального балансу ВА по NaOH:

$$F_0 \cdot x_0 - (F_0 - W_1) \cdot x_1 = V \cdot \rho_1 \cdot \frac{dx_1}{dt}, \quad (6.3)$$

3) Рівняння теплового балансу для рідини у ВА:

$$F_0 \cdot c \cdot \theta + F_n \cdot r_n - (F_0 - W_1) \cdot c \cdot \theta - W_1 \cdot r = V \cdot \rho_1 \cdot c \cdot \frac{d\theta}{dt}, \quad (6.4)$$

де c – питома теплоємність розчину, кДж/кг·град;

F_n – витрата гріючої пари, кг/с;

θ – температура розчину у ВА, град С;

r – скрита теплота пароутворення розчинника, кДж/кг;

r_n – питома теплота конденсації гріючої пари, кДж/кг;

V – об'єм розчину у ВА, м³;

ρ_1 – густина розчину, кг/м³.

4) Лінеаризована в точці основного статичного режиму залежність між концентрацією x_1 розчину у ВА та його температурою кипіння θ має вид:

$$\theta = a + b \cdot x_1, \quad (6.5)$$

де

$$b = \frac{\theta_{\max} - \theta_{\min}}{x_{1\max} - x_{1\min}}, \quad (6.6)$$

$[\theta_{\min}, \theta_{\max}]$ і $[x_{1\min}, x_{1\max}]$ – діапазон змінних, в якому дійсна лінеаризація цієї залежності.

3. Лінеаризація та перетворення за Лапласом змінної часу у рівняннях балансів

Змінні, які підлягають лінеаризації: $x_0, x_1, F_0, W_1, \theta$.

Рівняння (6.3) після лінеаризації вказаних змінних має вид:

$$(x_0 - x_1) \cdot \Delta F_0 + x_1 \cdot \Delta W_1 + F_0 \cdot \Delta x_0 - (F_0 - W_1) \cdot \Delta x_1 = V \cdot \rho_1 \cdot \frac{d\Delta x_1}{dt}, \quad (6.7)$$

Після введення наступних позначень

$$\begin{aligned}
T_1 &= \frac{V \cdot \rho_1}{F_0 - W_1} & k_{F_0 x_1} &= \frac{x_0 - x_1}{F_0 - W_1} \\
k_{W_1 x_1} &= \frac{x_1}{F_0 - W_1} & k_{x_0 x_1} &= \frac{F_0}{F_0 - W_1}
\end{aligned} \tag{6.8}$$

та перетворення за Лапласом змінної часу $t \rightarrow p$ отримаємо рівняння

$$(T_1 p + 1) \cdot x_1(p) - k_{W_1 x_1} W_1(p) = k_{x_0 x_1} x_0(p) + k_{F_0 x_1} F_0(p), \tag{6.9}$$

Рівняння (6.4) після лінеаризації змінних має вид:

$$(c \cdot \theta - c \cdot \theta) \cdot \Delta F_0 + (c \cdot F_0 - c \cdot F_0 + c \cdot W_1) \cdot \Delta \theta + (c \cdot \theta - r) \cdot \Delta W_1 = V \cdot \rho_1 \cdot c \cdot \frac{d\Delta \theta}{dt}, \tag{6.10}$$

Після введення наступних позначень

$$T_\theta = \frac{V \cdot \rho_1}{W_1} \quad k_{W_1 \theta} = \frac{r - c \cdot \theta}{c \cdot W_1} \tag{6.11}$$

та перетворення за Лапласом змінної часу $t \rightarrow p$ отримаємо рівняння

$$(T_\theta p - 1) \cdot \theta(p) + k_{W_1 \theta} W_1(p) = 0, \tag{6.12}$$

Рівняння (6.5) після лінеаризації змінних має вид:

$$\Delta \theta = b \cdot \Delta x_1. \tag{6.13}$$

Після перетворення за Лапласом змінної часу $t \rightarrow p$ отримаємо рівняння

$$\theta(p) = b \cdot x_1(p). \tag{6.14}$$

4. Передатні функції за каналами збурення і керування

Лінійна система рівнянь (6.9), (6.12), (6.14) складає математичну модель процесу в формі перетвореного за Лапласом часу:

$$\left\{ \begin{aligned}
&(T_1 p + 1) \cdot x_1(p) - k_{W_1 x_1} W_1(p) = k_{x_0 x_1} x_0(p) + k_{F_0 x_1} F_0(p), & (6.9) \\
&(T_\theta p - 1) \cdot \theta(p) + k_{W_1 \theta} W_1(p) = 0, & (6.12) \\
&\theta(p) = b \cdot x_1(p), & (6.14)
\end{aligned} \right.$$

Для отримання передатних функцій необхідно з цієї системи рівнянь визначити регульовану величину x_1 як функцію збурення x_0 та керуючої дії F_0 .

$$x_1(p) = W_{x_0 x_1}(p) \cdot x_0(p) + W_{F_0 x_1}(p) \cdot F_0(p). \tag{6.15}$$

Рішення системи рівнянь (6.9), (6.12), (6.14) одержимо методом Крамера.

Детермінант цієї системи:

$$\Delta = \begin{vmatrix} T_1 p + 1 & 0 & k_{W_1 x_1} \\ 0 & T_\theta p - 1 & k_{W_1 \theta} \\ -b & 1 & 0 \end{vmatrix} = (T_1 \cdot k_{W_1 \theta} + T_\theta \cdot k_{W_1 x_1} \cdot b) \cdot p + k_{W_1 \theta} - k_{W_1 x_1} \cdot b \quad (6.16)$$

Вектор-стовпці керуючої дії та збурення:

$$F_0(p) = \begin{vmatrix} k_{F_0 x_1} \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad x_0(p) = \begin{vmatrix} k_{x_0 x_1} \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} \quad (6.17)$$

Доповнення для F_0 :

$$\Delta_{F_0} = \begin{vmatrix} k_{F_0 x_1} & 0 & k_{W_1 x_1} \\ 0 & T_\theta p - 1 & k_{W_1 \theta} \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} = k_{F_0 x_1} \cdot k_{W_1 \theta} \quad (6.18)$$

Доповнення для x_0 :

$$\Delta_{x_0} = \begin{vmatrix} k_{x_0 x_1} & 0 & k_{W_1 x_1} \\ 0 & T_\theta p - 1 & k_{W_1 \theta} \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} = k_{x_0 x_1} \cdot k_{W_1 \theta} \quad (6.19)$$

Передатна функція за каналом керування $F_0 \rightarrow x_1$:

$$W_{F_0 x_1}(p) = \frac{x_1(p)}{F_0(p)} = \frac{\Delta_{F_0}}{\Delta} = \frac{k_{F_0 x_1} \cdot k_{W_1 \theta}}{(T_1 \cdot k_{W_1 \theta} + T_\theta \cdot k_{W_1 x_1} \cdot b) \cdot p + k_{W_1 \theta} - k_{W_1 x_1} \cdot b} \quad (6.20)$$

Передатна функція за каналом збурення $x_0 \rightarrow x_1$:

$$W_{x_0 x_1}(p) = \frac{x_1(p)}{x_0(p)} = \frac{\Delta_{x_0}}{\Delta} = \frac{k_{x_0 x_1} \cdot k_{W_1 \theta}}{(T_1 \cdot k_{W_1 \theta} + T_\theta \cdot k_{W_1 x_1} \cdot b) \cdot p + k_{W_1 \theta} - k_{W_1 x_1} \cdot b} \quad (6.21)$$

Завдання для практичної роботи №6

Мета: навчитись отримувати модель ТОК аналітичним шляхом на прикладі випарного апарату.

Завдання.

1) Ознайомитися з об'єктом дослідження:

- Визначити межі ТОК, встановити перелік величин, що його характеризують і будуть присутні в математичній моделі;
- скласти структурно-параметричну схему ТОК
- визначити внутрішню структуру ТОК, ввести спрощуючі припущення;
- ввести позначення основних параметрів ТОК та його акумулюючих ємностей
- скласти розрахункову схему ТОК.

2) Побудувати математичну модель ТОК, для чого:

- скласти для кожної акумулюючої ємності рівняння статики у вигляді балансних рівнянь, виходячи з фізичної природи визначальних параметрів ємності;
- розв'язати рівняння статики, визначити числові значення всіх констант та змінних, що задовольняють рівнянням статики;
- скласти таблицю числових значень констант та змінних, що входять в рівняння статики, тобто таблицю основного статичного режиму;
- рівняння статики ТОК перетворити в систему рівнянь динаміки акумулюючих ємностей шляхом врахування нагромадження (акумулювання) в них речовин чи енергії, отримавши таким чином *модель динаміки об'єкту в розмірних величинах*;
- лінеаризувати рівняння динаміки, отримавши *математичну модель динаміки об'єкту у відхиленнях*;
- записати рівняння динаміки ТОК *в канонічній формі*;
- записати *рівняння динаміки об'єкту в безрозмірних величинах*;
- перевірити розмірність усіх складових рівнянь динаміки об'єкту;
- для отримання *рівняння динаміки ТОК в зображеннях* використати перетворення за Лапласом змінної часу $t \rightarrow p$ системі рівнянь динаміки об'єкту при нульових початкових умовах і одержати *систему зображуючих рівнянь відносно входів і виходів ТОК*;
- розв'язати одержану систему зображуючих рівнянь відносно досліджуваного виходу та входів ТОК (бажано використовувати метод Крамера);

- отримати передатні функції за досліджуваними каналами впливу.
- записати передатні функції розширеного ТОК (з урахуванням передатних функцій датчика і виконавчого механізму) за каналами керування і збурення.

Список рекомендованої літератури

1. Ідентифікація динамічних характеристик. Комп'ютерні методи / А.І. Жученко, М.З. Кваско, Н.А. Кубрак – К.: вид. відділ КЛТКМ та М, 2000. – 182 с.
2. Кваско М.З., Кубрак Н.А. Динамічні моделі типових теплообмінних апаратів: Навчальний посібник. – К.: ІЗМН, 1999. – 136 с.
3. Остапенко Ю.О. Ідентифікація та моделювання технологічних об'єктів керування: Підручник. – К.: Задруга, 1999. – 424 с.
4. Жученко А.И., Кубрак Н.А., Голинко И.М. Динамика объектов с распределенными параметрами: Учебн. пособ. – К.: «ЕКМО», 2005. – 121 с.
5. Коваль А.В. Ідентифікація та моделювання технологічних об'єктів: Навч. посібник – Житомир: ЖДТУ, 2018. - 133 с.
6. Букетов А.В. Ідентифікація і моделювання технологічних об'єктів та систем. – Тернопіль: СМП «Тайп». – 2009. – 260с.
7. Брановицька С.В., Медведєв Р.Б., Фіалков Ю.Я. Обчислювальна математика та програмування: Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології. Підручник. – К.: ІВЦ «Видавництво «Політехніка», ТОВ «Фірма «Періодика», 2004. – 220 с.
8. Комп'ютерне моделювання процесів і систем: Організація розрахунків у середовищі MathCAD [Електронний ресурс]: навчальний посібник для самостійної роботи студентів спеціальності 151 «Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології» / КПІ ім. Ігоря Сікорського: уклад.: О.О. Квітка, А.М. Шахновський. – Електронні текстові данні (1 файл 4,84 Мбайт). – К.: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. – 89 с.
9. Кундрат А. М. Науково-технічні обчислення засобами MathCAD та MS Excel : навч. посіб. / А. М. Кундрат, М. М. Кундрат. – Рівне : НУВГП, 2014. – 252 с. URL: <http://ep3.nuwm.edu.ua/1760/1/734733%20zah.pdf>
- 10.Коробов В.І. , Очков В.Ф. Хімічні розрахунки в середовищі MathCAD : навч. посібник– Д. : Вид-во ДНУ, 2012. – 216 с. URL: <http://twt.mpei.ac.ru/ochkov/MathCAD-Chem-Ukr.pdf>