

СХІДНОЄВРОПЕЙСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ЛЕСІ УКРАЇНКИ
КАФЕДРА АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ ТА ЕКОТЕХНОЛОГІЙ

О.О. ОНИЩУК, Ж. О. КОРМОШ

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ЗАСТОСУВАННЯ ЕОМ В ХІМІЧНІЙ
ТЕХНОЛОГІЇ**

*методичні рекомендації
для лабораторних робіт*

Луцьк – 2016

УДК 66.013:543(072)

ББК 35я73-9

Рекомендовано до друку науково-методичною радою
Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки
(протокол № від 2016 року)

Рецензенти: *Сливка Н.Ю.* – кандидат хімічних наук, доцент кафедри органічної та біоорганічної хімії.

Євсюк М.М. – кандидат технічних наук, доцент кафедри фізики і електротехніки ЛНТУ.

ОНИЩУК О.О., КОРМОШ Ж. О.

К-68. Математичне моделювання та застосування ЕОМ в хімічній технології. Методичні рекомендації до лабораторних робіт/ Онищук Оксана Олександрівна, Кормош Жолт Олександрович - Луцьк : Вежа-Друк, 2016 - 95с.

Анотація: У методичних рекомендаціях представлені приклади застосування Microsoft Office Excel та Mathcad для моделювання процесів у хімічній технології. Також представлено механізм моделювання кінетики хімічної реакції та процесів адсорбції, а також виведене диференціальне рівняння теплопровідності.

Рекомендовано студентам хімічного факультету за напрямом підготовки „Хімічна технологія”

УДК 66.013:543(072)

ББК 35я73-9

© Онищук О.О., Кормош Ж.О., 2016

© Східноєвропейський національний університет
імені Лесі Українки, 2016

Зміст

Основні правила техніки безпеки.....	4
<u>Лабораторна робота № 1.</u> Побудова діаграм в Microsoft Office Excel.....	5
<u>Лабораторна робота № 2.</u> Побудова регресійної моделі ізобари реакції утворення ціанаміду кальцію при атмосферному тиску.....	8
<u>Лабораторна робота № 3.</u> Математичне описання кінетики хімічної реакції процесу видалення фосфатів сульфатом феруму (II) $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	10
<u>Лабораторна робота № 4.</u> Математичне описання залежності щільності розчинів азотної кислоти (HNO_3) від концентрації при температурі 293 К за допомогою гістограми.....	13
<u>Лабораторна робота № 5.</u> Математичне описання процесу адсорбції та визначення питомої поверхні адсорбенту (на прикладі адсорбції фосфатів зі стічної води торфу).....	15
<u>Лабораторна робота № 6.</u> Отримання математичної моделі і критеріального рівняння процесу тепловіддачі.....	17
<u>Лабораторна робота № 7.</u> Розрахунок матеріального балансу колони синтезу карбаміду за допомогою Mathcad.....	19
<u>Лабораторна робота № 8.</u> Математичне описання процесу гомогенного та гетерогенного окиснення оксиду азоту (II) до оксиду азоту (IV).....	23
<u>Лабораторна робота № 9.</u> Основи роботи з інтегрованим середовищем Mathcad. Отримання моделей на основі обробки статистичних даних (лінійна регресія на учбовому прикладі).....	25
<u>Лабораторна робота № 10.</u> Побудова математичних моделей процесів з використанням методу найменших квадратів (нелінійна регресія).....	39
<u>Лабораторна робота № 11.</u> Моделювання гідродинаміки потоку у насадковій колоні за допомогою коміркової моделі.....	52
<u>Лабораторна робота № 12.</u> Дослідження теплообмінних апаратів на основі математичних моделей.....	57
<u>Лабораторна робота № 13.</u> Комп'ютерне визначення констант швидкості зворотної хімічної реакції.....	62
<u>Лабораторна робота № 14.</u> Комп'ютерне дослідження реактора ідеального змішування періодичної дії.....	67
<u>Лабораторна робота № 15.</u> Розробка обчислювальних модулів реакторів для автоматизованого розрахунку та проектування СХТС.....	77
<u>Лабораторна робота № 16.</u> Оптимізація роботи реактора.....	82
Література.....	95

Основні правила техніки безпеки

Приступаючи до роботи з ПК, необхідно завжди пам'ятати, що це дуже складна і дорога апаратура, яка потребує акуратного й обережного ставлення до неї, високої самодисципліни на всіх етапах роботи з комп'ютером.

Напруга живлення ПК (220 В) є небезпечною для життя людини. Особливо уважним треба бути при роботі з дисплеєм, електронно-променевою трубкою якого використовується висока напруга і є джерелом електромагнітного випромінювання. Неправильне поводження з дисплеєм та іншою електронною апаратурою може призвести до тяжких уражень електричним струмом, спричинити загоряння апаратури. Через це суворо забороняється:

- торкатися до екрана і тильного боку дисплея, проводів живлення і пристроїв заземлення, з'єднувальних кабелів;
- порушувати порядок ввімкнення й вимкнення апаратних блоків, намагатись самостійно усунути виявлену несправність в роботі апаратури;
- класти на апаратуру сторонні предмети; працювати на комп'ютері у вологому одязі і з вологими руками.

В разі появи запаху горілого, незвичайних звуків або самовільного вимкнення апаратури треба негайно вимкнути комп'ютер і повідомити про це викладача. Робота на комп'ютері потребує постійної уваги, чітких дій і самоконтролю. Через це на комп'ютері не можна працювати при недостатньому освітленні, високому рівні шуму. Під час роботи на комп'ютері необхідно:

- суворо дотримуватись положень інструкції з експлуатації апаратури; уважно слідкувати за справністю основних блоків і пристроїв; працювати на клавіатурі чистими сухими руками, не натискувати на ті чи інші клавіші без потреби або навмання; під час перерви в роботі вимикати комп'ютер лише в тому разі, коли обробка поточної інформації завершена і вміст оперативної пам'яті занесено на магнітні диски (в противному випадку неминуча втрата інформації).

Під час роботи комп'ютера електронно-променевою трубкою дисплея є джерелом електромагнітного випромінювання, яке при роботі близько від екрана руйнівнює діє на зір, викликає втоми і знижує працездатність. Через це треба працювати на відстані 60-70 см від екрана, дотримуватись правильної постави, не сутулячись і не нахилиючись. Треба пам'ятати, що тривала робота на комп'ютері призводить до перенапруження зору, через це тривалість безперервної роботи для не повинна перевищувати 25 хв.

Лабораторна робота № 1

ПОБУДОВА ДІАГРАМ В MICROSOFT OFFICE EXCEL

Мета лабораторної роботи – навчитися будувати елементарні діаграми, використовуючи програму Microsoft Excel.

Теоретичні основи. Microsoft Excel (повна назва Microsoft Office Excel) — програма для роботи з електронними таблицями, створений корпорацією Microsoft для Microsoft Windows, Windows NT. Програма входить до складу офісного пакету Microsoft Office. Типові області застосування Excel:

завдяки тому, що лист Excel являє собою готову таблицю, Excel часто використовують для створення документів без усіляких розрахунків, що просто мають табличне представлення;

у Excel легко можна створювати різні види графіків і діаграм, які беруть дані для побудови з комірок таблиць;

його можуть використовувати звичайні користувачі для елементарних розрахунків;

Excel містить багато математичних і статистичних функцій, завдяки чому його можуть використовувати студенти для розрахунків курсових та дипломних проектів.

Діаграма – це графічно представлена залежність однієї величини від іншої. За допомогою діаграм взаємозв'язок між даними стає наочнішим. Діаграми полегшують порівняння різних даних. Більшість діаграм упорядковують дані по горизонтальній (вісь категорій) і вертикальній осям (вісь значень). Окремі елементи даних називаються точками. Декілька точок утворюють послідовність даних. На рис. 1.1 представлено елементи діаграми.

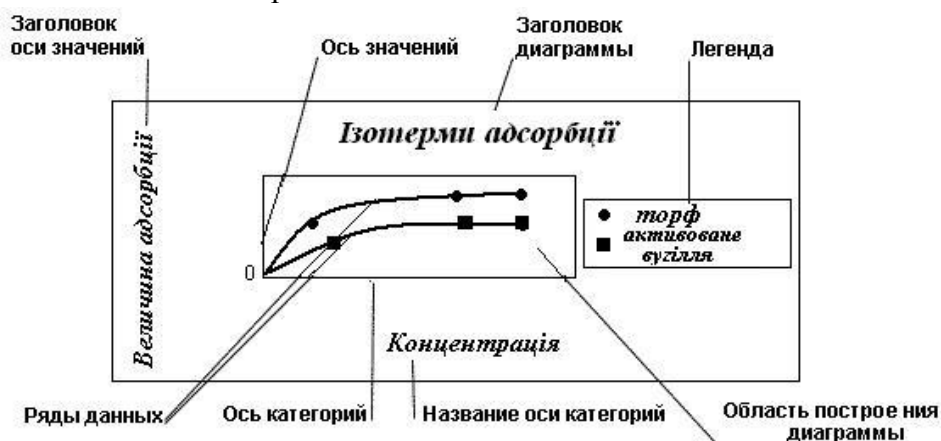


Рисунок 1.1 – Елементи діаграми

Заголовки стовпців і рядків утворюють координатну сітку на робочому листі, що дозволяє визначити адресу кожного осередку. На діаграмі аналогічну роль грають осі x і y . Осі є присутніми на усіх діаграмах, окрім кругових.

Вісь x – це вісь категорій. Вона також називається віссю незалежних змінних. На цій осі відзначаються категорії значень.

Вісь y називають віссю значень. На цій осі відкладаються числові значення, які змінюються від категорії до категорії, тобто залежать від категорії значень. Тому вісь y (чи вісь значень) також називають віссю, що представляє залежні змінні.

Excel володіє широкими можливостями для побудови діаграм 15 різних типів. Кожен тип діаграми має декілька видів. Розглянемо основні елементи діаграм, а також основні поняття, які використовуються при побудові діаграм. Діаграма завжди будується для якогось діапазону осередків (комірок).

Як правило, на діаграмі відображається послідовність значень якого-небудь параметра залежно від значень аргументів. Послідовність значень параметра в Excel називають рядом даних, а послідовність значень аргументів — категорією.

Хід виконання роботи. Вихідні дані для побудови діаграми надано табл. 3.1.

Для таблиці 1.1, рядів даних — 5 (0, 20, ..., 80), а категорій — 1 (концентрація).

Таблиця 1.1 – Вихідні дані для побудови діаграми

Доза сульфату алюмінію, мг/дм ³	Концентрація забруднювача, мг/дм ³
0	11,25
20	7
40	3,75
60	3
80	2,25

Побудова діаграми. Діаграма може будуватись на активному листі або на новому. спочатку необхідно занести початкові дані у таблицю Excel, виділити правою кнопкою миші необхідні вихідні дані.

Excel 2007, для створення діаграми виконати команду **Вставка/Точечная/Точечная с гладкими кривыми и маркерами**. Далі виділяємо дані на осі x, правою кнопкою миші натискаємо **Формат осей /Параметры осей/Минимальное, максимальное значение і цену основных делений** вибираємо **Фиксированное** і встановлюємо необхідні значення. меню **Макет** вибираємо **Название диаграммы, Название осей** і підписуємо x – доза коагулянту, мг/дм³; y – концентрація забруднювача, мг/дм³.

На рис. 1.2 приведена діаграма залежності концентрації забруднювача від дози коагулянту, побудована для даних табл. 1.1.

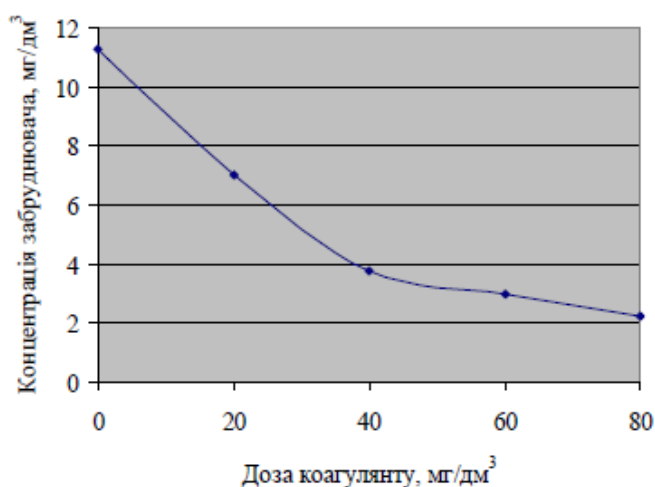


Рисунок 1.2. – Діаграма залежності концентрації забруднювача від дози коагулянту

Редагування діаграм. Excel має засоби для редагування елементів побудованих діаграм. Для редагування діаграм цей елемент необхідно виділити. Для виділення елемента діаграми слід активізувати діаграму, клацнувши мишею по полю діаграми, а потім клацнути по елементу. Переміщуватись між елементами діаграми можна також за допомогою клавіш [] і []. Коли виділено ряд даних, за допомогою клавіш [] і [] можна вибрати окремі точки ряду. Ім'я виділеного об'єкта з'являється в полі імені (ліва частина рядка формул). Виділені елементи можна редагувати (переміщувати, міняти розміри, вилучати, форматувати). Список операцій редагування індивідуальний для кожного елемента діаграми. Для редагування виділеного елемента діаграми зручно користуватись контекстним меню, яке викликається натискуванням правої кнопки миші. Це меню містить ті операції, які доступні для виділеного елемента.⁸

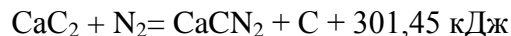
Лабораторна робота № 2

ПОБУДОВА РЕГРЕСІЙНОЇ МОДЕЛІ ІЗОБАРИ РЕАКЦІЇ УТВОРЕННЯ ЦІАНАМІДУ КАЛЬЦІЮ ПРИ АТМОСФЕРНОМУ ТИСКУ

Мета лабораторної роботи – навчитися будувати регресійні моделі за допомогою лінії тренду, знаходити найбільш достовірну модель за величиною достовірності апроксимації.

Теоретичні основи виробництва ціанаміду кальцію. Ціанамід кальцію являє собою порошок темно-синього кольору з домішкою вугілля. Хімічно чистий CaCN_2 ($\text{Ca} = \text{N} - \text{C} = \text{N}$) містить 34,98% N_2 , а технічний – 18,6– 22,8%. Хімічно чистий CaCN_2 – безкольорові кристали, його температура сублімації (переходу речовини від кристалічного стану в газоподібний) складає 1363К. В сучасний період більша частина CaCN_2 використовують безпосередньо як азотне мінеральне добриво, частина переробляється в карбамід і ціаністі сполуки; застосовується як дефоліант(речовина, яка сприяє опаданню листя у рослин та полегшує збирання врожаю машинами).

CaCN_2 одержують шляхом взаємодії тонкоподрібненого карбіду кальцію з газоподібним азотом при температурі 1320 – 1370К. Ця реакція зворотна:



Теоретично із 64кг CaC_2 можна отримати 80кг CaCN_2 . Фактично вихід CaCN_2 з карбіду коливається в межах 82 – 84 % від теоретичного і залежить від якості сировини і температури.

Технологія EXCEL представляє два варіанти побудови статистичних моделей парної регресії:

- використовують лінію тренду;
- використання інструменту **Поиск – Решение**.

Побудову регресійної моделі за допомогою лінії тренду дає можливість вибрати одну із залежностей (лінійну, логарифмічну, експоненціальну, ступінну, поліноміальну) і визначити коефіцієнти цієї залежності. Використовуючи лінію тренду для побудови регресійної моделі дозволяє об'єднати етапи вибору виду залежності, визначити коефіцієнти регресійної залежності і обчислити величину достовірності апроксимації (R^2).

Хід виконання роботи. Для побудови регресійної моделі з використанням **лінії тренду** в EXCEL 2007 треба виконати наступну послідовність дій:

- занести початкові дані в таблицю;
- побудувати графік залежності y від x , вибираючи при цьому тип діаграми

Точечная;

- вибрати діаграму з видом **Точечная с гладкими кривыми и маркерами;**
- натиснути нуль та вибрати в меню **Формат оси**, потім вкладку **Шкала,**

Параметры оси і встановити мінімальне та максимальне значення (**Фиксированное**) величин x та y ;

- далі натиснути **Макет, Название осей, Название основной горизонтальной оси, Название основной вертикальной оси** і підписати осі: вісь x – **Температура, К**, вісь y – **Вміст азоту, %;**

- в меню **Макет** вибрати **Лінія тренда, Параметры линии тренда**, вибрати

необхідну лінію та поставити галочки в меню **Показать уравнение на диаграмме і Поместить на диаграмму величину достоверности аппроксимации (R^2)**.

В результаті на діаграмі з'явиться лінія тренду, яка є графічним представленням вибраного виду залежності, а саме рівняння з коефіцієнтом і величиною достовірності апроксимації (R^2) є регресійною моделлю вибраного процесу. Для однієї заданої вибірки можна побудувати декілька **ліній тренду**.

Величина достовірності апроксимації (R^2) – це число від нуля до одиниці, яке характеризує близькість значення лінії тренду до фактичних даних. Лінія тренду найбільше відповідає дійсності, коли значення величини достовірності апроксимації (R^2) наближене до одиниці. Воно також називається **коефіцієнтом мішаної кореляції**. Вихідні дані для побудови ізобари представлені в табл.2.1

Таблиця 2.1

Вихідні дані для побудови ізобари

Температура, К	Вміст азоту, %
1273	32
1373	32
1473	22
1573	19
1673	18
1773	17

В ході виконання роботи необхідно побудувати діаграму ізобару реакції утворення ціанаміду кальцію при атмосферному тиску, її математично описати за допомогою лінії тренду та вибрати найбільш достовірну модель за величиною достовірності апроксимації.

Лабораторна робота № 3
МАТЕМАТИЧНЕ ОПИСАННЯ КІНЕТИКИ ХІМІЧНОЇ РЕАКЦІЇ
ПРОЦЕСУ ВИДАЛЕННЯ ФОСФАТІВ СУЛЬФАТОМ ФЕРУМУ (II)
FeSO₄·7H₂O

Мета лабораторної роботи – навчитися математично описувати кінетику хімічної реакції, використовуючи детерміноване рівняння Ареніуса та визначати енергію активації.

Теоретичні основи. Процес реагентного осадження фосфатів прискорюється при перемішуванні реагуючих речовин. Порядок реакції визначається тільки з експериментальних даних і не зв'язаний зі стехіометричними коефіцієнтами при реагентах у рівнянні реакції. Для математичного описання кінетики реагентного осадження фосфатів зі стічних вод сульфатом феруму (II) можливо застосувати класичне рівняння хімічної кінетики:

$$w = k \cdot c^n, \quad (3.1)$$

де k – константа швидкості хімічної реакції; n – порядок реакції за даною речовиною; c – вихідна концентрація фосфатів, моль/дм³.

З іншої сторони швидкість хімічної реакції дорівнює:

$$w = -\Delta c / \Delta \tau = -(c_2 - c_1) / (\tau_2 - \tau_1) \quad (3.2)$$

де c_1 – концентрація фосфатів при τ_1 ;

c_2 – концентрація фосфатів при

τ_2 .

Знак «-» потрібний тому, що швидкість реакції може бути тільки позитивною величиною. Причому, можна очікувати, що порядок реакції буде близьким до першого, тобто $n \rightarrow 1$. Крім того, для реакцій першого порядку константа швидкості хімічної реакції дорівнює швидкості хімічної реакції, $k = W$.

Хід виконання роботи.

Для нашого випадку $\tau_1 = 1,5$ год; $\tau_2 = 2$ год; $c = 0,00001$ моль/дм³; $\ln c = -11,5$.

Таблиця 3.1

Таблиця з вихідними даними

T, K	Концентрація фосфатів	
	Через $\tau_1 = 1,5$ год C_1 , моль/дм ³	Через $\tau_2 = 2$ год; C_2 , моль/дм ³
283	0,000055	0,000053
288	0,000044	0,000040
293	0,000031	0,000017

$$W_1 = 0,000053 - 0,000055 / 0,5 = 0,000004 \text{ моль/год;}$$

$$W_2 = 0,000040 - 0,000044 / 0,5 = 0,000008 \text{ моль/год;}$$

$$W_3 = 0,000017 - 0,000031 / 0,5 = 0,000028 \text{ моль/год;}$$

$$\text{Тоді } \ln W_1 = \ln 0,000004 = -12,4;$$

$$\ln W_2 = \ln 0,000008 = -11,7;$$

$$\ln W_3 = \ln 0,000028 = -10,4;$$

Прологарифмуємо рівняння (3.1) та одержимо:

$$\ln w = \ln k + n \ln c,$$

яке подібне до рівняння прямої $y = kx + b$. Будуємо графік залежності $\ln w$ від $\ln c$. За лінійним рівнянням, знаходимо тангенс кута (α) нахилу прямої – значення порядку реакції (n).

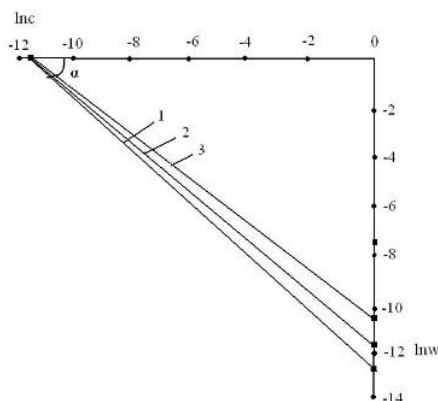


Рисунок 3.1 – Залежність $\ln w$ від $\ln c$ при температурі (К): 1 – 283; 2 – 288; 3 – 293

Видно, що у всіх 3-х випадках $\tan \alpha$ є близьким до 1.

Таблиця 3.1

Порядок реакції n , знайдений з графіку 3.1

Температура стічної води, К	Порядок реакції n
283	$-12,4 / -11,5 = 1,07$
288	$-11,7 / -11,5 = 1,02$
293	$-10,4 / -11,5 = 0,9$

Константа швидкості хімічної реакції взаємодії реагенту з фосфатами описується рівнянням Ареніуса:

$$k = A e^{-E_a / (RT)}, \quad (3.3)$$

де A – передекспоненціальний множник;

k – константа швидкості процесу, сек^{-1} ;

e – основа натурального логарифму;

E – енергія активації Дж/моль;

R – універсальна газова стала, Дж/моль·К;

T – температура, К.

Енергія активації описує потенціальний бар'єр, який повинні подолати частинки для того, щоб реакція відбулася. Для розрахунку енергії активації за використовують рівняння 3.3, логарифмування якого дає:

$$\ln k = \ln A - E_a / RT \quad (3.4)$$

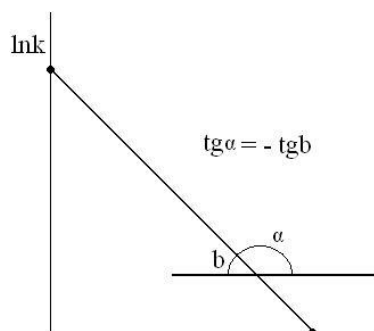


Рисунок 3.2 – Залежність логарифма константи швидкості хімічної реакції від оберненої температури згідно рівняння Ареніуса

Отже, $\ln k$ лінійно залежить від оберненої температури $1/T$ (рис.3.2), значення E_a знаходимо за тангенсом кута нахилу, оскільки:

$$\operatorname{tg} \alpha = -E_a/R. \text{ Звідси: } -E_a = R \cdot \operatorname{tg} \alpha$$

Кінетичні параметри процесу видалення фосфатів сульфатом феруму (II) представлено у табл.3.2.

Таблиця 3.2

Кінетичні параметри процесу видалення фосфатів сульфатом феруму (II) дозою 60 мг/дм^3

Температура стічної води, К	Константа швидкості хімічної реакції k	Логарифм константи швидкості хімічної реакції $\ln k$
283	$4 \cdot 10^{-6}$	- 12,4
288	$8 \cdot 10^{-6}$	- 11,7
293	$2,8 \cdot 10^{-6}$	- 10,5

Будуємо залежність $\ln k$ від оберненої температури. При побудові графіку температуру записуємо як $T \cdot 10^3$. Отже, $1/T_1 = 1/283 = 0,0035 = 3,5 \cdot 10^3$; $1/T_2 = 1/288 = 0,0034 = 3,4 \cdot 10^3$; $1/T_3 = 1/293 = 0,0034 = 3,4 \cdot 10^3$.

На рис.3.3 надано залежність логарифму константи швидкості реакції видалення фосфатів сульфатом феруму (k) від $1/T$ в інтервалі температур 283–293 К. Залежність константи швидкості процесу видалення фосфатів сульфатом феруму (II) від температури в інтервалі 283–293 К описується рівнянням прямої:

$$\ln k = -22,14 \cdot 1/T + 65,11 \quad (3.5)$$

З рис. 3.3 випливає, що $\alpha = 134^\circ$; $\operatorname{tg} \alpha = -1,7$. Звідси енергія активації становить:
 $-E_a = R \cdot \operatorname{tg} \alpha = 8,31 \cdot 1,7 \cdot 10^3 = 14 \text{ кДж/моль.}$

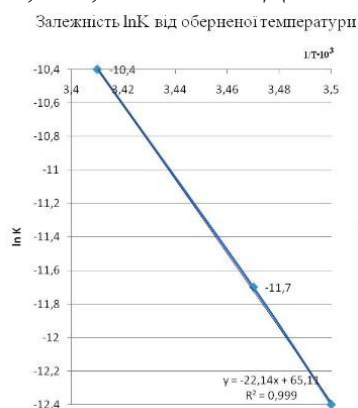


Рисунок – 3.3 Залежність логарифму константи швидкості реакції видалення фосфатів сульфатом феруму (k) від $1/T$ в інтервалі температур.

При математичному описанні кінетики хімічної реакції процесу видалення фосфатів сульфатом феруму (II) $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ за рівнянням Ареніуса встановлено, що процес протікає за реакцією першого порядку, тому тощо порядок реакції n є близьким до 1. Для реакції першого порядку залежність концентрації вихідної речовини від часу експоненціальна, період напівперетворення не залежить від початкової концентрації вихідної речовини. Крім того, величина енергії активації 14 кДж/моль свідчить про дифузійний характер процесу видалення фосфатів сульфатом феруму (II).

Лабораторна робота №4

МАТЕМАТИЧНЕ ОПИСАННЯ ЗАЛЕЖНОСТІ ЩІЛЬНОСТІ РОЗЧИНІВ АЗОТНОЇ КИСЛОТИ (HNO₃) ВІД КОНЦЕНТРАЦІЇ ПРИ ТЕМПЕРАТУРІ 293 К ЗА ДОПОМОГОЮ ГІСТОГРАМИ

Мета лабораторної роботи - навчитися математично описувати залежність розчинів HNO₃ від концентрації за допомогою гістограми, побудованої в Microsoft Office Excel.

Теоретичні основи процесу виробництва неконцентрованої HNO₃ контактним окисненням NH₃. HNO₃ є одним із основних продуктів для отримання більшості азотних речовин, в тому числі:

- мінеральних добрив;
- вибухових речовин;
- ряд інших технічних солей.

HNO₃ застосовується:

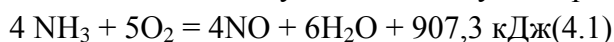
- в органічному синтезі;
- у ракетній техніці;
- як окислювач у різних процесах;
- в багатьох галузях народного господарства.

Процес виробництва неконцентрованої HNO₃ контактним окисненням NH₃ складається з двох основних стадій:

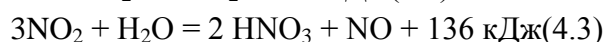
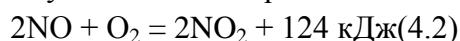
- одержання NO; переробка його на HNO₃.

На останній стадії перебігає процес окиснення NO до вищих оксидів N₂O з подальшим поглинанням їх водою.

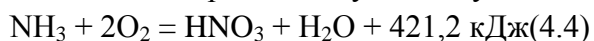
I стадія в загальному вигляді описується рівнянням:



II стадія – окиснення NO у вищі оксиди і переробка їх на HNO₃ може бути наведена у вигляді таких рівнянь:



Сумарна реакція, без урахування побічних реакцій, які перебігають з утворенням елементарного азоту може бути наведена у вигляді рівняння:



Хід виконання роботи. Вихідні дані для побудови гістограми представлені у табл. 4.1.

Спочатку необхідно занести початкові дані у таблицю, виділити їх та натиснути **Вставка** → **Гистограмма** → **Гистограмма с группировкой**. Гістограма використовується для порівняння значень по категоріям із використанням вертикальних прямокутників.

Далі натискаємо **Макет** і підписуємо **Название осей** і **Название гистограммы** (Залежність концентрації азотної кислоти від щільності при температурі 293 К).

Потім натискаємо на дані, що описують концентровану HNO₃, правою кнопкою мишки і вибираємо **Добавить линию тренда**, встановлюємо прапорці **Показать уравнение на диаграмме**; **Поместить на диаграмму величину**

достовірності апроксимації (R^2). В меню **Макет** натискуємо **Панки погрешности со стандартними ошибками**. Такі ж операції виконуємо з даними, які описують щільність азотної кислоти на гістограмі.

На рис. 4.1 представлена залежність концентрації азотної кислоти від щільності при температурі 293 К.

Таблица 4.1

Щільність розчинів азотної кислоти при 293 К

Щільність азотної кислоти, г/см ³	Концентрація азотної кислоти, % мас	Щільність азотної кислоти, г/см ³	Концентрація азотної кислоти, % мас	Щільність азотної кислоти, г/см ³	Концентрація азотної кислоти, % мас
1,026	5	1,246	40	1,339	55
1,054	10	1,253	41	1,345	56
1,084	15	1,259	42	1,351	57
1,115	20	1,266	43	1,356	58
1,147	25	1,272	44	1,361	59
1,180	30	1,278	45	1,367	60
1,187	31	1,285	46	1,372	61
1,193	32	1,291	47	1,377	62
1,200	33	1,298	48	1,382	63
1,207	34	1,304	49	1,387	64
1,214	35	1,310	50	1,391	65
1,2205	36	1,316	51	1,390	66
1,277	37	1,322	52	1,400	67
1,234	38	1,328	53	1,405	68
1,240	39	1,334	54	—	—

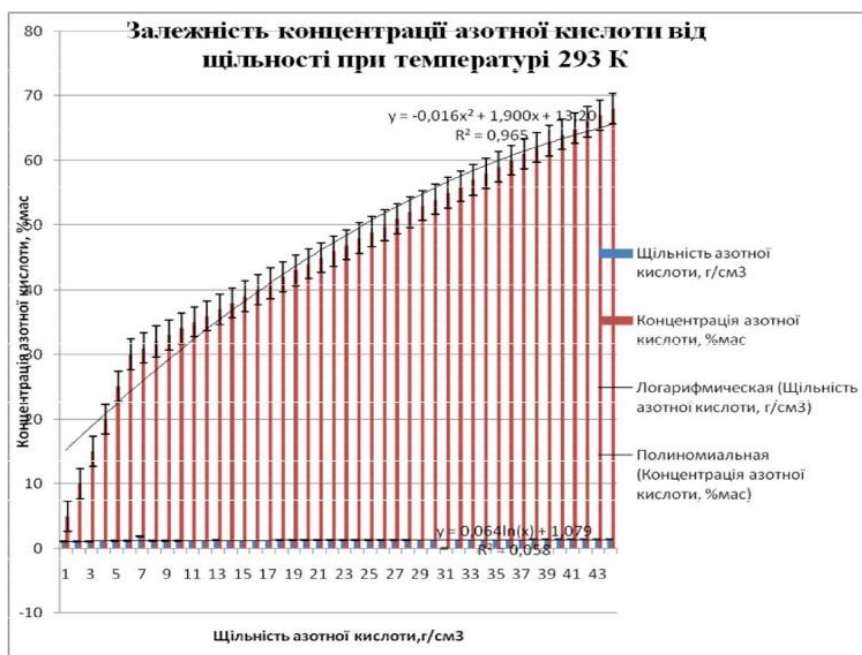


Рисунок 4.1 – Залежність концентрації азотної кислоти від щільності при температурі 293 К

Лабораторна робота № 5

МАТЕМАТИЧНЕ ОПИСАННЯ ПРОЦЕСУ АДСОРБЦІЇ ТА ВИЗНАЧЕННЯ ПИТОМОЇ ПОВЕРХНІ АДСОРБЕНТУ (НА ПРИКЛАДІ АДСОРБЦІЇ ФОСФАТІВ ЗІ СТІЧНОЇ ВОДИ ТОРФОМ)

Мета лабораторної роботи – за вихідними даними, використовуючи рівняння Ленгмюра навчитися визначати питому поверхню адсорбенту.

Кількість речовини, адсорбованої одиницею маси адсорбента, називають абсолютною адсорбцією (A). Адсорбція фосфатів зі стічної води природним торфом має мономолекулярний характер і описується рівнянням Ленгмюра:

$$A = A \cdot bc / (1 + bc), \quad (5.1)$$

де A – граничне значення адсорбції, моль/г;

b – константа рівноваги адсорбції;

c – залишкова концентрація фосфатів (рівноважна концентрація), моль/дм³

Визначивши величину адсорбції (A) при різних рівноважних концентраціях (C), можна розрахувати граничну адсорбцію (A) та питому поверхню адсорбента (S_m). Величина адсорбції A (моль/г) визначається за рівнянням:

$$A = (C_0 - C) \cdot V / m, \quad (5.2)$$

де V – об'єм розчину, дм³; m – маса адсорбента, г; C₀ – вихідна концентрація фосфатів, моль/дм³.

Вихідні дані для побудови лінеаризованої ізотерми Ленгмюра для дози торфу 50 г/дм³ та тривалості адсорбції 3 години надано у табл.5.1.

За одержаним графіком визначаємо величину граничної адсорбції A (граничне значення адсорбції) – це кількість адсорбтиву, адсорбованого одиницею маси (або одиницею площі) адсорбенту, що відповідає повному заповненню всіх активних центрів. Величину A ще називають ємністю адсорбційного моношару, тому що вона дорівнює числу адсорбційних центрів, що припадає на одиницю площі поверхні або на одиницю маси адсорбенту (згідно з моделлю адсорбції за Ленгмюром).

Таблиця 5.1

Вихідні дані для побудови лінеаризованої ізотерми Ленгмюра для дози торфу 50 г/дм³ та тривалості адсорбції 3 години

Вихідна концентрація фосфатів, C ₀		Залишкова концентрація фосфатів, C		(C ₀ -C), моль/дм ³	Величина адсорбції A, моль/г	C/A, г/дм ³
г/дм ³	моль/дм ³	г/дм ³	моль/дм ³			
0,011	0,00009	0,00125	0,000011	0,00008	0,0000016	6,25
0,0139	0,00018	0,0042	0,000035	0,0000145	0,0000029	12,06
0,028	0,00023	0,013	0,00011	0,00013	0,000002	36,6

Отже, $A = \Delta C / \Delta(C/A) = 0,000099 / 30,5 = 0,0000032$ моль/г. Обчислюємо питому поверхню адсорбента за рівнянням:

$$S_m = A_{\infty} \cdot N_A \cdot S_o, \quad (5.3)$$

де N_A – число Авогадро, $6,022 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ S_0 – площа, яку займає молекула PO_4^{3-} , Å.

Радіус молекули $PO_4^{3-} = 7,74$ Å, тоді площу, яку займає молекула PO_4^{3-} знаходимо за формулою: $S_0 = \pi \cdot r^2$ (5.4)

Ізотерма адсорбції фосфатів на поверхні торфу представлена на рис.5.1.

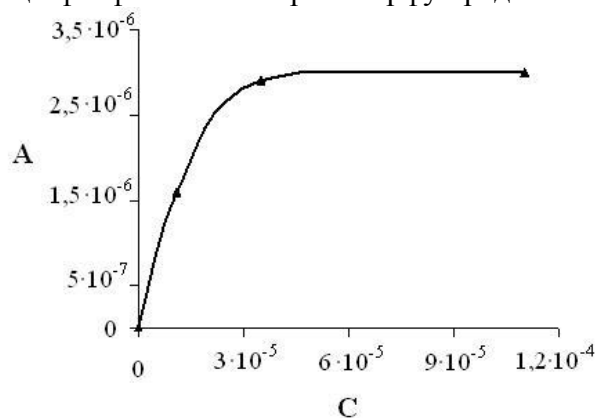


Рисунок 5.1 – Ізотерма адсорбції фосфатів на поверхні торфу
Лінеаризована ізотерма адсорбції фосфатів на поверхні торфу надано на рис.5.2.

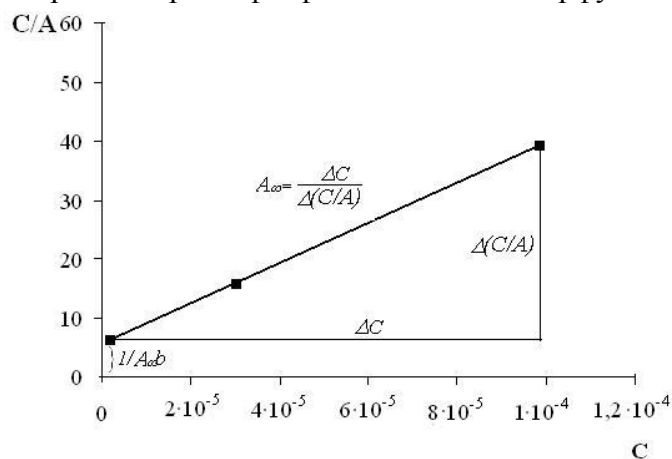


Рисунок 5.2 – Лінеаризована ізотерма адсорбції фосфатів на поверхні торфу

Лабораторна робота №6
ОТРИМАННЯ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ І КРИТЕРІАЛЬНОГО
РІВНЯННЯ ПРОЦЕСУ ТЕПЛОВІДДАЧІ

Мета лабораторної роботи: отримати математичну модель та критеріальне рівняння процесу тепловіддачі.

При тепловіддачі (конвективному теплообміні) тепло розповсюджується від поверхні твердого тіла до рідини крізь граничний шар за рахунок теплопровідності, а від граничного шару в масу рідини – переважно конвекцією. Тому для описання процесу тепловіддачі спочатку отримують диференціальне рівняння теплопровідності. Це рівняння виводять на основі закону збереження енергії, при цьому припускаються, що тепло розповсюджується в тілі (середовищі), яке має густину ρ , теплоємність c , теплопровідність λ . Причому, ці параметри сталі за напрямками x і y часі. Для виведення диференціального рівняння теплопровідності у середовищі виділяємо паралелепіпед з ребрами довжиною dx , dy і dz (рис.6.1). В паралелепіпед входить тепло уздовж осі x Q_x , виходить – Q_{x+dx} .

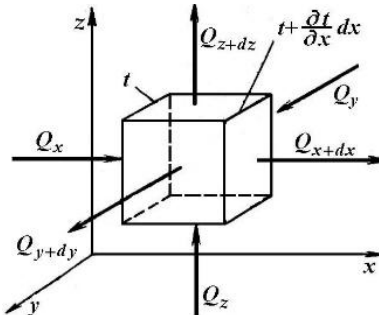


Рисунок 6.1 – До виведення диференціального рівняння теплопровідності

Процес розповсюдження тепла нероздільно пов'язаний з розподілом температури. В загальному випадку температура T в будь-якій точці простору являється функцією координат і часу. Наприклад, для декартової системи координат:

$$t=f(x,y,z,t) \quad (6.1)$$

Сукупність значень температур в даний момент часу для всіх точок простору називається температурним полем. Температура є величиною скалярною, тому і температурне поле – скалярне.

Різниця між кількістю тепла, що входить в паралелепіпед, і виходить з нього (тепло, яке залишається в об'ємі):

$$dQ=(Q_x-Q_{x+dx})+(Q_y-Q_{y+dy})+(Q_z-Q_{z+dz}) \quad (6.2)$$

Згідно із законом Фур'є:

$$u_x = -\lambda \frac{\partial t}{\partial x} dx dy dz d\tau$$

$$Q_{x+dx} = -\lambda \frac{\partial \left(t + \frac{\partial t}{\partial x} dx \right)}{\partial x} dy dz d\tau = -\lambda \frac{\partial t}{\partial x} dy dz d\tau - \lambda \frac{\partial^2 t}{\partial x^2} dx dy dz d\tau$$

Аналогічно

$$Q_{y'} - Q_{y'+dy} = \lambda \frac{\partial^2 t}{\partial y^2} dx dy dz d\tau \quad \text{і} \quad Q_{z'} - Q_{z'+dz} = \lambda \frac{\partial^2 t}{\partial z^2} dx dy dz d\tau$$

Тоді

$$dQ = \lambda \left(\frac{\partial^2 t}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial z^2} \right) dx dy dz d\tau \quad (6.3.)$$

Зміну ентальпії паралелепіпеду за час τ На основі закону збереження енергії кількість тепла, котра йде на зміну ентальпії паралелепіпеду за час τ :

$$dQ = c\rho dx dy dz \frac{\partial t}{\partial \tau} d\tau \quad (6.4)$$

Зіставляючи (6.3) та (6.4) отримаємо диференційне рівняння теплопровідності Фур'є:

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} = \frac{\lambda}{c\rho} \left(\frac{\partial^2 t}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial z^2} \right) \quad (6.5)$$

$\nabla^2 t$ – оператор Лапласа

$$\frac{\lambda}{c\rho} = a, \quad (6.6)$$

де a - коефіцієнт температуропровідності, м²/с. Таким чином критеріальне рівняння процесу тепловіддачі можна представити у вигляді :

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} = a \nabla^2 t \quad (6.7)$$

Лабораторна робота № 7
РОЗРАХУНОК МАТЕРІАЛЬНОГО БАЛАНСУ КОЛОНИ СИНТЕЗУ
КАРБАМІДУ ЗА ДОПОМОГОЮ MATHCAD

Мета лабораторної роботи – розрахувати матеріальний баланс колони синтезу карбаміду за допомогою Mathcad.

Mathcad — система комп'ютерної алгебри з класу систем автоматизованого проектування, орієнтована на підготовку інтерактивних документів з обчисленнями і візуальним супроводженням, відрізняється легкістю використання і застосування для колективної роботи. За допомогою Mathcad в хімічні технології можливо здійснювати будь-які розрахунки.

Система автоматизованого проектування — комп'ютерна система обробки інформації, що призначена для автоматизованого проектування, розробки і виготовлення кінцевого продукту, а також оформлення конструкторської і/або технологічної документації.

Mathcad був задуманий і спочатку написаний Алленом Раздовим з Массачусетського технологічного інституту (MIT), співзасновником компанії Mathsoft, яка з 2006 року є частиною корпорації Parametric Technology Corporation.

Mathcad має простий і інтуїтивний для використання інтерфейс користувача. Для введення формул і даних можна використовувати як клавіатуру, так і спеціальні панелі інструментів

Інтерфейс користувача — сукупність засобів для обробки та відображення інформації, максимально пристосованих для зручності користувача; у графічних системах реалізується багатовіконним режимом, змінами кольору, розміру, видимості (прозорість, напівпрозорість, невидимість) вікон, їх розташуванням, сортуванням елементів вікон, гнучкими налаштуваннями як самих вікон, так і окремих їх елементів

(файли, папки, ярлики, шрифти тощо), доступністю багатокористувацьких налаштувань.

Не зважаючи на те, що ця програма здебільшого орієнтована на користувачів-непрограмістів, Mathcad також використовується в складніших проектах, щоб візуалізувати результати математичного моделювання, шляхом використання поширених обчислень і традиційних мов програмування.

Складання матеріального балансу відділення синтезу карбаміду на 1т продукту

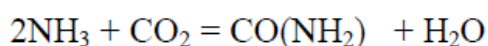
Вихідні дані.

Тиск, Па $21 \cdot 198 \cdot 10^{-5}$

Температура, 190°C

Співвідношення компонентів $\text{NH}_3:\text{CO}_2:\text{H}_2\text{O}$ 5:1:1.

Рішення. Відповідно до сумарної реакції:



на 1 т карбаміду чистотою 100% потрібно NH_3 і CO_2 відповідно, кг:

$$G_{NH_3} = \frac{2 \cdot M_{NH_3} \cdot G_{CO(NH_2)_2}}{M_{CO(NH_2)_2}};$$

$$G_{CO_2} = \frac{M_{CO_2} \cdot G_{CO(NH_2)_2}}{M_{\dot{N}i(NH_2)_2}};$$

де M_{NH_3} , $M_{CO(NH_2)_2}$, M_{CO_2} – молярні маси відповідно NH_3 , $CO(NH_2)_2$ та CO_2 , кг/кмоль;

$G_{CO(NH_2)_2}$ – необхідна кількість карбаміду, кг.

На 1т 99,5%-вого карбаміду необхідно NH_3 і CO_2 відповідно, кг:

$$G_{NH_3} = \frac{2 \cdot 17 \cdot 1000}{60} = 566,7;$$

$$G_{CO_2} = \frac{44 \cdot 1000}{60} = 733,3.$$

В колоні синтезу з урахуванням 7% втрат (5% при дистиляції та 2% при упарюванні) повинно утворитися карбаміду:

$$G = 1000 \cdot 0,995 \cdot 1,07 = 1064,7 \text{ кг.}$$

на утворення цієї кількості карбаміду чистотою 100% потрібно NH_3 і CO_2 відповідно, кг:

$$G_{NH_3} = 569,3 \cdot 1,07 = 603,4;$$

$$G_{CO_2} = 729,6 \cdot 1,07 = 780,7.$$

Експанзерний газ містить 98% CO_2 , решта – інерти (H_2 , N_2 , CO , CH_4). Аміак містить 99,2% NH_3 і 0,8% води. З урахуванням цього витрата вихідних компонентів складе, кг:

аміаку	$\frac{603,4}{0,992} = 608,3;$
--------	--------------------------------

експанзерного газу	$\frac{780,7}{0,98} = 766,6.$
--------------------	-------------------------------

Практична витрата реагентів на 1т карбаміду при ступені конверсії 0,65 складе, кг:

$$G_{NH_3}^{пратт} = \frac{a \cdot M_{NH_3} \cdot q_{втр} \cdot G_{CO(NH_2)_2} \cdot a'}{M_{CO(NH_2)_2} \cdot \alpha \cdot \varphi_{NH_3}};$$

$$G_{CO_2}^{пратт} = \frac{M_{CO_2} \cdot q_{втр} \cdot G_{CO(NH_2)_2} \cdot a'}{M_{CO(NH_2)_2} \cdot \alpha \cdot \varphi_{CO_2}};$$

іє

a – надлишок NH_3 проти стехіометричного;

$q_{\text{втр}} -$ втрати продукту;

α – ступінь конверсії карбамату в карбамід;

$\varphi_{\text{NH}_3}, \varphi_{\text{CO}_2}$ – чистота відповідних газів;

a' – чистота продукту.

$$G_{\text{NH}_3\text{практ}} = \frac{5 \cdot 17 \cdot 1,07 \cdot 1000 \cdot 0,995}{60 \cdot 0,65 \cdot 0,992} = 2339,1 \text{ кг};$$

$$G_{\text{CO}_2\text{практ}} = \frac{44 \cdot 1,07 \cdot 1000 \cdot 0,995}{60 \cdot 0,65 \cdot 0,98} = 1225,7 \text{ кг}.$$

З технічним аміаком виходить води, кг:

$$g_{\text{NH}_3} = G_{\text{NH}_3\text{практ}} \cdot \varphi_{\text{NH}_3} = 2339,1 \cdot 0,992 = 2320,4;$$

$$g_{\text{H}_2\text{O}} = G_{\text{NH}_3\text{практ}} - g_{\text{NH}_3} = 2339,1 - 2320,4 = 18,7.$$

З експанзерним газом надходить відповідно CO_2 та інертів, кг:

$$g_{\text{CO}_2} = G_{\text{CO}_2\text{практ}} \cdot \varphi_{\text{CO}_2} = 1225,7 \cdot 0,98 = 1201,2;$$

$$g_{\text{ін}} = G_{\text{CO}_2\text{практ}} - g_{\text{CO}_2} = 1225,7 - 1201,2 = 24,5.$$

Кількість циркуляційної води знаходимо з умови співвідношення реагентів:

$$G_{\text{цирк. H}_2\text{O}} = g_{\text{CO}_2} \cdot \frac{M_{\text{H}_2\text{O}}}{M_{\text{CO}_2}} = 1201,2 \cdot \frac{18}{44} = 491,4 \text{ кг}.$$

Утворюється карбамату амонію, кг:

$$G_{\kappa} = g_{\text{CO}_2} \cdot \frac{M_{\kappa}}{M_{\text{CO}_2}},$$

На утворення цієї кількості карбамату амонію витрачається аміаку

$$G_{\text{NH}_3} = \frac{2 \cdot M_{\text{NH}_3} \cdot G_{\kappa}}{M_{\kappa}} = \frac{2 \cdot 17 \cdot 2129,4}{78} = 928,2 \text{ кг}.$$

Залишається NH_3 , що не прореагував:

$$G_{\text{NH}_3\text{непр}} = g_{\text{NH}_3} - G_{\text{NH}_3} = 2320,4 - 928,2 = 1392,2 \text{ кг}.$$

Утворюється карбаміду з карбамату амонію:

$$G_{\text{CO}(\text{NH}_2)_2} = G_{\kappa} \cdot \frac{M_{\text{CO}(\text{NH}_2)_2}}{M_{\kappa}} \cdot \alpha = 2129,4 \cdot \frac{60}{78} \cdot 0,65 = 1064,7 \text{ кг}.$$

Залишається карбамату амонію:

$$G_{к.непр} = G_{к} \cdot (1 - \alpha) = 2129,4 \cdot (1 - 0,65) = 745,3 \text{ кг.}$$

При утворенні карбамату виділиться води:

$$g_{2H_2O} = G_{к} \cdot \frac{M_{H_2O}}{M_{к}} \cdot \alpha = 2129,4 \cdot \frac{18}{78} \cdot 0,65 = 319,4 \text{ кг.}$$

Всього води буде $g_{H_2O} = g_{1H_2O} + g_{2H_2O} = 18,7 + 319,4 = 338,1 \text{ кг.}$

Всі розрахунки зведені до таблиці 7.2.

Таблиця 7.2

Матеріальний баланс відділення синтезу карбаміду на 1 т продукту

Прихід			Витрати		
компонент	кг	%	компонент	кг	%
1. Технічний аміак:			1. Карбамід:		
NH ₃	2320,4	57,2	CO(NH ₂) ₂ H ₂ O	1064,7	26,3
H ₂ O	18,7	0,5	2. Інерти	338,1	8,3
2. Експанзерний газ:			3. Циркуляційна вода	24,5	0,6
CO ₂	1201,2	29,6	4. Карбамат амонію	491,4	12,1
Інерти	24,5	0,6	5. NH ₃ надлишковий	745,3	18,4
3. Циркуляційна вода	491,4	12,1		1392,2	34,3
Всього:	4056,2	100,0	Всього:	4056,2	100,0

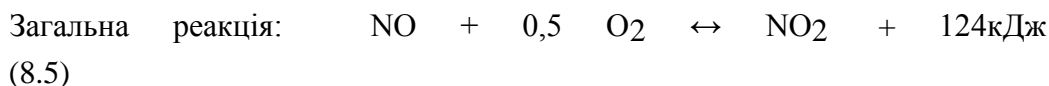
Лабораторна робота № 8

МАТЕМАТИЧНЕ ОПИСАННЯ ПРОЦЕСУ ГОМОГЕННОГО ТА ГЕТЕРОГЕННОГО ОКИСНЕННЯ ОКСИДУ АЗОТУ (II) ДО ОКСИДУ АЗОТУ (IV)

Мета лабораторної роботи – вивчити механізм процесу гомогенного і гетерогенного окиснення NO до NO₂, ознайомитися з параметрами, які впливають на процес окиснення NO до NO₂, вивести математичні рівняння залежності прискорення від температури на основі різних високотемпературних каталізаторів.

Теоретичні основи. Прискорити реакцію окиснення оксиду азоту (II) до оксиду азоту (IV) можливо за допомогою каталізатора. Як високотемпературні були запропоновані каталізатори на основі оксидів нікелю та кобальту з домішками оксидів цирконію, мангана та срібла. Ці каталізатори прискорюють реакцію окиснення NO у десятки рази. Значення енергії активації для гетерогенної реакції окиснення NO в межах 2,3 – 3,4 кДж/моль свідчить про позитивний вплив на швидкість реакції, підвищення температури до 630 – 640 К до зниження швидкості процесу веде збільшення вмісту NO; NO₂ та водяної пари у вихідній газовій суміші.

Атрощенко В.І. запропонував детальний механізм каталітичного окиснення NO:



Гомогенні реакції – реакції, у яких реакційна суміш являється гомогенною, а реагенти і продукти належать одній і тій же фазі.

Гетерогенні реакції – реакції, при проходженні яких реагенти знаходяться в різних фазових станах. Реакційний процес протікає на межі розділу фаз.

Хід виконання роботи. Механізм каталітичного окиснення NO описує кінетичне рівняння, яке було виведено для III стадії (реакція 8.3):

$$w = \frac{k_1 \cdot P_{NO} \cdot P_{O_2}^{0,5} \cdot \left[1 - \sqrt{\frac{\varphi}{k_p}} \right]}{\left[1 + k_2 \cdot P_{O_2}^{0,5} + k_3 \cdot P_{NO} + k_4 \cdot P_{NO_2} \right]^2}$$

$k_p = \frac{P_{NO}^n}{P_{NO}^2 \cdot P_{O_2}}$ – константа рівноваги, де P_{NO} ; P_{NO_2} ; P_{O_2} – рівноважні

$\varphi = \frac{P_{NO}}{P_{NO} \cdot P_{O_2}^{0,5}}$ – величина, що характеризує ступінь наближення до рівноваги, k_1, k_2, k_3, k_4 – константа швидкості реакцій за стадіями розмірність, яких наведена в таблиці 8.1.

За рівнянням (8.6) розраховано швидкість реакції, яка протікає на трьох

найбільш активних каталізаторах при об'ємній швидкості газу = 15000 год⁻¹ та вмісту 0,8 – 0,9% об'ємних NO та 2,45 – 3% об'ємних O₂ і, яка порівняна зі швидкістю гомогенного процесу окиснення (табл. 8.2).

Таблиця 8.1

Розмірність констант швидкості реакцій 8.1 – 8.4

Реакція	Константа швидкості	Розмірність
8.1	k ₁	1/Па
8.2	k ₂	1/Па
8.3	k ₃	1/Па
8.4	k ₄	1/Па

Таблиця 8.2

Активність високотемпературних каталізаторів

Каталізатор	Температура, К	Швидкість реакції моль/м ³ кат·с		Прискорення w _{кат}
		w _{кат}	w _{ГОМОГ}	
на основі NiO	473	3,230	0,0120	269
	523	3,287	0,0080	410
	573	3,360	0,0076	525
	623	3,630	0,0064	583
	633	3,700	0,0062	596
на основі Co ₃ O ₄ з домішкою ZrO ₂	473	3,567	0,0126	283
	523	3,578	0,0090	397
	573	3,756	0,0084	447
	623	3,842	0,0072	506
	633	3,935	0,0068	578
на основі Co ₃ O ₄ з домішкою MnO ₂	473	5,030	0,0150	335
	523	5,110	0,0146	350
	573	5,160	0,0094	543
	623	5,320	0,0084	633
	633	5,400	0,0082	658

Процес гомогенного окиснення NO описується наступними рівняннями:

$$\alpha_{\text{ГОМОГ}} = 1/\beta + \beta$$

$$\beta = 39,6\tau \cdot P_{\text{NO}}^{0,69} \cdot P_{\text{O}_2}^{0,8} \cdot e^{5071,34/RT} \cdot (w \cdot \sqrt{P})^{0,21}$$

де $\alpha_{\text{ГОМОГ}}$ – ступінь гомогенного окиснення NO, частки одиниці; β – газодинамічний коефіцієнт; τ – тривалість окиснення, с; P_{NO} – парціальний тиск NO, МПа; w – лінійна швидкість газу, м/с; R – універсальна газова стала, 8,314 кДж/моль·К P – загальний тиск в системі, МПа.

Лабораторна робота № 9
РОЗРОБКА СТАТИСТИЧНИХ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ
ЛІНІЙНОГО ТИПУ В ІНТЕГРОВАНОМУ СЕРЕДОВИЩІ MATHCAD

Тема лабораторної роботи – розробка математичних моделей на основі експериментальних статистичних даних із застосуванням інтегрованого програмного середовища Mathcad.

Мета лабораторної роботи – освоєння методики побудови лінійних експериментально-статистичних моделей з використанням методу найменших квадратів та проведення обробки експериментально-статистичних даних із застосуванням різних операцій та вбудованих функцій інтегрованого програмного середовища Mathcad.

ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

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

Призначення й мети моделювання

Моделювання — заміщення досліджуваного об'єкта (оригіналу) його умовним образом, описом або іншим об'єктом (моделлю) і вивчення властивостей оригіналу шляхом дослідження властивостей моделі. З моделями й моделюванням ми зіштовхуємося в нашому житті щодня. У дитинстві дитину оточують іграшки: машинки, ляльки, кубики й т.д. моделі, що повторюють окремі властивості реально існуючих предметів. Граючи, дитина одержує важливі знання про їх. У процесі мислення людина оперує образами об'єктів навколишнього світу, які є різновидами моделей - когнітивними (уявними) моделями. Реальна користь від моделювання може бути отримана при виконанні двох головних умов: модель повинна бути адекватної оригіналу, у тому розумінні, що повинна з достатньою точністю відображати характеристики оригіналу, які цікавлять дослідника; модель повинна усувати проблеми, пов'язані з фізичним виміром якихось сигналів або характеристик оригіналу. Моделювання може здійснюватися із двома головними цілями: для вивчення механізму явищ (пізнавальна мета); для керування об'єктом, тобто для виробітку по моделі оптимальних керованих впливів. В обох випадках модель створюється для визначення й прогнозу характеристик, що цікавлять, або сигналів об'єкта.

Основні види моделей й їхні властивості

Залежно від способу реалізації всі моделі можна розділити на два класи. *Фізичні моделі* — припускають, як правило, реальне втілення тих фізичних властивостей оригіналу, які цікавлять дослідника. Фізичні моделі спрощені й менші й називаються *макети*. Фізичне моделювання інакше називається *макетування*. *Математичні моделі* являють собою формалізовані описи об'єкта або системи за допомогою деякої абстрактної мови, наприклад у вигляді сукупності математичних співвідношень або схеми алгоритму. Розрізняють різні види математичного моделювання: вербальні (словесні), графічні, табличні, аналітичні й алгоритмічні. Іноді математична модель описується рівняннями, які впливають із

розгляду фізичної сутності явища або системи, які моделюються. Однак частіше опис об'єктів і систем, які моделюються, носить чисто формальний характер і базується на тім, що багато явищ часом всілякої природи описуються рівняннями (алгебраїчними, диференціальними й іншими) того самого виду. У цьому випадку говорять про *формальні* моделі. Крім того, явища, системи і їхні моделі можуть бути нестационарними й стационарними. *Нестационарні моделі* характеризуються залежністю їхніх параметрів від часу. У *стационарних моделях* такої залежності немає. Природно, що моделювання нестационарних явищ набагато складніше, ніж стационарних. Моделі володіють рядом властивостей, від яких залежить успіх їхнього застосування. Відзначимо деякі з них, найбільш важливі. *Адекватність* — це ступінь відповідності моделі досліджуваному реальному об'єкту. Вона ніколи не може бути повною. На практиці модель вважають адекватною, якщо вона із задовільною точністю дозволяє досягти цілей дослідження. *Простота (складність)* — також є однією з характеристик моделі. Чим більша кількість властивостей об'єкта описує модель, тим більш складною вона виявляється. Не завжди чим складніше модель, тим вище її адекватність. Треба прагнути знайти найбільш просту модель, що дозволяє досягти необхідні результати вивчення. *Потенційність (передбачуваність)* — здатність моделі дати нові знання про досліджуваний об'єкт, спрогнозувати його поведінку або властивості.

Основні принципи моделювання

Розглянемо їх. *Принцип інформаційної достатності*. При повній відсутності інформації про досліджуваний об'єкт побудова його моделі неможлива. З іншого боку, при наявності повної інформації про об'єкт побудова його моделі не має сенсу. Існує деякий рівень апріорної інформації про об'єкт, при досягненні якої може бути побудована його адекватна модель. *Принцип здійснюваності*. Створювана модель повинна забезпечувати досягнення поставленої мети дослідження з імовірністю, що істотно відрізняється від нуля. *Принцип множинності моделей*. Даний принцип є ключовим. Мова йде про те, що створювана модель повинна відбивати в першу чергу ті властивості реальної системи, які цікавлять дослідника. Відповідно, при використанні будь-якої конкретної моделі пізнаються лише деякі сторони реальності. Для більш повного її дослідження необхідний ряд моделей, що дозволяє з різних сторін і з різним ступенем деталізації розглянути досліджуваний об'єкт. *Принцип агрегування*. У більшості випадків складну систему можна представити такою, яка складається з агрегатів (підсистем), для адекватного математичного опису яких виявляються придатними деякі стандартні математичні схеми. *Принцип параметризації*. Цей принцип означає, що модель будується у вигляді відомої системи, параметри якої не відомі.

Технологія моделювання

Ступінь реалізації перерахованих принципів кожної конкретної моделі може бути різною. Це залежить не тільки від бажання дослідника, але й від дотримання їм технологій моделювання, а будь-яка технологія має на увазі певну послідовність дій. У цей час найпоширенішою технологією моделювання є *комплексне моделювання*, під яким розуміється математичне моделювання з використанням засобів обчислювальної техніки. Відповідні технології комплексного моделювання представляють виконання наступних дій: визначення мети моделювання; розробки

концептуальної моделі; формалізації моделі; програмної реалізації моделі; планування модельних експериментів; реалізації плану експерименту; аналізу й інтерпретації результатів моделювання.

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

Основні методи рішення завдань моделювання

На етапі програмної реалізації моделі й плану експериментів необхідний вибір методів рішення завдань моделювання. При цьому використовуються три основні групи методів: графічні - оцінні наближені методи, засновані на побудові й аналізі графіків; аналітичні - рішення, строго отримані у вигляді аналітичних виражень (придатні для вузького кола завдань); чисельні - основний інструмент для рішення складних математичних завдань, заснований на застосуванні різних чисельних методів. Аналітичне рішення вдається одержати рідко й частіше лише при спрощеному формулюванні завдання в лінійному наближенні. Основним засобом рішення є алгоритмічний підхід, що реалізує обчислювальний експеримент на ЕОМ. Одержуване на ЕОМ рішення майже завжди містить деяку погрішність (похибку). Нагадуємо, що є абсолютна похибка:

$$\varepsilon = x - x_u \quad \Delta = \varepsilon / x_u$$

у вигляді різниці між наближеним і точним значеннями результату й відносна похибка: наявність погрішності рішення обумовлено рядом причин. Перелічимо основні джерела погрішності.

Математична модель є лише наближеним описом реального процесу (погрішність моделі). Вихідні дані, як правило, містять погрішності, тому що є або результатами експериментів (вимірів), або рішеннями допоміжних завдань (погрішність даних). Застосовувані для рішення завдання методи в більшості випадків є наближеними (погрішність методу). При уведенні вихідних даних в ЕОМ, виконанні операцій, виробляються округлення (обчислювальна погрішність). Погрішності 1 й 2 - непереборні на даному етапі рішення, для їхнього зменшення доводиться повертатися знову до побудови математичної, а й іноді й концептуальної моделі, проводити додаткове експериментальне уточнення умов завдання. Оцінка обумовленості обчислювального завдання - ще одна обов'язкова вимога при виборі методу рішення й побудові математичної моделі. Нехай обчислювальне завдання коректне. Теоретично стійкість завдання означає, що її рішення може бути знайдене з як завгодно малою погрішністю, якщо тільки гарантувати досить малу погрішність вхідних даних. Однак на практиці їхня точність обмежена (і величиною набагато більшою, ніж $\approx 2^{-p+1}$ - машинна точність, p - порядок, округлення виконується усіканням). Як впливають малі, але кінцеві погрішності вхідних даних на рішення? Як сильно вони спотворюють результат? Відповідь на це дає поняття *обумовленості* завдання, тобто чутливість рішення обчислювального завдання до малих погрішностей вхідних даних.

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

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

абсолютне число обумовленості або $\delta(y^*) \leq \nu_{\delta} \cdot \delta(x^*)$ відносне число обумовленості (замість похибки можуть фігурувати її границі). Для погано обумовлених завдань $\gg 1$ (нестійкість $=\infty$).

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

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

метод еквівалентних перетворень — вихідне завдання замінюють іншим, що має те ж рішення: знаходження кореня нелінійного рівняння зводять до пошуку точок глобального мінімуму;

методи апроксимації — замінюють вихідне завдання іншим, рішення якого близьке до рішення вихідного завдання;

методи кінцево-різницевої, засновані на заміні похідних кінцевими різницями;

прямі (точні) методи — рішення може бути отримане за кінцеве число елементарних операцій (арифметичні й добування кореня). Багато прямих методів не годяться до застосування в ЕОМ через чутливість до помилок округлення;

ітераційні методи — методи послідовних наближень до рішення завдання. Задається початкове наближення рішення, будується ітераційна послідовність наближень до рішення. Якщо ця послідовність сходиться до рішення, то говорять, що ітераційний процес сходиться. Безліч початкових наближень, для яких метод сходиться, називаються областю збіжності методу;

метод статистичних випробувань (Монте-Карло) — заснований на моделюванні випадкових величин і побудові статистичних оцінок рішень завдань (для моделювання великих систем).

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

Контроль правильності моделі

Для контролю правильності отриманої моделі може використатися ряд прийомів:

аналіз розмірності — величини в лівій і правій частині вираження, окремі

доданки в кожній із частин повинні мати однакову розмірність;

перевірка порядків і характеристик залежностей — параметри й змінні, які в даному завданні виражені величинами більшого порядку малості, можуть бути виключені з розгляду як несуттєві, що часто дозволяє значно спростити модель й її аналіз. Характер зміни значень величин, які моделюються, повинен відповідати їхньому реальному змісту, не суперечити спостережуваним даним;

дослідження граничних випадків — результати моделювання при крайніх значеннях параметрів моделі, рівних, як правило, нулю або нескінченності, не повинні суперечити змісту (наприклад, енергія реальної фізичної системи не може виявитися нескінченно великий, час протікання процесу — негативним і т.п.). Модель у цьому випадку істотно спрощується й легше для розуміння;

перевірка замкнутості й коректності математичного завдання — система математичних співвідношень повинна мати єдине рішення.

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

його рішення існує при будь-яких припустимих вхідних даних;

це рішення єдине (однозначно визначене);

рішення неперервно залежить від даних завдання - стійке стосовно малих збурювань вхідних даних. Рішення обчислювального завдання називається *стійким* за вхідними даними, якщо воно залежить від вхідних даних безперервним чином; тобто для будь-якого $\epsilon > 0$ існує $\delta(\epsilon) > 0$ таке, що всяким вихідним даним, які задовольняють умови, відповідає наближене рішення. Далеко не всі практичні завдання є коректними. До них, наприклад, не відносяться зворотні завдання геофізики, астрофізики, спектрографії, розпізнавання образів, синтез і багато інших важливих прикладних проблем. Властивість коректності завдання має велике значення для вибору методу рішення. До некоректних завдань незастосовні звичайні чисельні методи обчислювальної математики. Строгий аналіз коректності в багатьох випадках математично складний, і обмежується перевіркою відповідності кількості невідомих й рівнянь моделі, які їх зв'язують.

Побудова експериментально-статистичної моделі

Основна задача при обробці статистичних даних складається у встановленні тісноти і форми зв'язку між досліджуваними явищами, подіями, параметрами і т.д. Форма зв'язку визначає характер зміни (лінійний, експонентний...) досліджуваної ознаки (результативної ознаки, залежної перемінної) зі зміною ознаки-фактора (факторної ознаки, незалежної змінної). Якщо статистичні дані представити на графіку, то одержимо поле кореляції (поле статистичних даних - точок). Якщо спробувати провести лінію в максимальній близькості від точок по полю кореляції, то вона буде називатися лінією регресії. Існує багато способів побудови і визначення параметрів рівняння регресії. Обмежимося використанням одного з найбільш розповсюджених - способу найменших квадратів (с.13-16). Необхідно провести автоматизацію обробки експериментально-статистичних даних у системі Mathcad. Як метод оцінки тісноти кореляційного зв'язку використовувати коефіцієнт кореляції, а в якості способу визначення форми зв'язку - метод найменших квадратів. Треба визначити такі параметри рівняння регресії, що забезпечать оптимальне розташування лінії регресії серед множини точок поля

кореляції. Обробка експериментально-статистичних даних виконується із застосуванням різних операцій і вбудованих функцій Mathcad. В якості вихідної інформації використати дані, представлені в Табл.1.1.

Таблиця 1.1

X	1	3	5	7	9	11	13	15
Y	800.0	810.0	820.0	830.0	840.0	850.0	860.0	890.0

Обмежимося в даній задачі визначенням параметрів рівняння

$$Y = A_0 + A_1 \cdot X$$

регресії лінійного виду:

де A_0 - вільний член рівняння регресії; A_1 - коефіцієнт рівняння регресії. Для визначення вільного члена A_0 і коефіцієнта рівняння регресії A_1 використовуємо загальновідомі формули [2]:

$$A_0 = \frac{\sum_{i=1}^n Y_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i^2 - \sum_{i=1}^n Y_i \cdot X_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i}{n \cdot \sum_{i=1}^n X_i^2 - \sum_{i=1}^n X_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i}$$

$$A_1 = \frac{n \cdot \sum_{i=1}^n Y_i \cdot X_i - \sum_{i=1}^n Y_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i}{n \cdot \sum_{i=1}^n X_i^2 - \sum_{i=1}^n X_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i}$$

$$R = \frac{n \cdot \sum_{i=1}^n Y_i \cdot X_i - \sum_{i=1}^n Y_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i}{\sqrt{\left(n \cdot \sum_{i=1}^n X_i^2 - \sum_{i=1}^n X_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i \right) \left(n \cdot \sum_{i=1}^n Y_i^2 - \sum_{i=1}^n Y_i \cdot \sum_{i=1}^n Y_i \right)}}$$

де N - число пар вихідних експериментально-статистичних даних; X_i, Y_i - значення i -х факторної і результативної ознак. Тіснота зв'язку між факторною ознакою X_i і результативною Y_i оцінюється коефіцієнтом кореляції R , що визначається за формулою:

$$R = \frac{n \cdot \sum_{i=1}^n Y_i \cdot X_i - \sum_{i=1}^n Y_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i}{\sqrt{\left(n \cdot \sum_{i=1}^n X_i^2 - \sum_{i=1}^n X_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i \right) \left(n \cdot \sum_{i=1}^n Y_i^2 - \sum_{i=1}^n Y_i \cdot \sum_{i=1}^n Y_i \right)}}$$

Зображення поля кореляції і всіх результатів розрахунку необхідно зробити з максимально можливим масштабом збільшення. Для рішення задачі використовувати убудовані функції системи Mathcad.

Необхідно провести автоматизацію обробки експериментально-статистичних даних у системі Mathcad. Як метод оцінки тісноти кореляційного зв'язку використовувати коефіцієнт кореляції, а в якості способу визначення форми зв'язку - метод найменших квадратів. Треба визначити такі параметри рівняння регресії, що забезпечать оптимальне розташування лінії регресії серед множини точок поля кореляції. Обробка експериментально-статистичних даних виконується із застосуванням різних операцій і вбудованих функцій Mathcad.

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

Короткі відомості про середовище Mathcad

Mathcad - це інтегроване середовище для рішення різноманітних математичних задач. Mathcad має ієрархічну систему меню, що складається з головного меню і системи падаючих, спливаючих і контекстно-залежних меню (підменю). Після запуску система Mathcad готова до роботи. Кожний документ у Mathcad складається з окремих блоків різного типу: тексти (коментарі), формули, графіки, таблиці і т.д. Блок займає на робочому листі визначену область прямокутної форми. Розташування блоків у документі, крім текстового, має принципове значення. Виконання розрахунків у системі Mathcad відбувається з ліва на право, а потім згори до низу у суворій послідовності. Тому блоки не повинні перетинатися і мають бути розташовані у послідовності, яка необхідна для виконання розрахунків. При конструюванні блоків використовують три убудованих редактори - текстовий, формульний і графічний. Розрізняють: *математичну область*, яка містить математичний вираз чи графік. Вона є робочою; це означає, що будь-яка зміна, зроблена в ній, відіб'ється на всіх інших математичних областях, розташованих нижче в робочому документі;

текстова область - це прямокутна область, зарезервована для розміщення тексту. Вона може мати довільні розміри і розташовуватися в будь-якій місці робочого документа. Текстові області використовуються для коротких пояснень. Текст у робочих документах може бути присутнім у двох формах: у виді текстових абзаців і текстових областей. Вибір придатного варіанта залежить від кількості тексту і від його бажаного представлення;

текстовий абзац - область, яка розташовується по всій ширині сторінки робочого документа і зарезервована для розміщення тексту

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

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

Для присвоєння значень змінним, константам та функціям у системі використовується символ := (оператор присвоєння). При цьому ліворуч від оператора присвоєння (:=) знаходиться вираз якому присвоюється значення, а праворуч - вираз, що треба присвоїти. Для отримання результату розрахунку необхідно записати ім'я змінної чи функція та поставити знак = (дорівнює) після нього. Mathcad автоматично виконає розрахунок якщо ви клацнете мишею поза межами

блоку або виберете команду *Розрахувати* на панелі керування.

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

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

Кожен вираз має *точку прив'язки*. Mathcad використовує ці точки, щоб визначити порядок проходження виразів. Далі пояснимо деякі визначення, що використовуються в середовищі Mathcad.

Операнд – число чи вираз, на яке діє оператор. *Функція* - вираз, відповідно до якого проводяться деякі обчислення з його аргументами і визначається його числове значення. Функції в Mathcad можуть бути убудованими і визначеними користувачем.

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

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

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

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

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

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

Оператори являють собою елементи мови, за допомогою яких можна створювати математичні вирази. Робочі файли Mathcad мають розширення *.mcd і можуть бути відкриті тільки в середовищі Mathcad тієї версії, в якій були створені чи в новішій версії Mathcad. Для можливості відкриття вашого файлу у попередніх версіях Mathcad необхідно обрати пункт меню *File (Файл) → Save as... (Зберегти як...)*. У діалоговому вікні що з'явиться у полі *Save as type: (Тип файлу:)* вкажіть версію Mathcad в якій необхідно буде відкрити файл (наприклад, *Mathcad 2000 Worksheet (*.mcd)*). Для можливості перегляду файлів, створених у середовищі Mathcad, на комп'ютері де Mathcad не встановлено, необхідно виконати дії описані

вище, але у полі *Save as type: (Тип файлу:)* вказати *Rich Text Format File (*.rtf)*. Після цього файл можна переглядати у текстовому редакторі (наприклад, MS Word), але редагування файлу та зміни будуть неможливі. Тому перед цим треба обов'язково зберігати файл у форматі Mathcad при потребі подальшої роботи з ним.

ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Перед початком виконання першої роботи необхідно у вказаному викладачем місці створити на жорсткому диску комп'ютера папку з назвою своєї групи. В цю папку потрібно зберігати всі файли з результатами виконання лабораторних робіт. Робота виконується у два етапи. На першому здійснюється розрунк за традиційним методом, а на другому - здійснюється розв'язання задачі із використанням вбудованих функцій Mathcad. Включіть комп'ютер і запусіть програму Mathcad вказаним викладачем способом. Обробка експериментально-статистичних даних має наступний порядок дій.

Визначення вихідних сум.

Уведіть спочатку пояснювальний текст у робочому листі. Для цього розмістіть курсор у місці введення. Виберіть мову для введення (українську чи російську). Потім виберіть пункт *Insert* (Вставка) головного меню Mathcad. У спадаючому меню клацніть по пункту *Text Region* (Текстова область) чи в місці розташування курсору натисніть клавішу з подвійними лапками (команда для введення тексту). В обох випадках виникне шаблон, що вказує місце і початок уведення, після чого можна приступити до виконання цієї операції. Текстова область буде автоматично збільшуватися по мірі введення тексту. Для закінчення введення досить вивести курсор за рамки цієї області. Можна вводити текст і через буфер обміну з текстового редактора (наприклад, MS Word).

Тепер необхідно зберегти створений документ з допомогою команди *Файл*→*Зберегти* або комбінації клавіш *Ctrl+S* у папку з назвою вашої групи. Для запобігання втрати набраної в документі Mathcad інформації, рекомендується зберігати файл після виконання кожної певної стадії роботи.

Введемо тепер вихідні дані по факторній ознаці X і результативній ознаці Y , представлені у виді векторів. Для цього в полі робочого листа визначимо спочатку місце розташування факторної ознаки. Скористаємося комбінацією клавіш *Shift+*: (двокрапка); з'явиться оператор присвоювання у виді $:=$. Якщо у вікні мається панель інструментів *Math* (*Математика*), клацнемо по кнопці із зображенням матриці. З'явиться панель *Matrix* (*Матриця*). Клацнемо в ній по кнопці з аналогічним зображенням чи застосуємо комбінацію *Ctrl+M*. В обох випадках з'явиться діалогове вікно *Insert Matrix* (*Уставити матрицю*). У його текстових полях *Rows* (*Рядки*) і *Columns* (*Стовпці*) розміщаємо потрібне число рядків і стовпців, у нашій задачі- 8 і 1 відповідно.

Після щиглика по клавіші *OK* з'явиться шаблон з мітками для уведення вихідних даних. Підвівши курсор покажчика миші до кожної з них, уведіть відповідні числові значення (табл. 1.1) Аналогічно вводяться дані і для результативної ознаки Y . Перейдемо до визначення вихідних сум:

$$SX = \sum_{i=1}^n X_i; \quad SY = \sum_{i=1}^n Y_i; \quad SXX = \sum_{i=1}^n X_i^2$$

$$SXY = \sum_{i=1}^n X_i \cdot Y_i; \quad SY^2 = \sum_{i=1}^n Y_i^2$$

Визначимо тепер величину суми SX . Для цього наберемо в робочому листі її ім'я і натиснемо на клавішу зі знаком = (дорівнює). Далі в панелі *Matrix (Матриця)* клацнемо по кнопці з зображенням ΣV (підсумовування елементів вектора). Після знака присвоєння := з'явиться символ суми Σ . На місці виниклої мітки наберемо факторну ознаку X . Небагато відступивши вправо, надрукуємо шукану величину SX і клацнемо по кнопці = на стандартній панелі інструментів *Arithmetic (Арифметика)* чи натиснемо = на клавіатурі. Для отримання результату (проведення обчислення) потрібно клацнути мишею поза межами блоку, натиснути клавішу $F9$ на клавіатурі чи клацнути по кнопці *Calculate (Обчислити)* панелі керування. Аналогічно визначаються й інші суми - SX , SY , SXY , SXX , SXY . Звертаємо особливу увагу на місце розташування виражень, що обчислюються. Вони повинні розташовуватися, щонайменше, в одному рядку, але праворуч чи нижче виражень і величин, які входять до їхнього складу. Ці величини і вираження повинні бути визначені задалегідь.

Визначення параметрів рівняння регресії A_0 , A_1 і коефіцієнта кореляції R

Формули для визначення A_0 , A_1 і R виглядають трохи громіздко, при цьому окремі їхні частини повторюються в інших формульних вираженнях. Для спрощення розрахунку введемо їхні проміжні варіанти:

$$A = n \cdot \sum_{i=1}^n X_i^2 - \sum_{i=1}^n X_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i;$$

$$B = n \cdot \sum_{i=1}^n Y_i^2 - \sum_{i=1}^n Y_i \cdot \sum_{i=1}^n Y_i;$$

$$C = n \cdot \sum_{i=1}^n Y_i \cdot X_i - \sum_{i=1}^n Y_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i$$

У цьому випадку шукані параметри можна буде визначити наступним чином:

$$A_0 = \left(\sum_{i=1}^n Y_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i^2 - \sum_{i=1}^n Y_i \cdot X_i \cdot \sum_{i=1}^n X_i \right) / A;$$

$$A_1 = C / A;$$

$$R = C / \sqrt{A \cdot B}.$$

Збережіть створений документ у своїй папці на жорсткому диску. На закінчення дамо графічне зображення теоретичного рівняння регресії для нашої задачі, використовуючи для цього убудовані оператори зображення графіків у Mathcad. Виконаємо побудову на робочому листі, точніше, на його продовженні. Для цього ми попередньо повинні набрати на робочому листі теоретичне рівняння регресії.

Для побудови декартового графіка необхідно поставити курсор у місце розташування його лівого верхнього кута, потім уставити шаблон графіка на робочий лист. Для цього виберіть у головному меню Mathcad пункт *View (Вид) → Toolbars (Панелі інструментів) → Graph (Графіки)*. З'явиться панель інструментів *Graph (Графіки)*. Клацніть у ній по кнопці *X-Y Plot (Декартів графік)* чи скористайтесь комбінацією *Shift+2*.

На робочому листі в місці розташування курсору з'являться дві рами з мітками. Для швидкої побудови графіка досить у мітку, розташовану на середині осі ординат Y , ввести ім'я функції, що ми хочемо зобразити, а в мітку, розташовану на середині осі абсцис X - ім'я її аргументу.

У нашій задачі вводимо в мітку на осі ординат ім'я функції $Y(X)$, а на осі абсцис - ім'я аргументу X . Потім виводимо курсор з області графіка чи натискаємо клавішу $F9$. Відразу ж з'являється графік з теоретичною лінією рівняння регресії. Таким чином отримані результати за традиційним методом розрахунку (1 етап). Збережіть результати виконання роботи.

Проведемо тепер визначення параметрів рівняння регресії A_0 , A_1 і коефіцієнта кореляції R за допомогою вбудованих функцій Mathcad.

Для виклику і вставки в робочий лист вбудованих функцій Mathcad виберіть пункт меню *Insert (Вставка) → Function... (Функції...)* чи натисніть комбінацію $Ctrl+E$. З'явиться діалогове вікно *Insert Function (Уставити функцію)*. У списку *Function Category (Категорії функцій)* цього вікна виберіть категорію *Regression and Smoothing (Регресія і згладжування)*. У правому списку *Function Name (Назва функції)* цього ж діалогового вікна виберіть функцію, наприклад *intercept*. Опис функцій міститься в нижній частині діалогового вікна. У тім місці робочого листа Mathcad, де стояв курсор, з'явиться обрана функція із шаблонами - указівкою місць уведення потрібних даних.

Для виконання завдання потрібні наступні вбудовані функції Mathcad:

intercept(vx,vy) – функція повертає значення вільного члену рівняння регресії; де vx - вектор, елементи якого повинні йти у порядку зростання і відповідати значенням x ; vy - це вектор одного розміру з vx . Його елементи відповідають значенням y .

slope(vx,vy) - функція повертає значення другого члену рівняння лінійної регресії; де vx - вектор, елементи якого повинні йти у порядку зростання і відповідати значенням x ; vy - це вектор одного розміру з vx . Його елементи відповідають значенням y .

corr(vx,vy) - функція повертає значення коефіцієнта лінійної кореляції; де vx - вектор, елементи якого повинні йти у порядку зростання і відповідати значенням x ; vy - це вектор одного розміру з vx . Його елементи відповідають значенням y .

Представити результати роботи на комп'ютері викладачу. Перейти до оформлення звіту.

АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Тексти програм мають бути такими, як наведені нижче.

Розранук за традиційним методом. Вихідні дані:

$$X := \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \\ 7 \\ 9 \\ 11 \\ 13 \\ 15 \end{pmatrix} \quad Y := \begin{pmatrix} 800.0 \\ 810.0 \\ 820.0 \\ 830.0 \\ 840.0 \\ 850.0 \\ 860.0 \\ 890.0 \end{pmatrix}$$

Розв'язання:

$$SX := \sum X$$

$$SX = 64$$

$$SY := \sum Y$$

$$SY = 6.7 \times 10^3$$

$$SXX := SX^2$$

$$SXX = 4.096 \times 10^3$$

$$SYY := SY^2$$

$$SYY = 4.489 \times 10^7$$

$$SXY = 4.288 \times 10^5$$

$$n := \xi$$

$$A0 = 790.833$$

$$A1 = 5.833$$

$$SYK = 5.617 \times 10^6$$

$$XY = 5.458 \times 10^4$$

$$R = 0.98$$

$$R := \frac{C}{\sqrt{A \cdot B}}$$

$$C := n \cdot XY - SXY$$

$$A1 := \frac{C}{A}$$

$$A0 := \frac{(SY \cdot SXX - XY \cdot SX)}{A}$$

$$SYK := \sum Y^2$$

$$XY := X \cdot Y$$

$$A := n \cdot SXX - SXX$$

$$B := n \cdot SYK - SYY$$

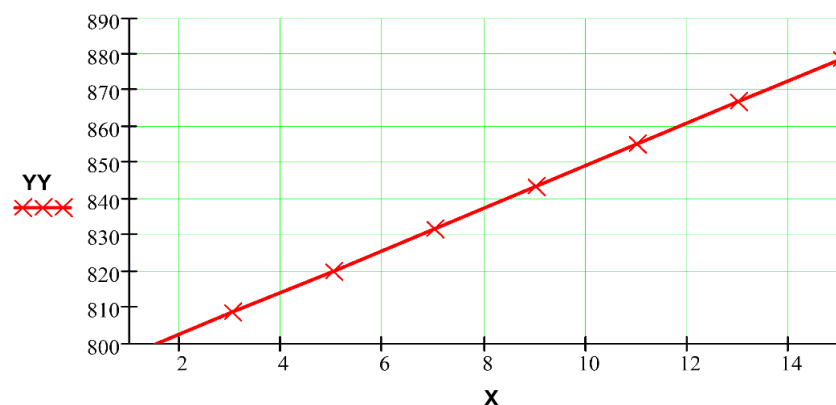
Геометрична інтерпретація результатів:

$$YY := A0 + A1 \cdot X$$

$$A = 1.344 \times 10^3$$

$$B = 4.76 \times 10^4$$

$$C = 7.84 \times 10^3$$



2 етап

Визначення параметрів рівняння регресії за допомогою вбудованих функцій

Вихідні експериментальні точки та їх значення:

$$\mathbf{x} := \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \\ 7 \\ 9 \\ 11 \\ 13 \\ 15 \end{pmatrix} \quad \mathbf{y} := \begin{pmatrix} 800.0 \\ 810.0 \\ 820.0 \\ 830.0 \\ 840.0 \\ 850.0 \\ 860.0 \\ 890.0 \end{pmatrix}$$

Визначення вільного члена рівняння регресії:

$$\mathbf{a0} := \text{intercept}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad \mathbf{a0} = 790.833$$

Визначення коефіцієнта A1:

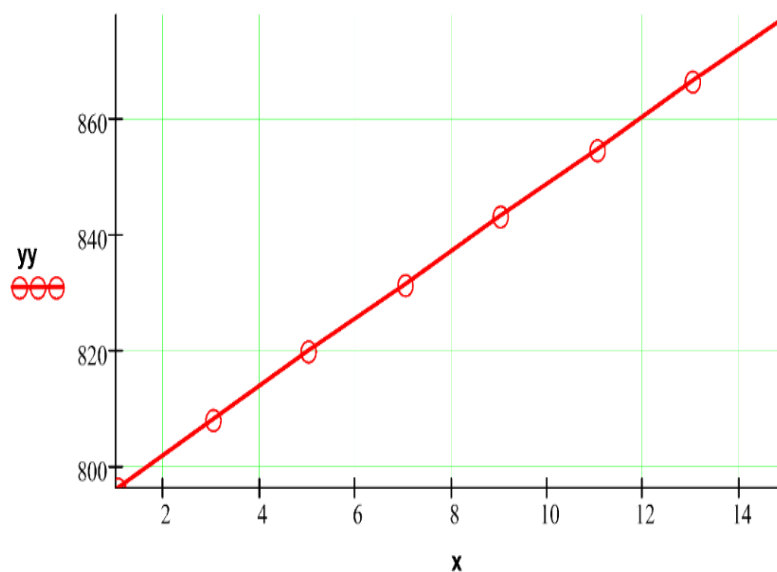
$$\mathbf{a1} := \text{slope}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad \mathbf{a1} = 5.833$$

Визначення коефіцієнта кореляції:

$$\mathbf{r} := \text{corr}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad \mathbf{r} = 0.98$$

Геометрична інтерпретація результатів:

$$y := a0 + a1 \cdot x$$



Порівняйте отримані результати і зробіть висновки щодо ефективності використання. В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм для реалізації 1 та 2 етапів роботи. Зробіть висновки щодо отриманих значень коефіцієнтів рівняння лінійної регресії та тісноти зв'язку відповідно до значення коефіцієнта кореляції, а також особливостей використання вбудованих функцій.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №9

1. Що таке математичне моделювання, фізичні та математичні моделі? Основні властивості моделей: адекватність, простота, потенційність.
2. Надайте основні принципи моделювання.
3. В чому заключаються технології моделювання? Наведіть основні методи рішення завдань моделювання.

4. Охарактеризуйте класи чисельних методів.
5. У чому полягає контроль правильності моделі? У чому полягає задача обробки експериментально-статистичних даних?
6. Які Ви знаєте методи визначення кореляційного зв'язку, що таке коефіцієнт кореляції? Порівняйте розв'язання задачі традиційними методами і вбудованими функціями Mathcad. Що таке шаблони в Mathcad?
7. Для чого вони застосовуються? Що таке «математична область», «текстова область», «текстовий абзац», «операнд», «робоча область» у Mathcad?

Лабораторна робота № 10
ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕСІВ З
ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДУ НАЙМЕНЬШИХ КВАДРАТІВ (НЕЛІНІЙНА
РЕГРЕСІЯ)

Тема лабораторної роботи – побудова математичних моделей процесів з використанням методу найменших квадратів (нелінійна регресія)

Мета лабораторної роботи – оволодіння методикою побудови експериментально-статистичних математичних моделей з використанням *метода найменших квадратів* (МНК) та придбання навичок побудови математичних моделей нелінійного типу у інтегрованому програмному середовищі Mathcad.

ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Лінійна регресія

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

Найчастіше використовується *лінійна регресія*, в якій функція описує відрізок прямої та має вид:

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

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

Математично постановка задачі регресії зводиться до наступного. Нехай є набір точно визначених значень x_i і відповідних їм неточних значень y_i . Припустимо, що існує деяка залежність $x_i, a_0, a_1, \dots, a_k$ яка може розглядатись як наближення до залежності $y(x)$, чії точки представлені як $y_i(x_i)$. Таким чином, ми маємо право записати: $y_i(x_i) = f(x_i, a_0, a_1, \dots, a_k) + \xi_i$

Тут ξ_i - незалежні випадкові величини із нормальним законом розподілення, які визначають похибку завдання y_i . Зазвичай їх вважають наслідком помилок експерименту. Задача регресії полягає у тому, щоб знайти параметри a_0, a_1, \dots, a_k такими, при яких представлення $y(x)$ нашою функцією $f(x)$ мало найменшу середньоквадратичну похибку. Для цього треба мінімізувати функцію/Наприклад, для найширше розповсюдженої лінійної регресії (часто замінюють $=a$ та $=b$), треба мінімізувати наступний вираз:

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

Якщо прирівняти та до нуля, то для лінійної регресії можна знайти її параметри та у явній формі:

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

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

ЛІНІЙНА РЕГРЕСІЯ

$$VX := \begin{pmatrix} 0.95 \\ 1.8 \\ 2.9 \\ 4.1 \\ 4.8 \end{pmatrix} \quad VY := \begin{pmatrix} 4.2 \\ 11 \\ 15 \\ 21 \\ 26 \end{pmatrix}$$

$$ORIGIN := 1$$

Обчислення коефіцієнтів a та b лінійної регресії:

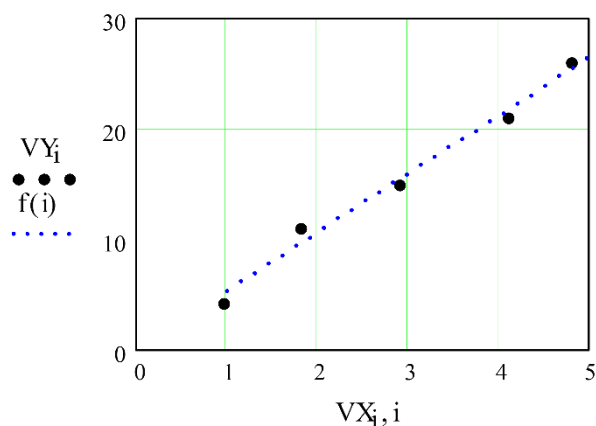
$$a := \text{intercept}(VX, VY) \quad b := \text{slope}(VX, VY)$$

$$i := 1..5 \quad f(x) := a + b \cdot x$$

$$a = -0.044 \quad b = 5.321$$

$$\text{corr}(VX, VY) = 0.993 \quad f(3) = 15.919$$

$$\text{linterp}(VX, VY, 3) = 15.5$$



Графік функції регресії та вихідних точок

Як видно з прикладу, лінія регресії проходить у «хмарі» вихідних точок з максимальним середньоквадратичним наближенням до них. Чим ближче коефіцієнт кореляції до 1, тим точніше залежність, яка представлена вихідними точками, наближується до лінійної.

Реалізація лінійної регресії загального виду

У Mathcad реалізована можливість виконання лінійної регресії загального виду. У ній задана сукупність точок наближається до функції виду:

$$F(x, K_1, K_2, \dots, K_n) = K_1 \cdot F_1(x) + K_2 \cdot F_2(x) + \dots + K_n \cdot F_n(x)$$

Таким чином, функція регресії є лінійною комбінацією функцій,

причому самі ці функції можуть бути нелінійними, що різко розширює можливості такої апроксимації та поширює її на безліч нелінійних функцій. Для реалізації лінійної регресії загального виду використовується функція $fit(VX, VY, F)$, яка повертає вектор коефіцієнтів лінійної регресії загального виду, при яких середньоквадратична похибка наближення «хмари» вихідних точок, координати яких зберігаються у векторах (VX, VY, F) стає мінімальною. Вектор повинен містити функції, записані у символьному виді.

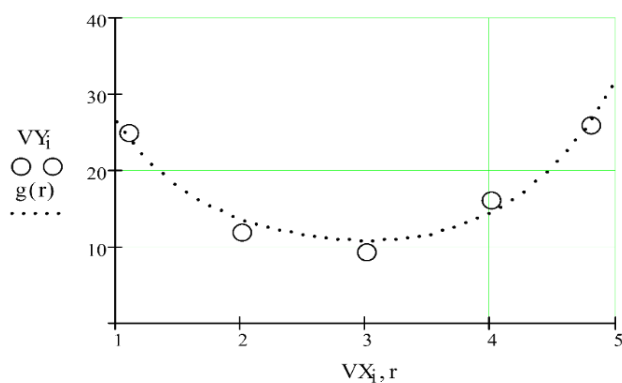
Приклад пояснює проведення лінійної регресії загального виду з використанням функції $fit(VX, VY, F)$. Процедура проведення обчислень настільки проста, що не потребує особих коментарів.

ЛІНІЙНА РЕГРЕСІЯ ЗАГАЛЬНОГО ВИДУ

$$\begin{aligned}
 VX &:= \begin{pmatrix} 1.1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 4.8 \end{pmatrix} &
 VY &:= \begin{pmatrix} 25 \\ 12 \\ 9.4 \\ 16.2 \\ 26 \end{pmatrix} &
 F(x) &:= \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ \exp(x) \end{pmatrix} \\
 i &:= 0..4 &
 K &:= \text{linfit}(VX, VY, F) &
 g(t) &:= F(t) \cdot K \\
 r &:= 1, 1.25.. 5
 \end{aligned}$$

Коефіцієнти функції регресії

$$K = \begin{pmatrix} 26.064 \\ -0.284 \\ 0.228 \end{pmatrix}$$



Розташування абсцис точок вихідного масиву у векторі може бути будь-яким, але вони повинні йти у порядку збільшення. Вектор ординат повинен містити ординати точок з абсцисами, вказаними у векторі.

Реалізація одномірної поліноміальної регресії

У Mathcad введена і функція для проведення поліноміальної регресії довільного ступеня полінома регресії. Регресія здійснюється функцією $polyfit$. Вона повертає вектор, який запитує функція, і який містить коефіцієнти

багаточлена n -го ступеня, що найкращим чином наближує «хмару» точок з координатами, які зберігаються у векторах. В прикладі наведено фрагмент виконання поліноміальної регресії в Mathcad. Для розрахунку коефіцієнтів полінома регресії використовується функція $polyfit$.

ПОЛІНОМІАЛЬНА РЕГРЕСІЯ

```
data :=  $\begin{pmatrix} 1 & 0.8 \\ 2 & 3.5 \\ 3 & 8 \\ 4 & 15 \\ 5 & 19 \\ 6 & 15 \end{pmatrix}$ 
```

Ступінь поліному $k := 3$

Створення векторів X та Y вихідних даних

```
X := data  $\langle 0 \rangle$ 
```

```
Y := data  $\langle 1 \rangle$ 
```

```
n := rows(data)
```

```
n = 6
```

```
z := regress(X, Y, k)
```

```
fit(x) := interp(z, X, Y, x)
```

```
coeffs := submatrix(z, 3, length(z) - 1, 0, 0)
```

```
(coeffs)T = (7.133 -11.231 5.734 -0.606)
```

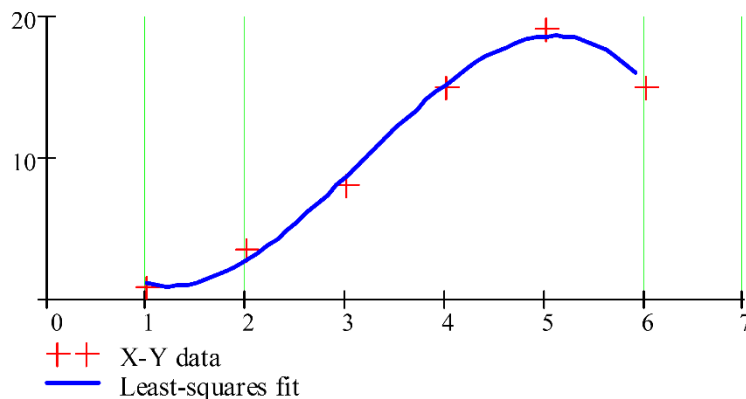
```
i := 0.. n - 1
```

```
j := 0.. 49
```

```
txj := min(X) + j ·  $\frac{\max(X) - \min(X)}{50}$ 
```

$$\frac{\sum (\text{fit}(X) - \text{mean}(Y))^2}{\sum (Y - \text{mean}(Y))^2} = 0.995$$

R2:



Графік поліному та вихідні точки

На практиці не рекомендується робити ступінь апроксимуючого поліному вище 4-6, оскільки похибки реалізації регресії значно збільшуються.

Функція *regress* створює єдиний наближений поліном, коефіцієнти якого розраховуються по всій сукупності заданих точок. Іноді корисна інша функція поліноміальної регресії, яка дає локальні наближення відрізками поліномів другого ступеня *regress(VX, VY, span)*. Вона повертає вектор *VS*, для функції *interp* для найкращого наближення даних векторів та відрізками поліномів другого ступеня.

Аргумент $h > 0$ показує розмір локальної області наближених даних (рекомендоване початкове значення - 0,75). Чим більше $span$, тим сильніше виявляється згладження даних. При великих значеннях $span$ ця функція наближається до функції $regress(VX, VY, 2)$.

Далі наведено фрагмент документа Mathcad із прикладом наближення складної функції із випадковим розкидом її значень за допомогою сукупності відрізків поліномів другого ступеня (функція *loess*) для двох значень параметру $span$. Приклад дано для Mathcad 2001.

РЕГРЕСІЯ ВІДРІЗКАМИ ПОЛІНОМУ ДРУГОГО СТУПЕНЯ

$$i := 1..199$$

$$VX_i := i \qquad VY_i := \operatorname{atan}\left(\frac{i}{5}\right) \cdot \left(1 - \exp\left(\frac{-i}{10}\right) + 0.5 \cdot \operatorname{rnd}(1)\right)$$

$$span1 := 0.05$$

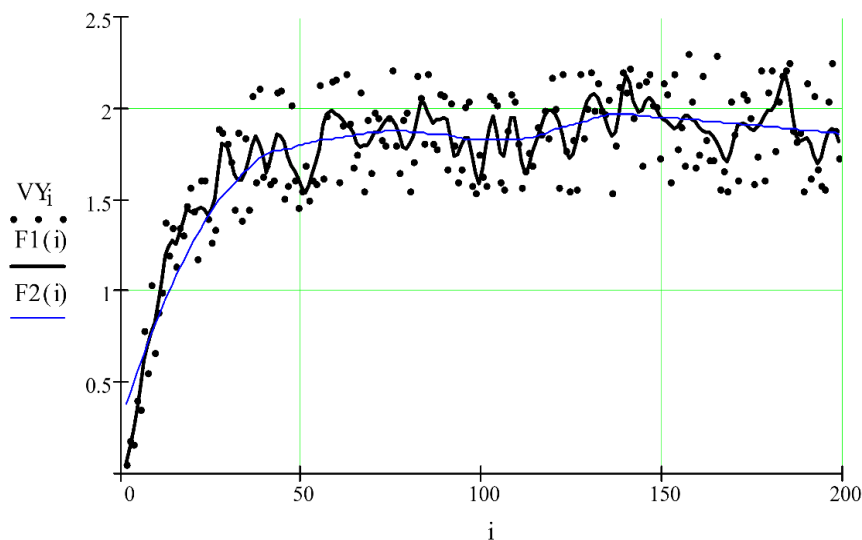
$$span2 := 0.5$$

$$VS1 := \operatorname{loess}(VX, VY, span1)$$

$$VS2 := \operatorname{loess}(VX, VY, span2)$$

$$F1(x) := \operatorname{interp}(VS1, VX, VY, x)$$

$$F2(x) := \operatorname{interp}(VS2, VX, VY, x)$$



З рисунку неважко помітити, що при значенні спостерігаються характерні випадкові коливання значень функції, тоді як вже при $h = 0.5$ крива регресії становиться практично гладкою. Але, через відсутність простого опису апроксимуючої функції у виді відрізків поліномів, цей вид регресії широкого використання не знайшов.

Проведення багатомірної регресії

Mathcad дозволяє робити також багатомірну регресію. Більш розповсюджений випадок її використання - наближення поверхонь у тривимірному просторі. Їх можна описати, задаючи масив значень висот, що відповідають двомірному масиву

координат точок на горизонтальній площині.

Нових функцій для цього не потрібно. Використовуються вже описані раніше функції, але в дещо іншому вигляді.

$regress(Mxy, Vz, n)$ - повертає вектор, який запитує функція $interp(Vs, Mxy, Vz, V)$ для обчислення багаточлена n-го ступеня, який найкращим чином наближує точки множини y та $(y$ -матриця розміру $X2$, яка містить координати, m - мірний вектор, який містить координати, відповідні точкам, вказаним у y);

$loess(Mxy, Vz, span)$ -аналогічна $loess(VX, VY, span)$, але для багатовимірного випадку;

$interp(Vs, Mxy, Vz, V)$ - повертає значення по відомим значенням (створюється функціями $regress$ та y та вектор координат та заданої точки для якої знаходиться). У цілому багатомірна регресія використовується дуже рідко у зв'язку із складністю збору вихідних даних.

Проведення нелінійної регресії загального виду

Під нелінійною регресією загального виду ми маємо на увазі знаходження вектора параметрів довільної функції $k1, k2, \dots$, при якому забезпечується мінімальна середньоквадратична похибка наближення «хмари» вихідних точок.

Для проведення нелінійної регресії загального виду використовується функція $nfit(VX, VY, VS, F)$, яка повертає вектор параметрів функції, що дає мінімальну середньоквадратичну похибку наближення функцією $k1, k2, \dots$, вихідних даних. Вектор повинен бути вектором із символічними елементами, причому вони повинні містити аналітичні вирази для вихідної функції та її похідних за всіма параметрами. Вектор повинен містити початкові значення елементів вектора, необхідні для рішення системи нелінійних рівнянь регресії ітераційним методом.

У фрагменті документу в Mathcad наведений приклад виконання нелінійної регресії загального виду за допомогою нелінійної функції

НЕЛІНІЙНА РЕГРЕСІЯ ЗАГАЛЬНОГО ВИДУ

$$i := 1..6 \quad Y := data \begin{pmatrix} 3.167 \\ 0.602 \\ 2.129 \end{pmatrix} \rightarrow \frac{d}{da} F(x, a, b) \rightarrow \exp(-b \cdot x) + b$$

$$P = \begin{pmatrix} 0.991 \\ 1.008 \end{pmatrix}$$

$$F(x, a, b) := a \cdot \exp(-b \cdot x) + a \cdot b$$

$$\frac{d}{db} F(x, a, b) \rightarrow -a \cdot x \cdot \exp(-b \cdot x) + a$$

$$F1(x, k) := \begin{pmatrix} k_1 \cdot \exp(-k_2 \cdot x) + k_1 \cdot k_2 \\ \exp(-k_2 \cdot x) + k_2 \\ -k_1 \cdot x \cdot \exp(-k_2 \cdot x) + k_1 \end{pmatrix}$$

$$VX := \begin{pmatrix} 0.1 \\ 0.5 \\ 1 \\ 1.5 \\ 2 \\ 2.9 \end{pmatrix}$$

$$ORIGIN := 1 \quad X := data \langle 0 \rangle$$

$$VY := \begin{pmatrix} 1.9 \\ 1.6065 \\ 1.34 \\ 1.22 \\ 1.1353 \\ 1.05 \end{pmatrix}$$

$$VS := \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

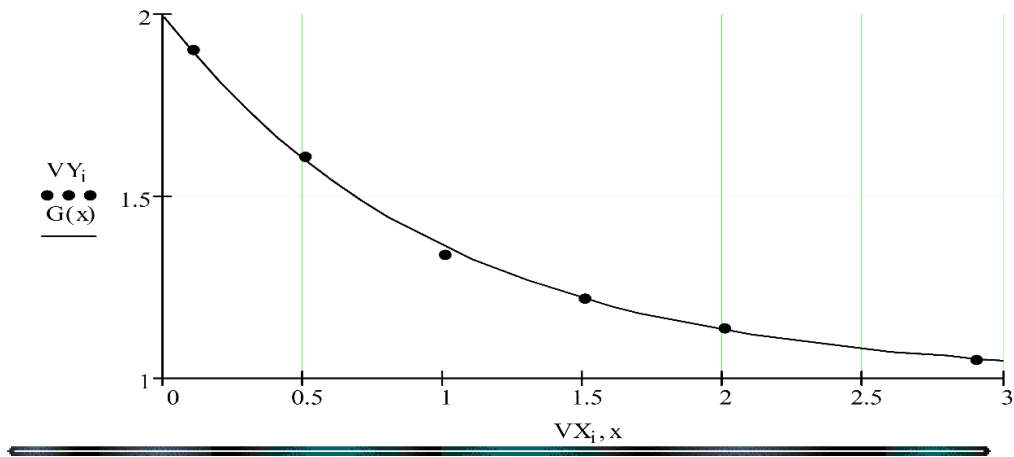
$$P := genfit(VX, VY, VS, F1)$$

$$x := 0, 0.1.. 3$$

$$G(x) := F1(x, P)_1$$

Вектор P повертає значення $a=k1$ и $b=k2$ для найкращого

середньоквадратичного наближення $F(x, a, b)$



При вирішенні цієї задачі виникають дві проблеми. По перше, треба обчислити значення похідних по змінним. Як показано на прикладі, це зроблено засобами символьних операцій (перші рядки фрагменту), що наглядно показує користь від таких операцій. Друга проблема пов'язана із необхідністю використання функції *nfit* у її стандартному виді, через це прийшлося замінити параметр. Решта операцій у прикладі достатньо очевидні.

Приклад виконання експоненціальної регресії

Оскільки усі часткові види регресії за допомогою приведених вище функцій Mathcad виконуються за однією схемою, обмежимося двома прикладами її проведення. Фрагмент документа Mathcad із прикладом експоненціальної регресії приведено нижче.

ЕКСПОНЕНЦІЙНА РЕГРЕСІЯ

Вихідні данні представлені матрицею, яка має два стовпця. Нульовий стовпець містить координати точок вихідних даних, а перший - їх абсциси. Перед обчисленням задаються початкові наближення параметрів експоненціальної регресії - вектор. Сама регресія реалізується одним виразом із функцією. На рисунку представлені графік функції регресії та вихідні точки.

Приклад виконання синусоїдальної регресії

Ще один вид регресії – синусоїдальний - представляє фрагмент документа Mathcad, який наведено нижче. Тут вихідні вектори даних формуються шляхом додавання до значень синусоїдальної функції випадкових чисел. Регресія реалізується функцією *fit*.

data :=

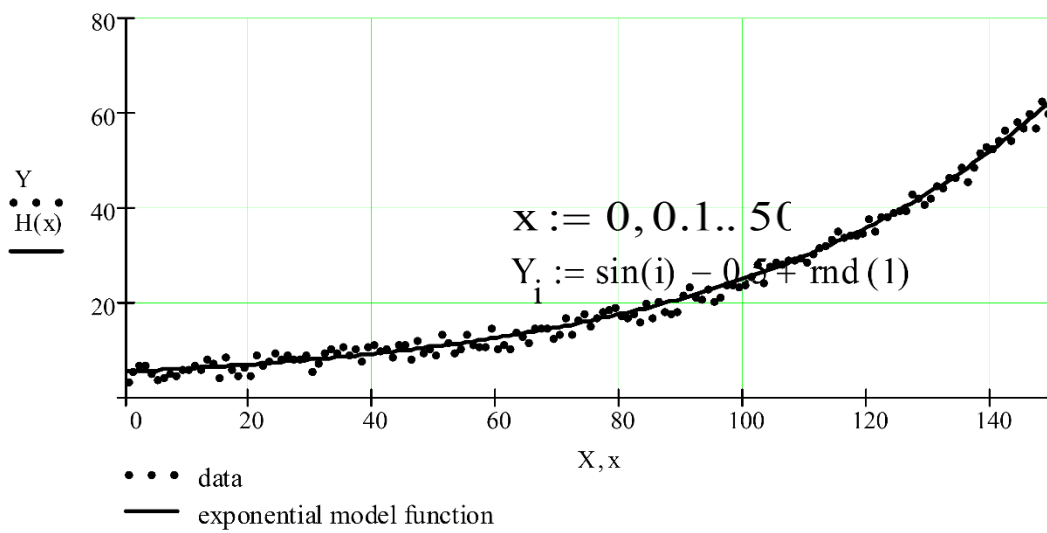
	0	1
0	0	3.25
1	1	5.38
2	2	6.76
3	3	6.59
4	4	5.11
5	5	3.57

$$\text{Guess} := \begin{pmatrix} 3 \\ 0.02 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$E := \text{expfit}(X, Y, \text{Guess})$$

$$H(x) := E_0 \cdot e^{E_1 \cdot x} + E_2$$

$$x := \min(X) .. \max(X)$$



Коефіцієнт кореляції

$$\text{corr}(\overrightarrow{H(X)}, Y) = 0.996$$

СИНУСОЇДАЛЬНА РЕГРЕСІЯ

$$i := 0..50$$

$$x := 0, 0.1..50$$

$$X_i := i$$

$$Y_i := \sin(i) - 0.5 + \text{rnd}(1)$$

$$\text{Guess} := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

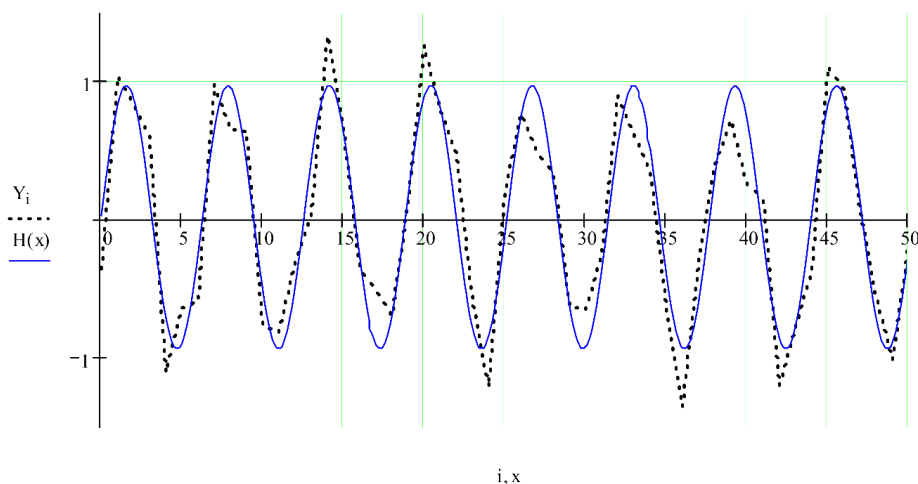
$$E := \text{sinfit}(X, Y, \text{Guess})$$

$$E = \begin{pmatrix} 0.953 \\ 0.012 \\ 0.017 \end{pmatrix}$$

$$E := \text{sinfit}(X, Y, \text{Guess})$$

$$H(x) := E_0 \cdot \sin(x + E_1) + E_2$$

Коефіцієнт кореляції



$$\text{corr}(\overrightarrow{H(X)}, Y) = 0.925$$

Побудова лінійної апроксимуючої залежності

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

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n \quad (10.1)$$

Застосування поліномів має ту перевагу, що невідомі коефіцієнти (параметри) a_i , входять у рівняння лінійно, що спрощує їх розрахунок. Крім того, збільшуючи степінь такого полінома, можна досягнути практично будь-якої міри наближення розрахункових даних до експериментальних аж до повного збігу. Задача побудови математичного опису процесу у вигляді (2.1) зводиться до знаходження таких значень коефіцієнтів a_i , при яких досягається найкращий збіг експериментально одержаних y_e та розрахованих за допомогою апроксимуючої залежності вихідних значень y_p . Одним із методів знаходження коефіцієнтів апроксимуючих поліномів є метод найменших квадратів (МНК), умова якого полягає у тому, що сума квадрата різниць між експериментальними значеннями функції та розрахованими за допомогою апроксимуючого полінома при одних і тих же значеннях аргументу повинна бути мінімальною, тобто:

$$S = \sum_{i=1}^N [y_e(x_i) - y_p(x_i)]^2 = \sum [Y_{ei} - Y_{pi}] \rightarrow \min \quad (10.2)$$

Після підстановки (1.1) в умову МНК (1.2) одержуємо:

$$S = \sum_{i=1}^N [Y_{ei} - (a_0 x_i^0 + a_1 x_i^1 + a_2 x_i^2 + \dots + a_n x_i^n)] \rightarrow \min \quad (10.3)$$

де a_1, a_2, \dots, a_n - невідомі (ті, що потрібно знайти) коефіцієнти поліноміальної емпіричної моделі процесу; n - порядок поліному; N - кількість дослідних значень функції Y . Змінна вводиться у рівняння (2.3) для одноманітності запису. Як відомо, функція S має мінімум при умові, що похідні незалежних змінних, (у даному випадку похідні коефіцієнтів a_1, a_2, \dots, a_n)

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = \frac{\partial S}{\partial a_1} = \frac{\partial S}{\partial a_2} = \dots = \frac{\partial S}{\partial a_n} = 0$$

будуть рівними нулеві: (10.4)

чому відповідає наступна система:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N (y_{ei} - a_0 x_i^0 - a_1 x_i^1 - a_2 x_i^2 - \dots - a_n x_i^n) x_i^0 = 0 \\ \sum_{i=1}^N (y_{ei} - a_0 x_i^0 - a_1 x_i^1 - a_2 x_i^2 - \dots - a_n x_i^n) x_i^1 = 0 \\ \dots \\ \sum_{i=1}^N (y_{ei} - a_0 x_i^0 - a_1 x_i^1 - a_2 x_i^2 - \dots - a_n x_i^n) x_i^n = 0 \end{cases} \quad (13.5)$$

Приведемо одержану систему рівнянь до наступного вигляду (так званої системи нормальних рівнянь): експериментально - статистичної моделі, тобто дослідні значення вхідної змінної y та відповідні значення вхідної змінної. Потрібно за допомогою програмного комплексу Mathcad знайти поліноміальну залежність $y=f(x)$. При обробці дослідних даних з допомогою МНК важливо не тільки розраховувати значення коефіцієнтів апроксимуючого полінома, але й знайти такий його ступінь, якому буде відповідати задовільна помилка апроксимації, котру, як правило, оцінюють у вигляді середньої відносної похибки:

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

Максимальну відносну похибку апроксимації рекомендується прийняти $\varepsilon=5-10\%$. Якщо нанести експериментальні дані на графік, можна скласти уявлення про приблизне значення степені полінома, 1 чи 2 (крива близька до прямої), або 2 чи 3

(кривизна є достатньо великою). На рис. 2.2 нанесені результати обробки експериментальних даних для полінома 4-го порядку. Апроксимація вважається задовільною, якщо помилка є буде мати значення близькі до значень середньої відносної похибки. У випадку незадовільних результатів апроксимації степінь полінома можна підвищувати та знов обробляти експериментальні дані за допомогою МНК. Після розрахунку на ЕОМ треба нанести одержану розрахункову криву на той же графік що й експериментальні точки, та записати вираз статистичної математичної моделі.

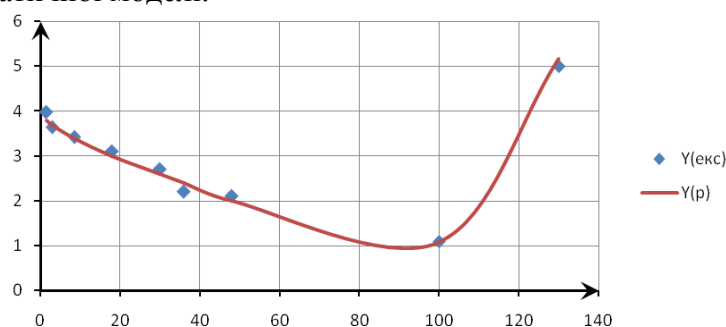


Рис. 10.6 - Експериментальні точки та розрахункова крива

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

ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.

Включити комп'ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.

Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.

Отримати результати та проаналізувати їх.

Представити результати роботи на комп'ютері викладачу. Перейти до оформлення звіту.

АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Приклад результатів програмування задачі і геометричної інтерпретації результатів

Вихідні дані по об'єму і рН:

$$\text{PH} := \begin{pmatrix} 3.4 \\ 3.0 \\ 2.6 \\ 2.4 \\ 2.0 \\ 1.08 \end{pmatrix} \qquad \text{V} := \begin{pmatrix} 8.5 \\ 18.0 \\ 30.0 \\ 36.0 \\ 48.0 \\ 100.0 \end{pmatrix}$$

Визначимо ступінь поліному, що задовільняє похибці

$k := 4$ (k – ступінь поліному)

$H := \text{regress}(V, PH, k)$

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

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

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

$$E_p = 0.244$$

(розрахункова відносна похибка). Визначимо коефіцієнти поліному

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

$$YX := \begin{pmatrix} PH \cdot V^0 \\ PH \cdot V^1 \\ PH \cdot V^2 \\ PH \cdot V^3 \\ PH \cdot V^4 \end{pmatrix}$$

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

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

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

Коефіцієнти поліному знайдені:

Перевіримо вірність обчислень:

$$yy(z) := A_0 + A_1 \cdot z + A_2 \cdot z^2 + A_3 \cdot z^3 + A_4 \cdot z^4$$

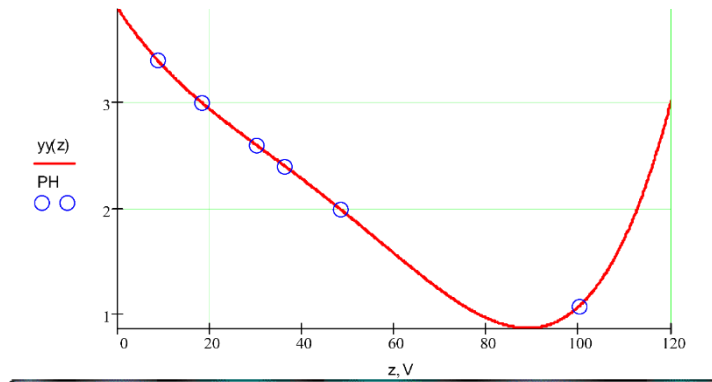
$$Y := \begin{pmatrix} yy(V_0) \\ yy(V_1) \\ yy(V_2) \\ yy(V_3) \\ yy(V_4) \\ yy(V_5) \end{pmatrix} \quad Y = \begin{pmatrix} 3.4 \\ 3.001 \\ 2.596 \\ 2.403 \\ 1.999 \\ 1.08 \end{pmatrix}$$

$$\sum \left(\frac{|PH - Y|}{PH} \right)_{100}$$

$$E_p := \frac{\quad}{6} \quad (\text{розрахункова відносна похибка})$$

$$E_p = 0.244$$

Відобразимо поліном графічно:



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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 10

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

Лабораторна робота № 11

МОДЕЛЮВАННЯ ГІДРОДИНАМІКИ ПОТОКУ У НАСАДКОВІЙ КОЛОНІ ЗА ДОПОМОГОЮ КОМІРКОВОЇ МОДЕЛІ

Тема лабораторної роботи – моделювання гідродинаміки потоку у насадковій колоні за допомогою коміркової моделі.

Мета лабораторної роботи – визначення за експериментальною кривою відгуку кількості комірок n -коміркової моделі, яка описує гідродинаміку насадкової колони.

ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Дослідження гідродинаміки потоку за допомогою методу стандартних збурень

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

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

Основні параметрами гідродинамічних моделей реальних процесів зображені на рис. 11.1.

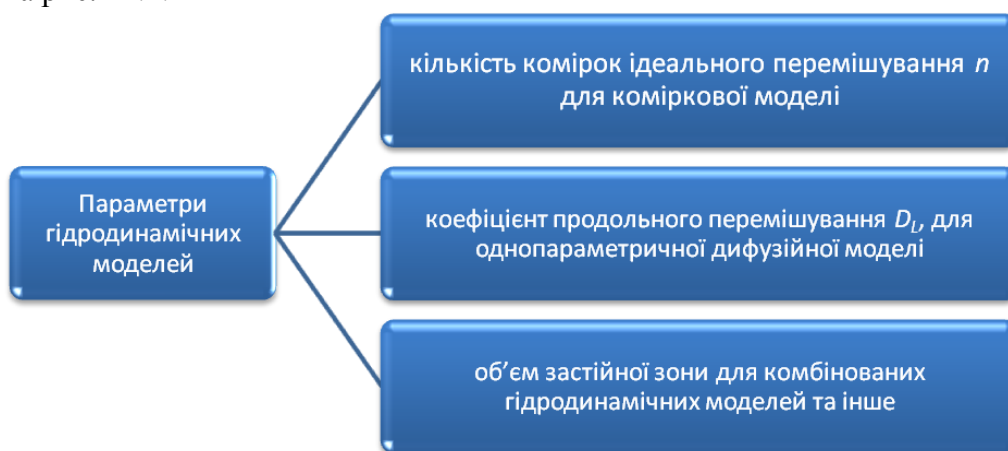


Рис. 11.1 - Основні параметрами гідродинамічних моделей реальних процесів

Одним із методів визначення структури реального потоку та розрахунку параметрів гідродинамічних моделей є експериментальне дослідження реакції ОХТ на стандартні збурення у початковій потоці. На початку проведення експерименту об'єкт зображають у вигляді «чорного ящика». Імпульсний метод полягає у визначенні параметра n через статистичні оцінки диференціальної функції розподілу часу перебування речовини. Цю функцію знаходять експериментально за даними дослідів із використанням трасера. При цьому час перебування часток (молекул) речовини в апараті розглядають як випадкову величину, дискретний розподіл та ідеальність якої можуть бути описані за допомогою теоретично ймовірних характеристик. *Трасер* (індикатор) вибирають із тим розрахунком, щоби він не руйнував гідродинаміку потоку в апараті і в той же час легко аналізувався.

Трасерами, як правило, служать розчини солей, фарб, інертні тверді частки, радіоактивні речовини тощо. Обраний трасер уводять у початковий потік у вигляді стандартного сигналу (східцевого або імпульсного). Частіше збурення вносять у вигляді імпульсу (t), оскільки воно легше реалізується, а також спрощує наступну аналітичну обробку експериментальних даних (при відсутності випадкових збурень). У певні моменти часу після вводу індикатора відбирають проби з вихідного потоку та аналізують вміст трасера в них. Згідно з експериментальними даними будують F - або C -криві відгуку. На основі форми експериментальної кривої припускають можливий вигляд гідродинамічної моделі (наприклад коміркової) і проводять математичну обробку кривої, в результаті чого розраховують значення параметрів моделі і роблять висновки про адекватність прийнятої моделі реальному об'єкту. При цьому у загальному випадку час перебування часток речовини в апараті розглядають як випадкову величину, що має диференційну функцію розподілення.

Опис насадкового колонного абсорбера за допомогою коміркової моделі.

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

$$C(t) = \frac{1}{\tau} \cdot \frac{n^n}{(n-1)!} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^{n-1} \cdot e^{-n \cdot t/\tau} \quad (11.1)$$

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

$$t = M[t] = \int t \cdot C_{кр}(t) dt \quad (11.2)$$

Розрахункові (теоретичні) криві коміркової моделі зазвичай наводяться у безрозмірних координатах, оскільки у математичних викладках припускається, що одиничне імпульсне збурення й концентрація не мають конкретної фізичної розмірності. Під безрозмірними величинами t час і диференційна крива $Z(\theta)$.

Таким чином, для порівняння експериментальної кривої з теоретичними кривими (рис. 3.1) необхідно вирахувати θ згідно із залежністю (11.2) і зробити відповідні перерахунки. Необхідно також провести нормування експериментальних значень концентрації $x(i)$ до загальної енергії імпульсу індикатора KCl , введеного у колонку. Чисельні значення визначних інтегралів, що входять у рівняння можна знайти, наприклад, за методом трапеції, який у загальному випадку має наступний вигляд:

$$f(x)dx = \frac{h}{2} \cdot [y_0 + y_n + 2(y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1})] \quad (11.3)$$

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

Для виконання необхідних розрахунків доречно використати ЕОМ. Після цього потрібно нанести на один графік C - криві відгуку, розраховані згідно

коміркової гідродинамічної моделі (див. рис. 3.2.), а також експериментальну C - криву у безрозмірній формі.

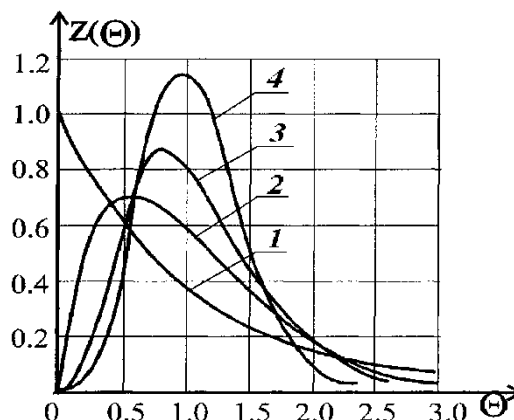


Рис. 11.2 - Порівняння експериментальної кривої з теоретичними кривими при різній кількості комірок (відповідно 1,2,6,8)

Шляхом порівняння потрібно знайти необхідну кількість комірок n , яка буде визначена як основний параметр моделі. Інструкції по роботі з інтегрованим програмним середовищем Mathcad надаються при роботі в лабораторії обчислювальної техніки. Робота виконується у програмному середовищі Mathcad (версії 8 і вище) на персональному комп'ютері.

ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.

Включити комп'ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.

Розробити алгоритм вирішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.

Отримати результати та їх проаналізувати.

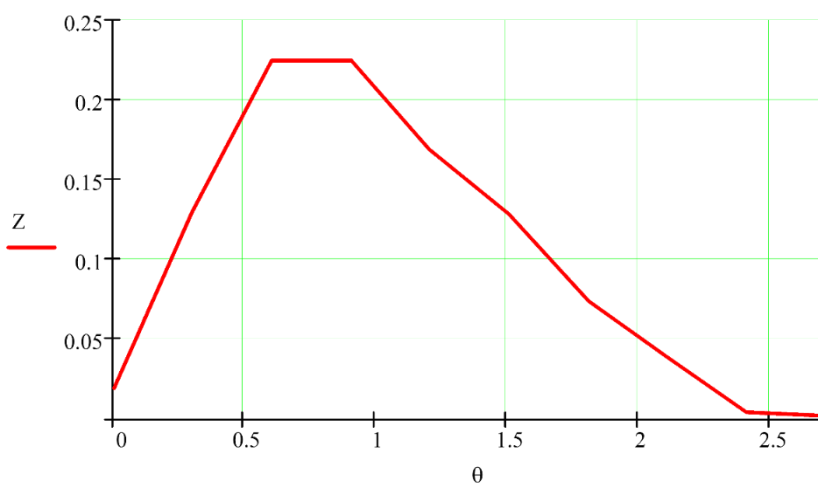
Представити результати роботи на комп'ютері викладачу. Перейти до оформлення звіту.

АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Приклад результатів програмування задачі і геометричної інтерпретації результатів

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

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



Розв'язок:

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

$$C_{\text{нв}} := \frac{C_V^{(1)}}{2 \cdot \sum C_V^{(1)} - C_{V_{0,1}} - C_{V_{9,1}}}$$

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

Визначимо середній час перебування потоку в ОХТ:

$$\tau := \frac{2 \cdot C_V^{(0)} \cdot C - C_{V_{0,0}} \cdot C_0 - C_{V_{9,0}} \cdot C_9}{2} \quad \tau = 3.321$$

Визначимо безрозмірні величини:

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

Графік у безрозмірних координатах має вигляд:

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

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

$$n := 4 \quad C_{kp}(t) := \frac{n^n \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^{n-1} \cdot e^{-n \cdot \frac{t}{\tau}}}{\tau \cdot (n-1)!} \quad P(t) := \frac{t}{\tau}$$

Перевіримо адекватність моделі:

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

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

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

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

Результати оцінки (1 рядок – значення кількості комірок, 2- середньо квадратичне відхилення). Таким чином, параметр моделі $n=4$. В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм для реалізації. Зробіть висновки щодо отриманих значень параметру коміркової моделі.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 11

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

Лабораторна робота № 12 ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕПЛОБМІННИХ АПАРАТІВ НА ОСНОВІ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ

Тема лабораторної роботи – дослідження теплообмінних апаратів на основі математичної моделі.

Мета лабораторної роботи – дослідження стаціонарного режиму протиточного кожухотрубчатого теплообмінника, побудова температурних профілей теплоносіїв.

ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Моделі ідеального витіснення та ідеального змішування при дослідженні теплообмінних апаратів

Теплообмінний апарат (ТОА) є одним із найшироковживаних і різноманітних видів устаткування хіміко-технологічних та інших виробництв. Капіталовкладення і експлуатаційні витрати на ТОА досягають 40-50% від вартості та витрат на все обладнання хіміко-технологічної системи (ХТС). Отже, від характеристик ТОА буде значним чином залежати якість всієї ХТС. У теперішній час проектування, дослідження та оптимізацію ТОА проводять, як правило, на основі математичних моделей. Структуру потоків в ТОА частіше за все надають у вигляді моделі ідеального перемішування або моделі ідеального витіснення. Тоді з врахуванням джерела тепла, що виникає в потоці за рахунок теплопередачі, рівняння моделі будуть записані:

$$(12.1) \quad \begin{array}{ll} \text{модель} & \text{змішування:} \\ Vc_T \frac{dT}{dt} = \vartheta c_T (T_{ex} - T) \pm FK_T \Delta T & \end{array}$$

$$\begin{array}{l} \text{модель витіснення:} \\ Sc_T \frac{\partial T}{\partial t} = \vartheta c_T \frac{\partial T}{\partial l} \pm \frac{F}{L} K_T \Delta T \end{array} \quad (12.2)$$

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

Види моделей ТОА в залежності від вигляду моделі структур потоку первинного та вторинного теплоносія наведені на рис.12.1.



Рис. 12.1 - Види моделей ТОА в залежності від вигляду моделі структури потоку

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

$$\begin{cases} S_1 c_{T_1} \frac{dT_1}{dt} = -\vartheta_1 c_{T_1} \frac{dT_1}{dl} - \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) \\ S_2 c_{T_2} \frac{dT_2}{dt} = \pm \vartheta_2 c_{T_2} \frac{dT_2}{dl} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2), \end{cases} \quad (12.3)$$

де індекс 1 - відповідає гарячому, а 2 - холодному теплоносіям; ϑ_2 - противотік; ϑ_1 - прямотік.

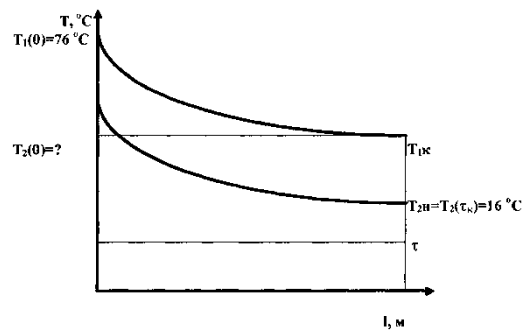
Розрахунок теплообмінного апарату для моделі «витіснення-витіснення»

На практиці у проектуванні ТОА частіше за все використовуються моделі стаціонарних режимів для проведення конструктивних, теплових і оптимізаційних розрахунків. У випадку моделі «В-В» рівняння (4.3) можна записати:

$$\begin{cases} -\vartheta_1 c_{T_1} \frac{dT_1}{dt} - \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0 \\ \vartheta_2 c_{T_2} \frac{dT_2}{dt} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0. \end{cases} \quad (12.4)$$

Хай потрібно отримати розподіл температур по довжині проточного кожухотрубного ТОА. Записані рівняння дозволяють розрахувати розподіл температур по довжині ТОА (так званий температурний профіль), а також температуру кожного теплоносія на виході з апарату. Можна одержати аналітичне рішення цих рівнянь при крайових умовах, чисельними методами із застосуванням ЕОМ. Таким чином, для розв'язання задачі на ЕОМ необхідно підібрати такі початкові умови, в результаті чого наприкінці рішення температура другого теплоносія дорівнюватиме заданому значенню на вході.

Для наведених початкових даних $T_{2п}=16^{\circ}\text{C}$. Схема потоків для



розв'язання рівнянь відповідно для заданих граничних умов надана на рис. 12.2.

Рис. 12.2 - Профілі температур

При виконанні роботи розглядається той же теплообмінний апарат, що і в прикладі, тобто кожухотрубний, протиточний ТОА в стаціонарному режимі, із тими ж конструктивними та технологічними характеристиками. Граничні умови надаються в індивідуальному завданні: точність розрахунків можна обрати 0,01. Потрібно побудувати температурні профілі, які характеризували б залежність температур теплоносіїв від довжини апарату. Розв'язуючи систему рівнянь (12.4) з допомогою ЕОМ, проводиться підбір послідовно задаючись значеннями.

Рекомендується починати з 20°C , і змінювати значення температури з кроком 10°C , доки не буде отримане кінцеве значення. Після закінчення розрахунків необхідно нанести на графік одержані температурні профілі. Інструкції по роботі з інтегрованим програмним середовищем Mathcad надаються при роботі в лабораторії обчислювальної техніки. Для розв'язання математичної моделі ТОА можна використати наступну вбудовану функцію: *rkfixed* (y, n, F) – видає таблицю результатів рішення систем звичайних диференціальних рівнянь методом Рунге-Кутта четвертого порядку з фіксованим кроком інтегрування. Ця функція має п'ять аргументів: y - вектор початкових значень шуканих функцій; x_0 - початкове значення незалежної змінної; x_n - кінцеве значення незалежної змінної; n - фіксоване число кроків інтегрування; F - праві частини системи рівнянь, записані у векторі в символічному виді. Функція *rkfixed* (y, n, F) видає таблицю результатів рішень з $(m + 1)$ стовпцями і n рядками (m - число рівнянь у системі). Нульовий стовпець таблиці - це поточні значення незалежної змінної (аргументу) x .

Наступні стовпці рішення визначають значення ординат шуканих, для відповідних поточних значень аргументу x . Результат рішення системи звичайних диференціальних рівнянь з використанням функції *rkfixed* (y, n, F) у Mathcad представлений у виді таблиці - певним чином побудованої матриці. При цьому перший стовпець таблиці (матриці) містить значення незалежної змінної на кожному кроці інтегрування. Другий – значення першої шуканої функції для заданого значення незалежної змінної на кожному кроці інтегрування. Третій – значення другої шуканої функції й і т.д. Робота виконується у програмному середовищі Mathcad (версії 8 і вище) на персональному комп'ютері.

ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.

Включити комп'ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.

Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.

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

АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

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

$$\begin{aligned} v1 &:= 0.267 & T1н &:= 90 & F &:= 13 & K &:= 60 & Ct2 &:= 4185 \cdot 10^3 \\ v2 &:= 0.26 \cdot 10^{-3} & T2н &:= 40 & L &:= 1.5 & Ct1 &:= 1670 & h &:= 0.15 \end{aligned}$$

Вихідні дані: Розв'язання задачі:

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

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

(матриця температур теплоносіїв у точці входу гарячого теплоносія).

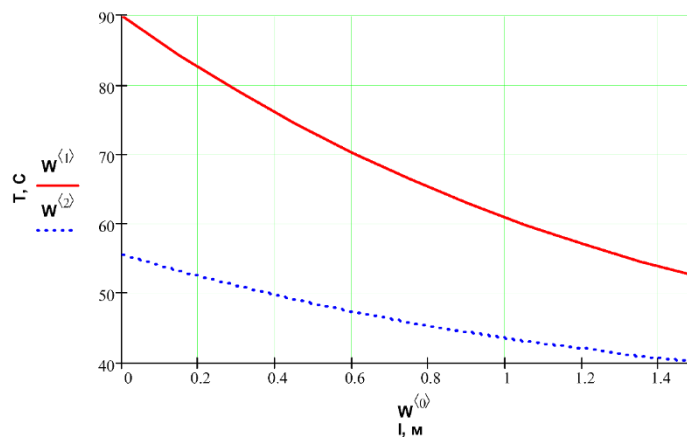
$$G(t, T) := \begin{bmatrix} -F \cdot K \cdot \frac{(T_0 - T_1)}{L \cdot v1 \cdot Ct1} \\ -F \cdot K \cdot \frac{(T_0 - T_1)}{L \cdot v2 \cdot Ct2} \end{bmatrix}$$

(матриця правих частин диференціальних рівнянь математичної моделі ТОА)Рішення

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

математичної моделі:

Профілі розрахованих температур наведені на графіку



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

висновки щодо отриманих температурних профілей.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 12

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

Лабораторна робота № 13 КОМП'ЮТЕРНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НА ЕОМ КОНСТАНТ ШВИДКОСТІ ЗВОТНОЇ ХІМІЧНОЇ РЕАКЦІЇ

Тема лабораторної роботи – комп'ютерне визначення на ЕОМ констант швидкості зворотної хімічної реакції.

Мета лабораторної роботи – набуття навичок моделювання кінетики хімічних реакцій на ЕОМ та розрахунок кінетичних констант.

ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Розрахунок кінетичних параметрів (констант, порядків реакції) є одним з етапів побудови кінетичної моделі хімічної реакції (див. рис. 5.1). Кінетична модель (рівняння) зв'язує швидкість хімічної реакції з параметрами, від яких вона залежить. Такими параметрами виступають: концентрації реагуючих речовин, температура тощо. Звичайно кінетичні рівняння являють собою систему диференціальних рівнянь і містять поряд із концентраціями кінетичні константи та порядки реакцій. Методи, що існують для знаходження констант моделей безпосередньо зв'язані з обробкою експериментальних даних відповідно до рівнянь швидкості реакції. В загальному випадку задача знаходження кінетичних констант формулюється так: необхідно знайти значення констант, при яких кінетичні рівняння найкращим чином описували б експериментальні дані. У тому випадку, коли кінетична модель має простий вигляд, порядок хімічної реакції відомий і диференціальні рівняння моделі можуть бути аналітично розв'язані, то розрахунок кінетичних констант рекомендується виконувати безітераційними методами, наприклад, методом середніх, методом найменших квадратів, тощо.

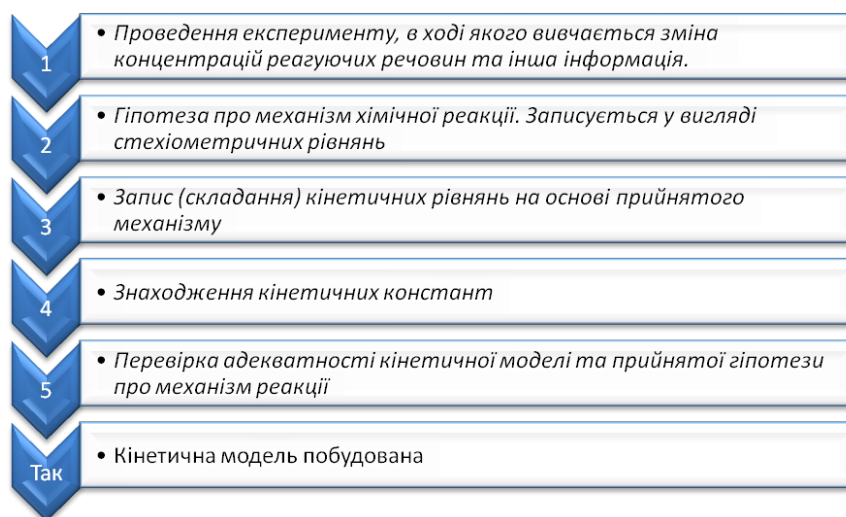


Рис 13.1 Основні етапи побудови кінетичної моделі

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

ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Приклад розрахунку констант швидкості реакції етерифікації етилового спирту та оцтової кислоти

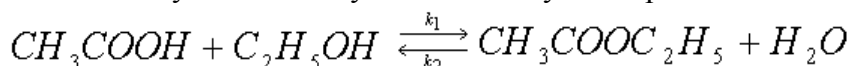
Розглядається реакція етерифікації етилового спирту та оцтової кислоти.

Необхідно скласти кінетичну модель процесу, знайти значення констант швидкостей і підтвердити механізм реакції, що досліджується.

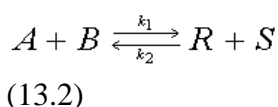
Експериментальні дані наведені у вигляді залежності ступеня перетворення кислоти у часі процесу. Також встановлено, що реакція є зворотною і константа рівноваги становить:

$$k_1/k_2=4 \quad (13.1)$$

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



або у загальному вигляді:



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

$$C_{Bx} = -k_1 C_A C_B + k_2 C_R C_S \quad (13.3)$$

Початкові умови: $C_A = C_B$, $C_R = C_S$, $C_A(0) = C_{Avx}$, $C_B(0) = C_{Bvx}$, $C_R(0) = C_S(0) = 0$.

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

Алгоритм розрахунку кінетичних констант

Алгоритм розрахунку кінетичних констант може бути таким: Задається орієнтовне (довільне) значення k_2 (рекомендується 0,01 або 0,02). Кінетичну модель (5.4) із прийнятим значенням константи чисельно інтегрують на інтервалі від 0 до 1, використовуючи, наприклад, методи Ейлера або Рунге-Кутта. Результат інтегрування на ЕОМ - розрахункові значення концентрації C_A у різні моменти часу. Розраховується на ЕОМ значення критерію середньоквадратичного відхилення S для перевірки адекватності моделі:

$$S = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_{Ae} - C_{Ap})^2} \quad (13.5)$$

де N - кількість експериментальних даних; S - значення концентрацій компонента A експериментальне та розрахункове, відповідно.

Початкове значення S рекомендується задати рівним нулеві. Змінюється (наприклад, збільшується) значення константи k_2 (наприклад, на 0,01). Розрахунок повторюють відповідно з п.п. 2 та 3. Порівнюють попереднє та останнє значення критерію S . Якщо значення S зменшилося, то продовжують змінювати константу k_2 у тому ж напрямку. Якщо значення S збільшилося - у зворотному. Розрахунки виконують у діалоговому режимі з ЕОМ; константи змінюють, доки не буде одержано мінімальне значення критерію S . У цьому випадку пошук k_2 припиняється. На графік наносять залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості реакції k_2 , на якому відзначають мінімум S та знайдене значення константи k_2 (рис.

13.2). Значення константи прямої реакції k_1 розраховують згідно з формулою константи рівноваги (13.1): $k_1 = 4k_2$.

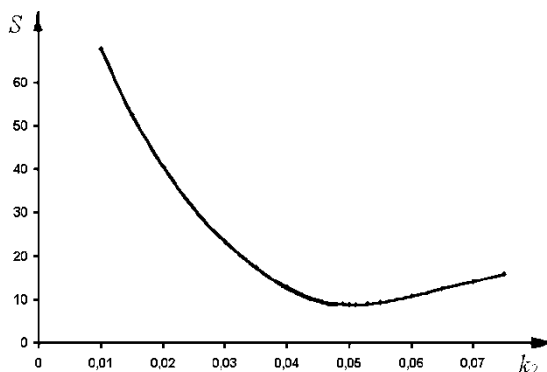


Рис. 13.2 - Залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості реакції k_2

Після закінчення розрахунку констант k_1 та k_2 необхідно нанести розрахункові та експериментальні залежності концентрації компонента A від часу на графік і провести візуальний аналіз збігу, тобто оцінити адекватність розробленої кінетичної моделі експериментальним даним (рис. 13.3).

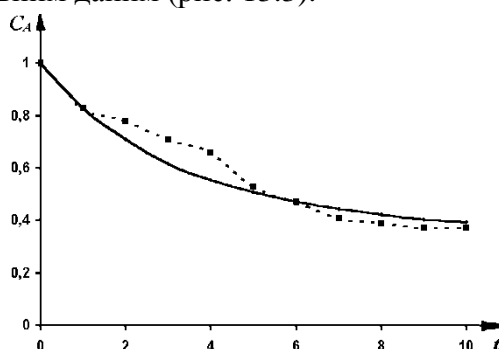


Рис. 13.3 - Залежність концентрації компонента A від часу
АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Початкові дані:

Ca _e :=	0	1.00
	1	0.88
	2	0.76
	3	0.7
	4	0.62
	5	0.60
	6	0.48
	7	0.44
	8	0.40
	9	0.39
	10	0.33

Пошук адекватного рівняння кінетичної моделі:

Прийняте значення константи швидкості зворотної реакції k_2 :

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

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

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

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

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

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

Середньоквадратичне відхилення розрахункових значень концентрації від експериментальних:

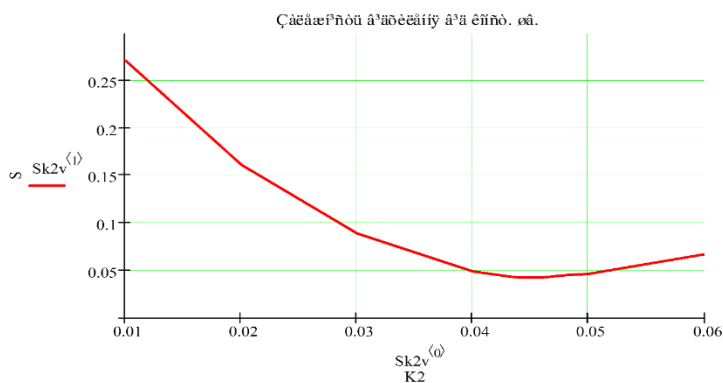
$$S := \sqrt{\frac{\sum (C_{ae}^{(1)} - C_{ap})^2}{11}} \quad S = 0.042$$

Значення константи швидкості прямої реакції k_1 :

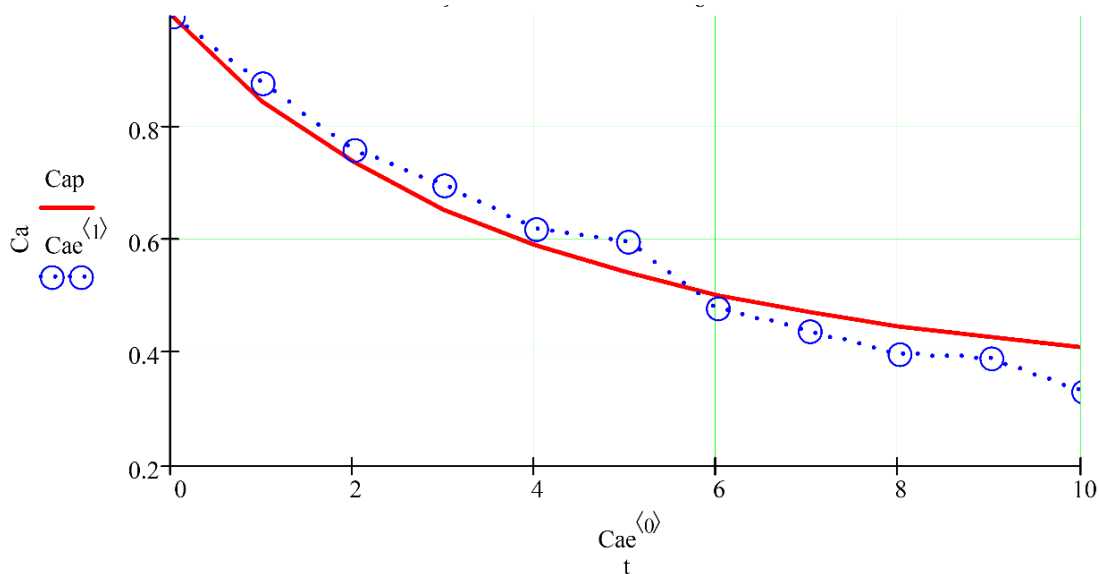
$$k_1 := K_p \cdot k_2 \quad k_1 = 0.18$$

Розраховані значення константи швидкості зворотної реакції k_2 (1-й рядок) та відповідне їй значення середньоквадратичного відхилення (2-й рядок). Транспонуємо матрицю отриманих значень для можливості побудови графічної залежності:

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



Залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості зворотної реакції k_2



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

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №13

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

Лабораторна робота № 14

ДОСЛІДЖЕННЯ ІДЕАЛЬНОГО РЕАКТОРА ЗМІШУВАННЯ ПЕРІОДИЧНОЇ ДІЇ

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

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

ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Математичний опис реактора ідеального змішування періодичної дії

Багато з хімічних процесів відбуваються у реакторах із змішуванням реакційної суміші близьким до режиму ідеального змішування (РІЗ). В реакторах подібного типу забезпечується майже миттєве і повне змішування речовин, що надходять в апарат. При цьому концентрація компонентів на виході з реактору дорівнює концентрації у реакційній зоні. У загальному випадку стаціонарний режим описується системою алгебраїчних рівнянь матеріального та теплового балансів відносно до кожного з компонентів

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau}(C_{exi} - C_i) + W_{ri} = 0 \\ \frac{1}{\tau}(T_{ex} - T) + \frac{1}{C_T}(\pm\Delta H)|W_r| - \frac{K_T F}{C_T V}(T - T_x) = 0 \\ \frac{1}{\tau}(T_{ex} - T_x) + \frac{K_T F}{C_x V_x}(T - T_x) = 0 \end{cases} \quad (14.1)$$

$1, 2, \dots, n$ - кількість компонентів реакції; x - середній час перебування потоку в реакторі та холодоагенту в сорочці; C_i - вхідна, поточна (вихідна) концентрація i -го компонента; T, T_x - вхідна, поточна (вихідна) температури потоку та температура холодоагенту, відповідно; C_x - об'ємна теплоємність реакційної суміші та холодоагенту, відповідно; W - робочий об'єм реактора та сорочки; F - коефіцієнт та поверхня теплопередачі; V - швидкість перетворення x -го компонента в хімічній реакції; H - сумарний тепловий ефект; V_x - сумарна швидкість реакції для усіх стадій.

Задача розрахунку згідно з моделлю (6.1) містить в собі визначення концентрацій компонентів реакції, температури суміші на виході з реактору і температури холодоагенту на виході із сорочки.

У статичному ізотермічному режимі процес в РІЗ можна описати рівнянням матеріального балансу: $C_{ex} - C_i + W_{ri} = 0$ (14.2)

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



Відомі: концентрації компонентів у вхідному потоці: кмоль/м^3 ;
 $C_{p_{\text{вх}}} = C_{S_{\text{вх}}} = 0$ константи швидкостей окремих стадій реакції: $k_1 = 0,5 \text{ год}^{-1}$;
 $k_2 = 0,4 \text{ год}^{-1}$; $k_4 = 0,3 \text{ год}^{-1}$; t - час перебування потоку в реакторі.

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

$$\begin{cases} W r_A = \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \\ W r_B = \frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S \\ W r_S = \frac{dC_S}{dt} = k_2 C_B - k_3 C_S \\ W r_P = \frac{dC_P}{dt} = k_4 C_B \end{cases} \quad (14.4)$$

Тоді модель ізотермічного реактора у статичі запишемо так:

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau} (C_{A_{\text{вх}}} - C_A) - k_1 C_A = 0 \\ \frac{1}{\tau} (C_{B_{\text{вх}}} - C_B) + k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S = 0 \\ \frac{1}{\tau} (C_{S_{\text{вх}}} - C_S) + k_2 C_B - k_3 C_S = 0 \\ \frac{1}{\tau} (C_{P_{\text{вх}}} - C_P) + k_4 C_B = 0 \end{cases} \quad (14.5)$$

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

$$\begin{cases} C_{A_{\text{вх}}} = (1 + k_1 \tau) C_A \\ C_{B_{\text{вх}}} = -k_1 \tau C_A - [1 + (k_2 + k_4) \tau] C_B + k_3 \tau C_S \\ C_{S_{\text{вх}}} = -k_2 \tau C_B - (1 + k_3 \tau) C_S \\ C_{P_{\text{вх}}} = -k_4 \tau C_B + C_P \end{cases} \quad (14.6)$$

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

Систему (14.6) зручно навести у матричному вигляді для подальшого розв'язання на ЕОМ: $C_{\text{вх}} = K \cdot C$, де C , $C_{\text{вх}}$ - вектори-стовпці вхідних та вихідних концентрацій компонентів, відповідно.

$$C = \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \\ C_S \\ C_P \end{pmatrix} \quad C_{\text{вх}} = \begin{pmatrix} C_{A_{\text{вх}}} \\ C_{B_{\text{вх}}} \\ C_{S_{\text{вх}}} \\ C_{P_{\text{вх}}} \end{pmatrix} \quad K = \begin{pmatrix} (1 + k_1 \tau) & 0 & 0 & 0 \\ -k_1 \tau & 1 + (k_2 + k_4) \tau & -k_3 \tau & 0 \\ 0 & -k_2 \tau & (1 + k_3 \tau) & 0 \\ 0 & -k_4 \tau & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (14.8)$$

- матриця коефіцієнтів (14.8) Після обернення квадратичної матриці коефіцієнтів за допомогою ЕОМ можна записати остаточний розв'язок математичного опису реактора:

$$C = K^{-1} \cdot C_{\text{вх}} \quad (14.9)$$

**Приклад розрахунку проточного реактора ідеального змішування
періодичної дії**

Згідно із заданим викладачем механізмом реакції потрібно скласти статичну математичну модель ізотермічного РІЗ у статиці й підготувати матриці коефіцієнтів для п'яти значень часу перебування.

За допомогою ЕОМ одержати обернені матриці. Після розрахункових робіт намалювати залежність концентрації кожного компонента від часу перебування речовин у потоці. Розглянемо на прикладі.

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

Вихідні дані. Початкові концентрації реагуючих компонентів, $\text{кмоль}/\text{м}^3$: 1,15, 0,01, 0. Теплота реакції $13100 \text{ кДж}/\text{кмоль}$. Температурні залежності констант швидкості мають вигляд

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

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

Щільність і теплоємність реакційної суміші відповідно рівні 810 та $1600 \text{ кДж}/\text{м}^3$, Обсяг реакційної суміші в РІЗ-П складає $0,8 \text{ м}^3$; поверхня теплопередачі $2,1 \text{ м}^2$; коефіцієнт теплопередачі $280 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \text{ К})$.

Припущення:

Гідродинамічний режим в апараті і тепло-обмінному пристрої типу сорочка - ідеальне змішування. Густина, теплоємність реакційної суміші і теплота реакції від температури не залежать. Реакція протікає без зміни об'єму.

Розв'язання задачі

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

$$\frac{dn_j}{dt} = \frac{d(V\rho N_j)}{dt} = \sum_{i=1}^p v_i^0 \cdot \rho_i^0 \cdot N_{ji}^0 - v \cdot \rho \cdot N_j + \sum F_{j\Sigma}, \quad (14.10)$$

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{d(V\rho c_p T)}{dt} = \sum_{i=1}^p v_i^0 \cdot \rho_i^0 \cdot c_{p_i}^0 \cdot T_i^0 - v \cdot \rho \cdot c_p \cdot T + \sum F_{T\Sigma}, \quad (14.11)$$

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

Оскільки періодичний реактор ідеального змішування непроточний, то в його математичному описі відсутні два перших члени в правій частині рівнянь (14.10), (14.11). Тоді рівняння покомпонентного балансу приймає вигляд

$$\frac{d(V\rho N_j)}{dt} = \sum F_{j\Sigma}, \quad (14.13)$$

теплового балансу

$$\frac{d(V\rho C_p T)}{dt} = \sum F_{T\Sigma}. \quad (14.14)$$

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

$$\sum F_{A\Sigma} = f_{A,V} \cdot V = W_A \cdot V = -k_1 \cdot C_A \cdot V; \quad (14.15)$$

$$\sum F_{R\Sigma} = f_{R,V} \cdot V = W_R \cdot V = (k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_R) \cdot V; \quad (14.16)$$

$$\sum F_{S\Sigma} = f_{S,V} \cdot V = W_S \cdot V = k_2 \cdot C_R \cdot V; \quad (14.17)$$

$$\sum F_{T\Sigma} = q_{T,V} \cdot V + q_{T,F} \cdot F_T = -Q_P \cdot W_S \cdot V + K_T \cdot (T_T - T) \cdot F_T; \quad (14.18)$$

де W_A , W_R , W_S - швидкості відповідно перетворення й утворення, $\text{кмоль}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})$; V - об'єм реакційної суміші, м^3 ; F_T - поверхня теплопередачі, м^2 ; k_1 та k_2 - константи швидкості стадій реакції, с^{-1} ; K_T - коефіцієнт теплопередачі, $\text{Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$; Q_P - теплота реакції, $\text{кДж}/\text{кмоль}$; T_T - температура теплоносія, К ; T - температура реакційної суміші, К . Ввівши в рівняння (14.13), (14.14) залежності (14.15) -(14.18), температурні залежності констант швидкості і співвідношення після нескладних перетворень отримаємо

$$k_1 = k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T); \quad (14.19)$$

$$k_2 = k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T); \quad (14.20)$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A; \quad (14.21)$$

$$\frac{dc_R}{dt} = k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_R; \quad (14.22)$$

$$\frac{dC_S}{dt} = k_2 \cdot C_R;$$

(14.23)

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

(14.24)

Для адіабатичного теплового режиму рівняння (6.24) прийме вигляд

$$\frac{dT}{dt} = - \frac{Q_P}{\rho \cdot c_p} \cdot k_2 \cdot C_R.$$

(14.25)

Ізотермічний тепловий режим забезпечується рівністю теплоприходу і теплотрат, тобто

$$\frac{dT}{dt} = 0. \quad (14.26)$$

Вибір чисельного методу розв'язання

Математичний опис РІЗ-П для розглянутих теплових режимів (14.19) - (14.26) являє собою систему звичайних диференціальних рівнянь першого порядку. Для її рішення скористаємося методом Ейлера з постійним кроком інтегрування. Сутність методу полягає в тому, що похідна замінюється відношенням кінцевих різниць. Тоді чисельне інтегрування зводиться до обчислення за рекурентним співвідношенням:

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

(14.27)

де i - крок інтегрування; x, y - права частина диференціального рівняння; y_i - попереднє наближення шуканої величини.

Для узгодження розмірностей у вихідній інформації необхідно розмірність теплоти реакції представити в Дж/кмоль (по речовині). Температуру реакційної суміші і теплоносія необхідно виразити в градусах Кельвіна. Інші величини задані в погоджених розмірностях. Інструкції по роботі з інтегрованим програмним середовищем Mathcad надаються при роботі в лабораторії обчислювальної техніки. Робота виконується у програмному середовищі Mathcad (версії 8 і вище) на персональному комп'ютері.

ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.

Скласти математичну модель реактора відповідно до завдання та розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.

Включити комп'ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.

Отримати результати та їх проаналізувати.

Представити результати роботи на комп'ютері викладачу. Перейти до оформлення звіту

АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

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

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

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

$$i := 1..900 \quad \Delta t := 0.1$$

$$\rho := 810$$

$$t_0 := 0 \quad \text{tem}_0 := 303$$

$$Ca_0 := 1.15 \quad Cr_0 := 0.01$$

$$Qps := 1.31 \cdot 10^7 \text{cp} := 1600 \quad Ft := 2.1$$

$$Cs_0 := 0$$

k - константи швидкості реакції, $1/s$, Δt - величина кроку інтегрування, T - температура (K) у початковий момент часу, i - кроки інтегрування, Q - тепловий ефект реакції по речовині S , Дж/кмоль, c - питома теплоємність реакційної суміші, Дж/(кг·K), ρ - щільність реакційної суміші, кг/м³, V - об'єм реакційної суміші, м³, F - поверхня теплопередачі, м², K - коефіцієнт теплопередачі, Вт/(м²·K), $T=383$ K- температура теплоносія, K), c - концентрації речовин (кмоль/м³)

Ліві частини системи диференціальних рівнянь

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

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

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

Моделювання РІЗ-П (ізотермічний режим)

Реалізація метода Ейлера

$$\begin{pmatrix} t_i \\ Ca_i \\ Cr_i \\ Cs_i \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} t_{i-1} + \Delta t \\ Ca_{i-1} + FCa(Ca_{i-1}, \text{tem}_0) \cdot \Delta t \\ Cr_{i-1} + FCr(Ca_{i-1}, Cr_{i-1}, \text{tem}_0) \cdot \Delta t \\ Cs_{i-1} + FCs(Cr_{i-1}, \text{tem}_0) \cdot \Delta t \end{pmatrix}$$

$$\Delta_i := |FCa(Ca_i, \text{tem}_0)|$$

$$\Delta =$$

	0
0	0
1	0.066
2	0.065
3	0.065
4	0.065

$$t =$$

	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4

$$Ca =$$

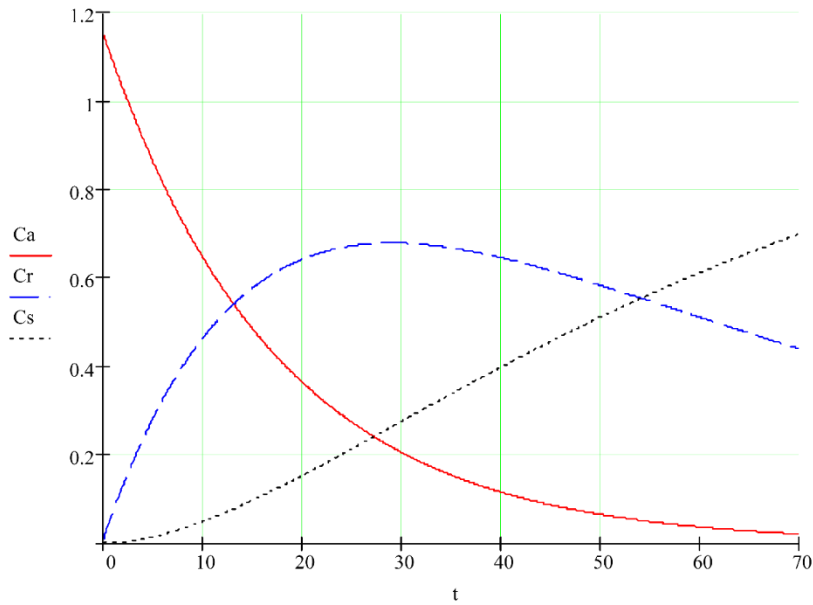
	0
0	1.15
1	1.143
2	1.137
3	1.13
4	1.124

$$Cr =$$

	0
0	0.01
1	0.017
2	0.023
3	0.03
4	0.036

$$72 \quad Cs =$$

	0
0	0
1	1.838 · 10 ⁻⁵
2	4.887 · 10 ⁻⁵
3	9.137 · 10 ⁻⁵
4	1.458 · 10 ⁻⁴



Моделювання РІЗ-П (адиабатичний режим)

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

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

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

	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4

$$Ca =$$

	0
0	1.15
1	1.143
2	1.137
3	1.13
4	1.124

$$\Delta =$$

	0
0	0
1	0.066
2	0.065
3	0.065
4	0.065

Cr =

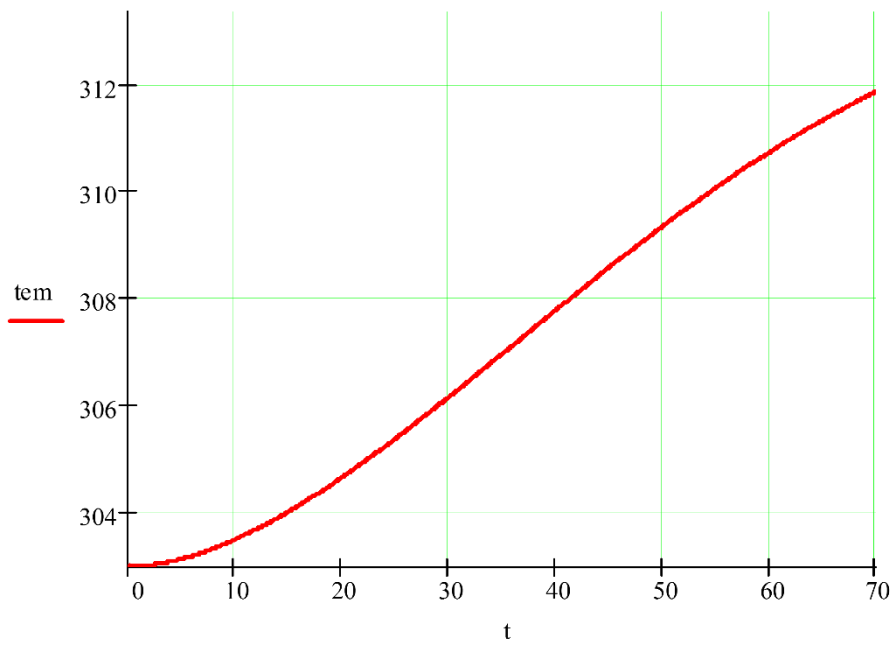
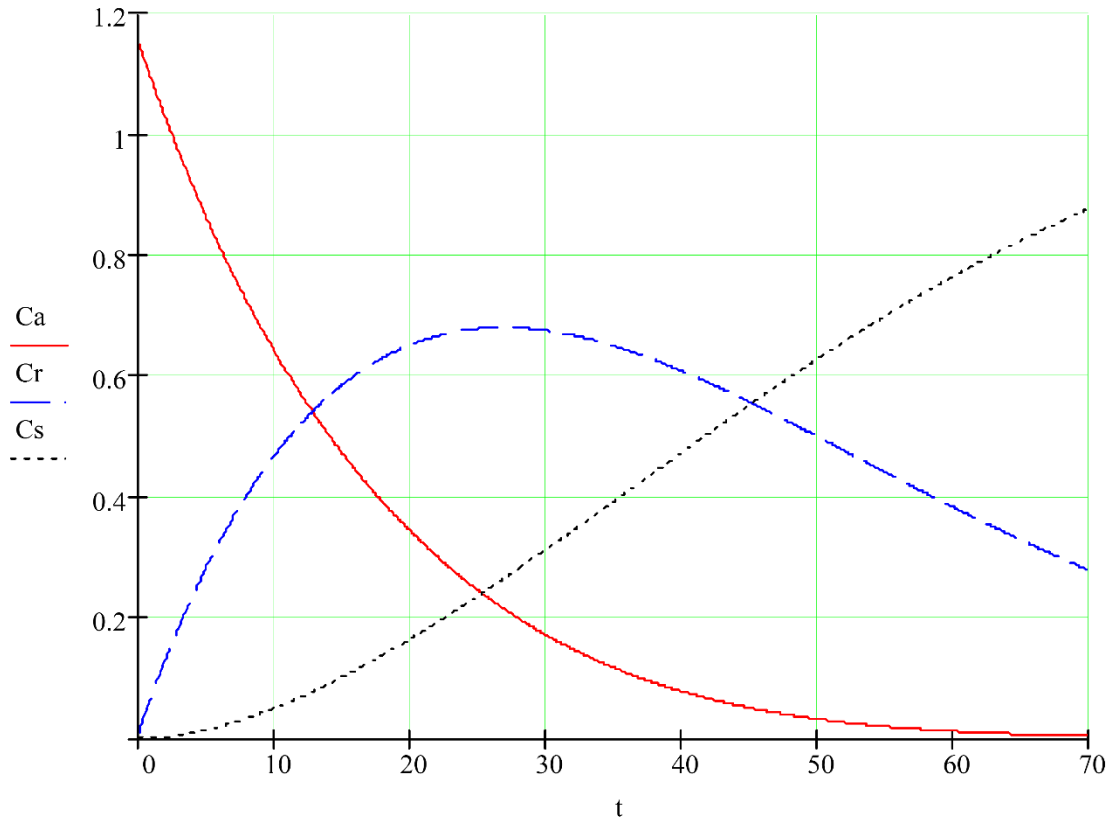
	0
0	0.01
1	0.017
2	0.023
3	0.03
4	0.036

Cs =

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

tem =

	0
0	303
1	303
2	303
3	303.001
4	303.001



Моделювання РІЗ-П (політропічний режим)

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

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

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

$$\Delta =$$

	0
0	0
1	0.066
2	0.065
3	0.065
4	0.065

$$t =$$

	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4

$$Ca =$$

	0
0	1.15
1	1.143
2	1.137
3	1.13
4	1.124

$$Cr =$$

	0
0	0.01
1	0.017
2	0.023
3	0.03
4	0.036

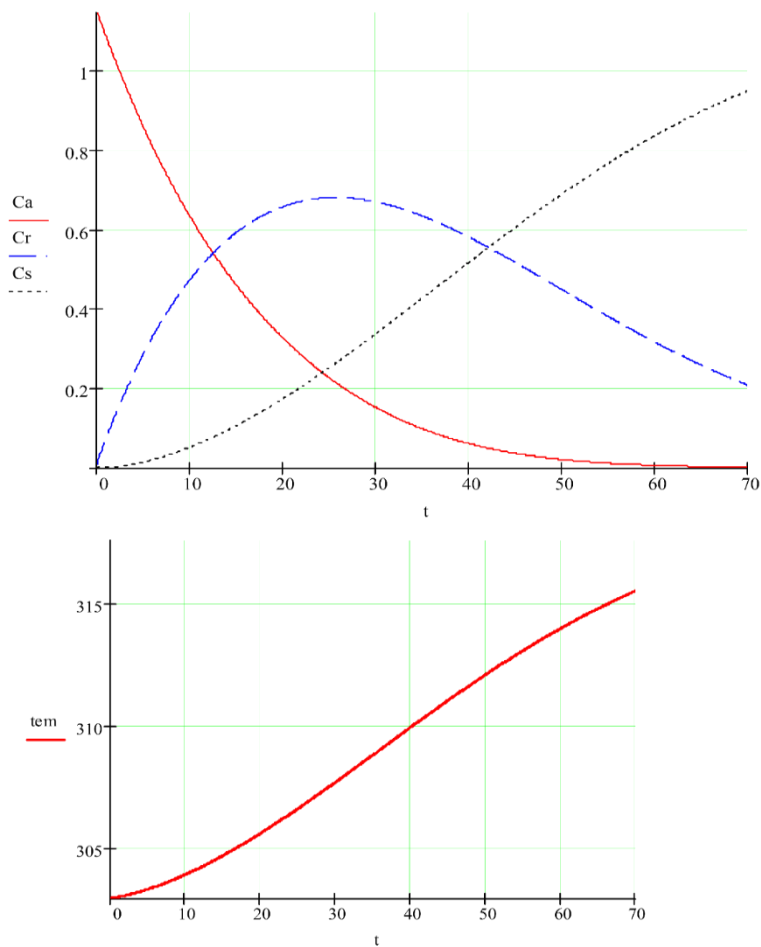
$$Cs =$$

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

$$tem =$$

	0
0	303
1	303.005
2	303.01
3	303.015
4	303.02

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



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

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 14

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

Лабораторна робота № 15
РОЗРОБКА ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ МОДУЛІВ РЕАКТОРІВ ДЛЯ
АВТОМАТИЗОВАНОГО РОЗРАХУНКУ ТА ПРОЕКТУВАННЯ СХТС

Тема лабораторної роботи - математичне моделювання хімічних процесів в системах автоматизованого проектування.

Мета лабораторної роботи - одержання практичних навичок у побудові математичних моделей хімічних реакторів, оформлення їх у вигляді програмно-обчислювальних процедур (модулів).

ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Моделювання проточного реактора ідеального змішування

Опис математичної моделі проточного реактора ідеального змішування детально був описаний в роботі № 14. Для побудови даної математичної моделі використовуються залежності (14.1) -(14.9). Згідно із заданим викладачем механізмом реакції потрібно скласти статичну математичну модель ізотермічного РІЗ у статиці й підготувати матриці коефіцієнтів K для п'яти значень часу перебування. За допомогою ЕОМ одержати обернені матриці. Після розрахункових робіт намалювати залежність концентрації кожного компонента від часу перебування речовин у потоці.

Математичний опис і розрахунок ізотермічного трубчатого реактора ідеального витіснення

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

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

$$C_i(0) = C_{ex_i} \frac{\partial C_i}{\partial t} = -U \frac{\partial C_i}{\partial l} + W r_i \quad (15.1)$$

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

$$-U \frac{\partial C_i}{\partial l} + W r_i = 0, \quad (15.2)$$

де U - середня лінійна швидкість потоку в РІВ; l - координата довжини реактора.

Враховуючи, що $U = 2\tau$, систему (15.2) запишемо так:

$$\frac{dC_i}{d\tau} = W r_i, \quad (15.3)$$

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

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

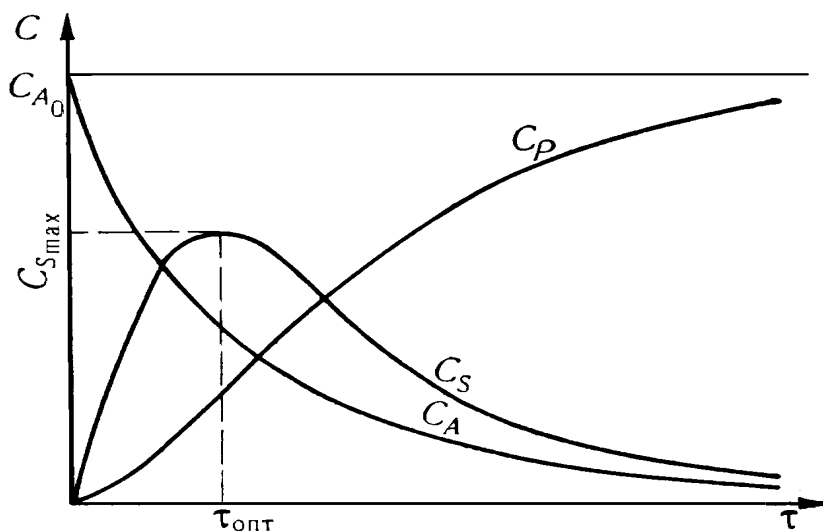
В цьому випадку математична модель РІВ буде мати вигляд системи звичайних

диференціальних рівнянь (6.4) з відповідними граничними умовами:

$$C_{S_{ex}} = C_{P_{ex}} = 0$$

Система диференціальних рівнянь (15.4) описує зміну концентрацій реагуючих речовин від часу перебування в РІВ (або по його довжині). Для розв'язання системи (15.4) можна скористатися яким-небудь із відомих чисельних методів, наприклад,

методом Ейлера. Результати рішення моделі РІВ на ЕОМ потрібно накреслити як



графічну залежність $f(\tau)$ (див. рис. 15.1) $= f(\tau)$

Рис. 15.1 - Графічна залежність

ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.

Включити комп'ютер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.

Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.

Отримати результати та їх проаналізувати.

Представити результати роботи на комп'ютері викладачу. Перейти до оформлення звіту.

АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Моделювання проточного реактору ідеального змішування

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

$$C_{\text{inp}} := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$k := \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.4 \\ 0.3 \\ 0.4 \end{pmatrix}$$

Час перебування:

$$K(\tau) := \begin{bmatrix} 1 + k_0 \cdot \tau & 0 & 0 & 0 \\ -k_0 \cdot \tau & 1 + (k_1 + k_3) \cdot \tau & -k_2 \cdot \tau & 0 \\ 0 & -k_1 \cdot \tau & 1 + k_2 \cdot \tau & 0 \\ 0 & -k_3 \cdot \tau & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \tau := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix}$$

Матриці коефіцієнтів:

Розв'язання системи матричним методом при різних термінах перебування

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

Поточні концентрації знайдені:

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

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

$$C_r := C^T$$

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

Моделювання ізотермічного трубчатого реактору ідеального витіснення

Початкова концентрація компонентів, *кмоль/м3* та константи швидкості хімічної реакції, *год⁻¹* задані вище в матрицях C_{inP} та k відповідно.

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

$$D(t, C_{inP}) := \begin{bmatrix} -k_0 \cdot C_{inP_0} \\ k_0 \cdot C_{inP_0} - (k_1 + k_3) \cdot C_{inP_1} + k_2 \cdot C_{inP_2} \\ k_1 \cdot C_{inP_1} - k_2 \cdot C_{inP_2} \\ k_3 \cdot C_{inP_1} \end{bmatrix}$$

За допомогою вбудованої функції для вирішення системи звичайних диференціальних рівнянь знайдемо розподіл концентрацій компонентів в часі:

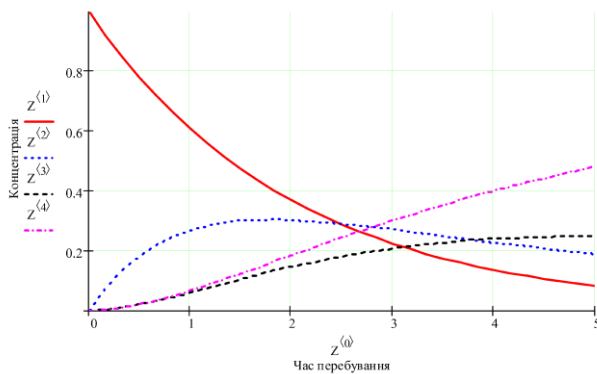
$$Z := \text{rkfixed}(C_{inP}, 0, 5, 30, D)$$

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

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

Графічна інтерпретація розв'язку матиме вигляд:

В звіті послідовно надайте: № і назву лабораторної роботи, тему, мету, хід виконання роботи, наведіть тексти своїх програм для реалізації 1-го та 2-го етапів роботи. Зробіть висновки щодо отриманих розподілів концентрацій компонентів в часі



для реактора ідеального змішування та реактора ідеального витіснення.

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №15

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

Лабораторна робота № 16 ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЖИМУ РОБТИ РЕАКТОРА

Тема лабораторної роботи – використання математичних методів для визначення оптимальних технологічних параметрів хімічного процесу у реакторі.

Мета лабораторної роботи – набуття навичок розв'язання оптимізаційних задач для об'єктів хімічної технології, що мають цільову функцію, яка залежить від однієї змінної.

ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Оптимізація – це цілеспрямована діяльність, яка полягає в отриманні найкращих результатів при відповідних умовах [1, 2].

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

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

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

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

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

Метод сканування

Інтервал $[a, b]$, на якому потрібно знайти мінімум $f(x)$, поділяється на n рівних відрізків довжини: $h = (b - a) / n$.

Послідовно обчислюються значення цільової функції у цих точках, а найменше значення запам'ятовується. Екстремум може бути знайденим із точністю до кроку пошуку. Обчислення продовжується до тих пір, поки не буде розглянуто весь інтервал.

Переваги методу: простота алгоритму та можливість пошуку глобального екстремуму. До недоліків методу слід віднести великий обсяг обчислень. Блок-схема алгоритму мінімізації функції на заданому відрізку наведена у Додатку 1.

Методи виключення інтервалів

Ці методи дозволяють визначити оптимум функції однієї змінної всередині заданого інтервалу шляхом послідовного виключення підінтервалів, а отже, шляхом зменшення інтервалу пошуку [1].

Досліджувана функція на розглянутому інтервалі повина бути унімодальною. Функція являється унімодальною на відрізку тільки в тому випадку, якщо вона монотонна по обидва боки від єдиної на цьому інтервалі точки оптимуму, тобто коли для точок та із цього інтервалу $x_1 < x_2$ впливає, що $f(x_1) < f(x_2)$ та $x_1 > x_2$ впливає, що $f(x_2) > f(x_1)$ [1].

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

Методи виключення інтервалів можна використовувати для аналізу як неперервних, так і дескретних функцій, а також у випадках, коли змінні приймають значення із дискретної множини. Єдиною вимогою є можливість визначення значень функції в заданих точках за допомогою прямих розрахунків або імітаційних експериментів.

Ефективність цих методів пов'язана з тим, що це методи спрямованого пошуку. У багатьох задачах умова унімодальності не виконується, або не може бути легко перевірена. Тоді можна вихідний інтервал визначеності (якщо великий) поділити на маленькі інтервали, знайти на кожному з підінтервалів, а потім вибрати з них найменший.

Метод половинного ділення інтервалів (метод дихотомії)

Цей метод дозволяє виключити в точності половину інтервалу на кожній ітерації [2]. Розглянемо проточний реактор із мішалкою, режим якого з достатнім наближенням відповідає умовам ідеального змішування. В реакторі протікає складна реакція. Необхідно визначити максимально можливу концентрацію напівпродукту, який є цільовим компонентом, і відповідний час перебування потоку в апараті. При такій постановці задачі критерієм оптимальності є концентрація речовини, а змінною - час перебування. Зручно у даному випадку використати метод половинного ділення (дихотомії), який дозволяє зробити мінімальну кількість розрахунків згідно з моделлю для знаходження.

Розглянемо алгоритм цього методу, припускаючи, що функція, яка оптимізується, має один максимум (див. рис. 16.1)

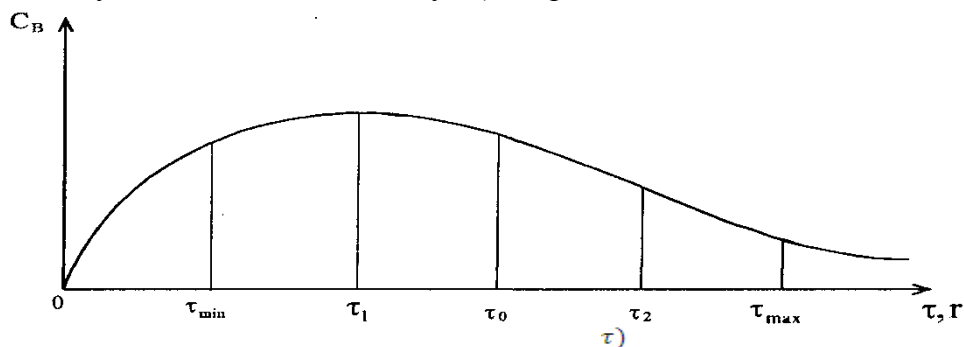


Рис.16.1 - Графік функції

Алгоритм методу дихотомії.

Розбиваємо інтервал на два рівних підінтервала (точка), кожний з яких ділимо на дві рівних частини (т.т.).Розраховуємо значення критерію оптимальності на межах усіх підінтервалів, включаючи кінцеві точки. Серед отриманих значень знаходимо найбільше, тобто те, яке відповідає типу екстремума (максимуму), котрий потрібно знайти. Виходячи з певних уявлень (рис. 8.1) найбільше значення критерію спостерігається у точці.Вибираємо новий інтервал, який вміщує два підінтервали з найбільшим розрахованим значенням на їх загальній межі. У даному випадку таким

інтервалом. Повторюємо процедуру розрахунків для нового інтервалу, починаючи з п.1 доки різниця між значеннями в сусідніх точках не стане меншою за задану точність визначення екстремуму. Послідовність дій для знаходження мінімуму цим методом зображена на блок-схемі (Додаток 2).

Завдання програмних модулів в середовищі Mathcad

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

Можливість завдання програмних блоків (модулів) з'явилася у версії Mathcad PLUS 6.0 й у розширеному варіанті підтримується у версіях

Mathcad починаючи з 8.0/2000. Засоби програмування зосереджені в палітрі програмних елементів, показаної на рис. 16.2.

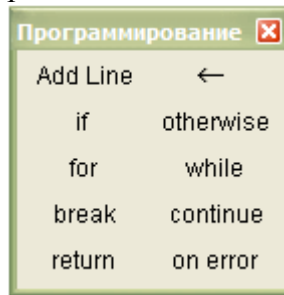


Рис.16.2 - Елементи для створення програмних модулів

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

ПРОГРАМНІ БЛОКИ

$x := 25$ Задане значення x

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

$\left| \begin{array}{l} x \leftarrow 12 = 3.464 \\ \sqrt{x} \end{array} \right.$ Локально задане $x=12$ і обчислений квадратний корінь з $x=12$
 $x = 25$

За межами програмного блоку x зберегло значення 25 Приклад завдання функції звичним способом:

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

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

Програмним блоком:

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

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

Неважко помітити (див. палітру програмних елементів на рис. 8.2), що набір інструкцій для створення програмних модулів досить обмежений і містить наступні елементи.

Інструкція додавання ліній у модуль Add Line

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

Оператор внутрішнього присвоювання

Оператор виконує функції внутрішнього (локального) присвоювання. Наприклад, вираження `-123` привласнює змінної значення `123`. Локальний характер присвоювання означає, що таке значення змінної зберігається тільки в тілі програмного модуля. За межами тіла програми значення змінної може бути невизначеним або рівним значенню, що задається поза програмним блоком операторами локального або глобального присвоювання.

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

Умвна інструкція if

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

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

Інструкція організації циклу for

Інструкція `for` служить для організації циклів із заданим числом повторень.

Вона записується у вигляді:

Цей запис означає, що вираження, поміщене в розташоване нижче місце уведення, буде виконуватися для значень змінної `Var`, що міняються від `Nmin` до `Nmax` із кроком `+1`.

Змінну лічильника `Var` можна використати у виразі, що виконується.

`for Var ∈ Nmin .. Nmax`

Інструкція організації циклу while

Інструкція `while` служить для організації циклів, що діють доти, поки виконується деяка умова.

В `while Умова` розташоване нижче місце уведення записується вираження, яке виконується.

Інструкція otherwise

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

Тобто функція $F(x) := \begin{cases} 1 & \text{if } x > 0 \\ -1 & \text{otherwise} \end{cases}$ повертає 1, якщо $x > 0$ та -

1 у

всіх інших випадках.

Інструкція переривання break

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

Інструкція continue

Інструкція `continue` використовується для продовження роботи після

переривання програми. Вона також найчастіше використовується разом з інструкціями циклів while й for, забезпечуючи повернення в точку переривання й продовження обчислень.

Інструкція return

Особлива інструкція return перериває виконання програми й повертає значення операнда, що розташований слідом за нею.

Інструкція on error і функція error

Інструкція on error дозволяє створювати процедури обробки помилок. Ця інструкція задається у вигляді **return 0 if x<0**

Для обробки помилок корисна також функція error (S), що, будучи поміщеною в програмний модуль, при виникненні помилки виводить спливаючу підказку з повідомленням, що зберігається в символній змінній S.

Найпростіші приклади створення програмних модулів

Незважаючи на скромність набору програмних засобів, наявних в Mathcad, вони дають системі саме ті можливості, які раніше попросту були відсутні: завдання спеціальних функцій, завдання різних видів циклів (у тому числі вкладених), спрощення алгоритмів ряду обчислень і реалізацію різних ітераційних і рекурсивних процедур. Рекомендується уважно вивчити фрагмент документа Mathcad, наведений нижче, який ілюструє частину цих можливостей.

Зверніть особливу увагу на приклад обчислення факторіала. Тут один програмний модуль задається усередині іншого. Загалом кажучи, для декількох підмодулів, які повинні виконуватися в складі циклів, служить команда Add Line (додати лінію), що додає в модуль додаткову вертикальну рису для підмодуля.

Програмний модуль, по суті, є функцією, але описаною із застосуванням згаданих програмних засобів. Вона повертає значення, обумовлене останньою інструкцією (якщо не передбачене інше за допомогою інструкції return). Це значить, що після такого модуля, виділеного як цілий блок, можна поставити знак рівності для виводу результату його роботи. У блоці можуть утримуватися будь-які оператори й функції вхідної мови системи. Для передачі в блок значень змінних можна використати змінні документа, які поводяться в блоці як глобальні.

Звичайно модулю привласнюється ім'я зі списком змінних, після якого йде оператор присвоювання :=. Змінні в списку є локальними, і їм можна привласнювати значення при виклику функції, заданої модулем. Локальний характер таких змінних дозволяє використати для їхніх ідентифікаторів ті ж імена, що й у глобальних змінних документа. Однак краще цього не робити й призначати різні імена для локальних змінних програмних модулів і змінних документа.

ЗАСТОСУВАННЯ ПРОГРАМНИХ БЛОКІВ

Застосування умовного оператора if в програмному блоці:

$$\text{abs}(x) := \begin{cases} -x & \text{if } x < 0 \\ x & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\text{abs}(-5) = 5 \qquad \text{abs}(5) = 5$$

Застосування оператора циклу for для обчислення суми та добутку послідовності цілих чисел від 1 до n:

$$\text{sum}(n) := \begin{cases} s \leftarrow 0 \\ \text{for } i \in 1..n \\ s \leftarrow s + i \end{cases}$$

$$\text{sum}(10) = 55 \qquad \text{sum}(20) = 210$$

```

prod(n) := | p ← 1
           | for i ∈ 1.. n
           |   p ← p·i
           | p

```

prod(3) = 6 prod(10) = 3.629 × 10⁶

Застосування операторів while та break для обчислення факторіалу:

```

Fact(n) := | f ← 1
           | while n ← n - 1
           |   f ← f·(n + 1)
           | f

```

Fact(3) = 6 Fact(10) = 3.629 × 10⁶

Обробка помилок у програмних модулях

```

F(n) := | f ← n
        | while 1
        |   | f ← f·(n - 1)
        |   | n ← n - 1
        |   | break if n = 1
        | f

```

F(3) = 6 F(10) = 3.629 × 10⁶

Нижче наведений фрагмент документа Mathcad із прикладами застосування інструкцій on error й return, а також прикладом дії функції error, що задає вивід спливаючої підказки при вказівці мишею на вираження, що містить помилку.

У цих прикладах треба звернути увагу на два моменти. Перший - можливість застосування інструкції on error поза програмним блоком для завдання функції sin x(x) з до визначенням її. Другий - застосування цієї інструкції для рішення рівняння, що має комплексних корінь. Коли при такому рішенні задається початкове значення x (дійсне число), то функція f(x) викликає помилку. Вона виправляється за допомогою інструкції on error при завданні функції, що має процедуру обробки помилок.

Таким чином, інструкція on error фактично відіграє роль процедури обробки помилок. Вона дозволяє створювати програмні модулі, захищені від грубих помилок.

ЗАСТОСУВАННЯ СИСТЕМНИХ ДИРЕКТИВ return ТА on error

```

F(i) := | return "One" if i = 1
        | return "Two" if i = 2
        | error("Çíà÷ áíÿ íàì°!!!" ) otherwise

```

F(1) = "One"

F(2) = "Two"

F(3) =

Значення немає!!!

$$S(x) := \begin{cases} \text{return } 1 & \text{if } x = 0 \\ \frac{\sin(x)}{x} & \text{otherwise} \end{cases}$$

$S(0) = 1$ $S(1) = 0.841$ $S(-1) = 0.841$

$$y1(x) := \left(\frac{1}{x}\right) \cdot \sin(x)$$

$y(0) = 1$ $y(1) = 0.841$ $y(-1) = 0.841$

Помилка!

$$f(x) := x^2 + 9$$

$$x := -1$$

$$R(f, x) := \text{root}(f(x), x)$$

$$R(f, 1) = -3i$$

$$RF(f, x) := \begin{cases} a \leftarrow x \cdot \sqrt{-1} \\ R(f, a) & \text{on error } R(f, x) \end{cases}$$

$x := 1$ $RF(f, x) = -3i$
 $x := -1$ $RF(f, x) = 3i$

Помилки немає

Модуль побудови точок у просторі

Нижче показаний фрагмент документа Mathcad із прикладом застосування програмного модуля для зображення в тривимірному просторі точок з координатами і $f(x, y)$, де $f(x, y)$ - деяка функція. Точки зображені на тлі паралелепіпеда, усередині якого вони перебувають. Цей приклад ілюструє можливість застосування усередині програмного модуля графічних функцій - у цьому випадку функції mesh.

ЗАСТОСУВАННЯ ПРОГРАМНОГО МУДУЛЯ ДЛЯ ПОБУДОВИ ТОЧОК ГРАФІКУ ФУНКЦІЇ $f(x, y)$

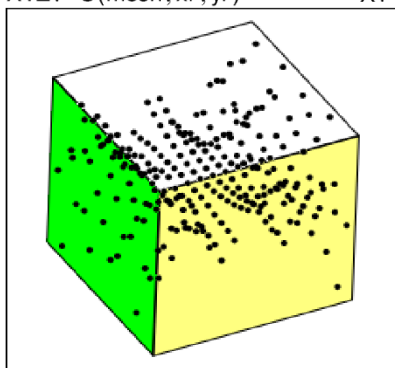
$$f(x, y) := x^3 \cdot \sin(4 \cdot y) + y^2 \cdot \cos(3 \cdot x)$$

$xr := \pi$ $yr := \pi$ **mesh := 15**

```

S(mesh, xr, yr) :=
  count ← 0
  for i ∈ 0.. mesh
    for j ∈ 0.. mesh
      x ← -|xr| +  $\frac{2 \cdot |xr| \cdot i}{\text{mesh}}$ 
      y ← -|yr| +  $\frac{2 \cdot |yr| \cdot j}{\text{mesh}}$ 
      c<count> ←  $\begin{pmatrix} x \\ y \\ f(x, y) \end{pmatrix}$ 
      count ← count + 1
  cT
XYZ := S(mesh, xr, yr)
X := XYZ<0>
Y := XYZ<1>
Z := XYZ<2>

```



(X, Y, Z)

Побудова фрактала «кукурудза»

До числа цікавих розділів математики ставляться фрактали - поверхні, малі частини яких як би повторюють загальну структуру поверхні. Фрактальна геометрія - особлива область математичної графіки. Не занадто вторгаючись у неї, розглянемо один з документів Mathcad, у якому задана побудова фрактальної поверхні, що нагадує осередку кукурудзи.

ПОБУДОВА ФРАКТАЛУ - "КУКУРУДЗА"

$$x_{n+1} = x_n - h \cdot f(y_n) \qquad y_{n+1} = y_n - h \cdot f(x_n)$$

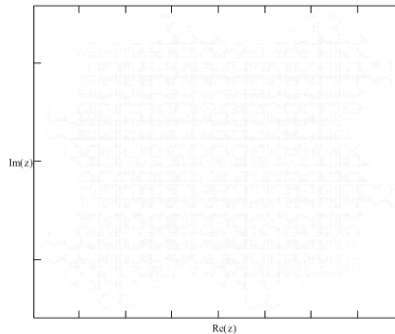
$$\frac{dx}{dt} = -f(y) \qquad \frac{dy}{dt} = -f(x) \qquad f(z) := \sin(z + \tan(3 \cdot z))$$

```

popcorn (N,h,a) :=
  t ← -1
  d ← 2· $\frac{a}{N}$ 
  for j ∈ 0..N
    for k ∈ 0..N
      t ← t + 1
      xt ← d·j - a
      yt ← d·k - a
      for n ∈ 0..N
        xx ← xt - h·f(yt)
        yy ← yt - h·f(xt)
        t ← t + 1
        xt ← xx
        yt ← yy
        zt ← xt + yt·i
  z
  
```

N := 50 h := 0.05 a := 6

z := popcorn (N,h,a)



Цей приклад наведений в підтримку програмування в системі Mathcad. Крім того, це гарний приклад організації рекуррентних обчислень і застосування програмного оператора циклу.

Фрагмент документа Mathcad із фракталом, обумовленим цим програмним модулем, дійсно нагадує комірчасту структуру кукурудзяного качана.

Заключні зауваження по програмуванню

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

Взагалі треба відзначити, що проблема включення в документи Mathcad програмних блоків вирішені добірно й красиво - такі блоки часом просто

прикрашають документи й дають можливість користуватися всіма способами не тільки математично орієнтованої вхідної мови Mathcad, але й класичного програмування.

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

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

Нарешті, слід зазначити ще одну важливу можливість - застосування відкомпільованих додаткових бібліотек, що розширюють можливості ядра системи, а також спеціальних модулів, що виконуються, які обновляють версії системи. Їх можна одержати в розроблювача через Інтернет або електронну пошту. Ці модулі звичайно зберігаються в основній папці Mathcad і запускаються як самостійні програми. Після однократного виконання вони модифікують поточну версію Mathcad, перетворюючи її в чергову, могутнішу.

ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.
Перейти до оформлення звіту.

АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

ексти програм мають бути такими, як наведено нижче.

Завдання роботи.

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

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

Максимізація функції методом сканування:

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

Задайте будь ласка кроком:

$$h := 0.1$$

$T1(a, b, E, h) :=$

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

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

Максимум заданої Вами функції на заданому Вами інтервалі знаходиться в точці аргументу:

$$Arg_1 = 1.634$$

Значення максимуму функції:

$$Func_1 = 234.1$$

Знайдено за наступну кількість ітерацій:

$$Iter_1 = 1.8 \times 10^4$$

1. Максимізація функції методом діхотомії

$T2(a, b, \varepsilon) :=$

$$\begin{array}{l} Len \leftarrow b - a \\ x0 \leftarrow \frac{(a+b)}{2} \\ F0 \leftarrow F(x0) \quad Func_2 := T2(a, b, E)_1 \\ k \leftarrow 1 \\ \text{while } Len \geq \varepsilon \\ \quad \begin{array}{l} x1 \leftarrow a + \frac{Len}{4} \\ x2 \leftarrow b - \frac{Len}{4} \\ F1 \leftarrow F(x1) \\ F2 \leftarrow F(x2) \\ k \leftarrow k + 2 \\ \text{if } F1 = F2 \\ \quad \begin{array}{l} a \leftarrow x1 \\ b \leftarrow x2 \end{array} \\ \text{otherwise} \\ \quad \begin{array}{l} \text{if } F1 > F0 \\ \quad \begin{array}{l} b \leftarrow x0 \\ x0 \leftarrow x1 \\ F0 \leftarrow F1 \end{array} \\ \text{otherwise} \\ \quad \begin{array}{l} a \leftarrow x0 \\ x0 \leftarrow x2 \\ F0 \leftarrow F2 \end{array} \end{array} \\ Len \leftarrow b - a \\ q \leftarrow 1 \\ \left(\begin{array}{c} x0 \\ F0 \\ k \end{array} \right) \end{array}$$

$Arg_2 := T2(a, b, E)_0$

Максимум заданої Вами функції на заданому Вами інтервалі знаходиться в точці аргументу:

$$Arg_2 = 1.634$$

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

Знайдено за наступну кількість ітерацій: $\text{Iter}_2 := T2(a, b, \varepsilon)_2$ $\text{Iter}_2 = 37$

2. Максимізація функції методом «Золотого перетину»

```

T3(a,b,ε) := k ←  $\frac{\sqrt{5}-1}{2}$ 
              L ← b - a
              x1 ← b - L·k
              x2 ← a + L·k
              s ← 2
              while L > ε
                F1 ← F(x1)
                F2 ← F(x2)
                if F1 = F2
                  a ← x1
                  b ← x2
                  L ← b - a
                  break if L ≤ ε
                otherwise
                  x1 ← b - L·k
                  x2 ← a + L·k
                  s ← s + 2
                otherwise
                  if F1 > F2
                    b ← x2
                    L ← b - a
                    break if L ≤ ε
                  otherwise
                    x2 ← x1
                    x1 ← b - L·k
                    s ← s + 1
                otherwise
                  a ← x1
                  L ← b - a
                  break if L ≤ ε
                otherwise
                  x1 ← x2
                  x2 ← a + L·k
                  s ← s + 1
              (  $\left( \begin{array}{c} \frac{a+b}{2} \\ F\left(\frac{a+b}{2}\right) \\ s \end{array} \right)$  )

```

$$\text{Arg}_3 := \mathbb{T}(a, b, \epsilon)_0$$

$$\text{Func}_3 := \mathbb{T}(a, b, \epsilon)_1$$

$$\text{Iter}_3 := \mathbb{T}(a, b, \epsilon)_2$$

Максимум заданої Вами функції на заданому Вами інтервалі знаходиться в точці аргументу:

$$\text{Arg}_3 = 1.634$$

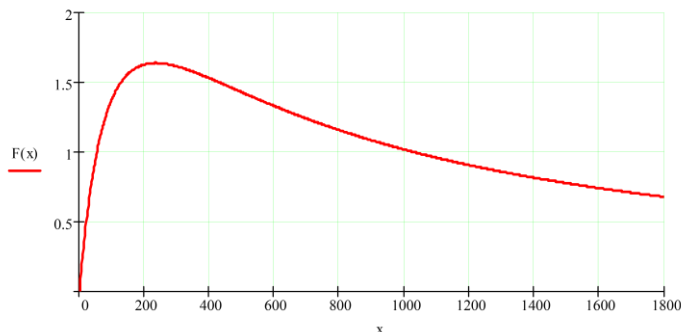
Значення максимуму функції:

$$\text{Func}_3 = 234.148$$

Знайдено за наступну кількість ітерацій:

$$\text{Iter}_3 = 27$$

Графік функції $F(x)$:



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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №16

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

Література

1. Самолов Н.А. Моделирование в химической технологии и расчет реакторов: Учеб.пособие: Уфа ООО «Монография», 2005. – 224 с.
2. Гунич С.В., Янчуковская Е.В. Математическое моделирование и расчет на ЭВМ химико-технологических процессов. Примеры и задачи. Часть I: учеб. пособие. — Иркутск: Изд-во ИрГТУ, 2010. — 216 с.
3. Гунич С.В., Янчуковская Е.В. Математическое моделирование и расчет на ЭВМ химико-технологических процессов. Примеры и задачи. Часть II: учеб. пособие. — Иркутск: Изд-во ИрГТУ, 2010. — 216 с.
4. Тovaжнянский Л.Л. Вычислительная математика и программирование в химической технологии. –Х.:НТУ «ХПИ». 2005. – 258 с.
5. Загальна хімічна технологія: підручник/ В.Т. Яворський, Т.В. Перекупко, З.О. Знак, Л.В. Савчук. – Львів: видавництво НТУ «Львівська політехніка», 2005.– 552 с.
6. Комп'ютерні системи проектування. Теорія і практика./ Ред.: М.В. Лобур. –Л.: Львів- Політехніка. 2004. –183 с.
7. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической промышленности. – М.: Химия. 1985. – 448 с.
8. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии. –М.: Химия. 1985. – 612 с.

Навчально-методичне видання

Автори: **Онищук** Оксана Олександрівна
Кормош Жолт Олександрович

Математичне моделювання та застосування ЕОМ в хімічній технології

*методичні рекомендації
для лабораторних робіт*

Друкується в авторській редакції