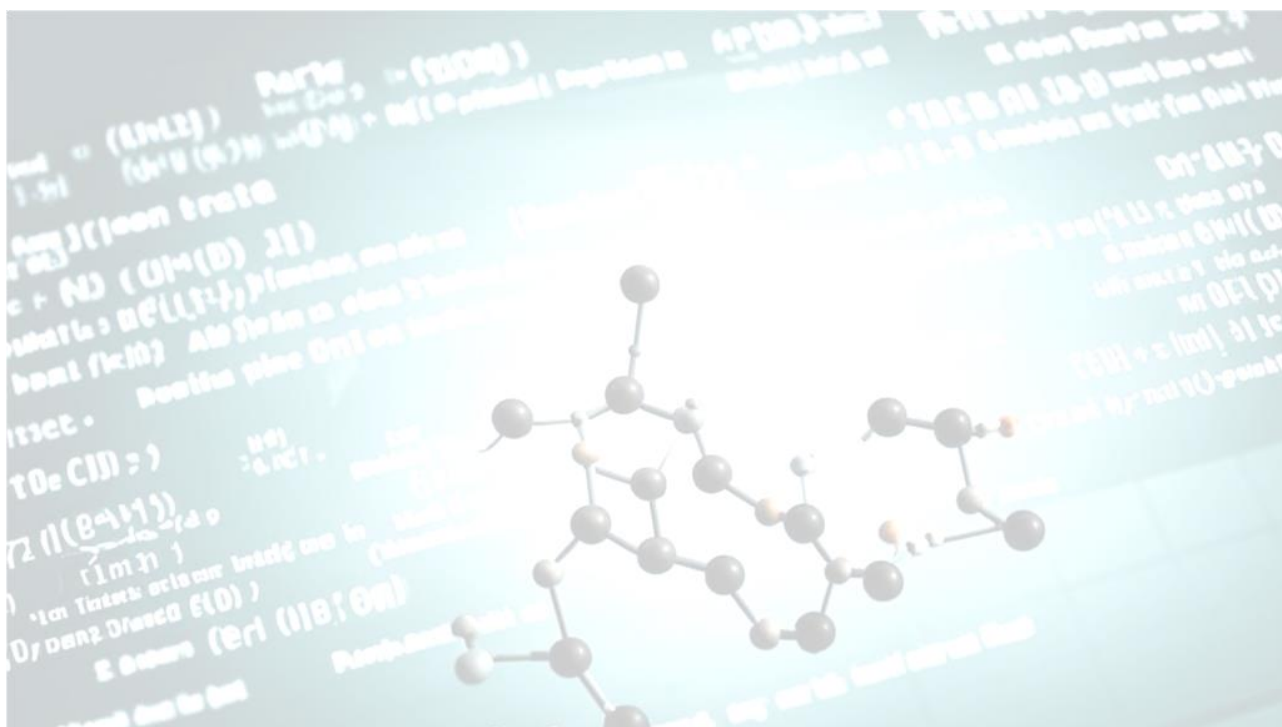


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Амурский государственный университет



Максимова Н.Н.

Моделирование химико-технологических процессов

Учебно-методическое пособие

Благовещенск 2025

*Рекомендовано
учебно-методическим советом университета*

Рецензенты:

*Труфанова Т.В., доцент кафедры математического анализа и моделирования ФГБОУ ВО «АмГУ»,
канд. техн. наук*

Максимова, Н.Н.

Моделирование химико-технологических процессов: учебно-методическое пособие / Амур. гос. ун-т; Н.Н. Максимова. – Благовещенск: АмГУ, 2025. – 171 с.

Целью данного пособия является выработка практических навыков построения и исследования математических моделей в химии и химической технологии.

В первой части изложены основы работы в ППП MATLAB; материал позволит получить практические навыки работы с указанным пакетом; все остальные разделы ориентированы на исследование моделей в данной программе. В лабораторных работах №№ 2-9 представлены математические модели, построение которых основано на детерминированном подходе, а также представлены методы исследования данных моделей. Лабораторные работы №10-11 посвящены обработке экспериментальных данных и построению экспериментально-статистических моделей на основе недетерминированного подхода. Разделы №№1-11 дополняются заданиями для самостоятельной работы, что позволит закрепить навыки построения и исследования моделей химико-технологических процессов.

Учебно-методическое пособие предназначено для студентов, обучающихся по направлению 18.03.01 – «Химическая технология» (в рамках изучения дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов»), а также для студентов других направлений и специальностей, изучающих математическое моделирование.

© Амурский государственный университет, 2025

© Максимова, Н.Н., 2025

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что **назначение процессов химической технологии** – изменение свойств перерабатываемых материальных тел за счет взаимодействия между ними и окружающей средой. Это взаимодействие приводит к перераспределению массы и энергии между отдельными частями системы и между системой и окружающей средой. Конкретные формы таких взаимодействий определяются их физической природой.

При **моделировании технологического процесса** в общем случае нужно определить потоки количества движения, энергии и массы между отдельными частями системы и окружающей средой.

Уравнения скорости переноса количества движения, энергии и массы не содержат никаких специальных ограничений относительно конкретных особенностей процессов или физических свойств участвующих в них материальных объектов. Следовательно, эти уравнения применимы к любым процессам.

При практическом использовании уравнений переноса на изменения переменных величин налагаются ограничения, вытекающие из свойств рассматриваемого конкретного процесса.

Известно, что любой процесс протекает в системе с определенной геометрической характеристикой и характеризуется физическими параметрами. Перечисленные сведения определяют геометрические и физические свойства системы. Кроме них должны быть заданы условия взаимодействия системы (граничные условия) и условия, характерные для того момента, который принимается за начало отсчета (начальные условия).

Геометрические и физические характеристики системы совместно с граничными и начальными условиями содержат комплекс сведений, выделяющих данный конкретный процесс из класса процессов, описываемых соответствующими уравнениями переноса. Так, если объектом исследования является движение жидкости в трубе, то должны быть заданы диаметр, длина трубы и ее форма (**геометрические характеристики**), свойства жидкости (**физические характеристики**), **граничные условия** (для вязкой жидкости – равенство нулю составляющих скорости на границе со стенкой) и **начальные условия** (например, профиль скоростей на входе в трубу).

Дифференциальные уравнения переноса, геометрические и физические характеристики системы, граничные и начальные условия составляют математическое описание процесса. Моделирование заключается в интегрировании соответствующего уравнения переноса (или системы уравнений) с учетом перечисленного выше комплекса сведений, характеризующего данный объект.

Вследствие сложности уравнений переноса их интегрирование представляет большие трудности, однако его можно упростить путем использования метода численного интегрирования с помощью ЭВМ. Результатом моделирования является получение числовых значений искомых величин.

Математическое описание воспроизводит наиболее существенные стороны процесса. Поэтому возможно, варьируя отдельные параметры, получать сведения о влиянии этих вариаций на показатели процесса.

Химико-технологический процесс (ХТП) – совокупность операций по переработке сырья с целью получения требуемых продуктов. Он может быть реализован как в отдельном аппарате, так и в определенной последовательности аппаратов.

В состав математической модели ХТП могут входить следующие группы уравнений:

1. **Уравнения баланса масс и энергии**, записанные с учетом гидродинамических структур движения потоков (данная группа уравнений характеризует распределение в потоках температуры, составов и связанных с ними свойств, например, плотности, вязкости, теплоемкости и т.д.).

2. **Уравнения элементарных процессов химических реакций**: тепло- и массообмена, фазовых превращений и т.п.

3. **Теоретические, полуэмпирические соотношения между различными параметрами процесса**, например, зависимость коэффициента массопередачи от скоростей потоков фаз, зависимость теплоемкости раствора от состава, равновесные соотношения и т.д.

4. **Ограничения на параметры процесса**, например, при моделировании процессов с участием многокомпонентных смесей должно выполняться следующее условие: сумма относительных концентраций всех компонентов равна единице, а концентрация любого компонента может быть только положительной и заключена между 0 и 1.

С математической точки зрения, перечисленные уравнения делятся на следующие типы: конечные алгебраические или трансцендентные уравнения, обыкновенные дифференциальные уравнения, дифференциальные уравнения в частных производных и т.д.

К **конечным уравнениям** обычно сводится математическое описание объектов с сосредоточенными параметрами в установившемся режиме, а также различные соотношения эмпирического характера.

Обыкновенные дифференциальные уравнения используются для математического описания нестационарных режимов объектов с сосредоточенными параметрами, а также установившихся режимов объектов с распределен-

ными параметрами, в которых значения параметров зависят только от одной пространственной координаты.

Дифференциальные уравнения в частных производных используются для описания объектов с распределенными параметрами.

Математическое описание процесса состоит в формализации гипотез, т.е. записи математических соотношений, связывающих переменные и параметры процесса. Под переменными понимают величины, характеризующие состояние процесса (концентрация, температура, давление и т.д.), под параметрами – некоторые коэффициенты (постоянные или переменные), которые отображают физические, физико-химические, режимные и конструктивные характеристики объекта (константа скорости реакции, коэффициенты массопередачи, теплопередачи, скорости потоков, геометрические размеры и т.д.).

Несмотря на специфические особенности математических моделей отдельных стадий ХТП, методика их построения имеет много общего. Однако **методы построения модели будут разными в зависимости от целей моделирования и степени полноты знаний об исследуемом объекте**. В этом смысле различают вероятностный и детерминированный подходы.

Вероятностный подход используется, когда знаний о внутренней структуре объекта недостаточно или они отсутствуют совсем. Тогда математическую модель получают на основе некоторой статистической информации о поведении объекта, измеренной на ее входах и выходах. Уравнение модели при этом представляет собой, как правило, полином заданной степени (уравнение регрессии), его использование для анализа объекта имеет существенные ограничения.

Детерминированный подход используется тогда, когда есть определенная информация о внутренней структуре исследуемого объекта. Он основан на использовании физических и физико-химических законов и закономерностей, свойственных исследуемому процессу.

В зависимости от целей исследования строят или **динамическую** или **статическую модель**, что приводит к использованию дифференциального или алгебраического оператора.

Целью данного пособия является выработка практических навыков построения и исследования математических моделей в химии и химической технологии.

Учебно-методическое пособие состоит из введения и одиннадцати работ. В первой лабораторной работе изложены основы работы в ППП MATLAB; материал позволит получить практические навыки работы с указанным пакетом. В лабораторных работах №№ 2-9 представлены математические модели, построение которых основано на детерминированном подходе, а также представ-

лены методы исследования данных моделей. Лабораторные работы №10-11 посвящена обработке экспериментальных данных и построению экспериментально-статистических моделей на основе недетерминированного подхода. Все разделы дополняются заданиями для самостоятельной работы, что позволит закрепить навыки построения и исследования моделей химико-технологических процессов.

Учебно-методическое пособие предназначено для студентов, обучающихся по направлению 18.03.01 – «Химическая технология» (в рамках изучения дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов и производств»). Пособие может быть полезно студентам всех форм и ступеней обучения, интересующимися вопросами моделирования в естественных науках.

Для более глубокого изучения дисциплины рекомендован весьма обширный список литературы. Помимо специальной литературы в библиографическом списке представлены издания по методам решения дифференциальных уравнений, численным методам, методам математической статистики и методам обработки экспериментальных данных.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 1 ОСНОВНЫЕ ПРИЕМЫ РАБОТЫ С ПАКЕТОМ MATLAB

MATLAB – интерактивный матрично-ориентированный пакет, предназначенный для выполнения научных и инженерных расчетов. Пакет содержит обширную библиотеку программ по численным методам, использует двух- и трехмерную графику, а также форматы языков высокого уровня.

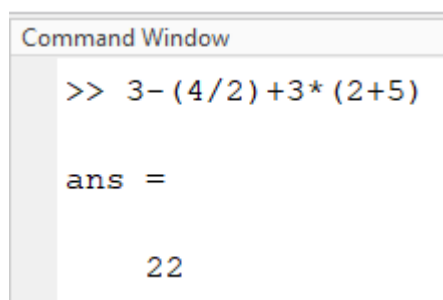
Примечание. Данные лабораторные работы подготовлены для ППП MATLAB версии R2022b. Интерфейс других версий может отличаться, однако основные принципы работы остаются неизменными.

1.1. Простейшие вычисления в среде MATLAB

Встроенные математические функции позволяют находить значения различных выражений. MATLAB предоставляет возможность управления форматом вывода результата. Команды для вычисления выражения имеют вид, свойственный всем языкам программирования высокого уровня.

Приступим к работе в пакете.

Наберите в командной строке « $3-(4/2)+3*(2+5)$ » и нажмите <Enter>. В результате в командном окне MATLAB отображается следующее:



```
Command Window
>> 3 - (4/2) + 3 * (2+5)

ans =

    22
```

Что сделала программа MATLAB? Сначала она вычислила значение выражения « $3-(4/2)+3*(2+5)$ », затем записала результат в специальную переменную ans и вывела ее значение, равное 22, в командное окно. Переменная ans автоматически создается, когда вычисляемое выражение не присваивается некоторой переменной.

Вид, в котором выводится результат вычислений, зависит от формата вывода, установленного в MATLAB.

Требуемый формат вывода результата определяется пользователем из меню рабочей среды MATLAB. Выберите на вкладке Home пункт Preferences. На экране появится диалоговое окно Preferences. Для установки формата вывода следует убедиться, что в списке левой панели выбран пункт Command Window.

Задание формата производится из раскрывающегося списка Numeric format панели Text display. В этом же окне можно изменить и другие настройки, например, размер шрифта.

Для того, чтобы изменить формат вывода данных, можно также в командной строке ввести определенную команду, например, «format long», результатом будут числа с 15 знаками после запятой. Чтобы посмотреть, какие форматы есть и как они предоставляют результат, необходимо в диалоговом окне набрать команду *help format*.

Команда **help** выдает на экран все команды, выполняемые **MATLAB**. Так, при выборе команды **help elfun** в командное окно выводится список всех встроенных элементарных функций с их кратким описанием.

Элементарные функции:

sin, cos, tan, cot – синус, косинус, тангенс и котангенс;

sec, csc – секанс, косеканс;

asin, acos, atan, acot – арксинус, арккосинус, арктангенс и арккотангенс;

asec, acsc – арксеканс, арккосеканс.

Примечание. Аргументы тригонометрических функций должны быть выражены в радианах.

Обратные тригонометрические функции возвращают результат также в радианах.

sinh, cosh, tanh, coth – гиперболические синус, косинус, тангенс и котангенс;

sech, csch – гиперболические секанс и косеканс;

asinh, acosh, atanh, acoth – гиперболические арксинус, арккосинус, арктангенс и арккотангенс;

asech, acsch – гиперболические арксеканс и арккосеканс;

exp – экспоненциальная функция;

log – натуральный логарифм;

log10 – десятичный логарифм;

log2 – логарифм по основанию 2;

pow2 – возведение числа 2 в степень;

sqrt – квадратный корень;

nextpow2 – степень, в которую надо возвести число 2, чтобы получить ближайшее число (больше или равное аргументу);

fix – округление до ближайшего целого по направлению к нулю;

floor, ceil – округление до ближайшего целого по направлению к минус бесконечности или плюс бесконечности;
round – округление до ближайшего целого;
mod – остаток от целочисленного деления (со знаком второго аргумента);
rem – остаток от целочисленного деления (со знаком первого аргумента);
sign – знак числа.

Арифметические операции в **MATLAB** выполняются в обычном порядке, свойственном большинству языков программирования:

возведение в степень – ^;
умножение и деление – *, /;
сложение и вычитание – +, -.

Для изменения порядка выполнения арифметических операторов следует использовать круглые скобки.

Как и во всех языках программирования, в **MATLAB** предусмотрена возможность работы с переменными. Причем пользователь не должен заботиться о том, какие значения будет принимать переменная (комплексные, вещественные или только целые). Для того чтобы присвоить, например, переменной z значение 1.45, достаточно написать в командной строке z=1.45, при этом MATLAB сразу же выведет значение z:

```
>> z=1.45  
  
z =  
  
1.4500
```

Примечание. Для ввода длинных формул или команд в командную строку следует поставить три точки (подряд, без пробелов), нажать клавишу <Enter> и продолжить набор формулы на следующей строке. Так можно разместить выражение на нескольких строках. **MATLAB** вычислит все выражение или выполнит команду после нажатия на <Enter> в последней строке (в которой нет трех идущих подряд точек).

MATLAB запоминает значения всех переменных, определенных во время сеанса работы. Если после ввода примера, приведенного выше, были проделаны еще какие-либо вычисления, и возникла необходимость вывести значение z, то следует просто набрать z в командной строке и нажать <Enter>:

```
>> z
z =
    1.4500
```

Примечание. Для очистки командного окна следует использовать команду **clc**. Для удаления значений всех переменных можно ввести в командном окне команду **clear** или удалить вручную в окне *Workspace*.

Следует также понимать, что при закрытии программы все команды в командном окне и все данные, введенные в командном окне, будут уничтожены. В окне *Command History*

1.2. Матрицы и действия над ними

MATLAB работает с одним видом объектов – числовыми прямоугольными матрицами, элементами которых в общем случае могут быть комплексные числа. Все элементы представляют собой матрицы, матрицы 1x1 интерпретируются как скаляры, матрицы с одной строкой или с одним столбцом – как вектора. В системе **MATLAB** матрицы могут быть созданы разным способом:

- 1) введены явно с помощью списка элементов;
- 2) сгенерированы встроенными операторами и функциями;
- 3) созданы в *m*-файлах;
- 4) загружены из внешнего файла данных.

Ввод матриц, простейшие операции

Вводить небольшие по размеру матрицы удобно прямо из командной строки, при этом строки при наборе отделяются точкой с запятой.

```
>> A = [1 2 3; 4 5 6; 7 8 9]
A =
     1     2     3
     4     5     6
     7     8     9
```

Либо вводить следующим образом:

```

>> K = [4 5 6
4 7 8
5 4 2]

K =

     4     5     6
     4     7     8
     5     4     2

```

Возможны и другие варианты, о которых можно прочитать в специализированной литературе.

Доступ к элементам матриц осуществляется при помощи двух индексных номеров строки и столбца, заключенных в круглые скобки, например,

```

>> A(2,3)

ans =

     6

```

Обращение к элементам вектора возможно с указанием одного номера (порядкового). Например,

```

>> v = [-1 4 5 -6 8]

v =

    -1     4     5    -6     8

>> v(3)

ans =

     5

```

Элементы матриц и векторов могут входить в состав выражений:

```
>> (A(1, 2) - K(2, 2))*v(5)
ans =
-40
```

В качестве индексов могут выступать векторы, содержащие номера нужных строк и столбцов. Например, для выделения элементов первой и второй строк второго и третьего столбцов введенной выше матрицы А достаточно ввести команды:

<pre>>> B = A([1, 2], [2, 3]) B = 2 3 5 6</pre>	<pre>>> C = A([1, 3], [3, 1]) C = 3 1 9 7</pre>	<pre>>> D = K(:, [2 1]) D = 5 4 7 4 4 5</pre>
---	---	--

В последнем варианте команда «:» означает, что будут браться все элементы указанных столбцов (второго и первого в указанном порядке)

При использовании матричных операций следует помнить, что для сложения или вычитания матрицы должны быть одного размера, а при перемножении число столбцов первой матрицы обязано равняться числу строк второй матрицы. Сложение и вычитание матриц, так же как чисел и векторов, осуществляется при помощи знаков плюс и минус. Для умножения матриц предназначена "*". Умножение матрицы на число тоже осуществляется при помощи "*", причем умножать на число можно как справа, так и слева. Транспонирование матрицы производится при помощи «'». Деление производится при помощи символов / (правое деление) и \ (левое деление).

В **MATLAB** парные квадратные скобки [] обозначают пустой массив, который, в частности, позволяет удалять строки и столбцы матрицы. Для удаления строки следует присвоить ей пустой массив. Удалите, например, первую строку квадратной матрицы E, а затем в полученной матрице заменим элементы четвертого столбца на элементы вектора P (соответствующей размерности):

```

>> E = [3 -5 6 9; 8 6 4 -1; 6 5 4 -2; 3 -3 -2 7]

E =

     3     -5      6      9
     8      6      4     -1
     6      5      4     -2
     3     -3     -2      7

>> E(1, :) = []

E =

     8      6      4     -1
     6      5      4     -2
     3     -3     -2      7

>> P = [0; 6; 0]

P =

     0
     6
     0

>> E(:, 4) = P

E =

     8      6      4      0
     6      5      4      6
     3     -3     -2      0

```

Примечание. Не всегда есть необходимость выводить на экран какие-либо данные; для этого в конце строки, задающей значение выражения, следует поставить знак «;».

Создание матриц специального вида

Заполнение прямоугольной матрицы нулями производится встроенной функцией **zeros**, аргументами которой являются число строк и столбцов матрицы. Один аргумент функции **zeros** приводит к образованию квадратной матрицы заданного размера. Единичная матрица инициализируется при помощи функции **eye**. Функция **eye** с двумя аргументами создает прямоугольную матрицу, у которой на главной диагонали стоят единицы, а остальные элементы

равны нулю. Матрица, состоящая из единиц, образуется в результате вызова функции **ones**. Использование одного аргумента в **ones** приводит к созданию квадратной матрицы, состоящей из единиц.

<pre>>> R1 = zeros(2) R1 = 0 0 0 0</pre>	<pre>>> R2 = eye(3) R2 = 1 0 0 0 1 0 0 0 1</pre>
<pre>>> R3 = eye(3, 2) R3 = 1 0 0 1 0 0</pre>	<pre>>> R5 = ones(3, 2) R5 = 1 1 1 1 1 1</pre>

MATLAB предоставляет возможность заполнения матриц случайными элементами. Результатом функции **rand** является матрица чисел, распределенных случайным образом между нулем и единицей, а функции **randn** – матрица чисел, распределенных по нормальному закону. Обращение к функциям **rand** и **randn** с одним входным аргументом приводит к формированию квадратных матриц. Часто возникает необходимость создания диагональных матриц, т. е. матриц, у которых все внедиагональные элементы равны нулю. Функция **diag(x)** формирует диагональную матрицу из вектор-столбца или вектор-строки x , располагая их элементы по диагонали матрицы. Для заполнения не главной, а побочной диагонали предусмотрена возможность вызова функции **diag** с двумя аргументами. В этом случае второй аргумент означает, насколько побочная диагональ отстоит от главной, а его знак указывает на направление, плюс – вверх, минус – вниз от главной диагонали. Функция **diag(A)** служит и для выделения диагонали матрицы A в вектор.

<pre>>> S1 = rand(2) S1 = 0.8147 0.1270 0.9058 0.9134</pre>	<pre>>> S2 = diag([2 3]) S2 = 2 0 0 3</pre>
---	---

<pre>>> s3 = diag([2 3], 1) s3 = 0 2 0 0 0 3 0 0 0</pre>	<pre>>> s4 = diag(K) s4 = 4 7 2</pre>
---	--

Поэлементные операции с матрицами.

Умножение каждого элемента одной матрицы на соответствующий элемент другой производится при помощи оператора «*». Для деления элементов первой матрицы на соответствующие элементы второй используется «./», а для деления элементов второй матрицы на соответствующие элементы первой служит «.\». Поэлементное возведение в степень осуществляется при помощи «.^». Показатель степени может быть матрицей того же размера, что и матрица, возводимая в степень. При этом элементы первой матрицы возводятся в степени, равные элементам второй матрицы.

Рассмотрим все эти операции на примерах матриц A и K, описанных выше:

<pre>>> A*K ans = 27 31 28 66 79 76 105 127 124</pre>	<pre>>> A^2 ans = 30 36 42 66 81 96 102 126 150</pre>	<pre>>> A./K ans = 0.2500 0.4000 0.5000 1.0000 0.7143 0.7500 1.4000 2.0000 4.5000</pre>
<pre>>> A.*K ans = 4 10 18 16 35 48 35 32 18</pre>	<pre>>> A.^2 ans = 1 4 9 16 25 36 49 64 81</pre>	<pre>>> A.\K ans = 4.0000 2.5000 2.0000 1.0000 1.4000 1.3333 0.7143 0.5000 0.2222</pre>
<pre>>> A.^K ans = 1 32 729 256 78125 1679616 16807 4096 81</pre>		

Вычисление математических функций от элементов матриц

Очень важно сразу понять, что в книгах по теории матриц формула $\cos A$, где A – квадратная матрица, означает вычисление косинуса от матрицы, которое осуществляется при помощи разложения в ряд. В MATLAB имеется возможность вычисления функций от матриц. Запись $c = \cos(A)$ в MATLAB приводит к вычислению косинусов от элементов массива A и записи их в массив c того же размера, что и A . Аналогично вычисляются и другие математические функции.

Часто возникает необходимость использования векторных матричных функций.

Функция **sum** по умолчанию вычисляет сумму по столбцам, изменяя первый индекс массива при фиксированном втором. Для того чтобы производить суммирование по строкам, необходимо вызвать **sum** с двумя аргументами, указав место индекса, по которому следует суммировать. Функция **sum** суммирует или по строкам, или по столбцам, выдавая результат в виде вектора или вектор-строки. Аналогично работает и функция **prod**.

<pre>>> sum(A) ans = 12 15 18</pre>	<pre>>> sum(A, 2) ans = 6 15 24</pre>	<pre>>> prod(A) ans = 28 80 162</pre>
<pre>>> sum(A, 1) ans = 12 15 18</pre>	<pre>>> sum(sum(A)) ans = 45</pre>	<pre>>> prod(prod(A)) ans = 362880</pre>

Функция **sort** упорядочивает элементы каждого из столбцов матрицы в порядке возрастания. Вызов **sort** со вторым аргументом, равным двум, приводит к упорядочению элементов строк. Так же как и для векторов, функция **sort** позволяет получить матрицу индексов соответствия элементов исходной и упорядоченной матриц. Для этого необходимо вызвать **sort** с двумя выходными аргументами.

<pre>>> sort(K) ans = 4 4 2 4 5 6 5 7 8</pre>	<pre>>> [K1, b] = sort(K) K1 = 4 4 2 4 5 6 5 7 8</pre>
<pre>>> sort(K, 2) ans = 4 5 6 4 7 8 2 4 5</pre>	<pre>b = 1 3 3 2 1 1 3 2 2</pre>

Функции **max** и **min** вычисляют вектор-строку, содержащую максимальные или минимальные элементы в соответствующих столбцах матрицы. Для того чтобы узнать не только значения максимальных или минимальных элементов, но и их номера в столбцах, следует вызвать **max** или **min** так:

[mx, k] = max(M) или **[mn, n] = min(M)**.

Наиболее часто употребляемые команды:

max(max(M)) – максимальный элемент матрицы,

min(min(M)) – минимальный элемент матрицы,

inv – обратная матрица,

det – определитель матрицы,

size – размерность матрицы,

norm – норма вектора или матрицы,

rank – ранг матрицы.

<pre>>> S = [3 6 -3; 6 4 9; -1 -1 1; -5 3 1] S = 3 6 -3 6 4 9 -1 -1 1 -5 3 1</pre>	<pre>>> (max(S'))' ans = 6 9 1 3</pre>
--	--

<pre>>> min(S) ans = -5 -1 -3</pre>	<pre>>> max(S) ans = 6 6 9</pre>	<pre>>> size(S) ans = 4 3</pre>
<pre>>> min(min(S)) ans = -5</pre>	<pre>>> max(max(S)) ans = 9</pre>	<pre>>> rank(S) ans = 3</pre>
<pre>>> inv(A) Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND = 1.541976e-18. ans = 1.0e+16 * -0.4504 0.9007 -0.4504 0.9007 -1.8014 0.9007 -0.4504 0.9007 -0.4504</pre>		<pre>>> det(A) ans = 6.6613e-16</pre>
<pre>>> inv(K) ans = 0.6923 -0.5385 0.0769 -1.2308 0.8462 0.3077 0.7308 -0.3462 -0.3077</pre>	<pre>>> det(K) ans = -26.0000</pre>	
<pre>>> K^-1 ans = 0.6923 -0.5385 0.0769 -1.2308 0.8462 0.3077 0.7308 -0.3462 -0.3077</pre>	<pre>>> det(S) Error using det Matrix must be square.</pre>	

Более подробно про обработку матричных данных можно узнать, если вывести список всех встроенных функций обработки данных командой **help datafun**, а затем посмотреть информацию о нужной функции, например, **help max**, или обратиться к интерактивной справочной системе.

1.3. Построение графиков функций

Команду **plot** используют для построения графиков двумерных функций. Следующий пример иллюстрирует, как построить графики функций $y = \sin(x)$ и $y = 1/x$:

```
>> x = 0.5:0.1:pi; %задаем область с шагом 0.1
>> y = sin(x); %задаем значение первой функции
>> z = x.^-1; %задаем значение второй функции
>> plot(x, y, '*g', x, z, '-r') %строим графики
```

Результатом работы будет следующий график на рис. 1.1 (в **MATLAB** можно сохранять графики во многих форматах).

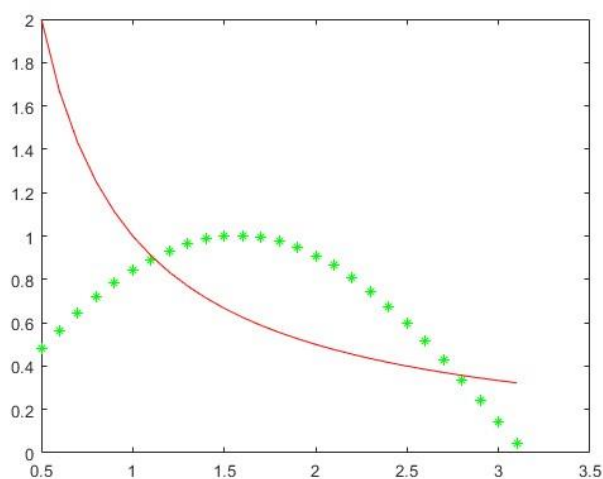


Рисунок 1.1 – Графики функций

После каждой пары «переменная-функция» можно указывать тип и цвет линии, которым следует построить график функции. Без их указания график тип и цвет выберется по умолчанию. Основные цвета и типы линий представлены в таблицах ниже.

Таблица 1.1 – Обозначение цвета линии графика

Маркер	Цвет линии
c	голубой
m	фиолетовый
y	желтый
r	красный
g	зеленый
b	синий

w	белый
k	черный

Таблица 1.2 – Обозначение типа точек графика

Маркер	Тип точек
.	точка
+	плюс
*	звездочка
o	кружок
x	крестик
s	квадрат
d	ромб
v	треугольник вершиной вниз
^	треугольник вершиной вверх
<	треугольник вершиной влево
>	треугольник вершиной вправо
p	пятиконечная звезда
h	шестиугольная звезда

Таблица 1.3 – Обозначение типа линии графика

Маркер	Тип линии
-	непрерывная
--	штриховая
:	пунктирная
-.	штрих-пунктирная

Для оформления графиков могут быть использованы следующие основные команды:

Таблица 1.4 – Команды оформления графика

Команда	Значение
grid on/off	Наносит/удаляет координатной сетки на графике
title('<текст>')	Размещает текст над графиком
text(x, y, '<текст>') text(x, y, z, '<текст>')	Помещает в заданной точке (x, y) двумерного или (x, y, z) трехмерного графика начало текста, указанного в качестве третьего аргумента

xlabel('<текст>') ylabel('<текст>') zlabel('<текст>')	Помещает текст для графика вдоль соответствующих осей координат
legend('<текст1>', '<текст2>', '<текст3>', ...)	Добавляет к текущему графику пояснение в виде указанных текстовых строк
figure	Создаёт новое (добавочное) графическое окно, и все последующие за ней команды построения графиков выводят их в новое окно
subplot(m, n, p)	Производит разбивку графического окна на несколько подокон; значение m указывает, на сколько частей разбивается окно по горизонтали, n – по вертикали, а p – номер подокна, куда будет выводиться очередной график
polar(phi, rho)	Реализует построение графика в полярной системе координат
comet(y) comet(x, y)	Рисует движение точки по траектории, заданной одномерным массивом y или массивами x и y, в виде головы и хвоста кометы

Разумеется, данный перечень является далеко неполным. Это наиболее часто используемые команды. Продемонстрируем работу этих команд на примерах.

Примечание. Перед работой рекомендуется очистить командное окно и рабочую область с помощью команд `clear` (удаляет все переменные в `Workspace`) и `clc` (очищает `Command Window`).

Сценарий:

```
>> x = 0:0.01:4*pi;
>> y = x - 2*sin(x);
>> plot(x, y, 'm')
>> grid on
>> title('График функции y=x-2*sin(x)')
>> xlabel('Ось абсцисс')
>> ylabel('Ось ординат')
>> ylabel('Ось ординат')
```

Результат работы на рис. 1.2.

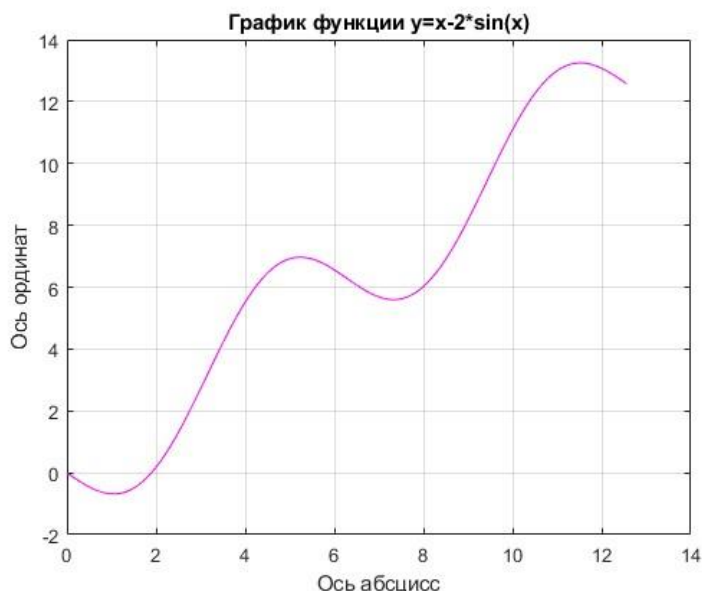


Рисунок 1.2 – График функции

Сценарий:

```
>> x = 0:0.2:20;
>> y1 = besselj(1, x);
>> y2 = besselj(2, x);
>> y5 = besselj(5, x);
>> plot(x, y1, '-', x, y2, '--', x, y5)
>> title('Графики функций Бесселя 1^{го}, 2^{го} и 5^{го} порядков')
>> legend('Функция Бесселя 1^{го} порядка', ...
'Функция Бесселя 2^{го} порядка', 'Функция Бесселя 5^{го} порядка')
```

Результат работы на рис. 1.3.

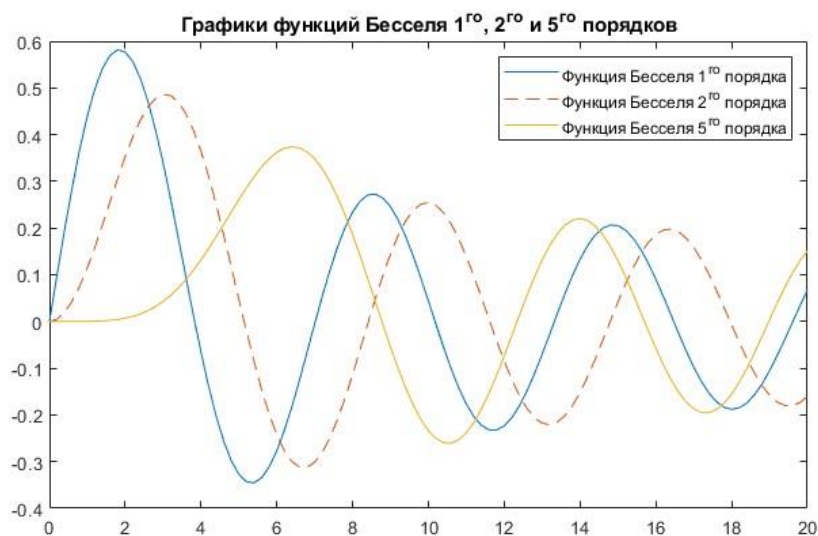


Рисунок 1.3 – Графики функций Бесселя

Обычно графики выводятся в специальное графическое окно с заголовком **Figure 1**. При следующем построении графика новый график выводится в то же самое окно. **MATLAB** представляет возможность вывода:

- каждого графика в свое окно,
- нескольких графиков в одно окно,
- в пределах одного окна нескольких графиков, каждого в своих осях.

Следующая последовательность команд построит графики функций в отдельных окнах **Figure 1** и **Figure 2**, причем последнее окно будет текущим и все последующие изменения будут соответственно отражаться именно на этом окне.

Сценарий:

```
>> x = 0:0.1:2*pi;  
>> y1 = sin(x);  
>> y2 = cos(x);  
>> figure  
>> plot(x, y1, 'k*')  
>> figure  
>> plot(x, y2, 'bp')
```

Результат работы:

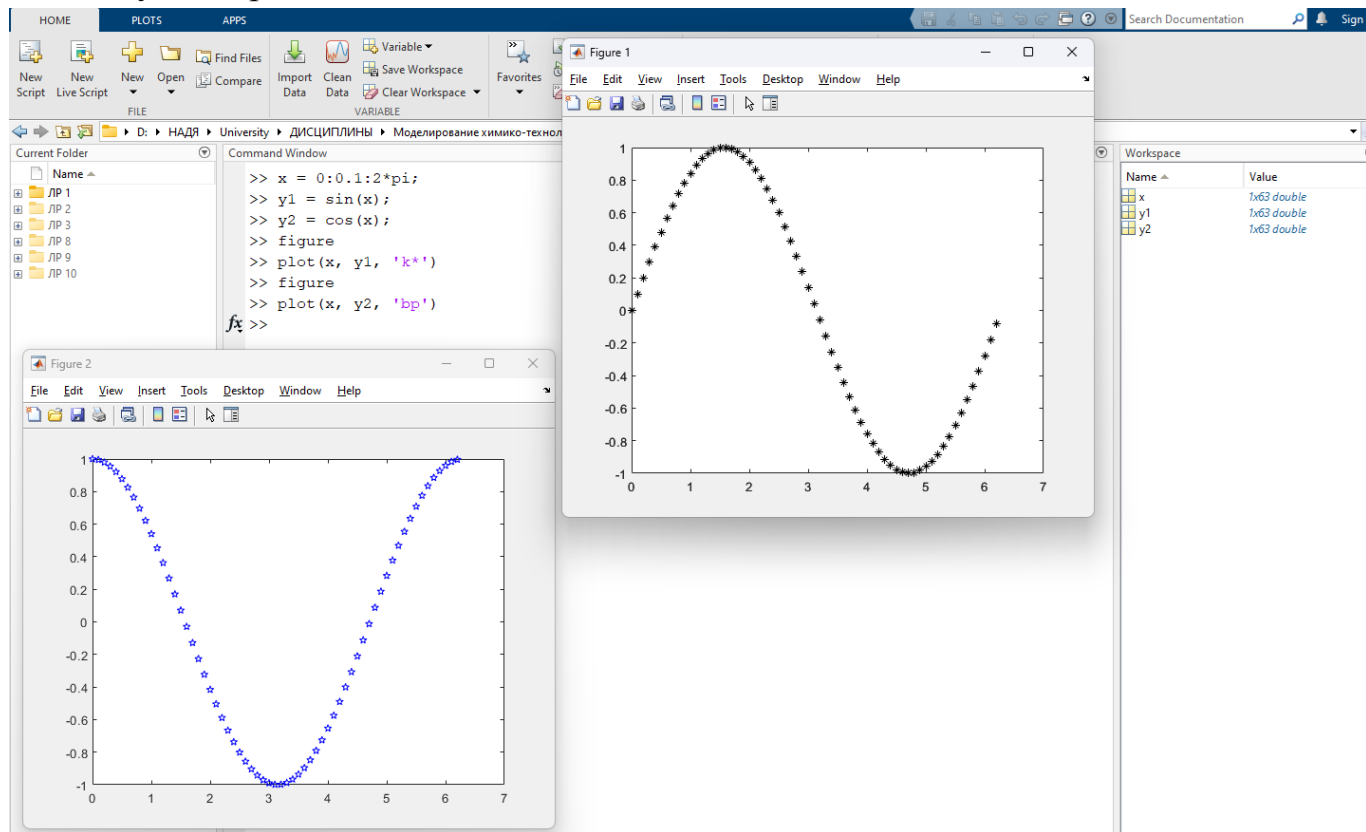


Рисунок 1.4 – Графики функций в разных окнах

MATLAB позволяет разместить в графическом окне несколько осей и вывести на них различные графики. Для это можно воспользоваться функцией **subplot**, которая располагает оси в виде матрицы с тремя параметрами: число подграфиков по вертикали, горизонтали, номер подграфика.

Сценарий:

```
>> x = 0:0.2:2*pi;  
>> y = sin(x);  
>> phi = 0:0.01:2*pi;  
>> rho = sin(3*phi);  
>> subplot(1, 2, 1)  
>> plot(x, y, 'rd')  
>> title('Синусоида')  
>> subplot(1, 2, 2)  
>> polar(phi, rho)  
>> title('Трехлепестковая роза')
```

Результат работы на рис. 1.5.

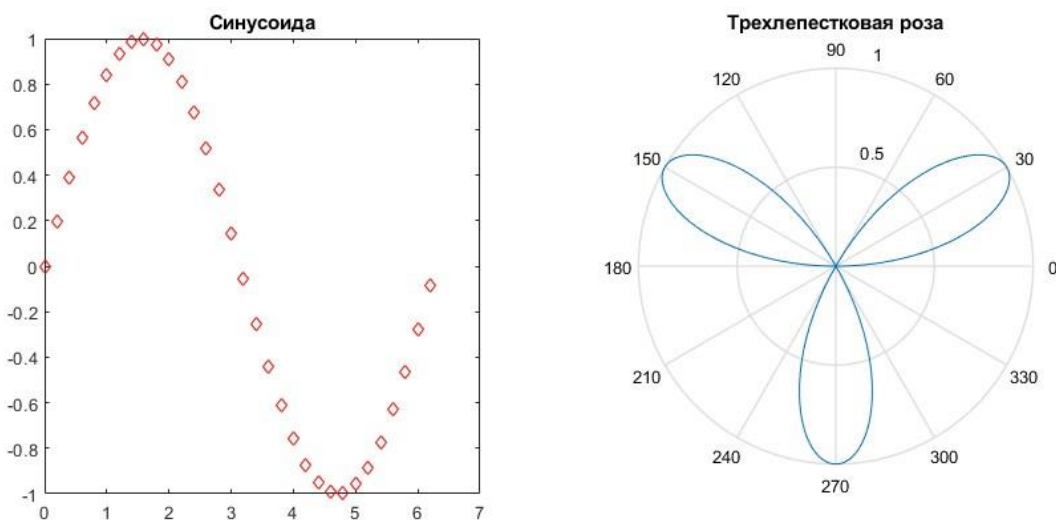


Рисунок 1.5 – Графики функций в одном окне в разных системах координат

При изучении движения точки на плоскости или в пространстве полезно не только построить траекторию точки, но и следить за движением точки по этой траектории. Для построения анимированных графиков применяются функции **comet** и **comet3**.

Сценарий:


```
>> x = -pi:pi/50000:pi;
>> y = tan(sin(x)) - sin(tan(x));
>> comet(x, y)
```

Результат работы на рис. 1.6 (в процессе построения графика).

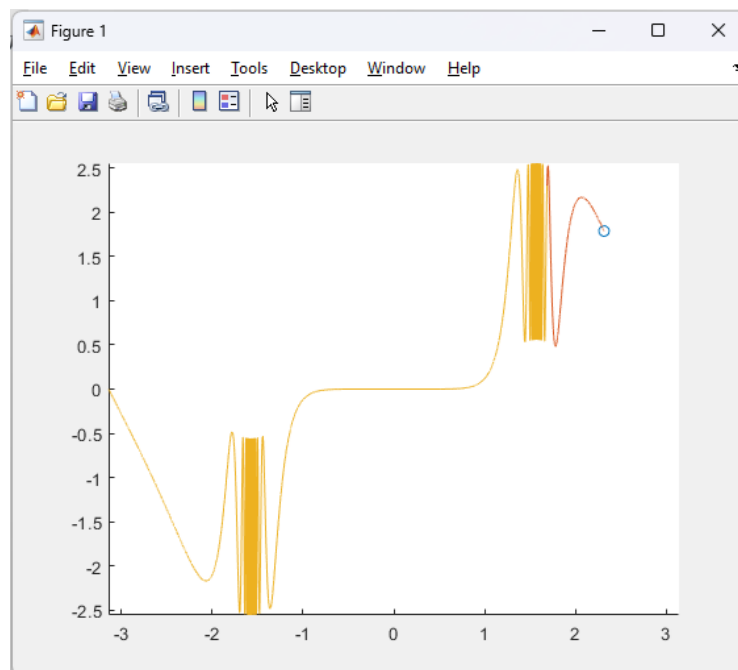


Рисунок 1.6 – Анимированный график функции

Для построения трехмерных графиков используется функция **mesh**.

Процедура состоит из двух этапов:

- 1) разбиваем область определения прямоугольной сеткой,
- 2) вычисляем значения функции в точках пересечения линий сетки и записываем их в матрицу.

Например, построим график функции $z(x, y) = x^2 + y^2$ на области определения в виде $x = [-1, 1]$, $y = [-1, 2]$.

Сценарий:

```
>> [X, Y] = meshgrid(-1:0.1:1, -1:0.1:2);
>> Z = X.^2 + Y.^2;
>> mesh(X, Y, Z)
>> title('Эллиптический параболоид')
```

Результат работы на рис. 1.7 (в MATLAB трехмерные графики можно поворачивать).

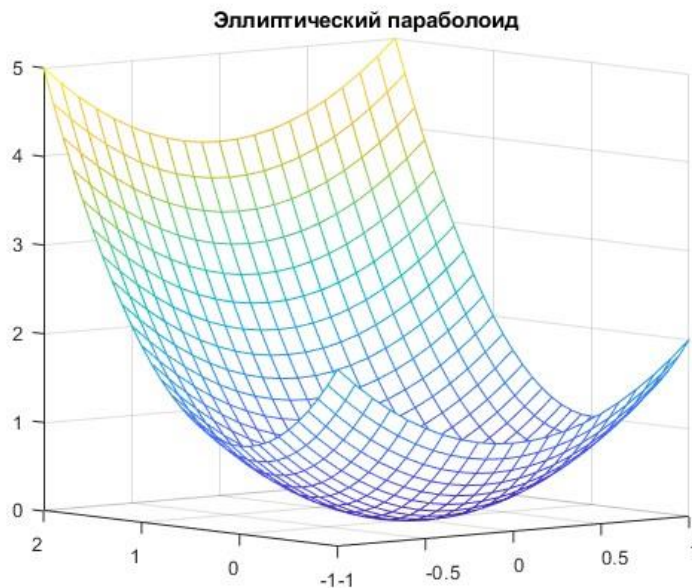


Рисунок 1.7 – График поверхности

Функция **surf** строит каркасную поверхность графика функции и заливает каждую клетку определенным цветом, зависящим от значения функции в точках, соответствующим углам клетки.

Ниже приведен пример использования различных функций для построения трехмерных графиков совместно с функцией **subplot**.

Сценарий:

```
>> [X, Y] = meshgrid(-1:0.1:1, 0:0.1:2);
>> Z = 10*sin(2*pi*X).*cos(Y*pi).*(1-X.^2).*Y.*(1-Y);
>> subplot(2, 2, 1)
>> mesh(X, Y, Z)
>> title('mesh')
>> subplot(2, 2, 2)
>> surf(X, Y, Z)
>> title('surf')
>> subplot(2, 2, 3)
>> meshc(X, Y, Z)
>> title('meshc')
>> subplot(2, 2, 4)
>> surf1(X, Y, Z)
>> shading interp
>> title('surf1')
>> colormap cool
```

Результат работы на рис. 1.8.

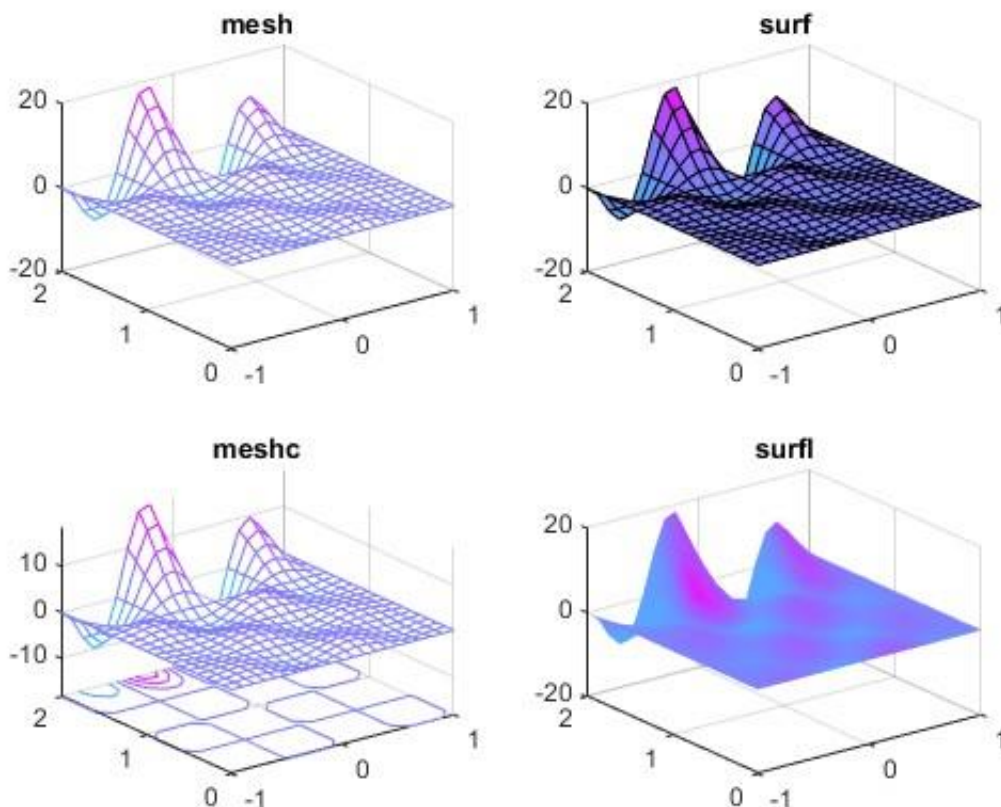


Рисунок 1.8 – Графики поверхностей

1.4. Циклы. Условные операторы и операторы отношения

Операторы управления и операторы отношения **MATLAB** при использовании работают также, как и в большинстве языков программирования.

<p><u>Оператор for:</u> for <переменная цикла>=<выражение цикла> <выполняемые операторы> end</p>	<p><u>Оператор if:</u> if <условие> <выполняемые операторы> elseif <условие> <выполняемые операторы> else <выполняемые операторы> end</p>
<p><u>Оператор while:</u> while <условие> <выполняемые операторы> end</p>	

При этом операторы **elseif** и **else** могут и не присутствовать.

В пакете **MATLAB** используются следующие операторы отношений и логические операторы: **==** – равно, **~=** – не равно, **<**, **>** – меньше, больше, **<=**, **>=** – меньше либо равно, больше либо равно, **~** – не, **&** – и, **|** – или.

Приведем пример использования циклов и условий. В заданной матрице все отрицательные элементы заменить на нули.

```
>> S = [-9 4 6 -3; 4 8 -2 3; 2 -1 -1 3]
```

```
S =
```

```
   -9     4     6    -3
     4     8    -2     3
     2    -1    -1     3
```

```
>> k = size(S)
```

```
k =
```

```
     3     4
```

```
>> for i = 1:k(1)
```

```
for j = 1:k(2)
```

```
if S(i, j) < 0
```

```
S(i, j) = 0;
```

```
end
```

```
end
```

```
end
```

```
>> S
```

```
S =
```

```
     0     4     6     0
     4     8     0     3
     2     0     0     3
```

1.5. Работа с М-файлами

Мы рассмотрели достаточно простые примеры, для выполнения которых требуется набрать несколько команд в командной строке. Для более сложных задач число команд возрастает, и работа в командной строке становится непродуктивной. **MATLAB** может последовательно выполнять последовательность операторов, записанных в файл на диске. Имена таких файлов имеют вид <имя>.m. Большая часть работы **MATLAB** заключается в создании, редактировании и выполнении таких m-файлов. Существуют два типа m-файлов: файлы-программы (сценарии) и файлы-функции. Ознакомиться с файлами-программами вы можете в любой специализированной литературе. Остановимся подробно на файлах-функциях.

Файлы функции дают возможность расширять **MATLAB**, поскольку определенные пользователем функции имеют тот же статус, что и другие функции **MATLAB**. Переменные по умолчанию являются локальными.

На панели Home в пункте New выберите подпункт Script. Новый файл открывается в окне редактора М-файлов, которое приведено на рис. 1.9.

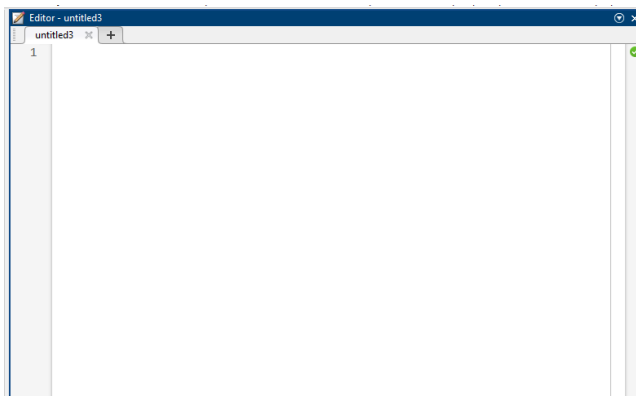


Рисунок 1.9 – Окно m-файла

Общий вид задания:

function [x1,x1,...]=name(y1,y2,...)

<тело функции>

Первая строка функции содержит объявление выходных аргументов, имен функции и входных аргументов. Совпадение имени функции и имени файла, написанных латиницей с или без цифр, является обязательным условием в **MATLAB**.

Приведем примеры. Например, необходимо вычислить значение функции в некоторой точке. Зададим функцию в отдельном m-файле (рис. 1.10).

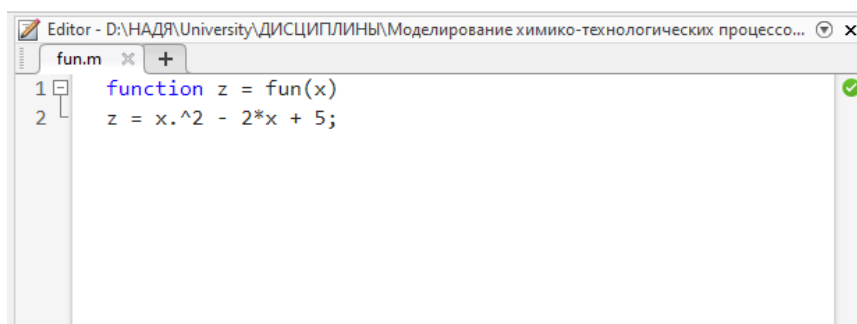


Рисунок 1.10 – Пример функции

Примечание. Для того чтобы обращаться к функции в командном окне, в окне Current Folder должна быть открыта папка, где располагается файл с данной функцией.

Вспользуемся встроенной функцией **feval** для вычисления значения заданной функции в точке $x=3$ (которое, очевидно, совпадает с тем, если вызвать эту функцию с указанием значения аргумента, равного 3), а также построим график этой функции на рис. 1.11 (данные команды следует вводить в командном окне):

```
>> z = feval('fun', 3)
```

```
z =
```

```
8
```

```
>> y = fun(3)
```

```
y =
```

```
8
```

```
>> x = -1:0.1:2;
```

```
>> yx = fun(x);
```

```
>> plot(x, yx)
```

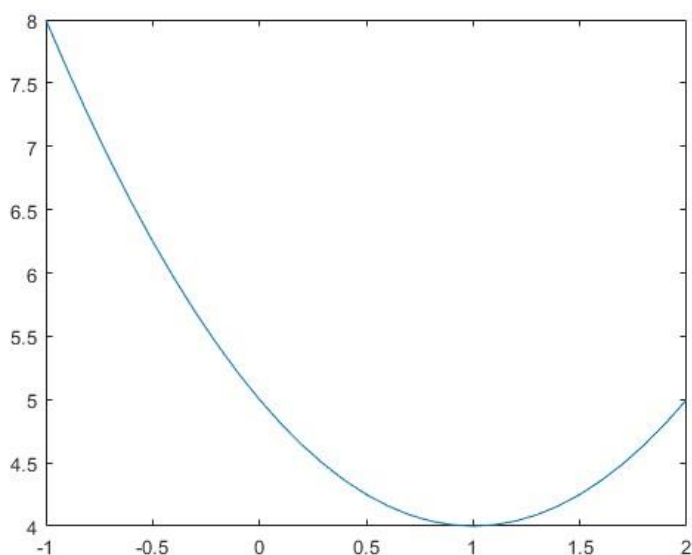
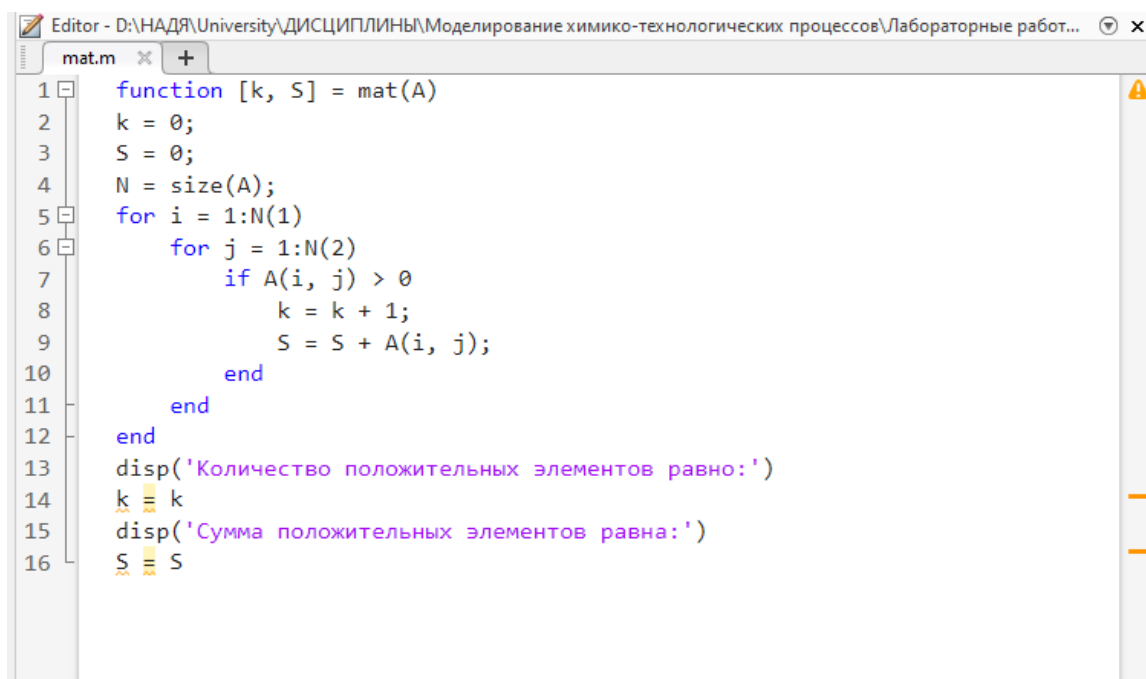


Рисунок 1.11 – График функции

Это довольно простой пример использования файлов-функции. Приведем другой: произведем подсчет количества положительных элементов матрицы и вычислим их сумму (рис. 1.12).



```
1 function [k, S] = mat(A)
2 k = 0;
3 S = 0;
4 N = size(A);
5 for i = 1:N(1)
6     for j = 1:N(2)
7         if A(i, j) > 0
8             k = k + 1;
9             S = S + A(i, j);
10        end
11    end
12 end
13 disp('Количество положительных элементов равно:')
14 k
15 disp('Сумма положительных элементов равна:')
16 S
```

Рисунок 1.12 – Пример использования файлов-функции

Результат работы этой программы (вводить в командном окне):

```
>> A = [1 2 -3 1; 4 -5 6 3; -8 7 1 -4; 4 -6 -9 8; 7 -9 3 4]

A =

     1     2    -3     1
     4    -5     6     3
    -8     7     1    -4
     4    -6    -9     8
     7    -9     3     4

>> [k, S] = mat(A);
Количество положительных элементов равно:

k =

    13

Сумма положительных элементов равна:

S =

    51
```

Следует учитывать также, что входные и выходные переменные у вызываемой функции могут отличаться от тех, что прописаны в исходном коде.

Разумеется, такое задание можно выполнить гораздо проще с использованием встроенных функций **MATLAB**:

```
>> % Находим положительные элементы матрицы
positive_elements = A(A > 0) '

positive_elements =

     1     4     4     7     2     7     6     1     3     1     3
8     4

>> % Считаем количество положительных элементов
num_positive = length(positive_elements)

num_positive =

     13

>> % Вычисляем сумму всех положительных элементов
sum_positive = sum(positive_elements)

sum_positive =

     51
```


Индивидуальные задания для самостоятельной работы

Средствами MATLAB решить следующие задачи.

Задание 1. Заданы матрицы $A = \text{randi}([-5\ 5], 5, 5)$ и $B = \text{randi}([0\ 4], 5, 3)$.

№ варианта	Задачи
1	<ol style="list-style-type: none">1. Определить количество ненулевых элементов матрицы A.2. Найти $A+A^T$.3. Для матрицы B определить количество элементов, равных 2.4. Переставить верхнюю и нижнюю строки матрицы B.5. Найти сумму элементов главной диагонали матрицы A.
2	<ol style="list-style-type: none">1. Определить количество нулевых элементов матрицы A.2. Найти $A \cdot B$.3. Для матрицы B определить количество элементов, равных 3.4. Переставить первую и четвертую строки матрицы B.5. Найти сумму элементов главной диагонали матрицы A.
3	<ol style="list-style-type: none">1. Определить количество отрицательных элементов матрицы B.2. Найти $B \cdot B^T$.3. Для матрицы A определить количество элементов, равных 1.4. Переставить второй и третий столбец матрицы B.5. Найти сумму элементов главной диагонали матрицы A.
4	<ol style="list-style-type: none">1. Определить количество положительных элементов матрицы B.2. Найти $B \cdot B^T$.3. Для матрицы A определить количество элементов, равных 2.4. Переставить первый и третий столбцы матрицы A.5. Найти сумму элементов главной диагонали матрицы B.
5	<ol style="list-style-type: none">1. Определить количество положительных элементов матрицы A.2. Найти $A \cdot A^T$.3. Для матрицы B определить количество элементов, равных 2.4. Переставить первый и четвертый столбцы матрицы A.5. Найти сумму элементов, стоящих выше главной диагонали в матрице B.
6	<ol style="list-style-type: none">1. Определить количество ненулевых элементов матрицы B.2. Найти $A+2 \cdot A^T$.3. Для матрицы A определить количество элементов, равных 3.4. Переставить второй и четвертый столбцы матрицы A.5. Найти сумму элементов, стоящих ниже главной диагонали в матрице B.
7	<ol style="list-style-type: none">1. Определить количество ненулевых элементов матрицы A.2. Найти $A-2 \cdot A^T$.3. Для матрицы B определить количество элементов, равных 1.4. Переставить вторую и четвертую строку матрицы A.5. Найти произведение элементов, стоящих на главной диагонали в матрице B.

8	<ol style="list-style-type: none"> 1. Определить количество нулевых элементов матрицы A. 2. Найти $2 \cdot A^T + A$. 3. Для матрицы B определить количество элементов, равных 4. 4. Переставить вторую и четвертую строку матрицы B. 5. Найти максимальный элемент на главной диагонали в матрице A.
9	<ol style="list-style-type: none"> 1. Определить количество неположительных элементов матрицы A. 2. Найти $A^T - 4 \cdot A$. 3. Для матрицы A определить количество элементов, равных (-5). 4. Переставить третью и четвертую строку матрицы B. 5. Найти минимальный элемент на главной диагонали в матрице A.
10	<ol style="list-style-type: none"> 1. Определить количество неотрицательных элементов матрицы A. 2. Найти $A^T - 3 \cdot A$. 3. Для матрицы A определить количество элементов, равных (-4). 4. Переставить третью и пятую строку матрицы B. 5. Найти минимальный элемент на главной диагонали в матрице B.
11	<ol style="list-style-type: none"> 1. Определить количество нулевых элементов матрицы A. 2. Найти $3 \cdot A^T - A$. 3. Для матрицы A определить количество элементов, равных (-3). 4. Переставить третью и пятую строку матрицы A. 5. Найти максимальный элемент на главной диагонали в матрице B.
12	<ol style="list-style-type: none"> 1. Определить количество положительных элементов матрицы B. 2. Найти $A^T \cdot B$. 3. Для матрицы B определить количество элементов, равных 3. 4. Переставить третий и пятый столбцы матрицы A. 5. Найти среднее арифметическое их элементов на главной диагонали в матрице B.
13	<ol style="list-style-type: none"> 1. Определить количество неотрицательных элементов матрицы A. 2. Найти $B^T \cdot B$. 3. Для матрицы B определить количество элементов, равных 1. 4. Переставить второй и пятый столбцы матрицы A. 5. Найти среднее арифметическое элементов на главной диагонали в матрице A.
14	<ol style="list-style-type: none"> 1. Определить количество отрицательных элементов матрицы B. 2. Найти $B \cdot B^T$. 3. Для матрицы A определить количество элементов, равных (-1). 4. Переставить второй и четвертый столбцы матрицы A. 5. Найти среднее геометрическое элементов на главной диагонали в матрице A.
15	<ol style="list-style-type: none"> 1. Определить количество положительных элементов матрицы B. 2. Найти $A + B \cdot B^T$. 3. Для матрицы A определить количество элементов, равных (-2). 4. Переставить второй и третий столбцы матрицы A. 5. Найти среднее геометрическое элементов на главной диагонали в матрице B.

Задание 2. Построить графики функций $f(x) = a \cdot x \cdot \sin bx$ и $g(x) = c \cdot e^{-dx} \cdot \cos fx$ на отрезке $[0, 2\pi]$. Выведите графики различными способами:

- а) в отдельные графические окна,
- б) в одно окно на одни оси,
- в) в одно окно на отдельные оси.

Дайте заголовки, разместите подписи, легенду, используйте различные цвета, стили линий и типы маркеров, нанесите сетку.

№ варианта	Задачи
1	$a = 1, b = 3, c = 0.9, d = 1.6, f = 3$
2	$a = 2, b = 3, c = 0.9, d = 2.6, f = 3$
3	$a = 3, b = 1, c = 0.9, d = 2.6, f = 3$
4	$a = 1, b = 1.7, c = 1.5, d = 0.6, f = 2$
5	$a = 1, b = 1.2, c = 1.1, d = 0.9, f = 2.1$
6	$a = 2, b = 1.7, c = 1.9, d = 0.6, f = 3$
7	$a = 2, b = 1, c = 1.3, d = 1, f = 1.3$
8	$a = 1, b = 1, c = 1.5, d = 0.9, f = 2.1$
9	$a = 2, b = 2.2, c = 1.3, d = 2.1, f = 1.3$
10	$a = 2, b = 1, c = 0.9, d = 0.6, f = 3$
11	$a = 3, b = 2.2, c = 1.3, d = 2.1, f = 1$
12	$a = 1, b = 1, c = 2.5, d = 0.9, f = 2$
13	$a = 2, b = 1, c = 2.5, d = 1, f = 2.1$
14	$a = 2, b = 2, c = 1.3, d = 1.6, f = 1.3$
15	$a = 2, b = 1.1, c = 0.9, d = 1.5, f = 3$

Задание 3. Визуализировать график функции двух переменных $z(x, y) = e^{-cxy} \cdot (\sin ax^2 + \cos by^2)$ на прямоугольной области определения $x \in [0, 2], y \in [-1, 1]$. Выведите графики двумя различными способами (по выбору) в одно графическое окно. Параметры a, b, c взять из таблицы к заданию 2.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 2 РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ С ОДНИМ НЕИЗВЕСТНЫМ ДЛЯ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

При решении химико-технологических задач, связанных, в частности, с термодинамикой и химической кинетикой, в теоретических расчётах при обработке экспериментальных данных очень часто бывает необходимо решать нелинейные уравнения для нахождения того или иного параметра.

2.1. Понятие нелинейного уравнения

Нелинейным уравнением с одним неизвестным называется уравнение вида

$$f(x) = 0, \quad (2.1)$$

где $f(x)$ – известная нелинейная функция аргумента x . При решении уравнений необходимо соблюдать этот канонический вид и приводить к нему рассматриваемые уравнения (справа должен быть 0), так как в конкретных методах работа проводится с полученной после этого функцией $f(x)$.

Таким образом, задачи решения нелинейного уравнения сводится к поиску всех возможных значений x , при которых функция $f(x)$ обращается в ноль. Такие значения называются корнями уравнения (2.1) или нулями функции $f(x)$.

Например, нелинейным будет уравнение

$$x^2 - \cos 2x - 1 = \ln x. \quad (2.2)$$

В математике известны способы аналитического (т.е. точного) решения линейных уравнений, уравнений второй степени; имеются также формулы для решения уравнений третьей и четвертой степеней. В некоторых простых случаях можно подобрать корни простых нелинейных уравнений. Например, очевидно, что единственным возможным решением нелинейного уравнения $e^x - x - 1 = 0$ будет число $x = 0$.

Нелинейные функции вида $f(x)$ подразделяются на алгебраические и трансцендентные (соответственно, уравнения бывают алгебраическими и трансцендентными). Алгебраические функции представляются в виде полинома степени n :

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_2 x^2 + a_1 x + a_0,$$

где a_i – известные коэффициенты. К такому виду приводятся и некоторые другие функции, в частности – рациональные дроби. Трансцендентные функции (показательные, логарифмические, тригонометрические и др.) нельзя точно привести к каноническому виду. Уравнение (2.2) является трансцендентным.

Будем обозначать корень уравнения x^* . Из формы уравнения (2.1) следует, что при $x = x^*$ функция $f(x)$ обращается в нуль, т.е. график функции должен пересекать ось абсцисс (рис. 2.1).

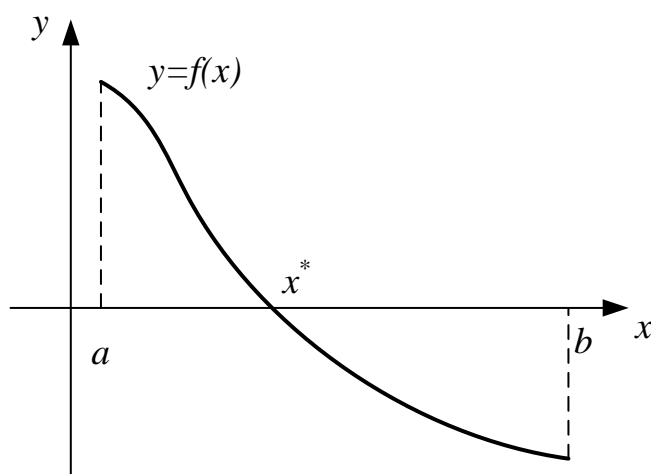


Рисунок 2.1 – Функция $y = f(x)$, имеющая на отрезке $[a, b]$ корень x^*

Нелинейные уравнения можно решить аналитически лишь в некоторых, немногих, случаях. С помощью численных же методов можно решить практически любые уравнения, причём существует довольно много этих методов и всегда можно подобрать наиболее оптимальный или перепроверить решение несколькими методами. При этом решения в отличие от аналитических методов получаются приближёнными, однако всегда можно задать требуемую точность решения, что сводит на нет этот недостаток.

Решение уравнений численными методами проходит в два этапа. Первый – отделение корней. На числовой оси выделяются достаточно узкие интервалы, каждый из которых содержит один корень. Второй – уточнение корней. В найденных интервалах конкретными методами отыскиваются корни с заданной точностью.

2.2. Отделение корней нелинейных уравнений

Абсолютно универсальных методов отделения (или, иначе, локализации) корней, особенно для сложных функций, не существует. Всегда имеет место опасность пропустить тот или иной корень. Можно быть уверенным только в отношении элементарных функций, поведение которых хорошо известно: например, тригонометрические, показательные, логарифмические и другие функции.

Самый простой, но и самый трудоёмкий – графический метод, т.е. построение графика функции $y = f(x)$. В настоящее время при наличии компьютерных

программ построения графиков это не представляет собой сложной задачи. Однако масштаб построения должен быть достаточно мелким, а интервал по оси x – достаточно большим, а это – два противоречивых требования. Лучше всего сначала построить график в широком интервале, а затем – в «подозрительных» местах, в более мелком масштабе.

Часто эту задачу можно упростить, разбив заданную функцию $f(x)$ на две более простые (или даже элементарные) функции ($f_1(x)$ и $f_2(x)$), т. е. выполнив преобразование

$$f(x) = 0 \Rightarrow f_1(x) = f_2(x),$$

а затем построив графики функций в одной системе координат. Если функция $y = f(x)$ имеет корень $x = x^*$, то функции $f_1(x)$ и $f_2(x)$ будут пересекаться в этой же точке.

Рассмотрим для примера задачу локализации корней уравнения (2.1). Очевидно, что корни следует искать при положительных значениях переменной. Построим график функции $f(x) = x^2 - \cos 2x - 1 - \ln x$ при $x \geq 0.1$. Следует также отметить, что нет необходимости брать большие значения для x , т.к. функция при $x \rightarrow +\infty$ будет также неограниченно расти, начиная с некоторого значения. Поэтому при построении графика ограничимся промежутком $[0.1, 3]$. График функции $f(x)$, построенный в **ППП МАТЛАВ**, представлен на рисунке 2.2 (изменить толщину линии можно, например, выбрав пункт «Figure Properties» в разделе «Edit» в окне графика).

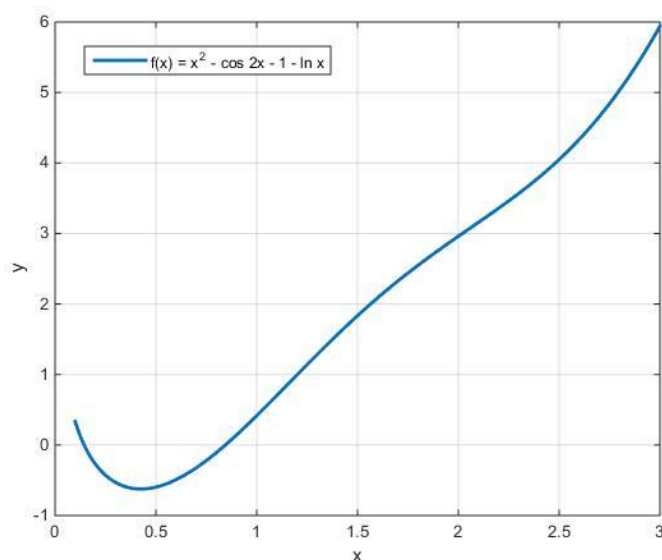


Рисунок 2.2 – График функции $f(x) = x^2 - \cos 2x - 1 - \ln x$ на отрезке $[0.1, 3]$

Перепишем уравнение (2.1) в виде $x^2 - \ln x = \cos 2x + 1$ и построим в одной системе графики функций $f_1(x) = x^2 - \ln x$ и $f_2(x) = \cos 2x + 1$ на том же промежутке (рис. 2.3).

Из рисунков 2.2 и 2.3 видно, что имеется 2 нуля функции $f(x)$ и такие же 2 точки пересечения функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$. Эти значения локализованы на промежутках $[0.1, 0.5]$ и $[0.5, 1]$. Именно на этих промежутках и стоит уточнять значения соответствующий корней уравнения $f(x) = 0$.

Стоит отметить, что результатом отделения корней должны быть чётко обозначенные интервалы; если уравнение имеет несколько корней, соответствующие интервалы не должны пересекаться или быть смежными, иначе методы уточнения корней могут работать некорректно.

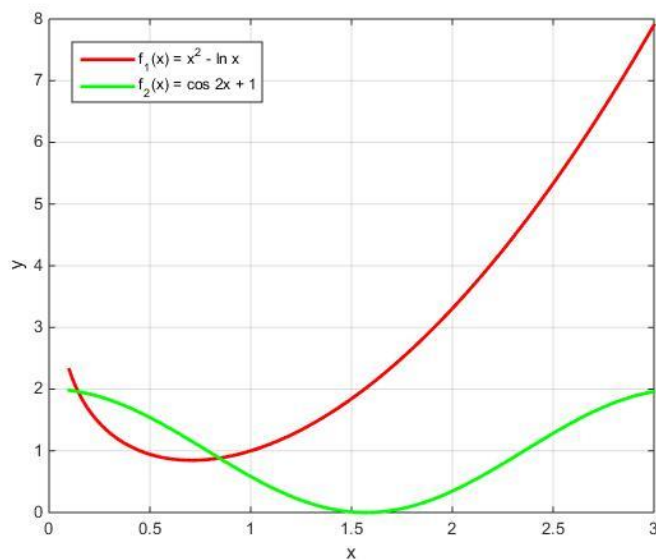


Рисунок 2.3 – Графики функции $f_1(x) = x^2 - \ln x$ и $f_2(x) = \cos 2x + 1$ на отрезке $[0.1, 3]$

2.3. Методы решения нелинейных уравнений. Средства ППП MATLAB

Практически все методы уточнения корней являются итерационными методами, т.е. принадлежат к широкому классу численных методов вообще. Теоретически итерационный процесс бесконечен, поэтому всегда должна быть задана точность, с которой необходимо получить решение и по достижении которой нужно прекращать итерации.

Из основных итерационных алгоритмов приближенного поиска корней нелинейного уравнения на промежутке локализации следует выделить следующие: метод деления отрезка пополам и вообще различные методы дихотомии, метод хорд (или метод секущих), метод простых итераций Якоби и метод Нью-

тона (или метод касательных). Описание данных методов, их итерационных формул и критериев останова можно найти в специальной литературе.

Здесь ограничимся рассмотрением встроенных средств **ППП MATLAB** для поиска корней нелинейного уравнения на найденном промежутке локализации.

2.3.1. Функция **fzero**

Для нахождения корней произвольных уравнений служит функция **fzero**. Данная функция позволяет приближенно вычислить корень уравнения на некотором интервале или ближайший к заданному начальному приближению. В простейшем варианте **fzero** вызывается с двумя входными и одним выходным аргументом

$x = \text{fzero}(\text{'func_name'}, x0),$

где `func_name` – имя функции, вычисляющей левую ясную часть уравнения, `x0` – начальное приближение к корню, `x` – найденное приближенное значение корня. Вместо начального приближения вторым параметром **fzero** можно задать интервал, на котором следует найти корень. Важной особенностью **fzero** является то, что она вычисляет только те корни, в которых функция меняет знак, а не касается оси абсцисс.

Программирование собственных приложений с использованием вычислительных функций требует получения сведений о завершении вычислительного процесса для перехода к соответствующему блоку алгоритма. Обращение к **fzero** стремя выходными аргументами

$[x1, f1, \text{flag}] = \text{fzero}(\text{'numb'}, x0)$

позволяет выбрать дальнейшие действия в зависимости от содержимого переменной `flag`. Положительное значение `flag` свидетельствует об успешном завершении вычислительного процесса. Отрицательное значение говорит о том, что-либо не удалось отделить интервал со сменой знака функции на границах, либо в процессе вычислений получилось комплексное значение, бесконечность, или выполнена операция с неопределенным результатом, например, деление нуля на ноль. Функция **fzero**, так же, как и большинство вычислительных функций **ППП MATLAB**, допускает управление многими параметрами заложенных в ней алгоритмов. Кроме того, для контроля выполнения алгоритма и изменения его параметров следует получить информацию о ходе вычислений. Управление алгоритмом и контроль за ним требуют специальных способов вызова функций **ППП MATLAB**. Об этом можно прочитать в дополнительной литературе.

Используем указанную функцию **fzero** для нахождения корней функции $f(x)$ на промежутках $[0.1, 0.5]$ и $[0.5, 1]$. Приходим к соответствующим значениям:

$$x_1 = 0.143977683660190, \quad x_2 = 0.844452064756183.$$

На рисунке 2.4 изображен график функции $f(x)$ и корни соответствующего уравнения $f(x) = 0$.

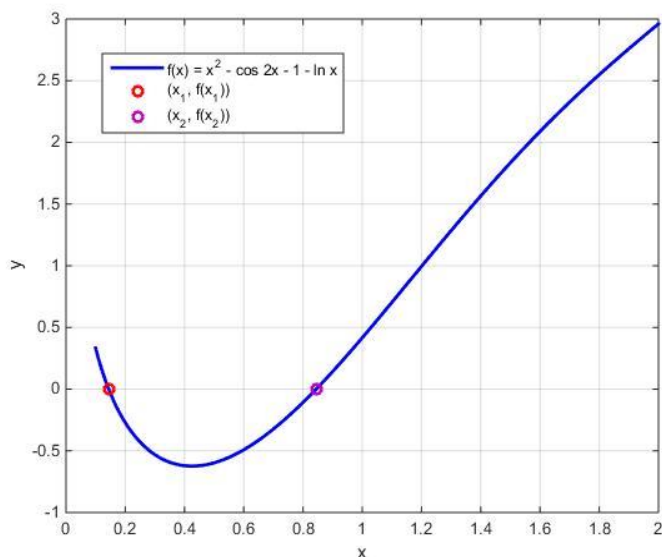


Рисунок 2.4 – График функции $f(x)$ и корни уравнения $f(x) = 0$ на отрезке $[0.1, 2]$

Ниже представлены программы для построения графиков и нахождения корней для данного примера.

```
function z = fun(x)
z = x.^2-cos(2*x)-1-log(x);
```

```
function calculat1
clc
clear
%задание значений переменной
x = 0.1:0.01:3;
%вычисление значений функции
z = fun(x);
%построение графиков
figure(1)
plot(x, z)
grid on
xlabel('x')
ylabel('y')
legend('f(x) = x^2 - cos 2x - 1 - ln x')

figure(2)
z1 = x.^2-log(x);
z2 = cos(2*x)+1;
```

```

plot(x, z1, 'r', x, z2, 'g')
grid on
xlabel('x')
ylabel('y')
legend('f_1(x) = x^2 - ln x', 'f_2(x) = cos 2x + 1')

format long
%нахождение корней уравнения с помощью функции fzero и построение
графиков
[x1, f1, flag1] = fzero('fun', [0.1, 0.5])
[x2, f2, flag2] = fzero('fun', [0.5, 1])

figure(3)
x = 0.1:0.01:2;
z = fun(x);
plot(x, z, 'b', x1, f1, 'ro', x2, f2, 'ro')
grid on
xlabel('x')
ylabel('y')
legend('f(x) = x^2 - cos 2x - 1 - ln x', '(x_1, f(x_1))', '(x_2,
f(x_2))')

```

2.3.3. Функция roots

Для определения всех корней полиномов применяется **roots**. Полином в MATLAB задается вектором его коэффициентов, например, для определения полинома

$$P(x) = x^7 + 3.2x^5 - 5.2x^4 + 0.5x^2 + x - 3$$

следует использовать команду

```
p = [1 0 3.2 -5.2 0 0.5 1 -3]
```

Число элементов вектора, т.е. число коэффициентов полинома, всегда на единицу больше его степени, нулевые коэффициенты должны содержаться в векторе.

Функция **polyval** предназначена для вычисления значения полинома от некоторого аргумента. Например, при вычислении значения при $x = 2$ получаем значение $P(2) = 148$. Аргумент может быть матрицей или вектором, в этом случае производится поэлементное вычисление значений полинома и результат представляет матрицу или вектор того же размера, что и аргумент.

Нахождение всех корней полиномов осуществляется при помощи функции **roots**, в качестве аргумента которой указывается вектор с коэффициентами полинома. Функция **roots** возвращает вектор корней полинома, в том числе и комплексных. Так для указанного полинома находим следующие значения:

```

u =
-0.5668 + 2.0698i
-0.5668 - 2.0698i
-0.6305 + 0.5534i
-0.6305 - 0.5534i
 1.2149 + 0.0000i
 0.5898 + 0.6435i
 0.5898 - 0.6435i

```

Известно, что число всех корней полинома совпадает с его степенью. Убедимся в правильности работы **roots**, вычислив значение полинома от вектора его корней:

```

1.0e-012 *
0.8700 + 0.2254i
0.8700 - 0.2254i
0.0031 - 0.0007i
0.0031 + 0.0007i
-0.0329
0.0018 + 0.0031i
0.0018 - 0.0031i

```

В верхней строке результата содержится общий множитель $1.0e-012 *$, на который следует умножить каждую компоненту получившегося вектора.

Ниже представлена программа для всех указанных вычислений.

```

function Poly
clc
clear
format short
%задание коэффициентов многочлена
p = [1 0 3.2 -5.2 0 0.5 1 -3];
%вычисление значений полинома при заданном значении аргумента
с = polyval(p, 2)
%нахождение корней полинома
u = roots(p)
%вычисление значений полинома в корнях
сс = polyval(p,u)

```

2.4. Задачи химической технологии, представляемые как нелинейные уравнения

2.4.1. Определение *PH* растворов слабых кислот

Известна концентрация недиссоциированной кислоты – $0,1 \text{ моль} \cdot \text{л}^{-1}$; константа диссоциации – $1,85 \cdot 10^{-5}$; ионное произведение воды – $1 \cdot 10^{-14}$. Требуется определить *PH* раствора.

Решение. Зависимость pH от перечисленных факторов может быть представлена следующим уравнением:

$$[HA]_0 = \frac{[H^+]^2 - K_w}{K_a} + [H^+] - \frac{K_w}{[H^+]},$$

где $[H^+]$ – концентрация ионов водорода; K_w – ионное произведение воды; K_a – константа диссоциации; $[HA]_0$ – концентрация недиссоциированной кислоты, моль · л⁻¹.

Известно, что значение pH – это отрицательный десятичный логарифм концентрации ионов водорода: $pH = -\lg(H^+)$. Алгоритм решения задачи предусматривает вычисление концентрации ионов водорода, а затем определение показателя pH .

Для нахождения неизвестного H^+ составим функцию

$$f([H^+]) = \frac{[H^+]^2 - K_w}{K_a} + [H^+] - \frac{K_w}{[H^+]} - [HA]_0$$

и найдем ее корни при указанных значениях параметров K_w , K_a , $[HA]_0$. Построим график функции на отрезке $[10^{-10}, 10^{-2}]$ (рис. 2.5). При увеличении значения аргумента $[H^+]$ значение функции будет еще больше увеличиваться, поэтому корней на других промежутках она не имеет. Из графика видим, что данная функция имеет корень на указанном промежутке. Находим его с помощью функции **fzero**: $H^+ \approx 4.3012 \cdot 10^{-3}$. Тогда pH будет равен $pH = -\lg(H^+) = 2.3664$.

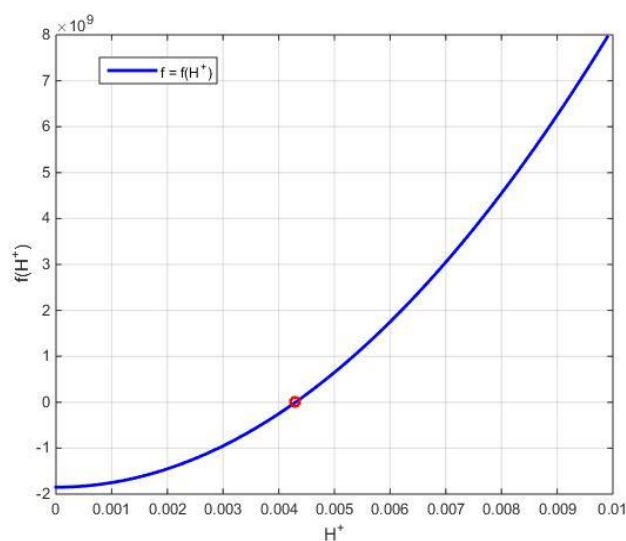


Рисунок 2.5 – График функции $f([H^+])$ и корни уравнения $f([H^+]) = 0$ на отрезке $[10^{-10}, 10^{-2}]$

Ниже представлены программы для построения графиков и нахождения корней для данного примера.

```
function f = fun_PH(H)
Kw = 1.85*10^(-5);
Ka = 1*10^(-14);
HA = 0.1;

f = (H.^2-Kw)./Ka + H - Kw./H + HA;
```

```
function calculate_PH
clc
clear
%задание значений переменной
H = 10^(-10):0.0001:10^(-2);
%вычисление значений функции
f = fun_PH(H);
format short e
%нахождение корней уравнения с помощью функции fzero и построение
графиков
[H_0, f_0] = fzero('fun_PH', [10^(-10), 10^(-2)])

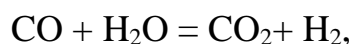
disp('PH раствора равен:')
PH = -log10(H_0)

%построение графика
figure(1)
plot(H, f, 'b', H_0, f_0, 'ro')
grid on
xlabel('H^+')
ylabel('f(H^+)')
legend('f = f(H^+)')
```

2.4.2. Определение равновесной степени конверсии и состава конвертированного газа при конверсии окиси углерода

На конверсию окиси углерода поступает газ, содержащий объем: CO – 36%; H₂ – 35.5%; CO₂ – 5.5%; N₂ – 23%. Необходимо определить равновесную степень конверсии и состав конвертированного газа для различных температур t от 480 до 550 с шагом 10 (в °C). В исходном состоянии отношение объемов пар/газ $n = 1$.

Решение. Продукты конверсии окиси углерода – водород и углекислый газ. Окисление окиси углерода водяным паром идет согласно реакции



протекающей с достаточно большой скоростью при 425-550°C на железо-хромовом катализаторе. Зависимость константы равновесия

$$K_p = \frac{P_{\text{CO}} \cdot P_{\text{H}_2\text{O}}}{P_{\text{CO}_2} \cdot P_{\text{H}_2}}$$

от температуры можно вычислить по формуле:

$$\lg K_p = -\frac{2059}{T} + 1.5904 \cdot \lg T - 1.817 \cdot 10^{-3} \cdot T + 5.65 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 8.24 \cdot 10^{-11} \cdot T^3 - 1.5313.$$

Здесь T – температура, выражаемая в К.

Выразим состав 1 моля сухой исходной газовой смеси следующим образом:

Вещество	Мольные доли
CO	a
H ₂	b
CO ₂	c
Инертные газы	d

Обозначим: n – число молей водяного пара, прибавляемого к 1 моль сухого исходного газа; P – общее давление газа; α — равновесная степень конверсии CO.

Тогда парциальные давления компонентов газовой смеси после конверсии будут:

$$P_{\text{CO}} = \frac{a - a \cdot \alpha}{1 + n} \cdot P; \quad P_{\text{CO}_2} = \frac{c + a \cdot \alpha}{1 + n} \cdot P; \quad P_{\text{H}_2} = \frac{b + a \cdot \alpha}{1 + n} \cdot P;$$

$$P_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{n - a \cdot \alpha}{1 + n} \cdot P; \quad P_{\text{инертн. газ}} = \frac{d}{1 + n} \cdot P.$$

Подставляя эти значения парциальных давлений компонентов в уравнение константы равновесия, получим:

$$K_p = \frac{P_{\text{CO}} \cdot P_{\text{H}_2\text{O}}}{P_{\text{CO}_2} \cdot P_{\text{H}_2}} = \frac{(a - a \cdot \alpha) \cdot (n - a \cdot \alpha)}{(c + a \cdot \alpha) \cdot (b + a \cdot \alpha)}.$$

При каждом значении температуры из указанного диапазона вычисляем значение

$$K_p = 10^{-\frac{2059}{T} + 1.5904 \lg T - 1.817 \cdot 10^{-3} \cdot T + 5.65 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 8.24 \cdot 10^{-11} \cdot T^3 - 1.5313}$$

и находим решение уравнения

$$\frac{(a - a \cdot \alpha) \cdot (n - a \cdot \alpha)}{(c + a \cdot \alpha) \cdot (b + a \cdot \alpha)} - K_p = 0$$

относительно α из промежутка [0.001, 0.999]. Тем самым получим значения равновесную степень конверсии при каждом значении T (рис. 2.6). При каждом таком α определяем состав (парциальное давление) конвертированного газа после реакции по указанным выше формулам (рис. 2.7); очевидно, сумма всех давлений должна быть равна единице, о чем свидетельствуют результаты проверки.

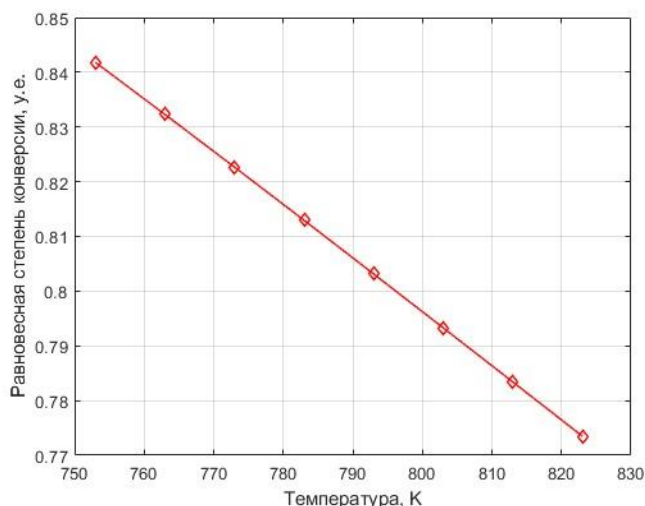


Рисунок 2.6 – Зависимость равновесной степени конверсии от температуры

Ниже представлены программы для проведения вычислений из данного примера.

```
function f = fun_conv(alpha)

global a b c T n
Kp = 10^(-2059./T+1.5904*log10(T)-1.817*10^(-3)*T+5.65*10^(-7)*T.^2-8.24*10^(-11)*T.^3-1.5313);
f = Kp - (a-a*alpha)*(n-a*alpha)/(c+a*alpha)/(b+a*alpha);
```

```
% script calculate_conv
clc
clear
% задание значений констант

global a b c T n

a = 0.36;
b = 0.355;
c = 0.055;
d = 0.23;
n = 1;
P = 1;
% задание значений переменной
TT = 753:10:823;
```

```

k = length(TT);
Alpha = zeros(1, k+1);
Alpha(1) = 0.3;

for i = 1:k
    alpha = Alpha(i);
    T = TT(i);
    Alpha(i+1) = fzero('fun_conv', [0.001, 0.999]);
end
disp('Значения температуры:')
TT = TT
disp('Значения корней:')
Alpha = Alpha(2:k+1)

%вычисление парциальных давлений компонент
P_CO = (a-a*Alpha)/(n+1)*P;
P_CO2 = (c+a*Alpha)/(n+1)*P;
P_H2 = (b+a*Alpha)/(n+1)*P;
P_H2O = (n-a*Alpha)/(n+1)*P;
P_inert = d/(n+1)*P*ones(1,k);
disp('Проверка решения (сумма всех давлений равна 1):')
proverka = P_CO+P_CO2+P_H2+P_H2O+P_inert

%построение графиков (изменение толщины линии с помощью команд)
figure(1)
plot(TT, Alpha, 'rd-', 'LineWidth', 1)

grid on
xlabel('Температура')
ylabel('Равновесная степень конверсии')
%title('Зависимость равновесной степени конверсии от температуры')

figure(2)
plot(TT, P_CO, 'bo-', 'LineWidth', 2)
hold on
plot(TT, P_CO2, 'go-', 'LineWidth', 2)
hold on
plot(TT, P_H2, 'ro-', 'LineWidth', 2)
hold on
plot(TT, P_H2O, 'gp-', 'LineWidth', 2)
hold on
plot(TT, P_inert, 'rp-', 'LineWidth', 2)

grid on
xlabel('Температура')
ylabel('Парциальное давление')
legend('CO', 'CO_2', 'H_2', 'H_2O', 'Инертный газ')
%title('Зависимость парциального давления от температуры')

```

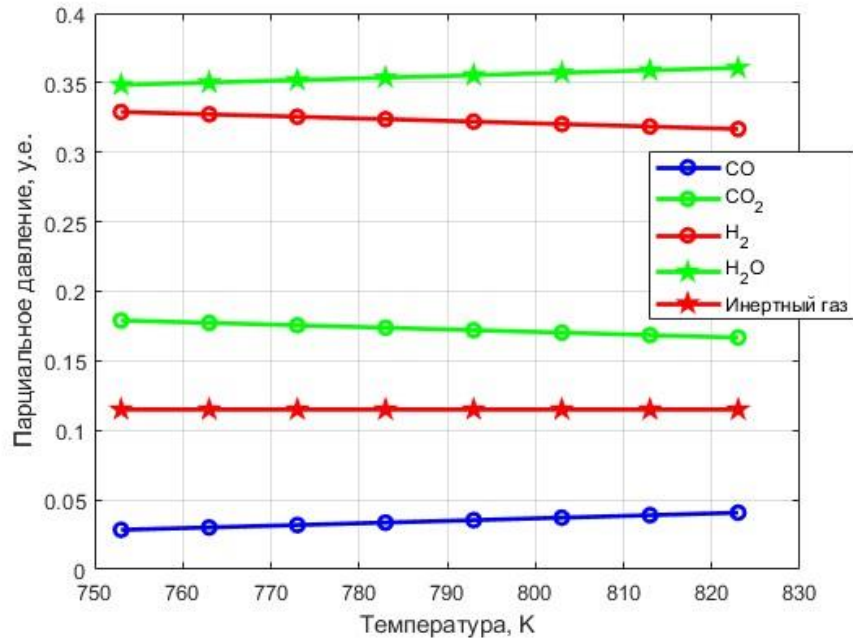



Рисунок 2.7 – Зависимость парциального давления от температуры

2.4.3. Определение равновесной концентрации аммиака при синтезе

Определить равновесную концентрацию аммиака при синтезе его из эквимолекулярной азото-водородной смеси при температуре 500 °С в зависимости от давления P (атм.), принимающего значения 10, 30, 100, 300, 600. Построить график зависимости равновесной концентрации аммиака от давления.

Решение. Равновесная концентрация C_{NH_3} определяется из уравнения:

$$C_{\text{NH}_3}^2 - 200 \cdot C_{\text{NH}_3} - \frac{308 \cdot \sqrt{K_p}}{P} \cdot C_{\text{NH}_3} + 10^4 = 0.$$

Константа равновесия K_p реакции синтеза аммиака определяется из эмпирического уравнения А.Т. Ларсона и Р.Л. Доджа:

$$\lg K_p = -\frac{2074.8}{T} + 2.4943 \cdot \lg T + \beta \cdot T - 1.8565 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 - J,$$

где β – коэффициент, зависящий от давления, J – константа интегрирования. Значения этих коэффициентов в зависимости от общего давления представлены в таблице:

P , атм.	β	J
10	0	1.993
30	$3.4 \cdot 10^{-5}$	2.021
100	$1.256 \cdot 10^{-4}$	2.113
300	$1.256 \cdot 10^{-4}$	2.206
600	$1.0856 \cdot 10^{-3}$	3.059

Процесс определения значений равновесной концентрации схож с решением предыдущей задачи. При каждом значении давления P и соответствующих значений β и J находим константу равновесия по формуле $K_p = 10^{\frac{-2074.8}{T} + 2.4943 \cdot \lg T + \beta \cdot T - 1.8565 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 - J}$. Далее решаем уравнение относительно неизвестной концентрации C_{NH_3} из промежутка $[0, 100]$. График полученных решений представлен на рис. 2.8.

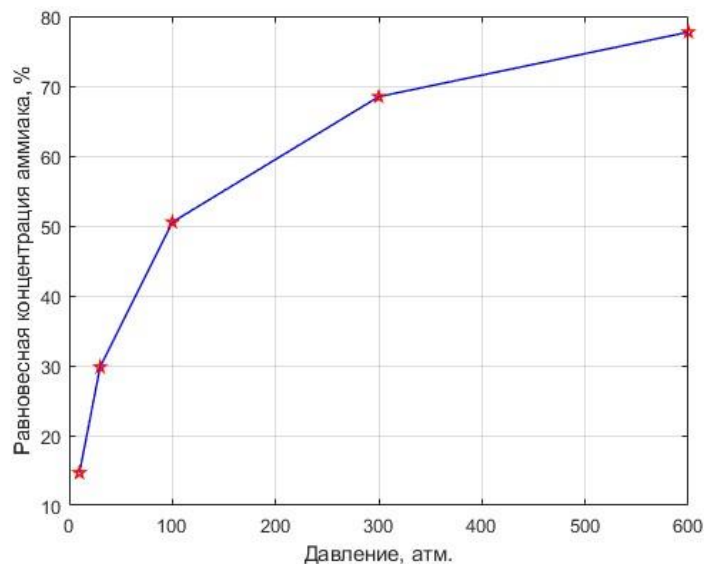


Рисунок 2.8 – Равновесная концентрация аммиака при температуре 500 °C в зависимости от давления P (атм.), принимающего значения 10, 30, 100, 300, 600

Ниже представлены программы для проведения вычислений из данного примера.

```
function f = fun_amm(C)
global beta J T P
Kp = 10^(-2074.8./T+2.4943*log10(T)+beta.*T-1.8565*10^(-7)*T.^2-J);
f = C.^2-200*C-308.*sqrt(Kp) ./P.*C+10^4;
```

```
% script calculate_amm
clc
clear
%Задание значений констант
global beta J T P
T = 773;
Beta = [0; 3.4*10^(-5); 1.256*10^(-4); 1.256*10^(-4);
1.0856*10^(-3)];
```

```

JJ = [1.993; 2.021; 2.113; 2.206; 3.059];
PP = [10; 30; 100; 300; 600];

k = 5;
C_amm = zeros(1, k);

for i = 1:k
    betta = Betta(i);
    J = JJ(i);
    P = PP(i);
    C_amm(i) = fzero('fun_amm', [0, 100]);
end

disp('Значения корней:')
C_amm = C_amm

%построение графика
figure(1)
plot(PP, C_amm, 'b-', 'LineWidth', 1)
hold on
plot(PP, C_amm, 'rp', 'LineWidth', 1)

grid on
xlabel('Давление, атм.')
ylabel('Равновесная концентрация аммиака, %')
%title('Зависимость равновесной степени конверсии от температуры')

```

Индивидуальные задания для самостоятельной работы

Задание. Произвести расчет свойств реальных газов по уравнению Редлиха-Квонга согласно условиям задачи.

Расчет P – V – T свойств газов в широком интервале изменения условий эксперимента требует использования уравнений состояния реального газа. Наиболее широкое распространение получили кубические (относительно объема) уравнения состояния. По литературным данным лучшим двухконстантным уравнением состояния реального газа является уравнение Редлиха-Квонга.

Определить объем N_2O при температуре T (К) и давлении P (кПа). Для решения использовать уравнение Редлиха-Квонга:

$$P = \frac{R \cdot T}{V - b} - \frac{a}{\sqrt{T} \cdot V \cdot (V + b)},$$

где $R = 8314$ кПа/(моль·К) – газовая постоянная; a , b – постоянные коэффициенты, связанные с критическими параметрами:

$$a = 0.4278 \frac{R^2 \cdot T_k^{2.5}}{P_k}, \quad b = 0.0897 \frac{R \cdot T_k}{P_k}.$$

Здесь T_k, P_k – критические температура и давление соответственно. Для N_2O критические параметры равны: $T_k = 309.65$ К, $P_k = 7.25$ мПа.

Зная любые два из параметров P , T , V , можно, решив уравнение Редлиха-Квонга, определить третий.

Таким, образом, при заданных условиях задачи следует определить объем газа. Следует найти все корни уравнения относительно V из промежутка [50, 12000] моль.

Таблица 2.1 – Значения параметров задачи (варианты для задания)

	Вариант									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Температура T , К	273	265	265	281	281	263	263	281	281	256
Давление P , кПа	1900	1900	2030	2930	1960	1960	2000	2000	2100	1910

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 3 РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПЕРЕНОСА МЕТОДОМ ЯВНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ

Задачи переноса в математическом моделировании химико-технологических процессов сводятся либо к решению уравнения в частных производных параболического типа: процессы молекулярной диффузии

$$\frac{\partial C}{\partial t} = a \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3.1)$$

или процессы ламинарного переноса (процессы в аппаратах идеального вытеснения)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -a \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + \varphi(C). \quad (3.2)$$

Дополнительными условиями к этим уравнениям являются начальные и граничные условия. Начальные условия задают концентрацию в начальный момент времени

$$C(0, x) = \varphi(x), \quad x \in [0, L]. \quad (3.3)$$

Значительное количество задач сводится к граничным условиям I рода, т.е. на границах системы заданы исходные концентрации:

$$C(t, 0) = \psi(t), \quad C(t, L) = \Psi(t), \quad t > 0. \quad (3.4)$$

В частном случае функции времени для граничных условий могут быть постоянными.

Очевидно, что решением в каждой из задач будет некоторая функция $C(t, x)$, удовлетворяющая уравнению (3.1) или (3.2), соответствующим начальным условиям (3.3) и граничным условиям (3.4). При этом, для существования решения уравнения (3.2) требуется лишь одно из граничных условий.

Основным методом решения уравнений в частных производных является составление разностных схем, основанных на замене непрерывных производных конечно-разностными отношениями. При этом наиболее простые алгоритмические решения соответствуют явным разностным схемам.

3.1. Описание метода конечных разностей

Суть метода конечных разностей состоит в замене исходной (непрерывной) задачи математической физики (дифференциальное уравнение в частных производных с начальными и/или граничными условиями) ее дискретным аналогом (разностной схемой), а также последующим применением специальных алгоритмов решения дискретной задачи.

Основные этапы решения задачи конечных разностей:

1 этап (дискретизация). На этом этапе область непрерывного изменения аргументов заменяется конечным или счетным набором точек, называемых узлами. Совокупность всех узлов называют сеткой. Вместо функций непрерывных аргументов рассматриваются функции, определенные на сетке (сеточной области), называемые сеточными функциями. Уравнения и условия, входящие в описание задачи математической физики, заменяются их дискретными аналогами. В результате получается сеточная (разностная) схема.

2 этап (аналитическое исследование схемы). Проводится теоретическое исследование основных свойств разностной схемы: аппроксимации, устойчивости и сходимости. Определяются порядки сходимости схемы относительно параметров дискретизации.

3 этап (алгоритмизация). Осуществляется разработка алгоритма решения дискретной задачи, разработка компьютерной программы, реализующей алгоритм, проводится отладка программы.

4 этап (экспериментальное исследование). Формируются специальные тестовые задачи, решение которых удастся вычислить с высокой точностью, используя альтернативный метод. Далее с помощью разработанной программы проводится исследование сходимости сеточных решений тестовых задач к высокоточным при измельчении сетки. Анализируя результаты вычислительных экспериментов, проверяют соответствие фактических порядков сходимости теоретическим. Экспериментальное подтверждение сходимости на тестовых примерах является хорошей (но не абсолютной) гарантией практической пригодности разработанной схемы для решения исходной задачи.

Рассмотрим метод конечных разностей на примере представленных выше задач. Имеется две переменные: t – переменная времени, x – пространственная переменная. Области изменения переменных: $t \in [0, T]$, $x \in [0, L]$. Тем самым, область решения нашей задачи представляет собой прямоугольник $(t, x) \in [0, T] \times [0, L]$.

Отрезок $[0, T]$ разобьем равномерно с шагом τ точками $t_i = t_{i-1} + \tau$, $i = 1, 2, \dots, K$ ($t_0 = 0, t_K = T$). Отрезок $[0, L]$ разобьем равномерно с шагом h точками $x_j = x_{j-1} + h$, $j = 1, 2, \dots, N$ ($x_0 = 0, x_N = L$). Величины $\tau = \frac{T}{K}$ и $h = \frac{L}{N}$ называются шагами аппроксимации по переменной времени и пространственной переменной соответственно. Конечно-разностная сетка представлена на рис. 3.1.

Через $C_{i,j}$ обозначим приближенное значение решения $C(t, x)$ в точке (t_i, x_j) (соответствующей узлу (i, j)). Очевидно, что наличие начального усло-

вия (3.3) приводит к тому, что $C_{0,j} = C(0, x_j) = \varphi(x_j)$, $j = 1, 2, \dots, N$, т.е. эти величины известны и определяются из начальных условий.

Ясно, что из первого граничного условия (3.4) можно также определить $C_{i,0} = \psi(t_i)$, $i = 1, 2, \dots, K$, из второго граничного условия (3.4) – $C_{i,T} = \Psi(t_i)$, $i = 1, 2, \dots, K$.

Таким образом, для приближенного решения соответствующей задачи требуется определить значения решения в остальных узлах сетки.

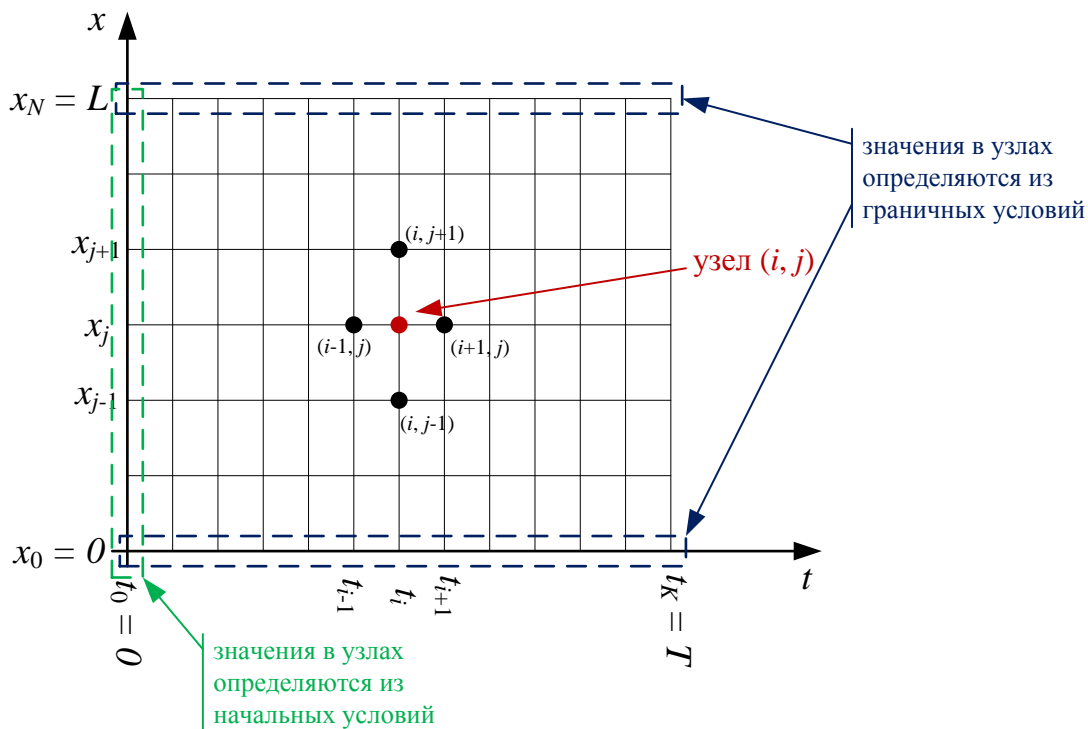


Рисунок 3.1 – Конечно-разностная сетка

При аппроксимации соответствующих задач требуются конечно-разностные формулы для приближенного вычисления производных. Существуют большое количество формул для конечно-разностной аппроксимации производных. В данном случае ограничимся рассмотрением симметричных формул для аппроксимации производных первого и второго порядков. Пусть имеется некоторая функция $f(z)$; z_{i-1} , z_i и z_{i+1} – значения ее аргумента (равноотстоящие друг от друга с шагом Δz); f_{i-1} , f_i и f_{i+1} – значения данной функции при указанных значениях аргумента.

Тогда для приближенного вычисления производных первого и второго порядков в точке z_i можно использовать следующие формулы:

$f'(z_i) = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta z} = \frac{f(z_{i+1}) - f(z_i)}{\Delta z}$	формула «правых» разностей (первого порядка точности)
$f'(z_i) = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta z} = \frac{f(z_i) - f(z_{i-1})}{\Delta z}$	формула «левых» разностей (первого порядка точности)
$f'(z_i) = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2 \cdot \Delta z} = \frac{f(z_{i+1}) - f(z_{i-1})}{2 \cdot \Delta z}$	формула «центральных» разностей (второго порядка точности)
$f''(z_i) = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{(\Delta z)^2} = \frac{f(z_{i+1}) - 2f(z_i) + f(z_{i-1}))}{(\Delta z)^2}$	формула «центральных» разностей (второго порядка точности)

Согласно таким схемам, уравнение (3.1) преобразуется к виду:

$$\frac{C_{i+1,j} - C_{i,j}}{\tau} = a \cdot \frac{C_{i,j+1} - 2C_{i,j} + C_{i,j-1}}{h^2}$$

или

$$C_{i+1,j} = C_{i,j} + \frac{a\tau}{h^2} \cdot (C_{i,j+1} - 2C_{i,j} + C_{i,j-1}), \quad (3.5)$$

где τ и h – шаги по временной и пространственной переменным, $i = 1, 2, \dots$ – номер узла по временной переменной, $j = 1, 2, \dots$ – номер узла по пространственной переменной.

Уравнение (3.2) преобразуется к виду

$$\frac{C_{i+1,j} - C_{i,j}}{\tau} = -a \cdot \frac{C_{i,j} - C_{i,j-1}}{h} + \varphi(C_{i,j})$$

или

$$C_{i+1,j} = C_{i,j} - \frac{a\tau}{h} \cdot (C_{i,j} - C_{i,j-1}) + \varphi(C_{i,j}). \quad (3.6)$$

Тем самым, значения искомой функции на последующем временном слое выражаются явно через значения на предшествующем временном слое. Алгоритм модели включает два вложенных цикла, по пространственной, а затем по временной переменной. Внутри каждого цикла вычисляются значения искомой функции последовательной подстановкой предшествующего временного слоя в последующий.

3.2. Вычислительный пример №1

Проведем вычисления для определения значений концентрационного профиля задачи молекулярной диффузии ионов меди (II) для моментов времени 5, 10, 30, 60, 120 сек с граничным условием в виде линейной развертки потенциала во времени в катодном направлении со скоростью 4 мВ/с при условии, что потенциал электрода подчиняется уравнению Нернста, развертка потенциала

начинается от стандартного потенциала медного электрода. На расстоянии 0,5 см от поверхности электрода исходная концентрация не изменяется. Коэффициент диффузии ионов меди (II) составляет 10^{-4} см²/с. Начальная концентрация ионов меди в системе составляет 1 моль/л. Шаг разностной схемы по координате составляет 10^{-2} см, по времени – 0,1 с.

Согласно условиям задачи, имеем уравнение молекулярной диффузии следующего вида

$$\frac{\partial C}{\partial t} = a \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2},$$

где коэффициент диффузии ионов меди $a = 10^{-4}$ см²/с.

Начальные условия постоянны и имеют вид: $C(0, x) = 1$ моль/л.

Граничное условие на правом конце: $C(t, 0,5) = 1$ моль/л.

Чтобы получить явную форму граничного условия при $x = 0$, запишем уравнение Нернста для медного электрода:

$$E(t) = E^0 + \frac{RT}{nF} \cdot \ln(C(t, 0)),$$

где $E(t)$ – электродный потенциал металла в момент времени t (В);

E^0 – стандартный электродный потенциал металла (В);

R – универсальная газовая постоянная равная 8.31 Дж/(моль·К);

F – постоянная Фарадея, равная 96485.35 Кл/моль;

T – абсолютная температура (К);

n – число электронов, принимающих участие в процессе (в нашем случае $n = 2$).

Если подставить в уравнение значения R и F , принять температуру равной $T = 298\text{K}$ (25°C) и перейти от натуральных логарифмов к десятичным ($\lg(x) \approx 0.43429 \ln(x)$), уравнение Нернста упростится и примет вид:

$$E(t) = E^0 + \frac{0,059}{2} \cdot \lg(C(t, 0)).$$

Из последнего уравнения можно выразить $C(t, 0) = 10^{\frac{2(E(t)-E^0)}{0,059}}$.

С учетом условия начала и скорости развертки получим:

$$C(t, 0) = 10^{\frac{2vt}{0,059}}, \quad (3.7)$$

где $v = 0,004$ В/с – скорость развертки потенциала.

С учетом условий задачи соотношения для разностных уравнений примут вид:

$$C_{i+1,j} = C_{i,j} + \frac{a \cdot \tau}{h^2} \cdot (C_{i,j+1} - 2C_{i,j} + C_{i,j-1}),$$

$$C_{i,0} = 10^{\frac{2 \cdot 0,004 \cdot i \cdot \tau}{0,059}},$$

$$C_{i;0,5} = 1,$$

$$C_{0;j} = 1,$$

где $\tau = 0,1$ с – шаг по временной переменной,

$h = 10^{-2}$ см – шаг по пространственной переменной.

Так как длина интервала, на котором решается задача, составляет 0,5 см, а шаг по пространственной переменной 0,01 см, количество узлов по координате составит $N = 0,5/0,01 + 1 = 51$. Максимальное количество узлов по временной переменной равно $K = 120/0,1 + 1 = 1201$.

Составим вычислительную программу в **ППП MATLAB**. Листинг вычислительной программы представлен в п. 3.3. Визуализируем полученные результаты с помощью графиков. На рис. 3.2 представлены концентрации в заданные моменты времени.

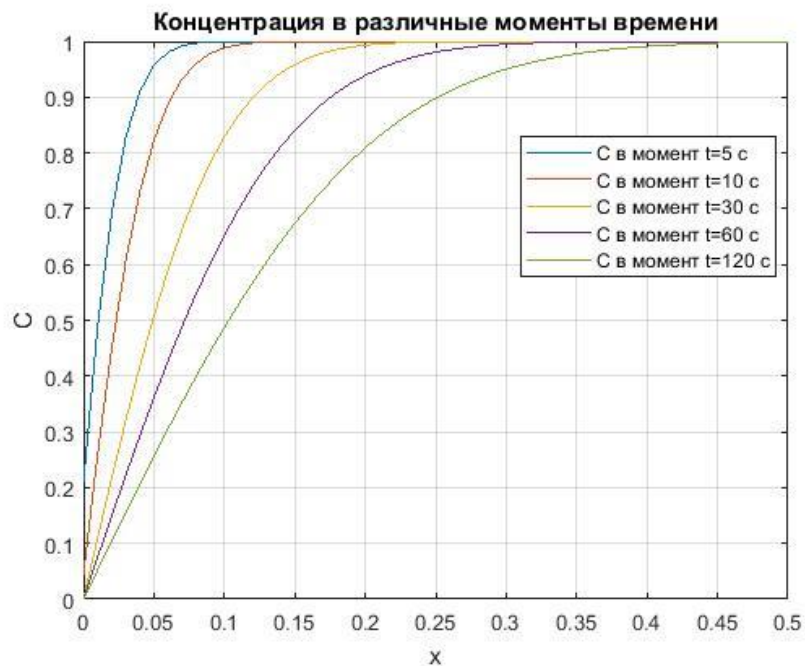


Рисунок 3.2 – Значение концентрации в заданные моменты времени

3.3. Листинг вычислительной программы для примера 1

```
function LabRab3N1
clc; clear all;
%входные данные
v=0.004; %скорость линейной развертки потенциала
a=10^-4; %коэффициент диффузии
L=0.5; %длина
T=120; %интервал времени
h=0.01; %шаг по пространственной переменной
tau=0.1; %шаг по временной переменной
```

```

x=0:h:L; %значения пространственной переменной
t=0:tau:T; %значения временной переменной
N=L/h+1; %количество узлов по координате
K=T/tau+1; %количество узлов по времени
C=zeros(K, N); %создание массива для матрицы концентраций
C(1,:)=1; %начальные условия
for i=1:K
    C(i,1)=10^(-2*v*t(i)/0.059); %граничные условия слева (при
x=0)
    C(i,N)=1; %граничные условия справа (при x=0.5)
end;
for i=1:K-1
    for j=2:N-1
        C(i+1,j)=C(i,j)+a*tau/h^2*(C(i,j+1)-2*C(i,j)+C(i,j-1));
    end;
end;
figure(1)
K5=5/tau+1; K10=10/tau+1; K30=30/tau+1; K60=60/tau+1; %коэффициен-
ты соответствующего временного слоя
plot(x, C(K5,:), x, C(K10,:), x, C(K30,:), x, C(K60,:), x, C(K,:))
grid on
xlabel('x')
ylabel('C')
legend('C в момент t=5 с', 'C в момент t=10 с', 'C в момент t=30
с', 'C в момент t=60 с', 'C в момент t=120 с')
title('Концентрация в различные моменты времени')

figure(2)
[tt, xx]=meshgrid(0:tau:T, 0:h:L);
mesh(tt, xx, C')
xlabel('t')
ylabel('x')
zlabel('C')
title('Концентрация')

```

3.4. Вычислительный пример №2

Получим концентрационные профили для значений времени 5, 10, 20, 50 с задачи переноса в реакторе идеального вытеснения, в котором протекает реакция 1-го порядка с константой скорости 0,05, скорость переноса реагентов составляет 0,2 см/с. Высота реактора равна 20 см. Начальное значение концентрации реагента составляет 1 моль/л, значение концентрации на левом конце – 1 моль/л. Принять шаг по координате равным 0,5 см, шаг по времени – 0,5 с.

Для реакции первого порядка функция $\phi(C)$ будет иметь вид: $\phi(C) = -kC$. По условиям задачи константа скорости равна $k = 0,05$, скорость переноса реагентов – $a = 0,2$. Тем самым, получаем ламинарного переноса

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -a \cdot \frac{\partial C}{\partial x} - k \cdot C.$$

Концентрация в начальный момент времени равна $C(0, x) = 1$ моль/л, где $L = 20$ см – высота реактора. Граничные условия на левом конце: $C(t, 0) = 1$ моль/л.

С учетом данных задачи разностная схема примет вид:

$$C_{i+1,j} = C_{i,j} - \frac{a\tau}{h} \cdot (C_{i,j} - C_{i,j-1}) - k \cdot C_{i,j},$$

где $\tau = 0,5$ с – шаг по временной переменной,

$h = 0,5$ см – шаг по пространственной переменной.

Вычислим количество узлов по координате: $N = 20/0,5 + 1 = 41$, максимальное количество узлов по временной переменной: $K = 50/0,5 + 1 = 101$.

Составим вычислительную программу в **ППП MATLAB** и проведем вычисления. Листинг вычислительной программы представлен в п. 3.5. Визуализируем полученные результаты с помощью графиков. На рис. 3.3 представлены концентрации в заданные моменты времени, На рис. 3.4 – концентрация на правом конце в течение всего временного промежутка.

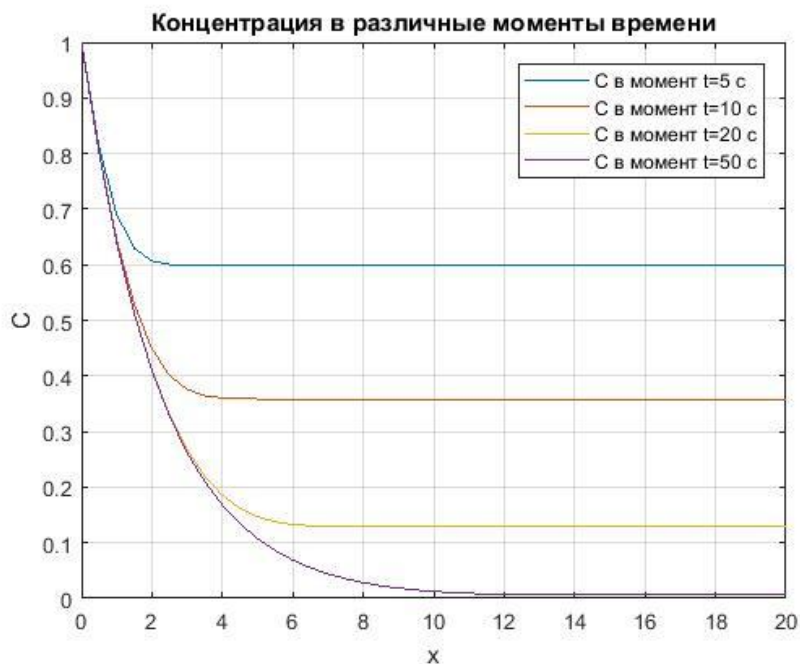


Рисунок 3.3 – Значение концентрации в заданные моменты времени

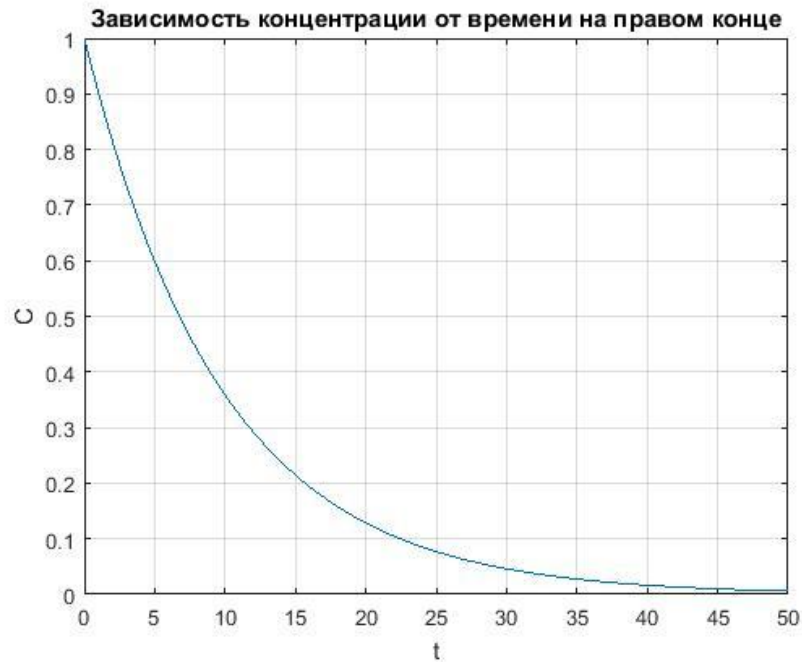


Рисунок 3.4 – Зависимость концентрации от времени на правом конце

3.5. Листинг вычислительной программы для примера 2

```
function LabRab3N2
clc; clear all;
%входные данные
k=0.05; %константа скорости
a=0.2; %скорость переноса реагентов
L=20; %длина
T=50; %интервал времени
h=0.5; %шаг по пространственной переменной
tau=0.5; %шаг по временной переменной
x=0:h:L; %значения пространственной переменной
t=0:tau:T; %значения временной переменной
N=L/h+1; %количество узлов по координате
K=T/tau+1; %количество узлов по времени
C=zeros(K, N); %создание массива для матрицы концентраций
C(1,:)=1; %начальные условия
for i=1:K
    C(i,1)=1; %граничные условия слева (при x=0)
end;
for i=1:K-1
    for j=2:N
        C(i+1,j)=C(i,j)-a*tau/h*(C(i,j)-C(i,j-1))-k*C(i,j);
    end;
end;
figure(1)
K5=5/tau+1; K10=10/tau+1; K20=20/tau+1; %коэффициенты соответствующего временного слоя
plot(x, C(K5,:), x, C(K10,:), x, C(K20,:), x, C(K,:))
grid on
xlabel('x')
ylabel('C')
```

```
legend('C в момент t=5 с', 'C в момент t=10 с', 'C в момент t=20  
с', 'C в момент t=50 с')  
title('Концентрация в различные моменты времени')  
  
figure(2)  
plot(t, C(:,N))  
grid on  
xlabel('t')  
ylabel('C')  
title('Зависимость концентрации от времени на правом конце')  
  
figure(3)  
[tt, xx]=meshgrid(0:tau:T, 0:h:L);  
mesh(tt, xx, C')  
xlabel('t')  
ylabel('x')  
zlabel('C')  
title('Концентрация')
```

Индивидуальные задания для самостоятельной работы

Задание 1. Получить концентрационные профили задачи молекулярной диффузии ионов меди (II) для заданных моментов времени с граничным условием в виде линейной развертки потенциала во времени в катодном направлении со скоростью v мВ/с при условии, что потенциал электрода подчиняется уравнению Нернста, развертка потенциала начинается от стандартного потенциала медного электрода. На расстоянии L см от поверхности электрода исходная концентрация не изменяется. Коэффициент диффузии ионов составляет a см²/с. Начальная концентрация ионов меди в системе составляет 1 моль/л. Все данные представлены в таблице 3.1. Шаг разностной схемы по координате принять равным 10^{-2} см, по времени – 0,1 с.

Таблица 3.1 – Значения параметров задачи (варианты для задания 1)

	Вариант									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Коэффициент диффузии ионов a , см ² /с	$2 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}	$3 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$
Длина L , см	0,6	0,7	0,3	0,4	0,6	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6
Скорость развертки потенциала v , мВ/с	2	6	3	3	2	7	5	4	2	5
Значения моментов времени для вычисления профилей	15	10	5	5	5	5	10	10	5	5
	30	60	10	20	30	10	30	15	30	15
	90	120	30	60	60	20	60	30	60	30
	120	240	90	120	120	40	90	60	90	45

Задание 2. Получить концентрационные профили для заданных моментов времени задачи переноса в реакторе идеального вытеснения, в котором протекает реакция 1-го порядка с константой скорости k , скорость переноса реагентов составляет a см/с. Высота реактора равна L см, начальное значение концентрации реагента составляет 1 моль/л. Все данные представлены в таблице 3.2. Шаг по координате принять равным 0,25 см, шаг по времени – 0,5 с.

Таблица 3.2 – Значения параметров задачи (варианты для задания 2)

	Вариант									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Константа скорости k ,	0,03	0,04	0,009	0,015	0,06	0,08	0,05	0,07	0,01	0,04
Скорость переноса реагентов составляет a , см/с	0,2	0,45	0,3	0,5	0,3	0,2	0,2	0,3	0,2	0,45
Высота реактора равна L , см	25	30	20	25	20	10	15	20	20	30
Значения моментов времени для вычисления профилей	10	15	15	10	5	5	15	5	10	5
	20	30	30	20	25	20	45	10	30	30
	50	45	60	40	45	45	75	20	60	60
	70	60	90	80	65	60	90	50	120	90

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 4 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ОДНОФАЗНЫХ ПОТОКОВ

Любой химико-технологический процесс, как правило, сопровождается перемещением материальных потоков жидкости или сыпучих материалов. Поэтому при составлении математических моделей ХТП особое значение приобретает описание движения потоков.

Гидродинамика реальных потоков настолько сложна, что в настоящее время возможно составить в общем виде лишь уравнения для однофазных потоков. Однако даже для этих уравнений решение можно найти только для частных случаев. Для многофазных же потоков не получены уравнения даже в общем виде. Поэтому при разработке моделей принимается упрощающие допущения.

Модели гидродинамики записываются в виде **дифференциальных уравнений**, выражающих связь между наиболее характерными переменными процесса. Универсальным видом математической модели гидродинамики является уравнение, характеризующее изменение концентрации вещества в потоке, обусловленное только движением этого потока

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} - U_y \cdot \frac{\partial C}{\partial y} - U_z \cdot \frac{\partial C}{\partial z} + D \cdot \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right). \quad (4.1)$$

Считают, что изменение концентрации за счет химической реакции не происходит, т.е. скорость химической реакции принимается равной нулю ($r = 0$).

При построении модели гидродинамики следует учитывать, что модель должна:

1. Отражать физическую сущность реального потока и в то же время иметь достаточно простое математическое описание.
4. Позволять определять параметры модели расчетным или экспериментальным способом.
3. Быть удобной для использования при расчетах конкретных процессов.

Известно, что в аппаратах химической технологии в результате действия кинетических, гидродинамических факторов, а также факторов тепло- и массообмена имеет место неравномерность распределения элементов потока во времени как по сечению, так и вдоль потока. При этом степень неравномерности характеризует структуру реального потока.

Степень неравномерности распределения элементов потока во времени можно оценить по распределению вещества в потоке. Поэтому задача оценки структуры потока практически сводится к отысканию отклика на выходе аппа-

рата, в виде изменения концентрации во времени, после нанесения возмущения на вход аппарата.

4.1. Время пребывания элементов потока как случайная величина

В реальном непрерывном потоке (жидкости, газа и т.д.) всегда имеет место неравномерность распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате в силу стохастической природы движения частиц на микроуровне, не говоря о причинах макроскопического характера. Микроскопическими причинами могут быть неравномерность профиля скоростей потока, турбулизация потока, молекулярная диффузия, наличие застойных зон и т.п. Для оценки неравномерности распределения элементов потоков вводится ряд функций распределения.

С произвольным распределением элементов потока по времени пребывания t в аппарате можно связать некоторую функцию $F(t)$, характеризующую долю элементов, пребывающих в аппарате в течение времени t или меньше t . Эта функция называется функцией распределения времени пребывания элементов потока. Функция $F(t)$ – неубывающая функция времени t , которая принимает нулевое значение при $t = 0$ и асимптотически приближается к единице при $t \rightarrow \infty$. Функция распределения времени пребывания имеет вероятностный смысл: $F(t)$ – вероятность того, что элементы потока находились в аппарате в течении времени t или менее.

Производная $F(t)$ по времени t

$$\varphi(t) = \frac{dF(t)}{dt} \quad (4.2)$$

есть плотность вероятности, которую называют дифференциальной функцией времени пребывания элементов потока. Безразмерная концентрация трассера (*трассер* – чужеродное вещество, смешанное с данным веществом с целью определения распределения или местонахождение последнего) равна

$$\varphi(t) = \frac{C(t)}{C_{cp}}, \quad (4.3)$$

где $C(t)$ – размерная концентрация трассера;

$$C_{cp} = \frac{Q}{V} \text{ – средняя концентрация трассера;}$$

V – объем потока в аппарате между сечениями ввода и вывода возмущения;

Q – количество трассера.

Доля потока, элементы которого пробыли в аппарате время от t до $t + dt$, определяется по формуле

$$\varphi(t) \cdot \Delta t \quad (4.4)$$

и является вероятностью того, что время пребывания частиц потока в аппарате находится в интервале $(t, t + dt)$.

Между $F(t)$ и $\varphi(t)$ имеется связь

$$F(t) = \int_0^t \varphi(t) dt, \quad F(t \rightarrow \infty) = \int_0^{\infty} \varphi(t) dt = 1. \quad (4.5)$$

Другими словами, $F(t)$ – доля потока, элементы которого пробыли в аппарате время, не превышающее t . Функция $F(t)$ – интегральная функция распределения времени пребывания элементов потока в аппарате.

4.2. Экспериментальное изучение распределения времени пребывания элементов потока

Распределение времени пребывания частиц потока (жидкости, газа или сыпучего материала) **в аппарате и параметры моделей определяют экспериментальным путем.** Для этой цели получили широкое распространение методы нанесения возмущения в определенном сечении потока и фиксации вызванных им последствий в другом сечении потока. Сигнал может быть различным по форме и по физической природе. Наибольшее распространение получили импульсная и ступенчатая формы возмущений. В качестве сигнала в поток вводят трассер (индикатор, краситель, солевой раствор и т.п.), химически не взаимодействующий со средой и не участвующий в массообмене.

Отклик системы на нанесенное возмущение характеризует распределение времени пребывания частиц потока в аппарате. Функция отклика на возмущение, записанная в безразмерных переменных (концентрация – время), является функцией времени пребывания элементов потока в объеме, ограниченном сечением ввода трассера и замера отклика системы.

4.3. Интегральная и дифференциальная функции распределения времени пребывания элементов потока

В химической технологии для определения функции распределения времени пребывания часто используются два вида возмущения: **импульсное** $\delta(t)$ (дельта-функция) и ступенчатое $1(t)$ (единичный скачок).

При импульсной подаче трассера на выходе системы получается дифференциальная функция распределения времени прерывания (рис. 4.1). Физически данная форма подачи трассера означает, что на вход аппарата в некоторый момент времени $t = t_0$ мгновенно подается единичное количество трассера. Одно-

временно начинают регистрировать концентрацию трассера во времени на выходе аппарата.

При подаче трассера в виде единичного скачка на выходе системы получается интегральная функция распределения времени пребывания (рис. 4.2). Физически рассматриваемая форма подачи означает, что в момент времени $t = t_0$ мгновенно включается подача трассера, после чего концентрация на входе аппарата поддерживается постоянной, т.е.

$$C_{\text{ex}}(t) = \begin{cases} C_0 = \text{const}, & t \geq t_0, \\ 0, & t < t_0. \end{cases}$$

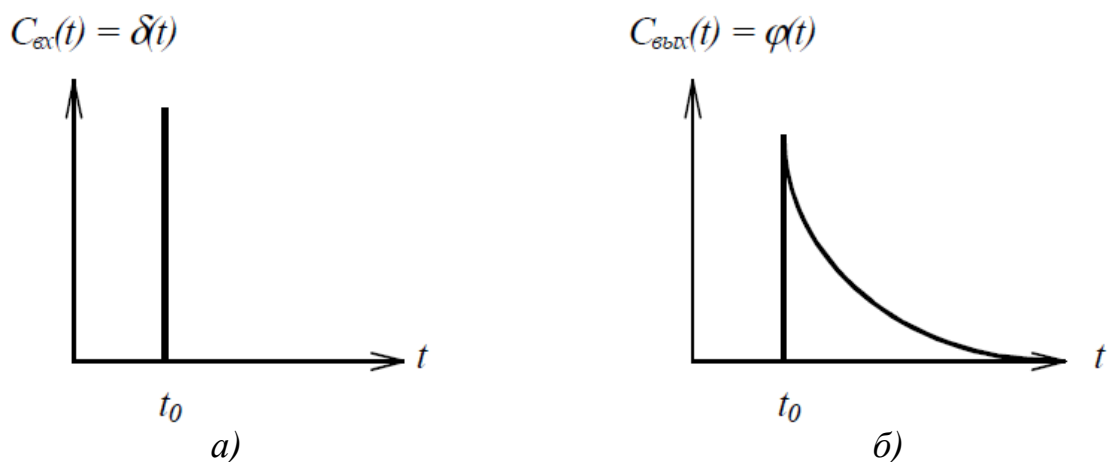


Рисунок 4.1 – $\delta(t)$ функция (а) и отклик на $\delta(t)$ функцию (б)

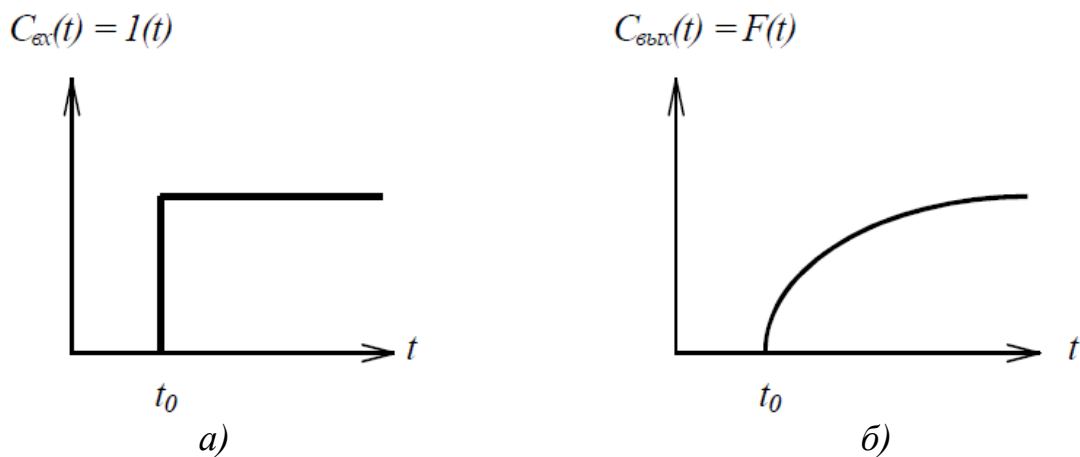


Рисунок 4.2 – $1(t)$ -функция (а) и отклик на $1(t)$ функцию (б)

4.4. Типовые модели структуры потоков

Известно, что структура потока характеризуется степенью перемешивания частиц потока, которая определяет поле концентраций и градиент температуры. Это обстоятельство послужило предпосылкой для установления по характеру перемешивания некоторых типовых моделей гидродинамики.

К типовым моделям относится **модель идеального перемешивания (МИП)** и **модель идеального вытеснения (МИВ)**. Эти модели теоретические и соответствуют идеальным потокам, однако, в ряде случаев их можно использовать для характеристики реальных потоков.

К типовым моделям структуры потоков также относятся **диффузионная, ячеечная и комбинированные модели**. Эти модели характеризуют реальные потоки и при предельных условиях переходят в одну из теоретических моделей – МИВ и МИП.

Подробное описание типовых моделей представлено в лекционном курсе данной дисциплины.

4.5 Алгоритм идентификации математического описания структуры потоков

Наибольшее распространение получили методы идентификации, основанные на **сравнении различных числовых характеристик функций отклика**. При этом используется понятие момента, заимствованное из теории вероятностей, согласно которой функция распределения случайной величины может быть охарактеризована числовыми величинами (моментами различных порядков).

Безразмерным начальным моментом i -го порядка, характеризующим φ -кривую, является интеграл вида

$$M_i = \int_0^{\infty} t^i \varphi(t) dt, \quad (4.6)$$

где t и $\varphi(t)$ – безразмерные время и концентрация.

Безразмерный центральный момент i -го порядка

$$\eta_i = \int_0^{\infty} (t - M_1)^i \varphi(t) dt, \quad (4.7)$$

где M_1 – среднее значение, или математическое ожидание, равное первому начальному моменту.

Для функции распределения времени пребывания, получаемой при импульсном вводе трассера в поток на входе его в аппарат, **первый начальный момент M_1 представляет собой среднее время пребывания**.

Из выражения (4.7) следует, что **первый центральный момент всегда равен нулю**, т.е. $\eta_1 = 0$.

Второй центральный момент, называемый дисперсией, является мерой рассеяния времени пребывания и определяется по формуле

$$\eta_2 = \sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - M_1)^2 \varphi(t) dt = M_2 - M_1^2. \quad (4.8)$$

Третий центральный момент $\eta_3 = 0$ называется **асимметрией**, характеризует степень асимметричности кривой распределения (φ -кривой). Он определяется из уравнения

$$\eta_3 = \int_0^{\infty} (t - M_1)^3 \varphi(t) dt. \quad (4.9)$$

Четвертый центральный момент, называемый **эксцессом распределения**, характеризует островершинность распределения и равен

$$\eta_4 = \int_0^{\infty} (t - M_1)^4 \varphi(t) dt. \quad (4.10)$$

Обычно при расчете моментов по экспериментальным кривым используется **ступенчатая аппроксимация**, т.е. расчет моментов выполняется по формулам:

– начальные моменты

$$M_0 = \sum_{i=1}^n \Delta t \cdot c_i, \quad M_1 = \sum_{i=1}^n \Delta t \cdot t_i \cdot c_i, \quad M_2 = \sum_{i=1}^n \Delta t \cdot t_i^2 \cdot c_i$$

(M_0 – площадь, ограниченная кривой $\varphi(t)$ и осью t);

– масштабированные моменты

$$M_0^M = \frac{M_0}{M_0} = 1, \quad M_1^M = \frac{M_1}{M_0}, \quad M_2^M = \frac{M_2}{M_0};$$

– безразмерный момент

$$M_i^T = \frac{M_i^M}{(M_1^M)^i} \quad \left(M_2^T = \frac{M_2^M}{(M_1^M)^2} \right).$$

Между безразмерными моментами и параметрами моделей существуют следующие соотношения

$$M_{2ODM}^T = 1 + \frac{2}{Pe}, \quad M_{2ЯМ}^T = 1 + \frac{1}{n},$$

где Pe – критерий Пекле, n – число ячеек.

Таким образом, алгоритм идентификации математической модели структуры потока заключается в вычислении всех моментов и в определении с их помощью параметров выбранной модели.

4.6. Практический пример

Через насадочный аппарат длиной $L = 10$ м, внутренним диаметром $d = 0,065$ м и коэффициентом заполнения насадкой $\varphi = 0,7$ протекает жидкость с объемной скоростью $v = 0,001$ м³/с. Построить математическую модель структуры гидродинамического потока в аппарате.

Все вычисления в работе выполнены в ППП MATLAB. Листинг вычислительной программы представлен в п. 4.7.

Этап 1. Проведение эксперимента. На вход аппарата подается трассирующее вещество в виде δ -функции. На выходе аппарата замеряем его концентрацию, представляющую собой дифференциальную функцию распределения времени пребывания. Данные представлены в табл. 4.1. На рис. 4.4. представлено график полученной функции.

Таблица 4.1 – Исходная функция распределения

t	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
c	0	1	3.8	7.5	14.6	17.25	21.3	22.6	21.8	20.25	18.4
t	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
c	16.8	14	12.5	9.6	8.1	6.2	5.4	3.8	3.1	2.3	2.1
t	22	23	24	25	26	27	28	29	30		
c	1.4	1.35	1	1.05	0.5	0.6	0.3	0.3	0.1		

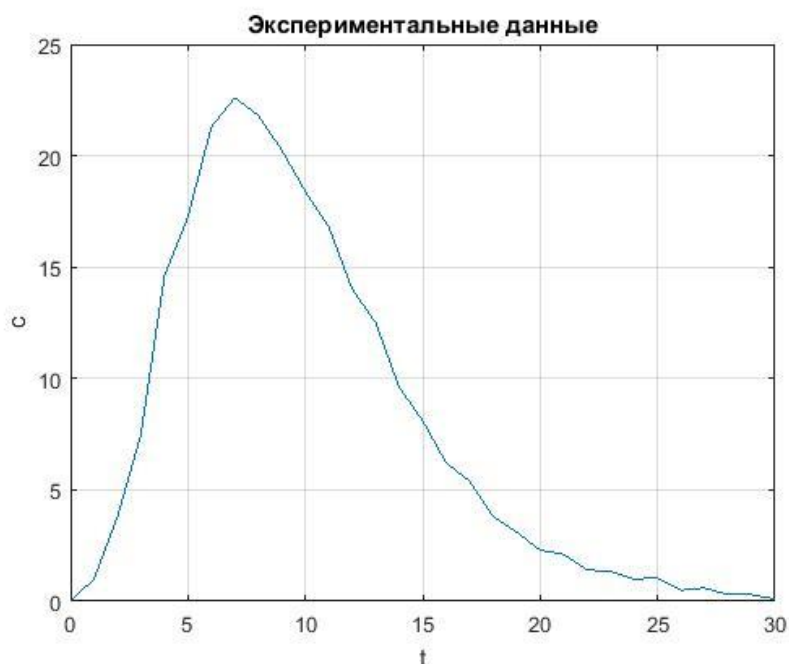


Рисунок 4.4 – Функция распределения времени пребывания

Этап 2. Выбор вида модели. Выбор математической модели можно сделать на основе анализа кривой функции распределения времени пребывания частиц в аппарате и соотношения его размеров. Исходя из соотношения размеров аппарата ($L/d > 20$), можно выбрать либо **однопараметрическую диффузионную модель**, либо **ячеечную модель**. Более простой для исследования является ячеечная модель.

Этап 3. Идентификация параметров выбранной зависимости.

Для нахождения значения **критерия Пекле** Pe рассмотрим дифференциальную функцию распределения времени пребывания, полученную на основе экспериментальных данных. Эта функция может быть охарактеризована ее числовыми характеристиками – моментами. Для определения моментов построенный график разбиваем по оси X на равные интервалы и методом прямоугольников находим площадь под кривой для каждого интервала. Положим шаг по времени равным $\Delta t = 2$ (ширина каждого прямоугольника), в качестве высоты принимаем значение функции распределения в центральных (нечетных) узлах.

Вычислим **размерные моменты**

$$M_0 = \sum_{i=1}^{15} \Delta t \cdot c_{2i} = 239,8,$$

$$M_1 = \sum_{i=1}^{15} \Delta t \cdot t_{2i} \cdot c_{2i} = 2392,$$

$$M_2 = \sum_{i=1}^n \Delta t \cdot t_{2i}^2 \cdot c_{2i} = 2,9762 \cdot 10^4.$$

Вычислим **приведенные и безразмерный моменты**

$$M_1^M = \frac{M_1}{M_0} = 9,975, \quad M_2^M = \frac{M_2}{M_0} = 124,1126,$$

$$M_2^T = \frac{M_2^M}{(M_1^M)^2} = 1,2474.$$

Зная второй безразмерный момент второго порядка, можно вычислить по приведенным ранее в п. 4.5 формулам **значение критерия Пекле**:

$$Pe = \frac{2}{M_2^T - 1} = 8,0854.$$

Далее рассчитываем **эффективный объем аппарата**

$$V = \frac{\pi \cdot d^2}{4} \cdot L \cdot (1 - \varphi) = 0,01 \text{ (м}^3\text{)},$$

линейную скорость потока $U = \frac{v}{V} = 0,1005,$

коэффициент продольного перемешивания $D_x = \frac{U \cdot L}{Pe} = 0,1242.$

Далее перейдем к построению **ячеечной модели**.

Число ячеек согласно рассчитываем по формуле

$$N = \frac{1}{M_2^T - 1} \approx 4.$$

Получили ячеечную модель с четырьмя ячейками, уравнения которой записываются следующим образом

$$\begin{cases} \frac{dc_1}{dt} = -k \cdot c_1, \\ \frac{dc_2}{dt} = k \cdot (c_1 - c_2), \\ \frac{dc_3}{dt} = k \cdot (c_2 - c_3), \\ \frac{dc_4}{dt} = k \cdot (c_3 - c_4), \end{cases}$$

где коэффициент, определяющий скорость «разбавления» потока, вычисляется по формуле

$$k = \frac{N \cdot v}{V} = 0,4061.$$

Начальные условия: при $t = 0$ $c_1(0) = 100$, $c_2(0) = c_3(0) = c_4(0) = 0$.

Этап 4. Решение полученных уравнений модели и выводы о ее адекватности.

При выборе модели и определении параметров выбранной зависимости получили систему четырех дифференциальных уравнений с четырьмя неизвестными, но нас интересуют только значения концентрации на выходе последней ячейки, т.е. изменение концентрации c_4 .

Для решения полученной системы воспользуемся известным численным методом – **классическим методом Рунге-Кутты**, имеющим четвертый порядок точности. Для решения задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ расчетные формулы метода имеют вид:

$$k_1 = f(x_i, y_i),$$

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

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

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3),$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

где h – шаг по переменной x , $i = 1, 2, 3, \dots$

Результат решения системы дифференциальных уравнений, полученной на этапе 4, представлен ниже в таблице и на рис. 4.5.


```

ans =
 100.0000      0      0      0
 66.6330    27.0136    5.5771    0.6629
 44.3996    36.0000   14.7298    3.8966
 29.5848    35.9818   22.0160    8.8776
 19.7132    31.9677   26.0399   14.0656
 13.1355    26.6263   27.0862   18.3202
 8.7526     21.2903   25.9737   21.0963
 5.8321     16.5507   23.5464   22.3190
 3.8861     12.6037   20.4859   22.1943
 2.5894      9.4480   17.2718   21.0514
 1.7254      6.9950   14.2054   19.2370
 1.1497      5.1271   11.4513   17.0571
 0.7661      3.7269    9.0795   14.7527
 0.5105      2.6903    7.0994   12.4958
 0.3401      1.9305    5.4858   10.3975
 0.2266      1.3782    4.1958    8.5200
 0.1510      0.9796    3.1807    6.8890
 0.1006      0.6935    2.3925    5.5052
 0.0671      0.4893    1.7871    4.3539
 0.0447      0.3441    1.3267    3.4116
 0.0298      0.2414    0.9795    2.6512
 0.0198      0.1689    0.7195    2.0448
 0.0132      0.1179    0.5262    1.5664
 0.0088      0.0821    0.3832    1.1926
 0.0059      0.0571    0.2780    0.9028
 0.0039      0.0396    0.2010    0.6799
 0.0026      0.0275    0.1449    0.5096
 0.0017      0.0190    0.1041    0.3802
 0.0012      0.0131    0.0746    0.2825
 0.0008      0.0091    0.0533    0.2092
 0.0005      0.0062    0.0380    0.1543

```

Как видно из графика 4.5, наиболее точно реальные данные описывает значение функции $c_4(t)$. На рис. 4.6 приведены экспериментальная функция и расчетная функция распределения на выходе четвертой ячейки ($c_4(t)$). На рис. 4.7 представлена абсолютная погрешность полученной расчетной функции распределения.

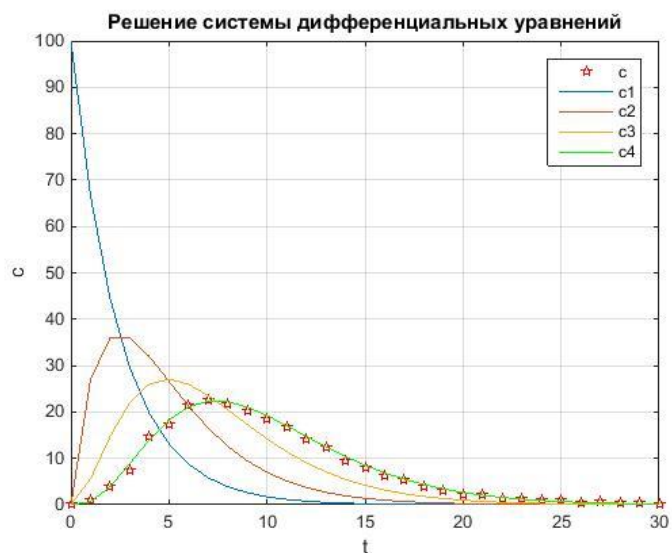


Рисунок 4.5 – Решение системы дифференциальных уравнений

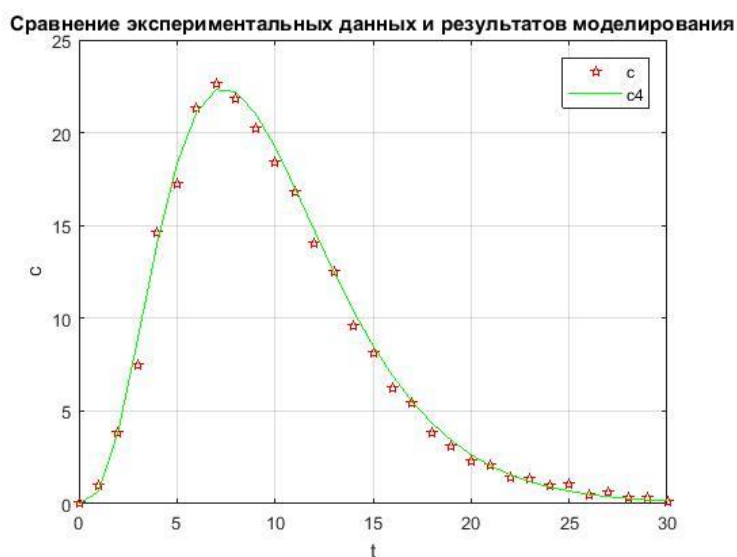


Рисунок 4.6 – Экспериментальная и расчетная функции распределения

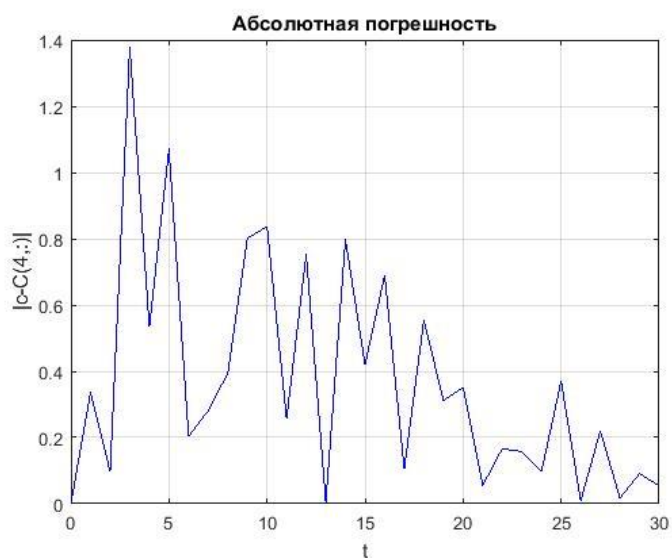


Рисунок 4.7 – График абсолютной погрешности

Сравнение экспериментальной кривой и расчетной функции $c_4(t)$ распределения в последней ячейке дает возможность судить об адекватности модели. Если кривые расположены достаточно близко друг к другу, то можно сказать, что модель адекватна структуре потока. Если нет, то модель выбрана неправильно, и все вычисления надо начинать вновь со второго этапа.

4.7. Листинг вычислительной программы

```
function LabRab4
clc; clear;
%входные данные
L=10; %длина насадочного аппарата, м
d=0.065; %внутренний диаметр, м
phi=0.7; %коэффициент заполнения насадкой
v=0.001; %объемная скорость, м^3/с
t=0:1:30; %время
c=[0 1 3.8 7.5 14.6 17.25 21.3 22.6 21.8 20.25 18.4 16.8 ...
    14 12.5 9.6 8.1 6.2 5.4 3.8 3.1 2.3 2.1 1.4 1.35 1 1.05 ...
    0.5 0.6 0.3 0.3 0.1]; %концентрация
p=size(t); % размерность вектора t
figure(1)
plot(t, c)
grid on
xlabel('t')
ylabel('c')
title('Экспериментальные данные')
dt=1; %шаг по времени
ddt=2*dt; %шаг по времени для расчета моментов
disp('Размерные моменты')
M0=sum(ddt*c(2:2:(p(2)-1)))
M1=sum(ddt*t(2:2:(p(2)-1)).*c(2:2:(p(2)-1)))
M2=sum(ddt*t(2:2:(p(2)-1)).^2.*c(2:2:(p(2)-1)))
disp('Приведенные моменты')
M1M=M1/M0
M2M=M2/M0
disp('Безразмерный момент')
M2T=M2M/M1M^2
disp('Критерий Пекле')
Pe=2/(M2T-1)
disp('Эффективный объем аппарата')
V=pi*d^2*L*(1-phi)/4
disp('Линейная скорость потока')
U=v/V
disp('Коэффициент продольного перемешивания')
Dx=U*L/Pe
disp('Число ячеек')
N=1/(M2T-1)
disp('Коэффициент, определяющий скорость "разбавления" потока')
k=N*v/V
%правая часть системы дифференциальных уравнений
fun=@(tt, c)([-k*c(1); k*(c(1)-c(2)); k*(c(2)-c(3)); k*(c(3)-
```

```

c(4)]);
%задание начальных условий
c0=[100;0;0;0];
%решение системы ОДУ методом Рунге-Кутты
C(:, 1)=c0;
for j=1:(p(2)-1)
    k1=fun(t(j), C(:, j));
    k2=fun(t(j)+dt/2, C(:, j)+dt*k1/2);
    k3=fun(t(j)+dt/2, C(:, j)+dt*k2/2);
    k4=fun(t(j)+dt, C(:, j)+dt*k3);
    C(:, j+1)=C(:, j)+dt/6*(k1+2*k2+2*k3+k4);
end;
C' %вывод полученного численного решения
figure(2)
plot(t,c, 'rp', t,C(1,:), t,C(2,:), t,C(3,:), t,C(4,:), 'g')
grid on
xlabel('t')
ylabel('c')
legend('c', 'c1', 'c2', 'c3', 'c4')
title('Решение системы дифференциальных уравнений')
figure(3)
plot(t,c, 'rp', t,C(4,:), 'g')
grid on
xlabel('t')
ylabel('c')
legend('c', 'c4')
title('Сравнение экспериментальных данных и результатов моделиро-
вания')
figure(4)
plot(t,abs(c-C(4,:)), 'b')
grid on
xlabel('t')
ylabel('|c-C(4,)|')
title('Абсолютная погрешность')

```

Индивидуальные задания для самостоятельной работы

Задание 1. Через насадочный аппарат длиной $L = 15$ м, внутренним диаметром $d = 0,03$ м и коэффициентом заполнения насадкой φ протекает жидкость с объемной скоростью $\nu = 0,001$ м³/с. На выходе аппарата осуществлены замеры концентрации, представляющую собой дифференциальную функцию распределения от времени пребывания. Необходимо рассчитать моменты функции распределения времени. Выполнить моделирование структуры гидродинамического потока в аппарате на основе ячеечной модели, положив значение концентрации в первом аппарате в начальный момент времени равным C_0 ($c_1(t = 0) = C_0$).

Задание 2. Через насадочный аппарат длиной $L = 40$ м, внутренним диаметром $d = 0,02$ м и коэффициентом заполнения насадкой φ протекает жидкость с объемной скоростью $\nu = 0,001$ м³/с. На выходе аппарата осуществлены замеры концентрации, представляющую собой дифференциальную функцию распределения от времени пребывания. Необходимо рассчитать моменты функции распределения времени. Выполнить моделирование структуры гидродинамического потока в аппарате на основе ячеечной модели, положив значение концентрации в первом аппарате в начальный момент времени равным C_0 ($c_1(t = 0) = C_0$).

На основе заданий 1 и 2 необходимо:

- вычислить число ячеек n для моделирования структуры гидродинамического потока в аппарате на основе ячеечной модели;
- провести моделирование на основе ячеечной модели и указать, какое количество ячеек наиболее точно будет описывать экспериментальные данные;
- сделать заключение, в каких случаях (при каких параметрах реактора) более точно удастся определить число ячеек n ячеечной модели.

Таблица 4.2 – Значения исходной функция распределения (варианты для заданий)

t	Вариант									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,25	1,31	1,20	0,40	0,18	0,03	0,11	0,02	0	0	0
0,5	6,16	5,49	3,18	1,73	0,45	1,03	0,35	0	0,02	0
0,75	10,84	10,58	8,84	5,11	2,15	3,08	1,60	0,102	0,17	0,01
1	15,46	13,29	13,52	8,44	4,94	5,22	3,85	0,536	0,63	0,04
1,25	15,74	14,34	16,21	10,60	7,05	7,74	6,47	1,454	1,66	0,18
1,5	14,63	13,92	17,24	14,25	11,07	9,75	8,81	3,21	3,17	0,44
1,75	13,86	14,08	15,98	15,18	12,65	11,32	11,07	5,80	5,28	1,09
2	10,90	12,36	12,45	14,41	13,48	11,69	12,24	8,12	6,95	1,96
2,25	8,32	9,42	9,34	11,75	12,55	11,51	12,02	10,38	9,61	3,10
2,5	6,90	7,32	7,43	10,42	10,98	11,08	11,27	11,84	11,01	4,51
2,75	4,68	5,04	5,64	7,85	10,45	9,80	10,15	12,14	11,36	5,94
3	3,60	3,65	3,97	6,86	8,16	7,32	8,47	11,85	10,97	7,29
3,25	2,64	2,65	2,45	4,30	6,88	6,38	7,57	11,44	10,27	8,24
3,5	1,82	1,94	1,83	3,77	5,56	5,44	6,33	9,97	8,96	8,57
3,75	1,16	1,24	1,06	2,53	3,98	4,65	4,63	8,80	8,47	8,91
4	0,81	0,91	0,65	1,96	2,87	3,52	3,88	7,18	6,79	8,92
4,25	0,56	0,65	0,44	1,22	2,40	2,62	3,30	5,32	5,96	8,84
4,5	0,34	0,42	0,30	0,84	1,71	2,07	2,39	4,44	4,44	8,24
4,75	0,24	0,27	0,15	0,64	1,22	1,58	1,51	3,43	3,60	7,71
5	0,15	0,20	0,11	0,42	0,88	1,16	1,14	2,61	2,94	6,44
5,25	0,10	0,13	0,06	0,29	0,52	0,76	0,95	1,89	2,29	5,63
5,5	0,06	0,08	0,03	0,21	0,36	0,52	0,68	1,28	1,72	4,54
5,75	0,04	0,05	0,02	0,14	0,25	0,41	0,47	0,85	1,24	3,93
6	0,03	0,03	0	0,09	0,18	0,28	0,34	0,64	0,89	3,31
6,25	0,02	0,02		0,06	0,11	0,20	0,23	0,43	0,64	2,53
6,5	0	0		0,04	0,09	0,15	0,16	0,27	0,50	1,96
6,75				0,02	0,05	0,11	0,10	0,20	0,34	1,57
7				0	0,04	0,07	0,07	0,12	0,23	1,16
7,25					0,02	0,05	0,04	0,08	0,16	0,90
7,5					0	0,03	0,03	0,05	0,08	0,62
7,75						0,01	0,01	0,02	0,05	0,33
8						0	0	0	0	0
φ	0,7	0,69	0,75	0,7	0,71	0,65	0,69	0,75	0,71	0,7
C_0	50	60	80	60	60	50	55	80	70	80

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 5 МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ ТЕПЛООБМЕННИКА «ТРУБА В ТРУБЕ»

Теплообменная аппаратура составляет весьма значительную часть технологического оборудования в химической и смежных отраслях промышленности. Удельный вес теплообменного оборудования составляет на предприятиях химической промышленности в среднем 15-18%, в нефтехимической и нефтеперерабатывающей промышленности – 50%. Это объясняется тем, что почти все основные процессы химической технологии (выпаривание, ректификация, сушка и др.) связаны с необходимостью подвода или отвода теплоты.

Использование математических моделей, численных методов, специализированных пакетов и ЭВМ является необходимым условием при решении задач моделирования, расчета и проектирования процессов и аппаратов химической промышленности. От его эффективного функционирования в значительной степени зависит протекание всего технологического процесса и качества выпускаемой нефтехимической продукции.

5.1. Математическая модель теплообменника «труба в трубе»

Рассмотрим моделирование широко распространенного в химической технологии теплообменника «труба в трубе», изображенного на рис. 5.1, структура потоков которого соответствует модели «вытеснение-вытеснение».

Будем рассматривать **прямоточный теплообменник** (движение сред происходит в одном направлении) и **противоточный теплообменник** (движение сред происходит встречно и параллельно).

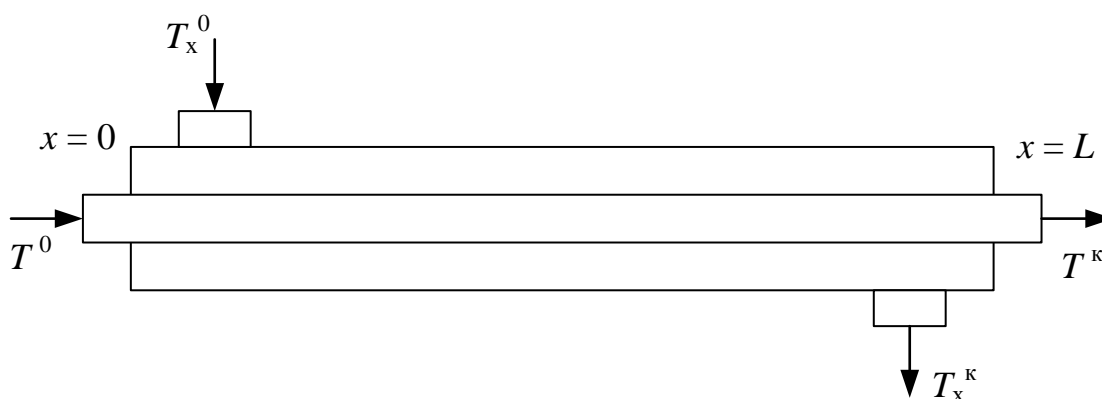


Рисунок 5.1 – Теплообменник типа «труба в трубе» (прямоточный)

Для данного теплообменника (рис. 5.1), называемого **прямоточным**, математическая модель имеет вид:

$$\begin{cases} S_{B1} C_{p1} \frac{\partial T_1}{\partial \tau} = -v_1 C_{p1} \frac{\partial T_1}{\partial l} - \frac{F}{L} \cdot K \cdot \Delta T, \\ S_{B2} C_{p2} \frac{\partial T_2}{\partial \tau} = -v_2 C_{p2} \frac{\partial T_2}{\partial l} + \frac{F}{L} \cdot K \cdot \Delta T, \end{cases}$$

где T_1 и T_2 – температуры теплоносителей 1 и 2 в произвольном сечении аппарата,

S_{B1}, S_{B2} – сечения зон идеального вытеснения теплоносителей 1 и 2,

C_{p1}, C_{p2} – теплоемкости теплоносителей 1 и 2,

v_1, v_2 – объемные скорости теплоносителей 1 и 2,

F – поверхность теплообмена, отнесенная к единице объема;

K – коэффициент теплопередачи;

L – длина теплообменника,

$\Delta T = T_1 - T_2$ – разность температур.

При этом значения T_1 и T_2 изменяются по длине соответствующих зон идеального вытеснения. Построим математическую модель и рассчитаем теплообменный аппарат с известной структурой потоков.

Требуется, при заданных параметрах горячего и холодного потоков теплообменника:

а) рассчитать его длину, необходимую для эффективного охлаждения при прямотоке и противотоке;

б) построить графики изменения температур холодного и горячего потоков по длине рассматриваемого теплообменника.

Рассмотрим математическое описание распространенного в химической технологии теплообменного аппарата **при следующих допущениях:**

- структура потоков соответствует модели «вытеснение-вытеснение»;
- перенос тепла осуществляется в стационарном режиме;
- плотность, теплоемкость, теплопроводность для каждого теплоносителя постоянны;
- теплообмен с внешней средой отсутствует;
- пренебрегаем термическим сопротивлением стенки теплообменника.

Принятые выше допущения значительно упрощают математическую модель, позволяя **перейти от дифференциальных уравнений в частных производных к обыкновенным дифференциальным уравнениям с постоянными коэффициентами.**

Исходные данные для моделирования:

- 1) конструкционные параметры и тип теплообменника;
- 2) тепловая нагрузка на теплообменник (тепло горячего потока)

$$Q = v \cdot C_p \cdot \rho \cdot (T^0 - T^k),$$

где v – объемная скорость потока (расход),

C_p – теплоемкость теплоносителя,

ρ – плотность потока,

T^0, T^k – температура потока на входе и выходе теплоносителя;

3) параметры хладагента.

Математическое описание теплообменника состоит из уравнений теплового баланса по обоим потокам. Для **прямотока** имеем систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dT}{dx} = \frac{K_T \cdot F}{V \cdot C_p \cdot \rho} \cdot (T_x - T), \\ \frac{dT_x}{dx} = \frac{K_T \cdot F}{V_x \cdot C_{px} \cdot \rho_x} \cdot (T - T_x), \end{cases} \quad (5.1)$$

где T, T_x – текущие значения температур соответственно горячего и холодного потоков, $^{\circ}\text{C}$;

x – текущее значение длины теплообменника, м;

K_T – коэффициент теплопередачи от горячего потока хладагенту, ккал / (м²·час · $^{\circ}\text{C}$);

$F = \pi \cdot d$ – площадь поверхности теплообмена, м²;

d – диаметр внутренней трубы, м;

L – длина теплообменника, м;

V, V_x – объемные скорости горячего и холодного потоков, м³/с;

C_p, C_{px} – теплоемкость горячего и холодного потоков, ккал / (кг · $^{\circ}\text{C}$);

ρ, ρ_x – плотности горячего и холодного потоков, кг/м³.

Запишем **начальные условия** для системы (5.1):

$$T(x=0) = T^0, \quad T_x(x=0) = T_x^0. \quad (5.2)$$

Для **противотока** имеем место система дифференциальных уравнений вида:

$$\begin{cases} \frac{dT}{dx} = \frac{K_T \cdot F}{V \cdot C_p \cdot \rho} \cdot (T_x - T), \\ \frac{dT_x}{dx} = \frac{K_T \cdot F}{V_x \cdot C_{px} \cdot \rho_x} \cdot (T_x - T), \end{cases} \quad (5.3)$$

Краевые условия для противотока имеют вид:

$$T(x=0) = T^0, \quad T_x(x=L) = T_x^k. \quad (5.4)$$

Таким образом, для математического моделирования стационарного теплового поля теплообменника типа «труба в трубе» в режимах прямотока и противотока имеют место системы дифференциальных уравнений ((5.1) или (5.2)) с соответствующими начальными или краевыми условиями ((5.3) или (5.4)).

5.2. Вычислительный пример для прямоточного теплообменника

Рассмотрим следующий пример. В прямоточном теплообменнике длиной 2 м охлаждается толуол с начальной температурой 105 °С. Охлаждающая вода имеет начальную температуру 13 °С. Внутренний диаметр трубы 0,01 м. Расход толуола 0,005 м³/ч, воды – 0,012 м³/ч. Теплоемкость, плотность воды и толуола при средней температуре 65 °С соответственно 4183 Дж/(кг·°С) и 1889 Дж/(кг·°С), 998 кг/м³ и 866 кг/м³. Коэффициент теплопередачи от горячего потока хладагенту равен 220 ккал / (м²·час · °С).

Система дифференциальных уравнений, описывающих процессы в данном теплообменнике, имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dT}{dx} = a \cdot (T_x - T), \\ \frac{dT_x}{dx} = a_x \cdot (T - T_x), \end{cases}$$

где $a = \frac{K_T \cdot F}{V \cdot C_p \cdot \rho}$, $a_x = \frac{K_T \cdot F}{V_x \cdot C_{px} \cdot \rho_x}$.

Начальные условия: $T(x=0) = 105$ °С, $T_x(x=0) = 13$ °С.

Согласно условиям задачи имеем:

$K_T = 220$ – коэффициент теплопередачи, ккал / (м²·час · °С)

$\rho = 866$, $\rho_x = 998$ – плотность толуола и воды соответственно, кг/м³;

$C_p = 1889$ (Дж / (кг · °С)) = 1889/(1000 · 4,1868) = 0,451 (ккал / (кг · °С)) –

теплоемкость толуола;

$C_{px} = 4183$ (Дж / (кг · °С)) = 4183/(1000 · 4,1868) = 0,999 (ккал / (кг · °С)) –

теплоемкость воды;

$V = 0,005$, $V_x = 0,012$ – объемные скорости толуола и воды соответственно, м³/ч;

$d = 0,01$ – диаметр внутренней трубы, м;

$L = 2$ – длина теплообменника, м.

Тогда вычисляем площадь поверхности теплообмена:

$$F = \pi \cdot d \cdot L = 3,14 \cdot 0,01 \cdot 2 = 0,0314 \text{ м}^2.$$

Далее вычислим коэффициенты системы дифференциальных уравнений:

$$a = 3,5392, \quad a_x = 0,5777.$$

Окончательно получаем **начальную задачу (задачу Коши)** для системы дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dT}{dx} = 3,5392 \cdot (T_x - T), \\ \frac{dT_x}{dx} = 0,5777 \cdot (T - T_x), \end{cases} \quad \begin{cases} T(0) = 105, \\ T_x(0) = 13. \end{cases} \quad (5.5)$$

Найдем **аналитическое решение** полученной задачи. Из первого уравнения выразим $T_x = T + \frac{1}{a} \cdot T'$, продифференцируем один раз $T'_x = T' + \frac{1}{a} \cdot T''$ и подставим во второе уравнение системы:

$$T' + \frac{1}{a} \cdot T'' = a_x \cdot \left(T - T - \frac{1}{a} \cdot T' \right),$$

$$\frac{1}{a} \cdot T'' + \left(1 + \frac{a_x}{a} \right) \cdot T' = 0 \text{ или } T'' + (a + a_x) \cdot T' = 0.$$

Получили однородное линейное дифференциальное уравнение с постоянными коэффициентами. Для его решения составим характеристическое уравнение

$$k^2 + (a + a_x) \cdot k = 0$$

и найдем его корни: $k_1 = 0$, $k_2 = -(a + a_x)$. Тогда общее решение для внутренней трубы имеет вид

$$T(x) = C_1 + C_2 \cdot e^{-(a+a_x)x}.$$

Далее находим общее решение для внешней трубы

$$T_x(x) = C_1 + C_2 \cdot e^{-(a+a_x)x} + \frac{1}{a} \cdot (C_1 + C_2 \cdot e^{-(a+a_x)x})' = C_1 - \frac{C_2 \cdot a_x}{a} \cdot e^{-(a+a_x)x}.$$

Неизвестные коэффициенты находим из начальных условий:

$$\begin{cases} T(0) = C_1 + C_2 = 105, \\ T_x(0) = C_1 - \frac{C_2 \cdot a_x}{a} = 13. \end{cases}$$

Получим $C_1 = \frac{13a + 105a_x}{a + a_x}$, $C_2 = \frac{92a}{a + a_x}$.

Тогда окончательно получаем **точное решение**:

$$\begin{cases} T(x) = \frac{13a + 105a_x}{a + a_x} + \frac{92a}{a + a_x} e^{-(a+a_x)x} \\ T_x(x) = \frac{13a + 105a_x}{a + a_x} - \frac{92a_x}{a + a_x} \cdot e^{-(a+a_x)x}. \end{cases}$$

Найдем **численное решение** исследуемой задачи (5.5). Поскольку (5.5) представляет собой задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, то для ее решения можно применить классический метод Рунге-Кутты четвертого порядка. Для решения задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ расчетные формулы метода имеют вид:

$$k_1 = f(x_i, y_i),$$

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

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

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3),$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

где h – шаг по переменной x , $i = 1, 2, 3, \dots$

Реализацию метода и построение графиков выполним в **ППП МАТЛАВ**. Листинг вычислительной программы представлен в п. 5.3.

На рис. 5.1 представлены графики аналитических и численных решений задачи (5.5).

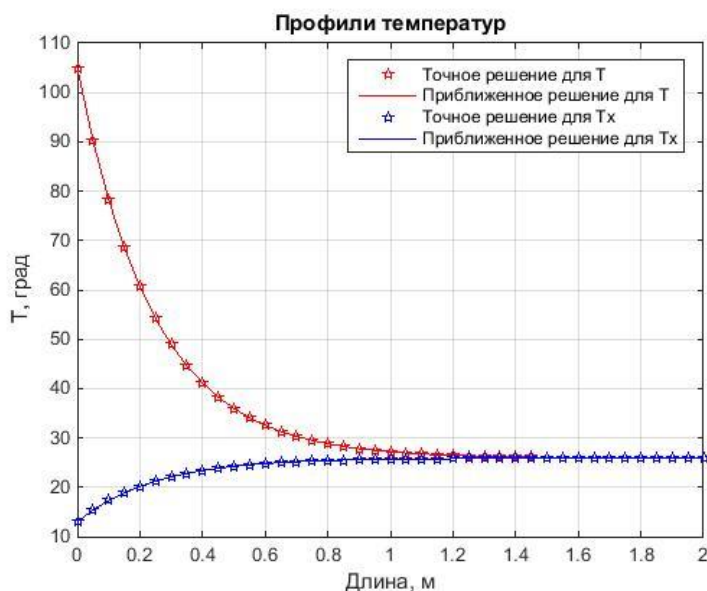


Рисунок 5.1 – Профиль изменения температур горячего (T) и холодного (T_x) потоков

Оценим **абсолютную погрешность** полученных приближенных решений: для внутренней трубы

$$\Delta T = \max_{x_i} |T(x_i) - \tilde{T}(x_i)| = 5,1679 \cdot 10^{-4},$$

где $T(x_i)$ и $\tilde{T}(x_i)$ – значение точного и приближенного значения температур для внутренней трубы в расчетных узлах сетки;

для внешней трубы

$$\Delta T_x = \max_{x_i} |T_x(x_i) - \tilde{T}_x(x_i)| = 8,4353 \cdot 10^{-5},$$

где $T_x(x_i)$ и $\tilde{T}_x(x_i)$ – значение точного и приближенного значения температур для внешней трубы в расчетных узлах сетки. Полученные значения свидетельствуют о высокой точности применяемого численного алгоритма.

Кроме того, из рис. 5.1 видно, что к правому концу трубы температуры для холодного и горячего потоков становятся примерно одинаковыми и равными 25,9 °С. Если ставится задача о минимизации длины теплообменника, то при заданной нижней допустимой границе значения температуры горячего потока можно указать оптимальную длину теплообменника. Так, например, если в поставленной задаче указать, что толуол достаточно охладить до 28 °С, то необходимая длина теплообменника составит 0,9 м.

5.3. Листинг вычислительной программы для прямого теплообменника

```
function LabRab5N1
clc; clear all;
%входные данные
Kt=220; %коэффициент теплопередачи, ккал / (м2*час*град)
ro=866; roх=998; % плотность толуола и воды, кг/м^3
Ср=0.451; Срх=0.999; %теплоемкость толуола и воды, Дж / (кг*град)
V=0.005; Vх=0.012; %объемные скорости толуола и воды, м^3/ч
d=0.01; %диаметр внутренней трубы, м
L=2; %длина теплообменника, м
dx=0.05;
x=0:dx:L;
p=size(x);
disp('Площадь поверхности теплообменника')
F=pi*d
disp('Коэффициенты системы дифференциальных уравнений')
a=Kt*F/(V*Ср*ro)
ах=Kt*F/(Vх*Срх*roх)
fun=@(x, T) ([a*(T(2)-T(1)); ах*(T(1)-T(2))]);
%задание начальных условий
T0=[105;13];
%аналитическое решение
C1=(13*a+105*ах)/(a+ах);
C2=92*a/(a+ах);
T_tochn=C1+C2*exp(-(a+ах)*x)
Tx_tochn=C1-C2*ах/a*exp(-(a+ах)*x)
%решение системы ОДУ методом Рунге-Кутта
T(:, 1)=T0;
for j=1:(p(2)-1)
```

```

k1=fun(x(j), T(:, j));
k2=fun(x(j)+dx/2, T(:, j)+dx*k1/2);
k3=fun(x(j)+dx/2, T(:, j)+dx*k2/2);
k4=fun(x(j)+dx, T(:, j)+dx*k3);
T(:, j+1)=T(:, j)+dx/6*(k1+2*k2+2*k3+k4);
end;
figure(1)
plot(x, T_tochn, 'rp', x, T(1,:), 'r', x, Tx_tochn, 'bp', x,
T(2,:), 'b')
grid on
xlabel('Длина, м')
ylabel('Т, град')
legend('Точное решение для Т', 'Приближенное решение для Т', 'Точ-
ное решение для Tx', 'Приближенное решение для Tx')
title('Профили температур')
disp('Абсолютная погрешность для внутренней (горячей) трубы')
delta_T=max(abs(T_tochn-T(1,:)))
disp('Абсолютная погрешность для внешней (холодной) трубы')
delta_Tx=max(abs(Tx_tochn-T(2,:)))

```

5.4. Вычислительный пример для противоточного теплообменника

Для задачи п. 5.2 изменим тип теплообменника на противоточный. В данном случае изменится и система дифференциальных уравнений, и дополнительные условия (температура для горячего потока задается в начале трубы, для холодного потока – в конце трубы).

Математическая модель будет представлять собой **краевую задачу для системы дифференциальных уравнений**:

$$\begin{cases} \frac{dT}{dx} = a \cdot (T_x - T), \\ \frac{dT_x}{dx} = a_x \cdot (T_x - T), \end{cases} \quad \begin{cases} T(0) = 105, \\ T_x(2) = 13. \end{cases} \quad (5.6)$$

Коэффициенты системы рассчитываются по тем же формулам и принимают те же значения, что для прямоточного теплообменника: $a = 3,5392$, $a_x = 0,5777$.

Аналитическое (точное) решение задачи имеет вид (проверить это):

$$\begin{cases} T(x) = C_1 + C_2 \cdot e^{(a_x - a)x}, \\ T_x(x) = C_1 + \frac{C_2 \cdot a_x}{a} \cdot e^{(a_x - a)x}, \end{cases}$$

где коэффициенты

$$\begin{cases} C_1 = \frac{13a - 105 \cdot a_x \cdot e^{2 \cdot (a_x - a)}}{a - a_x \cdot e^{2 \cdot (a_x - a)}}, \\ C_2 = \frac{92a}{a - a_x \cdot e^{2 \cdot (a_x - a)}} \end{cases}$$

найденны из граничных условий.

Для **численного решения** задачи (5.6) можно использовать **метод начального параметра**, который заключается в том, что вместо второго краевого условия для холодного потока при $x = L$ произвольно задается некоторое начальное значение при $x = 0$: $T_x(x=0) = T_x^0$. После этого система дифференциальных уравнений решается приближенно с помощью некоторого численного алгоритма (в нашем случае, классического метода Рунге-Кутты четвертого порядка). После чего полученное при решении системы значение $\tilde{T}_x(x=L) = \tilde{T}_x^L$ сравнивается с заданным $T_x(x=L) = T_x^L$. На основании сравнения осуществляется коррекция начального приближения $T_x(x=0) = T_x^{L0}$ и расчет повторяется. Данная процедура расчета повторяется до тех пор, пока не выполнится неравенство

$$|T_x^L - \tilde{T}_x^L| < \varepsilon,$$

где ε – заданная точность приближения, \tilde{T}_x^L – полученное на некотором шаге расчетное значение температуры холодного потока в точке $x = L$.

Реализуем алгоритм в **ППП MATLAB**. Листинг вычислительной программы представлен в п. 5.5.

Зададим начальное значение температуры холодного потока $T_x(x=0) = T_x^0 = 25$ °С и проведем вычисления. На рис. 5.2 представлены полученные графики. Отклонение расчетного значения температуры горячего потока на правом конце от заданного составляет $|T_x^L - \tilde{T}_x^L| = 3,5634$ °С, что, очевидно, довольно велико. При этом из рис. 5.2 видно, что полученное расчетное значение меньше заданного, а, следовательно, начальное значение температуры холодного потока следует увеличить.

Проведем серию вычислительных экспериментов для определения начального значения температуры холодного потока, чтобы отклонение температур на правом конце (величина $|T_x^L - \tilde{T}_x^L|$) было примерно равным 0,02 °С. Получим $T_x(x=0) = T_x^0 = 28$ °С. Тем самым, при задании начальной температуры холодного потока (на правом конце) в 13 °С на левом конце установится его тем-

пература, равная 28 °С. На рис. 5.3 представлены полученные графики профилей температур (численные и аналитические решения).

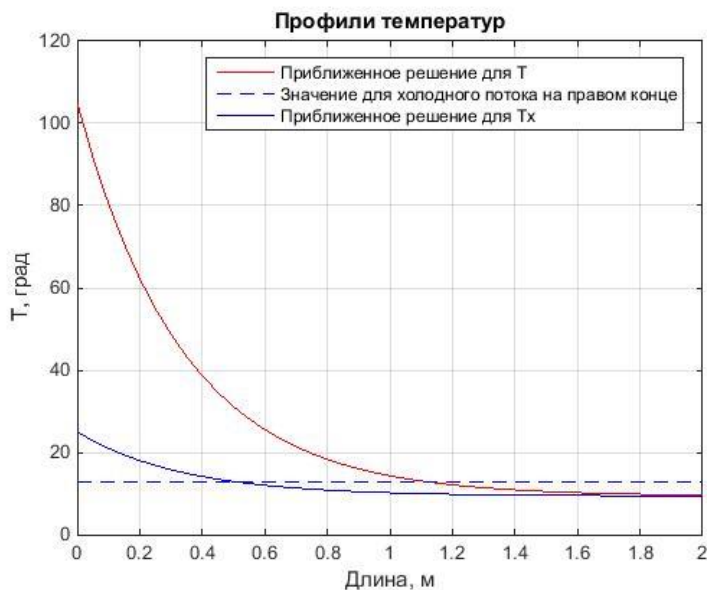


Рисунок 5.2 – Профиль изменения температур горячего (T) и холодного (T_x) потоков

Оценим **абсолютную погрешность** полученных приближенных решений: для внутренней трубы

$$\Delta T = \max_{x_i} |T(x_i) - \tilde{T}(x_i)| = 0,0202,$$

где $T(x_i)$ и $\tilde{T}(x_i)$ – значение точного и приближенного значения температур для внутренней трубы в расчетных узлах сетки;

для внешней трубы

$$\Delta T_x = \max_{x_i} |T_x(x_i) - \tilde{T}_x(x_i)| = 0,0202,$$

где $T_x(x_i)$ и $\tilde{T}_x(x_i)$ – значение точного и приближенного значения температур для внешней трубы в расчетных узлах сетки. Полученные значения, как и в случае с прямоточным теплообменником, говорят о высокой точности применяемого численного алгоритма. Однако точность в данном случае будет ниже за счет подбора начального значения T_x^0 .

Из анализа рис. 5.1 и 5.3 видно, что для противоточного теплообменника остывание горячего потока будет происходить гораздо быстрее.

Кроме того, если требуется **минимизировать длину аппарата**, то при моделировании противоточного теплообменника сначала следует задать необходимую длину, затем подобрать начальное значение T_x^0 , провести расчеты и по

их результатам сделать выводы о том, достигла ли температура горячего потока необходимого значения и при необходимости скорректировать длину.

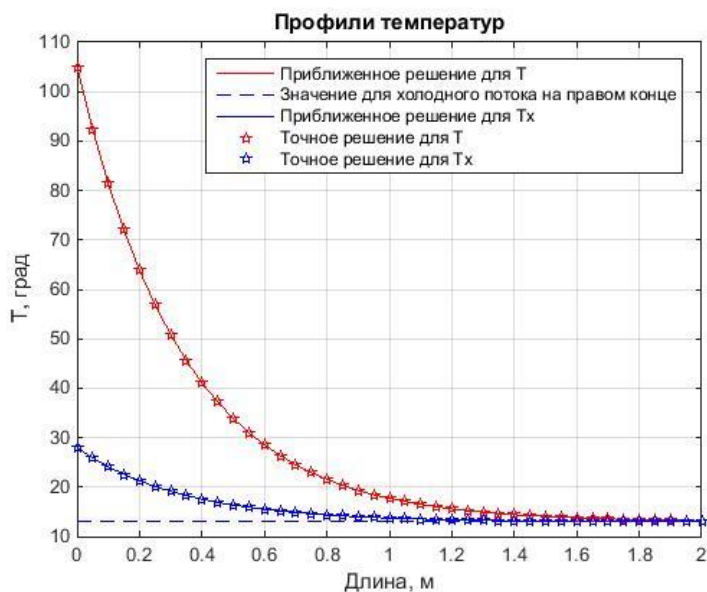


Рисунок 5.3 – Профиль изменения температур горячего (T) и холодного (T_x) потоков

Так пусть для заданного примера толуол достаточно охладить до $28\text{ }^{\circ}\text{C}$. Про рис. 5.3 предположим, что для этого длина теплообменника составит $0,8\text{ м}$. Для заданной длины проведем вычисления и установим, что $T_x(x=0) = T_x^0 = 26,7\text{ }^{\circ}\text{C}$. Далее находим численное решение и строим графики профилей температур (рис 5.4). По результатам расчетов получили, что на правом конце теплообменника температура горячего потока будет равна $20,18\text{ }^{\circ}\text{C}$. Следовательно, длину теплообменника можно еще уменьшить.

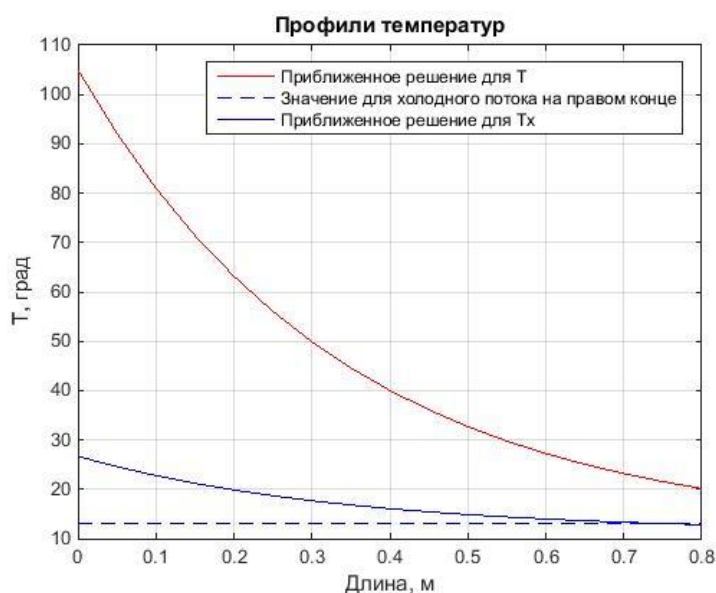


Рисунок 5.4 – Профиль изменения температур горячего (T) и холодного (T_x) потоков

5.5. Листинг вычислительной программы для противоточного теплообменника

```
function LabRab5N2
clc; clear all;
%входные данные
Kt=220; %коэффициент теплопередачи, ккал / (м2*час*град)
ro=866; roх=998; % плотность толуола и воды, кг/м^3
Cp=0.451; Cpx=0.999; %теплоемкость толуола и воды, Дж / (кг*град)
V=0.005; Vх=0.012; %объемные скорости толуола и воды, м^3/ч
d=0.01; %диаметр внутренней трубы, м
L=2; %длина теплообменника, м
dx=0.05;
x=0:dx:L;
p=size(x);
disp('Площадь поверхности теплообменника')
F=pi*d
disp('Коэффициенты системы дифференциальных уравнений')
a=Kt*F/(V*Cp*ro)
ax=Kt*F/(Vх*Cpx*roх)
fun=@(x, T) ([a*(T(2)-T(1)); ax*(T(2)-T(1))]);
%задание граничных условий
T(1)=105;
Tx(p(2))=13;
%аналитическое решение
C1=(13*a-105*ax*exp(2*(ax-a)))/(a-ax*exp(2*(ax-a)));
C2=92*a/(a-ax*exp(2*(ax-a)));
T_tochn=C1+C2*exp((ax-a)*x);
Tx_tochn=C1+C2*ax/a*exp((ax-a)*x);
%вспомогательные значения для сравнения значения температуры хо-
лодного потока на правом конце
T_hol(1, 1:p(2))=Tx(p(2));
%задание произвольного начального значения
Tx(1)=28;
%решение системы ОДУ методом Рунге-Кутта
TT(:, 1)=[T(1); Tx(1)];
for j=1:(p(2)-1)
    k1=fun(x(j), TT(:, j));
    k2=fun(x(j)+dx/2, TT(:, j)+dx*k1/2);
    k3=fun(x(j)+dx/2, TT(:, j)+dx*k2/2);
    k4=fun(x(j)+dx, TT(:, j)+dx*k3);
    TT(:, j+1)=TT(:, j)+dx/6*(k1+2*k2+2*k3+k4);
end;
figure(1)
% plot(x, TT(1,:), 'r', x, T_hol, '--b', x, TT(2,:), 'b')
plot(x, TT(1,:), 'r', x, T_hol, '--b', x, TT(2,:), 'b', x,
T_tochn, 'rp', x, Tx_tochn, 'bp')
grid on
xlabel('Длина, м')
ylabel('Т, град')
% legend('Приближенное решение для T', 'Значение для холодного пото-
тока на правом конце', 'Приближенное решение для Tx')
legend('Приближенное решение для T', 'Значение для холодного пото-
```

```
ка на правом конце', 'Приближенное решение для Tх', 'Точное реше-
ние для T', 'Точное решение для Tх')
title('Профили температур')
disp('Отклонение расчетного значения температуры горячего потока
на правом конце от заданного')
err=abs(TT(2,p(2))-Tх(p(2)))
disp('Абсолютная погрешность для внутренней (горячей) трубы')
delta_T=max(abs(T_tochn-TT(1,:)))
disp('Абсолютная погрешность для внешней (холодной) трубы')
delta_Tх=max(abs(Tх_tochn-TT(2,:)))
```

Индивидуальные задания для самостоятельной работы

Задание 1. В прямоточном теплообменнике типа «труба в трубе» охлаждается этиловый эфир от температуры $T(x=0) = T^0$ ($^{\circ}\text{C}$) до $T(x=L) = T^L$ ($^{\circ}\text{C}$). Охлаждение эфира осуществляется рассолом, поступающим из холодильной установки при температуре $T_x(x=0) = T_x^0$ ($^{\circ}\text{C}$). Объемный расход эфира $0,098 \text{ м}^3/\text{ч}$, рассола – $0,061 \text{ м}^3/\text{ч}$; диаметр внутренней трубы – d м; плотность эфира $716 \text{ кг}/\text{м}^3$, рассола – $1150 \text{ кг}/\text{м}^3$; теплоемкость эфира – $0,514 \text{ ккал}/(\text{кг}\cdot^{\circ}\text{C})$, рассола – $0,813 \text{ ккал}/(\text{кг}\cdot^{\circ}\text{C})$; коэффициент теплопередачи – $475 \text{ ккал}/(\text{м}^2\cdot\text{ч}\cdot^{\circ}\text{C})$. Найти длину теплообменника, необходимого для снижения температуры эфира до заданного значения. Определить профили температур эфира и рассола по длине теплообменника.

Задание 2. Исследовать стационарный режим работы теплообменника типа «труба в трубе», используя данные, приведенные в задании 1 для случая противотока. Сопоставить эффективность теплообмена в обоих случаях, если длина теплообменника $0,6$ м.

Таблица 5.1 – Значения параметров задачи (варианты для заданий 1 и 2)

	Вариант									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Начальная температура эфира T^0 , $^{\circ}\text{C}$	30	45	32	40	41	35	56	48	50	70
Конечная температура эфира T^L , $^{\circ}\text{C}$	5	10	7	12	3	8	15	10	3	6
Начальная температура рассола T_x^0 , $^{\circ}\text{C}$	-17	-5	-10	-6	-15	-10	-5	-13	-20	-10
Диаметр внутренней трубы, d м	0,038	0,027	0,031	0,036	0,029	0,028	0,021	0,035	0,034	0,025

Дополнение. Для обоих вариантов задания типа теплообменника следует определить аналитическое и численное решения для профилей температур. При численном решении шаг аппроксимации положить равным $dx = L/50$, где L – длина теплообменника. Оценить абсолютную погрешность полученного численного решения.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 6 МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Химическая кинетика – это раздел химии, изучающий скорости и механизмы химических реакций. Химическая кинетика включает два типа задач: прямую и обратную задачи. **Прямая задача** заключается в решении аналитическими либо численными методами дифференциальных уравнений, описывающих кинетику химических реакций. Другими словами, для заданной структуры математической модели кинетики, вытекающей из механизма реакции, и значений её параметров нужно определить значения концентраций реагирующих веществ на интервале времени $t \in [0, \tau]$. Далее полученное решение анализируется соответствующими методами и делаются выводы с целью управления процессом и его оптимизации.

Смысл **обратной задачи** химической кинетики заключается в следующем: на основании полученных в результате спланированного эксперимента (в соответствии с выдвинутой гипотезой о механизме реакции) данных об изменении концентраций реагирующих веществ определить значения параметров дифференциальных уравнений, описывающих кинетику реакции, для выбранной структуры математической модели.

6.1. Классификация типов и уравнений кинетики химических реакций

Приведем примеры простых элементарных реакций и соответствующие им кинетические уравнения (табл. 6.1). В таблице приняты обозначения k – константа скорости реакции; C_A, C_B, C_D – концентрации соответствующих реагентов реакции.

Таблица 6.1 – Простые реакции и соответствующие им кинетические уравнения

Реакция	Кинетическое уравнение
$A \xrightarrow{k} S$	$\frac{dC_A}{dt} = -k \cdot C_A$
$A + B \xrightarrow{k} S$	$\frac{dC_A}{dt} = -k \cdot C_A \cdot C_B$
$2A \xrightarrow{k} S$	$\frac{dC_A}{dt} = -k \cdot C_A^2$
$A + B + D \xrightarrow{k} S$	$\frac{dC_A}{dt} = -k \cdot C_A \cdot C_B \cdot C_D$
$2A + B \xrightarrow{k} S$	$\frac{dC_A}{dt} = -k \cdot C_A^2 \cdot C_B$

Реакция	Кинетическое уравнение
$nA \xrightarrow{k} S$	$\frac{dC_A}{dt} = -k \cdot C_A^n$

Большинство химических реакций протекают в несколько стадий и при этом могут иметь прямое и обратное направления. Приведём примеры сложных химических реакций и соответствующие им кинетические уравнения (табл. 6.2).

Таблица 6.2 – Сложные реакции и соответствующие им кинетические уравнения

Реакция	Кинетическое уравнение
<p>Последовательная реакция</p> $A \xrightarrow{k_1} S \xrightarrow{k_2} R$	$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_S}{dt} = k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_S, \\ \frac{dC_R}{dt} = k_2 \cdot C_S. \end{cases}$
<p>Параллельная реакция</p> $A \xrightarrow{k_1} S$ $A \xrightarrow{k_2} R$	$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -(k_1 + k_2) \cdot C_A, \\ \frac{dC_S}{dt} = k_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_R}{dt} = k_2 \cdot C_A. \end{cases}$
<p>Смешанная реакция</p> $A \xrightarrow{k_1} S \xrightarrow{k_2} R$ $A \xrightarrow{k_1} S \xrightarrow{k_3} Q$	$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_S}{dt} = k_1 \cdot C_A - (k_2 + k_3) \cdot C_S, \\ \frac{dC_R}{dt} = k_2 \cdot C_S, \\ \frac{dC_Q}{dt} = k_3 \cdot C_S. \end{cases}$

Реакция	Кинетическое уравнение
<p>Обратимая химическая реакция</p> $n_A A + n_B B \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} n_R R + n_S S$	$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A^{n_A} \cdot C_B^{n_B} + k_2 \cdot C_R^{n_R} \cdot C_S^{n_S}, \\ \frac{dC_B}{dt} = -k_1 \cdot C_A^{n_A} \cdot C_B^{n_B} + k_2 \cdot C_R^{n_R} \cdot C_S^{n_S}, \\ \frac{dC_S}{dt} = k_1 \cdot C_A^{n_A} \cdot C_B^{n_B} - k_2 \cdot C_R^{n_R} \cdot C_S^{n_S}, \\ \frac{dC_R}{dt} = k_1 \cdot C_A^{n_A} \cdot C_B^{n_B} - k_2 \cdot C_R^{n_R} \cdot C_S^{n_S}. \end{cases}$

Для исследования моделей, описываемых кинетическими уравнениями, необходимо задать значения констант скоростей химически реакций и начальные условия – значения концентраций в начальный момент времени.

6.2. Метод Эйлера для аналитического решения систем линейных дифференциальных уравнений

Рассмотрим систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами:

$$\begin{cases} \frac{dy_1(t)}{dt} = a_{11}y_1 + a_{12}y_2 + \dots + a_{1n}y_n, \\ \frac{dy_2(t)}{dt} = a_{21}y_1 + a_{22}y_2 + \dots + a_{2n}y_n, \\ \dots \\ \frac{dy_n(t)}{dt} = a_{n1}y_1 + a_{n2}y_2 + \dots + a_{nn}y_n. \end{cases} \quad (6.1)$$

Согласно методу Эйлера решение системы будем искать в виде $y_i(t) = b_i \cdot e^{rt}$, $i = \overline{1, n}$, где b_i – некоторые константы, r – параметр, подлежащий определению. Подставив вид решений в систему уравнений (6.1), получаем:

$$\begin{cases} b_1 \cdot r \cdot e^{rt} = a_{11} \cdot b_1 \cdot e^{rt} + a_{12} \cdot b_2 \cdot e^{rt} + \dots + a_{1n} \cdot b_n \cdot e^{rt}, \\ b_2 \cdot r \cdot e^{rt} = a_{21} \cdot b_1 \cdot e^{rt} + a_{22} \cdot b_2 \cdot e^{rt} + \dots + a_{2n} \cdot b_n \cdot e^{rt}, \\ \dots \\ b_n \cdot r \cdot e^{rt} = a_{n1} \cdot b_1 \cdot e^{rt} + a_{n2} \cdot b_2 \cdot e^{rt} + \dots + a_{nn} \cdot b_n \cdot e^{rt}. \end{cases}$$

Сократив на e^{rt} , приведем полученную систему к виду:

$$\begin{cases} (a_{11} - r) \cdot b_1 + a_{12} \cdot b_2 + \dots + a_{1n} \cdot b_n = 0, \\ a_{21} \cdot b_1 + (a_{22} - r) \cdot b_2 + \dots + a_{2n} \cdot b_n = 0, \\ \dots \\ a_{n1} \cdot b_1 + a_{n2} \cdot b_2 + \dots + (a_{nn} - r) \cdot b_n = 0. \end{cases} \quad (6.2)$$

Полученная система (6.2) представляет собой однородную систему линейных алгебраических уравнений. Для получения нетривиального (ненулевого) решения необходимо, чтобы определитель системы был равен нулю:

$$\begin{vmatrix} a_{11} - r & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - r & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} - r \end{vmatrix} = 0. \quad (6.3)$$

После раскрытия определителя (6.3) получаем алгебраическое уравнение относительно неизвестного r :

$$B_n \cdot r^n + B_{n-1} \cdot r^{n-1} + \dots + B_1 \cdot r + B_0 = 0, \quad (6.4)$$

где $B_0, B_1, \dots, B_{n-1}, B_n$ – некоторые коэффициенты. Уравнение (6.4) называется **характеристическим уравнением** для системы (6.1).

В зависимости от получаемых решений, называемых **характеристическими корнями**, уравнения (6.4) будем получать различные **базисные решения** системы (6.1). Подробно вид базисного решения в зависимости от характеристических корней представлен в табл. 6.3.

Таблица 6.3 – Вид базисного решения в зависимости от характеристического корня

Характеристический корень	Вид базисного решения
Простой (однократный) действительный корень: $r = \alpha$	Одно базисное решение вида $e^{\alpha t}$
Кратный (кратности p) действительный корень: $r = \alpha$	p базисных решений вида $e^{\alpha t}, t \cdot e^{\alpha t}, t^2 \cdot e^{\alpha t}, \dots, t^{p-1} \cdot e^{\alpha t}$
Пара сопряженных комплексных корней: $r = \alpha \pm \beta \cdot i$	Два базисных решения вида $e^{\alpha t} \cdot \cos \beta t, e^{\alpha t} \cdot \sin \beta t$
Пары сопряженных комплексных корней, имеющих кратность p : $r = \alpha \pm \beta \cdot i$	p пар базисных решений вида $e^{\alpha t} \cdot \cos \beta t, e^{\alpha t} \cdot \sin \beta t,$ $t \cdot e^{\alpha t} \cdot \cos \beta t, t \cdot e^{\alpha t} \cdot \sin \beta t$ \dots $t^{p-1} \cdot e^{\alpha t} \cdot \cos \beta t, t^{p-1} \cdot e^{\alpha t} \cdot \sin \beta t$

Далее, подставляя поочередно найденные значения характеристических корней в систему (6.2), находим соответствующие им значения неизвестных коэффициентов b_i (поскольку решений будет бесконечно много, то следует найти какое-то одно) и соответствующие им базисные решения. После общее решение для каждой из функций представляем в виде линейной комбинации полученных базисных решений с некоторыми коэффициентами C_i . Эти коэффициенты находятся из начальных условий.

6.3. Метод Рунге-Кутты для численного решения систем линейных дифференциальных уравнений

Для решения задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка $y' = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$ существует много численных методов: методы Эйлера, методы Рунге-Кутты, методы Адамса и др. Наиболее эффективным методом считается классический метод Рунге-Кутты, имеющий четвертый порядок точности. Расчетные формулы метода имеют вид:

$$\begin{cases} k_1 = f(t_i, y_i), \\ k_2 = f(t_i + \frac{h}{2}, y_i + h \frac{k_1}{2}), \\ k_3 = f(t_i + \frac{h}{2}, y_i + h \frac{k_2}{2}), \\ k_4 = f(t_i + h, y_i + hk_3), \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \end{cases} \quad (6.5)$$

где h – шаг по переменной x , $i = 1, 2, 3, \dots$

Для решения начальных задач систем дифференциальных уравнений вида

$$\begin{cases} \frac{dy_1(t)}{dt} = f_1(t, y_1, y_2, \dots, y_n), \\ \frac{dy_2(t)}{dt} = f_2(t, y_1, y_2, \dots, y_n), \\ \dots \\ \frac{dy_n(t)}{dt} = f_n(t, y_1, y_2, \dots, y_n), \end{cases} \quad \begin{cases} y_1(t_0) = y_{10}, \\ y_2(t_0) = y_{20}, \\ \dots \\ y_n(t_0) = y_{n0}, \end{cases}$$

расчетные формулы метода остаются неизменными, если ввести обозначения:

$$Y(t) = (y_1(t) \quad y_2(t) \quad \dots \quad y_n(t))^T,$$

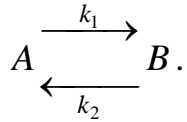
$$F(t, Y) = (f_1(t, Y) \quad f_2(t, Y) \quad \dots \quad f_n(t, Y))^T,$$

$$Y_0 = (y_{10} \quad y_{20} \quad \dots \quad y_{n0})^T.$$

Далее метод реализуется по формулам (6.5), где все коэффициенты k_i и функция y_i являются векторными величинами.

6.4. Вычислительный пример № 1

Рассмотрим реакцию первого порядка следующего вида:



Заданы следующие исходные данные: константы скоростей химических реакций – $k_1 = 1,5$ (1/с), $k_2 = 0,5$ (1/с); начальные условия – $C_{A0} = 100$ (моль/л), $C_{B0} = 0$ (моль/л).

Для решения этой задачи построим математическую модель, основой которой является система дифференциальных уравнений, описывающих динамику процесса, т.е. изменение концентраций реагирующих веществ во времени. В указанной реакции во взаимодействие вступают два вещества с текущими концентрациями $C_1(t) = C_A(t)$, $C_2(t) = C_B(t)$. Изменение концентраций этих веществ во времени записываем в виде дифференциалов dC_A/dt , dC_B/dt , которые используем в качестве левых частей дифференциальных уравнений. Правыми частями уравнений кинетики будут соотношения, записанные на основании табл. 6.1 и 6.2.

В принятых обозначениях полученная система имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dC_1}{dt} = -k_1 \cdot C_1 + k_2 \cdot C_2, \\ \frac{dC_2}{dt} = k_1 \cdot C_1 - k_2 \cdot C_2, \end{cases} \quad \text{или} \quad \begin{cases} \frac{dC_1}{dt} = -1,5 \cdot C_1 + 0,5 \cdot C_2, \\ \frac{dC_2}{dt} = 1,5 \cdot C_1 - 0,5 \cdot C_2. \end{cases} \quad (6.6)$$

Соответствующие начальные условия: $C_1(0) = 100$, $C_2(0) = 0$.

Найдем **аналитическое решение** системы (6.6) методом Эйлера, описанным в п. 6.2.

Решение системы будем искать в виде $C_i(t) = b_i \cdot e^{rt}$, $i = 1, 2$. Запишем систему типа (6.2) для определения неизвестных параметров

$$\begin{cases} (-1,5 - r) \cdot b_1 + 0,5 \cdot b_2 = 0, \\ 1,5 \cdot b_1 + (-0,5 - r) \cdot b_2 = 0. \end{cases} \quad (6.7)$$

Условие разрешимости (6.3) для данной системы принимает вид:

$$\begin{vmatrix} -1,5 - r & 0,5 \\ 1,5 & -0,5 - r \end{vmatrix} = 0.$$

Вычисляя определитель в левой части, получим алгебраическое уравнение

$$(1,5 + r) \cdot (0,5 + r) - 0,75 = 0 \text{ или } r^2 + 2 \cdot r = 0.$$

Получаем характеристические корни: $r_1 = 0$, $r_2 = -2$.

Для каждого из характеристических корней запишем систему (6.7). Для $r_1 = 0$ получаем:

$$\begin{cases} -1,5 \cdot b_1 + 0,5 \cdot b_2 = 0, \\ 1,5 \cdot b_1 - 0,5 \cdot b_2 = 0. \end{cases}$$

Откуда, положив $b_1 = 1$, находим $b_2 = 3$. Тогда соответствующие базисные решения принимают вид: $C_1^{(1)}(t) = 1 \cdot e^{0 \cdot t} = 1$, $C_2^{(1)}(t) = 3 \cdot e^{0 \cdot t} = 3$.

Для $r_2 = -2$ получаем:

$$\begin{cases} 0,5 \cdot b_1 + 0,5 \cdot b_2 = 0, \\ 1,5 \cdot b_1 + 1,5 \cdot b_2 = 0. \end{cases}$$

Откуда, положив $b_1 = 1$, находим $b_2 = -1$. Тогда соответствующие базисные решения принимают вид: $C_1^{(2)}(t) = 1 \cdot e^{-2 \cdot t} = e^{-2t}$, $C_2^{(2)}(t) = -1 \cdot e^{-2 \cdot t} = -e^{-2t}$.

Общие решения записываем в виде линейных комбинаций полученных базисных решений: $C_i(t) = B_1 \cdot C_i^{(1)}(t) + B_2 \cdot C_i^{(2)}(t)$, $i = 1, 2$.

Получаем общее решение системы (6.6):

$$C_1(t) = B_1 + B_2 \cdot e^{-2t}, \quad C_2(t) = 3B_1 - B_2 \cdot e^{-2t}.$$

Неизвестные константы находим из начальных условий:

$$\begin{cases} C_1(0) = B_1 + B_2 = 100, \\ C_2(0) = 3B_1 - B_2 = 0, \end{cases}$$

Решение этой системы: $B_1 = 25$, $B_2 = 75$. Окончательно получаем **точное решение** системы (6.6) с заданными начальными условиями:

$$C_1(t) = 25 + 75 \cdot e^{-2t}, \quad C_2(t) = 75 - 75 \cdot e^{-2t}.$$

Реализацию **численного метода Рунге-Кутты** и построение графиков выполним в **ППП МАТЛАВ**. Листинг вычислительной программы представлен ниже. На рис. 6.1 представлены графики аналитических и численных решений исследуемой задачи.

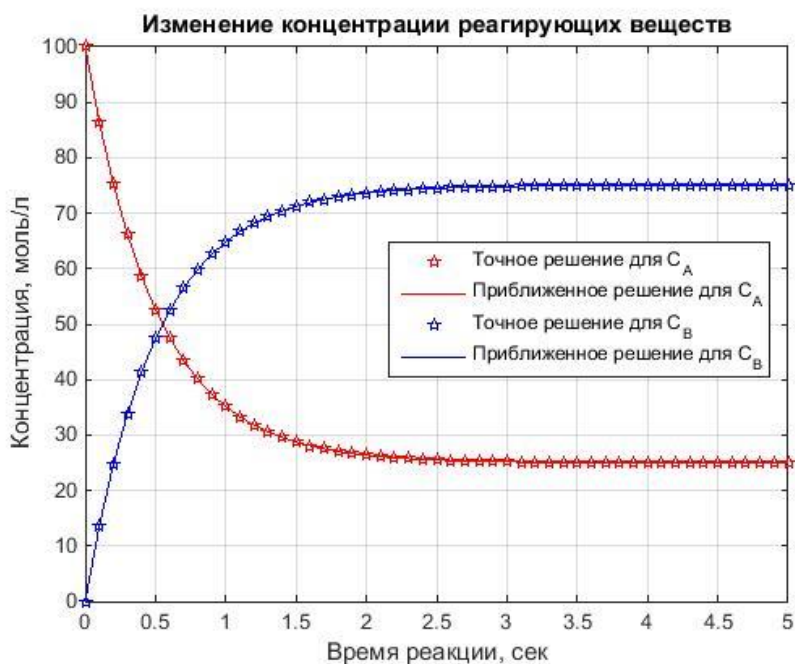


Рисунок 6.1 – Изменение концентраций реагирующих веществ

При реализации и построении графиков был выбран временной промежуток, равный 5 секундам. Как видно из построенного графика, примерно после 3 секунд концентрация фиксируется на уровне 25 (моль/л) и 75 (моль/л) для первого и второго реагента и далее остается неизменной.

Оценим **абсолютную погрешность** полученных приближенных решений: для реагента A

$$\Delta C_A = \max_{t_i} |C_A(t_i) - \tilde{C}_A(t_i)| = 4,3477 \cdot 10^{-4},$$

где $C_A(t_i)$ и $\tilde{C}_A(t_i)$ – значение точного и приближенного значения концентраций реагента A в расчетных узлах сетки;

для реагента B

$$\Delta C_B = \max_{t_i} |C_B(t_i) - \tilde{C}_B(t_i)| = 4,3477 \cdot 10^{-4},$$

где $C_B(t_i)$ и $\tilde{C}_B(t_i)$ – значение точного и приближенного значения концентраций реагента B в расчетных узлах сетки.

Полученные значения свидетельствуют о высокой точности применяемого численного метода.

Листинг вычислительной программы для примера №1

```
function LabRab6N1
clc; clear all;
%входные данные
k1=1.5; k2=0.5; %константы скоростей химических реакций, 1/сек
CA0=100; CB0=0; %начальные концентрации, моль/л
```

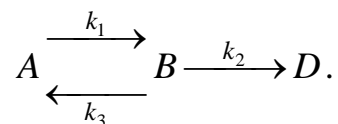
```

T=5; %время реакции, сек
dt=0.1; %шаг аппроксимации
t=0:dt:T; %разбиение сетки
p=size(t);
%система кинетических уравнений
fun=@(t, C) ([-k1*C(1)+k2*C(2); k1*C(1)-k2*C(2)]);
%начальные условия
C0=[CA0; CB0];
%аналитическое решение
B1=25;
B2=75;
CA_tochn=B1+B2*exp(-2*t);
CB_tochn=3*B1-B2*exp(-2*t);
%решение системы ОДУ методом Рунге-Кутты
C(:, 1)=C0;
for j=1:(p(2)-1)
    k1=fun(t(j), C(:, j));
    k2=fun(t(j)+dt/2, C(:, j)+dt*k1/2);
    k3=fun(t(j)+dt/2, C(:, j)+dt*k2/2);
    k4=fun(t(j)+dt, C(:, j)+dt*k3);
    C(:, j+1)=C(:, j)+dt/6*(k1+2*k2+2*k3+k4);
end;
figure(1)
plot(t, CA_tochn, 'rp', t, C(1,:), 'r', t, CB_tochn, 'bp', t,
C(2,:), 'b')
grid on
xlabel('Время реакции, сек')
ylabel('Концентрация, моль/л')
legend('Точное решение для C_A', 'Приближенное решение для C_A',
'Точное решение для C_B', 'Приближенное решение для C_B')
title('Изменение концентрации реагирующих веществ')
disp('Абсолютная погрешность для реагента A')
delta_CA=max(abs(CA_tochn-C(1,:)))
disp('Абсолютная погрешность для реагента B')
delta_CB=max(abs(CB_tochn-C(2,:)))

```

6.5. Вычислительный пример № 2

Рассмотрим систему реакций следующего вида:



Заданы следующие исходные данные: константы скоростей химических реакций – $k_1 = 1,5$ (1/с), $k_2 = 0,5$ (1/с), $k_3 = 0,1$ (1/с); начальные условия – $C_{A0} = 100$ (моль/л), $C_{B0} = C_{D0} = 0$ (моль/л).

Для решения этой задачи построим математическую модель, основой которой является система дифференциальных уравнений, описывающих динамику процесса, т.е. изменение концентраций реагирующих веществ во времени. В указанной реакции во взаимодействие вступают три вещества с текущими кон-

центрациями $C_1(t) = C_A(t)$, $C_2(t) = C_B(t)$, $C_3(t) = C_D(t)$. Изменение концентраций этих веществ во времени записываем в виде дифференциалов dC_A/dt , dC_B/dt , dC_D/dt , которые используем в качестве левых частей дифференциальных уравнений. Правыми частями уравнений кинетики будут соотношения, записанные на основании табл. 6.1 и 6.2.

В принятых обозначениях полученная система имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dC_1}{dt} = -k_1 \cdot C_1 + k_3 \cdot C_2, \\ \frac{dC_2}{dt} = k_1 \cdot C_1 - (k_2 + k_3) \cdot C_2, \\ \frac{dC_3}{dt} = k_2 \cdot C_2, \end{cases} \quad \text{или} \quad \begin{cases} \frac{dC_1}{dt} = -1,5 \cdot C_1 + 0,1 \cdot C_2, \\ \frac{dC_2}{dt} = 1,5 \cdot C_1 - 0,6 \cdot C_2, \\ \frac{dC_3}{dt} = 0,5 \cdot C_2. \end{cases} \quad (6.8)$$

Соответствующие начальные условия: $C_1(0) = 100$, $C_2(0) = C_3(0) = 0$.

Найти **аналитическое решение** системы (6.6) можно, но характеристические корни будут иррациональными, что повлечет громоздкость формул точных решений.

Найдем **приближенное решение** метода Рунге-Кутты с реализацией в **ППП MATLAB**. Листинг вычислительной программы представлен ниже. На рис. 6.2 представлены графики численных решений исследуемой задачи.

При реализации и построении графиков был выбран временной промежуток, равный 15 секундам. Как видно из построенного графика, к окончанию времени реакции концентрация первого и второго реагентов приближается к нулю (моль/л), концентрация третьего реагента – к 100 (моль/л).

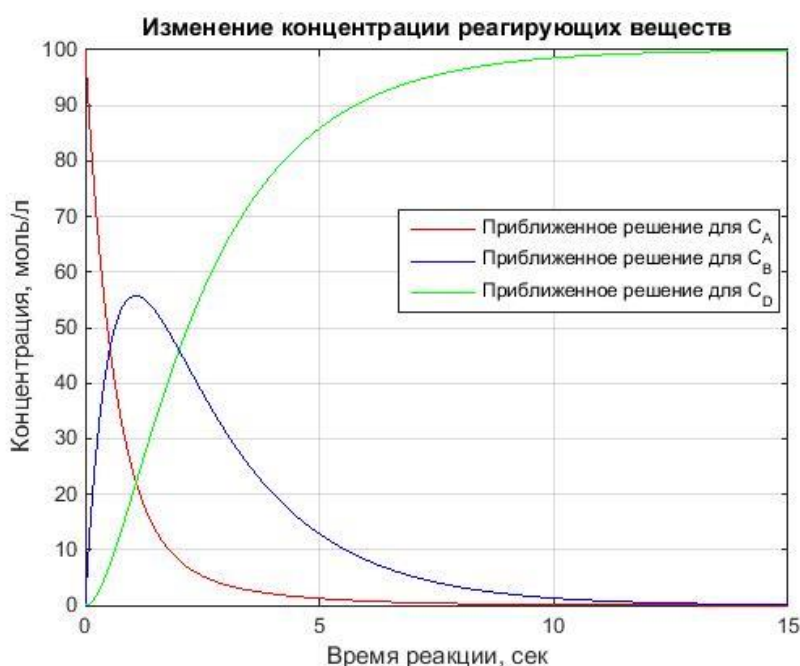


Рисунок 6.2 – Изменение концентраций реагирующих веществ

Изменим начальные концентрации реагентов и установим следующие их значения: $C_{A0} = 80$ (моль/л), $C_{B0} = C_{D0} = 10$ (моль/л). Результаты вычислений представлены на рис. 6.3. Как видно, к концу реакции концентрация реагирующих веществ устанавливается на тех же уровнях, что и при прежних начальных условиях.

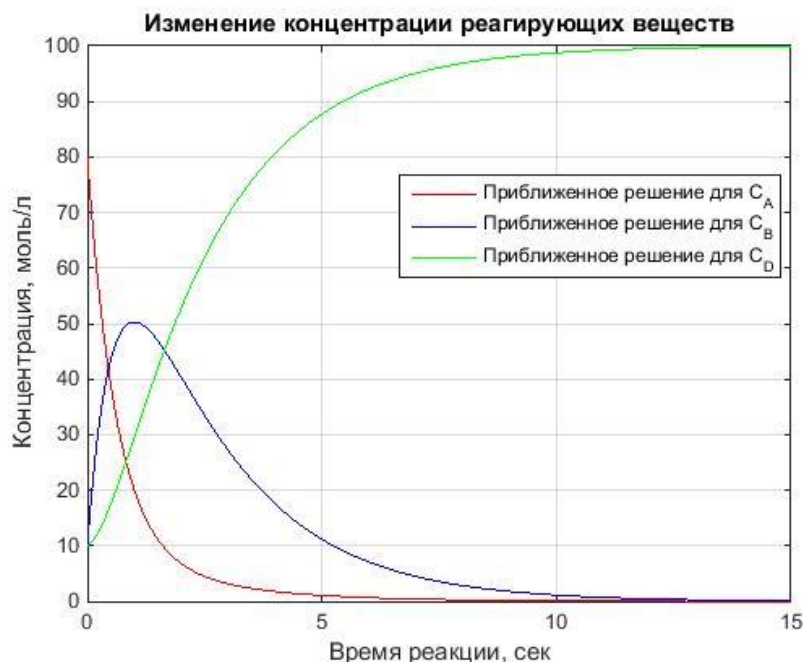


Рисунок 6.3 – Изменение концентраций реагирующих веществ

Листинг вычислительной программы для примера №2

```
function LabRab6N2
clc; clear all;
%входные данные
k1=1.5; k2=0.5; k3=0.1; %константы скоростей химических реакций,
1/сек
CA0=100; CB0=0; CD0=0; %начальные концентрации, моль/л
T=15; %время реакции, сек
dt=0.05; %шаг аппроксимации
t=0:dt:T; %разбиение сетки
p=size(t);
%система кинетических уравнений
fun=@(t, C) ([-k1*C(1)+k3*C(2); k1*C(1)-(k2+k3)*C(2); k2*C(2)]);
%начальные условия
C0=[CA0; CB0; CD0];
%решение системы ОДУ методом Рунге-Кутты
C(:, 1)=C0;
for j=1:(p(2)-1)
    k1=fun(t(j), C(:, j));
    k2=fun(t(j)+dt/2, C(:, j)+dt*k1/2);
    k3=fun(t(j)+dt/2, C(:, j)+dt*k2/2);
    k4=fun(t(j)+dt, C(:, j)+dt*k3);
```

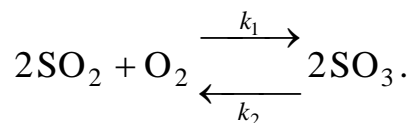
```

C(:, j+1)=C(:, j)+dt/6*(k1+2*k2+2*k3+k4);
end;
figure(1)
plot(t, C(1,:), 'r', t, C(2,:), 'b', t, C(3,:), 'g')
grid on
xlabel('Время реакции, сек')
ylabel('Концентрация, моль/л')
legend('Приближенное решение для C_A', 'Приближенное решение для
C_B', 'Приближенное решение для C_D')
title('Изменение концентрации реагирующих веществ')

```

6.6. Вычислительный пример № 3

Рассмотрим обратимую реакцию следующего вида:



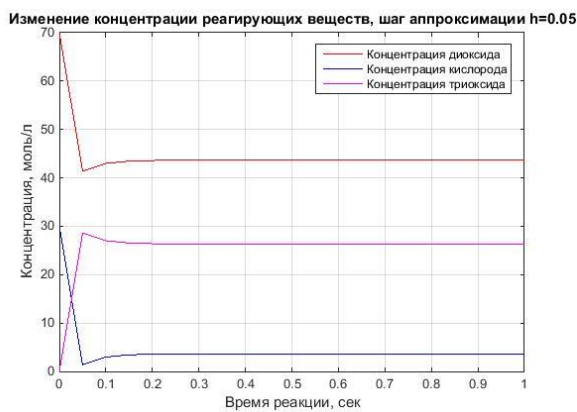
Заданы следующие исходные данные: константы скоростей химических реакций – $k_1 = 0,01$ (1/с), $k_2 = 0,1$ (1/с); начальные условия – $C_{\text{диоксид}}(0) = 70$ (моль/л), $C_{\text{кислород}}(0) = 30$ (моль/л), $C_{\text{триоксид}}(0) = 0$ (моль/л).

Для решения этой задачи построим математическую модель. Введем следующие обозначения: $C_1(t) = C_{\text{диоксид}}(t)$, $C_2(t) = C_{\text{кислород}}(t)$, $C_3(t) = C_{\text{триоксид}}(t)$. В принятых обозначениях полученная система имеет вид:

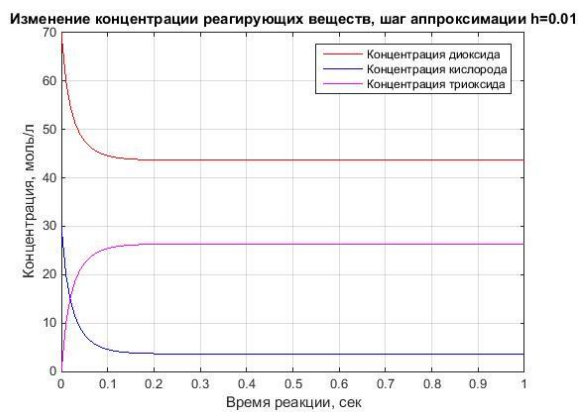
$$\begin{cases} \frac{dC_1}{dt} = -k_1 \cdot C_1^2 \cdot C_2 + k_2 \cdot C_3^2, \\ \frac{dC_2}{dt} = -k_1 \cdot C_1^2 \cdot C_2 + k_2 \cdot C_3^2, \\ \frac{dC_3}{dt} = k_1 \cdot C_1^2 \cdot C_2 - k_2 \cdot C_3^2. \end{cases} \quad (6.9)$$

Соответствующие начальные условия: $C_1(0) = 70$, $C_2(0) = 30$, $C_3(0) = 0$.

Найдем **приближенное решение** метода Рунге-Кутты с реализацией в **ППП МАТЛАВ**. Листинг вычислительной программы представлен ниже. При реализации и построении графиков был выбран временной промежуток, равный 1 секунде. На рис. 6.4 представлены графики численных решений исследуемой задачи. Следует обратить внимание, что точность численного решения в начале реакции зависит от шага аппроксимации. Однако, как видно из построенных графиков и выведенных значений, при разных значениях шага к окончанию времени реакции концентрация реагирующих не будет сильно отличаться и составит: диоксида – 43,6459 (моль/л), для кислорода – 3,6459 (моль/л), для триоксида – 26,3541 (моль/л).



a)



б)

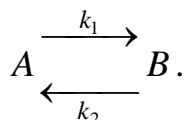
Рисунок 6.4 – Изменение концентраций реагирующих веществ (a – для шага аппроксимации $h = 0,05$; б – для шага аппроксимации $h = 0,01$)

Листинг вычислительной программы для примера №3

```
function LabRab6N3
clc; clear all;
%входные данные
k1=0.01; k2=0.1; %константы скоростей химических реакций, 1/сек
CA0=70; CB0=30; CS0=0; %начальные концентрации, моль/л
T=1; %время реакции, сек
dt=0.05; %шаг аппроксимации
t=0:dt:T; %разбиение сетки
p=size(t);
%система кинетических уравнений
fun=@(t, C) ([-k1*C(1)^2*C(2)+k2*C(3)^2;
-k1*C(1)^2*C(2)+k2*C(3)^2;
k1*C(1)^2*C(2)-k2*C(3)^2]);
%начальные условия
C0=[CA0; CB0; CS0];
%решение системы ОДУ методом Рунге-Кутты
C(:, 1)=C0;
for j=1:(p(2)-1)
k1=fun(t(j), C(:, j));
k2=fun(t(j)+dt/2, C(:, j)+dt*k1/2);
k3=fun(t(j)+dt/2, C(:, j)+dt*k2/2);
k4=fun(t(j)+dt, C(:, j)+dt*k3);
C(:, j+1)=C(:, j)+dt/6*(k1+2*k2+2*k3+k4);
end;
figure(1)
plot(t, C(1,:), 'r', t, C(2,:), 'b', t, C(3,:), 'm')
grid on
xlabel('Время реакции, сек')
ylabel('Концентрация, моль/л')
legend('Концентрация диоксида', 'Концентрация кислорода', 'Концентрация
триоксида')
title('Изменение концентрации реагирующих веществ, шаг аппроксимации
h=0.01')
disp('значение концентрации реагирующих веществ на момент окончания реак-
ции')
C(:, p(2))
```

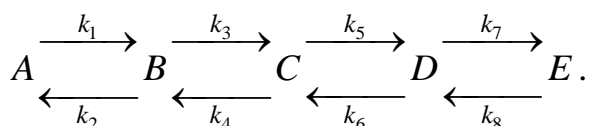
Индивидуальные задания для самостоятельной работы

Задание 1. Приведены значения констант скоростей реакций, начальные концентрации реагирующих веществ (табл. 6.4) и механизм химической реакции:



Требуется составить математическую модель кинетики химических реакций, определить аналитически и численно значений концентраций реагирующих веществ. Время реакции определить самостоятельно.

Задание 2. Приведены значения констант скоростей реакций, начальные концентрации реагирующих веществ (табл. 6.3) и механизм химической реакции:

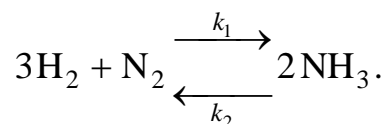


Требуется составить математическую модель кинетики химических реакций, определить численно значений концентраций реагирующих веществ. Время реакции определить самостоятельно.

Таблица 6.4 – Значения параметров задачи (варианты для заданий 1 и 2)

	Вариант									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
A_0	75	70	60	90	70	85	65	90	80	55
B_0	25	30	40	10	30	15	35	10	20	45
C_0	0	0	00	0	0	0	0	0	0	0
D_0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
E_0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
k_1	0,9	0,8	0,8	0,9	0,7	0,9	0,8	0,7	0,9	0,8
k_2	–	0,1	0,2	0,3	0,1	0,4	0,2	0,1	0,2	–
k_3	0,5	0,6	0,4	0,4	0,5	0,4	0,5	0,4	0,4	0,5
k_4	0,2	–	–	0,1	–	–	0,2	–	–	0,2
k_5	0,2	0,4	0,3	0,2	0,3	0,3	0,2	0,2	0,3	0,2
k_6	–	–	–	–	0,1	0,1	–	–	0,1	0,1
k_7	0,1	0,2	0,2	0,2	0,2	0,1	0,1	0,2	0,1	0,1
k_8	–	0,1	0,1	0,1	–	–	–	0,1	–	–

Задание 3. Дана обратимая реакция следующего вида:



Заданы следующие исходные данные: константы скоростей химических реакций – $k_1 = 0,0015 - 0,0001 \cdot N$ (1/с), $k_2 = 0,025 + 0,001 \cdot N$ (1/с); начальные условия – $C_{\text{водород}}(0) = 65 + 2 \cdot N$ (моль/л), $C_{\text{азот}}(0) = 35 - 2 \cdot N$ (моль/л), $C_{\text{аммиак}}(0) = 0$ (моль/л), где N – номер варианта.

Требуется составить математическую модель кинетики химических реакций, определить численно значений концентраций реагирующих веществ. Время реакции и шаг аппроксимации определить самостоятельно.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 7 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ

Химическим реактором называется аппарат, в котором осуществляются химические процессы, сочетающие химические реакции с массо- и теплопереносом, с целью получения определенного вещества.

Типичные реакторы – это контактные аппараты, реакторы с механическим, пневматическим и струйным перемешиванием, промышленные печи и т. д. От правильности выбора реактора и его совершенства зависит эффективность всего технологического процесса.

Реальные химические реакторы существенно отличаются друг от друга, следовательно, задача построения математических моделей должна решаться в каждом конкретном случае с учетом особенностей процесса и его конструктивного оформления.

В химической технологии применяют всевозможные типы реакторов, имеющие существенные различия. Тем не менее, реакторы можно классифицировать по некоторым признакам.

7.1. Математические модели реакторов идеального смешения

Уравнение модели РИС записывается в виде математического выражения, характеризующего изменения концентрации в реакционной среде во времени, которое обуславливается, во-первых, движением потока и, во-вторых, химическим превращением. Поэтому указанную модель следует строить на основе типовой МИС с учетом скорости химической реакции, т.е.

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{v}{V} \cdot (C_{iex} - C_i) \pm W_j, \quad (7.1)$$

где C_i – концентрация i -го вещества, моль/м³;

v – объемная скорость, м³/с;

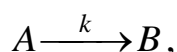
V – объем реактора, м³;

W_j – скорость j -й химической реакции, моль/(м³·с).

Уравнение (7.3) записывается по каждому из компонент, участвующих в реакции. Если принять, что исходным является вещество A и заменить величины $C_{ex} = C_{A0}$, $C = C_A$, $W_i = -W_A$ (вещество A убывает), а также представить **время пребывания**, как отношение реакционного объема к объемной скорости $\tau = V/v$, то уравнение (7.1) примет вид

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_{A0} - C_A) - W_A. \quad (7.2)$$

Модель реактора идеального перемешивания, в которой протекает простая элементарная реакция типа



имеет вид

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_{A0} - C_A) - kC_A, \\ \frac{dC_B}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_{B0} - C_B) + kC_A. \end{cases} \quad (7.3)$$

Начальные условия: при $t = 0$ имеем $C_A(0) = C_{A0}$, $C_B(0) = 0$.

Система (7.3) представляет собой систему материального баланса для динамического режима работы реактора. В стационарном режиме работы аппарата

$$\frac{dC_A}{dt} = 0, \quad \frac{dC_B}{dt} = 0.$$

7.2. Математические модели химических реакторов идеального вытеснения

С достаточным приближением МИВ соответствует структуре потока в трубчатых проточных аппаратах при турбулентном движении потоков и больших отношениях длин труб к их диаметрам ($L/d > 100$).

Математическое описание реактора идеального вытеснения характеризует изменение концентраций в реакционной среде во времени, которое обусловлено движением потока (гидродинамический фактор) и химическим превращением (кинетический фактор). Поэтому модель реактора идеального вытеснения можно построить на основании типовой гидродинамической модели идеального вытеснения формула с учетом скорости химической реакции.

С учетом кинетического фактора динамическая модель изотермического реактора идеального вытеснения непрерывного действия будет иметь вид

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -U \cdot \frac{\partial C_i}{\partial l} \pm W_i, \quad (7.4)$$

где C_i – концентрация соответствующего вещества, моль/м³;

$U = v/S$ – средняя линейная скорость потока, м/с;

W_i – скорость реакции по i -му веществу, моль/(м³·с).

Уравнение (7.4) записывается по каждому из компонентов, участвующих в реакции. Например, для реакции $A \xrightarrow{k} B$, протекающей в изотермическом реакторе идеального вытеснения, математическая модель (динамический режим) будет иметь вид

$$\begin{cases} \frac{\partial C_A}{\partial t} = -U \cdot \frac{\partial C_A}{\partial l} - k \cdot C_A, \\ \frac{\partial C_B}{\partial t} = -U \cdot \frac{\partial C_B}{\partial l} + k \cdot C_A. \end{cases} \quad (7.5)$$

В установившемся (стационарном) режиме работы реактора $\frac{\partial C_A}{\partial t} = 0$, $\frac{\partial C_B}{\partial t} = 0$, тогда уравнения (7.5) примут следующий вид:

$$\begin{cases} U \cdot \frac{\partial C_A}{\partial l} = -k \cdot C_A, \\ U \cdot \frac{\partial C_B}{\partial l} = k \cdot C_A. \end{cases} \quad (7.6)$$

Так как $\frac{l}{U} = \tau$ – **время контакта или среднее время пребывания** (с), то уравнения (7.6) примут вид

$$\begin{cases} \frac{\partial C_A}{\partial \tau} = -k \cdot C_A, \\ \frac{\partial C_B}{\partial \tau} = k \cdot C_A. \end{cases} \quad (7.7)$$

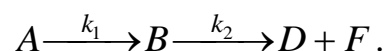
Для того чтобы с применением данной модели выполнить исследования химико-технологического процесса, протекающего в реакторе идеального вытеснения, необходимо решить систему дифференциальных уравнений (7.7).

7.3. Исследование химического процесса, протекающего в реакторе идеального смешения

Пусть в реакторе идеального смешения протекает химическая реакция *n*-октана в *и*-октан и в продукты крекинга:



или



Математическая модель процесса, представленного реакциями (7.8), с учетом уравнения (7.2), может быть записана в виде следующей системы уравнений материального баланса:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_{A_0} - C_A) - k_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_B}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_{B_0} - C_B) + k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_B, \\ \frac{dC_D}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_{D_0} - C_D) + k_2 \cdot C_B, \\ \frac{dC_F}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_{F_0} - C_F) + k_2 \cdot C_B. \end{cases} \quad (7.9)$$

Начальные условия для системы имеют вид: при $t = 0$ начальные концентрации равны $C_A(0) = C_{A_0} = 1$, $C_B(0) = C_D(0) = C_F(0) = 0$ (моль·доли). Пусть значения констант скоростей химических реакций равны $k_1 = 0,19$, $k_2 = 0,2$ (1/сек).

Для исследования построенной математической модели применим классический метод Рунге-Кутты четвертого порядка точности (шаг аппроксимации $h = 0,1$). Реализацию метода и построение графиков выполним в **ППП MATLAB**. Листинг вычислительной программы представлен ниже.

Время наблюдения за процессом установим равным 15 сек. Время контакта реагирующих веществ пример равным 3 и 8 сек. На рис. 7.1 изображены концентрации реагирующих веществ. Как видно из построенных графиков система постепенно приходит в равновесие (скорость изменений концентраций замедляется) сразу после окончания времени контакта (для графиков в виде звездочки после 3 сек, для графиков в виде пунктирной линии – после 8 сек). Изменим временной промежуток наблюдений и время контакта и получим другие графики изменений концентраций (рис. 7.2).

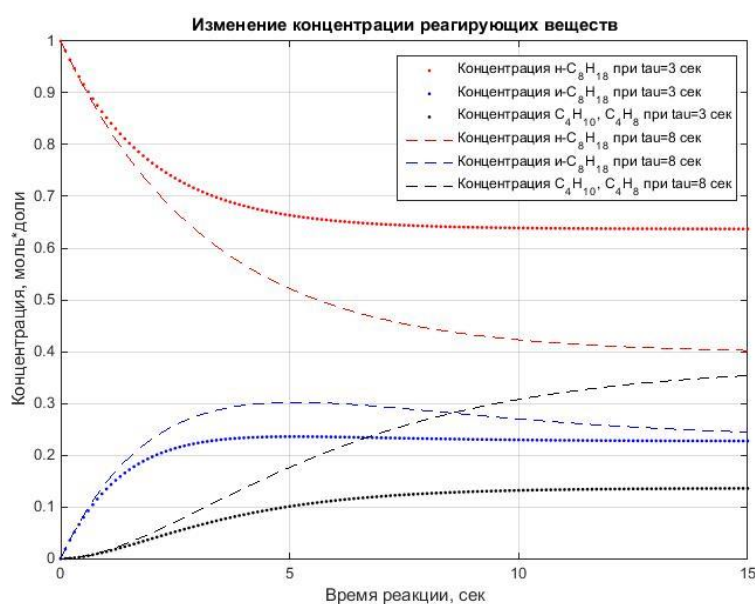


Рисунок 7.1 – Изменение концентраций реагирующих веществ (время наблюдения 15 сек, время контакта 3 и 8 сек)

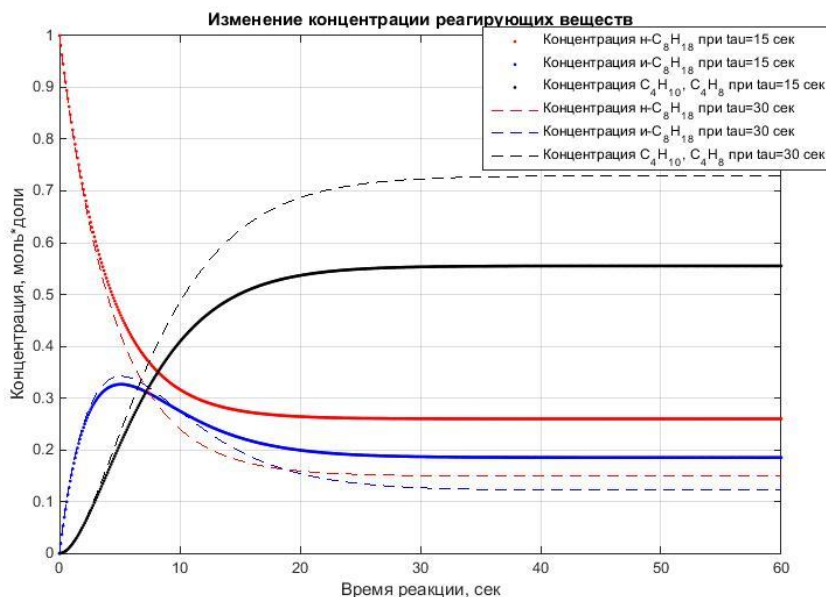


Рисунок 7.2 – Изменение концентраций реагирующих веществ (время наблюдения 60 сек, время контакта 3 и 8 сек)

Листинг программы для вычислительного примера

```
function LabRab7N1
clc; clear all;
%входные данные
k1=0.19; k2=0.2; %константы скоростей химических реакций, 1/сек
CA0=1; CB0=0; CD0=0; CF0=0; %начальные концентрации, моль*доли
T=60; %время реакции, сек
dt=0.1; %шаг аппроксимации
t=0:dt:T; %разбиение сетки
p=size(t);

%задание времени пребывания
tau1=15;
%система кинетических уравнений
fun=@(t, C) ([1/tau1*(CA0-C(1))-k1*C(1);
1/tau1*(CB0-C(2))+k1*C(1)-k2*C(2);
1/tau1*(CD0-C(3))+k2*C(2);
1/tau1*(CF0-C(4))+k2*C(2)]);
%начальные условия
C10=[CA0; CB0; CD0; CF0];
%решение системы ОДУ методом Рунге-Кутты
C1(:, 1)=C10;
for j=1:(p(2)-1)
K1=fun(t(j), C1(:, j));
K2=fun(t(j)+dt/2, C1(:, j)+dt*K1/2);
K3=fun(t(j)+dt/2, C1(:, j)+dt*K2/2);
K4=fun(t(j)+dt, C1(:, j)+dt*K3);
C1(:, j+1)=C1(:, j)+dt/6*(K1+2*K2+2*K3+K4);
end;

%задание времени пребывания
```



```

tau2=30;
%система кинетических уравнений
fun=@(t, C) ([1/tau2*(CA0-C(1))-k1*C(1);
             1/tau2*(CB0-C(2))+k1*C(1)-k2*C(2);
             1/tau2*(CD0-C(3))+k2*C(2);
             1/tau2*(CF0-C(4))+k2*C(2)]);
%начальные условия
C20=[CA0; CB0; CD0; CF0];
%решение системы ОДУ методом Рунге-Кутты
C2(:, 1)=C20;
for j=1:(p(2)-1)
    K1=fun(t(j), C2(:, j));
    K2=fun(t(j)+dt/2, C2(:, j)+dt*K1/2);
    K3=fun(t(j)+dt/2, C2(:, j)+dt*K2/2);
    K4=fun(t(j)+dt, C2(:, j)+dt*K3);
    C2(:, j+1)=C2(:, j)+dt/6*(K1+2*K2+2*K3+K4);
end;

figure(1)
plot(t, C1(1,:), 'r.', t, C1(2,:), 'b.', t, C1(3,:), 'k.', t,
      C2(1,:), 'r--', t, C2(2,:), 'b--', t, C2(3,:), 'k--')
grid on
xlabel('Время реакции, сек')
ylabel('Концентрация, моль*доли')
legend('Концентрация n-C_8H_1_8 при tau=15 сек', 'Концентрация и-
C_8H_1_8 при tau=15 сек', 'Концентрация C_4H_1_0, C_4H_8 при
tau=15 сек', 'Концентрация n-C_8H_1_8 при tau=30 сек', 'Концентра-
ция и-C_8H_1_8 при tau=30 сек', 'Концентрация C_4H_1_0, C_4H_8 при
tau=30 сек')
title('Изменение концентрации реагирующих веществ')

```

7.4. Исследование химического процесса, протекающего в реакторе идеального вытеснения

Исследование закономерностей протекания химической реакции в реакторе идеального вытеснения заключается в определении концентраций реагирующих веществ на выходе из реактора.

Пусть в реакторе идеального вытеснения протекает химическая реакция n -октана в u -октан и в продукты крекинга, аналогичная (7.8).

Тогда математическая модель химического процесса может быть записана в виде следующей системы уравнений материальных балансов:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{d\tau} = -k_1 \cdot C_A, \\ \frac{dC_B}{d\tau} = k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_B, \\ \frac{dC_D}{d\tau} = k_2 \cdot C_B, \\ \frac{dC_F}{d\tau} = k_2 \cdot C_B. \end{cases} \quad (7.10)$$

Начальные условия для системы имеют вид: при $\tau = 0$ начальные концентрации равны $C_A(0) = C_{A0} = 1$, $C_B(0) = C_D(0) = C_F(0) = 0$ (моль·доли). Значения констант скоростей химических реакций равны $k_1 = 0,19$, $k_2 = 0,2$ (1/сек).

Для исследования построенной математической модели применим классический метод Рунге-Кутты четвертого порядка точности (шаг аппроксимации $h = \tau/100$). Реализацию метода и построения графиков в ППП MATLAB **выполнить самостоятельно**.

Будем изменять время контакта реагирующих веществ. После проведения вычислений получим следующие графики (рис. 7.3-7.5). Как видно из последнего рисунка, примерно через 50 сек от начала реакции система приходит в равновесие. Концентрации н-С₈H₁₈ и изо-С₈H₁₈ приближаются к нулю, и в реакторе остаются продукты крекинга.

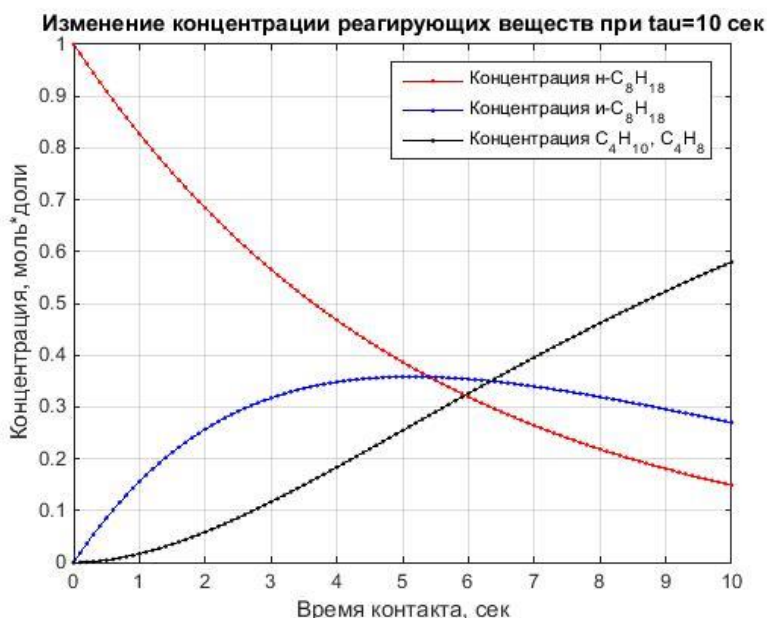


Рисунок 7.3 – Изменение концентраций реагирующих веществ (время контакта 10 сек)

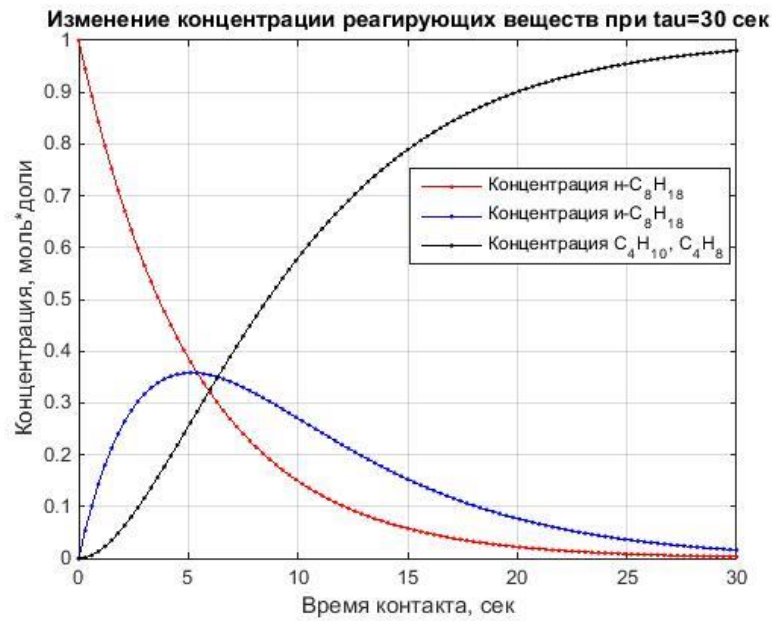


Рисунок 7.4 – Изменение концентраций реагирующих веществ (время контакта 30 сек)

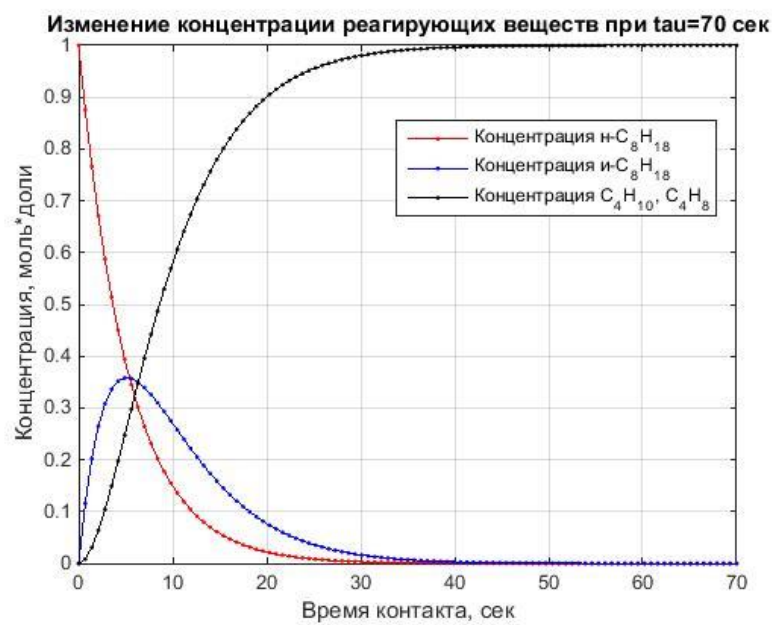


Рисунок 7.5 – Изменение концентраций реагирующих веществ (время контакта 70 сек)

Индивидуальные задания для самостоятельной работы

Пусть в реакторе протекает химическая реакция *n*-октана в *и*-октан и в продукты крекинга, описанная уравнением (7.8). Заданы начальные концентрации реагирующих веществ $C_{n-C_8H_{18}}(0) = 1$, $C_{изо-C_8H_{18}}(0) = C_{C_4H_{10}}(0) = C_{C_4H_8}(0) = 0$ (моль·доли). Значения констант скоростей химических реакций составляют $k_1 = 0,4 - 0,015 \cdot N$, $k_2 = 0,3 + 0,02 \cdot N$ (1/сек), где *N* – номер варианта.

Задание 1. Построить и исследовать математическую модель химического процесса, протекающего в реакторе идеального смешения. Положить время наблюдения равным $t = 10 + 3N$ (*N* – номер варианта), время контакта – $\tau_1 = t/4$ и $\tau_2 = 2t/3$. Положить шаг аппроксимации равным $h = t/100$.

Задание 2. Построить и исследовать математическую модель химического процесса, протекающего в реакторе идеального вытеснения. Определить, после какого значения времени контакта система придет в равновесие. Положить шаг аппроксимации равным $h = \tau/100$.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 8 РЕШЕНИЕ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ В ЗАДАЧАХ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

8.1. Системы линейных алгебраических уравнений и методы их решения

Система из m линейных алгебраических уравнений с n неизвестными (сокращенно СЛАУ) в общем виде имеет вид

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m, \end{cases} \quad (8.1)$$

числа a_{ij} – **коэффициенты системы** (8.1), числа b_i – **свободные члены**, x_i – **неизвестные числа, которые надо определить**. Запись СЛАУ в виде (8.1) называется координатной.

Если ввести обозначения

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \text{ – матрица системы,}$$

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_m \end{pmatrix} \text{ – вектор правых частей,} \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix} \text{ – вектор правых частей,}$$

то систему (8.1) можно записать в матричной форме

$$A \cdot x = b.$$

СЛАУ (8.1) называется **однородной**, если $b_1 = b_2 = \dots = b_m = 0$, т.е. имеет система вид

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = 0, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = 0, \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = 0. \end{cases}$$

Иначе – **неоднородной**.

Решением СЛАУ называется такой набор значений неизвестных $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$, который при подстановке в каждое уравнение системы (8.1) обращает его в верное тождество.

Решить СЛАУ – значит:

- 1) выяснить, имеет ли СЛАУ решения;
- 2) найти все решения, если они существуют.

Система (8.1) называется **совместной**, если она имеет хотя бы одно решение и **несовместной**, если решений не имеет. Совместная система уравнений называется **определенной**, если она имеет единственное решение, и **неопределенной**, если она имеет более одного решения. В последнем случае каждое конкретное решение называется **частным решением системы**. Совокупность всех частных решений называется **общим решением системы**.

Однородная СЛАУ всегда совместна, поскольку нулевой набор значений ее неизвестных всегда является решением. Это решение называется **нулевым** или **тривиальным**.

Из **аналитических методов** решения СЛАУ универсальным является метод Гаусса (подходит для решения систем любого вида); для систем с квадратными матрицами ($m = n$) подходят матричный метод и метод Крамера.

Численные методы решения СЛАУ (с квадратными матрицами) делятся на две группы:

1) **прямые методы**: используют конечные соотношения (формулы) для вычисления неизвестных. Они дают решение после выполнения заранее известного числа операций (метод Гаусса, метод прогонки, метод LU-разложения, метод квадратных корней);

2) **итерационные методы** или **методы последовательных приближений**: в них необходимо задать некоторое приближённое решение – начальное приближение. После этого с помощью некоторого алгоритма проводится один цикл вычислений, называемый итерацией. В результате итерации находят новое приближение. Итерации проводятся до получения решения с требуемой точностью (метод простых итераций, метод Зейделя).

Для решения СЛАУ (с квадратными матрицами) в ППП MATLAB можно использовать матричную запись задачи и стандартные функции линейной алгебры (обращение матрицы и матричное умножение).

8.2. Задачи химической технологии, представляемые как системы линейных алгебраических уравнения

8.2.1. Обработка результатов спектрофотометрического исследования

Определить молярные концентрации компонентов в смеси углеводородов на основании результатов спектрофотометрического исследования, представленных в таблице 8.1.

Решение. Полагая, что для i -той длины волны выполняется закон Бэра, концентрацию каждого вещества в смеси можно определить из зависимости:

$$A_{tot_i} = \sum \varepsilon_{ij} \cdot C_j,$$

где A_{tot_i} – общее поглощение на длине волны λ_i ; ε_{ij} – молярный коэффициент поглощения j -го компонента смеси; C_j – молярная концентрация j -го компонента. Толщина поглощающего слоя считается равной 1.

Таблица 8.1 – Данные к задаче 8.2.1

Длина волны	Молярный коэффициент поглощения, л/моль · см				Общее поглощение
	П-ксилол	М-ксилол	О-ксилол	этилбензол	
12.5	1.502	0.0514	0	0.0408	0.1013
13.0	0.0261	1.1516	0	0.082	0.09943
13.4	0.0342	0.0355	2.532	0.2933	0.2194
14.3	0.034	0.0684	0	0.347	0.03393

Математическое описание предлагаемой зависимости может быть представлено системой линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} \varepsilon_{11}x_1 + \varepsilon_{12}x_2 + \varepsilon_{13}x_3 + \varepsilon_{14}x_4 = A_{tot_1}, \\ \varepsilon_{21}x_1 + \varepsilon_{22}x_2 + \varepsilon_{23}x_3 + \varepsilon_{24}x_4 = A_{tot_2}, \\ \varepsilon_{31}x_1 + \varepsilon_{32}x_2 + \varepsilon_{33}x_3 + \varepsilon_{34}x_4 = A_{tot_3}, \\ \varepsilon_{41}x_1 + \varepsilon_{42}x_2 + \varepsilon_{43}x_3 + \varepsilon_{44}x_4 = A_{tot_4} \end{cases}$$

или записано в соответствующей матричной форме.

Подставив все необходимые коэффициенты, находим решение системы – значения молярных концентраций:

$$C_1 = 0.0627, C_2 = 0.0795, C_3 = 0.0759, C_4 = 0.0760.$$

Ниже представлена программа для решения поставленной задачи.

```
function LabRab8N1
clc; clear all;
%входные данные
%Задание матрицы коэффициентов
Eps = [1.502    0.0514  0    0.0408;
       0.0261  1.1516  0    0.082;
       0.0342  0.0355  2.532  0.2933;
       0.034   0.0684  0    0.347];
%Задание столбца свободных членов
Atot = [0.1013; 0.09943; 0.2194; 0.03393]
%Решение системы с использованием матричных операций
```

```

disp('Значения молярных концентраций:')
C = Eps^-1*Atot
disp('Проверка решения:')
delta = Eps*C - Atot

```

8.2.2. Материальный баланс в производственном планировании

Требуется согласовать производство трех групп химических заводов, как по линии взаимных связей, так и по линии выполнения заданной им программы на производство продукции для удовлетворения нужд потребителей (конечная продукция). Исходные данные – программа на конечную продукцию каждой группы заводов и прогрессивные величины норм расхода этих продуктов как сырья для взаимного и собственного воспроизводства – представлены в таблице 8.2.

Таблица 8.2 – Данные к задаче 8.2.2

	Норма расхода, т/т			Программа на конечную продукцию
	Нефтехимические продукты	Химические продукты	Изделия из пластмассы	
Нефтехимические заводы	0.08	0.04	0.01	50000
Заводы химической промышленности	0.07	0.06	0.02	30000
Заводы переработки пластмасс	0.09	0.08	0.01	80000

Решение. Математически согласованное производство по валовым выпускам данных групп заводов (x_1 – нефтехимии, x_2 – химии, x_3 – пластмасс) с учетом прогрессивных норм расхода записано в виде системы линейных уравнений

$$\begin{cases} x_1 - (a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3) = y_1, \\ x_2 - (a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3) = y_2, \text{ или} \\ x_3 - (a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3) = y_3, \end{cases} \quad \begin{cases} (1 - a_{11})x_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 = y_1, \\ -a_{21}x_1 + (1 - a_{22})x_2 - a_{23}x_3 = y_2, \\ -a_{31}x_1 - a_{32}x_2 + (1 - a_{33})x_3 = y_3, \end{cases}$$

где a_{ij} – нормы расхода; y_i – количество конечного продукта.

Подставив все необходимые коэффициенты, находим решение системы – количество производимой продукции:

$$x_1 = 5.697 \cdot 10^4, \quad x_2 = 3.8052 \cdot 10^4, \quad x_3 = 8.9062 \cdot 10^4.$$

Ниже представлена программа для решения поставленной задачи.

```

function LabRab8N2
clc; clear all;
%входные данные

```



```

%Задание матрицы коэффициентов
A = [0.08    0.04    0.01;
     0.07    0.06    0.02;
     0.09    0.08    0.01];
%Задание столбца свободных членов
y = [50000; 30000; 80000];
%Решение системы с использованием матричных операций
AA = eye(3) - A;
disp('Количество производимой продукции:')
X = AA^-1*y
disp('Проверка решения:')
delta = AA*X - y

```

8.3. Системы нелинейных уравнений и методы их решения

Системой из m нелинейных уравнений с n неизвестными называется система вида

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \\ \dots \\ f_m(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \end{cases} \quad (8.2)$$

где $f_i(x_1, x_2, \dots, x_n): \check{Y}^n \rightarrow \check{Y}$ – нелинейные функции, определенные и непрерывные в некоторой области $D \in \check{Y}^n$. Запись СЛАУ в виде (8.1) называется координатной.

Решением системы (8.2) называется такой набор значений неизвестных $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$, который при подстановке в каждое уравнение системы (8.2) обращает его в верное тождество.

Как и в случае СЛАУ имеют место аналогичные определения. Система (8.2) называется **совместной**, если она имеет хотя бы одно решение и **несовместной**, если решений нет. Совместная система уравнений называется **определенной**, если она имеет единственное решение, и **неопределенной**, если она имеет более одного решения. В последнем случае каждое конкретное решение называется **частным решением системы**. Совокупность всех частных решений называется **общим решением системы**.

К **аналитическим методам** решения относятся следующие – метод разложения на множители, метод исключения одной из неизвестных, метод алгебраических преобразований, метод замены переменных. **Численные методы** решения систем нелинейных уравнений: метод простых итераций, метод Зейделя, метод секущих, метод Ньютона и его модификации.

Для решения нелинейных систем в ППП MATLAB используется встроенная функция **fsolve**.

8.4. Задачи химической технологии, представляемые как системы нелинейных уравнения

8.4.1. Определение зависимости концентраций компонентов для стационарного процесса химического превращения в реакторе с мешалкой. Определение оптимальной скорости подачи исходной смеси

Процесс, для которого известна схема реакций $A + 2B \xrightarrow{k_1} D$, $2A + D \xrightarrow{k_2} E$, проводится в аппарате смешения в установившемся режиме при изотермических условиях. Известны концентрации веществ во входном потоке: $C_{A0} = 2$ моль/м³, $C_{B0} = 1.6$ моль/м³, $C_{D0} = C_{E0} = 0$ моль/м³. Константы скоростей реакции – $k_1 = 0.3$ м³/(с·моль), $k_2 = 0.6$ м³/(с·моль). Объем реактора – $V = 1$ м³. Диапазон возможного времени пребывания в реакторе τ равен $[0.4, 2]$. Требуется определить зависимость концентраций на выходе от времени пребывания в аппарате и скорость подачи исходной смеси, обеспечивающую максимальную концентрацию целевого продукта D .

Решение. Для заданных условий проведения процесса математическая модель может быть записана в виде системы нелинейных алгебраических уравнений. Каждое из уравнений представляет собой материальный баланс по компоненту с учетом времени пребывания в реакторе и кинетики процесса:

$$\begin{cases} C_A = C_{A0} - \tau \cdot (k_1 C_A C_B^2 + k_2 C_A^2 C_D), \\ C_B = C_{B0} - \tau \cdot k_1 C_A C_B^2, \\ C_D = C_{D0} + \tau \cdot (k_1 C_A C_B^2 - k_2 C_A^2 C_D), \\ C_E = C_{E0} + \tau \cdot k_2 C_A^2 C_D. \end{cases}$$

Неизвестными в задаче являются концентрации веществ, которые определяются из данной нелинейной системы при заданных параметрах и при каждом значении τ из указанного диапазона. Так, например, при $\tau = 1$ с находим соответствующие решения:

$$C_A = 1.2805, C_B = 1.119, C_D = 0.2425, C_E = 0.2385 \text{ (моль/м}^3\text{)}.$$

Будем варьировать τ от 0.4 до 2 с шагом 0.1 и определять значения соответствующих концентраций. Построим соответствующие графики (рис. 8.1).

Определяем, что максимально значение концентрации целевого продукта D составляет $C_D^{\max} = 0.2653$ при $\tau = 2$, откуда находим оптимальную скорость подачи исходной смеси – $v = V/\tau = 0.5$ м³/с.

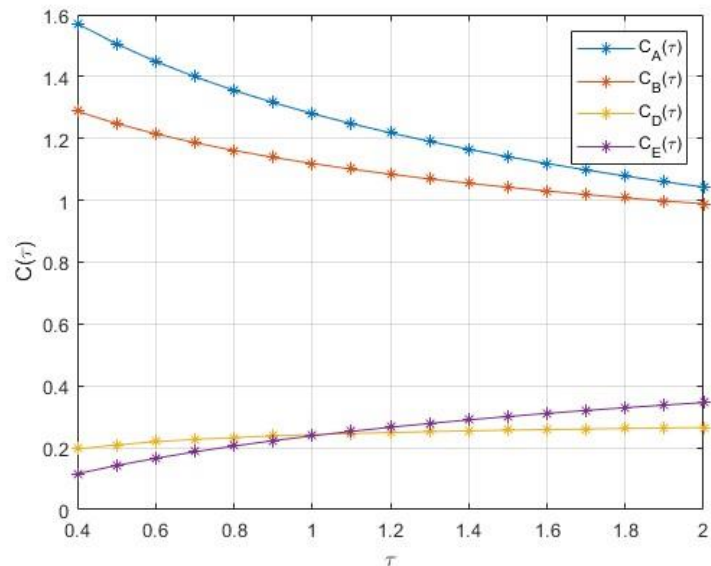


Рисунок 8.1 – Зависимость концентраций веществ от времени пребывания

Ниже представлена программа для решения поставленной задачи.

```
function LabRab8N2
clc; clear all;
%входные данные
A0 = 2;
B0 = 1.6;
D0 = 0;
E0 = 0;
k1 = 0.3;
k2 = 0.6;
V = 1;

% поиск решений при заданном tau
tau = 1;
F = @(C) [C(1) - A0 + tau*(k1*C(1).*C(2).^2 + k2*C(1).^2.*C(3));
          C(2) - B0 + tau*k1*C(1).*C(2).^2;
          C(3) - D0 - tau*(k1*C(1).*C(2).^2 - k2*C(1).^2.*C(3));
          C(4) - E0 - tau*k2*C(1).^2.*C(3)];
C0 = [A0; B0; D0; E0];
[C, fval] = fsolve(F, C0);

disp('Концентрация веществ при tau = 1:')
C_A = C(1)
C_B = C(2)
C_D = C(3)
C_E = C(4)

% поиск решений при tau из [0.4, 2]
Tau = 0.4:0.1:2;
CC = zeros(4, length(Tau));
for i = 1:length(Tau)
```

```

    tau = Tau(i);
    F = @(C) [C(1) - A0 + tau*(k1*C(1).*C(2).^2 +
k2*C(1).^2.*C(3));
    C(2) - B0 + tau*k1*C(1).*C(2).^2;
    C(3) - D0 - tau*(k1*C(1).*C(2).^2 - k2*C(1).^2.*C(3));
    C(4) - E0 - tau*k2*C(1).^2.*C(3)];
    CC(:, i) = fsolve(F, C0);
end

plot(Tau, CC(1, :), '-*', Tau, CC(2, :), '-*', Tau, CC(3, :), '-
*', Tau, CC(4, :), '-*')
grid on
xlabel('\tau')
ylabel('C(\tau)')
legend('C_A(\tau)', 'C_B(\tau)', 'C_D(\tau)', 'C_E(\tau)')

[C_D_max, I] = max(CC(3, :)); % определение максимального значения
концентрации для D и соответствующего индекса
C_D_max = C_D_max
disp('Оптимальная скорость подачи исходной смеси, м^3/с:')
v_opt = V/Tau(I)

```

Индивидуальные задания для самостоятельной работы

Задание 1. Произвести расчет кислоты заданной концентрации.

Даны четыре емкости с растворами кислоты различной концентрации. Если смешать растворы в определенных соотношениях, то получится кислота заданной концентрации (табл. 8.3). Составить математическую модель задачи и определить, какова концентрация кислоты в каждом сосуде при приготовлении смеси. Выполнить проверку полученного решения.

Таблица 8.3 – Значения параметров задачи (варианты для задания 1)

Вариант	Соотношения концентраций в емкостях	Конечная концентрация в емкостях кислоты, %
1	1 : 1 : 1 : 1	13
	2 : 3 : 2 : 1	34
	4 : 1 : 1 : 4	15
	3 : 1 : 4 : 1	25
2	3 : 1 : 1 : 5	16
	2 : 3 : 2 : 1	24
	4 : 1 : 1 : 2	15
	3 : 1 : 4 : 1	25
3	1 : 1 : 1 : 5	16
	2 : 3 : 2 : 1	24
	1 : 1 : 4 : 2	17
	3 : 1 : 4 : 1	25
4	1 : 1 : 1 : 5	16
	2 : 3 : 2 : 1	24
	3 : 1 : 4 : 2	27
	2 : 1 : 4 : 1	25
5	3 : 4 : 1 : 1	16
	2 : 3 : 2 : 1	14
	2 : 1 : 4 : 2	20
	2 : 1 : 4 : 1	15
6	3 : 2 : 1 : 1	16
	4 : 3 : 2 : 1	24
	2 : 1 : 4 : 2	20
	7 : 1 : 3 : 1	20
7	3 : 2 : 1 : 3	18
	4 : 3 : 2 : 1	24
	2 : 1 : 4 : 2	20
	7 : 2 : 3 : 1	22
8	5 : 2 : 1 : 3	23
	4 : 1 : 2 : 1	17
	2 : 1 : 4 : 2	20
	2 : 2 : 3 : 1	22
9	3 : 2 : 1 : 3	17
	4 : 1 : 2 : 1	17
	2 : 1 : 4 : 2	20
	1 : 2 : 3 : 5	21
10	1 : 1 : 1 : 1	13
	4 : 3 : 2 : 1	34
	4 : 1 : 1 : 4	25
	4 : 1 : 4 : 1	25

Задание 2. Произвести моделирование стационарного процесса химического превращения в реакторе с мешалкой.

Процесс $A + B \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} R + S$ протекает в жидкой фазе и проводится в реакторе идеального смешения. Известны: объем реактора – $V \text{ м}^3$; константы прямой и обратной реакции – k_1 и $k_2 \text{ м}^3/(\text{с}\cdot\text{моль})$. В реактор поступают непрерывно два потока жидкости с объемными одинаковыми скоростями. В первом содержится C_{A0} кмоль/ м^3 вещества A , во втором потоке – C_{B0} кмоль/ м^3 вещества B . Требуется определить скорость подачи каждого потока, которые обеспечат за время пребывания в аппарате превращение вещества B на x %. Принять, что плотность жидкости в процессе не изменяется. Данные представлены в таблице 8.4.

Таблица 8.4 – Значения параметров задачи (варианты для задания 2)

	Вариант									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C_{A0} , кмоль/ м^3	3.8	3.8	3.5	3.5	4.5	4.5	3.3	2.3	2.8	2.8
C_{B0} , кмоль/ м^3	1.6	1.9	1.9	2.9	2.9	1.5	1.5	1.5	1.5	1.6
k_1 , $\text{м}^3/(\text{с}\cdot\text{моль})$	0.13	0.13	0.12	0.12	0.12	0.12	0.151	0.151	0.141	0.118
k_2 , $\text{м}^3/(\text{с}\cdot\text{моль})$	0.05	0.05	0.05	0.03	0.03	0.04	0.04	0.05	0.03	0.05
V , м^3	0.12	0.2	0.24	0.24	0.2	0.2	0.22	0.22	0.3	0.12
x , %	0.75	0.75	0.7	0.7	0.6	0.6	0.6	0.7	0.7	0.75

Дополнительные сведения. Технологическое оформление процесса может быть представлено эквивалентной схемой, состоящей из смесителя и реактора смешения (рис. 8.2).

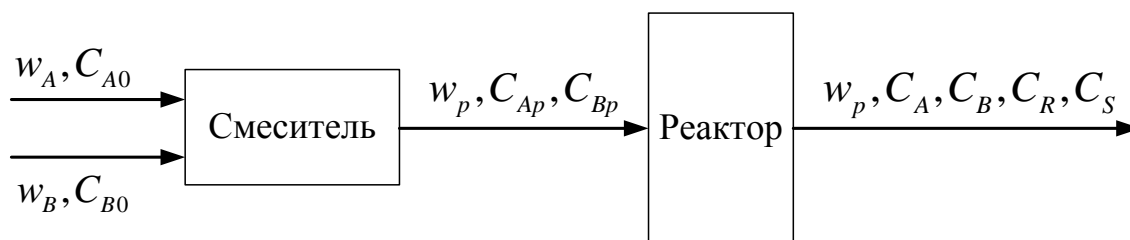


Рисунок 8.2. Эквивалентная схема процесса

Математическое описание работы смесителя потоков:

$$\begin{cases} w_p = w_A + w_B, \\ C_{Ap} = \frac{w_A \cdot C_{A0}}{w_p}, \\ C_{Bp} = \frac{w_B \cdot C_{B0}}{w_p}, \end{cases}$$

где w_A, w_B, w_p – объемные скорости потоков на входе и выходе смесителя; $C_{A0}, C_{B0}, C_{Ap}, C_{Bp}, C_A, C_B$ – концентрации веществ A и B на входе и выходе смесителя и реактора соответственно.

Учитывая условия проведения конкретного процесса, эти уравнения могут быть записаны в следующем виде $w_p = 2w, C_{Ap} = C_{A0} / 2, C_{Bp} = C_{B0} / 2$.

Математическое описание работы реактора включает уравнения кинетики, систему уравнений материального баланса по компонентам, зависимость времени пребывания τ от объема аппарата V и объемной скорости потока, а также ограничение на степень превращения вещества B :

$$\begin{cases} C_A = C_{Ap} + \tau \cdot (-k_1 C_A C_B + k_2 C_R C_S), \\ C_B = C_{Bp} + \tau \cdot (-k_1 C_A C_B + k_2 C_R C_S), \\ C_R = C_{Rp} + \tau \cdot (k_1 C_A C_B - k_2 C_R C_S), \\ C_S = C_{Sp} + \tau \cdot (k_1 C_A C_B - k_2 C_R C_S), \end{cases} \quad (8.3)$$

где $\tau = V / w_p$.

Тем самым, требуется найти решение системы нелинейных уравнений (8.3) с дополнительным уравнением $C_B = (1 - x) \cdot C_{Bp}$ (условие на превращение вещества B) относительно неизвестных величин C_A, C_B, C_R, C_S и τ , а затем вычислить скорость подачи каждого потока по формуле $w = V / (2\tau)$.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 9 МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ УПРАВЛЕНИЯ

Современная химическая технология – это высокопроизводительная аппаратура плюс информационные системы оптимального управления производством. Для реализации оптимального управления необходимо оперативно обрабатывать информацию о состоянии технологических процессов с помощью математических методов и компьютерной техники. Другой важной областью знаний, использующей для решения своих задач математические модели, является оптимальное проектирование технологической аппаратуры.

Рассмотрим некоторые задачи, при исследовании которых можно определить оптимальные параметры функционирования технологической аппаратуры.

9.1. Регулирование уровня жидкости в емкостях

9.1.1. Постановка задачи и математическая модель

Рассматривается задача определения оптимальных настроек ПИ-регулятора уровня жидкости в ёмкости. В данной задаче следует получить кривые переходного процесса регулирования уровня в емкостях, а также оценить качество управления по комплексному критерию. На рисунке 9.1 представлена принципиальная схема регулирования уровня жидкости в емкостях.

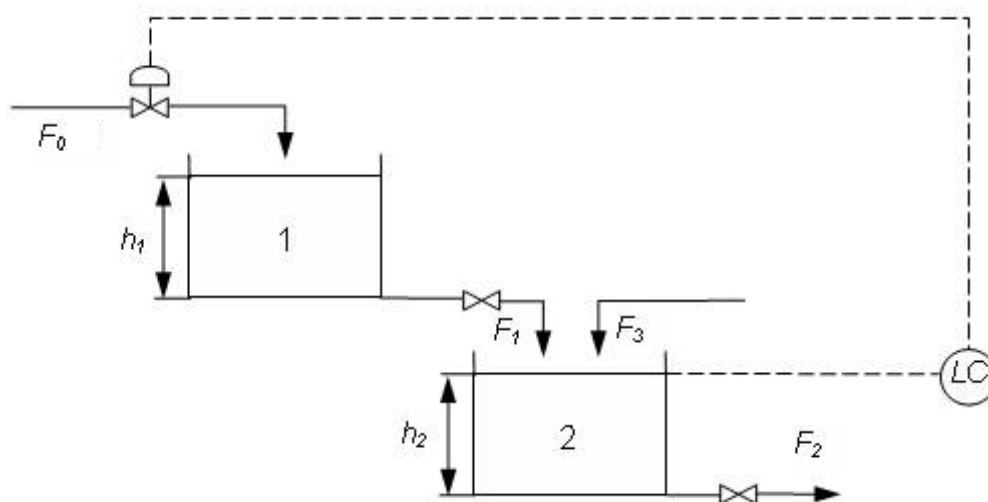


Рисунок 9.1 – Принципиальная схема регулирования уровня жидкости в ёмкости

Регулирование уровня в ёмкости осуществляется по принципу отклонения регулируемой величины от заданного значения. Уровень в ёмкости 2 поддерживается на заданном значении регулированием входного потока в ёмкость 1.

Эта ёмкость играет роль запаздывания в системе. Задача регулятора заключается в том, чтобы сохранять заданный уровень в ёмкости 2, несмотря на возмущения, которые происходят в потоке F_3 .

Уравнения математического описания при постоянной плотности можно записать в следующем виде:

$$\text{для ёмкости 1} - a_1 \cdot \frac{dh_1}{dt} = F_0 - F_1,$$

$$\text{для ёмкости 2} - a_2 \cdot \frac{dh_2}{dt} = F_1 + F_3 - F_2.$$

Уравнения расходов через вентили задаются в виде:

$$F_1 = k_1 \sqrt{h_1}, \quad F_2 = k_2 \sqrt{h_2}.$$

Возмущения, которые происходят в потоке F_3 будем моделировать в виде некоторой функции от времени.

Уравнение пропорционально-интегрального регулятора представим в виде:

$$F_0 = F_{00} + K_p (H_{zad} - h_2) + \frac{K_p}{\tau} \int_0^t (H_{zad} - h_2) dt.$$

Критерий качества регулирования по отклонению регулируемой величины от заданного значения запишем в следующем виде:

$$Q = \int_0^t (H_{zad} - h_2)^2 dt \rightarrow \min.$$

В таблице 9.1 представлено описание используемых параметров.

Таблица 9.1 – Спецификация принятых обозначений и их размерность

Обозначения	Наименование	Размерность
a_1, a_2	Площади поперечного сечения емкостей	м^2
F, F_2, F_3	Расход соответствующего потока	$\text{м}^3/\text{с}$
h_1, h_2	Уровень жидкости в соответствующей ёмкости	м
k_1, k_2	Коэффициенты, характеризующие пропускную способность вентилей ёмкостей	$\text{м}^3/(\text{с}\cdot\text{м})$
K_p	Пропорциональная составляющая регулятора	–
τ	Время изодрома (интегральная составляющая)	с
H_{zad}	Заданное значение уровня во второй емкости h_2 , который нужно поддерживать постоянным	м

Тем самым, математическое описание процесса регулирования уровня в ёмкости представляется в виде системы дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dh_1}{dt} = \frac{1}{a_1} (F_0 - k_1 \cdot \sqrt{h_1}), \\ \frac{dh_2}{dt} = \frac{1}{a_2} (k_1 \cdot \sqrt{h_1} + F_3(t) - k_2 \cdot \sqrt{h_2}), \\ \frac{dF_0}{dt} = -\frac{K_p}{a_2} (k_1 \cdot \sqrt{h_1} + F_3(t) - k_2 \cdot \sqrt{h_2}) + \frac{K_p}{\tau} (H_{zad} - h_2), \\ \frac{dQ}{dt} = (H_{zad} - h_2)^2. \end{cases} \quad (9.1)$$

Первое и второе уравнения системы – это дифференциальные уравнения для изменения уровня воды в ёмкостях; третье уравнение – уравнение для ПИ-регулятора, записанное в виде дифференциального уравнения; четвертое уравнение – критерий качества регулирования в дифференциальной форме.

Начальные условия определяются при $t = 0$:

$$h_1(0) = h_{10}, h_2(0) = h_{20}, F_0(0) = F_{00}, Q(0) = 0.$$

Для исследуемой системы найти такие значения параметров настройки ПИ-регулятора: коэффициент пропорциональности K_p и время изодрома τ , при которых критерий качества регулирования был бы минимальным.

9.1.2. Вычислительный эксперимент

Положим следующие значения параметров системы (9.1):

Наименование	Значение
Коэффициенты, характеризующие пропускную способность вентилей ёмкостей	$k_1 = 0.5$ $k_2 = 1.2$
Площади поперечного сечения емкостей	$a_1 = 4$ $a_2 = 3$
Пропорциональная составляющая регулятора	$K_p = 1$
Время изодрома (интегральная составляющая)	$\tau = 10$
Заданное значение уровня во второй емкости h_2 , который нужно поддерживать постоянным	$H_{zad} = 2$
Функция возмущения	$F_3(t) = \begin{cases} 0.015, & \text{если } t = 4, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$
Начальные условия	$h_{10} = 0, h_{20} = 0, F_{00} = 0.2$
Время моделирования	$T = 300$

В результате получим графики соответствующих зависимостей (рис. 9.1-9.2).

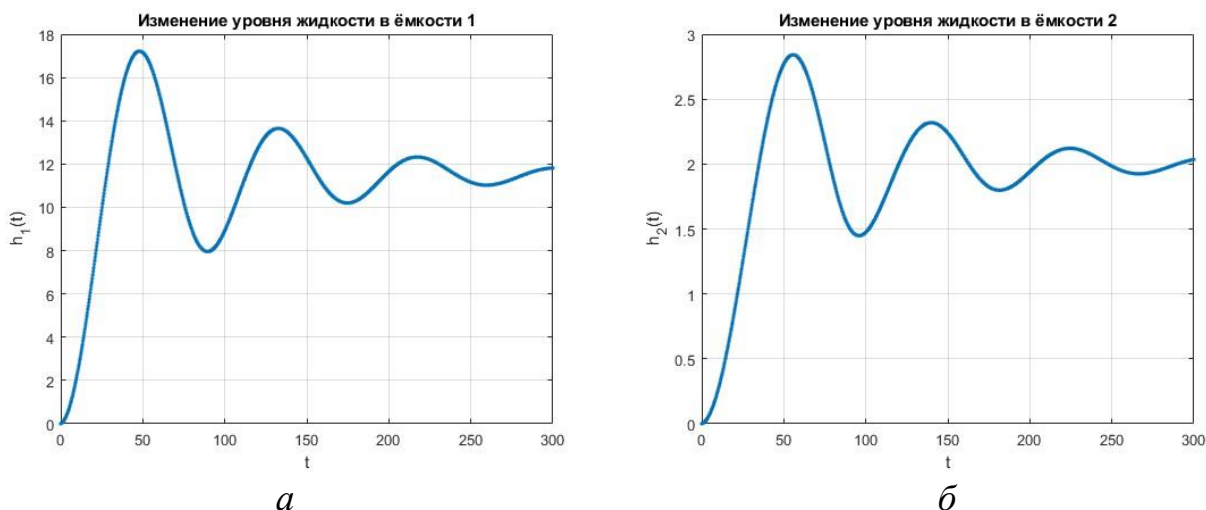


Рисунок 9.1 – Зависимости уровней жидкости от времени в ёмкости 1 (а), в ёмкости 2 (б) при $K_p = 1$ и $\tau = 8$

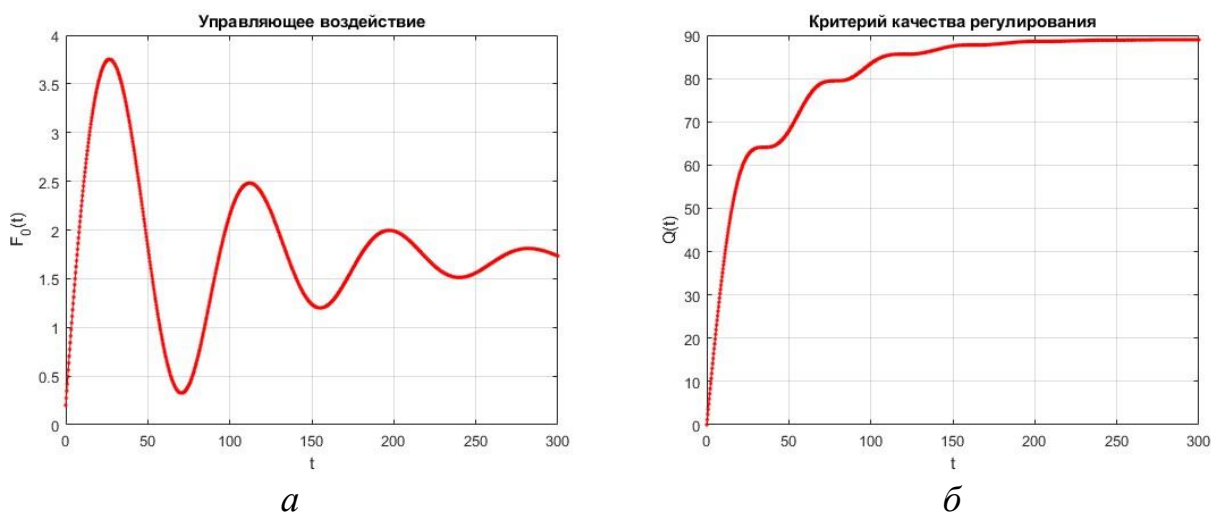
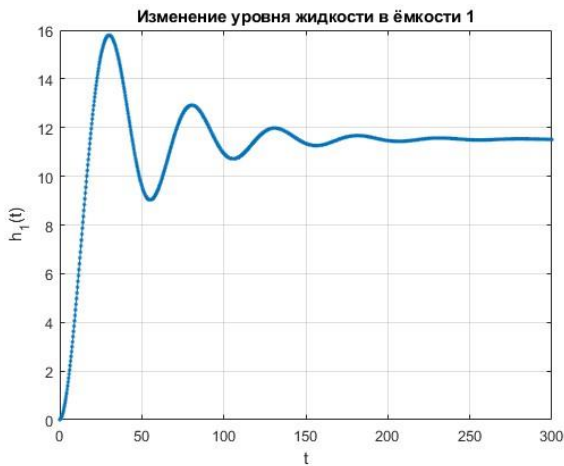


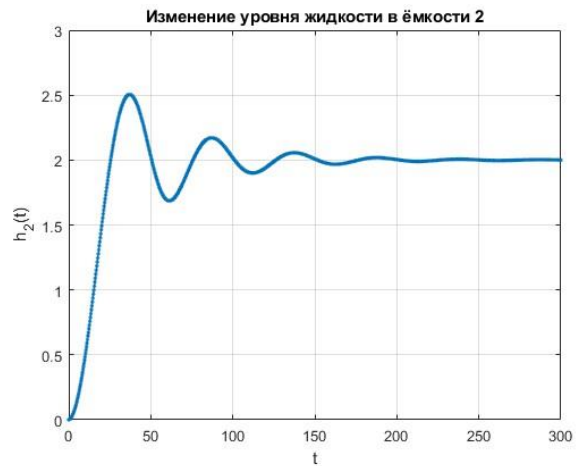
Рисунок 9.2 Зависимости управляющего воздействия (а) и критерия качества регулирования (б) от времени при $K_p = 1$ и $\tau = 8$

Значение критерия качества в конце наблюдений составляет величину $Q = 85.2964$ ($\text{м}^2 \cdot \text{с}$). Определим оптимальный набор параметров K_p и τ , при которых значение критерия качества в конце наблюдений Q будет минимальным. Для этого будем изменять параметр K_p от 0.2 до 2 с шагом 0.1, параметр τ от 4 до 30 с шагом 1, для каждого из этих наборов находить значение Q в конце наблюдений, а затем среди полученного массива найдем минимальное и соответствующие ему значения параметров.

Как видно из результатов моделирования значение критерия качества составляет 50.1485 ($\text{м}^2 \cdot \text{с}$) при значениях коэффициента пропорциональности равного $K_p = 3$ и времени издрорма $\tau = 10$ (с). Соответствующие кривые представлены на рис. 9.3-9.4.

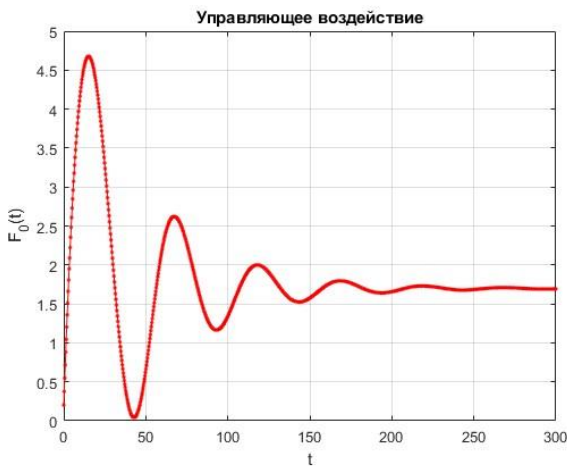


a

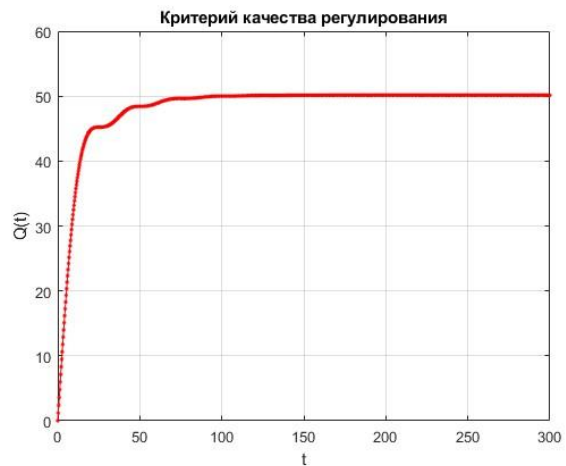


б

Рисунок 9.3 – Зависимости уровней жидкости от времени в ёмкости 1 (*a*), в ёмкости 2 (*б*) при $K_p = 3$ и $\tau = 10$



a



б

Рисунок 9.4 Зависимости управляющего воздействия (*a*) и критерия качества регулирования (*б*) от времени при $K_p = 3$ и $\tau = 10$

Ниже представлены программы для решения поставленной задачи.

```
function Y = F3(t) %функция возмущения
if t == 4
    Y = 0.015;
else
    Y = 0;
end
```

```
function z = fun1(t, Y) %система дифференциальных уравнений
global k1 k2 a1 a2 Kp tau Hzad

z(1,1) = 1/a1*(Y(3) - k1*abs(sqrt(Y(1)))));
z(2,1) = 1/a2*(k1*abs(sqrt(Y(1))) + F3(t) - k2*abs(sqrt(Y(2)))));
z(3,1) = -Kp/a2*(k1*abs(sqrt(Y(1))) + F3(t) - k2*abs(sqrt(Y(2)))));
```

```
+ Kp/tau*(Hzad - Y(2));  
z(4,1) = (Hzad - Y(2)).^2;
```

```
function LabRab9N1  
clc; clear all;  
  
global k1 k2 a1 a2 Kp tau Hzad  
%входные данные  
k1 = 0.5; k2 = 1.2; %коэффициенты, характеризующие пропускную спо-  
соб-ность вентилей ёмкостей  
a1 = 4; a2 = 3; %площади поперечного сечения емкостей  
Kp = 1; %пропорциональная составляющая регулятора  
tau = 10; %время изодрома (интегральная составляющая)  
Hzad = 2; %заданное значение уровня во второй емкости  
  
%начальные условия  
h10 = 0;  
h20 = 0;  
F00 = 0.2;  
Q0 = 0;  
Y0 = [h10; h20; F00; Q0];  
  
T = 300; %время моделирования  
dt = T/1000; %шаг аппроксимации  
t = 0:dt:T; %разбиение сетки  
%решение встроенным методом ode45  
[tt, Y] = ode45('fun1', t, Y0);  
  
%построение графиков  
figure(1)  
plot(t, Y(:,1), 'r.-')  
grid on  
xlabel('t')  
ylabel('h_1(t)')  
title('Изменение уровня жидкости в ёмкости 1')  
  
figure(2)  
plot(t, Y(:,2), 'r.-')  
grid on  
xlabel('t')  
ylabel('h_2(t)')  
title('Изменение уровня жидкости в ёмкости 2')  
  
figure(3)  
plot(t, Y(:,3), 'r.-')  
grid on  
xlabel('t')  
ylabel('F_0(t)')  
title('Управляющее воздействие')  
  
figure(4)  
plot(t, Y(:,4), 'r.-')
```

```

grid on
xlabel('t')
ylabel('Q(t)')
title('Критерий качества регулирования')

disp('Критерий качества регулирования в конце наблюдений:')
Q = Y(end, 4)

```

9.2. Регулирования температуры в емкости

9.2.1. Постановка задачи и математическая модель

Рассматривается задача определения оптимальных настроек ПИД-регулятора температуры в емкости, с помощью нагревателя. На рисунке 9.2 представлен объект управления и принципиальная схема регулирования температуры жидкости в ёмкости.

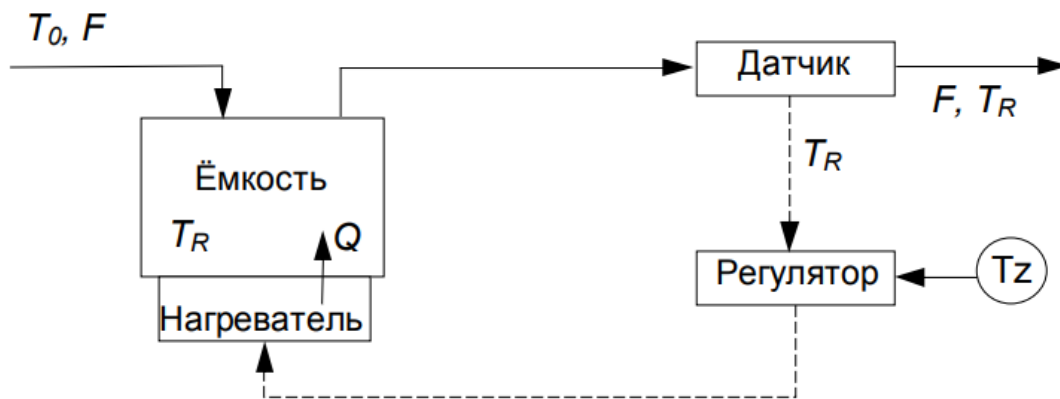


Рисунок 9.2 – Принципиальная схема управления температурой в ёмкости

Математическое описание теплового баланса для ёмкости имеет вид:

$$V \cdot \rho \cdot c_p \cdot \frac{dT_R}{dt} = F \cdot \rho \cdot c_p \cdot (T_0 - T_R) + Q,$$

где Q – тепло, поступающее от нагревателя.

Уравнение для ПИД-регулятора, работающего по принципу отклонения регулируемой величины от заданного значения, может быть представлено в следующем виде:

$$Q = Q_0 + K_p \cdot \varepsilon + \frac{K_p}{\tau_1} \cdot \int_0^t \varepsilon dt + K_p \cdot \tau_2 \cdot \frac{d\varepsilon}{dt},$$

где ошибка регулирования определяется по формуле $\varepsilon = T_{zad} - T_R$.

Уравнение для регулятора представим в виде дифференциального уравнения

$$\frac{dQ}{dt} = K_p \frac{d\varepsilon}{dt} + \frac{K_p}{\tau_1} \varepsilon + K_p \cdot \tau_2 \cdot \frac{d^2\varepsilon}{dt^2} \quad \text{или} \quad \frac{dQ}{dt} = -K_p \frac{dT_R}{dt} + \frac{K_p}{\tau_1} \varepsilon - K_p \cdot \tau_2 \cdot \frac{d^2T_R}{dt^2}$$

с соответствующими начальными условиями при $t = 0$: $Q(0) = 0, T_R(0) = T_{R0}$.

Критерий качества регулирования по отклонению регулируемой величины от заданного значения запишем в следующем виде:

$$Q_{val} = \int_0^t (T_{zad} - T_R)^2 dt \rightarrow \min.$$

В таблице 9.2 представлено описание используемых параметров.

Таблица 9.2 – Спецификация принятых обозначений и их размерность

Обозначения	Наименование	Размерность
F_R	Температура в ёмкости	$^{\circ}\text{C}$
Q	Количество теплоты, подаваемой в реактор (управляющее воздействие)	кДж
T_0	Температура входного потока	$^{\circ}\text{C}$
V	Объем ёмкости	м^3
ρ	Плотность жидкости	$\text{кг}/\text{м}^3$
K_p	Пропорциональная составляющая регулятора	–
τ_1	Время изодрома (интегральная составляющая)	ч
τ_2	Время предварения	ч
T_{zad}	Заданное значение температуры в емкости	$^{\circ}\text{C}$
F	Объемный расход поступающей жидкости	$\text{м}^3/\text{ч}$
c_p	Теплоёмкость	$\text{кДж}/(\text{кг}\cdot^{\circ}\text{C})$

Тем самым, математическое описание процесса регулирования температуры в ёмкости представляется в виде системы дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dT_R}{dt} = \frac{F}{V}(T_0 - T_R) + \frac{Q}{V\rho c_p}, \\ \frac{dQ}{dt} = -K_p \frac{dT_R}{dt} + \frac{K_p}{\tau_1}(T_{zad} - T_R) - K_p \tau_2 \frac{d^2T_R}{dt^2}, \\ \frac{dQ_{val}}{dt} = (T_{zad} - T_R)^2. \end{cases} \quad (9.2)$$

Преобразуем систему (9.2) следующим образом. Продифференцируем первое уравнение $\frac{d^2T_R}{dt^2} = -\frac{F}{V} \frac{dT_R}{dt} + \frac{1}{V\rho c_p} \frac{dQ}{dt}$, подставим во второе уравнение и преобразуем его:

$$\frac{dQ}{dt} = -K_p \frac{dT_R}{dt} + \frac{K_p}{\tau_1}(T_{zad} - T_R) - K_p \tau_2 \cdot \left(-\frac{F}{V} \frac{dT_R}{dt} + \frac{1}{V\rho c_p} \frac{dQ}{dt} \right),$$

$$\left(1 + \frac{K_p \tau_2}{V \rho c_p}\right) \cdot \frac{dQ}{dt} = \left(\frac{K_p \tau_2 F}{V} - K_p\right) \cdot \frac{dT_R}{dt} + \frac{K_p}{\tau_1} (T_{zad} - T_R),$$

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{1}{1 + \frac{K_p \tau_2}{V \rho c_p}} \cdot \left(\left(\frac{K_p \tau_2 F}{V} - K_p\right) \cdot \frac{dT_R}{dt} + \frac{K_p}{\tau_1} (T_{zad} - T_R)\right).$$

Тогда систему дифференциальных уравнений (9.2) можно записать в виде:

$$\begin{cases} \frac{dT_R}{dt} = \frac{F}{V} (T_0 - T_R) + \frac{Q}{V \rho c_p}, \\ \frac{dQ}{dt} = \frac{1}{1 + \frac{K_p \tau_2}{V \rho c_p}} \cdot \left(\left(\frac{K_p \tau_2 F}{V} - K_p\right) \cdot \frac{dT_R}{dt} + \frac{K_p}{\tau_1} (T_{zad} - T_R)\right), \\ \frac{dQ_{val}}{dt} = (T_{zad} - T_R)^2. \end{cases} \quad (9.3)$$

Начальные условия определяются при $t = 0$: $T_R(0) = T_{R0}$, $Q(0) = 0$, $Q_{val}(0) = 0$.

Для исследуемой системы найти такие значения параметров настройки ПИД-регулятора: коэффициент пропорциональности K_p , время изодрома τ_1 и время предварения τ_2 , при которых критерий качества регулирования был бы минимальным.

9.2.2. Вычислительный эксперимент

Положим следующие значения параметров системы (9.3):

Наименование	Значение
Температура входного потока	$T_0 = 20 + 0.2 \cdot \sin(\pi t / 5)$
Объем ёмкости	$V = 2$
Плотность жидкости	$\rho = 1$
Пропорциональная составляющая регулятора	$K_p = 10$
Время изодрома (интегральная составляющая)	$\tau_1 = 6$
Время предварения	$\tau_2 = 2$
Заданное значение температуры в емкости	$T_{zad} = 80$
Объемный расход поступающей жидкости	$F = 0.1$
Теплоёмкость	$c_p = 1$
Начальные условия	$T_R(0) = 20, Q(0) = 0, Q_{val}(0) = 0$

В результате получим графики соответствующих зависимостей (рис. 9.5-9.6).

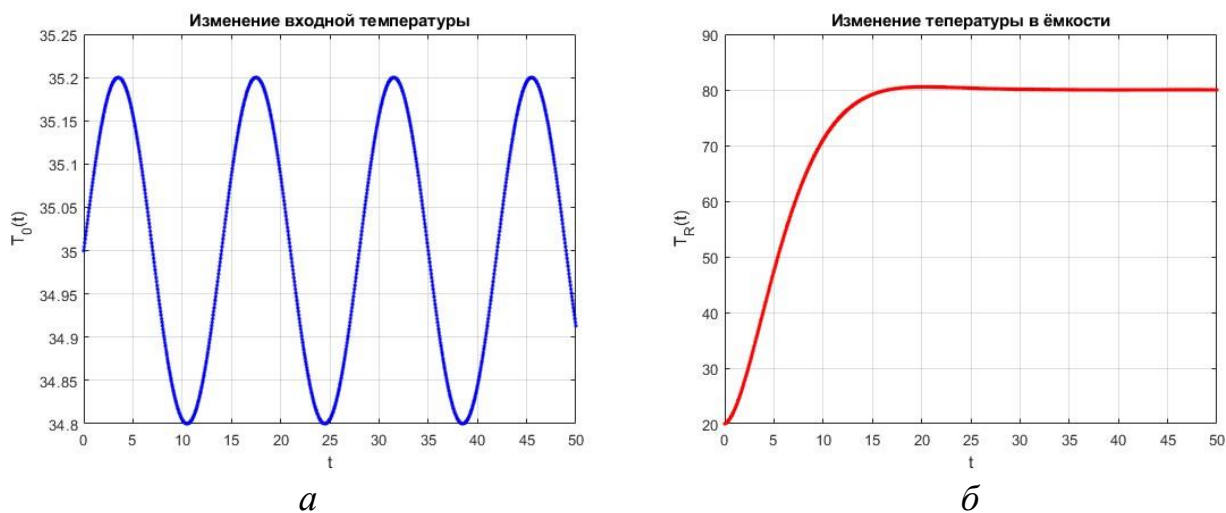


Рисунок 9.5 – Зависимости изменения входной температуры (а) и температуры в ёмкости 2 (б) от времени при $K_p = 10$, $\tau_1 = 6$ и $\tau_2 = 2$

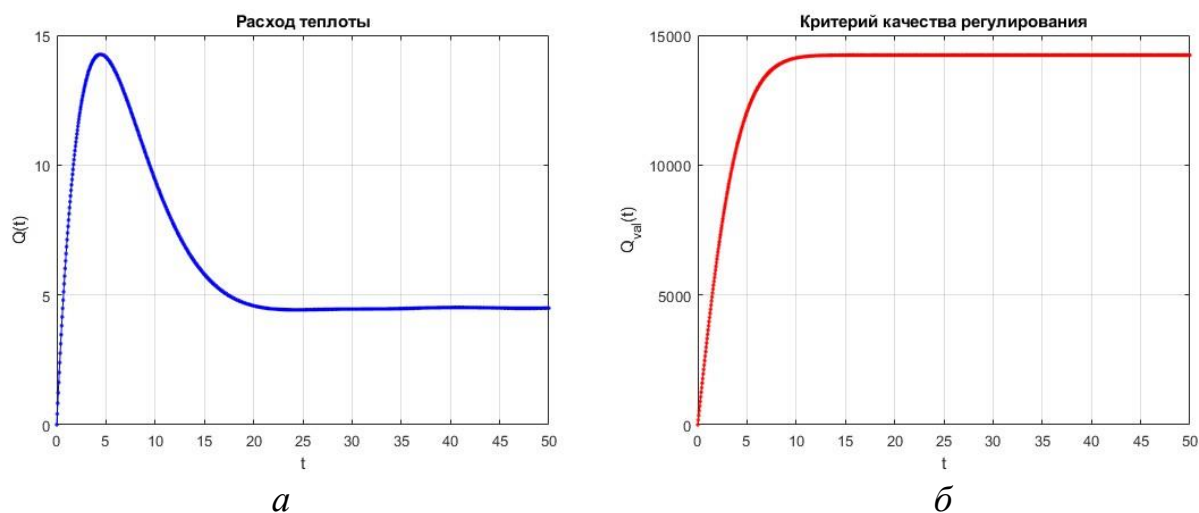


Рисунок 9.6 – Зависимости расхода теплоты (а) и критерия качества регулирования (б) от времени при $K_p = 10$, $\tau_1 = 6$ и $\tau_2 = 2$

Значение критерия качества в конце наблюдений составляет величину $Q_{val} = 14231$ ($^{\circ}\text{C}^2 \cdot \text{ч}$) при указанных настройках регулятора (при значениях коэффициента пропорциональности 10, времени издрорма 6 ч и времени предварения 2 ч). Определим оптимальный набор параметров K_p , τ_1 и τ_2 , при которых значение критерия качества в конце наблюдений Q_{val} будет минимальным.

Для этого будем изменять параметр K_p от 0.2 до 5 с шагом 0.2, параметр τ_1 от 2 до 10 с шагом 0.5, параметр τ_2 от 1 до 10 с шагом 0.5, для каждого из этих наборов находить значение Q_{val} в конце наблюдений, а затем среди полученного массива найдем минимальное и соответствующие ему значения параметров.

По результатам моделирования получаем, что значение критерия качества составляет 6011.3 ($^{\circ}\text{C}^2 \cdot \text{ч}$) при значениях коэффициента пропорциональности равного $K_p = 5$, времени издрорма $\tau_1 = 2$ (ч) и времени предварения $\tau_2 = 1$ (ч). Соответствующие кривые представлены на рис. 9.7-9.8.

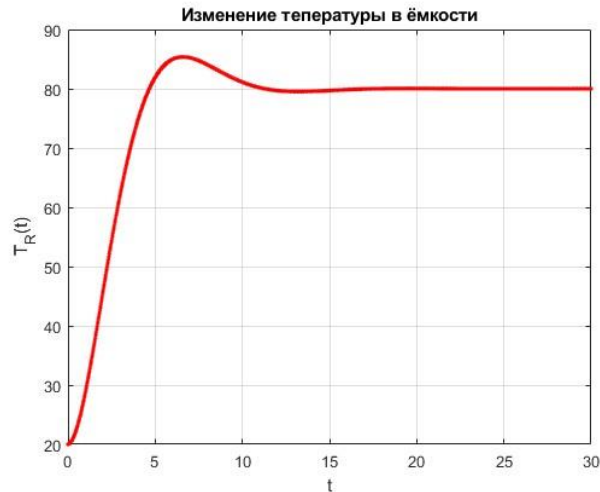


Рисунок 9.7 – Зависимость температуры в ёмкости 2 от времени при $K_p = 5$, $\tau_1 = 2$ и $\tau_2 = 1$

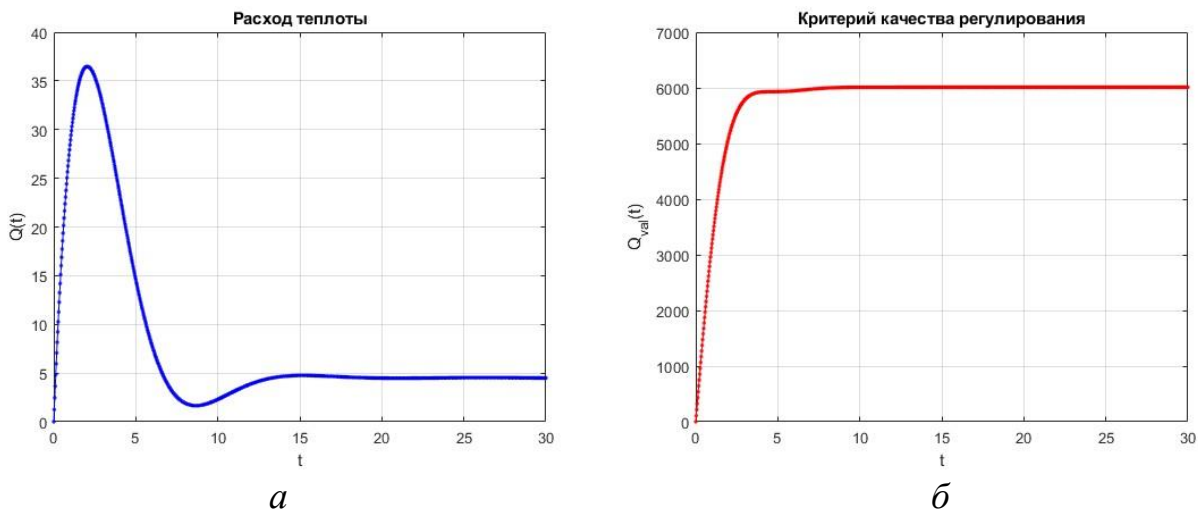


Рисунок 9.8 – Зависимости расхода теплоты (а) и критерия качества регулирования (б) от времени при $K_p = 5$, $\tau_1 = 2$ и $\tau_2 = 1$

Ниже представлены программы для решения поставленной задачи.

```
function Y = T0(t) %функция входной температуры
Y = 35 + 0.2*sin(pi*t/7);
```

```
function z = fun2(t, Y) %система дифференциальных уравнений
global V ro Kp tau1 tau2 Tzad F Cp
z(1,1) = F/V*(T0(t) - Y(1)) + Y(2)/(V*ro*Cp);
z(2,1) = 1/(1+Kp*tau2/(V*ro*Cp)) * ((Kp*tau2*F/V - Kp)*z(1,1) +
Kp/tau1*(Tzad - Y(1)));
z(3,1) = (Tzad - Y(1)).^2;
```

```

function LabRab9N2
clc; clear all;

global V ro Kp tau1 tau2 Tzad F Cp
%входные данные
V = 2; %Объем ёмкости
ro = 1; %Плотность жидкости
Kp = 10; %пропорциональная составляющая регулятора
tau1 = 6; %Время изодрома (интегральная составляющая)
tau2 = 2; %Время предварения
Tzad = 80; %Заданное значение температуры в емкости
F = 0.1; %Объемный расход поступающей жидкости
Cp = 1; %Теплоёмкость

%начальные условия
Tr = 20;
Q = 0;
Qval = 0;
Y0 = [Tr; Q; Qval];

T = 50; %время моделирования
dt = T/1000; %шаг аппроксимации
t = 0:dt:T; %разбиение сетки
%решение встроенным методом ode45
[tt, Y] = ode45('fun2', t, Y0);

%построение графиков
figure(1)
plot(tt, T0(tt), 'b.-')
grid on
xlabel('t')
ylabel('T_0(t)')
title('Изменение входной температуры')

figure(2)
plot(tt, Y(:,1), 'r.-')
grid on
xlabel('t')
ylabel('T_R(t)')
title('Изменение температуры в ёмкости')

figure(3)
plot(t, Y(:,2), 'b.-')
grid on
xlabel('t')
ylabel('Q(t)')
title('Расход теплоты')

figure(4)
plot(t, Y(:,3), 'r.-')
grid on
xlabel('t')

```

```
ylabel('Q_{val}(t)')  
title('Критерий качества регулирования')  
  
disp('Критерий качества регулирования в конце наблюдений:')  
Q_val = Y(end, 3)
```

Индивидуальные задания для самостоятельной работы

Задание 1. Произвести расчет для задачи регулирования уровня жидкости в емкости (п. 9.1).

Все параметры для задачи взять такими, как и в п. 9.1.2, кроме функции возмущения (табл. 9.3). Записать математическую модель задачи и определить такие значения параметров настройки ПИ-регулятора: коэффициент пропорциональности K_p и время изодрома τ , при которых критерий качества регулирования был бы минимальным.

Таблица 9.3 – Значения параметров задачи (варианты для задания 1)

Вариант	Вид функции возмущения
1	$F_3(t) = 1 + 0.2\cos(\pi t / 10)$
2	$F_3(t) = 1 + 0.1\cos(\pi t / 15)$
3	$F_3(t) = 1 + 0.2\sin(\pi t / 10)$
4	$F_3(t) = 1 + 0.2\sin(\pi t / 15)$
5	$F_3(t) = 1.2 + 0.1\cos(\pi t / 10)$
6	$F_3(t) = 1.2 + 0.1\sin(\pi t / 10)$
7	$F_3(t) = 1.2 + 0.1\cos(\pi t / 20)$
8	$F_3(t) = 1.2 + 0.1\sin(\pi t / 20)$
9	$F_3(t) = 0.2 + 0.1\sin(\pi t / 10)$
10	$F_3(t) = 0.2 + 0.1\cos(\pi t / 10)$

Задание 2. Произвести расчет для задачи регулирования ур температуры в емкости (п. 9.2).

Все параметры для задачи взять такими, как и в п. 9.2.2, кроме функции температуры входного потока и начальной температуры (табл. 9.3). Записать математическую модель задачи и определить такие значения параметров настройки ПИД-регулятора (коэффициент пропорциональности K_p , время изодрома τ_1 и время предварения τ_2), при которых критерий качества регулирования был бы минимальным.

Таблица 9.3 – Значения параметров задачи (варианты для задания 1)

Вариант	Вид температуры входного потока	Начальная температура
1	$F_3(t) = 20 + 0.2\cos(\pi t / 10)$	20.2
2	$F_3(t) = 30 + 0.1\cos(\pi t / 15)$	30.1
3	$F_3(t) = 25 + 0.2\sin(\pi t / 10)$	25

4	$F_3(t) = 20 + 0.2\sin(\pi t / 15)$	20
5	$F_3(t) = 30 + 0.1\cos(\pi t / 10)$	30.1
6	$F_3(t) = 20 + 0.1\sin(\pi t / 10)$	20
7	$F_3(t) = 25 + 0.1\cos(\pi t / 20)$	25.1
8	$F_3(t) = 15 + 0.1\sin(\pi t / 20)$	15
9	$F_3(t) = 25 + 0.1\sin(\pi t / 10)$	25
10	$F_3(t) = 25 + 0.1\cos(\pi t / 10)$	25.1

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 10 ПЕРВИЧНАЯ ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИИ

Обработка экспериментальных данных является важнейшим этапом проведения любого исследования. От того, насколько качественно и правильно проведена обработка, зависят достоверность полученных результатов и возможность их интерпретации. Существует несколько основных методов обработки экспериментальных данных: статистические, математические, компьютерные.

Статистическая обработка данных – наиболее распространенный подход к анализу результатов эксперимента. Он позволяет выявить закономерности, тенденции и взаимосвязи в больших массивах данных.

К основным статистическим методам относятся:

описательная статистика: расчет средних значений, медиан, дисперсий и других статистических показателей;

проверка статистических гипотез: сравнение выборок с помощью критериев Стьюдента, Фишера и др.;

корреляционный анализ: выявление связей между переменными;

регрессионный анализ: построение моделей зависимостей;

дисперсионный анализ: сравнение средних значений в разных группах.

Статистические методы широко используются при обработке результатов медико-биологических, социологических, психологических и других исследований. –

Математические методы применяются для построения и анализа математических моделей на основе экспериментальных данных. Эти методы позволяют выявить скрытые закономерности исследуемых процессов и явлений.

К математическим методам относятся:

интерполяция и экстраполяция;

сглаживание данных;

построение Трендов;

Фурье- и спектральный анализ;

решение дифференциальных уравнений.

Математические методы часто используются в физических, химических, технических науках для моделирования процессов на основе экспериментальных данных.

Современные компьютерные технологии открывают широкие возможности для обработки больших массивов экспериментальной информации. Использование компьютеров позволяет значительно ускорить процесс обработки и повысить ее точность.

Основные компьютерные методы включают:

сортировку и фильтрацию данных;

визуализацию результатов;

машинное обучение для поиска закономерностей;

моделирование сложных процессов.

Компьютерные технологии незаменимы при работе с большими объемами данных, полученных в ходе многопараметрических физических, биологических, медицинских экспериментов и во многих других видах деятельности.

10.1. Теоретические сведения

Пусть в результате эксперимента получена таблица зависимости $f(x)$:

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

Требуется найти формулу (точную или приближенную), выражающую данную зависимость.

Поскольку данные были получены экспериментально, то подразумевается, что они содержат различного рода ошибки, и использование интерполяционных многочленов только повторит или даже увеличит эти ошибки. Это наводит на мысль о построении такой формулы, которая бы сглаживала экспериментальные данные. Эта кривая носит название *эмпирической*.

Построение эмпирической формулы состоит из двух этапов: подбор общего вида этой формулы и определения наилучших значений для содержащихся в ней параметров. Вид эмпирической формулы может быть произвольным, предпочтение отдается наиболее простым формулам. Формула выбирается из геометрических соображений: точки наносятся на график и по ним определяется вид зависимости.

Будем считать, что вид эмпирической зависимости выбран и ее можно записать в виде

$$y = g(x, a_0, a_1, \dots, a_m),$$

где g – некоторая функция, a_0, a_1, \dots, a_m – параметры, подлежащие определению. Задача состоит в определении таких значений этих параметров, чтобы эмпирическая формула давала в некотором смысле хорошее приближение экспериментальной зависимости. Существует несколько подходов для решения данной задачи (равномерное приближение, метод подобластей, метод выбранных точек). Наиболее популярным является *метод наименьших квадратов (МНК)*.

Суть МНК состоит в следующем: требуется минимизировать выражение

$$S(a_0, a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=0}^n [g(x_i, a_0, a_1, \dots, a_m) - y_i]^2.$$

Очевидно, что параметры можно найти из системы уравнений:

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 0, \frac{\partial S}{\partial a_1} = 0, \dots, \frac{\partial S}{\partial a_m} = 0. \quad (10.1)$$

В качестве эмпирической формулы часто используется многочлен степени m :

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m.$$

Система вида (10.1) для данной эмпирической формулы запишется в следующем виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial a_0} \sum_{i=0}^n [a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 + \dots + a_mx_i^m - y_i]^2 = 0, \\ \frac{\partial}{\partial a_1} \sum_{i=0}^n [a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 + \dots + a_mx_i^m - y_i]^2 = 0, \\ \dots, \\ \frac{\partial}{\partial a_m} \sum_{i=0}^n [a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 + \dots + a_mx_i^m - y_i]^2 = 0. \end{cases}$$

Или, более подробно,

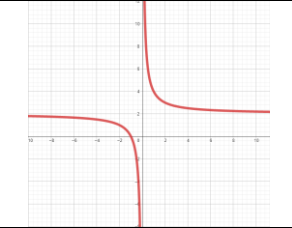
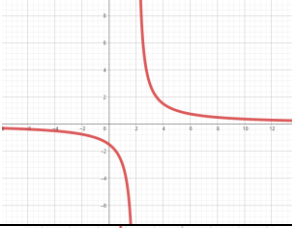
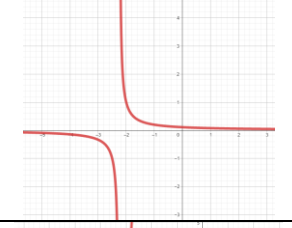
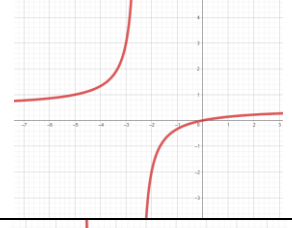


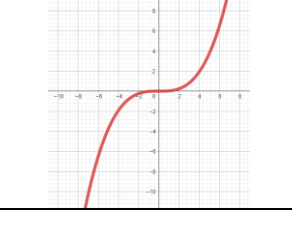
$$\begin{cases} (n+1)a_0 + a_1 \sum_{i=0}^n x_i + a_2 \sum_{i=0}^n x_i^2 + \dots + a_m \sum_{i=0}^n x_i^m = \sum_{i=0}^n y_i, \\ a_0 \sum_{i=0}^n x_i + a_1 \sum_{i=0}^n x_i^2 + a_2 \sum_{i=0}^n x_i^3 + \dots + a_m \sum_{i=0}^n x_i^{m+1} = \sum_{i=0}^n x_i y_i, \\ \dots, \\ a_0 \sum_{i=0}^n x_i^m + a_1 \sum_{i=0}^n x_i^{m+1} + a_2 \sum_{i=0}^n x_i^{m+2} + \dots + a_m \sum_{i=0}^n x_i^{2m} = \sum_{i=0}^n x_i^m y_i. \end{cases} \quad (10.2)$$

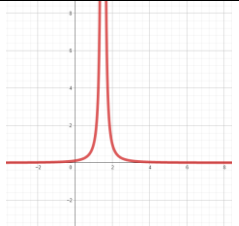

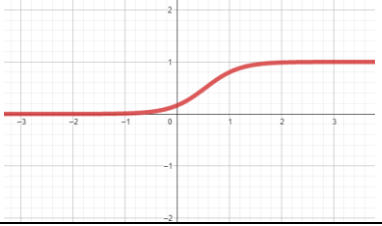
Полученная система является системой $m+1$ линейного уравнения с $m+1$ неизвестными. Из курса линейной алгебры известно, что определитель этой системы отличен от нуля, и, следовательно, существует единственное решение.

Простейшей эмпирической формулой является линейная функция; в этом случае система типа (10.2) состоит из двух уравнений.

Вернемся к подбору эмпирической формулы. В зависимости от характера табличных данных, выбирают отличные от линейной функции семейства двух-параметрических функций. Выбранную эмпирическую функцию линеаризируют, с помощью МНК определяют коэффициенты линейной зависимости и по ним находят параметры искомой зависимости. Основные виды эмпирических формул представлены в таблице 10.1.

Таблица 10.1 – Виды эмпирических формул

Функция	Примерный график (необходимо учитывать знаки коэффициентов)	Линеаризованная форма
$y = \frac{a}{x} + b$		$y = a \frac{1}{x} + b$
$y = \frac{d}{x+c}$		$y = -\frac{1}{c}xy + \frac{d}{c}$
$y = \frac{1}{ax+b}$		$\frac{1}{y} = ax + b$
$y = \frac{x}{ax+b}$		$\frac{1}{y} = a \frac{1}{x} + b$
$y = a \ln x + b$		$y = a \ln x + b$
$y = ce^{ax}$		$\ln y = ax + \ln c$
$y = cx^a$		$\ln y = a \ln x + \ln c$

$y = \frac{1}{(ax+b)^2}$		$\frac{1}{\sqrt{y}} = ax + b$
$y = \frac{cx}{e^{dx}}$		$\ln\left(\frac{y}{x}\right) = -dx + \ln c$
$y = \frac{1}{1 + ce^{ax}}$		$\ln\left(\frac{1}{y} - 1\right) = ax + \ln c$

10.2. Вычислительный пример

Пусть задана таблица значений некоторого эксперимента:

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
x	0.1	0.28	0.51	0.7	0.92	1.09	1.3	1.49	1.72	1.9	2.11
y	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	7.605	5.408	4.386	3.713	3.211	2.809	2.475	2.189	1.939	1.716	1.516

Требуется выбрать вид эмпирической зависимости, соответствующим образом линеаризовать исходные данные, найти параметры зависимости и оценить погрешность полученной эмпирической формулы.

Нанесем точки на координатную плоскость (рис. 10.1, а). По характеру расположения точек сделаем предположение о том, что эмпирическая формула имеет вид

$$y = a \ln x + b.$$

Линеаризируем данную функцию, как показано в таблице 10.1: $Y = AX + B$, где $A = a$, $B = b$ – параметры линейной зависимости, $Y = y$, $X = \ln x$ – новые значения функции и переменной. Рассчитаем значения переменных X и Y и нанесем их на новый график (рис. 10.1, б):

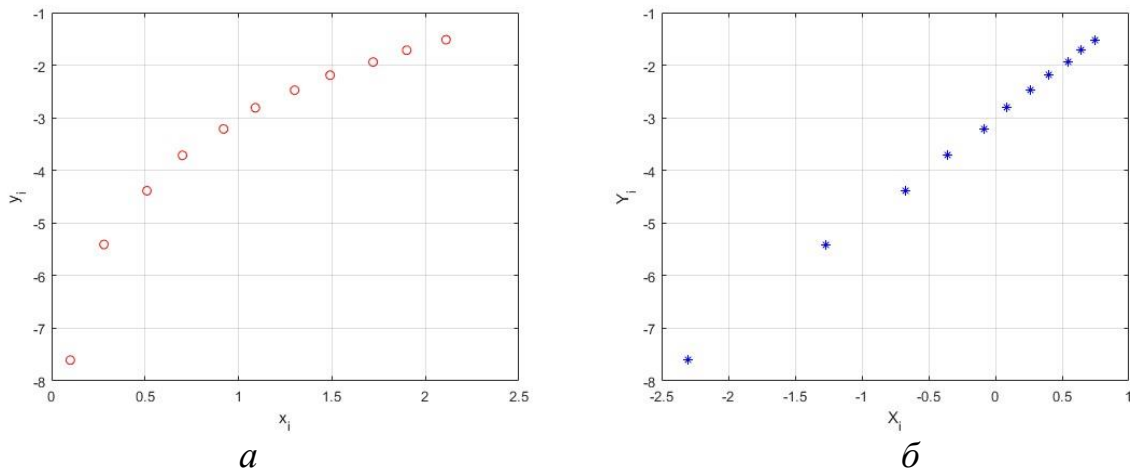


Рисунок 10.1 – Исходные (а) и линеаризованные (б) данные

Из рис. 10.1, б видно, что новые точки выстроились примерно в одну линию, из этого можно сделать вывод о том, что эмпирическая зависимость подобраана верно.

По новым значениям X , Y построим уравнение линейной регрессии $Y = AX + B$. Для этого запишем систему по формулам (10.2):

$$\begin{cases} (n+1) \cdot B + \left(\sum_{i=0}^n X_i \right) \cdot A = \sum_{i=0}^n Y_i, \\ \left(\sum_{i=0}^n X_i \right) \cdot B + \left(\sum_{i=0}^n X_i^2 \right) \cdot A = \sum_{i=0}^n X_i Y_i. \end{cases}$$

Вычислим значения коэффициентов данной системы:

$$\sum_{i=0}^n X_i = -2.0108, \quad \sum_{i=0}^n X_i^2 = 9.0088, \quad \sum_{i=0}^n Y_i = -36.9670, \quad \sum_{i=0}^n X_i Y_i = 23.8914$$

Тем самым получаем систему

$$\begin{cases} 11 \cdot B - 2.0108 \cdot A = -36.9670, \\ -2.0108 \cdot B + 9.0088 \cdot A = 23.8914, \end{cases}$$

решение которой имеем вид $B = -2.9982$, $A = 1.9828$. Тогда находим значения параметров $a = A = 1.9828$, $b = B = -2.9982$ и вид эмпирической зависимости $y = 1.9828 \ln x - 2.9982$. Построим графики сеточной функции и полученной эмпирической зависимости (рис. 10.2).

Рассчитаем среднюю абсолютную погрешность полученной эмпирической зависимости по формуле

$$\Delta = \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^n |y_i - y_i^{emp}| = 0.03,$$

среднюю относительную погрешность – по формуле

$$\delta = \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^n \left| \frac{y_i - y_i^{emp}}{y_i} \right| \cdot 100 = 0.7865\%.$$

Таким образом, получили что погрешность полученной зависимости составляет менее 1%, что является достаточно хорошим результатом.

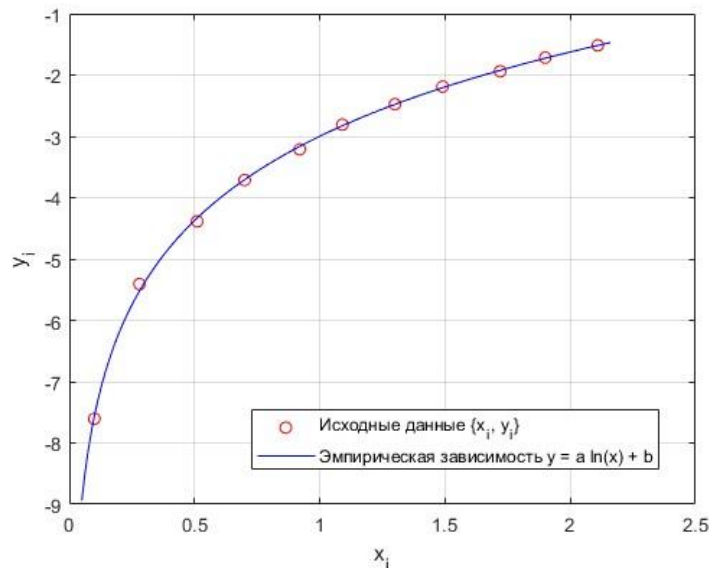


Рисунок 10.2 – Исходные данные и график эмпирической зависимости

Ниже представлена программа для решения поставленной задачи.

```
function LabRab10N
clc; clear all;

%исходные данные
x = [0.1 0.28 0.51 0.7 0.92 1.09 1.3 1.49 1.72 1.9 2.11];
y = [-7.605 -5.408 -4.386 -3.713 -3.211 -2.809 -2.475 -2.189 -
1.939 -1.716 -1.516];

figure(1)
plot(x, y, 'ro')
grid on
xlabel('x_i')
ylabel('y_i')

X = log(x);
Y = y;
figure(2)
plot(X, Y, 'b*')
grid on
xlabel('X_i')
ylabel('Y_i')

%вычисление коэффициентов системы
matrA = zeros(2,2);
```

```

vectB = zeros(2,1);
matrA(1,1) = length(x);
matrA(1,2) = sum(X);
matrA(2,1) = sum(X);
matrA(2,2) = sum(X.^2);
vectB(1,1) = sum(Y);
vectB(2,1) = sum(X.*Y);
matrA = matrA
vectB = vectB

koef = matrA^(-1)*vectB;
B = koef(1)
A = koef(2)

%вычисление значений эмпирической функции
xx = (min(x)-0.05):0.01:(max(x)+0.05);
y_emp = A*log(xx)+B;
figure(3)
plot(x, y, 'ro', xx, y_emp, 'b-')
grid on
xlabel('x_i')
ylabel('y_i')
legend('Исходные данные \{x_i, y_i\}', 'Эмпирическая зависимость y
= a ln(x) + b')

%вычисление погрешности приближения
disp('Средняя абсолютная погрешность эмпирической зависимости,
ед:')
Delta = 1/length(x)*sum(abs(y - (A*log(x)+B)))
disp('Средняя относительная погрешность эмпирической зависимости,
%:')
delta = 1/length(x)*sum(abs((y - (A*log(x)+B))./y))*100

```

Индивидуальные задания для самостоятельной работы

Дана таблица значений некоторого эксперимента (табл. 10.2). Требуется выбрать вид эмпирической зависимости, соответствующим образом линеаризировать исходные данные, найти параметры зависимости и оценить погрешность полученной эмпирической формулы.

Таблица 10.2 – Значения параметров задачи (варианты для задания)

№ варианта									
1		2		3		4		5	
<i>x</i>	<i>y</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>x</i>	<i>y</i>
0	-0.333	1.01	0.2	-0.99	6.65	1.99	4.227	-0.51	0.25
0.07	-0.339	1.11	0.212	-0.91	5.445	2.11	4.032	-0.46	0.237
0.21	-0.345	1.19	0.222	-0.78	4.458	2.18	3.846	-0.41	0.222
0.31	-0.351	1.28	0.232	-0.72	3.65	2.33	3.668	-0.351	0.206
0.39	-0.357	1.42	0.241	-0.61	2.988	2.41	3.498	-0.31	0.187
0.48	-0.364	1.51	0.25	-0.51	2.446	2.52	3.335	-0.246	0.167
0.62	-0.37	1.57	0.258	-0.38	2.003	2.56	3.178	-0.202	0.143
0.72	-0.377	1.72	0.266	-0.33	1.64	2.71	3.027	-0.146	0.115
0.81	-0.385	1.79	0.273	-0.21	1.343	2.78	2.882	-0.11	0.083
0.86	-0.392	1.91	0.279	-0.09	1.099	2.9	2.741	-0.046	0.045
1	-0.4	2	0.286	0	0.9	3	2.606	0	0
1.11	-0.408	2.11	0.292	0.12	0.737	3.11	2.474	0.051	-0.056
1.21	-0.417	2.21	0.29	0.23	0.603	3.22	2.347	0.12	-0.125
1.29	-0.426	2.28	0.303	0.31	0.494	3.33	2.224	0.151	-0.214
1.41	-0.435	2.42	0.308	0.42	0.404	3.41	2.105	0.203	-0.333
1.48	-0.444	2.51	0.313	0.49	0.331	3.49	1.989	0.25	-0.5

№ варианта									
6		7		8		9		10	
<i>x</i>	<i>y</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>x</i>	<i>y</i>
1.22	0.391	1	4	-1.01	0.576	1.02	1.472	0.21	0.427
1.31	0.277	1.052	3.854	-0.952	0.56	1.12	1.331	0.29	0.477
1.38	0.207	1.11	3.714	-0.91	0.552	1.21	1.205	0.42	0.527
1.53	0.16	1.153	3.581	-0.846	0.539	1.303	1.09	0.505	0.576
1.61	0.128	1.19	3.453	-0.82	0.527	1.41	0.986	0.56	0.624
1.67	0.104	1.252	3.331	-0.76	0.514	1.53	0.893	0.71	0.67
1.81	0.087	1.28	3.213	-0.71	0.502	1.61	0.808	0.81	0.712
1.92	0.073	1.353	3.1	-0.66	0.489	1.68	0.731	0.87	0.752
2	0.063	1.41	2.991	-0.59	0.477	1.81	0.661	1	0.787
2.11	0.054	1.47	2.885	-0.51	0.464	1.86	0.598	1.11	0.819
2.21	0.047	1.51	2.784	-0.49	0.452	2	0.541	1.21	0.846
2.33	0.042	1.56	2.685	-0.451	0.44	2.11	0.49	1.31	0.871
2.36	0.037	1.62	2.59	-0.42	0.427	2.22	0.443	1.39	0.892

2.51	0.033	1.652	2.498	-0.34	0.415	2.31	0.401	1.51	0.909
2.63	0.03	1.703	2.408	-0.306	0.403	2.41	0.363	1.62	0.925
2.69	0.027	1.751	2.321	-0.251	0.391	2.48	0.328	1.68	0.937

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 11 НЕДЕТЕРМИНИРОВАННЫЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

11.1. Статистические модели объектов на основе пассивного эксперимента

Эмпирические модели строятся на основе пассивных и активных экспериментов. Эмпирическая модель представляет собой уравнение, описывающее экспериментальные данные.

Суть **пассивного эксперимента**: исследователь собирает некоторый объем экспериментальной информации, т.е. значений параметров (факторов) x_i и выходного параметра y_i , причем происходит это в режиме нормальной эксплуатации объекта. Данные (выборка) берутся с промышленной или с лабораторной установкой.

В общем виде эмпирические модели могут быть представлены в виде приближенных уравнений регрессии:

$$y = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_n, b_0, b_1, \dots, b_m). \quad (11.1)$$

Для получения конкретного вида эмпирической модели (11.1) необходимо выполнить следующее:

- найти конкретный вид функции φ в уравнении (11.1);
- определить значения коэффициентов регрессии b_i ;
- выполнить статистический анализ полученных результатов.

Для получения статистических математических моделей в виде полиномов используют **методы корреляционного и регрессионного анализа**.

11.1.1. Метод корреляционного анализа

Корреляционный анализ основывается на предпосылке о том, что переменные величины y (выходной параметр) и x_i (факторы) являются случайными величинами и между ними может существовать так называемая **корреляционная связь**, при которой с изменением одной величины изменяется распределение другой.

Простой коэффициент корреляции, или **коэффициент парной корреляции**, определяет величину (тесноту) зависимости между двумя переменными (x или y) и определяется по формуле

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) \cdot (y_i - \bar{y})}{(n-1) \cdot S_x \cdot S_y}, \quad (11.2)$$

где $\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$, $\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}$ – среднеарифметические значения переменных x, y ;

n – число опытов;

$$S_x = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}, \quad S_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1}} \quad \text{– среднеквадратические отклонения}$$

случайных величин.

Коэффициент корреляции характеризует степень тесноты линейной зависимости. Если случайные величины x и y связаны **точной линейной функциональной** зависимостью $\hat{y} = b_0 + b_1 \cdot x_1$, то $r_{xy} = \pm 1$, при этом знак коэффициента корреляции соответствует знаку коэффициента b_1 .

В том случае, когда величины x и y связаны **произвольной стохастической зависимостью**, коэффициент корреляции может принимать значение в интервале $-1 < r_{xy} < 1$.

Если $r_{xy} = 0$, то x и y **независимы**, корреляции нет. При $r_{xy} > 0$ существует положительная корреляционная связь между x и y (с ростом x увеличивается y), если $r_{xy} < 0$ – отрицательная (с ростом x уменьшается y).

О наличии или отсутствии корреляции между двумя случайными величинами качественно можно судить по виду поля корреляции (рис. 11.1).

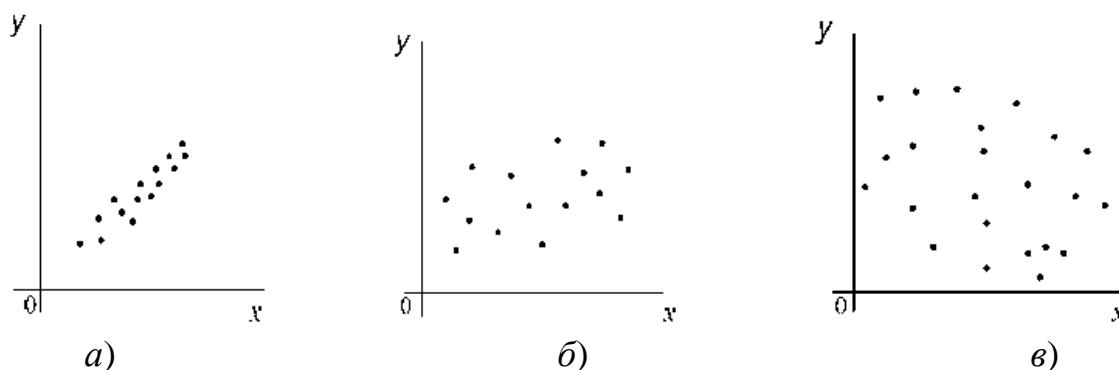


Рисунок 11.1 – Поля корреляции случайной величины (a – сильная положительная корреляция между x и y , $б$ – слабая корреляция, $в$ – корреляции нет)

11.1.2. Метод регрессионного анализа

Регрессионный анализ предполагает (рассматривает) связь между зависимой величиной y и независимыми переменными x_i . Эта связь представляется с помощью математической модели, т. е. уравнения, которое связывает зависимую и независимые переменные.

Для характеристики формы связи пользуются **уравнением регрессии**. Пусть по данной выборке объема n найти уравнение приближенной регрессии и оценить допускаемую при этом ошибку. Эта задача решается методом корреляционного и регрессионного анализов.

Нужно найти $\hat{y} = f(x, b_0, b_1, \dots, b_m)$.

По сгущениям точек можно найти определенную зависимость, т.е. получить вид уравнения регрессии. Если разброс точек значительный, то регрессии не будет. Вид уравнения регрессии зависит от выбираемого метода приближения.

Обычно пользуются **методом наименьших квадратов**, согласно которому коэффициенты эмпирической модели могут быть найдены из условия **минимума** функции

$$F(b_0, b_1, \dots, b_m) = \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i, b_0, b_1, \dots, b_m))^2, \quad (11.3)$$

представляющей сумму квадратов отклонений экспериментальных данных y_i от расчетных значений $f(x_i, b_0, b_1, \dots, b_m)$ выходной величины в экспериментальных точках x_i . В силу вида функции (11.3) **необходимое условие экстремума** (равенство нулю частных производных) является одновременно и **достаточным условием**. При этом, очевидно, что в стационарной точке будет достигаться **минимум**.

При обработке результатов пассивных экспериментов получают линейные и нелинейные эмпирические модели, которые должны достаточно точно описывать всю совокупность опытных данных. Сложность в этом случае заключается в правильном выборе вида модели и определении параметров модели (коэффициентов уравнения).

11.1.2. Линейная регрессионная модель с одной независимой переменной

Рассмотрим случай линейной регрессии от одного параметра. При моделировании химико-технологических процессов (ХТП) во многих случаях связь между входными (x) и выходными (y) параметрами можно аппроксимировать линейным уравнением

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x. \quad (11.4)$$

Для получения вида математической модели необходимо определить коэффициенты уравнения регрессии b_0 и b_1 . Подставляя в (11.3) функцию (11.4), дифференцируя по коэффициентам и приравнявая частные производные к ну-

лю, с учетом $\left(\sum_{i=1}^n 1\right) = n$, получим следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} n \cdot b_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i\right) \cdot b_1 = \sum_{i=1}^n y_i, \\ \left(\sum_{i=1}^n x_i\right) \cdot b_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i^2\right) \cdot b_1 = \sum_{i=1}^n y_i \cdot x_i. \end{cases} \quad (11.5)$$

Далее решаем систему уравнений (11.5) любым известным методом и находим неизвестные коэффициенты b_0 и b_1 .

После вычисления коэффициентов уравнения (11.4) приступают к исследованию полученной математической модели. Такое исследование называется **статистическим (регрессионным) анализом**. Рассмотрим последовательность данного анализа.

11.2. Алгоритм обработки экспериментальных данных

Пусть дана таблица экспериментальных данных (табл. 11.1) однофакторного эксперимента.

Таблица 11.1 – Экспериментальные данные

№ опыта	Значение фактора x_i	Значение параметра y_{iu} в параллельных опытах			
		y_1	y_2	...	y_m
1	x_1	y_{11}	y_{12}	...	y_{1m}
2	x_2	y_{21}	y_{22}	...	y_{2m}
...
n	x_n	y_{n1}	y_{n2}	...	y_{nm}

1. Для оценки тесноты линейной зависимости между факторами рассчитывают коэффициенты парной корреляции r_{xy} по формуле (11.5). **Чем ближе значение r_{xy} к 1, тем вероятнее наличие линейной связи.** Следовательно, зависимость между x и y в определенном диапазоне будет иметь вид

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x.$$

2. Проверка однородности дисперсий (при наличии параллельных опытов).

1) Вычисляется среднее по результатам параллельных опытов (если есть параллельные опыты):

$$\bar{y}_i = \frac{\sum_{u=1}^m y_{iu}}{m}, \quad i = 1, n. \quad (11.6)$$

где m – число параллельных опытов, n – количество опытов в выборке.

2) определяются выборочные дисперсии:

$$S_i^2 = \frac{\sum_{u=1}^m (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{m-1}, \quad i = \overline{1, n}; \quad (11.7)$$

3) составляется отношение (расчетное значение критерия Кохрена)

$$G_{\text{расч}} = \frac{S_{\text{max}}^2}{\sum_{i=1}^n S_i^2}, \quad (11.8)$$

где S_{max}^2 – максимальное значение из всех выборочных дисперсий,

$\sum_{i=1}^n S_i^2$ – сумма всех выборочных дисперсий;

4) проверяется однородность дисперсий по критерию Кохрена (при одинаковом количестве параллельных опытов). Для этого **по таблице распределения Кохрена** при заданном уровне значимости (как правило $\alpha = 0,05$) с вычисленными степенями свободы $f_1 = m - 1$, $f_2 = n$ определяется табличное значение критерия $G_{\text{табл}}$ и сравнивается с расчетным.

Гипотеза об однородности дисперсий подтверждается, если экспериментальное значение критерия Кохрена не превышает табличного значения, т.е. имеет место неравенство $G_{\text{расч}} < G_{\text{табл}}$. Тогда имеющиеся экспериментальные данные можно использовать для обработки, дисперсии можно усреднять;

5) определяется дисперсия воспроизводимости по формуле

$$S_{\text{воспр}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{u=1}^m (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{n \cdot (m-1)} = \frac{\sum_{i=1}^n S_i^2}{n}. \quad (11.9)$$

3. По методу наименьших квадратов определяются коэффициенты аппроксимирующего полинома и производится оценка значимости этих коэффициентов по критерию Стьюдента (t). Для каждого коэффициента в случае линейного полинома рассчитываются дисперсии по следующим формулам:

$$S_{b_0}^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}, \quad S_{b_1}^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2 \cdot n}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}. \quad (11.10)$$

Далее вычисляются расчетные значения критерия:

$$t_{b_i} = \frac{|b_i|}{\sqrt{S_{b_i}^2}}. \quad (11.11)$$

По таблице распределения Стьюдента при заданном уровне значимости (как правило $\alpha = 0,05$) со степенью свободы $f = n \cdot (m - 1)$ определяется табличное значение критерия $t_{\text{табл}}$.

Коэффициент b_i значим, если расчетное значение критерия больше табличного значения, т.е. $t_{b_i} > t_{\text{табл}}$.

В математическую модель следует включать только те коэффициенты, которые являются значимыми.

4. Проверка модели (полученного уравнения) на адекватность осуществляется по критерию Фишера.

Полагают, что уравнение регрессии адекватно описывает исследуемый процесс, если остаточная дисперсия выходной величины y , рассчитанной по уравнению регрессии относительно экспериментальных данных, не превосходит ошибки опыта.

При наличии параллельных опытов и их одинакового числа выражение для остаточной дисперсии имеет вид

$$S_{\text{ост}}^2 = \frac{m \cdot \sum_{i=1}^n (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2}{n - q}, \quad (11.12)$$

где \bar{y}_i – среднее значение выходного параметра по результатам параллельных опытов,

\hat{y}_i – расчетное значение выходного параметра,

q – число членов аппроксимирующего полинома (число коэффициентов регрессии, включая свободный член).

Далее вычисляют расчетное значение критерия

$$F_{\text{расч}} = \frac{S_{\text{ост}}^2}{S_{\text{воспр}}^2}. \quad (11.13)$$

Определяют числа степеней свободы $f_1 = n - q$ для дисперсии адекватности и $f_2 = n \cdot (m - 1)$ для дисперсии воспроизводимости, выбирают уровень значимости и по ним в таблице распределения Фишера находят критическое значение $F_{\text{крит}}$.

Если $F_{\text{расч}} \leq F_{\text{крит}}$, то математическое описание уравнением регрессии считается адекватным (уравнение регрессии адекватно описывает исследуемый объект).

Если математическая модель неадекватна данным эксперимента, то необходимо перейти к более сложной форме уравнения регрессии.

11.3. Пример построения однофакторной регрессионной модели

Требуется определить зависимость растворимости хлорида бария в воде (y) в присутствии хлорида кальция (x) при температуре 70°C . Экспериментальные данные приведены в табл. 11.2. Объем выборки равен $n = 10$. Для каждого значения x проводилось по 3 параллельных опыта.

Все вычисления и построения графиков выполнены в ППП МАТЛАВ. Листинг вычислительной программы представлен в п. 11.4.

Таблица 11.2 – Экспериментальные данные

№ опыта	Концентрация хлорида кальция (x), %	Растворимость хлорида бария в воде (y), %		
		y_1	y_2	y_3
1	0	32	29	31
2	3	30	27	25
3	5	25	27	24
4	7	22	20	23
5	10	17	15	18
6	11	15	14	16
7	13	13	12	9
8	15	11	10	8
9	19	7	9	7
10	20	5	4	3

Для определения вида функциональной зависимости для каждой серии параллельных опытов вычислим по формуле (11.6) средние значения \bar{y}_i и построим зависимость (x_i, \bar{y}_i) на графике (рис. 11.1). Полученные данные занесем в табл. 11.3.

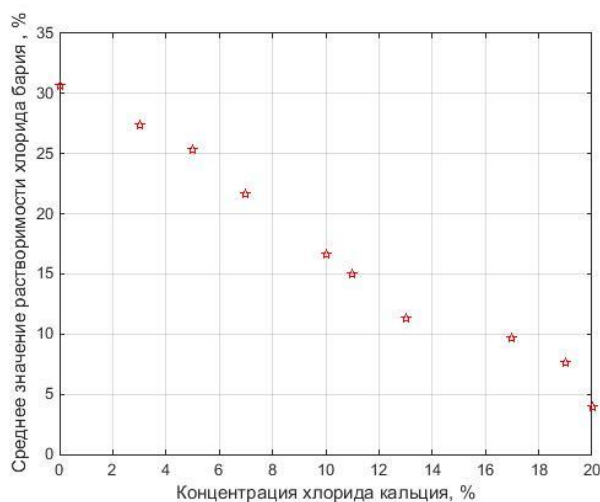


Рисунок 11.1 – График зависимости (x_i, \bar{y}_i)

Таблица 11.3 – Обработка экспериментальных данных

№ опыта	x	y_1	y_2	y_3	Среднее \bar{y}_i	Построчные дисперсии S_i^2
1	0	32	29	31	30,6667	2,3333
2	3	30	27	25	27,3333	6,3333
3	5	25	27	24	25,3333	2,3333
4	7	22	20	23	21,6667	2,3333
5	10	17	15	18	16,6667	2,3333
6	11	15	14	16	15,0000	1,0000
7	13	13	12	9	11,3333	4,3333
8	15	11	10	8	9,6667	2,3333
9	19	7	9	7	7,6667	1,3333
10	20	5	4	3	4,0000	1,0000
Сумма	105				169,3333	25,6667

11.3.1. Корреляционный анализ

По виду зависимости на рис. 11.1 можно сделать предположение о наличии линейной связи между фактором x и параметром y . Следовательно, для определения величины (тесноты) зависимости между двумя переменными (x и \bar{y}) по формуле (11.1) вычислим коэффициент парной корреляции. Для этого найдем:

– среднее значение фактора $\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} = \frac{105}{10} = 10,5;$

– среднее значение параметра $\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n \bar{y}_i}{n} = \frac{169,3333}{10} \approx 16,9333;$

– дисперсию и среднеквадратическое отклонение фактора

$$S_x^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1} \approx 46,7222, \quad S_x = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} \approx 6,8354;$$

– дисперсию и среднеквадратическое отклонение параметра

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1} \approx 81,2049, \quad S_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1}} \approx 9,0114.$$

Далее вычисляем коэффициент корреляции

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) \cdot (y_i - \bar{y})}{(n-1) \cdot S_x \cdot S_y} \approx -0,9897.$$

Поскольку модуль $|r_{xy}| = 0,9897$ очень близок к единице, то между x и \bar{y} существует сильная корреляционная зависимость. Отрицательный знак коэффициента r_{xy} говорит об отрицательной корреляционной зависимости.

11.3.2. Дисперсионный анализ: проверка однородности дисперсий

Для проверки однородности дисперсий по критерию Кохрена вычислим построчные выборочные дисперсии по формуле (11.7) и занесем результаты в последний столбец табл. 11.3. Составим отношение (расчетное значение критерия Кохрена) по формуле (11.8)

$$G_{\text{расч}} = \frac{S_{\text{max}}^2}{\sum_{i=1}^n S_i^2} = \frac{6,3333}{25,6667} \approx 0,2468.$$

Далее по таблице распределения Кохрена при заданном уровне значимости $\alpha = 0,05$ со степенями свободы $f_1 = m - 1 = 3 - 1 = 2$, $f_2 = n = 10$ находим табличное значение критерия $G_{\text{табл}} = 0,4450$ и сравним его с расчетным.

Поскольку экспериментальное (расчетное) значение критерия Кохрена не превышает табличного значения, т.е. имеет место неравенство $G_{\text{расч}} < G_{\text{табл}}$, то гипотеза об однородности дисперсий подтверждается.

Следовательно, имеющиеся экспериментальные данные можно использовать для обработки, а дисперсии можно усреднять. Вычислим дисперсию воспроизводимости по формуле (11.9):

$$S_{\text{воспр}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n S_i^2}{n} = \frac{25,6667}{10} \approx 2,5667.$$

11.3.3. Построение уравнения регрессии и проверка значимости коэффициентов

Для нахождения коэффициентов уравнения регрессии b_0 и b_1 составим систему (11.5), получим:

$$\begin{cases} 10 \cdot b_0 + 105 \cdot b_1 = 169,3, \\ 105 \cdot b_0 + 1523 \cdot b_1 = 1229,3. \end{cases}$$

Далее находим решение данной системы $b_0 = 30,6667$ и $b_1 = -1,3048$. Тем самым, получаем уравнений регрессии следующего вида:

$$\hat{y} = 30,6667 - 1,3048 \cdot x. \quad (11.14)$$

Далее следует провести оценку значимости этих коэффициентов по **критерию Стьюдента**. Для каждого коэффициента рассчитываем дисперсии по формулам (11.10):

$$S_{b_0}^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i\right)^2} \approx 0,0641, \quad S_{b_1}^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2 \cdot n}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i\right)^2} \approx 0,0061.$$

Вычисляем расчетные значения критерия по формулам (11.11):

$$t_{b_0} = \frac{|b_0|}{\sqrt{S_{b_0}^2}} \approx 121,0049, \quad t_{b_1} = \frac{|b_1|}{\sqrt{S_{b_1}^2}} \approx 16,7009.$$

По **таблице распределения Стьюдента** при заданном уровне значимости $\alpha = 0,05$ со степенью свободы $f = n \cdot (m - 1) = 10 \cdot (3 - 1) = 20$ определяем табличное значение критерия $t_{\text{табл}} = 2,086$.

Поскольку для всех коэффициентов расчетные значения критериев больше табличного значения, т.е. $t_{b_i} > t_{\text{табл}}$, то все коэффициенты b_i являются значимыми.

Таким образом, окончательно получаем, что уравнение регрессии примет вид (11.14). Проверим адекватность построенной модели.

11.3.4. Проверка адекватности уравнения регрессии

Для проверки модели (полученного уравнения регрессии) на адекватность по **критерию Фишера** вычислим остаточную дисперсию (дисперсию адекватности) по формуле (11.12):

$$S_{\text{ост}}^2 = \frac{m \cdot \sum_{i=1}^n (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2}{n - q} = \frac{3 \cdot 14,9464}{10 - 2} \approx 5,6049.$$

Далее по формуле (11.13) вычисляем расчетное значение критерия

$$F_{\text{расч}} = \frac{S_{\text{ост}}^2}{S_{\text{воспр}}^2} = \frac{5,6049}{2,5667} \approx 2,1837.$$

В **таблице распределения Фишера** при уровне значимости $\alpha = 0,05$ и при степенях свободы $f_1 = n - q = 10 - 2 = 8$ и $f_2 = n \cdot (m - 1) = 10 \cdot (3 - 1) = 20$ находим критическое значение $F_{\text{крит}} = 2,45$.

Поскольку $F_{\text{расч}} \leq F_{\text{крит}}$, то математическое описание уравнением регрессии считается адекватным (уравнение регрессии адекватно описывает исследуемый объект).

Построим график уравнения регрессии (рис. 11.2).

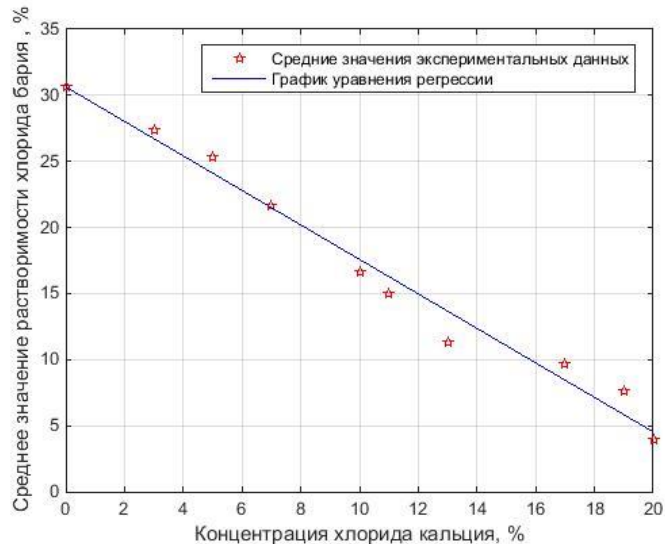


Рисунок 11.2 – Экспериментальные данные и график уравнения регрессии

11.4. Листинг программы для вычислительного примера

```
function LabRab7N1
clc
clear
n=10; %число экспериментов
%входные данные
x=[0 3 5 7 10 11 13 17 19 20]
sum_x=sum(x)
Y=[32 29 31;
 30 27 25;
 25 27 24;
 22 20 23;
 17 15 18;
 15 14 16;
 13 12 9;
 11 10 8;
 7 9 7;
 5 4 3]
p=size(Y);
disp('Число параллельных опытов')
m=p(2)
disp('Средние значения откликов')
Ymi=sum(Y,2)/m
sum_Ymi=sum(Ymi)
figure(1)
plot(x, Ymi, 'rp')
grid on
xlabel('Концентрация хлорида кальция, %')
ylabel('Среднее значение растворимости хлорида бария, %')
%-----
disp('Среднее значение фактора')
xmi=sum(x)/n
disp('Среднее значение параметра')
Ymi_mi=sum_Ymi/n
```

```

disp('Дисперсия фактора')
S2x=sum((x-xmi).^2)/(n-1)
disp('Дисперсия параметра')
S2y=sum((Ymi-Ymi_mi).^2)/(n-1)
disp('Среднеквадратическое отклонение фактора')
Sx=sqrt(S2x)
disp('Среднеквадратическое отклонение параметра')
Sy=sqrt(S2y)
disp('Коэффициент корреляции')
rxy=sum((x-xmi)*(Ymi-Ymi_mi))/(n-1)/Sx/Sy
%-----
disp('Построчные выборочные дисперсии')
for i=1:n
    S2yi(i,1)=sum((Y(i,:)-Ymi(i)).^2)/(m-1);
end;
S2yi
disp('Проверка однородности по критерию Кохрена')
disp('Расчетное значение коэффициента Кохрена')
S2yi_max=max(S2yi)
sum_S2yi=sum(S2yi)
G_rasch=S2yi_max/sum_S2yi
disp('Уровень значимости')
alpha=0.05
disp('Число степеней свободы')
f1=m-1
f2=n
disp('Табличное значение коэффициента Кохрена')
G_t=0.445
if G_rasch<G_t
    disp('Построчные дисперсии однородны')
else disp('Построчные дисперсии неоднородны')
end;
disp('Дисперсия воспроизводимости')
S2_vospr=sum(S2yi)/n
%-----
%матрица и вектор правых частей для определения коэффициентов ре-
грессии
A=[n sum(x);
    sum(x) sum(x.^2)]
B=[sum(Ymi); x*Ymi]
disp('Коэффициенты регрессии')
b=A^-1*B;
b0=b(1)
b1=b(2)
disp('Проверка значимости коэффициентов регрессии')
disp('Дисперсии коэффициентов регрессии')
S2b0=S2_vospr*sum(x)/(n*sum(x.^2)-(sum(x))^2)
S2b1=S2_vospr*n/(n*sum(x.^2)-(sum(x))^2)
disp('Расчетные значения коэффициента Стьюдента')
tb0=abs(b0)/sqrt(S2b0)
tb1=abs(b1)/sqrt(S2b1)
disp('Уровень значимости')
alpha=0.05

```

```

disp('Число степеней свободы')
f=n*(m-1)
disp('Табличное значение коэффициента Стьюдента')
t_t=2.086
if tb0<t_t
    disp('Коэффициент b0 не значим')
else disp('Коэффициент b0 значим')
end;
if tb1<t_t
    disp('Коэффициент b1 не значим')
else disp('Коэффициент b1 значим')
end;
disp('Уравнение регрессии')
y_regr=inline('b0+b1*x')
%-----
disp('Проверка адекватности модели')
disp('Значение уравнения регрессии')
for i=1:n
    yy(i, 1)=y_regr(b0, b1, x(i));
end;
yy
disp('Сумма квадратов отклонений')
for i=1:n
    S2ad(i,1)=(yy(i, 1)-Ymi(i,1))^2;
end;
Sum_kv_otkl=sum(S2ad)
q=2 %число коэффициентов модели
disp('Остаточная дисперсия (дисперсия адекватности)')
S2ad=m*sum(S2ad)/(n-q)
disp('Расчетное значение коэффициента Фишера')
F=S2ad/S2_vospr
disp('Уровень значимости')
alpha=0.05
disp('Число степеней свободы')
f1=n-q
f2=n*(m-1)
disp('Табличное значение коэффициента Фишера')
F_t=2.45
if F<F_t
    disp('Модель адекватна')
else disp('Модель неадекватна')
end;
%-----
figure(2)
xx=min(x):0.01:max(x);
YY=y_regr(b0, b1, xx);
plot(x, Ymi, 'rp', xx, YY, 'b')
grid on
xlabel('Концентрация хлорида кальция, %')
ylabel('Среднее значение растворимости хлорида бария , %')
legend('Средние значения экспериментальных данных', 'График урав-
нения регрессии')

```

Индивидуальные задания для самостоятельной работы

Задание. В экспериментальной таблице (табл. 11.4) представлены экспериментальные данные зависимости удельного веса водяного пара во влажном воздухе (y , кг_{воды}/кг_{сух.возд}) при относительной влажности 30% от температуры (x , °C). Объем выборки равен $n = 15$. Для каждого значения x проводились 2 параллельных опыта.

Примечание. Значения функции отклика следует определить с использованием встроенной функции MATLAB `rand`, которая формирует случайное число, подчиняющееся равномерному закону распределения в интервале (0, 1). Для каждого опыта задать значение отклика согласно указанной зависимости (для каждого повторного опыта значение генерировать отдельно).

Требуется.

1. Провести корреляционный анализ полученных данных.
2. Провести регрессионный анализ для проверки однородности дисперсий.
3. Найти коэффициенты уравнения линейной регрессии и оценить значимость коэффициентов.
4. Построить уравнение регрессии, включив в него только значимые коэффициенты.
5. Проверить адекватность модели оригиналу.

Таблица 11.4 – Экспериментальные данные

№ опыта	Температура (x , °C)	Удельный вес водяного пара во влажном воздухе (y , кг _{воды} /кг _{сух.возд}) (повторные опыты $m = 1, 2$)
1	4	$1+1 \cdot \text{rand}$
2	8	$3+3 \cdot \text{rand}$
3	12	$9+3 \cdot \text{rand}$
4	19	$16+4 \cdot \text{rand}$
5	25	$22+4 \cdot \text{rand}$
6	29	$26+4 \cdot \text{rand}$
7	36	$36+4 \cdot \text{rand}$
8	43	$44+5 \cdot \text{rand}$
9	47	$46+6 \cdot \text{rand}$
10	51	$50+6 \cdot \text{rand}$
11	59	$59+6 \cdot \text{rand}$
12	65	$64+7 \cdot \text{rand}$
13	69	$70+7 \cdot \text{rand}$
14	73	$76+8 \cdot \text{rand}$
15	80	$84+8 \cdot \text{rand}$

СПИСОК ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Беккер, В.Ф. Моделирование химико-технологических объектов управления: Учебн. Пособие – В.Ф. Беккер. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: РИОР: ИНФРА-М, 2014. – 142 с.
- 2 Боровков, А.А. Математическая статистика: учебник / А.А. Боровков. – 4-е изд., стер. – Санкт-Петербург: Лань, 2010. – 704 с. – Лань: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/3810>
- 3 Волков, Е.А. Численные методы: учебник / Е.А. Волков. – 5-е изд. – Санкт-Петербург: Лань, 2008. – 256 с. – Лань: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/54>
- 4 Губарь, Ю.В. Введение в математическое моделирование: учебное пособие / Ю.В. Губарь. – 4-е изд. – Москва: Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), Ай Пи Ар Медиа, 2025. – 178 с. – Текст: электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART: [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/146328.html>
- 5 Гумеров, А.М. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие / А.М. Гумеров. – Санкт-Петербург: Лань, 2014. – 176 с. – Текст: электронный // Электронно-библиотечная система «Лань». – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/41014>
- 6 Закгейм, А.Ю. Общая химическая технология. Введение в моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.Ю. Закгейм. – Электрон. текстовые данные. – М.: Логос, 2014. – 304 с. – Режим доступа: <https://www.iprbookshop.ru/66419.html>
- 7 Заусаев, А.Ф. Дискретные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений: учебное пособие / А.Ф. Заусаев, М.А. Романюк. – Самара: Самарский государственный технический университет, ЭБС АСВ, 2018. – 116 с. – Электронно-библиотечная система IPR BOOKS. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/90484.html>
- 8 Звонарев, С.В. Основы математического моделирования: учебное пособие / С.В. Звонарев. – Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2019. – 112 с.
- 9 Киреев, В.И. Численные методы в примерах и задачах: учебное пособие / В.И. Киреев, А.В. Пантелеев. – 4-е изд., испр. – Санкт-Петербург: Лань, 2022. – 448 с. – Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/212063>
- 10 Клинов, А.В. Лабораторный практикум по математическому моделированию химико-технологических процессов: учебное пособие / А.В. Кли-

нов, А. В. Малыгин. – Казань: КНИТУ, 2011. – 99 с. – Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/13285>

11 Клинов, А.В. Математическое моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.В. Клинов, А.Г. Мухаметзянова. – Электрон. текстовые данные. – Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2011. – 99 с. – Режим доступа: <https://www.iprbookshop.ru/63719.html>

12 Липкин, М.С. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учеб.-метод. пособие для практических занятий студентов / М.С. Липкин, В.М. Липкин В.М. – Новочеркасск: ЮРГПУ (НПИ), 2016. – 68 с.

13 Математические методы решения химических задач: учеб. пособие для студ. учреждений высш. проф. образования/ А.И. Козко, Е.С. Соболева, А.В. Субботин и др.; под ред. А. И. Козко. – М.: Издательский центр «Академия», 2013. – 368 с.

14 Мойзес, Б.Б. Статистические методы контроля качества и обработка экспериментальных данных: учебное пособие / Б.Б. Мойзес, И.В. Плотникова, Л.А. Редько; под редакцией Б.И. Капранова. – 2-е изд. – Москва: Ай Пи Ар Медиа, 2024. – 118 с. – Текст: электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART: [сайт]. – URL: <https://www.iprbookshop.ru/147299.html>

15 Островский, А.С. Моделирование химико-технологических процессов как объектов управления: учебно-исследовательский практикум: учеб.-метод. пособие / А.С. Островский, А.Г. Шумихин. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2008. – 47 с.

16 Саблин, А.В. Моделирование химико-технологических процессов / А.В. Саблин. – Новотроицк. НФ НИТУ «МИСиС». – 2016. –181 с.

17 Самойлов, Н.А. Примеры и задачи по курсу «Математическое моделирование химико-технологических процессов»: учебное пособие / Н.А. Самойлов. – Санкт-Петербург: Лань, 2013. – 176 с. – Текст: электронный // Электронно-библиотечная система «Лань». – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/37359>

18 Тарасенко, А.В. Дифференциальные уравнения с частными производными: учебно-методическое пособие / А. В. Тарасенко, И. П. Егорова, В. Г. Гумеров. — Самара: Самарский государственный технический университет, ЭБС АСВ, 2018. – 98 с. – Электронно-библиотечная система IPR BOOKS. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/90486.html>

19 Ушева, Н.В. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие / Н.В. Ушева, О.Е. Мойзес, О.Е.

Митянина, Е.А. Кузьменко; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 135 с.

20 Федосеев, А.М. Математическое моделирование кинетики сложных химических реакций: учеб. пособие. Ч. I / А.М. Федосеев, В.Н. Кетиков. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2010. – 223 с.

21 Холоднов, В.А. Системный анализ и принятие решений. Математическое моделирование гидродинамической структуры однофазных потоков в химических реакторах: учебное пособие / В.А. Холоднов, В.П. Решетиловский, Е.С. Боровинская, В.П. Андреева. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2009. – 35 с.

22 Черкашина Н.И. Системы управления химико-технологическими процессами: учеб.- метод. пособие по изучению дисциплины для студентов очного обучения / Н.И. Черкашина. – Севастополь: СевГУ, 2019. - 102 с.

23 Щербакова, Ю.В. Дифференциальные уравнения: учебное пособие / Ю.В. Щербакова. – 2-е изд. – Саратов: Научная книга, 2019. – 159 с. – Электронно-библиотечная система IPR BOOKS. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/81007.html>

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
Лабораторная работа № 1. Основные приемы работы с пакетом MATLAB	7
Лабораторная работа № 2. Решение уравнения с одним неизвестным для задач химической технологии	36
Лабораторная работа № 3. Решение задач переноса методом явных разностных схем	53
Лабораторная работа № 4. Математическое моделирование гидродинамической структуры однофазных потоков	64
Лабораторная работа № 5. Моделирование температурного поля теплообменника «труба в трубе»	79
Лабораторная работа № 6. Моделирование кинетики химических реакций	93
Лабораторная работа № 7. Математическое моделирование химических реакторов	108
Лабораторная работа № 8. Решение систем уравнений в задачах химической технологии	117
Лабораторная работа № 9. Моделирование химико-технологических объектов управления	128
Лабораторная работа № 10. Первичная обработка экспериментальной информации	143
Лабораторная работа № 11. Недетерминированный подход к моделированию. Экспериментально-статистические модели	153
Список дополнительной литературы	167

Надежда Николаевна Максимова,
доцент, и.о. заведующего кафедрой
математического анализа и моделирования,
кандидат физико-математических наук

Моделирование в химии. Учебно-методическое пособие

Изд-во АмГУ. Подписано к печати __.__.2025. Формат 60x84/16.

Усл. печ. л. 6,40.

Тираж __. Заказ __.

Отпечатано в типографии АмГУ.