

СХІДНОЄВРОПЕЙСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ЛЕСІ УКРАЇНКИ
КАФЕДРА АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ ТА ЕКОТЕХНОЛОГІЙ

О.О. ОНИЩУК, Ж. О. КОРМОШ

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

конспект лекцій

Луцьк – 2016

УДК 66.013:543(072)

ББК 35я73-9

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

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

Лишук В.В. – кандидат технічних наук, доцент кафедри фізики і електротехніки ЛНТУ.

ОНИЩУК О.О., КОРМОШ Ж. О.

К-68. Математичне моделювання та застосування ЕОМ в хімічній технології. Конспект лекцій / Онищук Оксана Олександрівна, Кормош Жолт Олександрович - Луцьк : Вежа-Друк, 2016 - 76с.

Анотація: У конспекті лекцій «Математичне моделювання та застосування ЕОМ в хімічній технології» представлено ієрархію та класифікацію хіміко-технологічної системи як об'єкту моделювання, основи математичного моделювання процесів та апаратів хімічної технології, методологію побудови аналітичних та емпіричних моделей, розрахунки матеріальних та теплових балансів хімічних виробництв, задачі моделювання та оптимізації хіміко-технологічних процесів, регресійні моделі, описи хімічних процесів на основі відомих залежностей.

Рекомендовано студентам хімічного факультету за напрямом підготовки „Хімічна технологія”

УДК 66.013:543(072)

ББК 35я73-9

© Онищук О.О., Кормош Ж.О., 2016

© Східноєвропейський національний університет
імені Лесі Українки, 2016

ЗМІСТ

<u>ВСТУП</u>	4
<u>Основні поняття. Моделі, методи моделювання і області застосування.</u>	
Тема 1. <u>Моделі, методи моделювання й області їх застосування.</u> Види подібності, поняття моделі й моделювання. Фізичне моделювання.....	5
Тема 2. <u>Етапи математичного моделювання.</u> Поняття системи, об'єкта і змінних. Класифікація об'єктів і процесів технології. Класифікація об'єктів за єдністю математичного опису. Класифікація об'єктів і моделей за єдністю природи процесів. Моделі статичної й динаміки. Лінійні й нелінійні об'єкти й моделі, лінеаризація. Стаціонарні й не стаціонарні моделі та об'єкти. Детерміновані і стохастичні об'єкти та моделі. Об'єкти й моделі із зосередженими та розподіленими параметрами.....	10
Тема 3. <u>Етапи побудови математичних моделей.</u> Змістовна постановка задачі. Концептуальна (формалізована) постановка задачі моделювання. Математична постановка задачі. Вибір методу розв'язання задачі і його обґрунтування. Реалізація математичної моделі у вигляді програми на ЕОМ. Перевірка адекватності моделі. Практичне використання побудованої моделі й аналіз результатів.....	17
Тема 4. <u>Побудова математичних моделей аналітичним методом.</u> Методологія застосування аналітичного методу. Моделі гідродинаміки (математичний опис процесів переміщення речовини. Побудова математичних моделей аналітичним методом. Експериментальний метод побудови математичних моделей. Експериментально-аналітичний метод отримання математичних моделей.....	24
<u>Модель ідеального перемішування. Математичний опис процесів хімічного перетворення. Математичні моделі хімічних реакторів.</u> Тема 5. <u>Модель ідеального перемішування.</u> Модель ідеального перемішування. Характеристика моделі. Модель ідеального витіснення. Характеристика моделі. Диференціальне рівняння моделі. Розв'язання диференціального рівняння моделі. Комбіновані моделі. Модель інтенсивного витіснення.....	30
Тема 6. <u>Дифузійна модель. Коміркова модель.</u> Характеристика моделі. Диференціальне рівняння однопараметричної дифузійної моделі. Розв'язання диференціального рівняння моделі. Застосування дифузійної моделі. Коміркова модель. Коміркова модель. Характеристика моделі. Математичний опис коміркової моделі. Розв'язання системи рівнянь коміркової моделі.....	38
Тема 7. <u>Математичний опис процесів хімічного перетворення.</u> Основні поняття хімічної кінетики. Кінетичні рівняння. Механізм хімічної реакції. Прості і складні реакції..	45
<u>Кінетика масообмінних процесів. Експериментальний метод побудови математичних моделей.</u> Тема 8. <u>Кінетика масообмінних процесів. Математичні моделі хімічних реакторів.</u> Математичні моделі реакторів ідеального перемішування. Математичні моделі реакторів ідеального витіснення. Математичні моделі найпростіших типів теплообмінних апаратів.....	52
Тема 9. <u>Експериментальний метод побудови математичних моделей.</u> Підготовка й проведення експерименту. Попередня обробка даних. Екстраполяція. Інтерполяція. Згладжування експериментальних даних. Оцінка наявності й сили зв'язку між досліджуваними величинами. Основні поняття кореляційного аналізу. Коефіцієнти коваріації й кореляції. Вибірковий коефіцієнт лінійної кореляції Пірсона. Перевірка статистичної гіпотези про значущість вибіркового коефіцієнта лінійної кореляції Пірсона.....	60
Тема 10. <u>Підбір виду функціональної залежності.</u> Визначення параметрів залежності. Наближення функцій за допомогою нейронних мереж. Визначення адекватності математичної моделі.....	68
Список літератури.....	75

ВСТУП

Математичне моделювання — метод дослідження процесів або явищ шляхом створення їхніх математичних моделей і дослідження цих моделей.

В основу методу покладено ідентичність форми рівнянь і однозначність співвідношень між змінними в рівняннях оригіналу і моделі, тобто, їхню аналогію. Математичні моделі досліджуються, як правило, із допомогою аналогових обчислювальних машин, цифрових обчислювальних машин, комп'ютерів.

Застосування методу математичного моделювання в хімічній технології дасть змогу роботи розрахунки процесів і апаратів за допомогою ЕОМ, а також створювати їх моделі, використовуючи сучасні комп'ютерні програми. Математичне моделювання дозволяє замінити реальний об'єкт його моделлю і потім вивчати останню.

Комп'ютерна модель — це програмна реалізація математичної моделі, доповнена різними службовими програмами. Комп'ютерна модель має дві складові — програмну і апаратну. Програмна складова так само є абстрактною знаковою моделлю. Це лише інша форма абстрактної моделі, яка, проте, може інтерпретуватися не лише математиками і програмістами, але і технічним пристроєм — процесором комп'ютера.

У конспекті лекцій представлені основи математичного моделювання хіміко-технологічної системи, описані головні поняття і терміни. Дано характеристику фізичному та експериментально-статистичному моделювання хіміко-технологічних процесів.

Тема 1. Моделі, методи моделювання й області їх застосування.

Види подібності, поняття моделі й моделювання.

Фізичне моделювання.

Математичне моделювання.

Математичне моделювання є одним із основних сучасних методів дослідження. Загалом під моделюванням розуміється процес дослідження реальної системи, який включає побудову моделі, її дослідження та перенесення одержаних результатів на досліджувану систему. Модель можна визначити як об'єкт, що в деяких відношеннях збігається з прототипом і є засобом опису, пояснення та/або прогнозування його поведінки. Під математичною моделлю реальної системи (процесу) розуміється сукупність співвідношень (формул, рівнянь, нерівностей, логічних умов, операторів тощо), які визначають характеристики станів системи залежно від її параметрів, зовнішніх умов (вхідних сигналів, впливів), початкових умов та часу. Загалом, за визначенням В.М. Глушкова, математична модель – це множина символічних математичних об'єктів і співвідношень між ними. За М.М. Амосовим, математична модель – це система, що відображає іншу систему.

Типовими завданнями моделювання можуть бути пошук оптимальних чи наближених до оптимальних рішень; визначення властивостей системи; встановлення взаємозв'язків між її елементами або характеристиками, а також між характеристиками системи та зовнішнього середовища тощо.

Складні системи можна охарактеризувати функціями, що вони виконують (процесами, які відбуваються в них), структурою, а також поведінкою в часі. Відповідно розрізняють функціональні, структурні, інформаційні та поведінкові (повдвійні) моделі систем. Функціональна модель системи описує сукупність функцій, що їх виконує система (сукупність процесів, які відбуваються в ній), характеризує склад та взаємозв'язки її функціональних підсистем. Структурна модель відображає побудову системи; інформаційна – відношення між елементами системи, а також між системою і зовнішнім середовищем. Остання будується у вигляді структур даних, що характеризують елементи системи, зовнішнє середовище та взаємозв'язки між ними. Інформаційна модель також може мати вигляд рівнянь регресії або кореляційних рівнянь, які відображають зв'язок між рядами даних, статистичного опису сукупності даних, порівняльних статистичних характеристик наборів даних тощо. Поведінкова модель відображає динаміку функціонування системи, зміни її станів, події, що відбуваються в ній, тощо.

Існує багато різних класифікацій математичних моделей. Зокрема, виділяють моделі статичні та динамічні, диференціальні й інтегральні, детерміністичні та стохастичні, лінійні та нелінійні, геометричні, топологічні, імітаційні, оптимізаційні тощо. Найбільш поширеними формами запису математичних моделей є інваріантна, аналітична, алгоритмічна та схемна (графічна). В інваріантній формі моделі записують за допомогою алгебраїчних, диференціальних, інтегральних та інших рівнянь і нерівностей, без урахування методу подальшого аналізу моделі. Аналітична форма – це запис моделі у вигляді аналітичного розв'язку вихідних рівнянь інваріантної моделі. Алгоритмічна форма є записом алгоритму дослідження вихідної моделі, тобто послідовності операцій, що здійснюються при такому дослідженні. Моделі, записані у графічній формі – це геометричні та топологічні об'єкти, графи, схеми, графіки тощо.

З погляду практичного використання важливою є класифікація моделей за методом їх подальшого аналізу. При цьому виділяють моделі, які досліджують аналітично, чисельно та за допомогою апаратного моделювання (аналогових обчислювальних машин).

Основні властивості математичних моделей

До основних властивостей математичних моделей належать їх скінченність, спрощеність, наближеність, повнота, адекватність та істинність. Скінченність моделі означає, що вона відображає лише деякі з характеристик та відношень, властивих оригіналу. Її

зумовлено обмеженістю ресурсів часу, пам'яті ЕОМ тощо, потрібних для розробки й аналізу моделі.

Спрощеність моделі означає, що в деяких відношеннях вона має бути простішою за оригінал. У цьому полягає сенс моделювання, оскільки у противному разі доцільніше досліджувати оригінал. Спрощення досягають шляхом нехтування другорядними, несуттєвими для досягнення мети моделювання властивостями оригіналу. При побудові моделей використовують принцип руху від простого до складного. Тобто, спочатку будують найпростішу можливу модель досліджуваної системи (як правило, такі моделі можна знайти у фаховій літературі). Потім перевіряють її адекватність. Якщо простіша модель неадекватна, то визначають, чим зумовлено її неадекватність. Зазвичай причинами є нехтування у змістовній моделі деякими факторами, що істотно впливають на досліджувану систему, або надмірна спрощеність математичної моделі.

Наближеність моделі означає, що вона лише наближено відображає досліджувані характеристики та відношення. Типовими прикладами наближень, які використовують при математичному моделюванні, є заміна дискретних систем неперервними та навпаки, задання обмежень на точність чисельних розрахунків, заміна нелінійних залежностей лінійними тощо. Ступінь наближеності моделі визначається компромісом між необхідністю відображення всіх суттєвих властивостей оригіналу й обмеженістю часу, пам'яті ЕОМ та інших ресурсів.

Зі скінченності та наближеності моделі випливає, що вона відображає оригінал неповно. Ступінь повноти моделі визначається метою та завданнями моделювання.

Адекватність моделі характеризує можливість реалізації мети моделювання, а істинність – її відповідність сукупності наявних знань про об'єкт дослідження. Критеріями адекватності є відображення всіх істотних властивостей та параметрів об'єкта дослідження, якісно правильне відображення суттєвих зв'язків між параметрами, а при кількісному дослідженні також мала різниця між результатами моделювання та наявними емпіричними даними. Адекватність є обов'язковою вимогою до будь-якої моделі, що використовується для дослідження реальних систем. Але в деяких випадках застосовують відносно прості моделі, що не є адекватними. Це доцільно, зокрема, під час розробки алгоритмів аналізу моделей (на першому етапі розробляють алгоритми аналізу неадекватних моделей, які потім використовують як елементи більш складної моделі), у навчальному процесі (зокрема, коли треба дослідити явища, які в реальних системах та процесах спотворюються іншими ефектами) тощо. Слід пам'ятати, що істинність моделі не є гарантією її адекватності. Зокрема, це може бути зумовлено накопиченням похибок за необхідності виконання великого обсягу розрахунків. З іншого боку, адекватними можуть бути моделі, що не є істинними. Типовими прикладами є регресійні моделі, які дають змогу прогнозувати поведінку досліджуваної системи в деякому діапазоні зміни вхідних параметрів, але не відображають наявних знань про побудову, зв'язки та внутрішні процеси в ній.

Загальна схема побудови математичної моделі є такою. Насамперед необхідно визначити, для чого необхідна модель. Це має принципове значення для обрання методу її побудови. Існують два основні підходи. У першому випадку математична модель ґрунтується на основі відомих теоретичних даних про закономірності поведінки системи або протікання процесу. У цьому разі одержувана математична модель буде системою відомих з теорії моделей. Перевагами такого підходу є відповідність структури моделі реальній структурі об'єкта дослідження. Завдяки цьому всі параметри моделі мають реальний фізичний, економічний, технічний або інший зміст. Такі моделі дають змогу аналізувати не тільки загальні властивості системи як цілого, але також і поведінку окремих її елементів, зміни структури, визначати відносні вклади різних факторів у властивості, що спостерігаються, тощо. Недоліками цього підходу зазвичай є складність одержуваних моделей і, внаслідок цього, можливість накопичення похибок при розрахунку вихідних характеристик об'єкта дослідження.

У другому випадку моделлю є рівняння регресії (або система таких рівнянь), за допомогою якого можна прогнозувати, як будуть змінюватися характеристики системи або

процесу при зміні вхідних змінних. Рівняння регресії відповідає розгляду досліджуваної системи як чорного ящика. Тому такі моделі принципово неможливо використовувати для оцінювання вкладу окремих підсистем у формування загальних властивостей системи, аналізу структури системи, зв'язків між її елементами тощо. Коефіцієнти рівнянь регресії часто не мають якогось реального змісту. Проте регресійні моделі відрізняються простотою і у багатьох випадках дають можливість одержувати більш точні оцінки вихідних характеристик досліджуваних систем та процесів. У багатьох випадках при побудові моделей складних систем і процесів використовують комбінації цих підходів. Зокрема, часто базову модель будують як систему відомих теоретичних моделей, параметри яких визначають за допомогою регресійного аналізу.

Якщо модель будують у вигляді системи відомих теоретичних моделей, то наступним етапом її розробки є визначення концептуальної або змістовної (фізичної, технічної, економічної тощо) моделі об'єкта дослідження. Змістовну модель будують на основі відомих теоретичних та емпіричних даних про досліджуваний об'єкт. На цьому етапі визначають суттєві для розв'язуваної задачі елементи системи, взаємозв'язки між ними, взаємозв'язки системи й навколишнього середовища, можливі стани системи, закономірності поведінки системи в цілому та її окремих елементів тощо. Потім переходять від змістовного до формального опису, тобто відбирають теоретичні моделі, з яких будуватиметься загальна математична модель об'єкта дослідження, визначають межі застосування зроблених у них припущень і спрощень.

Далі процедура розробки моделі залежить від обрання методики її подальшого аналізу. На сьогодні найбільш поширеним методом дослідження математичних моделей є їх чисельний аналіз за допомогою ЕОМ. Для цього можна використовувати різноманітні математичні, статистичні та інші прикладні пакети програмного забезпечення, зокрема Microsoft Excel, MathCad, MathLab, Mathematica, Statistica тощо. Але слід мати на увазі, що не існує алгоритмів чисельних розрахунків, які б давали змогу одержати задовільні розв'язки для всіх задач деякого класу. Важливою характеристикою результатів моделювання є похибка одержуваних результатів. Можна виділити такі її основні складові: похибка математичної моделі, похибка вихідних даних, похибка розрахункового алгоритму та похибка обчислень.

Фізичне моделювання — це метод досліджень на моделях, які мають однакову з оригіналом фізичну природу, тобто являють собою деякий макет досліджуваного об'єкта й відтворюють увесь комплекс властивостей досліджуваних явищ.

У фізичному моделюванні важливу роль відіграє теорія фізичної подібності. Її основне положення: *необхідна фізична подібність моделі й об'єкта забезпечується лише при рівності всіх однотипних визначальних безрозмірних комплексів* (критеріїв подібності, наприклад, Рейнольдса) *у подібних точках моделі й об'єкта*. Теорія подібності дозволяє визначити умови подібності моделі й оригіналу, дає можливість узагальнювати одиничні експерименти в безрозмірних комплексах (у критеріях подібності) і поширювати знайдені залежності на подібні системи.

При фізичному моделюванні геометрична подібність доповнюється подібностями швидкостей, сил, матеріальних середовищ і т.п. У цьому випадку безрозмірні комплекси відіграють двояку роль. По-перше, на їхній основі визначають, коли модель подібна до оригіналу, і у цьому випадку ці комплекси і є власне критеріями подібності. По-друге, значення тих самих комплексів у подібних точках і є тією кількісною мірою, яка переноситься з моделі на об'єкт.

У наш час метод фізичного моделювання знаходить плідне застосування в аеро- і гідродинаміці, кораблебудуванні, мостобудуванні, у теплоенергетиці, при спорудженні установок атомних станцій, у хімічній технології та в інших галузях науки й техніки. Цей метод дозволяє одержати необхідний експериментальний матеріал, пояснити механізм досліджуваних явищ, створює передумови для підтвердження або відхилення гіпотез і вироблення теоретичних положень. До *переваг методу фізичного моделювання* необхідно віднести:

- повне відтворення, наочність і природність процесу;

- можливість реєстрації спостережень без перетворювальних пристроїв (вони вносять додаткові похибки і спотворення);
- можливість вивчення явищ, що не піддаються математичному опису. Поряд із перевагами метод фізичного моделювання має й істотні *недоліки*:
- зберігається небезпека аварійності під час виконання експериментів, і тому в ряді випадків метод має обмеження або зовсім не застосовується;
- при дослідженні кожного нового об'єкта необхідно створювати нову модель;
- зміна параметрів об'єкта моделювання, як правило, викликає труднощі переробки моделі або її заміну;
- висока вартість моделей складних об'єктів;
- у випадку малих розмірів моделі порівняно з об'єктом пристрої вимірювання можуть вносити істотні похибки у результат (або ж їх треба модернізувати);
- перенесення результатів дослідження з моделі на об'єкт не завжди (особливо для систем, у яких проходять хімічні реакції [4]) є правомірним, оскільки деякі властивості об'єкта в його фізичній моделі можуть суттєво змінюватися.

Обмеження застосування методу фізичного моделювання у дослідженнях процесів хімічної технології аж ніяк не виключає його зовсім. Фізичне моделювання може успішно застосовуватися в ряді технологічних досліджень і розрахунків наприклад для гідравлічних або теплових систем з однофазним потоком. Це процеси перенесення тепла й маси речовини, які відбуваються без зміни хімічного складу робочого середовища, а саме: теплообмін у нагрівачах, холодильниках та інших системах, що характеризуються невеликим числом критеріїв подібності. Розрахунки таких процесів можна проводити на основі висновків теорії подібності, які дозволяють результати експериментів, отримані на фізичних моделях, практично безпомилково переносити на апарати заводських масштабів.

Математичне моделювання є методом наукового дослідження, який базується на пізнанні досліджуваних процесів (об'єктів) за допомогою математичної моделі (шляхом розв'язання співвідношень його математичної моделі). Цей метод ґрунтується на математичній подібності. *У математично подібних об'єктах процеси мають різну фізичну природу, але описуються ідентичними математичними співвідношеннями.* Відмова від однаковості природи моделі й об'єкта при збереженні подібності математичного опису розширила діапазон застосування методу, дозволила зробити якісний стрибок у розвитку моделювання.

Можливість установлення подібності між різнорідними за фізичною природою явищами не випадкова. *У природі внаслідок її матеріальної єдності для всіх якісних різновидів матерії є загальні кількісні співвідношення.* Це дозволяє узагальнювати процес пізнання, відволікаючись від деталей, що знаходяться в повному комплексі якостей речей, від процесів, що в них відбуваються, і зображувати ті або інші їхні сторони математично, у вигляді функціональних зв'язків, диференціальних рівнянь. Як приклад візьмемо кілька явищ, різних за фізичною природою, і наведемо їх математичні описи: перенесення тепла (тепловий потік) $q = -\lambda \frac{dT}{dx}$ (закон Фур'є); перенесення речовини (потік речовини) $j = -D \frac{dc}{dx}$ (закон Фіка); перенесення кількості руху (внутрішнє тертя) $f_{\text{вн}} = -\mu \frac{dv}{dx}$ (закон Ньютона); перенесення електрики $i = \frac{1}{\rho} \frac{dU}{dx}$ (закон Ома).

Усі наведені диференціальні рівняння мають ідентичний математичний запис; у них входять градієнти температури dT/dx , концентрації dc/dx , швидкості dv/dx й напруги dU/dx . Кожний із зазначених законів можна з використанням певних перерахункових коефіцієнтів представити, наприклад, на електричній моделі, що ілюструє закон Ома. При цьому електрична модель буде найпростішою і може бути застосована для декількох об'єктів з різною фізичною природою, тобто вона стає універсальною. На такій моделі відтворюється не сам фізичний процес, а його математичний опис або аналогія між законами, які виражають явища в оригіналі й у моделі.

Таким чином, *математична модель являє собою систему рівнянь математичного опису*, що відображає (що описує) сутність явищ, які відбуваються в об'єкті моделювання, що й дозволяє за допомогою певного алгоритму досліджувати його поведінку. У цьому випадку *математичне моделювання* – це одержання інформації про об'єкт на підставі досліджень його моделі що, по суті, *являє собою розв'язок системи рівнянь математичного опису об'єкта й аналіз одержуваних результатів*.

Порівняно з фізичним *математичне моделювання* — більш універсальний метод, що має цілий ряд переваг, оскільки:

- має абсолютну безпеку виконання експериментів;
- більш економічний, ніж метод фізичного моделювання, як за витратами часу, так і за вартістю (без урахування витрат на створення математичної моделі);
- дозволяє здійснити за допомогою одного пристрою розв'язок цілого класу задач, що мають однаковий математичний опис;
- забезпечує простоту переходу від однієї задачі до іншої, введення змінних параметрів, збурень і різних початкових умов;
- дає можливість моделювати об'єкт у роздріб (за «елементарними» процесами), що особливо суттєво при дослідженнях складних об'єктів хімічної технології;
- використовує досить ефективний засіб дослідження процесів — швидкодіючу обчислювальну техніку, яка безупинно удосконалюється;
- дозволяє легко і безпечно прогнозувати поведінку об'єкта моделювання в широкому діапазоні зміни параметрів, а також проводити його дослідження ще до моменту створення.

У практиці досліджень процесів хімічної технології за допомогою математичного моделювання вдається порівняно просто змінювати параметри досліджуваного об'єкта і з'ясовувати їхній вплив на якість його роботи в цілому, оскільки деформація моделі процесу виконується не на фізичній моделі, а безпосередньо на математичній моделі зміною її коефіцієнтів.

Разом з тим метод *математичного моделювання не позбавлений недоліків*, зокрема:

- висока складність розроблення математичної моделі й методів її розв'язання (а отже, і значна вартість), що вимагає глибоких знань фізичної й хімічної сутності процесів моделювання і хорошої спеціальної теоретичної підготовки фахівців;
- застосований математичний апарат і прийняті припущення у багатьох випадках не дозволяють з достатньою повнотою відобразити властивості досліджуваної складної хімічної системи, у результаті чого нерідко відчутно спотворюється сутність процесу, що значно знижує точність розв'язку задач;
- при математичному моделюванні не вдається візуально спостерігати за ходом процесу;
- практичні прийоми методу є специфічними і ще недостатньо освоєні фахівцями прикладних галузей.

Загальна характеристика методу математичного моделювання і, зокрема, зміст основних задач, які розв'язуються з його допомогою, свідчать, що математичне моделювання не протиставляється фізичному моделюванню, а швидше має доповнити його наявними засобами математичного опису й чисельного аналізу. У зв'язку із впровадженням математичного моделювання метод фізичного моделювання набуває нової якості: його успішно використовують для знаходження значень коефіцієнтів, що входять до рівняння математичної моделі (ідентифікація моделі).

У багатьох випадках при вивченні складних об'єктів доцільно комбінувати елементи фізичного й математичного моделювання для поєднання переваг обох методів.

Тема 2. Етапи математичного моделювання.

Поняття системи, об'єкта і змінних.

Класифікація об'єктів і процесів технології.

Класифікація об'єктів за єдністю математичного опису.

Класифікація об'єктів і моделей за єдністю природи процесів.

Моделі статистики й динаміки.

Лінійні й нелінійні об'єкти й моделі, лінеаризація. Стационарні й не стационарні моделі та об'єкти.

Детерміновані і стохастичні об'єкти та моделі. Об'єкти й моделі із зосередженими та розподіленими параметрами.

Процес моделювання містить три основні складові:

- суб'єкт (людина-дослідник);
- об'єкт дослідження (технологічний об'єкт або процес);
- модель, що відображає відносини суб'єкта-дослідника і пізнаваного об'єкта.

Сама постановка питання про математичне моделювання будь-якого об'єкта породжує чіткий план дій, який умовно можна розбити на три етапи (тріаду): **модель** — **алгоритм** — **програма** (див. рис. 1.1).

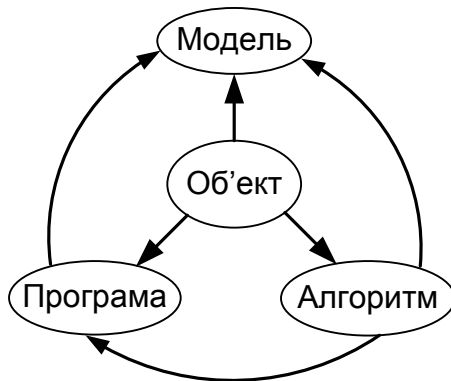


Рисунок 1.1 - Тріада «модель — алгоритм — програма»

На *першому етапі* вибирається або будується «еквівалент» об'єкта (математична модель), що відображає в математичній формі найважливіші його властивості — ті закони, яким він об'єктивно підкоряється, зв'язки, властиві його складовим частинам, обмеження і т.д. Математична модель (або деякі її фрагменти) *досліджується теоретичними методами*, що дозволяє одержати важливі попередні знання про об'єкт.

Другий етап — це вибір (або розроблення) алгоритму для реалізації моделі на комп'ютері. Модель представляється у формі, зручній для застосування чисельних методів, визначається послідовність обчислювальних і логічних операцій, які потрібно зробити, щоб знайти шукані величини із заданою

точністю. Обчислювальні алгоритми не повинні спотворювати основні властивості моделі й, отже, первинного об'єкта, бути економічними і такими, що просто адаптуються до особливостей розв'язуваних задач і використовуваних комп'ютерів.

На *третьому етапі* створюються програми, що «переводять» модель і алгоритм на доступну комп'ютеру мову. До них також ставляться вимоги економічності й адаптивності. Їх можна назвати «електронним» еквівалентом досліджуваного об'єкта, який уже придатний для безпосереднього випробування на «експериментальній установці» — комп'ютері.

Створивши тріаду «модель — алгоритм — програма», дослідник одержує в руки універсальний, гнучкий і недорогий інструмент, який спочатку налагоджується, тестується в «пробних» обчислювальних експериментах, для того щоб упевнитися в достатній відповідності (адекватності) тріади вихідному об'єкту. Після того як адекватність засвідчена, з моделлю проводяться різноманітні «досліди», в результаті яких отримують усі необхідні якісні й кількісні властивості й характеристики об'єкта. Процес моделювання супроводжується удосконаленням і уточненням у міру необхідності всіх ланок тріади.

Будучи методологією, математичне моделювання не підмінює собою математику, фізику, біологію й інші наукові дисципліни, не конкурує з ними. Навпаки, важко переоцінити її синтезуючу роль. Створення й застосування тріади «модель — алгоритм — програма» неможливе без опори на різноманітні методи й підходи — від якісного аналізу до сучасних мов програмування. Разом з тим вона дає нові стимули розвитку різноманітних напрямів науки.

Поняття системи, об'єкта і змінних

Перш ніж перейти до розгляду принципів і особливостей математичного моделювання, необхідно ввести деякі базові визначення.

Більшість об'єктів хімічної технології належить до так званих складних систем. За визначенням акад. А. І. Берга, *під складною системою необхідно розуміти організовану множину різноманітних елементів, взаємозалежних і виконуючих певні функції*. Автор [4] представляє хімічну систему як сукупність фізико-хімічних процесів і засобів для їхньої реалізації; там рекомендується розділяти всі системи на малі й великі. Однак немає чітко встановлених критеріїв, за допомогою яких можна оцінити ступінь складності системи. Тому надалі будемо застосовувати поняття більш вузьке, але ідентичне хімічній системі об'єкт хімічної технології (або просто об'єкт).

Об'єктом хімічної технології називається технологічний процес, що відбувається в апаратурі певного конструктивного оформлення (простий об'єкт), або технологічний ланцюжок, що охоплює кілька процесів і апаратів (складний об'єкт).

Будь-які об'єкти природи, з одного боку, природно, перебувають під впливом різних *зовнішніх факторів*, які не залежать від їх стану (температура, витрата, концентрація й т.п.), а з іншого - завжди можна зазначити аналогічні фактори, які характеризують стан цього об'єкта або є *залежними* від його стану. Усі фактори будемо називати *змінними* (координатами, параметрами) об'єкта.

Зауваження. У різних літературних джерелах поняттям: змінні, параметри, координати часто надають різний зміст. Щоб не створювати плутанину, надалі будемо використовувати термін «параметри» для позначення таких характеристик об'єкта, які певною мірою можна вважати постійними величинами (коефіцієнтам), наприклад, коефіцієнт теплопровідності, модуль Юнга й ін. Термін «координати» є повним аналогом терміна «змінні», однак має трохи математизоване, абстрактне забарвлення.

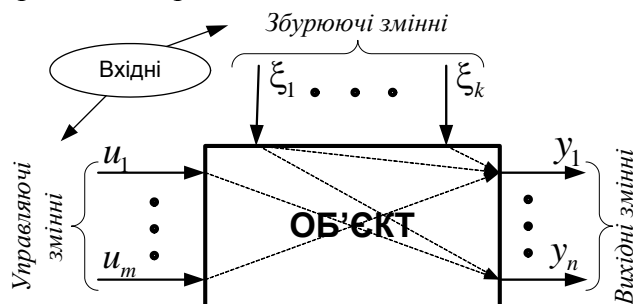


Рисунок 1.2 - Структура об'єкта моделювання

Структура об'єкта моделювання з урахуванням факторів, що на нього впливають і його характеризують, може бути представлена схематично так, як це показано на рис. 1.2. Як видно, усі змінні, як ті, що впливають на об'єкт, так і ті, що характеризують його стан, можна розділити на дві великі групи: *вхідні й вихідні*.

Вхідні змінні (u , ξ) є зовнішніми щодо об'єкта, тобто від режиму роботи об'єкта (його стану) не залежать. Стосовно хімічної технології вхідними змінними є, наприклад, контрольований і неконтрольований склад сировини, витрата й температура теплоносія, що надходять в апарат, та ін. Залежно від характеру участі в процесі *вхідні змінні поділяються* на:

- *збурюючі змінні* $\xi (i=1..k)$ (впливи, що збурюють стан об'єкта), це такі вхідні змінні, які ми, у кращому разі, можемо виміряти (проконтролювати), і зміна їх відбувається випадковим чином. Збурюючі впливи можуть як не залежати від процесу в об'єкті (зовнішні), так і залежати від нього (внутрішні). До зовнішніх збурень можна віднести неконтрольовані домішки у складі сировини. Залежним від процесу збурюванням буде, наприклад, зміна активності каталізатора
- *управляючі змінні* $u (i=1..m)$ (управління), це такі вхідні змінні, які можуть бути і виміряні, і змінені за нашим бажанням. Ці змінні використовуються для компенсації відхилень режиму роботи об'єкта від необхідного, які виникають у результаті

збурюючих впливів. У хімічній технології управляючими змінними можуть бути: регульована кількість суміші, що подається в апарат, регульований тиск в апараті, температура теплоносія і т.п.

Вихідні змінні $y_i (i=1..r)$, що характеризують стан об'єкта, безпосередньо визначаються режимом проходження процесів в об'єкті (тобто властивостями об'єкта) і опосередковано - сумарним впливом на об'єкт вхідних змінних. Оскільки вихідні змінні характеризують стан об'єкта, то їх часто називають змінними стану, однак наразі необхідно зазначити, що поняття «змінна стану» має дещо ширше значення, яке не завжди збігається з поняттям «вихідна змінна». Дуже часто вихідні змінні характеризують якісні й кількісні показники одержуваного в процесі продукту.

Необхідно також звернути увагу на принципову відмінність між такими важливими поняттями, як «параметр» (коефіцієнт) і вихідна змінна об'єкта. *Параметри є характеристиками властивостей об'єкта*, і поведінка об'єкта багато в чому визначається їхніми значеннями (наприклад, робота теплообмінника суттєво залежить від коефіцієнта теплопередачі). Однак вони, як правило, є величинами, що не вимірюються, а обчислюються, тобто абстрактними.

Між усіма розглянутими величинами в об'єкті існує тісний взаємозв'язок: вихідні змінні залежать як від вхідних впливів, так і від режиму перебігу процесів в об'єкті, який, у свою чергу, визначається набором параметрів (коефіцієнтів), що характеризують конкретний об'єкт. При цьому часто параметри, у свою чергу, можуть залежати від змінних стану об'єкта (наприклад, константа швидкості реакції в реакторі може залежати від температури). Однак у багатьох практичних випадках параметри з деякими застереженнями можна вважати постійними величинами (хоча, можливо, невідомими або неточними).

З міркувань доцільного ведення технологічного процесу або з міркувань фізичної реалізованості на вхідні управляючі і вихідні змінні, як правило, накладаються *обмеження*, які визначають допустимий діапазон зміни кожної змінної.

При вивченні об'єкта шукають не будь-які зв'язки між змінними, а цілком певні. Дослідника завжди цікавить взаємозв'язок між вхідними й вихідними змінними, тому що саме вони характеризують процес, що відбувається в об'єкті. Однак установлення цих зв'язків нерідко являє собою досить складне завдання внаслідок багатофакторності й випадкового характеру збурень. Факт взаємозв'язку між змінними називається *каналом впливу*. Прийнято називати « $u - y$ » — каналом управління; « $\xi - y$ » — каналом збурювання.

Класифікація об'єктів і процесів технології

Для вивчення складних об'єктів зручно представити їх у вигляді сукупності технологічних ланок, у яких відбуваються подібні між собою процеси хімічної технології. Установлення ознак схожості процесів ускладнюється тим, що хімічна технологія характеризується величезним різноманіттям процесів, які можна класифікувати з різних позицій. Тому з метою виділення типових процесів хімічної технології й визначення їх природи використовують кілька основних критеріїв:

1. Єдність математичного опису (моделі) процесів. Це, по суті, ідентичність матеріальних та енергетичних зв'язків. Така єдність моделі враховує фізико-хімічні особливості процесів.
2. Єдність апаратурно-технологічного оформлення процесів, що відображає їх цільове призначення й умови реалізації.
3. Єдність тих особливостей об'єкта, що пов'язані з природою процесів.

Класифікація об'єктів за єдністю математичного опису

За характером матеріальних та енергетичних зв'язків усе різноманіття процесів хімічної технології можна розділити на 5 основних класів: 1) гідродинамічні; 2) теплові; 3) дифузійні, або масообмінні; 4) механічні й 5) хімічні.

Кожний із цих класів з урахуванням цільового призначення й умов реалізації, у свою чергу, ділиться на типові процеси.

До класу гідродинамічних належать процеси переміщення рідин і газів по трубопроводах і апаратах, перемішування в рідких середовищах, процеси обробки неоднорідних рідких і газових систем (очищення газів від пилу й туманів, поділ суспензій і емульсій шляхом відстоювання, фільтрування, центрифугування і т.п.). Швидкість гідродинамічних процесів визначається законами механіки й гідродинаміки.

Клас теплових процесів становлять процеси нагрівання, охолодження, конденсації, випарювання, теплообміну й т.п. Швидкість теплових процесів визначається законами теплопередачі.

Клас дифузійних (масообмінних) процесів пов'язаний із процесами перенесення речовини в різних агрегатних станах з однієї фази в іншу (абсорбція, дистиляція, ректифікація, адсорбція, десорбція, розчинення, кристалізація, зволоження, сушіння, сублимація й ін.). Швидкість дифузійних процесів визначається законами масопереносу.

До класу механічних процесів належать процеси подрібнення, здрибнювання, просівання, транспортування твердих матеріалів, гранулювання й ін.

Клас хімічних процесів характеризується найбільшим різноманіттям. Швидкість хімічних процесів визначається законами хімічної кінетики. Хоча ці процеси є найбільш важливими, наукова класифікація їх продовжує залишатися однією з невирішених задач хімічної кібернетики.

Класифікація об'єктів і моделей за єдністю природи процесів. Моделі статички й динаміки

Об'єкти хімічної технології, у яких на фоні гідродинаміки відбуваються теплові й дифузійні процеси, хімічні реакції й ін., характеризуються інерційністю (говорять, мають динамічні властивості). Не претендуючи на повноту визначення цього поняття, зауважимо, що *інерційність технологічного об'єкта* — це міра інтенсивності зміни вихідної змінної при миттєвій зміні вхідної. Усі реальні об'єкти природи тією чи іншою мірою мають властивість інерційності, тобто є інерційними або динамічними. Так, наприклад, із власного життєвого досвіду всім відомий факт, що чим важчий автомобіль, тим більше часу й зусиль необхідно для його розгону або гальмування.

Динамічним об'єктам відповідають математичні моделі динаміки, які являють собою одне або декілька (систему) звичайних диференціальних рівнянь (за часом) першого й вище порядків. Ці диференціальні рівняння складаються на підставі фізичних законів, що дозволяють описати перехід об'єкта із одного стану спокою в інший під впливом зовнішніх факторів або зміни внутрішніх параметрів і є універсальним видом опису динамічної характеристики об'єкта, яка залежить одночасно від властивостей об'єкта й від закону зміни вхідних впливів. Графічне зображення динамічних властивостей об'єкта по певному каналу при подачі на вхід ступінчастого впливу, яке може бути отримане у результаті розв'язку диференціальних рівнянь або експериментально на об'єкті (так звана «крива розгону»), називається *перехідною характеристикою* (див. рис. 1.3).

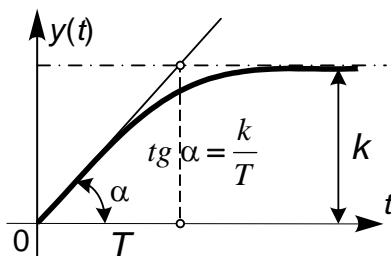


Рисунок 1.3 - Перехідна характеристика

У найпростішому випадку динамічні властивості об'єкта, що мають одну вхідну й одну вихідну змінну, можна описати диференціальним рівнянням першого порядку:

$$T \frac{dy}{dt} + y = kx, \quad (2.1)$$

розв'язком якого (перехідна характеристика) при нуль-вих початкових умовах буде експонента $y(t) = k(1 - e^{-t/T})$, зображена на рис. 1.3. Кількісною оцінкою інерційності у цьому випадку може бути стала часу об'єкта T (коефіцієнт при похідній), яка показує, за який проміжок часу вихідна змінна досягла б свого усталеного значення, якби вона змінювалася зі сталою швидкістю, що дорівнює первісній. Для об'єктів, які описуються диференціальними рівняннями більш високого порядку, поняття сталої часу точно не визначається, а є складною функцією усіх коефіцієнтів рівняння. Використання сталої часу є дуже зручним, оскільки для багатьох об'єктів хімічної технології вона виражається відношенням обсягу апарата V (m^3) до витрати рідини або газу w (m^3/c), що проходить через апарат. Об'єкти хімічної технології відрізняються великою інерційністю і для них стала часу іноді вимірюється навіть годинами.

Обов'язковою умовою правильності складання математичної моделі динаміки є необхідність задавання початкових умов, число яких дорівнює порядку диференціального рівняння (якщо воно одне) або кількості диференціальних рівнянь у системі (у перерахунку на рівняння першого порядку).

Поряд із моделями динаміки в дослідженнях об'єктів використовуються математичні моделі статичні (важливо: статичних об'єктів у природі не існує), які дозволяють описати зв'язки між вхідними й вихідними змінними в усталеному рівноважному стані. По суті, це не що інше, як відомі ще зі шкільного курсу статичні характеристики.

При складанні математичної моделі статичні використовують алгебраїчні рівняння й диференціальні рівняння в частинних похідних, які отримуються із матеріальних і енергетичних балансів об'єкта, що перебуває у стані рівноваги. Формально математичну модель статичні можна одержати з моделі динаміки, прирівнявши всі похідні за часом до нуля.

Лінійні й нелінійні об'єкти й моделі, лінеаризація

Якщо залежність вихідної величини об'єкта від вхідної в усталеному режимі (статична характеристика) має лінійний вигляд (тобто може бути графічно представлена прямою лінією, як це показано на рис. 1.4), то такий об'єкт називається лінійним і може бути представлений лінійною статичною або динамічною моделлю.

Однак статичні характеристики практично всіх об'єктів природи, що нас оточують, мають нелінійний характер. А. Ейнштейну належить вислів, що «... справжні закони не можуть бути лійними». Візьмемо, наприклад, класичний об'єкт, часто використовуваний для демонстрації лінійності характеристики, – дитяча гойдалка. Дійсно, у деякому діапазоні зміни вхідного впливу (наприклад, висоти правого боку гойдалки) ми, без сумніву, одержимо пропорційну зміну вихідної змінної (висоти лівого боку гойдалки). Однак спроба збільшити цей діапазон скоро приведе до неможливості подальшого переміщення гойдалки (досягнення однієї зі сторін підлоги), а це означає, що починають проявлятися нелінійні властивості (обмеження).

Нелінійні статичні характеристики (моделі) мають у своєму складі нелінійні алгебраїчні (такі, що включають добуток змінних і піднесення у ступінь) і трансцендентні рівняння. Аналітичний розв'язок таких моделей у край важкий, а часто неможливий.

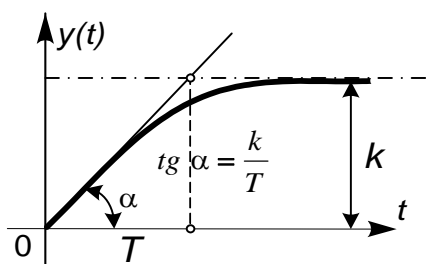


Рис. 1.3 - Переходная характеристика

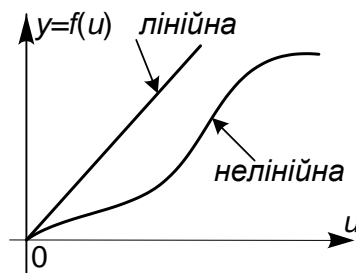


Рисунок 1.4 - Види статичних характеристик

Таким чином, для природи (у тому числі й для хімічної технології) характерна наявність нелінійних динамічних об'єктів, які можна представити у вигляді динамічних або статичних, лінійних або нелінійних математичних моделей. При цьому *найбільш точно й повне відображення властивостей реального об'єкта може бути отримане за допомогою нелінійної динамічної моделі*, яка являє собою систему нелінійних диференціальних рівнянь. Разом з тим аналітичний розв'язок нелінійних диференціальних рівнянь можливий тільки у виняткових і таких, що й не становлять практичного інтересу, випадках, тоді як для розв'язання лінійних диференціальних рівнянь на даний час розроблено потужний і надійний математичний апарат. Подібне протиріччя змушує дослідників виконувати певні дії, пов'язані із заміною нелінійних характеристик на лінійні, названі лінеаризацією статичних характеристик.

Під лінеаризацією розуміється заміна нелінійної функціональної залежності лінійною в певному інтервалі зміни або на межах деякого значення (робочої точки) вихідної змінної y (рис. 1.5). Лінеаризація статичної характеристики на практиці часто припустима, оскільки відхилення вихідної змінної в реальних умовах роботи від робочих значень незначні.

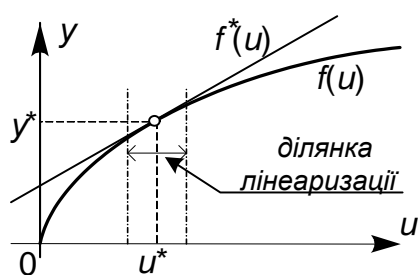


Рисунок 1.5 - Лінеаризація статичної характеристики

Сутність лінеаризації добре демонструє *метод геометричної лінеаризації*, суть якого полягає в заміні вихідної кривої статичної характеристики $y=f(u)$ на відрізок прямої лінії $y=f^*(u)$, дотичної до неї в робочій точці $(u^*; y^*)$. Недоліком методу є ймовірність помилки при геометричній побудові дотичної, перевагою – можливість лінеаризації характеристик, отриманих експериментально.

Значно точнішими методами лінеаризації є аналітичні методи, серед яких найбільше поширення одержав *метод лінеаризації розкладанням у ряд Тейлора* в околі точки, що відповідає робочому режиму об'єкта, з подальшим відкиданням членів розкладання другого й вище порядків малості. Для використання аналітичних методів лінеаризації необхідна наявність математичних виразів, які описують статичні характеристики.

Стаціонарні й не стаціонарні моделі та об'єкти

Якщо реакція об'єкта (характер зміни вихідної змінної) на будь-який заданий тип вхідного впливу не залежить від моменту початку дії, а лише від інтервалу часу його дії, то такий об'єкт називається *стаціонарним*. Практично це означає, що в який би момент часу (через годину, місяць, рік) ми не подали деякий фіксований сигнал на вхід об'єкта, характер зміни вихідного сигналу повинен залишатися незмінним.

Більшість об'єктів природи (особливо об'єкти хімічної технології) нестаціонарні за своєю фізичною сутністю. Це пов'язане з тим, що із часом з більшою або меншою інтенсивністю змінюються всі або деякі параметри об'єкта (наприклад, через появу накипу зменшується коефіцієнт теплопровідності трубок теплообмінника, «старіє» каталізатор і т.п.). Однак швидкість зміни параметрів може бути різною. Якщо на досліджуваному інтервалі часу параметри об'єкта змінюються незначно, так, що цією зміною можна знехтувати, то такий об'єкт можна вважати стаціонарним. Такі об'єкти й відповідні їм моделі називаються *квазістаціонарними*.

Нестаціонарність об'єкта в математичній моделі враховується залежністю параметрів (коефіцієнтів) моделі від часу. Складність розв'язання нестаціонарних математичних моделей суттєво вища і вимагає застосування спеціальних методів.

Детерміновані і стохастичні об'єкти та моделі

За відсутності або наявності незначних збурень в об'єктах визначити вплив вхідних змінних на вихідні можна однозначно. Якщо збурення великі і вносять значні спотворення в характер зв'язків в об'єкті, то навіть при відомому характері зміни управляючих змінних не можна говорити про їх точний вплив на виходи, а лише про деякий припустимий вплив, оскільки такі збурення, як правило, є випадковими. Наявність і ступінь впливу випадкових збурень в об'єктах визначаються сутністю (природою) процесів, що відбуваються у них.

Залежно від ступеня впливу збурень усі процеси (об'єкти) прийнято поділяти на *детерміновані і стохастичні*.

Детермінованими називаються об'єкти, в яких визначальні величини змінюються безперервно за цілком певними закономірностями і мають властивість повторюваності. При цьому припускається, що значення вихідних величин, які характеризують процес (змінні стану), однозначно визначаються уставкою вхідних управляючих впливів.

Стохастичними (випадковими, імовірнісними) називаються об'єкти, у яких зміна хоча б однієї з визначальних величин відбувається випадково. При цьому значення вихідних змінних перебувають в імовірнісній залежності від вхідних змінних і не визначаються ними однозначно.

У принципі будь-якому технічному процесу притаманні елементи випадкових флуктуацій. Наприклад, на всі процеси, що відбуваються у відкритих апаратах, впливає атмосферний тиск, коливання якого випадкові, однак у багатьох випадках цим впливом можна знехтувати й розглядати об'єкт як детермінований. Однак якщо ми розглядаємо військову операцію як об'єкт моделювання, то фактором випадковості знехтувати вже не можна.

Якщо об'єкт розглядається як стохастичний, то можуть виникнути дві ситуації:

- для випадкової величини, що діє на об'єкт, відомий закон розподілу (часто це є нормальний закон), і тоді з'являється можливість заміни випадкової величини на її математичне очікування, що дозволяє розглядати об'єкт як детермінований;
- якщо джерела й характеристики випадкових величин, що діють на об'єкт, не відомі, то для дослідження й моделювання таких об'єктів необхідно застосовувати спеціальні методи аналізу.

Для побудови математичної моделі стохастичного об'єкта використовується математичний апарат теорії ймовірностей, а отримана у результаті математична модель називається стохастичною. В іншому випадку математична модель – детермінована.

Безперервні й дискретні об'єкти та моделі

Якщо вихідна змінна об'єкта визначена для будь-якого моменту часу, то такий об'єкт і відповідна йому математична модель називаються *безперервними*. У *дискретних* об'єктах і відповідних їм математичних моделях вихідна змінна визначена (відома) тільки в деякі фіксовані моменти часу. Більшість об'єктів хімічної технології є безперервними за своєю природою, дискретність у технологічні процеси привноситься, як правило, штучно (лабораторні виміри, дискретний принцип роботи ЦОМ).

Безперервні математичні моделі описують тільки безперервні об'єкти й процеси, а дискретні моделі використовуються для опису як безперервних, так і дискретних об'єктів.

Для опису об'єкта за допомогою дискретної математичної моделі використовуються так звані кінцево-різницеві рівняння (аналогі безперервних диференціальних рівнянь).

Об'єкти й моделі із зосередженими та розподіленими параметрами

Якщо вихідні змінні об'єкта змінюються в часі однаково в усіх його точках (говорять розподілені) або певною нерівномірністю з достатньою для практики похибкою можна знехтувати, то такі об'єкти й відповідні їм математичні моделі називають *об'єктами й математичними моделями із зосередженими параметрами*. Для математичного опису таких об'єктів використовують тільки звичайні диференціальні рівняння (безперервні або кінцево-різницеві). Прикладом такого об'єкта може бути хімічний реактор з інтенсивним перемішуванням реагентів.

Якщо значення вихідних змінних у різних точках об'єкта суттєво відрізняються і це важливо з погляду моделювання, то такі об'єкти й відповідні їм математичні моделі називають *об'єктами й математичними моделями з розподіленими параметрами*. Для їхнього математичного опису використовуються диференціальні рівняння в частинних похідних. В об'єктах із розподіленими параметрами зміна вихідної змінної може відбуватися як за координатами, так і в часі. Які приклади об'єктів із розподіленими параметрами можна

навести однокоординатну зміну тиску стовпа рідини, двокоординатне температурне поле плоскої металевої пластини, що нагрівається в одній точці, і таке інше.

Класифікація об'єктів і моделей за єдністю апаратурно-технологічного оформлення процесів

У всьому різноманітті об'єктів хімічної технології можна виділити чотири класи типових апаратів, що відрізняються видом і числом потоків, що підходять і відходять:

- двополюсні (проточні апарати з одним вхідним і одним вихідним потоком);
- змішувальні (кілька вхідних потоків і один вихідний потік);
- розподільні (один вхідний потік і декілька вихідних потоків);
- складні (кілька вхідних і вихідних потоків).

Кожному такому класу апаратів (процесів) можна поставити у відповідність типову модель, сукупність яких і буде являти собою математичну модель об'єкта в цілому.

Найбільший інтерес у цій класифікації становлять двополюсні моделі апаратів, серед яких залежно від функціонального призначення розрізняють (за аналогією до електричних схем):

- «джерела», що створюють потенціальну або кінетичну енергію (насоси, компресори);
- «опори» - елементи, що розсіюють енергію (ділянки трубопроводів);
- «ємності» - елементи, які здатні накопичувати речовину або енергію та відображають властивості пружності речовини (ресивери, буферні ємності);
- «індуктивності» - елементи, що характеризують інерційні властивості мас потоків;
- реактори (з одним вхідним потоком).

Реальний технологічний апарат (процес) може являти собою складну сукупність взаємодіючих компонентів, зазначених вище. Так, наприклад, ділянку нестиснуваного трубопроводу, заповненого пружною рідиною, можна розглядати як: гідравлічний опір (втрата напору), гідравлічну ємність (непружність стінок) і гідравлічну індуктивність (інерція потоку). Залежно від цілей дослідження модель може відображати ті або інші сторони об'єкта.

Тема 3. Етапи побудови математичних моделей.

Змістовна постановка задачі.

Концептуальна (формалізована) постановка задачі моделювання.

Математична постановка задачі.

Вибір методу розв'язання задачі і його обґрунтування.

Реалізація математичної моделі у вигляді програми на ЕОМ.

Практичне використання побудованої моделі й аналіз результатів.

Процес створення математичних моделей трудомісткий, тривалий і пов'язаний із використанням праці різних фахівців досить високого рівня, які повинні мати гарну підготовку як у предметній області, пов'язаній з об'єктом моделювання, так і в області прикладної математики, сучасних числових методів, програмування, тобто таких, що добре знають можливості сучасної обчислювальної техніки.

Відмінною рисою математичних моделей об'єктів технології, створюваних у наш час, є їх комплексність, породжувана складністю об'єктів моделювання, що складаються із безлічі взаємодіючих елементів. Так, наприклад, при моделюванні хімічного реактора доводиться враховувати не тільки хімічні процеси, але і явища дифузії, теплопровідності, механіку руху потоків та ін.

Це приводить до ускладнення математичної моделі і часто до необхідності використання декількох теорій (нерідко з різних галузей знань), застосування сучасних обчислювальних методів і обчислювальної техніки для одержання й аналізу результатів моделювання.

Побудова моделі як процес проектування вимагає розроблення деякої сукупності правил і підходів, які дозволили б знизити витрати на їхнє розроблення й зменшити



Рисунок 1.6 - Етапи побудови математичної моделі

ймовірність появи важкопереборних унаслідок цього помилок. Подібна сукупність правил, яку умовно можна назвати *технологією розроблення математичних моделей*, придатна для побудови будь-якої моделі і представлена у вигляді послідовності етапів, показана на рис. 1.6.

Змістовна постановка задачі

Побудова математичної моделі вимагає значних інтелектуальних, фінансових і часових витрат. Тому *рішення про її розроблення повинне ухвалюватися тільки у випадку відсутності інших, більш простих шляхів розв'язання поставленої задачі*. Людину або організацію, зацікавлену в розробленні нової математичної моделі, називають *замовником*.

Враховуючи важливість прийняття рішення про розроблення математичної моделі, замовник повинен спочатку визначити основні цілі моделювання, тобто обґрунтувати необхідність побудови математичної моделі. Відповідно до [15] модель може бути потрібна для того, щоб:

- *зрозуміти*, як улаштований конкретний об'єкт, яка його структура, основні властивості, закони розвитку і взаємодії з навколишнім середовищем;
- *забезпечити виконання* проектних і конструкторських робіт на виробництві;
- *навчитися керувати* об'єктом (або процесом) і визначити найкращі (оптимальні) способи управління при заданих цілях і критеріях;
- *прогнозувати* прямі і непрямі наслідки реалізації заданих способів і форм впливу на об'єкт.

Після ухвалення рішення про необхідність побудови моделі замовник шукає *виконавця*, яким, як правило, виступає робоча група із фахівців різного профілю: технологів, що добре знають особливості об'єкта моделювання, прикладних математиків, програмістів.

Основною метою етапу обстеження об'єкта моделювання є *підготовка змістовної постановки завдання*, яка являє собою перелік сформульованих у словесній (змістовній) формі основних питань щодо об'єкта, які цікавлять замовника. Цей етап роботи найчастіше перетворюється в досить складну проблему, що має також самостійне значення, і вимагає для свого розв'язання залучення фахівців зі специфічними знаннями і здібностями. Вони повинні не тільки мати глибокі й усебічні спеціальні знання, але й *бути досить комунікабельними*, тобто вміти спілкуватися з людьми, бути здатними «розговорити» практиків, що добре «розуміють» об'єкт моделювання та нюанси його поведінки. Таких фахівців зараз називають *постановниками завдань*.

Як правило, обстеження об'єкта моделювання включає такі роботи:

- вивчення об'єкта з метою виявлення основних факторів (механізмів і змінних), що впливають на його поведінку;

- збір і перевірка наявних експериментальних даних про об'єкти-аналоги, а також проведення за необхідності додаткових експериментів;
- аналітичний огляд літературних джерел, аналіз і порівняння між собою побудованих раніше моделей досліджуваного об'єкта (або йому подібних);
- аналіз і узагальнення всього накопиченого матеріалу, розроблення загального плану складання математичної моделі.

Зібравши і проаналізувавши інформацію, постановник завдання повинен сформулювати такі вимоги до майбутньої моделі, які б, з одного боку, *задовольняли замовника*, а з іншого – *дозволили б реалізувати модель* у встановлений термін і в рамках наявних коштів. Неправильна оцінка строків і вартості розроблення моделі може призвести до невдачі всього проекту, до даремної втрати часу й коштів.

На основі зібраної інформації постановник задачі разом із замовником формують змістовну постановку задачі моделювання, яка, як правило, не буває остаточною й може уточнюватися та конкретизуватися у процесі розроблення моделі. Однак ці уточнення не повинні мати принципового характеру.

Увесь зібраний у результаті обстеження матеріал про об'єкт, змістовна постановка завдання моделювання, додаткові вимоги до реалізації й представлення результатів оформляються у вигляді *технічного завдання на проектування й розроблення математичної моделі*, яке є важливим і відповідальним підсумковим документом, що завершує етап обстеження. Чим більш повну інформацію про об'єкт, яка враховує накопичений досвід і знання, вдається зібрати на етапі обстеження, тим більш чіткою виходить змістовна постановка задачі, що дозволяє уникнути багатьох труднощів, уточнень і переформулювань на наступних етапах розроблення моделі. У цілому етап підготовки технічного завдання може зайняти 30 і більше відсотків часу, відпущеного на створення всієї моделі.

Концептуальна (формалізована) постановка задачі моделювання

Етап концептуальної (формалізованої) постановки задачі моделювання виникає в тих випадках, коли через складність досліджуваного процесу прямий перехід від змістовного опису до математичної моделі виявляється неможливим.

На відміну від змістовної, концептуальна, або «природничо-наукова» (фізична, хімічна, біологічна й ін.), постановка задачі моделювання, як правило, формулюється членами робочої групи без залучення замовника, на підставі розробленого на попередньому етапі технічного завдання.

Концептуальна постановка завдання моделювання – це сформульований у термінах конкретних дисциплін (фізики, хімії, біології й ін.) перелік основних питань, що цікавлять замовника, а також сукупність гіпотез щодо властивостей і поведінки об'єкта моделювання. Найбільші труднощі на цьому етапі доводиться долати при розробленні моделей, що знаходяться «на стику» різних дисциплін. Це пов'язано з наявністю відмінностей традицій, понять і мов, використовуваних для опису одних і тих явищ у різних дисциплінах. Наприклад, такі поняття, як «прибуток» і «баланс», викликають зовсім різні асоціації у економіста й математика. Якщо економіст пов'язує із цими поняттями конкретне виробництво, ціну й собівартість продукції, то для математика вони мають більш формальний вигляд – тільки як результат розв'язку деяких математичних рівнянь. При цьому практично неможливо навчити математика мислити економічними категоріями, а економіста – як математика. Той та інший метод мислення має свої переваги й недоліки. Економіст ніколи не зробить тих помилок, які може допустити математик, який обходиться з моделлю формально, без необхідних знань у розглянутій предметній області. Разом з тим, використовуючи формальні перетворення математичних співвідношень, математик може одержати рішення, яке дуже складно одержати економістові, що користується своїми, «приземленими» методами й підходами.

Концептуальна постановка завдання є базою для концептуальної моделі об'єкта як деякої ідеалізованої моделі, записаної в термінах конкретних дисциплін. При цьому формулюється сукупність гіпотез про поведінку об'єкта, його взаємодії із навколишнім

середовищем, зміну внутрішніх параметрів, які є правдоподібними в тому розумінні, що для їхнього обґрунтування можуть бути представлені теоретичні доведення або експериментальні дані, що базуються на зібраній раніше інформації про об'єкт. У виборі й обґрунтуванні прийнятих гіпотез значною мірою проявляються мистецтво, досвід і знання, накопичені членами робочої групи при обстеженні об'єкта. Відповідно до прийнятих гіпотез визначається множина змінних, що описують стан об'єкта, а також перелік законів, яким вони підкоряються.

Математична постановка задачі

Декарту належить вислів: «Задача будь-якого виду зводиться до математичної задачі».

Мета математичної постановки задачі – одержання сукупності математичних співвідношень, що описують поведінку і властивості об'єкта моделювання, тобто, по суті, математичної моделі (математичного опису) об'єкта. Цей етап формується на базі закінченої концептуальної постановки задачі моделювання.

Формально математична модель являє собою більш-менш складну сукупність залежностей між вхідними й вихідними змінними, що відображають фізичну (хімічну або іншу) сутність процесів, що відбуваються у реальному об'єкті з тією або іншою точністю.

За принципом складання математичних моделей розрізняють *два принципово різні методи*: детермінований (аналітичний) і статистичний (експериментальний).

При використанні *аналітичного методу* математична модель об'єкта будується на основі фундаментальних теоретичних законів, справедливих за певних умов для всіх об'єктів досліджень даної галузі знань (наприклад, рівняння балансу маси, кількості руху, енергії й ін.) і співвідношень (фізичних рівнянь), що описують поведінку окремих об'єктів або їх сукупностей при діях різних зовнішніх факторів (наприклад, закон Гука в теорії пружності, рівняння Менделєєва-Клапейрона для ідеальних газів). Співвідношення другого роду через величезну різноманітність явищ природи набагато менш вивчені і в ряді випадків їх доводиться встановлювати самому дослідникові.

При використанні *статистичного методу* математичну модель об'єкта одержують шляхом обробки експериментальних даних, що дозволяє одержувати емпіричні або напівемпіричні залежності (кореляційні й регресійні співвідношення), що зв'язують між собою змінні й параметри, *але не відображають фізичної сутності* описуваних процесів. Цей метод вимагає обов'язкової наявності об'єкта моделювання, а отриманий математичний опис справедливий тільки у тій області зміни змінних, при яких проводилися експерименти.

Завершується етап математичної постановки задачі обов'язковим контролем правильності отриманої системи математичних співвідношень (не по суті, а за формальними ознаками), який полягає в проведенні ряду перевірок, таких, як:

- контроль розмірностей, згідно з яким прирівнюватися і складатися можуть лише величини однієї розмірності (крім емпіричних залежностей);
- контроль порядків, який полягає у грубій оцінці порядків величин, що складаються, що дозволяє іноді шляхом виключення малозначущих параметрів спростити модель;
- контроль характеру залежностей, що полягає у встановленні факту відповідності напрямку і швидкості зміни вихідних змінних моделі їх «фізичному» змісту;
- контроль екстремальних ситуацій, коли виконується перевірка виду математичних співвідношень і можливих результатів моделювання при наближенні деяких параметрів моделі або їх комбінацій до гранично допустимих значень, найчастіше до нуля або нескінченності;
- контроль початкових і граничних умов, що полягає у перевірці того, що ці умови дійсно накладені й використовуються у процесі одержання шуканого розв'язку;
- контроль математичної замкнутості, що полягає у перевірці того, що отримана система математичних співвідношень дає можливість, причому однозначно, розв'язати поставлену математичну задачу. Наприклад, якщо задача зводиться до відшукування n невідомих із деякої системи алгебраїчних рівнянь, то необхідно переконатися, що число рівнянь дорівнює n . Якщо їх менше n , то треба віднайти відсутні рівняння, а якщо

більше n , то або в системі наявні залежні між собою рівняння, або допущена помилка. Ця умова повинна виконуватися суворо, якщо рівняння математичного опису отримані аналітичним методом. А якщо ні, то можлива постановка завдання, при якому число рівнянь перевищує n , але самі рівняння задовольняються лише приблизно, а розв'язання шукається, наприклад, за методом найменших квадратів.

Якщо для математичної моделі отриманий позитивний результат усіх контрольних перевірок, математична модель є коректною, що відповідає поняттю математично коректно поставленій задачі.

Вибір методу розв'язання задачі і його обґрунтування

Як уже зазначалося (див. лекцію 1), математичне моделювання зводиться до розв'язання системи рівнянь математичного опису об'єкта моделювання з метою знаходження невідомих залежностей вихідних змінних від вхідних (динамічних або статичних характеристик). Для розв'язання цієї задачі використовуються методи, які можна розділити на дві більші групи: *аналітичні й алгоритмічні* (числові).

Якщо використовуваний метод дозволяє одержати розв'язок у вигляді аналітичних виразів, тобто виразів, у яких використовується не більше, ніж пораховувана кількість арифметичних операцій і перехід до границі, то такий метод відносять до *аналітичних методів*, наприклад

$$a + b\sqrt{x^3 + 4ac}; \quad (a) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n}\right)^n \quad (3.1)$$

Окремим випадком аналітичних виразів є *алгебраїчні вирази* (3.1), у яких використовується скінченне число арифметичних операцій, операцій піднесення до степеня і добування кореня. Дуже часто аналітичне розв'язання може бути представлено в елементарних або спеціальних функціях: показових, тригонометричних та ін. Для одержання значень цих функцій використовують розкладання в ряди (3.1.), при цьому залежно від числа утримуваних членів ряду точність одержуваних результатів буде різною. Такі методи розв'язків називаються *наближеними*.

Аналітичні методи розв'язків є більш цінними в тому плані, що дозволяють із меншими обчислювальними витратами вивчити властивості об'єкта моделювання, застосовуючи традиційно добре розвинені *математичні методи аналізу* аналітичних функцій. Важливо те, що застосування аналітичних методів у більшості випадків можливо без використання ЕОМ. Крім того, одержання розв'язання в аналітичному вигляді дозволяє досліджувати фундаментальні властивості об'єкта, його якісну поведінку, будувати нові гіпотези про його внутрішню структуру. Можливості аналітичних методів суттєво залежать від рівня розвитку відповідних розділів математики.

Останнім часом помітний потужний сплеск інтересу до аналітичних методів розв'язання задач, що пов'язане з появою великої кількості програмних пакетів для математичних символічних обчислень (*Matlab, Mathcad, Maple, Mathematica* та ін.). Спектр розв'язуваних цими пакетами завдань дуже великий і постійно розширюється. Застосування подібного інструментарію не тільки спрощує процедуру одержання розв'язку, але й полегшує наступний аналіз отриманого розв'язання за рахунок розвинених засобів візуалізації.


Однак існуючі в цей час пакети дозволяють одержувати аналітичні розв'язання тільки для відносно нескладних математичних задач. У більшості випадків при дослідженні моделей доводиться використовувати алгоритмічні підходи, серед яких необхідно розрізняти *числові й імітаційні*.

При *числовому підході* сукупність математичних співвідношень шляхом дискретизації моделі заміняється на їх кінцевовимірний аналог, тобто виконується перехід від функції безперервного аргументу до функції дискретного аргументу. Після цього розробляється обчислювальний алгоритм, тобто визначається послідовність арифметичних і логічних дій, які дозволять за скінченне число кроків одержати розв'язання (використовуючи ЕОМ!). Знайдений розв'язок дискретизованої задачі за умови досить малого кроку дискретизації приймається за наближене розв'язання початкової математичної задачі.

Якщо при числовому підході дискретизації піддається отримана раніше система математичних співвідношень, то при *імітаційному підході* на окремі елементи розбивається сам об'єкт досліджень. У цьому випадку система математичних співвідношень для об'єкта-системи в цілому не записується, а замінюється деяким алгоритмом, що моделює її поведінку і враховує взаємодію між елементами. Для розрахунку окремих елементів можуть застосовуватися як аналітичні, так і числові методи.

Використання як числового, так і імітаційного підходу не дозволяє одержати розв'язання задачі в аналітичній формі, що створює деякі труднощі при аналізі отриманих результатів. Оскільки застосування цих методів можливо винятково за наявності обчислювальної техніки, то їх ефективність прямо пов'язана з потужністю і швидкістю застосовуваних ЕОМ. *Незаперечною перевагою алгоритмічних методів розв'язання математичних моделей є відсутність принципів обмежень на складність моделі.*

Застосування будь-якого числового методу неминує призводити до появи похибок результатів розв'язання, серед яких необхідно зазначити такі:

- *неусувна похибка, пов'язана з неточним заданням початкових даних* (початкових і граничних умов, коефіцієнтів та ін.);
- *похибка методу*, пов'язана з дискретизацією (наприклад, при заміні похідної $y'(x)$ різницеvim аналогом  виникає похибка дискретизації, яка визначається величиною Δx);
- *помилка округлення*, пов'язана зі скінченною розрядністю представлення чисел в ЕОМ.

Алгоритмічний числовий метод, як і аналітичний наближений, завжди реалізується у вигляді алгоритму, до якого висуваються *вимоги забезпечення максимальної швидкодії і як можна меншої похибки*. Ці два показники між собою несумісні: чим менша похибка, тим більший затрачуваний машинний час. Для дуже малих значень помилки час обчислення може стати неприпустимо великим. Тому на практиці шляхом вибору із числа можливих варіантів *ефективного алгоритму*, такого, що забезпечує менше число операцій для досягнення заданої точності, домагаються деякого компромісу між точністю й затраченим часом. Ще однією важливою вимогою, що висувається до алгоритмів, є його *стійкість*, тобто забезпечення у ході обчислень обмеженого росту помилки.

Величезна різноманітність числових методів створює деякі труднощі при їхньому виборі в кожному конкретному випадку. Оскільки для розв'язання однієї й тієї самої задачі можна використовувати кілька альтернативних методів, то вибір конкретного методу виконується з урахуванням того, який із них більше підходить для даної моделі з погляду забезпечення ефективності, стійкості й точності результатів, а також більш освоєний і відомий членам робочої групи.

Реалізація математичної моделі у вигляді програми на ЕОМ

У випадку використання для розв'язання задач математичного моделювання числових або наближених методів виникає необхідність створення програм для ЕОМ, що реалізують відповідні алгоритми. Процес розроблення надійного й ефективного програмного забезпечення є не менш складним, ніж усі попередні етапи створення математичної моделі. Успішний розв'язок цього етапу можливий лише при певному оволодінні сучасними алгоритмічними мовами й технологіями програмування, знанні можливостей обчислювальної техніки й існуючого спеціального програмного забезпечення, наявності досвіду розв'язання подібних завдань.

Розроблене програмне забезпечення повинне бути якісним, надійним, мати «дружній» інтерфейс, бути таким, що просто модифікується й легко супроводжується.

Перевірка адекватності моделі

Як би добре не розроблялася математична модель, вона все-таки відображає фізичну дійсність із більшою або меншою точністю. *Основними джерелами виникаючих неточностей є:*

- помилки, закладені у законах (наприклад, класична механіка Ньютона і теорія відносності Ейнштейна, закони стану ідеальних і реальних газів та ін.);
- *принципова неможливість урахування всіх процесів і явищ* в об'єкті;
- *свідомі спрощення і прийняття системи припущень* (наприклад, про постійність параметрів);
- *ідеалізація процесів*, помилки у прийнятті гіпотез;
- *помилки обчислювального алгоритму*;
- *похибки округлень* при розрахунках в ЕОМ та ін.

Ступінь відповідності результатів досліджень, отриманих із використанням розробленої математичної моделі, результатам, які можна було б одержати при проведенні аналогічних випробувань на реальному об'єкті в ідентичних умовах, визначається *поняттям адекватності моделі*. Перш ніж переходити до перевірки адекватності моделі, необхідно переконатися у правильному функціонуванні всіх алгоритмів і програм, для чого виконати їхнє незалежне тестування й налагодження на тестових прикладах.

Перевірка адекватності моделі переслідує дві цілі:

- ✓ переконатися у справедливості сукупності гіпотез, сформульованих на етапі концептуальної і математичної постановок;
- ✓ установити, що точність отриманих результатів буде відповідати точності, зазначеної в технічному завданні.

Перевірка адекватності виконується шляхом порівняння результатів розв'язку математичної моделі з наявними експериментальними даними або з результатами, отриманими на інших математичних моделях, які були створені раніше і вже добре зарекомендували себе. У першому випадку говорять про перевірку *шляхом порівняння з даними експерименту*, у другому – *про порівняння з результатами розв'язання тестового завдання*.

Розрізняють *якісний і кількісний збіг* результатів. При якісному порівнянні потрібний лише збіг деяких характерних рис у поведінці досліджуваних змінних (наприклад, наявність екстремальних точок, знак величини, її зростання або зменшення й ін.). Іншими словами, проводиться оцінка виду функціональної залежності. Питання про кількісне порівняння можна ставити тільки після задовільного вирішення питання про якісний збіг результатів.

При виникненні проблем, пов'язаних з неадекватністю моделі, її корегування слід починати з послідовного аналізу всіх причин, що можуть призвести до розбіжності результатів моделювання й даних експерименту. У першу чергу потрібно досліджувати саму модель і оцінити ступінь її адекватності при різних значеннях варійованих параметрів (початкових і граничних умов, параметрів, що характеризують властивості об'єкта). Якщо модель неадекватна в області змінних, яка цікавить дослідника, то можна спробувати уточнити значення констант. Якщо в такий спосіб не вдається одержати позитивних результатів, то єдиною можливістю залишається зміна прийнятої системи гіпотез. Це, по суті, означає повернення до другого етапу процесу розроблення математичної моделі, що *може викликати* не тільки серйозну зміну математичної постановки задачі, але також і методів її розв'язання (наприклад, перехід від аналітичних до числових), повну переробку програмного забезпечення і новий цикл перевірки на адекватність.

Практичне використання побудованої моделі й аналіз результатів

Розроблені математичні моделі можуть бути використані:

- для вивчення властивостей і особливостей поведінки досліджуваного об'єкта при різних комбінаціях вихідних даних і в різних режимах;
- як моделюючі блоки в різних автоматизованих системах проектування (САПР) і автоматизованих системах управління;
- при побудові оптимізаційних моделей і моделей-імітаторів складних систем.

Незалежно від області можливого застосування створеної моделі всебічний аналіз результатів моделювання дозволяє:

- виконати модернізацію досліджуваного об'єкта, знайти його оптимальні характеристики або принаймні щонайкраще врахувати його поведінку і властивості;
- перевірити обґрунтованість гіпотез, прийнятих на етапі математичної постановки задачі, оцінити можливість спрощення моделі з метою підвищення її ефективності при збереженні точності;
- визначити допустиму область застосування моделі, що особливо важливо у випадку її використання для систем автоматичного управління;
- визначити у якому напрямку необхідно розбудувати модель надалі.

Тема 4. Побудова математичних моделей аналітичним методом.

Методологія застосування аналітичного методу.

Моделі гідродинаміки (математичний опис процесів переміщення речовини.

Побудова математичних моделей аналітичним методом.

Експериментальний метод побудови математичних моделей.

Експериментально-аналітичний метод отримання математичних моделей.

Як зазначалося раніше, при побудові математичних моделей використовують два види методів: аналітичний (теоретичний) і статистичний (експериментальний). Кожний із зазначених методів має специфічні особливості й відмінності, що найбільш яскраво проявляються на етапі математичної постановки задачі. Метою цієї й наступних лекцій буде вивчення характерних рис кожного з методів побудови математичних моделей стосовно процесів і апаратів хімічної технології.

Методологія застосування аналітичного методу

Аналітичний (детермінований, теоретичний, структурний) *метод* передбачає складання математичного опису об'єктів моделювання на основі детального вивчення і глибокого розуміння фізико-хімічних закономірностей процесів, що відбуваються у ньому. При цьому до складу математичної моделі вводяться залежності, що зв'язують між собою параметри і змінні, які характеризують досліджуваний об'єкт, у єдину систему рівнянь. Серед таких залежностей можуть бути вирази, що відображають фундаментальні закони збереження речовини й енергії, а також інші рівняння, які описують фізичні й хімічні процеси, що відбуваються у модельованій системі.

Метод базується на тому, що *реальний процес, який відбувається в об'єкті моделювання, розглядається як комбінація різних «елементарних» процесів*, що підкоряються закономірностям, які описуються певними співвідношеннями. Тому складання математичної моделі аналітичним методом повинне починатися з розчленовування технологічного процесу як єдиного цілого на окремі складові частини («елементарні» процеси), що відображають властивості якого-небудь одного класу явищ. У хімічній технології такими «елементарними» процесами можуть бути: саме хімічне перетворення, переміщення речовин (гідродинаміка), перенесення тепла й маси (тепло- і масопередача та ін.).

Аналітичний метод - найбільш надійний спосіб складання математичного опису, який має ряд істотних переваг, що полягають у такому:

- за допомогою цього методу можна якісно більш правильно описати об'єкт моделювання навіть за наявності недостатньо точних у кількісному відношенні параметрів;
- він дозволяє розробляти математичні моделі навіть за відсутності діючого об'єкта, як це часто буває при проектуванні нових процесів і апаратів;
- складений на основі цього методу математичний опис дає можливість із великою точністю прогнозувати результати перебігу процесу в будь-яких наперед заданих умовах, а також вивчати загальні властивості об'єктів, що належать до певного класу;

- він дає можливість поділу складного процесу на окремі складові й дослідження його вроздріб, що полегшує складання моделі процесу в цілому, а також можливість вивчення процесу на різних рівнях.

Методологія побудови математичного опису аналітичним методом визначається послідовністю виконання певних позицій (етапів). Спочатку *виділяється область (або області)*, для якої *будується модель процесу*. Характерною рисою такої області має бути те, що в її межах змінні є постійними або змінюються незначно. Цією областю може бути реактор, переріз або частина реактора, газова бульбашка або крапелька рідини. Як правило, модель завжди спрощує реальну систему.

Так, наприклад, у реакторі з мішалкою концентрації й густоти реагентів розподіляються однаково по всьому об'єму, а, отже, властивості потоку на виході з реактору будуть ідентичні властивостям усього вмісту реактора. Тому областю, для якої в цьому випадку необхідно скласти рівняння математичного опису, може служити сам реактор. У випадку трубчастого реактора концентрації реагентів змінюються безперервно по довжині реактора, навіть коли реактор працює в усталеному режимі. Але при цьому концентрація в будь-якому перерізі реактора може бути постійною, і тоді це буде та область, для якої необхідно скласти рівняння математичного опису.

Визначаються транспортні потоки, які течуть поперек границь виділеної області системи. Суть цього етапу полягає у визначенні всіх вхідних і вихідних потоків. Це можуть бути фізичні витрати, дифузійні потоки, а також потоки міжфазної передачі. *Записуються матеріальний (масовий) і за необхідності енергетичний (тепловий) баланси в словесній формі.*

Форма запису матеріального балансу в загальному вигляді може бути представлена так, як це показано у формулі 4.1.

Цей баланс може бути записаний як для всього апарата в цілому, так для окремої області (загальний баланс). Рівняння збереження маси може також застосовуватися до кожного хімічного компонента системи (баланс за речовиною). Також ці рівняння можна поширити на атомний рівень і застосовувати до хімічних елементів.

Енергетичний (тепловий) баланс необхідно скласти, коли для об'єкта є важливими температурні процеси. Наприклад, це характерно за наявності хімічної реакції, що викликає зміни температури в реакторній зоні. Для відкритої системи з енергетичним обміном поперек його границь енергетичний баланс у загальному вигляді може бути представлений так, як це показано на рис. 2.2.

Якщо накопичення речовини (енергії) відсутнє, тобто дорівнює нулю, то це статичний процес. А якщо ні, то це динамічний процес.

$$\boxed{\text{Накопичення енергії}} = \boxed{\text{Кількість енергії у вхідних потоках}} - \boxed{\text{Кількість енергії у вихідних потоках}} \pm \boxed{\text{Кількість енергії, що отримана (витрачена) в області}}$$

Рисунок 2.2 - Форма запису теплового балансу

Зображення кожного з матеріальних балансів у вигляді математичних виразів із урахуванням відповідних змінних.

Накопичення речовини

Зміна маси (кількості) деякого рідкого або твердого компонента в межах системи (області) може бути представлена у вигляді похідної маси за часом $\frac{dm_i}{dt}$, де m_i - маса i -ї речовини; t - час. З урахуванням об'єму області V і концентрації речовини c_i (кмоль/м³ або кг/м³) останній вираз для будь-якого компонента можна подати у вигляді

$$\frac{dm_i}{dt} = \frac{dV \rho}{dt} \quad (4.1)$$

Для урахування накопичення (зміни маси) газів може бути використане рівняння Менделєєва-Клапейрона, яке зв'язує концентрацію n_i i -ї речовини (у мольних частках) із

парціальним тиском P_i і температурою T : $p_i V = n_i R T$. У термінах концентрації це рівняння має вигляд

$$\frac{M_i P_i}{V R T} = \frac{M_i}{V} \quad (4.2)$$

де y_i - мольна частка і M_i - молекулярна вага i -го компонента у газовій фазі; P - повний тиск у системі. У цьому випадку процес накопичення для газової фази з урахуванням (4.1) і (4.2) отримує вигляд

$$\frac{dM_i}{dt} = \frac{M_i}{P} \frac{dP}{dt} + \frac{M_i}{R T} \frac{dT}{dt} \quad (4.3)$$

Для всієї газової системи рівняння (4.1.) отримує вид

$$\frac{dm}{dt} = \frac{dV \rho}{dt} \quad (4.4)$$

де ρ - густина газової фази.

Притікання і стікання речовини.

Для опису процесів масопереносу використовуються закони *конвективного і молекулярного перенесення*.

Конвективний потік повної маси M визначається як добуток об'ємної витрати w й густини ρ :

$$M = w \rho \quad (4.5)$$

Конвективний потік для маси за i -м компонентом

$$M_i = w c_i \quad (4.6)$$

Дифузійний потік (молекулярне перенесення) у технічних додатках, як правило, виражають відповідно до закону Фіка для молекулярної дифузії:

$$j_i = -D_i \frac{dc_i}{dx} \quad (4.7)$$

де j_i - є поперечним питомим потоком ($\text{кмоль} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}$); $\frac{dc_i}{dx}$ - градієнт концентрації; D_i - коефіцієнт дифузії будь-якого компонента. Знак мінус свідчить, що відповідно до закону Фіка цей потік завжди спрямований у бік зменшення концентрації.

При істинній молекулярній дифузії константа дифузії дорівнює молекулярному коефіцієнту дифузії i -го компонента D_i в системі. Для інших випадків, наприклад, дифузії у пористих матеріалах або для турбулентних застосувань дифузії використовується його ефективне значення, яке повинне бути визначене експериментально.

Для обчислення маси потоку дифузії $M_a = j_i S$ необхідно знати площу поверхні S , через яку вона відбувається.

Можливе притікання або стікання для виділеної області може відбуватися за допомогою *масопередачі* (міжфазового перенесення). Для міжфазового переходу речовини із фази у фазу, який відбувається поперек через площу поверхні S , яка розділяє дві фази, повний масовий потік визначається за формулою

$$J = K S \Delta c \quad (4.8)$$

де J - повний масовий потік, кмоль/с ; S - площа поверхні поділу для масообміну; Δc - концентраційна рушійна сила; K - коефіцієнт масообміну, м/с . Важливо звернути увагу на те, що концентраційна рушійна сила подається як різниця між фактичною і рівноважною концентрацією.

Продукційні потоки

Так звані продукційні потоки враховують виникнення або витрату речовини за рахунок хімічної реакції і також повинні бути включені в рівняння математичного опису. Ці потоки, що являють собою швидкість хімічної реакції щодо певної речовини, визначаються у такий спосіб:

$$R_A = r_A V, \quad (4.9)$$

де r_A - кількість речовини **A**, яка утворюється в одиниці об'єму V реактора за одиницю часу..
Зображення *енергетичного (теплого) балансу у вигляді математичних співвідношень*.

У цілому при складанні енергетичного балансу необхідно дотримуватися раніше сформульованих принципів. Однак енергетичний баланс значно більш складний через більшу різноманітність процесів, які можуть викликати температурні зміни у хімічних системах. Розглянуті нижче питання дещо спрощені, але в цілому дозволяють зрозуміти основні принципи моделювання неізотермічних процесів.

Енергетичний баланс базується на *законі збереження енергії й на першому законі термодинаміки*. Величина внутрішньої енергії системи завжди залежить не тільки від температури, але також і від її маси й складу. Із цієї причини *матеріальний баланс є необхідним фундаментом енергетичного балансу*.

Розглянемо основні складові рівнянь енергетичного балансу, що зображені на рис. 2.2.

Накопичення енергії

Кількість накопиченої енергії у виділеній області *при припущенні про незмінність маси* речовини, що протікає через її поперечний переріз, визначається як сумарне накопичення за складовими матеріального балансу:

$$\left(\sum_{i=1}^S (n_{i,вих} c_{p_i,вих}) \right) \frac{dT}{dt} = V \rho c_p \frac{dT}{dt}, \quad (4.10)$$

де n_i , c_{pi} - число молів і питома мольна теплоємність i -ї речовини відповідно.

Кількість енергії у вхідних і вихідних потоках

Надходження енергії в систему із вхідними потокам і витрата її з вихідними можлива різними способами. Зокрема, кількість енергії у конвективних теплових потоках визначається у такий спосіб:

$$F \sum_{i=1}^S c_{i,вх} \int_{T_{вх}}^{T_{вх}} c_{pi} dT_{вх} = F \rho c_p (T_{вх} - T_{вих}), \quad (4.11)$$

де $c_{i,вх}$ - концентрація i -ї речовини у вхідному потоці; $T_{вх}$, $T_{вих}$ - температура вхідного й вихідного потоків; F - масова витрата потоку.

Кількість енергії, передана через поверхню S :

$$K_{mn} S (T_0 - T_1), \quad (4.12)$$

де K_{mn} - коефіцієнт теплопередачі; T_0 , T_1 - температура на різних сторонах поверхні.

Кількість енергії, що отримана або витрачена в області

Ця енергія, як правило, пов'язана із джерелами виникнення або поглинання теплоти. Як приклад можна навести тепловий ефект хімічного процесу. Якщо теплота j -ї реакції $\pm \Delta H_j$, то кількість теплоти, що утворюється в результаті хімічного процесу:

$$Q_{реакц} = \sum_{j=1}^k \Delta H_j r_j, \quad (4.13)$$

де r_j - кількість, що утворюється в результаті реакції j -го продукту. Наприклад, для хімічного процесу, обумовленого реакціями:



сумарна кількість теплоти, що надходить (що винесена) через поверхню, дорівнює

$$Q_{реакц} = (-\Delta H_1) k_1 c_A c_B^2 + (-\Delta H_2) k_2 c_D c_B^2.$$

Доповнення балансових рівнянь математичного опису різними співвідношеннями таким чином, щоб число рівнянь дорівнювало числу невідомих вихідних змінних.

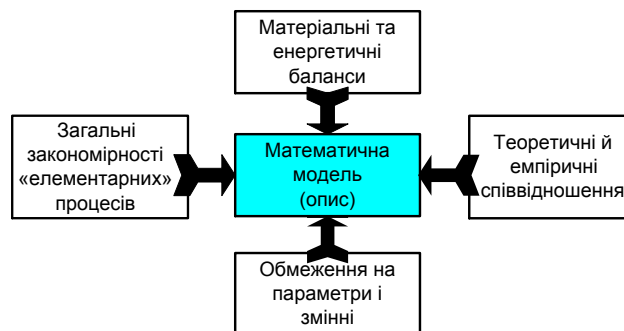


Рисунок 2.3 - Схема отримання математичного опису (моделі) аналітичним методом

Таких співвідношень, що визначають найважливіші залежності між змінними досліджуваних фізико-хімічних процесів, як теоретичних, так і отриманих з експериментів, велика кількість. Як приклад можна навести:

- константа швидкості хімічної реакції як функція концентрації й температури, яка виражається рівнянням Ареніуса $k = k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$, де k_0 - постійний передекспоненційний множник; E - енергія активації; R - універсальна газова стала; T - абсолютна температура;
- стехіометричні коефіцієнти речовин, що беруть участь у хімічній реакції, виражені як функції концентрації й температури;
- співвідношення для коефіцієнтів масообміну й ін.

Визначення обмежень на змінні й параметри процесу.

При складанні математичного опису більшості реальних процесів необхідно брати до уваги *об'єктивно існуючі обмеження* на діапазон зміни ряду параметрів. Наприклад, при моделюванні процесу ректифікації багатокомпонентних сумішей для будь-якого ступеня розділення повинна виконуватися умова, що сума концентрацій усіх компонентів дорівнює одиниці, й концентрація будь-якого компонента може бути тільки позитивною величиною у межах від 0 до 1. Багато фізичних величин не можуть набувати негативних значень.

У цілому склад і процедура одержання математичної моделі аналітичним методом можуть бути подані у вигляді схеми, показаної на рис. 2.3.

Аналітичний метод одержання математичної моделі, незважаючи на свою привабливість, має і серйозні *недоліки*, серед яких необхідно зазначити:

- труднощі одержання надійної теорії складних процесів;
- неможливість використання методу при невідомому механізмі процесу;
- більші затрати часу на розроблення;
- високі вимоги до рівня підготовки фахівців, що беруть участь у розробленні.

Моделі гідродинаміки (математичний опис процесів переміщення речовини)

Будь-який хіміко-технологічний процес, як правило, супроводжується переміщенням (рухом) матеріальних потоків рідини, газу або твердих частинок. Потoki можуть бути однофазними, тобто цілком складатися з однієї фази, яка переміщається в деякому об'ємі апарата, і багатофазними (зокрема двофазними), коли процес переміщення відбувається в умовах взаємодії декількох фаз (наприклад, газ — рідина, рідина — тверде тіло, газ — тверде тіло). Тому при складанні математичної моделі особливе значення набуває опис руху (гідродинаміки) потоків речовин.

Однак гідродинаміка реальних потоків настільки складна, що в даний момент є можливість скласти *в загальному вигляді* лише рівняння для однофазних потоків (наприклад, відоме рівняння Нав'є — Стокса), але розв'язок навіть цих рівнянь можна одержати тільки в окремих випадках. Для більш складних систем (багатофазні потоки) поки не вдається скласти рівняння гідродинаміки навіть у загальному вигляді. Так, для найпростішого з багатофазних — двофазного потоку типу «газ — рідина» - рівняння руху не можуть бути записані через неможливість задання граничних умов на нестационарній поверхні поділу фаз.

Таке складне становище змушує при складанні математичних описів використовувати більш просту, наближену уяву про внутрішню структуру потоків.

Відомо, що *структура технологічного середовища, що перебуває в русі, характеризується насамперед мірою перемішування частинок потоку, якою визначається поле концентрацій і градієнт температури*. Ця важлива обставина стала передумовою для виділення за ознакою *міри перемішування* певних типових моделей потоків, що рухаються.

До таких типових моделей насамперед належать *модель ідеального перемішування і модель ідеального витіснення*. Хоча ці моделі теоретичні й відповідають ідеальним потокам, однак у ряді випадків їх із достатньою точністю можна використовувати для опису реальних потоків. Крім перелічених, до типових моделей гідродинамічних потоків належать *дифузійна, коміркова й комбіновані моделі* (потоки із застійною зоною, байпасуванням та ін.). Дифузійна і коміркова моделі значно точніше характеризують реальні потоки. Ці моделі при граничних ідеалізованих умовах переходять в одну з теоретичних моделей — ідеального витіснення або ідеального перемішування. Комбіновані моделі також добре представляють реальні потоки у складних об'єктах і отримуються комбінацією більш простих моделей, кожна з яких відповідає окремій ділянці складного реального потоку.

Моделі структури потоку (моделі гідродинаміки) в математичному сенсі подаються у вигляді диференціальних рівнянь, які виражають зв'язок між найбільш характерними параметрами і змінними процесу. Для хіміко-технологічних об'єктів цей зв'язок доцільно знаходити, виходячи з аналізу явищ переміщення й розподілу речовини в потоці. Тому *універсальним видом гідродинамічної математичної моделі є рівняння, що характеризує зміну концентрації речовини в потоці, яка обумовлюється тільки її рухом*.

Оскільки в такому елементарному процесі переміщення речовини зміна концентрації викликається лише одними гідродинамічними факторами, то при розробленні гідродинамічних моделей береться умова, що швидкість хімічної реакції $w_r = 0$.

У ході складання математичного опису гідродинаміки нерідко доводиться долати деякі протиріччя і приймати компромісні рішення. Чим більше використовується параметрів при побудові опису гідродинаміки процесу, тим точніше модель буде відображати реальний процес. Але й рівняння при цьому ускладнюються настільки, що на практиці знайти їхній розв'язок стає досить важко або неможливо. Занадто простий опис, який можна одержати, якщо прийняти ряд спрощень і не врахувати частину параметрів, навпаки, розв'язується легко. Однак цей шлях, як правило, не приводить до позитивних результатів, оскільки результати розв'язку занадто спрощених математичних описів можуть неприпустимо відрізнятись від аналогічних характеристик реального процесу. Тому при формулюванні припущень, прийнятих при складанні математичного опису гідродинаміки процесу, необхідно ретельно аналізувати наявні теоретичні відомості й експериментальні дані для того, щоб математична модель достатньою мірою відображала реальний процес.

В остаточному підсумку побудована математична модель структури потоку повинна:

- достатньо добре відображати фізичну сутність реального потоку і у той самий час мати досить простий математичний опис;
- дозволяти знаходити параметри (коефіцієнти рівнянь) експериментальним або розрахунковим способом;
- бути зручною для використання при розрахунках конкретних хіміко-технологічних процесів.

При моделюванні реального апарата можна застосовувати як модель одну з ідеальних структур, якщо реальний потік із припустимим наближенням відповідає моделі ідеального перемішування або ідеального витіснення, або яку-небудь модель реального потоку (дифузійну, коміркову, комбіновану) в іншому випадку. Зрозуміло, кожному об'єкту буде відповідати своя модель. Це може бути як одна з типових моделей, так і відмінна від них, побудована для конкретного випадку.

Тема 5. Модель ідеального перемішування.

Модель ідеального перемішування. Характеристика моделі.

Модель ідеального витіснення. Характеристика моделі. Диференціальне рівняння моделі. Розв'язання диференціального рівняння моделі.

Коміркова модель. Коміркова модель. Характеристика моделі. Математичний опис коміркової моделі. Розв'язання системи рівнянь коміркової моделі

Характеристика моделі

Модель ідеального перемішування являє собою ідеалізований потік і є теоретичною моделлю. Згідно із цією моделлю припускається, що потік, який надходить в апарат, миттєво розподіляється по всьому об'єму внаслідок повного (ідеального) перемішування частинок середовища. При цьому концентрація розподіленої речовини в усіх точках апарата і у вихідному потоці з нього однакова. Схематичне зображення, що пояснює ідею моделі ідеального перемішування, наведено на рис. 2.4.

Диференціальне рівняння моделі

Виведемо математичну залежність, що описує розподіл концентрації в апараті з об'ємом зони ідеального перемішування V в часі.

Кількість речовини (масовий потік) q у будь-якому місці системи в загальному випадку можна представити як добуток

$$q = wc, \quad (5.1.)$$

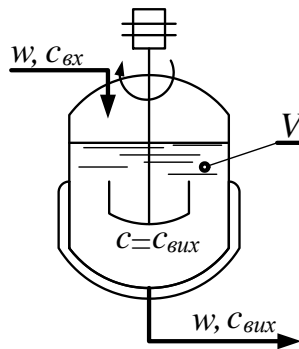


Рисунок 2.4 - До пояснення ідеї моделі ідеального перемішування

де w — об'ємна швидкість потоку, що надходить у зону ідеального перемішування і виходить з неї (для проточних систем припускається, що w зберігає постійне значення у будь-якому місці), m^3/c ; c - концентрація речовини в потоці в будь-якій точці об'єму апарата, mol/m^3 .

З урахуванням цього для об'єкта (рис. 2.4) вхідний $q_{вх}$ і вихідний $q_{вих}$ потоки будуть

$$q_{вх} = wc_{вх}, \quad (5.2-2a)$$

$$q_{вих} = wc_{вих}, \quad (5.2-2б)$$

де $c_{вх}$, $c_{вих}$ — концентрація речовини в потоці відповідно на вході й виході апарата.

В усталеному режимі, коли $c_{вх} = const$, справедлива рівність $q_{вх} = q_{вих}$, і накопичення маси речовини в апараті не відбувається, тобто скільки речовини надходить в апарат, стільки з нього і виходить у будь-який момент часу. Однак у загальному випадку може виникнути, наприклад, збурювання за складом потоку на вході. Припустимо, що вхідна концентрація $c_{вх}$ у якийсь момент часу збільшилася. При цьому рівновага, що встановилася раніше, порушується, і рівність вхідного й вихідного потоків не дотримується. У результаті в апараті за час t буде акумулюватися деяка кількість речовини, що може бути визначена з виразу в інтегральній формі:

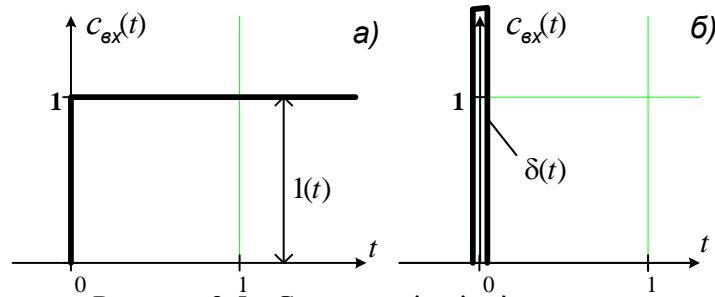


Рисунок 2.5 - Стандартні вхідні впливи:
а) ступінчастий; б) імпульсний

$$\Delta M = \int_0^t (q_{ex}(t) - q_{eux}(t)) dt. \quad (5.3)$$

Перетворимо рівняння (5.3.), розділивши обидві його частини на V (об'єм реактора) і підставивши замість величин q_{ex} , q_{eux} їх вирази з 5.2):

$$\frac{\Delta M}{V} = \frac{w}{V} \int_0^t (c_{ex}(t) - c_{eux}(t)) dt. \quad (5.4)$$

Ліва частина рівняння (5.4.) — це зміна кількості речовини, віднесена до одиниці об'єму, тобто зміна концентрації Δc , яку можна записати у вигляді

$$\frac{\Delta M}{V} = \Delta c, \quad (5.5)$$

де $c(t)$ — концентрація у будь-який момент часу (змінна величина); $c(0) = c_{con}$ — величина концентрації до моменту збурювання. Тоді рівняння (5.4) з урахуванням (5.5)

$$c(t) - c(0) = \frac{w}{V} \int_0^t (c_{ex}(t) - c_{eux}(t)) dt.$$

Отриманий вираз являє собою математичний опис моделі ідеального перемішування в інтегральній формі. У результаті диференціювання рівняння (5.5.) отримаємо закон зміни концентрації в часі в розглянутому потоці або математичний опис моделі ідеального перемішування в диференціальній формі:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{w}{V} (c_{ex} - c). \quad (5.6)$$

Відношення $V/w = \tau$ (зворотне записаному у формулі (5.6)) характеризує середній час знаходження частинок потоку у зоні ідеального перемішування; його прийнято називати *часом перебування* частинок в апараті й позначати грецькою літерою τ (тау). Час перебування є основним параметром моделі ідеального перемішування, який визначається експериментально або розрахунковим шляхом. Диференціальне рівняння моделі ідеального перемішування часто записують з урахуванням параметра τ :

$$\frac{dc}{dt} = \frac{1}{\tau} (c_{ex} - c). \quad (5.7)$$

За видом моделі ідеального перемішування — за видом рівнянь (5.6.) або (5.7.) — видно, що *це модель із зосередженими параметрами*, оскільки основна змінна змінюється тільки в часі. Рівняння (5.6.) у літературі іноді зустрічається і у такому вигляді:

$$V \frac{dc}{dt} = w(c_{ex} - c). \quad (5.8)$$

Рівняння (5.8) відображає розподіл концентрації речовини в об'ємі зони з гідродинамічною структурою ідеального перемішування. Аналогічне за формою рівняння може бути отримане, якщо розглянути зміну іншої характерної змінної потоку, наприклад,

температури T , у потоці теплоносія зі структурою ідеального перемішування. Тоді рівняння

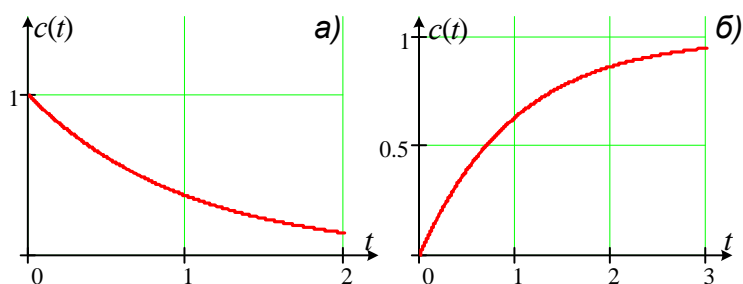


Рисунок 2.6 - Характеристики моделі ідеального перемішування:

а) імпульсна (С-крива); б) перехідна (F-крива)

(5.8) набуде вигляд

$$Vc_T \frac{dT}{dt} = wc_T (T_{ex} - T), \quad (5.9)$$

де c_T — теплоємність речовини потоку; T_{ex} , T — температура на вході й у будь-якій точці зони ідеального перемішування відповідно.

Рівняння (5.9.) характеризує розподіл температури в потоці з гідродинамічною структурою ідеального перемішування.

Розв'язання диференціального рівняння моделі

Запишемо диференціальне рівняння (5.7.) у стандартному вигляді

$$\tau \frac{dc}{dt} + c = c_{ex}. \quad (5.10)$$

Розв'язок цього рівняння при *ненульовій* правій частині (як неоднорідного диференціального рівняння) визначає зміну концентрації речовини в зоні ідеального перемішування під дією вхідної змінної – зміни концентрації вхідного потоку c_{ex} . Характер зміни c_{ex} у загальному випадку може бути довільним. Для того щоб можна було порівнювати між собою поведінку різних динамічних систем як вхідні випробувальні сигнали, найчастіше використовуються сигнали двох стандартних видів: *ступінчастий та імпульсний*.

Ступінчастий стандартний сигнал (див. рис. 2.5а) із математичним описом $1(t)$ являє собою миттєву стрибкоподібну зміну рівня від нульового до одиничного значення (відкриття засувки, увімкнення напруги). Реакцію системи на такий вид сигналу називають *перехідною характеристикою* (іноді її називають також «розгінною характеристикою»). У літературі за методами моделювання графік перехідної характеристики іноді зустрічається за назвою *F-кривої*.

Імпульсний стандартний сигнал (див. рис. 2.5б) $\delta(t)$ - це ідеалізований сигнал, який може бути представлений у вигляді імпульсу нескінченно малої тривалості й нескінченно великої висоти із площею, що дорівнює одиниці, але не може бути фізично реалізований. Незважаючи на неможливість реалізованості, він надає певні зручності при аналітичному розв'язку. Реакція системи на сигнал такого виду називається *імпульсною перехідною характеристикою* (функцією ваги). У літературі за методами моделювання графік імпульсної перехідної характеристики іноді зустрічається за назвою *С-кривої*.

Для об'єкта, структура потоку в якому відповідає моделі ідеального перемішування, розв'язки диференціального рівняння (5.10.), що відповідають зазначеним стандартним сигналам, отримані у вигляді (див. рис. 5.6):

- при ступінчастому стандартному сигналі на вході

$$c(t) = 1 - e^{-t/\tau}; \quad (5.11)$$

- при імпульсному стандартному сигналі на вході

$$c(t) = e^{-t/\tau}. \quad (5.12)$$

На рисунках 2.6а і 2.6б показані імпульсна й перехідна характеристики, побудовані у

відповідності до виразів для імпульсної (5.11) і перехідної (5.12) функцій при $\tau = 1$.

Умови фізичної реалізованості моделі ідеального перемішування

У хімічній технології наближення до умов ідеального перемішування досягається установкою в апаратах спеціальних мішалок. Тоді процеси, що відбуваються в реальних апаратах, у багатьох випадках можуть із достатнім для практики наближенням описуватися моделлю ідеального перемішування. Щонайкраще ця модель відповідає реальним потокам у проточних апаратах із мішалкою, у яких висота L мало відрізняється від діаметра d , мішалка створює високий ступінь перемішування й об'ємна швидкість потоків w невелика. У подібних випадках за рахунок інтенсивного

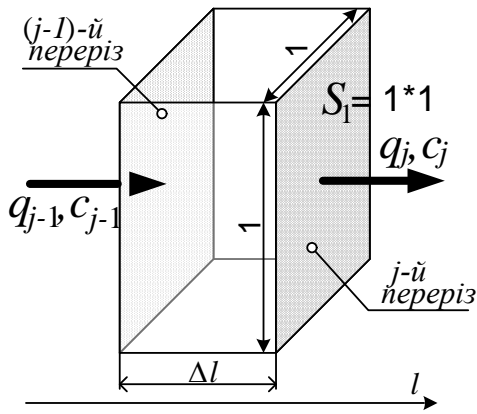


Рисунок 2.8 - Елементарний об'єм зони ідеального витіснення

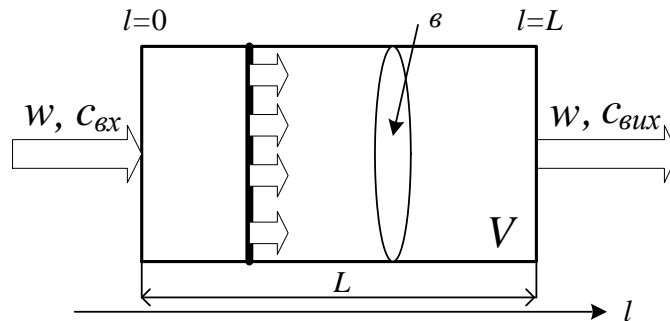


Рисунок 2.7 - До пояснення ідеї моделі ідеального витіснення

перемішування можна досягти такого стану, коли концентрація речовини у всіх точках об'єму апарата стає практично однаковою, тобто структура потоку наближається до моделі ідеального перемішування.

Модель ідеального витіснення. Характеристика моделі

Схематичне зображення моделі ідеального витіснення показано на рис. 2.7. Модель ідеального витіснення — це теоретична модель із ідеалізованою структурою потоку, що знаходиться в русі, відповідно до якої приймається поршнева течія без перемішування уздовж потоку при рівномірному розподілі концентрації речовини в напрямку, перпендикулярному до руху. При цьому час перебування всіх частинок у зоні ідеального витіснення однаковий й дорівнює відношенню об'єму зони витіснення до об'ємної витрати рідини (або газу) $\tau = \frac{V}{w}$.

Диференціальне рівняння моделі

Для складання математичного опису моделі ідеального витіснення виділимо й розглянемо елементарний об'єм зони потоку витіснення (див. рис. 2.8) об'ємом ΔV , довжиною Δl й перерізом S_1 , що дорівнює одиниці ($S_1 = 1*1$).

Вхідний і вихідний потоки для розглянутого J -го елементарного об'єму відповідно до рівняння (5.1) будуть

$$q_{вх} = q_{j-1} = w c_{j-1} = v_{сеп} S_1 c_{j-1}, \quad (5.13a)$$

$$q_{вих} = q_j = w c_j = v_{сеп} S_1 c_j, \quad (5.13б)$$

де $q_{вх} = q_{j-1}$ і $q_{вих} = q_j$ - потоки (кількості речовини) на вході й виході елементарного J -го об'єму, тобто в $(j-1)$ -му і J -му перерізах; c_{j-1} , c_j - концентрація на вході й на виході елементарного J -го об'єму; S_e — площа перерізу зони ідеального витіснення; $v_{сеп} = w/S_e$

— середня лінійна швидкість потоку (для проточних систем вважається, що v_{cep} зберігає середнє значення в усій зоні витіснення).

Аналогічно, як і в випадку ідеального перемішування, кількість речовини ΔM , яка буде акумулюватися в елементарному об'ємі ΔV при порушенні режиму рівноваги, тобто коли $q_{j-1}(t)$ не дорівнює $q_j(t)$, можна виразити рівнянням (з урахуванням того, що $S_1 = 1$)

$$\Delta M = \int_0^t (q_{j-1}(t) - q_j(t)) dt = -v_{cep} \int_0^t (c_j(t) - c_{j-1}(t)) dt. \quad (5.14)$$

Якщо розділити величину збільшення кількості речовини ΔM на об'єм ΔV , то одержимо вираз для опису зміни концентрації в розглянутому j -му елементарному об'ємі Δc_j у вигляді

$$\Delta c_j = \frac{\Delta M}{\Delta V} = -\frac{v_{cep}}{\Delta V} \int_0^t \Delta_1 c dt, \quad (5.15)$$

де $\Delta_1 c = c_{j-1} - c_j$ — різниця концентрацій у суміжних j -му і $(j-1)$ -му об'ємах; $\Delta c_j = c_j - c_j(0)$ — зміна концентрації в елементарному об'ємі; $c_j(0)$ — значення концентрації до початку збурювання; $c_j(t)$ — концентрація у будь-який момент часу (змінна величина); $\Delta V = S_1 \Delta l = \Delta l$ (враховуючи, що $S_1 = 1$). Оскільки Δl не залежить від часу t , рівняння (2.15.) можна переписати у вигляді

$$\Delta c_j = c_j(t) - c_j(0) = -v_{cep} \int_0^t \frac{\Delta_1 c}{\Delta l} dt. \quad (5.16)$$

У результаті диференціювання правої й лівої частин рівняння (5.16) за часом і граничного переходу при $\Delta l \rightarrow 0$ одержуємо

$$\frac{\partial c_j}{\partial t} = -v_{cep} \lim_{\Delta l \rightarrow 0} \frac{\Delta_1 c}{\Delta l}, \quad (5.17)$$

або остаточно

$$\frac{\partial c_j}{\partial t} = -v_{cep} \frac{\partial c}{\partial l}. \quad (5.18)$$

Рівняння (5.17) описує зміна концентрації $c(l, t)$ в елементарному j -му об'ємі ΔV зони ідеального витіснення, але оскільки режим потоку поршневий, то рівняння справедливе і для всього потоку. Тому диференціальне рівняння моделі ідеального витіснення в загальному вигляді записують так:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v_{cep} \frac{\partial c}{\partial l}. \quad (5.19)$$

Таким чином, математична модель режиму ідеального витіснення являє собою диференціальне рівняння в частинних похідних, оскільки основна змінна процесу — концентрація $c(l, t)$ — змінюється в часі і у просторі. Як відомо, це модель із розподіленими параметрами.

Якщо замість середньої лінійної швидкості потоку $v_{пер}$ в рівняння (5.19) підставити її значення $v_{cep} = w/S_e$, то воно набуває такого вигляду

$$S_e \frac{\partial c}{\partial t} = -w \frac{\partial c}{\partial l}. \quad (5.20)$$

Рівняння (5.20) відображає розподіл речовини (концентрації) у потоці з гідродинамічною структурою ідеального витіснення. Аналогічне за формою рівняння може бути також виведене, якщо розглянути зміну іншої характерної змінної, наприклад, температури T , у потоці теплоносія зі структурою ідеального витіснення. Тоді зміну $T(l, t)$ в потоці теплоносія за рахунок гідродинаміки можна зобразити так:

$$S_{\theta} c_T \frac{\partial T}{\partial t} = -c_T w \frac{\partial T}{\partial l}, \quad (5.21)$$

де c_T — теплоємність речовини потоку теплоносія; T — температура у будь-якій точці зони ідеального витіснення. Модель у вигляді рівняння (5.21) часто використовується для опису гідродинаміки потоку теплоносіїв у теплообмінних апаратах, що працюють за принципом витіснення.

Розв'язання диференціального рівняння моделі

Для об'єкта, структура потоку в якому відповідає моделі ідеального витіснення, розв'язки диференціального рівняння (5.20), відповідні стандартним сигналам, будуть такі:

- при ступінчастому стандартному сигналі на вході (перехідна функція)

$$c(t) = \mathbf{1}(t - \tau); \quad (5.22)$$

- при імпульсному стандартному сигналі на вході (функція ваги)

$$c(t) = \delta(t - \tau). \quad (5.23)$$

Перехідна й імпульсна перехідна характеристики, побудовані відповідно до виразів для

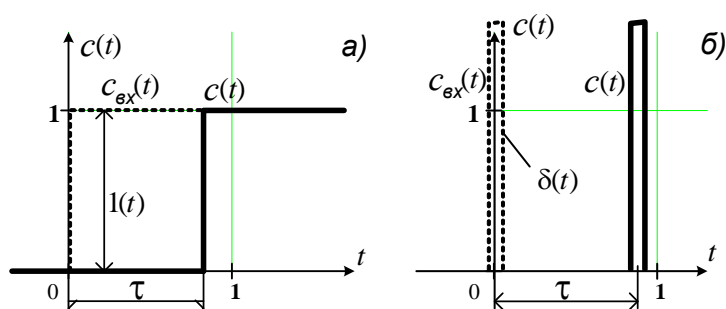


Рисунок 2.9 - Характеристики моделі ідеального витіснення:

а) перехідна (F-крива); б) імпульсна (C-крива)

перехідної (5.22) і імпульсної перехідної (5.23) функцій, подані на рис. 2.9а і 2.9б відповідно. Із графіків можна побачити, що вихідні криві повторюють за формою входні впливи, але тільки зі зміщенням за часом на величину τ . Звідси випливає практичний результат, яким користуються при експериментальному вивченні невідомої структури потоку в апараті: якщо при стандартних ступінчастому або імпульсному входних сигналах на виході потоку реєструється їхнє повторення зі зміщенням за часом, то такий потік відповідає моделі ідеального витіснення.

Умови фізичної реалізованості моделі ідеального витіснення

Модель ідеального витіснення широко використовується в хімічній технології при описі апаратів, що працюють за принципом витіснення (наприклад, трубчастих реакторів, теплообмінників). Перевагами моделі є відносна простота розв'язку рівнянь математичного опису, побудованого із застосуванням даної моделі, і припустимий ступінь відтворення реальних гідродинамічних умов. На практиці трубчасті апарати з великим відношенням довжини трубок до їхнього діаметра $L/d > 20$ при турбулентному русі рідини або газу ($Re > 2300$) можуть описуватися як моделі ідеального витіснення. Це пояснюється тим, що за таких умов поздовжнє перемішування незначне і мало спотворює потік витіснення, а турбулентний рух при цьому забезпечує рівномірний розподіл концентрації по перерізу апарата.

Коміркова модель. Характеристика моделі

Типові моделі ідеального перемішування й ідеального витіснення у багатьох випадках можуть застосовуватися для відтворення структури й гідродинамічних властивостей потоків у різних апаратах хімічної технології. Однак ідеальні моделі в ряді випадків неадекватні реальному процесу. Із цієї причини для трубчастих і колонних апаратів, а також для каскадів послідовно розташованих реакторів зручніше представляти реальні потоки у вигляді так званої коміркової моделі.

Фізична сутність коміркової моделі полягає в тому, що матеріальний потік, що рухається в апаратах, розглядається як такий, що складається з ряду послідовно з'єднаних комірок (рис. 2.10). При цьому вважається, що в кожній із таких комірок потік має структуру

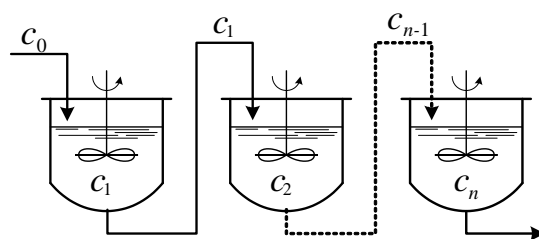


Рисунок 2.10 - Схематичне зображення коміркової моделі
(каскад реакторів ідеального перемішування)

ідеального перемішування, а між комірками перемішування відсутнє. Кількість можливих комірок ідеального перемішування n є параметром, що характеризує коміркову модель реального потоку. Якщо $n=1$, коміркова модель переходить у модель ідеального перемішування, а якщо $n \rightarrow \infty$ — у модель ідеального витіснення. Чим більше брати комірок, кожна з яких відтворює режим ідеального перемішування, тим більше весь апарат відповідає моделі ідеального витіснення. Практичні розрахунки показують, що брати занадто велике n недоцільно, оскільки коміркова модель уже із числом комірок $n > 10$ із достатньою точністю відтворює властивості потоку ідеального витіснення.

Математичний опис коміркової моделі

Структура потоку у комірковій моделі відповідає, наприклад, киплячому шару (псевдоскраплення) у колонному апараті або потоці в каскаді реакторів ідеального перемішування.

При отриманні коміркової моделі беруться такі припущення: у кожній комірці потік має структуру повного перемішування, і концентрація в ній \bar{c}_i ($i = \overline{1, n}$) не змінюється в об'ємі (i — індекс комірки); між комірками перемішування відсутнє; об'ємна швидкість v не змінюється по довжині і по перерізу потоку.

Для зручності припускається, що об'єми кожної з передбачуваних n комірок однакові й дорівнюють V_1 ; сума об'ємів усіх комірок дорівнює об'єму зони ($V = nV_1$); середній час перебування частинок у кожній комірці $\tau_1 = \frac{V_1}{v} = \frac{\tau}{n}$, а середній час перебування в системі $\tau = \frac{V}{v}$. Оскільки в кожній комірці потік перебуває у стані ідеального перемішування, то для кожної i -ї комірки справедливе рівняння моделі ідеального перемішування (див. (5.7))

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{1}{\tau_1} (c_{i-1} - c_i). \quad (5.24)$$

Якщо врахувати, що $\tau_1 = \tau/n$, то рівняння (5.2-24) набуває вигляду

$$\frac{1}{n} \frac{dc_i}{dt} = \frac{1}{\tau} (c_{i-1} - c_i), \quad (5.25)$$

де $i = \overline{1, n}$.

Рівняння (5.25) являє собою компактний запис математичного опису зміни концентрації у кожній із n комірок, тобто є системою рівнянь коміркової моделі.

Розв'язання системи рівнянь коміркової моделі

Розв'язання системи диференціальних рівнянь коміркової моделі каскаду, що складається з реакторів однакового об'єму, можна одержати у загальному вигляді аналітично. У випадку дії на вході одиничного імпульсу шуканим розв'язком вихідного математичного опису коміркової моделі каскаду реакторів (імпульсна перехідна функція, або С-крива) є

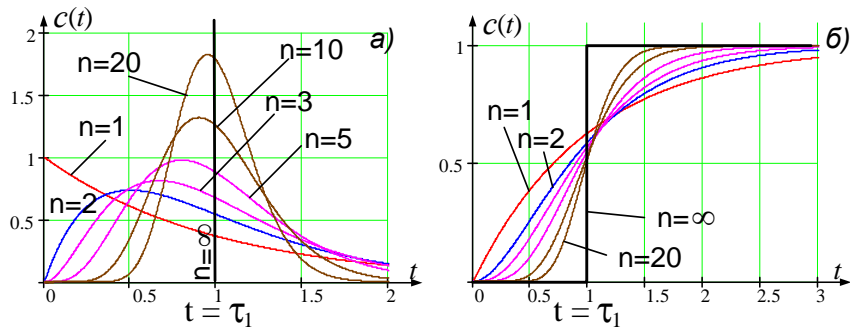


Рисунок 2.11 - Основні характеристики коміркової моделі
а) імпульсна (С-крива); б:) перехідна (F-крива)

$$c_{\text{вих}}(t) = \frac{1}{(n-1)!} \left(\frac{nt}{\tau_1}\right)^{n-1} \frac{n}{\tau_1} e^{-\frac{nt}{\tau_1}}, \quad (5.26)$$

τ_1 - середній час перебування частинок потоку у кожній комірці. Якщо вхідний сигнал змінюється стрибкоподібно, то шуканий розв'язок математичного опису коміркової моделі каскаду реакторів (перехідна функція, або F-крива) отримується у вигляді

$$c_{\text{вих}}(t) = 1 - e^{-\frac{nt}{\tau_1}} \cdot \sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{k!} \left(\frac{nt}{\tau_1}\right)^k. \quad (5.27)$$

На рис. 2.11а і 2.11б показані імпульсні й перехідні характеристики, побудовані відповідно до виразів для імпульсної перехідної (5.26) і перехідної (5.27) функцій при різних значеннях n - кількості реакторів.

Застосування коміркової моделі

При використанні коміркової моделі для відтворення гідродинамічних властивостей реального потоку *важливо вдало вибрати число комірок n* , оскільки значення цього параметра відображає ступінь перемішування речовини в апараті. Інженерні методи розрахунків числа комірок n , при якому досягалася б адекватність коміркової моделі реальному процесу, розроблені поки ще недостатньо.

При визначенні числа комірок у ряді випадків можна скористатися формальною аналогією між «дифузійним» значенням критерію Пекле Pe_L і величиною n , яка для колонних апаратів із достатньою для практичних розрахунків точністю виражається залежністю

$$n = \frac{vL Pe}{2D_L} = \frac{Pe}{2}, \quad (5.28)$$

де v — середня лінійна швидкість потоку; L — висота зони потоку (у насадкових колонах — це висота насадки); D_L — коефіцієнт поздовжнього перемішування.

За залежністю (5.28) можна обчислити n і замість дифузійної застосувати в дослідженнях коміркову модель, яка є значно простішою. Коміркова модель досить точно відтворює властивості потоків у послідовно з'єднаних апаратах з мішалками, що створюють інтенсивне перемішування (каскади реакторів) в абсорбційних і екстракційних колонах при деяких гідродинамічних режимах, і задовільно в апаратах із псевдоскрапленням шаром.

У промисловості значно поширені апарати, секційовані по висоті (по ходу потоку) ситовими або ґратчастими перегородками, які визначають циркуляцію потоку між секціями. Розглянута вище проста коміркова модель не може інтерпретувати гідродинаміку рухомого середовища в подібних апаратах. Для опису структури гідродинамічних потоків у таких апаратах останнім часом стали застосовувати *коміркову модель зі зворотним перемішуванням між секціями* (комірками), в основу якої покладена проста коміркова модель із внесенням у її рівняння відповідних змін. Коміркова модель зі зворотним перемішуванням використовується, зокрема, для вивчення процесу в секційованих барботажних реакторах, в апаратах із псевдоскрапленням шаром, у пульсаційно-тарілчастих і роторно-дискових екстракторах та ін.

Тема 6. Дифузійна модель.

Характеристика моделі.

Диференціальне рівняння однопараметричної дифузійної моделі. Розв'язання диференціального рівняння моделі.

Застосування дифузійної моделі.

Комбіновані моделі. Модель інтенсивного витіснення.

Характеристика моделі

Дифузійна модель набула широкого поширення при оцінці реальних потоків в апаратах, у яких відбувається поздовжнє або поздовжньо-радіальне перемішування (наприклад, потік у шарах насадки колонних апаратів). Природа виникнення поздовжнього й радіального перемішування досить складна. Виходячи з теорії масообміну, у наш час вважають, що перемішування виникає у результаті молекулярної й конвекційної дифузії.

Молекулярна дифузія — це перенесення маси речовини молекулами (область *макрокінетики*). Основним законом молекулярної дифузії є перший закон Фіка відповідно до якого *кількість речовини, що дифундує через площу, перпендикулярну до напрямку дифузійного потоку, пропорційна градієнту концентрації, площі і часу:*

$$dM = -D \frac{\partial C}{\partial l} dF dt, \quad (6.1)$$

де dM — кількість речовини, що дифундує; $\partial C / \partial l$ - градієнт концентрації в напрямку дифузії; dF — елементарна площа, через яку відбувається дифузія (перпендикулярна до напрямку дифузійного потоку); dt — час дифузії; D — коефіцієнт дифузії. Знак мінус у рівнянні показує, що при молекулярній дифузії в напрямку переміщення речовини концентрація зменшується.

Конвекційна дифузія — це перенесення речовини мікрочастинками середовища, яке визначається турбулентністю потоку, його гідродинамічним станом. Конвекційна дифузія пов'язана з уявленнями *макрокінетики*. Основний закон конвекційної дифузії (закон Щукарева) встановлює, що *кількість речовини, перенесена від поверхні поділу фаз у сприймаючу фазу, пропорційна різниці концентрацій біля поверхні поділу фаз і в ядрі потоку сприймаючої фази, площі поверхні фазового контакту й часу:*

$$dM = \beta (c_s - c_f) dF dt, \quad (6.2)$$

де β — коефіцієнт масовіддачі; c_s — концентрація у сприймаючій фазі на поверхні поділу фаз; c_f — концентрація в ядрі потоку сприймаючої фази.

Розрізняють *однопараметричну і двопараметричну дифузійні моделі*. Якщо при побудові моделі враховують тільки поздовжнє перемішування, а в радіальному напрямку концентрацію беруть постійною, то така модель називається *однопараметричною*. Така модель характеризується одним параметром, який враховує поздовжнє перемішування і позначається D_L . Основою однопараметричної дифузійної моделі є модель витіснення, ускладнена зворотним перемішуванням.

Якщо задача вимагає, щоб математичний опис враховував, крім поздовжнього, і радіальне перемішування, то при складанні моделі необхідно ввести додатково другий параметр — коефіцієнт радіального перемішування — D_R . Тоді модель стає *двопараметричною*. Вона більш точно відображає процес, але її опис і розв'язок значно ускладнюються.

Диференціальне рівняння однопараметричної дифузійної моделі

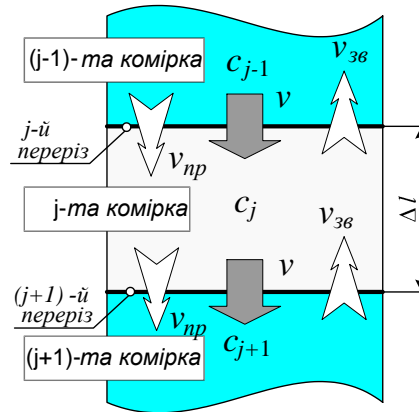


Рисунок 2.12 - Елементарна комірка потоку витіснення з поздовжнім перемішуванням (дифузійним потоком)

Структуру потоку, що відповідає однопараметричній дифузійній моделі, можна представити так (див. рис. 2.12): деяка технологічна речовина переміщується із середньою лінійною швидкістю v у поздовжньому каналі, уздовж якого відбувається перемішування речовини за рахунок прямого і зворотного потоків при рівномірному розподілі концентрації речовини в напрямку, перпендикулярному до руху. При складанні математичного опису такої моделі беруть такі припущення:

- зміна концентрації речовини є безперервною функцією координати (відстані по довжині каналу);
- концентрація речовини в кожному перерізі стала;
- об'ємна швидкість потоку $w = vS_0$, де S_0 - площа поперечного перерізу каналу, і коефіцієнт поздовжнього перемішування D_L не змінюються по довжині й перерізу потоку.

Виділимо в розглянутому потоці елементарну J -ту комірку (див. рис. 2.12), обмежену J -м і $(J+1)$ -м перерізами, об'ємом ΔV , висотою (довжиною) Δl і площею поперечного перерізу $S_1 = 1 \cdot 1$. Позначимо q_j — потік (кількість речовини), що проходить через J -й переріз; q_{j+1} — потік (кількість речовини), що проходить через $(j+1)$ -й переріз; $\Delta V = \Delta l \cdot S_1$ — об'єм елементарної J -ї комірки.

Виразимо кількість речовини, що надходить у J -ту комірку (q_j) і виходить із неї (q_{j+1}), що можна показати рівняннями

$$q_j = v_{np} S_1 c_{j-1} - v_{зв} S_1 c_j, \quad (6.3a)$$

$$q_{j+1} = v_{np} S_1 c_j - v_{зв} S_1 c_{j+1}, \quad (6.3б)$$

де v_{np} , $v_{зв}$ — лінійна швидкість прямого й зворотного потоку; c_{j-1} , c_j , c_{j+1} — концентрація речовини в елементарних комірках (індекс комірки відповідає індексу концентрації, яка у межах кожної елементарної комірки береться сталою). Якщо використати співвідношення між лінійними швидкостями потоків $v = v_{np} - v_{зв}$ і замінити в рівняннях (6.3a) і (6.3б) швидкість v_{np} на суму $v + v_{зв}$, а також увести позначення для збільшення концентрації

$c_j - c_{j-1} = \Delta_1 c$, $c_{j+1} - c_j = \Delta_2 c$, то з урахуванням умови $S_1 = 1$ рівняння набувають вигляду

$$q_j = v c_{j-1} - v_{зв} \Delta_1 c, \quad (6.4a)$$

$$q_{j+1} = v c_j - v_{зв} \Delta_2 c. \quad (6.4б)$$

У загальному випадку, коли на вході виникає збурювання по потоку, рівновага вхідного й вихідного потоків не дотримується, тобто потік $q_j(t)$ не дорівнює $q_{j+1}(t)$, і зміна маси речовин в неусталеному режимі за час t виразиться так:

$$\Delta \int_0^t q_j dt - \int_0^t q_{j+1} dt. \quad (6.5)$$

Після підстановки значень $q_j(t)$ (6.4a) і $q_{j+1}(t)$ (6.4б) у рівняння (6.5) і нескладних перетворень одержуємо

$$\Delta \int_0^t [v_{36}(\Delta_2 c - \Delta_1 c) - v \Delta_1 c] dt. \quad (6.6)$$

Розділимо обидві частини рівняння (6.6) на об'єм ΔV , а також скористаємося тим, що

$$\frac{\Delta V}{\Delta l} = \Delta c, \quad (6.7)$$

де Δc_j — зміна концентрації в розглянутій елементарній J -й комірці; $c_j(0)$ — значення концентрації до початку збурювання (константа); $c_j(t)$ — концентрація в будь-який момент часу після внесення збурювання (змінна величина). Тоді з урахуванням $\Delta V = \Delta l \cdot \Delta c$

$$c_j(t) - c_j(0) = \frac{1}{\Delta l} \int_0^t [v_{36}(\Delta_2 c - \Delta_1 c) - v \Delta_1 c] dt. \quad (6.8)$$

Оскільки Δl не залежить від t , внесемо під знак інтеграла величину $1/\Delta l$ і помножимо перший доданок на $\Delta l/\Delta l$, у результаті одержимо

$$c_j(t) - c_j(0) = \int_0^t \left[\frac{v_{36} \Delta l (\Delta_2 c - \Delta_1 c)}{(\Delta l)^2} - v \frac{\Delta_1 c}{\Delta l} \right] dt. \quad (6.9)$$

Рівняння (6.8) диференціюємо за часом і виконуємо граничний перехід при $\Delta l \rightarrow 0$:

$$\frac{\partial c_j}{\partial t} = \lim_{\Delta l \rightarrow 0} \left[v_{36} \Delta l \frac{(\Delta_2 c - \Delta_1 c)}{(\Delta l)^2} - v \frac{\Delta_1 c}{\Delta l} \right]. \quad (6.10)$$

Проаналізуємо границю, що становить праву частину рівняння (6.10)

$$\lim_{\Delta l \rightarrow 0} \frac{\Delta c}{\Delta l} = \frac{\partial c}{\partial l} \quad \text{і} \quad \lim_{\Delta l \rightarrow 0} \frac{(\Delta_2 c - \Delta_1 c)}{(\Delta l)^2} = \frac{\partial^2 c_j}{\partial l^2}. \quad (6.11)$$

Якщо в першому доданку правої частини рівняння (6.10) $\lim_{\Delta l \rightarrow 0} \frac{\Delta c}{\Delta l} = \frac{\partial c}{\partial l}$, то рівняння (6.11) перетворюється в математичний опис моделі ідеального витіснення, що суперечить початковій умові задачі, яка передбачає наявність перемішування уздовж потоку. Отже, ця границя не може дорівнювати нулю; оскільки вона характеризує зворотний потік, що є причиною поздовжнього перемішування. Тому ця границя - це *математичний запис параметра D_L , що характеризує зворотне перемішування* в елементарній комірці й у всьому потоці, тобто

$$\lim_{\Delta l \rightarrow 0} v_{36} \Delta l = D_L. \quad (6.12)$$

З урахуванням значень границь, що становлять праву частину виразу (6.10), його можна переписати так:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial l^2} - v \frac{\partial c}{\partial l}. \quad (6.13)$$

Рівняння (6.13) записано без індексу J на тій підставі, що для комірки із будь-яким іншим індексом можна одержати аналогічний вираз. Ця залежність характеризує зміну концентрації по довжині зони, для якої справедлива однопараметрична дифузійна модель, і є рівнянням однопараметричної дифузійної моделі в диференціальній формі. Вид рівняння показує, що *дифузійна модель характеризується розподіленими параметрами*. Необхідно

значити, що за відсутності поздовжнього перемішування ($D_L = 0$) рівняння перетворюється в рівняння моделі ідеального витіснення, що повністю відповідає фізичному уявленню про однопараметричну дифузійну модель як про модель витіснення, ускладнену поздовжнім перемішуванням. Коефіцієнт поздовжнього перемішування D_L , м²/год, знаходиться дослідним шляхом або обчислюється за розрахунковими формулами, складеними для апаратів різних типів. При експериментальному визначенні коефіцієнта поздовжнього перемішування D_L його, як правило, представляють у вигляді безрозмірного комплексу. При цьому використовують критерій Пекле $Pe_L = vL/D_L$, де L — визначальний лінійний розмір зони (системи). Тоді коефіцієнт поздовжнього перемішування у безрозмірній формі має вигляд

$$\frac{D_L}{vL} = \frac{1}{Pe_L} \quad (6.14)$$

Безрозмірний комплекс — $1/Pe_L$, який іноді називають «зворотним критерієм Пекле», характеризує тільки поздовжнє перемішування. Якщо замість середньої лінійної швидкості потоку v у рівняння (6.13) підставити її вираз через об'ємну швидкість і площу поперечного перерізу $v = w/S_a$, то рівняння, що описує зміну концентрації в зоні, для якої справедлива однопараметрична дифузійна модель, набуває вигляду

$$S_a \frac{\partial c}{\partial t} = S_a D_L \frac{\partial^2 c}{\partial l^2} - w \frac{\partial c}{\partial l} \quad (6.15)$$

де S_a — поперечний переріз потоку.

Аналогічне за формою рівняння може бути отримано, якщо розглянути зміну іншої характерної змінної, наприклад, температури T , у потоці теплоносія зі структурою ідеального витіснення, ускладненої поздовжнім перемішуванням. Тоді таке рівняння буде відображати не розподіл речовини, а розподіл температури:

$$S_a c_T \frac{\partial T}{\partial t} = S_a D_T \frac{\partial^2 T}{\partial l^2} - c_T w \frac{\partial T}{\partial l} \quad (6.16)$$

де D_T — коефіцієнт поздовжнього перенесення тепла; \tilde{n}_T — теплоємність речовини потоку теплоносія.

Розв'язання диференціального рівняння моделі

Рівняння однопараметричної дифузійної моделі записано в часткових похідних, тому одержання його аналітичного розв'язку важке. Розв'язання рівняння чисельними методами при стандартному східчастому й імпульсному сигналі на вході показане на рис. 2.13а і 2.13б відповідно.

Порівнюючи отримані результати з аналогічними характеристиками моделі ідеального витіснення, можна помітити характерне розмивання вихідної змінної, що обумовлено явищем

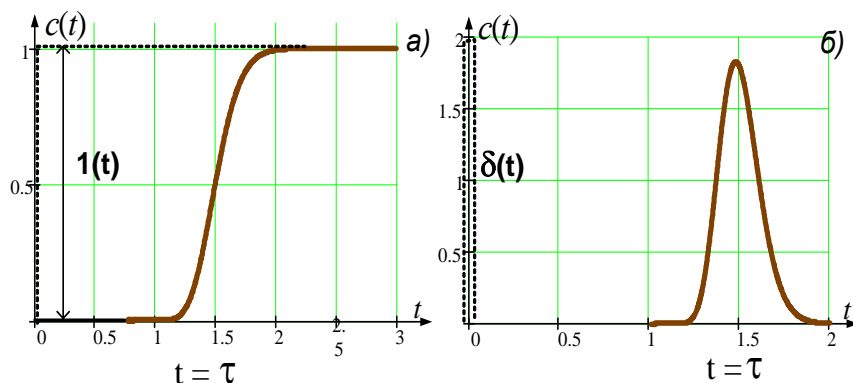


Рисунок 2.13 - Основні характеристики дифузійної моделі:
а) перехідна (F-крива) ; б) імпульсна (C-крива)

поздовжнього перемішування.

Застосування дифузійної моделі

Дифузійна модель значно краще, ніж модель ідеального витіснення, відповідає процесам у реальних апаратах хімічної технології, у яких переміщення речовин відбувається за принципом витіснення, наприклад, у трубчастих реакторах, протитечійних колонних апаратах і т.д. До недоліків цієї моделі треба віднести складність установаження граничних умов і необхідність попередньої оцінки коефіцієнта поздовжнього перемішування. У практиці технологічних розрахунків однопараметрична дифузійна модель дає можливість досить точно відтворювати властивості реального потоку при дослідженні багатьох апаратів, зокрема, плівкових, розпилувальних, барботажних, пульсаційних, насадкових колон, а також трубчастих апаратів (порожніх і заповнених насадкою). Зрозуміло, що модель може застосовуватися і в інших випадках, але для всіх названих апаратів спеціальними дослідженнями встановлені досить достовірні формули для оцінки значення коефіцієнта поздовжнього перемішування.

Комбіновані моделі

Типові гідродинамічні моделі ідеального перемішування, ідеального витіснення, дифузійна, коміркова відтворюють властивості потоків, що характеризуються різною гідродинамікою, але в кожному випадку гідродинамічний режим по своєму впорядкований і відрізняється однорідністю структури. Це порівняно добрі випадки. Однак на практиці буває, що жодна з перелічених гідродинамічних моделей достатньо точно не відтворює властивості потоку. Це пояснюється багатьма причинами, у тому числі тим, що в різних частинах апарата встановлюється своя структура потоку, гідродинаміка потоку сильно неупорядкована і в результаті спостерігаються такі явища, як застійні зони, байпасування, рецикли, проковзування.

У подібних випадках прибігають до побудови комбінованих моделей на основі розглянутих вище найпростіших моделей із додаванням застійних зон, а також введенням байпасування й рециркуляції окремих частин потоків. Математичний опис процесу при цьому істотно ускладнюється, однак у такий спосіб вдається істотно поліпшити точність відтворення властивостей об'єкта моделювання.

Принцип побудови комбінованих моделей полягає в тому, що досліджуваний процес розглядається розчленованим на окремі ділянки (зони) з різною структурою потоків, з'єднаних послідовно, паралельно або за схемою зі зворотним зв'язком. При цьому комбінована модель являє собою поєднання математичних описів усіх зон, що становлять процес.

Кількість зон і припустимий характер потоку в кожній зоні встановлюються шляхом з'ясування фізичної картини процесу, зокрема, за дослідними кривими зміни концентрації речовини в потоці на виході при відповідних вхідних впливах.

У ході побудови комбінованих моделей варто оцінити можливість застосування для різних ділянок апарата математичних описів типових моделей (ідеального перемішування, ідеального витіснення, ідеального витіснення із поздовжнім перемішуванням, ідеального витіснення із поздовжнім і поперечним перемішуванням, коміркової), а також урахувати *застійні зони*.

При вивченні процесу в застійних зонах припускають, що їхній вміст нерухомий або дуже повільно обмінюється з основним потоком, що проходить через апарат. У першому випадку - уявлення теоретичне, другий випадок наближається до реальної ситуації, тому що в дійсності абсолютно застійних зон бути не може. На практиці завжди спостерігається деякий обмін речовиною між застійною зоною й іншими частинами апарата, здійснювана за рахунок мікро- і макроявищ.

З викладеного вище випливає важливий для практичних розрахунків висновок про те, що застійні зони в апараті являють собою ділянки рідини, що відносно повільно рухаються і які, проте, можна з достатньою підставою вважати повністю нерухомими. Однак при знаходженні часу перебування речовин в апараті застійні зони можуть не братися до уваги [1].

Виходячи з положень теорії застійних зон, сформульована ознака наявності застійної зони стосовно апаратів хімічної технології. Прийнято вважати, що якщо частинки потоку на якійсь ділянці апарата залишаються довше, ніж подвоєний середній час перебування, то це свідчить про наявність там застійної зони. Зазначена умова використовується для обчислення об'єму застійної зони. Практичні прийоми, застосовувані для визначення об'ємів застійних зон.

Крім перелічених вище структур, при побудові комбінованих моделей необхідно враховувати й інші види потоку рідини (газу), які можуть виникати в реальних апаратах.

Байпасний потік — частина рідини (газу), що рухається паралельно апарату або деякій його зоні, у результаті чого ця частина потоку потрапляє на вихід апарату (зони), не зазнаючи ніяких змін (проскакування частини потоку).

Циркуляційні потоки (рецикли або зворотні потоки) — це різного роду повернення потоку. Вони виникають тоді, коли частина рідини (газу), що виводиться за межі апарату або певної його частини, вертається у нього знову й змішується зі свіжими порціями речовини на вході в апарат або в деяку його зону.

Струменевий потік (проковзування) — місцевий потік, що миттєво переносить речовину безпосередньо з однієї зони апарату в іншу.

Перш ніж розпочати побудову комбінованої моделі, що включає перелічені компоненти, необхідно ретельно оцінити вплив кожного з них на структуру потоку в апараті в цілому.

Зони, які мало змінюють гідродинамічну картину, краще не враховувати. Вплив компонентів на структуру потоку прийнято оцінювати, виходячи з об'ємів ділянок (зон), що складають процес. Тому одне з основних завдань побудови комбінованої моделі полягає у визначенні об'ємів зон об'єкта з різними типами потоків рідини (газу) [1].

При остаточному вирішенні питання, яку зону включати в математичний опис, а яку ні, варто мати на увазі, що зі збільшенням кількості зон можна описати процес будь-якої складності, однак математичне моделювання може ускладнитися настільки, що модель виявиться непринятною.

Нижче як приклади розглядаються деякі комбіновані моделі об'єктів з ускладненою структурою потоку.

Об'єкт, що поєднує зони ідеального перемішування й байпасування

Зі схеми об'єкта (рис. 2.14а) зрозуміло, що вхідний потік з об'ємною швидкістю v роздвоюється: частина потоку надходить у зону ідеального перемішування (його об'ємна

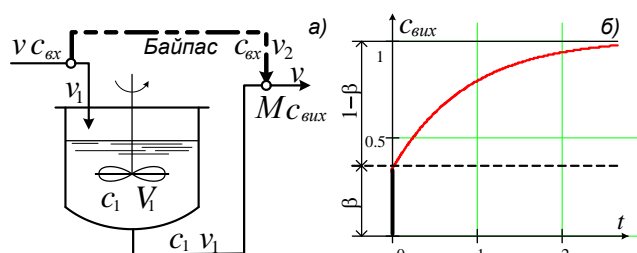


Рисунок 2.14 - Реактор ідеального перемішування із байпасуванням:
а) схема об'єкта; б) перехідна характеристика

швидкість v_1 і концентрація на вході c_{ex} ; цей потік миттєво розподіляється по всьому об'ємі V_1 , у кожній точці якого й на виході з нього встановлюється концентрація c_1); інша частина — байпасний потік — не зазнає ніяких змін, проковзує відразу на вихід, минаючи апарат (його об'ємна швидкість v_2 і постійна концентрація c_{ex}). Обидва потоки в точці M з'єднуються в один. Концентрація речовини в ньому $c_{вых}$ й об'ємній швидкості $v = v_1 + v_2$, при цьому $v_2 = \beta v$, де β — частка загального розходу, що становить байпасний потік, і $v_1 = (1 - \beta)v$. Перехідна характеристика (реакція на стандартну східчасту зміну концентрації на вході) показана на рис. 2.14б.

На практиці, як правило, перехідну характеристику знаходять експериментально й використовують як джерело інформації про структуру потоку в об'єкті моделювання. Якщо

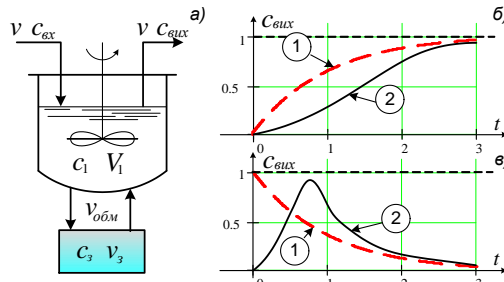


Рисунок 2.15 - Реактор перемішування із застійною зоною:
а) схема об'єкта; б) перехідна характеристика; в) імпульсна
перехідна характеристика

характер експериментальної кривої відповідає залежності, показаній на рис. 2.14б, то правомірно думати, що об'єкт моделювання може бути представлений поєднанням зони ідеального перемішування і байпасного потоку.

Об'єкт, що поєднує ділянки ідеального перемішування й застійної зони

Апарати із застійною зоною досить часто трапляються на практиці, тому що ділянки відносно повільного обміну речовиною виникають у багатьох випадках. Застійна зона не завжди очевидна, але її вплив на структуру потоку, безсумнівно, є і в розрахунках її потрібно враховувати. Це, наприклад, можна зробити, якщо є можливість скласти структурну схему складного об'єкта і знайти його математичний опис. Однак у випадку поєднання ділянок ідеального перемішування й застійної зони характер сполучення цих ділянок в об'єкті неочевидний. Тому для аналізу комбінованої моделі із застійною зоною застосовується методика складання матеріальних балансів усього апарата й окремо застійної зони.

Схема об'єкта, у якому потік включає ділянку ідеального перемішування й застійної зони і може бути описаний відповідною комбінованою моделлю, показана на рис. 2.15а.

У застійній зоні концентрація речовини може бути меншою від концентрації в апараті ($c_3 < c_1$) або більшою ($c_3 > c_1$), внаслідок цього напрямок потоку в застійній зоні інвертується. У загальному випадку між ділянкою ідеального перемішування і застійною зоною створюється градієнт концентрації $\text{grad}_1 \neq 0$ і, отже, відбувається обмін речовиною. Напрямок потоку залежить від знака градієнта (завжди навпаки щодо знака градієнта).

Інформацію про характер реального потоку, як і у попередньому випадку комбінованої моделі, можна одержати з аналізу F -кривої або C -кривої, знайдених експериментально на реальному об'єкті. Графічне зображення експериментально знайдених F -кривої і C -кривої для апарата ідеального перемішування із застійною зоною порівняно з аналогічними кривими за умови, що застійна зона відсутня, наводиться на рисунках 2.15б та 2.15в. За наявності застійної зони відбувається акумуляція деякої кількості речовини в її об'ємі, що пропорційна площі між кривими 1 і 2. Відхилення дослідної F -кривої 2 від ідеальної кривої 1 свідчить про існування в апараті застійної зони (рис. 2.15б). Також якісним показником наявності застійної зони в апараті і її впливу на структуру потоку в ньому є витягнутий «хвіст» у лівій частині імпульсної кривої і зсув центра ваги площі під кривою (рис. 2.15в).

Навіть розгляд відносно простих комбінованих моделей показує, що одержуваний при цьому математичний опис має досить складний вигляд. Очевидно, що при опису структури потоку комбінованою моделлю важливо визначити не тільки кількість зон, час перебування в них (або їхній об'єм), але і взаємозв'язок між зонами, спрямованість окремих потоків і т.п. Отже, у кожному конкретному випадку при використанні комбінованої моделі для опису структури потоку в реальному апараті потрібен індивідуальний підхід і акуратна оцінка фізичної картини процесу, що відбувається в ньому.

Тема 7. Математичний опис процесів хімічного перетворення.

Основні поняття хімічної кінетики. Кінетичні рівняння.

Механізм хімічної реакції. Прості і складні реакції.

Математичні моделі хімічних реакторів.

Математичні моделі реакторів ідеального перемішування. Математичні моделі реакторів ідеального витіснення.

Кінетика хімічних реакцій значною мірою визначає характер перебігу хімічних процесів і тому відіграє важливу роль у хімічній технології. Особливо її роль зростає при проектуванні хімічних реакторів із використанням математичного моделювання, що, зокрема, впливає з розглянутої раніше схеми складання математичної моделі (лекція 3).

Швидкість реакції

За ознакою фазового стану розрізняють *гомогенні і гетерогенні реакції*. Хімічна реакція, що відбувається в межах однієї фази, називається гомогенною хімічною реакцією. Гетерогенна хімічна реакція проходить на межі поділу фаз.

Найважливішою кількісною характеристикою процесу хімічного перетворення речовин є *швидкість хімічної реакції* — зміна кількості речовини за одиницю часу: для гомогенних процесів — на одиниці об'єму, для гетерогенних процесів — на одиниці поверхні поділу фаз. Математичний запис цього визначення може бути поданий так:

$$w_r = \pm \frac{dN}{Vdt} \text{ або } w_r = \pm \frac{dN}{Sdt} \quad (7.1)$$

де N — кількість речовини; t — час; V — об'єм і S — площа поверхні поділу фаз. Варто врахувати, що в ході реакції кількість вихідних речовин зменшується ($dN < 0$), а продуктів реакції — зростає ($dN > 0$), що і враховується знаком у рівняннях (7.1).

Оскільки в хімічному перетворенні бере участь ряд речовин (вихідні, проміжні речовини, продукти реакції), то, як правило, мають на увазі не швидкість хімічного перетворення взагалі, а швидкість за яким-небудь компонентом. Якщо, наприклад, кількість вихідної речовини A N_A виразити через його концентрацію й об'єм ($N_A = c_A V$), то вираз для швидкості гомогенних реакцій за вихідною речовиною з урахуванням (2.3-1) прийме вигляд

$$w_A = \frac{dN_A}{Vdt} \quad (7.2)$$

У багатьох практичних випадках $V = \text{const}$, тоді перший доданок дорівнює нулю, й одержуємо

$$w_{rA} = \frac{dc_A}{dt} \quad (7.3)$$

Таким чином, для системи, об'єм якої із часом не змінюється, швидкість реакції за будь-яким компонентом визначається зміною концентрації цього компонента за часом.

З іншого боку, швидкість хімічної реакції залежить від природи молекул реагентів і зовнішніх умов: температури, тиску, особливостей середовища (гідродинаміка потоків, стан поверхні поділу фаз, наявність сторонніх домішок і т.п.). При заданих конкретних зовнішніх умовах швидкість реакції є деякою функцією концентрацій реагуючих речовин c_A, c_B, \dots, c_i :

$$w = f(c_A, c_B, \dots, c_i) \quad (7.4)$$

У більшості випадків ця залежність виражається ступеневим законом (закон діючих мас)

$$w = k c_A^{n_A} c_B^{n_B} \dots c_i^{n_i} \quad (7.5)$$

де n_A, n_B, \dots, n_i — порядок реакції за даним компонентом (показник степеня при концентрації i -го реагенту); $n_A + n_B + \dots + n_i$ — загальний порядок реакції, тобто сума порядків реакції за всіма реагуючими речовинами, що визначає характер залежності швидкості реакції від концентрації; k — константа швидкості реакції.

Важливо те, що степенева залежність від концентрацій реагуючих речовин практично завжди виконується для швидкостей окремих стадій хімічного процесу. При цьому як *порядок за окремою речовиною*, так і сумарний порядок реакції завжди є цілими додатними числами. Якщо мова йде про окрему стадію процесу, то порядок її практично ніколи не перевищує трьох. Тому особливе значення мають у хімічній кінетиці реакції першого, другого і третього порядку [13]. У загальному ж випадку *сумарний порядок багатостадійної реакції може бути нульовим, дробовим або цілим числом; він визначається експериментально.*

Кінетичні рівняння

Із зіставлення рівнянь (7.3) і (7.4) одержуємо так звані *кінетичні рівняння*

$$\frac{dC}{dt} = k_{AB} \cdot C^{\alpha} \cdot C^{\beta} \quad (7.6)$$

що відображають зміну концентрації якої-небудь речовини в часі у ході хімічного перетворення. Графічне зображення розв'язку, що відповідає цьому рівнянню, називається *кінетичною кривою*.

Константа швидкості хімічного процесу

Константа швидкості - це параметр k , що входить у кінетичне рівняння (7.6). Константа швидкості реакції є поряд зі швидкістю реакції однією з основних величин у хімічній кінетиці. Як впливає із закону діючих мас (7.5), константа швидкості реакції показує, з якою швидкістю відбувається хімічний процес при концентраціях реагуючих речовин, що дорівнюють одиниці. Залежність константи швидкості реакції від температури виражається рівнянням Арреніуса:

$$k = k_0 e^{-\frac{E_a}{RT}}, \quad (7.7)$$

де T — температура; R — універсальна газова стала; E_a — енергія активації реакції; k_0 — постійний множник.

Енергія активації

Поняття енергії активації E_a визначається існуванням потенціальних бар'єрів, із подоланням яких пов'язане будь-яке хімічне перетворення. Параметр E_a для реакцій, що проходять в одну стадію, показує, яку мінімальну енергію (розраховуючи на 1 моль) повинні мати реагуючі частинки, щоб вони могли вступити в хімічну реакцію. Величина енергії активації виражається в калоріях або джоулях на моль.

Механізм хімічної реакції. Прості і складні реакції

У хімічній реакції не завжди відбувається безпосереднє перетворення початкових молекул у продукти реакції. У більшості випадків реакція проходить у кілька стадій. Сукупність стадій, з яких складається хімічна реакція, називають *механізмом хімічної реакції*. При вивченні хімічних перетворень у першу чергу варто встановити механізм хімічної реакції, оскільки саме він обумовлює конкретний вид кінетичного рівняння.

Для опису механізму хімічної реакції використовують *стехіометричні рівняння*, наприклад:



Стехіометричне рівняння хімічної реакції, як відомо, показує, у яких кількісних співвідношеннях речовини вступають у взаємодію. Однак фактично реакція рідко проходить за схемою, описаною стехіометричним рівнянням, що відображає тільки сумарний ефект ряду послідовних або паралельних реакцій. Отже, про механізм реакції не можна судити тільки за її стехіометричним рівнянням. На практиці механізм реакції встановлюється дослідним шляхом. Із цією метою формулюють найбільш імовірні гіпотези механізму досліджуваної реакції і вибирають ту з них, що найкраще відповідає дослідним даним, отриманим для зазначеної реакції.

Найбільш простим є механізм елементарної реакції, що проходить в одну стадію, тобто реалізується шляхом прямого переходу реагуючих частинок у продукти реакції. Кожна

елементарна реакція складається з великого числа однакових повторюваних перетворень початкових частинок - елементарних актів хімічного перетворення. Реакції, в елементарному акті яких беруть участь одна, дві або три молекули, називаються відповідно моно-, бі- і тримолекулярними. Реакції більш високої молекулярності практично не трапляються.

Для елементарних реакцій стехіометричні рівняння завжди виражають істинний механізм хімічного перетворення й, отже, визначають кінетичні рівняння у вигляді ступеневої залежності (7.6), у якій, наприклад, показники ступеня n_A, n_B відповідають стехіометричним коефіцієнтам компонентів А і В. Для елементарних реакцій порядок реакції і її молекулярність збігаються. За відсутності прямого зв'язку між стехіометричними й кінетичними рівняннями реакції є неелементарними, їх стехіометричні рівняння не відображають істинний механізм хімічного перетворення.

Відповідно до кількості стехіометричних рівнянь, необхідних для опису хімічного перетворення, розрізняють прості і складні реакції. Якщо досить одного стехіометричного рівняння, щоб описати механізм реакції, то її відносять до простих реакцій. Якщо ж для опису спостережуваного ходу реакції необхідно кілька стехіометричних і кінетичних рівнянь, то її відносять до складних реакцій. Складні реакції розділяють на послідовні, паралельні і змішані.

Якщо в простій елементарній реакції бере участь однакове число молекул різних компонентів, то константи швидкості реакції, що відповідають будь-якому компоненту, будуть мати рівні числові значення, тобто $k_A = k_B = \dots = k_S$. Якщо ж у реакції бере участь неоднакове число молекул різних компонентів, то в позначенні обов'язково зазначається компонент, якому відповідає константа швидкості реакції.

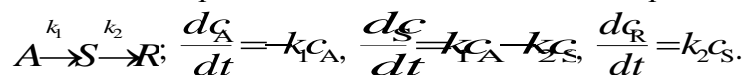
Наприклад, для реакції $A + 2B \xrightarrow{k} 3S$ швидкості реакції щодо кожного з компонентів будуть представлені у вигляді $-\frac{dc_A}{dt} = k c_A c_B^2$, $-\frac{dc_B}{dt} = 2k c_A c_B^2$ і $\frac{dc_S}{dt} = 3k c_A c_B^2$.

Зі стехіометричного рівняння випливає, що $\frac{dc_A}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dc_B}{dt} = \frac{1}{3} \frac{dc_S}{dt}$ і в результаті одержуємо співвідношення між константами швидкості, які належать відповідним компонентам, і стехіометричними коефіцієнтами $k = \frac{k_A}{1} = \frac{k_B}{2} = \frac{k_S}{3}$, звідки $k_A = k$, $k_B = 2k$, $k_S = 3k$.

Більшість хімічних реакцій є складними, тобто такими, які проходять у кілька стадій і при цьому можуть мати прямий і зворотний напрямки. Складання кінетичних рівнянь складних процесів базується на гіпотезі про незалежність перебігу елементарних реакцій. Відповідно до неї величина константи швидкості хімічної реакції не залежить від того, чи відбуваються у даній системі одночасно й інші елементарні реакції.

У складному хімічному процесі одна речовина може брати участь, як початковий або кінцевий компонент на різних стадіях. Тому при складанні кінетичних рівнянь складної реакції її представляють як таку, що складається з декількох елементарних реакцій, які проходять незалежно, і для опису кожної з них використовують кінетичні закономірності елементарного акту хімічного перетворення.

Загальна зміна концентрації i -го компонента складної реакції буде алгебраїчною сумою швидкостей його утворення або витрати на всіх елементарних стадіях, де бере участь у реакції цей компонент. Вони описуються системами диференціальних кінетичних рівнянь, кількість яких визначається числом реагуючих речовин. Нижче наводиться приклад складної послідовної необоротної хімічної реакції й відповідні їм кінетичні рівняння:



Тут k_1, k_2 — константи швидкості реакцій відповідних стадій.

Константи хімічної рівноваги

Багато хімічних процесів відбуваються за схемою оборотних реакцій, які характеризуються тим, що через якийсь час після їх початку швидкості прямої і зворотної реакцій стають рівними і настає хімічна рівновага. Такий стан процесу у кожному випадку визначається так званою константою рівноваги K , яка являє собою відношення констант швидкості прямої і зворотної реакцій:

$$K = \frac{k_{np}}{k_{зв}}. \quad (7.9)$$

Значення констант рівноваги знаходять за формулами через парціальні тиски (для газів — K_p) або як функцію концентрацій речовин, що беруть участь у реакції (для рідин - K_c). Константа хімічної рівноваги K визначається, як правило, експериментально.

Ступінь перетворення

У реальних умовах при проходженні хімічних реакцій початкові речовини перетворюються повністю або частково, що можна оцінити значеннями поточних концентрацій цих речовин. Однак значно простіше оцінювати стан перетворення вихідної реагуючої речовини величиною так званого *ступеня перетворення*. Якщо перетворення речовини **A** відбувається повністю, то це відповідає ступеню перетворення $X_A = 1$. Якщо перетворення речовини **A** зовсім не відбувається (реакція не проходить), то $X_A = 0$. Тобто ступінь перетворення змінюється від 0 до 1, є безрозмірною величиною й відповідає певному початковому реагенту. Як правило, її виражають відношенням [1, 11]:

$$X_A = \frac{N_{A_0} - N_A}{N_{A_0}}, \quad (7.10)$$

де N_{A_0}, N_A — відповідно початкова й кінцева кількість реагенту. Вираз в чисельнику встановлює кількість перетвореного вихідного реагенту. Діленням на величину N_{A_0} досягається безрозмірність величини X_A , яка являє собою частку початкової реагуючої речовини, що перетворюється в кінцевий продукт.

Якщо $V = \text{const}$, то ступінь перетворення визначається за формулою

$$X_A = \frac{c_{A_0} - c_A}{c_{A_0}}, \quad (7.11)$$

з якої випливає, що ступінь перетворення - це відношення різниці початкової й кінцевої концентрацій реагенту до його початкової концентрації. Ступінь перетворення - параметр, який у технологічних розрахунках часто застосовується замість концентрації, дозволяючи виразити, наприклад, поточну концентрацію через її початкове значення:

$$c_A = c_{A_0} (1 - X_A). \quad (7.12)$$

Кінетичні рівняння можуть включатися як складові частини до математичного опису, а також мають самостійне значення. *Необхідність розв'язання диференціальних кінетичних рівнянь або їхніх систем виникає найчастіше в одній із таких задач:*

1. Відома схема реакції й величини констант швидкості окремих стадій. *Потрібно розрахувати концентрацію того або іншого компонента у деякий момент часу або встановити час, за який концентрація того або іншого компонента досягає певного значення. Для цього досить знайти рівняння кінетичної кривої для речовини, що цікавить дослідника.*
2. Відома схема процесу й дослідним шляхом знайдені кінетичні криві компонентів реакції. *Необхідно визначити константи швидкості окремих елементарних стадій. У цьому випадку треба знайти розв'язок диференціального рівняння (або системи) у загальному вигляді з константами швидкості як невідомими параметрами, а потім підібрати такі значення параметрів, які приводять до збігу розв'язку зі знайденими дослідним шляхом кінетичними кривими (задача ідентифікації).*
3. Схема процесу має гіпотетичний характер. *Потрібно встановити співвідношення між кінетичними характеристиками системи (швидкостями, поточними концентраціями,*

часом), що дозволяють перевірити правильність запропонованої схеми. Гіпотетичні співвідношення вибирають у загальному вигляді з константами швидкості як невідомими параметрами і підставляють у них експериментальні дані. Якщо при цьому співвідношення не виправдовується - схему відкидають як таку, що не відповідає дослідним даним, якщо ж співвідношення виправдується, то це є більш-менш вагомим доведенням на користь правильності обраної схеми [13].

При розв'язанні кожної з перелічених задач варто поєднати теоретичні методи досліджень і дослідні дані. Третя задача, яка найчастіше виникає при проектуванні нового технологічного процесу, найбільш трудомістка і вимагає використання обчислювальної техніки.

Математичні моделі хімічних реакторів

Хімічними реакторами прийнято вважати апарати, у яких здійснюється хімічне перетворення з метою одержання певної речовини у рамках одного технологічного процесу. У хімічній і суміжній областях промисловості застосовують різноманітні типи реакторів, що мають як істотні розбіжності, так і спільні ознаки, за якими їх можна класифікувати. Відповідно до таких ознак (критеріїв) реактори класифікуються так:

1. **Залежно від фазового стану** реагуючих речовин реактори бувають *гомогенними або гетерогенними*.
2. **За характером операцій завантаження реагентами й видалення продуктів** реакції розрізняють реактори *періодичної, безперервної і напівперіодичної дії*.

Реактори періодичної дії прості за конструкцією й оснащуються невеликою кількістю допоміжного устаткування. Вони використовуються головним чином для проведення дослідних робіт з вивчення хімічної кінетики, у малотоннажних виробництвах або для переробки дорогих речовин.

Реактори безперервної дії (або з усталеним потоком) мають безперервне завантаження реагентами й безперервне видалення продуктів реакції. Такі реактори працюють в усталених режимах. Замість тривалості реакції, яка не може бути безпосередньо заміряна, користуються величиною часу перебування (контакту), що визначається як відношення об'єму реакційної суміші в реакторі до об'ємної витрати (завантаження) реагентів. Реактори з усталеним потоком є найбільш економічними для переробки значних кількостей продуктів або при реакціях, що відбуваються з високими швидкостями.

3. **За режимом руху реакційного середовища** або за структурою потоків речовини реактори поділяють на *апарати ідеального перемішування, ідеального витіснення, ідеального витіснення з поздовжнім перемішуванням, ідеального витіснення з поздовжнім і радіальним перемішуванням, з комбінованою структурою потоку*.
4. **За тепловим режимом** реактори розділяють на *ізотермічні, адіабатичні, політропні*.

Ізотермічні реактори мають одну постійну температуру в усіх точках реакційного простору; швидкість реакції в них залежить лише від складу реакційного середовища. Ізотермічний режим рідко досягається без допоміжних пристроїв для відведення (або підведення) тепла.

Адіабатичні реактори характеризуються тим, що не мають теплообміну із зовнішнім середовищем. На практиці це досягається гарною тепловою ізоляцією.

У реальних реакційних апаратах не завжди вдається забезпечити ізотермічний або адіабатичний режими, і процес є *політропним*.

5. **За конструктивними ознаками** реактори відносять до таких типів апаратів: *трубчасті, ємнісні, полицні, комбіновані*.

Видно, що реальні хімічні реактори істотно відрізняються один від одного й, отже, задача побудови математичних моделей таких апаратів повинна вирішуватися в кожному конкретному випадку з урахуванням особливостей процесу й конструктивного оформлення. При цьому необхідно використовувати моделі основоположних «елементарних» процесів (наприклад, для реакторів безперервної дії - моделі руху потоків речовин і хімічного

перетворення) і приєднати до них рівняння, що описують тепловий режим, зміну фазового стану реагентів, конструктивні й інші особливості.

Математичні моделі реакторів ідеального перемішування

Модель ідеального перемішування може з достатнім для практики наближенням описувати процеси в реальних проточних реакторах із пристроями інтенсивного перемішування, при невеликих витратах і малому відношенні довжини реактора до його діаметра.

Рівняння такої моделі записують у вигляді математичного виразу, який характеризує зміну концентрації в реакційному середовищі у часі. Це обумовлюється, по-перше, рухом потоку (гідродинамічний фактор) і, по-друге, хімічним перетворенням (кінетичний фактор). Тому зазначену модель варто будувати на основі типової моделі ідеального перемішування з урахуванням наявності хімічної реакції, тобто записати зміну концентрації як алгебраїчну суму:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{w}{V}(c_{ex} - c) \pm w_r, \quad (7.13)$$

де $\pm w_r$ — складова зміни концентрації, обумовлена наявністю хімічної реакції.

Аналогічних рівнянь необхідно записати стільки, скільки речовин бере участь у реакції. Тоді змінна c буде концентрацією відповідної i -ї речовини ($c_A, c_B, \dots, c_S, \dots$) і w_r — швидкістю реакції за тією самою i -ю речовиною. Система отриманих рівнянь буде математичною моделлю розглянутого реактора ідеального перемішування (моделлю динаміки).

Візьмемо для визначеності, що початковою є речовина А, замінимо величини $c_{a0} = c_{A_0}$, $c = c_A$, $w_r = -w_{r_A}$ (речовина А убуває), а також представимо час перебування як відношення реакційного об'єму до об'ємної швидкості $\tau = w/V$, тоді рівняння (2.3-13) набуде вигляду

$$\frac{dc_A}{dt} = \tau(c_{A_0} - c_A) - w_{r_A}. \quad (7.14)$$

В усталеному режимі роботи реактора, що характеризується дотриманням умови $\frac{dc_A}{dt} = 0$, з рівняння динаміки (7.14) можна одержати рівняння статичної моделі реактора ідеального перемішування у вигляді

$$\tau(c_A - c_{A_0}) = -w_{r_A}. \quad (7.15)$$

Аналогічні вирази можна одержати і стосовно інших компонентів.

Значення швидкостей реакції за початковою речовиною w_{r_A} або відносно продукту реакції залежать від механізму й порядку реакції. Отже, модель реактора ідеального перемішування повинна доповнюватися кінетичними рівняннями, що характеризують конкретну реакцію.

Дослідження математичної моделі реактора ідеального перемішування дозволяє знайти основні параметри, що характеризують роботу й економічність хімічних реакторів даного типу, тобто дають можливість установити:

- час перебування початкової речовини в реакторі τ , від величини якого залежить об'єм апарата (чим менше τ , тим менше V);
- зміну концентрації початкової речовини в часі $c_A(t)$, динаміку зміни концентрації цільових і побічних продуктів c_S, c_R, \dots .

Математичні моделі реакторів ідеального витіснення

З достатнім наближенням гідродинамічна модель ідеального витіснення відповідає процесам у трубчастих проточних апаратах при турбулентному русі потоків і значному відношенню довжин труб до їхніх діаметрів ($l/d > 20$). При цьому, як і у випадку реактора ідеального перемішування, шукана модель представляється у вигляді диференціального

рівняння в частинних похідних, що описує розподіл речовини в реакційному середовищі як за рахунок гідродинамічних факторів, так і за рахунок хімічного перетворення.

У загальному вигляді такий математичний опис будується на основі типової моделі ідеального витіснення з урахуванням впливу швидкості хімічної реакції і повинен бути представлений алгебраїчною сумою:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v_{cep} \frac{\partial c}{\partial l} \pm w_r. \quad (7.16)$$

Записавши аналогічні рівняння для всіх речовин, що беруть участь у реакції, одержимо математичний опис динаміки процесів у реакторі витіснення з урахуванням зміни концентрацій i -ї речовини в часі.

В усталеному режимі роботи реактора, коли похідна за часом дорівнює нулю, рівняння (7.16) описує статичний режим процесу хімічного перетворення і для конкретної початкової речовини **A** набуває такого вигляду:

$$v_{cep} \frac{dc_A}{dl} = -w_{r_A}. \quad (7.17)$$

З урахуванням очевидних заміन $w = v_{cep} / S_g$, $dl = dV / S_g$ і нескладних перетворень одержимо вираз

$$\tau = - \int_{c_{A0}}^{c_A} \frac{dc_A}{w_{r_A}}, \quad (7.18)$$

який представляє математичну модель статички реактора ідеального витіснення.

Вираз для швидкості реакції w_{r_A} за початковою речовиною **A** в кожному конкретному випадку залежить від механізму й порядку реакції. Розв'язок рівнянь математичної моделі (7.16) і (7.18) разом із кінетичними рівняннями дає можливість знайти основну характеристику хімічного реактора — час перебування τ , а також зміну концентрації початкової речовини і продуктів реакції в часі і просторі $c_A(l, t)$.

Порівняння хімічних реакторів ідеального перемішування й ідеального витіснення

Порівняння хімічних реакторів можна проводити різними методами. Зокрема, із цією метою зручно вибрати який-небудь параметр, що визначає роботу й економічність реактора, і оцінити значення цього параметра для розглянутих типів реакторів. Як такий параметр найчастіше використовують час перебування τ або іншу подібну характеристику.

При порівнянні безперервно діючих реакторів ідеального перемішування й ідеального витіснення можна скористатися аналітичними розрахунковими залежностями для визначення τ (див. рівняння (7.15) і (7.18)) з урахуванням конкретних типів реакцій. Для складних, а також для простих неелементарних реакцій, коли прямий зв'язок між стехіометричними рівняннями й виразами швидкості відсутній, скласти такі зручні аналітичні залежності на основі моделей реакторів ідеального перемішування й ідеального витіснення не вдається і доводиться застосовувати наближені числові методи.

Аналіз показує, що для однакових реакцій, що проходять в ідентичних умовах, час перебування реагентів у хімічному реакторі ідеального перемішування (τ_i) і в реакторі ідеального витіснення (τ_a) неоднаковий. Характер залежності між τ_i і τ_a можна проілюструвати на прикладі найпростішої хімічної реакції $A \xrightarrow{k} S$, установивши залежність величини τ_n / τ_a від ступеня перетворення X_A . З урахуванням отриманих вище співвідношень (7.3-15) і (7.3-18) і виразу w_{r_A} через ступінь перетворення можна одержати залежність

$$\frac{\tau_n}{\tau_a} = - \frac{X_A}{(1 - X_A) \ln(1 - X_A)}, \quad (7.19)$$

графік якої представлений на рис. 2.14. Із графіка видно, що час перебування в реакторі ідеального перемішування (τ_n) завжди більший, ніж у реакторі ідеального витіснення (τ_g).

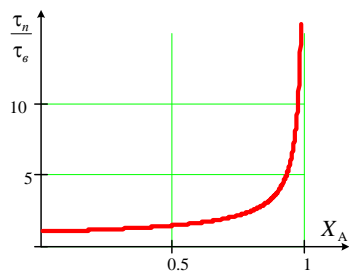


Рисунок 2.16 - Залежність часу перебування в реакторах різних типів від ступеня перетворення

При цьому чим вищий ступінь перетворення X_A , тим τ_n більше відрізняється від τ_g .

Оскільки час перебування прямо пропорційний об'єму апарата, то необхідний об'єм реактора ідеального перемішування завжди більший від об'єму реактора ідеального витіснення. При рівних об'ємах ступінь перетворення в реакторі ідеального витіснення досягає більших значень, ніж у реакторі ідеального перемішування. При цьому відношення об'ємів реакторів збільшується із підвищенням порядку реакції.

Вплив температури на протікання процесів у хімічному реакторі

Характер перебігу процесу у хімічних реакторах значною мірою залежить від температури. Тому при розрахунку хімічних реакторів необхідно враховувати:

- вплив температури на вихід (рівноважний ступінь перетворення для оборотних реакцій), швидкість реакції і склад одержуваних продуктів;
- теплові ефекти реакцій, які здебільшого проходять із виділенням або поглинанням тепла (відповідно екзотермічні і ендотермічні реакції), оскільки ці ефекти можуть помітно змінювати температуру реакційної маси.

Тема 8. Кінетика масообмінних процесів.

Математичні моделі хімічних реакторів.

Математичні моделі реакторів ідеального перемішування.

Математичні моделі реакторів ідеального витіснення.

Математичні моделі найпростіших типів теплообмінних апаратів

Кінетика масообмінних процесів

Кінетика масообмінних процесів *вивчає закономірності механізму і швидкості перенесення речовини з однієї фази в іншу в бінарних або багатокомпонентних системах*. До масообмінних належать такі процеси, як перегонка, ректифікація, екстракція, абсорбція, адсорбція, сушіння, кристалізація, випал та ін.

Розроблення математичного опису кінетики масообміну між фазами варто здійснювати, ґрунтуючись на засадах *загальної теорії гетерогенних процесів*. Особливість таких процесів полягає в тому, що вони є багатадійними.

Наприклад, *розчинення твердої речовини в рідині* представляється у вигляді двох стадій: 1) руйнування кристалічної решітки на поверхні твердої фази й 2) перенесення розчиненої речовини від поверхні кристала вглиб розчину.

Процес *кристалізації твердої речовини з розчину* має дві стадії: 1) перехід речовини, що кристалізується, з потоку розчинника до зовнішньої поверхні кристала й 2) приєднання молекул речовини до кристалічної решітки.

У процесі *екстрагування речовини з пористої структури твердого тіла* виділяють три стадії: 1) розчинення компонента, що екстрагується, у розчиннику; 2) дифузія цільового

компонента в пористому твердому тілі із внутрішніх зон до його зовнішньої поверхні; 3) конвективне перенесення компонента, що екстрагується, від зовнішньої поверхні в основну масу рідини.

Процес *термічного сушіння* вологого матеріалу також складається із трьох стадій: 1) дифузія вологи із внутрішніх зон капілярно-пористого матеріалу до його зовнішньої поверхні; 2) випарювання вологи у поверхневому шарі рідини; 3) відведення парів, що утворилися, від зовнішньої поверхні матеріалів у потік сушильного агента. Паралельно із транспортом рідини й пароподібної вологи при термічному сушінні відбувається перенесення теплоти.

У процесі *адсорбції* також виділяють три стадії: 1) перенесення молекул, що сорбуються, з потоку газу через прилеглий шар до поверхні частинки; 2) дифузія молекул, що сорбуються, усередині пористої структури адсорбенту від зовнішньої поверхні до її внутрішніх зон; 3) власне адсорбція молекул адсорбенту до активних центрів на поверхні внутрішніх пор поглинача.

Нарешті, *гетерогенно-каталітичний процес* має п'ять стадій: 1) дифузія реагуючої речовини з основної маси до поверхні твердого каталізатора; 2) адсорбція початкових речовин реакції; 3) хімічні перетворення на поверхні каталізатора; 4) десорбція продуктів реакції; 5) дифузія продуктів реакції від поверхні каталізатора в основну масу.

З наведених прикладів видно, що *масообмінні процеси в системі із твердою фазою*, як правило, *включають перенесення речовини між поверхнею тіла й навколишнім середовищем* (зовнішнє масоперенесення) і *перенесення речовини усередині твердої фази* (внутрішнє масоперенесення). У ряді технологічних процесів масообмін супроводжується хімічними перетвореннями й теплообміном.

При кінетичному дослідженні на підставі очікуваного механізму формують систему диференціальних рівнянь, що складається з рівнянь кожної «елементарної» стадії. Повнота математичного опису залежить від кількості факторів, що враховуються, ступеня вивченості як окремих стадій, так і процесу в цілому.

Внутрішнє масоперенесення у твердому тілі відбувається внаслідок теплового руху атомів або молекул. *Напрямок та інтенсивність дифузії визначається градієнтом хімічного потенціалу*. Дифузійний потік маси i -ї речовини в *ізотропному середовищі* описується як

$$\vec{j}_i = -D_i \text{grad} \bar{\mu}_i, \quad (8.1)$$

де $\bar{\mu}_i$ - концентрація цільового компонента в середовищі; k_i - кінетичний коефіцієнт, що характеризує рухливість речовини, що дифундує, у дифузійному середовищі; $\text{grad} \bar{\mu}_i$ - градієнт хімічного потенціалу. Хімічний потенціал характеризує здатність даного компонента виходити з даної фази шляхом випарювання, розчинення, кристалізації та ін.

Відомо, що хімічний потенціал компонента в *іонообмінному середовищі* визначається формулою

$$\bar{\mu}_i = \mu_i^0 + RT \ln p_i a_i, \quad (8.2)$$

де μ_i^0 - стандартний хімічний потенціал; p_i - парціальний тиск; V_i - парціальний мольний об'єм; T - температура; a_i - активність речовини.

Активність речовини пов'язана з його концентрацією таким виразом:

$$a_i = f_i \bar{c}_i, \quad (8.3)$$

де f_i - коефіцієнт активності іона. З урахуванням (8.2) і (8.3) вираз (8.4) набуває вигляду

$$\vec{j}_i = -D_i^0 \text{grad} \bar{c}_i, \quad (8.4)$$

де D_i^0 - коефіцієнт самодифузії, що визначається з іншого співвідношення Ейнштейна:

$$D_i^0 = k_i R T, \quad (8.5)$$

яке було отримано в 1905 році при побудові теорії броунівського руху й встановлювало зв'язок між рухливістю носіїв заряду (потенціалом) і їхнім коефіцієнтом дифузії.

Кінетичне рівняння (8.4) розв'язується разом із рівнянням матеріального балансу

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\text{div} \vec{j}_i, \quad (8.6)$$

де $\text{div} \vec{j}_i = \frac{\partial j_{ix}}{\partial x} + \frac{\partial j_{iy}}{\partial y} + \frac{\partial j_{iz}}{\partial z}$ - дивергенція.

Застосування для розрахунків системи рівнянь (8.4) і (8.6) пов'язане з необхідністю визначення коефіцієнта активності a_i і парціального тиску P_i у твердій фазі. У зв'язку з відсутністю експериментальних методів визначення цих параметрів, на практиці про дифузійний потік, як правило, судять із градієнта концентрацій на підставі закону Фіка:

$$\vec{j}_i = -\bar{D}_{ef} \text{grad} \bar{c}_i, \quad (8.7)$$

де \bar{D}_{ef} - коефіцієнт внутрішньої дифузії.

Баланс маси усередині твердого тіла з урахуванням співвідношення (2.4-7) приводить до диференціального рівняння

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \text{div} (-\bar{D}_{ef} \text{grad} \bar{c}_i) = 0, \quad (8.8)$$

яке для простих випадків, коли можна вважати $\bar{D}_{ef} = \text{const}$, стає лінійним

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\bar{D}_{ef} \nabla^2 \bar{c}_i. \quad (8.9)$$

Розв'язок диференціального рівняння (8.4-9) другого порядку в частинних похідних вимагає необхідної кількості початкових і граничних умов.

При побудові математичної моделі зовнішнього масоперенесення необхідно враховувати як дифузійне, так і конвективне перенесення речовини. Співвідношення для сумарного потоку i -ї речовини має вигляд

$$\vec{j}_i = \vec{j}_{Mi} + \vec{j}_{Ti} = -\bar{D} \text{grad} c_i + \vec{v}_l c_i, \quad (8.10)$$

де \vec{v}_l - локальна швидкість потоку рідини в нормальному до поверхні частин напрямку.

Доданок \vec{j}_{Ti} правої частини рівняння (8.4-10) характеризує перенесення речовини через прилеглий шар за рахунок молекулярної дифузії, а \vec{j}_{Mi} - за рахунок конвекції. Труднощі визначення локальної швидкості \vec{v}_l змушують другий доданок представляти у вигляді рівняння обраної гідродинамічної моделі, наприклад, у вигляді закону Фіка для турбулентної дифузії

$$\vec{j}_{Ti} = -D_{Ti} \text{grad} c_i, \quad (8.11)$$

де D_{Ti} - коефіцієнт турбулентної дифузії для i -го компонента.

Такі припущення, однак, не приводять до істотного спрощення задачі, оскільки на цей час не є можливим строго визначити межю між дифузійною і конвективною складовою і знайти окремо коефіцієнти внутрішньої й турбулентної дифузії.

В умовах малих швидкостей руху рідкої фази й малої концентрації розчину доданок \vec{j}_{Mi} у рівнянні (8.11) прямує до нуля, і постановка задачі зводиться до відомої задачі про масообмін між потоком рідини й тілом з нерухою оболонкою. Важливим параметром даної моделі є товщина дифузійного прилеглового шару. У розрахунках масообмінних процесів інтенсивність зовнішнього масо перенесення, як правило, характеризується коефіцієнтом масопередачі β , який вводиться у рівняння масовіддачі:

$$j_{zp} = \beta(c - c_{zp}), \quad (8.12)$$

де j_{zp} - потік речовини, що підводиться з боку рідини до поверхні твердої частинки; c, c_{zp} - концентрація речовини, що поглинається, у зовнішньому потоці й у розчині на поверхні частинки.

Оскільки потік j_{ep} відводиться в глиб частинки шляхом молекулярної дифузії, має місце рівняння

$$\bar{D} \frac{\partial \bar{c}}{\partial n} \Big|_{ep} = \beta(c - c_{ep}), \quad (8.13)$$

де n - відстань у напрямку нормалі до поверхні.

Подальше спрощення задачі може бути здійснене у двох напрямках. Для розвиненого турбулентного потоку, коли коефіцієнт молекулярної дифузії в розчині у багато разів більший, ніж у твердій фазі, зовнішнім масоперенесенням можна знехтувати, і процес описувати рівняннями виключно внутрішньодифузійної кінетики (8.9). При використанні припущення про те, що швидкістю дифузії, що лімітує масообмін між фазами, є зовнішня дифузія, математичний опис набуває вигляду іншого граничного випадку (8.13).

Кінетика теплообмінних процесів

Кінетика теплообмінних процесів розглядає питання, пов'язані з механізмом і швидкостями передачі енергії у формі теплоти від тіла з більшою температурою до тіла з меншою температурою. Рушійна сила процесу теплообміну – різниця температур між двома точками у просторі. До теплообмінних процесів належать процеси нагрівання, охолодження, випарювання, конденсації й ін. Розрізняють три механізми перенесення теплоти: теплопровідність, конвекція й випромінювання.

Теплопровідність – процес обміну тепловою енергією при безпосередньому зіткненні частинок унаслідок пружних коливань атомів, дифузії атомів, молекул.

Конвекція – перенесення теплоти здійснюється унаслідок переміщення макроскопічних об'ємів газу або рідини. Розрізняють *природну конвекцію*, що обумовлена різницею густин у різних точках об'єму газу (рідини) через різницю температур, і *вимушену конвекцію*, що визначає перенесення теплоти у результаті вимушеного руху газу або рідини.

Теплове випромінювання – це процес поширення енергії у вигляді електромагнітних хвиль.

При моделюванні процесу теплообміну розглядають *внутрішній, зовнішній і складний теплообмін*.

Найбільш проста **задача внутрішнього теплообміну** полягає у вивченні просторово-часової зміни температурного поля усередині твердого непрозорого тіла. Кінетика теплообміну у цьому випадку описується рівнянням Фур'є

$$Q = -\lambda \frac{dT}{dx} F, \quad (8.14)$$

де λ - коефіцієнт теплопровідності; $\frac{dT}{dx}$ - градієнт температури; F - площа поперечного перерізу, перпендикулярного до напрямку теплового потоку.

При складанні *рівняння теплового балансу для малого елемента об'єму ізотропного неоднорідного тіла* може бути отримане диференціальне рівняння, що описує нестационарне поле температур усередині розглянутого тіла:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \nabla^2 T, \quad (8.15)$$

де ρ, c_p - щільності й теплоємність тіла відповідно.

У випадку ізотропного однорідного тіла ($\lambda = \text{const}$) рівняння (8.5-2) набуває вигляду

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \nabla^2 T, \quad (8.16)$$

де $a = \lambda / (\rho c_p)$ - коефіцієнт температуропровідності; ∇^2 - оператор Лапласа.

Для одержання однозначного розв'язку рівняння (8.16) необхідне *задання таких умов: геометричних, фізичних, початкових і граничних*. Геометричні умови задають форму й розміри тіла. Фізичні умови задають фізичні властивості тіла: коефіцієнт теплопровідності,

теплоємність, густину й ін. Початкові умови встановлюють розподіл температури в тілі у початковий момент часу при $t = 0$.

Граничні умови відображають умови теплової взаємодії між тілом, яке моделюється, та навколишнім середовищем і мають чотири основних види (роди).

Граничні умови першого роду характеризують розподіл температури на поверхні тіла як функцію координат і часу (найпростіший випадок – температура стала):

$$T|_{\partial\Omega} = T_c \quad (8.17)$$

Граничні умови другого роду задають на поверхні тіла густину теплового потоку у вигляді функції координат і часу (окремий випадок – умова Неймана: тепла ізоляція):

$$q_{zp} = q(x, y, z, t), \text{ або } -\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{zp} = q_{zp} = 0. \quad (8.18)$$

Граничні умови третього роду (Ньютона) задають закон теплообміну між тілом і навколишнім середовищем:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{zp} = \alpha(T_{zp} - T_c), \quad (8.19)$$

де T_{zp}, T_c - температура поверхні тіла й навколишнього середовища. При $\alpha \rightarrow 0$ гранична умова третього роду переходить у граничну умову другого роду, а при $\alpha \rightarrow 0$ і $\lambda \rightarrow 0$ - у граничну умову першого роду.

Граничні умови четвертого роду (умови сполучення) задаються в місці контакту двох тіл, маючи на увазі рівність температур поверхонь і теплових потоків:

$$T_1 = T_2; \quad -\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial n_1} = -\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial n_2}, \quad (8.20)$$

де T_1, T_2 - температури на поверхні першого й другого тіл відповідно.

Рівняння (2.5-3) може бути спрощене. Часто розглядають одновимірне диференціальне рівняння нестационарної теплопровідності для ізотропних тіл в одній із трьох класичних форм:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (8.21)$$

Для тіл плоскої форми $A=0$, для протяжних тіл циліндричної форми $A=1$ і для кулі $A=2$.

Як ілюстративний приклад наведемо розв'язок рівняння нестационарної теплопровідності, отримане методом розділення змінних при рівномірному розподілі температури в тілі, що має форму одновимірної пластини товщиною $2R$:

$$\frac{T(x, t) - T_c}{T_0 - T_c} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{\mu_n} (-1)^{n+1} \cos(\mu_n \frac{x}{R}) \exp(-\mu_n^2 \frac{at}{R^2}), \quad (8.22)$$

де T_0 - початкова температура тіла; T_c - температура стінки тіла; $\mu_n = \alpha_n \sqrt{at}$.

При усталеному процесі передачі теплоти через плоску стінку рівняння теплопровідності (2.5-5) має вигляд

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0. \quad (8.23)$$

Граничні умови до рівняння (8.5-7) запишуться у вигляді $T|_{x=0} = T_{cm1}$ і $T|_{x=\delta} = T_{cm2}$. Інтегрування рівняння (8.5-7) із зазначеними умовами приводить до лінійної функції

$$T(x) = T_{cm1} - \frac{T_{cm1} - T_{cm2}}{\delta} x. \quad (8.24)$$

До задач зовнішнього теплообміну належать задачі перенесення теплоти випромінюванням і конвекцією із зовнішнього середовища до поверхні тіла або у зворотному напрямку.

Кінетика променевого теплообміну визначається інтенсивністю випромінювання й відносним розташуванням тіл. Кількість теплоти, передана за допомогою випромінювання за одиницю часу від більш нагрітого тіла до менш нагрітого, визначається *рівнянням Больцмана*

$$Q_l = c_{1-2} F \left[\left(\frac{T_1}{100} \right)^4 - \left(\frac{T_2}{100} \right)^4 \right] \varphi_{1-2}, \quad (8.25)$$

де c_{1-2} - коефіцієнт взаємного випромінювання; F - площа поверхні випромінювання; T_1 і T_2 - температури поверхні більш і менш нагрітого тіла; φ_{1-2} - середній кутовий коефіцієнт.

Кінетика конвективного теплообміну описується *законом охолодження Ньютона*:

$$Q_k = \alpha F \Delta T, \quad (8.26)$$

де α - коефіцієнт тепловіддачі; ΔT - різниця температур на поверхні і в об'ємі.

Кінетика теплообміну між двома теплоносіями, розділеними стінкою, описується *рівнянням теплопередачі*

$$Q_{k2} = KF \Delta T_{сер}, \quad (8.27)$$

де K - коефіцієнт теплопередачі; $\Delta T_{сер}$ - середня різниця температур між теплоносіями.

Складний теплообмін – це процес перенесення теплоти, в якому беруть участь усі види теплообміну: теплопровідність, конвекція й випромінювання.

Густина теплового потоку при складній тепловіддачі дорівнює

$$q = q_k + q_l = \alpha_k (T_{сер} - T_{ст}) + \alpha_l (T_{сер} - T_{ст}) = \alpha_{заг} (T_{сер} - T_{ст}), \quad (8.28)$$

де q_k і q_l - густина теплових потоків, що переносяться конвекцією й випромінюванням; α_k і α_l - конвективна і променева складові коефіцієнта тепловіддачі; $\alpha_{заг}$ - сумарний коефіцієнт тепловіддачі.

У середовищі, що рухається, перенесення тепла може здійснюватися спільно конвекцією й теплопровідністю. З урахуванням цього при виведенні рівняння теплового балансу може бути отримане диференціальне рівняння конвективного теплообміну (рівняння Фур'є-Кірхгофа)

$$\frac{\partial T}{\partial t} \rho c_p = \text{div}(\lambda \text{grad } T) - \text{div}(\vec{w} \rho c_p T), \quad (8.30)$$

де \vec{w} - вектор швидкості рідини.

У такій загальній постановці задача про розподіл температури в потоці в'язкого середовища, що рухається, аналітичними методами не розв'язується. Теоретичний розгляд даної задачі можливий тільки у досить спрощених випадках.

Математичні моделі найпростіших типів теплообмінних апаратів

Теплообмінні апарати (теплообмінники) є найпоширенішими й необхідними елементами різних технологічних і енергетичних установок. На теплообмінники припадає значна частка капітальних вкладень і експлуатаційних витрат.

Задача проектування теплообмінного апарата не вичерпується визначенням розрахункової площі поверхні теплообміну, а часто виникає необхідність дослідження режимів його роботи. Зокрема, дуже важливо проаналізувати:

- *усталений* (стаціонарний) режим роботи;
- *перехідний процес*, що виникає у результаті збурень на вході, й визначити час виходу апарата на стаціонарний режим;
- *оптимальні умови роботи* залежно від обраного критерію оптимальності.

Ці й інші завдання можуть бути успішно вирішені тільки при використанні методу математичного моделювання на основі статичної або динамічної моделі.

Математичний опис процесів у теплообмінних апаратах

Математичний опис процесів у теплообмінних апаратах зручно записати у вигляді виразів, які характеризують зміну температури в потоці теплоносія в часі, обумовленому, по-перше, рухом потоку і, по-друге, теплопередачею.

Якщо структура потоку теплоносія відповідає моделі ідеального перемішування, то для математичного опису цього потоку можна використовувати рівняння (8.2-9) з урахуванням джерела тепла, що виникає в потоці за рахунок теплопередачі через поверхню теплообміну:

$$Vc_T \frac{dT}{dt} = wc_T(T_{\text{ex}} - T) + FK_T(T_1 - T_2), \quad (8.31)$$

де F — площа поверхні теплообміну; K_T — коефіцієнт теплопередачі; T_1, T_2 — температура первинного (що гріє) і вторинного теплоносіїв (їхня різниця - це рушійна сила теплообміну).

Якщо перемішування відсутнє і структура потоку теплоносія відповідає моделі ідеального витіснення, то для математичного опису цього потоку можна використовувати рівняння (8.32) з урахуванням теплопередачі:

$$S_e c_T \frac{\partial T}{\partial t} = -c_T w \frac{\partial T}{\partial l} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2), \quad (8.32)$$

де L — довжина зони витіснення (визначальний розмір теплообмінника).

У рівняннях (8.31) і (8.32), які являють собою математичний опис потоків теплоносіїв відповідно в режимах ідеального перемішування й ідеального витіснення з урахуванням теплопередачі прийнято, що коефіцієнт теплопередачі K_T через стінку, що розділяє первинний («гарячий») і вторинний («холодний») теплоносії, є сталою величиною, що не залежить від об'ємних витрат. Таке припущення спрощує математичний розв'язок задачі, однак у тих випадках, коли залежністю $K_T = f(w)$ не можна знехтувати, варто встановити її характер і внести в розрахункові вирази.

Можливі три типи теплообмінних апаратів, у яких потоки, що рухаються, первинного і вторинного теплоносіїв характеризуються різними з'єднаннями моделей ідеального перемішування й ідеального витіснення.

- Теплообмінник типу «перемішування — перемішування» (рис. 2.17).

Математична модель такого теплообмінника являє собою систему двох рівнянь типу

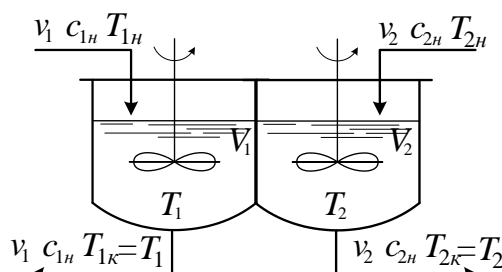


Рисунок 2.17 - Схема теплообмінника типу «перемішування - перемішування»

(8.32), записаних для первинного й вторинного теплоносіїв:

$$V_1 c_{1n} \frac{dT_1}{dt} = -c_{1n} w \frac{dT_1}{dl} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) \quad (8.33)$$

$$V_2 c_{2n} \frac{dT_2}{dt} = -c_{2n} w \frac{dT_2}{dl} + \frac{F}{L} K_T (T_2 - T_1) \quad (8.34)$$

де індекси 1 і 2 ставляться відповідно до первинного й вторинного теплоносія. Тут температури T_1 і T_2 мають сталі значення в кожній точці об'ємів V_1 і V_2 ідеального перемішування відповідно. T_{1i}, T_{2i} — початкові температури первинного і вторинного теплоносіїв; $T_1 = T_{1e}$ і $T_2 = T_{2e}$ — кінцеві температури первинного і вторинного теплоносіїв.

Величина $FK_T(T_1 - T_2)$ має знак «мінус» у рівнянні опису того потоку теплоносія, що віддає тепло, і знак «плюс», якщо тепло сприймається теплоносієм.

- Теплообмінник типу «перемішування — витіснення» (рис. 2.18).

Математична модель такого теплообмінника включає рівняння (8.32) для опису потоку первинного теплоносія й рівняння для опису потоку вторинного теплоносія:

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} + v_1 c_{1T} \frac{\partial T_1}{\partial l} = -c_{1T} w_1 \frac{\partial T_1}{\partial l} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) \quad (8.35a)$$

$$S_{2\sigma} c_{2T} \frac{\partial T_2}{\partial t} = -c_{2T} w_2 \frac{\partial T_2}{\partial l} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2). \quad (8.35б)$$

Тут значення T_1 залишаються однаковими в кожній точці об'єму ідеального перемішування, а

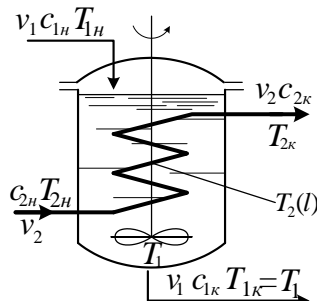


Рисунок 2.18 - Схема теплообмінника типу „перемішування - витіснення”

T_2 змінюються по довжині зони ідеального витіснення, тобто $T_2(l)$.

- **Теплообмінник типу «витіснення — витіснення»**, або так званий теплообмінник типу «труба в трубі» (рис. 2.19), для якого математична модель має вигляд системи двох рівнянь типу (8.33):

$$S_{1\sigma} c_{1T} \frac{\partial T_1}{\partial t} = -c_{1T} w_1 \frac{\partial T_1}{\partial l} - \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2), \quad (8.36a)$$

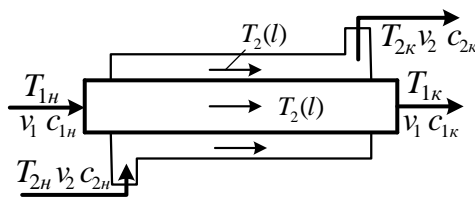


Рисунок 2.19 - Схема теплообмінника типу „витіснення - витіснення”

$$S_{2\sigma} c_{2T} \frac{\partial T_2}{\partial t} = -c_{2T} w_2 \frac{\partial T_2}{\partial l} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2). \quad (8.36б)$$

Тут значення T_1 і T_2 змінюються по довжині відповідних зон ідеального витіснення. Залежно від співвідношення потоків первинного і вторинного теплоносіїв цей тип теплообмінників поділяється на **прямотечійні** (входи теплоносіїв з одного боку) і **протитечійні** (входи теплоносіїв з різних боків). Математичний опис обох видів теплообмінників залишається незмінним, змінюються тільки крайові умови.

Для реальних теплообмінних апаратів, у яких структура потоків теплоносіїв наближається до структури потоків ідеального перемішування або ідеального витіснення, можна вибирати одну з розглянутих моделей (8.35) - (8.36). В інших випадках реальний теплообмін характеризується моделями, що займають проміжне положення між моделями ідеального перемішування й ідеального витіснення, наприклад, одно- або двопараметричними дифузійними моделями.

Якщо режим теплообміну описується моделлю із зосередженими параметрами (8.36), то розв'язок такої моделі порівняно нескладний. Навпаки, оскільки модель із розподіленими параметрами записується у вигляді диференціальних рівнянь у частинних похідних, то її розв'язок пов'язаний з відомими труднощами. Тому в деяких випадках, якщо це не призводить до ще більших спотворень, модель із розподіленими параметрами заміняють на модель із зосередженими параметрами. Зокрема, таку заміну можна зробити для деяких

протитечійних теплообмінників при дотриманні умови $\Delta T_B / \Delta T_M < 2$, де ΔT_B й ΔT_M — відповідно більша й менша різниці температур теплоносіїв на вході й виході.

Тема 9. Експериментальний метод побудови математичних моделей.

Підготовка й проведення експерименту. Попередня обробка даних.

Екстраполяція. Інтерполяція.

Згладжування експериментальних даних.

Оцінка наявності й сили зв'язку між досліджуваними величинами. Основні поняття кореляційного аналізу.

Коефіцієнти коваріації й кореляції. Вибірковий коефіцієнт лінійної кореляції Пірсона.

Перевірка статистичної гіпотези про значущість вибіркового коефіцієнта лінійної кореляції Пірсона.

Експериментальний метод побудови математичних моделей

У багатьох випадках (складність об'єкта моделювання або недостатня вивченість процесів, неможливість прийнятної ідеалізації гідродинамічних режимів та ін.) побудова математичної моделі аналітичним методом виявляється неможливою. У таких випадках може бути використаний експериментальний (емпіричний, експериментально-статистичний, формальний, метод "чорного ящика") метод побудови математичного опису. *Суть цього методу полягає в одержанні спрощених виразів для функціональних зв'язків між змінними процесу, що нас цікавлять, тобто таких, які б відображали з достатньою точністю й надійністю приховані за «випадковістю» закономірності.* При використанні цього методу експеримент стає основним джерелом інформації, а апарат теорії ймовірностей і математичної статистики — основним засобом обробки результатів.

Експериментальний метод дозволяє одержати математичний опис діючого об'єкта без докладного дослідження його внутрішньої структури. З метою досліджень досліджуваній



Рисунок 3.1 - Схематичне зображення «чорного» ящика

об'єкт зручно представити у вигляді деякого «ящика» (див. рис. 3.1), що має тільки входи й виходи. Звичайно, перетворення в «ящику» (на об'єкті) відбуваються (сигнали проходять по лініях зв'язку і елементах, змінюють свою форму й т.п.), але при такому представленні вони відбуваються приховано від спостерігача.

За ступенем інформованості дослідника про об'єкт існує поділ об'єктів на три типи «ящиків»:

- «білий ящик»: про об'єкт відомо все;
- «сірий ящик»: відома структура об'єкта, але не відомі кількісні значення параметрів;
- «чорний ящик»: про об'єкт не відомо нічого.

Модель "чорного ящика" – це модель об'єкта, створена без урахування внутрішніх властивостей об'єкта, без урахування фізичної суті процесів, що відбуваються у ньому.

Задача одержання математичної моделі з використанням експериментального методу може бути представлена у вигляді *послідовності етапів*:

- ✓ підготовка і проведення експерименту;
- ✓ попередня обробка експериментальних даних;
- ✓ оцінка сили зв'язку між досліджуваними величинами (вхідними й вихідними змінними);
- ✓ підбір виду функціональної залежності;
- ✓ визначення параметрів математичної моделі (параметрична ідентифікація);
- ✓ перевірка адекватності отриманої моделі досліджуваному об'єкту.

Залежно від конкретних вимог до математичної моделі й умов проведення експериментальних досліджень окремі етапи розроблення можуть бути відсутніми, а деякі повторяться, однак у цілому зазначена послідовність дій дотримується завжди.

Підготовка й проведення експерименту

Можливий характер проведення експерименту визначається такими факторами, як:

- ступенем складності й вивченості об'єкта моделювання;
- можливістю й точністю контролю й реєстрації змінних, що нас цікавлять;
- допустимістю ризику при проведенні експериментів.

Залежно від поєднання зазначених факторів можливе проведення експериментів двох видів: *пасивного й активного експерименту*.

Пасивний експеримент полягає у спостереженні за ходом нормально працюючого об'єкта, тобто виконуються збір і аналіз інформації про технологічні змінні об'єкта без спеціального втручання у хід процесу. *Перевагою даного методу є мінімальні витрати на проведення експерименту. Недоліки:*

- ✓ у нормальних умовах експлуатації коливання технологічного режиму невеликі, й тому експериментальні точки близькі одна до одної. У цих умовах на точність опису можуть сильно вплинути випадкові помилки;
- ✓ як наслідок із попереднього - необхідність одержання досить великої кількості експериментальних даних.

Пасивний експеримент застосовується в тих випадках, коли існує високий ризик втрат при проведенні експериментів, пов'язаних із втручанням у нормальний хід процесу.

Активний експеримент полягає у цілеспрямованій зміні вхідних управляючих змінних технологічного процесу і у спостереженні за отримуваною реакцією. Тут також розрізняють два методи.

Перший метод припускає подачу на управляючі входи технологічного об'єкта спеціально сформованих тестових сигналів і фіксацію одержуваного відгуку на виході. Як такі сигнали використовуються: ступінчасті стрибкоподібні, синусоїдальні, імпульсні й ін. (див. рис. 3.3). Дослідження об'єкта при нанесенні тестових збурень помітно спрощує обробку одержуваної інформації. Цей метод активного експерименту *застосовується насамперед для вивчення динамічних властивостей об'єкта, при визначенні гідродинамічної обстановки й ін.*

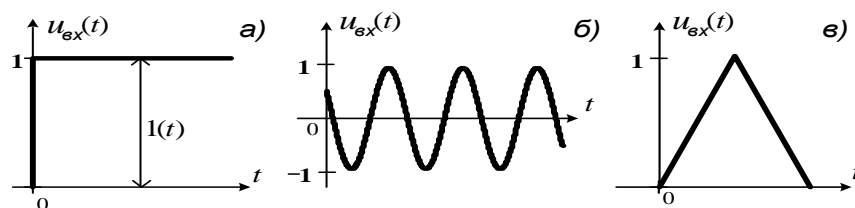


Рисунок 3.2 - Типові вхідні впливи:
а) ступінчастий; б) синусоїдальний; в) імпульсний

В основу другого методу покладено планування експерименту. Відомо, що практично всі процеси хімічної технології є складними, і на їхній хід впливає велике число змінних (факторів). *Можливі два підходи до дослідження таких багатофакторних систем.* Перший базується на тому, що дослідження об'єкта розбивається на серії, у кожній з яких досліджується зміна тільки одного параметра при фіксованих інших. Другий підхід базується на побудові плану експерименту, що передбачає зміну всіх факторів, що на нього впливають, і називається багатофакторним (див. рис. 3.3). Такий план повинен забезпечити максимум

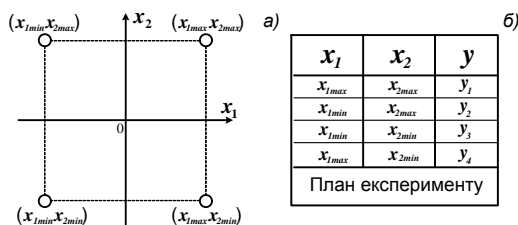


Рисунок 3.3 - Ілюстрація методу планування експерименту:
а) рівні факторів; б) план факторного експерименту

точності. Перевагою першого підходу є його наочність і простота інтерпретації одержуваних результатів. Другий підхід значно ефективніший: при тому самому обсязі експериментальних досліджень і тій самій точності дослідів отримується істотно більша точність результатів. Цей метод активного експерименту застосовується для вивчення статичних властивостей (характеристик) об'єкта.

Для пояснення ідеї методу планування експерименту як приклад розглянемо вплив температури x_1 й часу перебування x_2 на вихід продукту y (рис. 3.3). Математичну модель отримаємо у вигляді полінома 1-го ступеня лінійного рівняння вигляду

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 \quad (9.1)$$

Для цього використовуємо план експерименту 1-го порядку, що розробляється в такий спосіб: вибирається центр досліджуваної області (центр плану), і в нього переноситься початок координат (рис. 3.3а). Задаються мінімальні (*min*) і максимальні (*max*) значення вхідних параметрів x_1 і x_2 . Складається план експерименту (рис. 3.3б) так, що при цьому кожний фактор набуває лише два значення – тобто варіюється на двох рівнях (верхньому й нижньому).

На наступному етапі змінні кодується. При цьому координати центра плану прирівнюються до нуля, а інтервали варіювання беруть за одиницю. Кодування змінних значно полегшує обробку результатів дослідів, яка у цьому випадку проводиться у стандартній формі, що не залежить від конкретних особливостей задачі.

Розглянутий у прикладі план побудований так, що кожний фактор варіюється на двох рівнях, причому в досліді перебираються всі можливі комбінації двох рівнів факторів. Такий план називають планом повного факторного експерименту на двох рівнях.

Основоположником методу планування експерименту є англійський статистик Рональд Фішер. У сучасному вигляді методи побудови статистичних моделей стали розвиватися після виходу праці Боксу й Уїлсона в 1951 р.

Попередня обробка даних

До операцій із попередньої обробки даних експерименту належать: оцифрування результатів, отриманих на паперових носіях; екстраполяція; інтерполяція; згладжування.

Необхідно зазначити, що операції оцифрування й згладжування результатів експерименту виникають в основному як складова частина створення математичної моделі експериментальним методом, тоді як операції екстраполяції й інтерполяції мають і самостійне значення.

Оцифрування результатів

Хоча сучасні прилади, як правило, мають можливість безпосереднього формування результатів своєї роботи у цифровій формі, але усе ще залишається значна кількість паперових носіїв (діаграм), створених за старих часів або отриманих зараз старими приладами.

При роботі із паперовими носіями неминує постає питання про переведення всієї інформації у цифрову форму. Оцифрування нині проводиться двома шляхами - автоматичним і ручним. Зрозуміло, автоматичний метод має переваги, оскільки він більш швидкий й легший.

Однак для автоматичного оцифрування потрібна дуже висока якість зображень і можливість чіткого розділу (як правило, колірного) інформації різного роду. На практиці така якість досягається далеко не завжди, а часто наявні паперові носії мають дефекти та й виконані, як правило, в одній колірній гамі.

Тому поряд із процесами автоматичного оцифрування, незважаючи на більшу трудомісткість, усе ще велике поширення має і метод ручного оцифрування. Екстраполяція

Екстраполяція визначається як *поширення висновків, отриманих зі спостереження над однією частиною явища на іншу частину цього самого явища*. По суті, це особливий тип

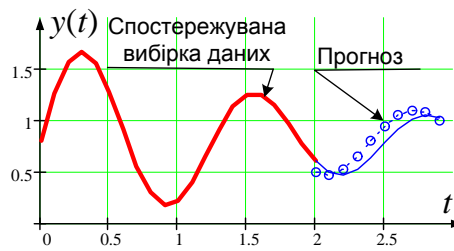


Рисунок 3.4 - Екстраполяція

апроксимації, при якому функція апроксимується поза заданим інтервалом, а не між заданими значеннями. Тобто екстраполяція — наближене визначення значень функції $f(x)$ в точках x , що лежать поза відрізком $[x_0, x_n]$, за її значеннями у точках $x_0 < x < x_n$ (див. рис. 3.4).

Операція екстраполяції застосовується за необхідності за наявним набором (вибіркою) експериментальних даних оцінити наступні N значень, які або об'єктивно неможливо одержати, або вони виявилися загубленими.

Методи екстраполяції у багатьох випадках подібні до методів інтерполяції.

Інтерполяція

Частіше виникає необхідність в інтерполяції даних, яка використовується в математиці й статистиці для відшукування проміжних значень величини за деякими відомими її значеннями. Наприклад, відшукування значень функції $f(x)$ у будь-яких точках x , що лежать між точками $x_0 < x < x_n$ (вузлами інтерполяції), за відомим значенням

$$y_i = f(x_i) \quad (\text{де } i = 0, 1, \dots, n) \quad (9.2)$$

Ідея інтерполяції різними методами проілюстрована на рис. 3.5. Невідому залежність, представлену деякою кількістю значень, отриманих, наприклад, у результаті досліджень, замінюють якою-небудь відомою, наприклад степеневим поліномом (інтерполяція за загальною формулою Лагранжа, інтерполяція кубічним сплайном). При цьому ступінь

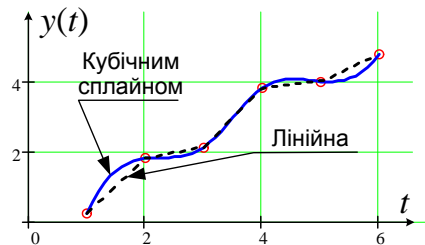


Рисунок 3.5 - Інтерполяція

полінома однозначно пов'язаний із числом вузлових точок, тому графік отриманої залежності проходить через експериментальні точки точно, але між точками характер поведінки інтерполяційної кривої залежно від методу інтерполяції може бути різним. Так, при лінійній інтерполяції існуючі точки даних з'єднуються прямими лініями, а інтерполяція кубічним сплайном дозволяє провести криву через набір точок таким чином, що перші й другі похідні кривої будуть безперервними в кожній експериментальній точці.

Згладжування експериментальних даних

Важко уявити собі експеримент без наявності випадкової складової (помилки), що може бути викликана як об'єктивними факторами (несправність вимірювальної апаратури, зовнішні перешкоди й ін.), так і суб'єктивними причинами (неуважність експериментатора, помилки при записі або обробці даних дослідів та ін.). З метою зменшення впливу на кінцеві результати випадкових відхилень застосовують операцію згладжування.

Загальна ідея всіх методів згладжування — уточнення кожної ординати з урахуванням значень декількох найближчих. Інакше кажучи, згладжування передбачає використання набору експериментальних значень y (i , можливо, значень x , що їм відповідають) і отримання нового набору значень y , що є більш гладким, ніж початковий набір (див. рис. 3.6).

Існує кілька методів згладжування. Розглянемо докладніше лінійне згладжування, методи якого відомі за назвою *згладжування ковзним середнім* (ковзної медіани) за n точками, де n може набувати непарних значень з ряду 3, 5, 7 і т.д. Суть методу ковзного середнього

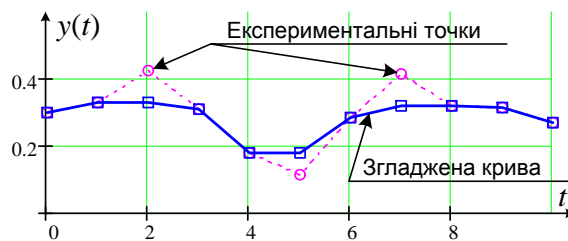


Рисунок 3.6 - Згладжування експериментальних даних

полягає в послідовній заміні деяких груп n підряд розташованих значень на їх середньоарифметичне значення (ця група неналежить до набору даних). *Недоліком методу* є проблема втрати експериментальних даних на початковій і кінцевій ділянках вибірки. При цьому чим більше береться значення n , що посилює ефект згладжування, тим більше точок губиться. З цієї причини метод ковзної медіани, незважаючи на високу стійкість до зашумленості, знаходить обмежене застосування у випадку незначних обсягів експериментальних даних. Зазначеного недоліку позбавлена симетрична лінійна процедура згладжування методом найменших квадратів за правилом n -найближчих сусідів.

Оцінка наявності й сили зв'язку між досліджуваними величинами

Для нескладних і невідкладних сильним шумам процесів (об'єктів) з одним входом і одним виходом це досить тривіальне завдання, яке, як правило, *полягає в побудові графіка експериментальної залежності* (див. рис. 3.7а) і *спробі «вгадати» за його зовнішнім виглядом характер функціональної залежності: лінійний, параболічний, експонентний або який-небудь інший*.

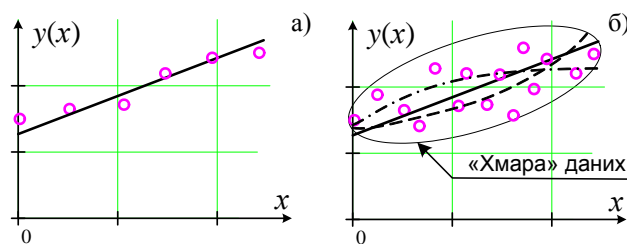


Рисунок 3.7 - Характер експериментальних даних:
а) слабко зашумлених; б) сильно зашумлених

Однак якщо об'єкт багатовимірний (кілька входів і виходів) з наявністю перехресних зв'язків, а дані експерименту слабко помітні на фоні шумів, то однозначно оцінити ступінь впливу тих або інших вхідних змінних на вихідні не є можливим або вкрай важко (див. рис. 3.7б).

Задача виявлення слабко помітних закономірностей (на фоні шумів) у часі й установлення взаємозв'язків і взаємовпливу між випадковими процесами (змінними) з кількісною оцінкою сили цих зв'язків розв'язується за допомогою *кореляційного аналізу*.

Кореляційний аналіз експериментальних даних містить у собі такі основні практичні прийоми: побудова кореляційного поля («хмари» даних) і складання кореляційної таблиці; обчислення вибірових коефіцієнтів кореляції або кореляційного відношення; перевірка статистичної гіпотези значущості зв'язку.

Основні поняття кореляційного аналізу

Величини можуть бути або незалежними, або пов'язаними функціональною або стохастичною (імовірнісною) залежністю. Прикладом функціональної залежності є залежність довжини кола $l = 2\pi R$ від її радіуса.

У більшості випадків між змінними існують залежності, при яких кожному значенню однієї величини (аргументу) відповідає *не якась певне значення* іншої величини, *а безліч її*

можливих значень – певний розподіл. Така залежність називається стохастичною, або імовірнісною. Наприклад, з однієї ділянки при однаковій кількості внесених добрив збирають у різні роки різний урожай.

Окремим випадком імовірнісної залежності є *кореляційна залежність* (від лат. *correlatio* – зв'язок, співвідношення, залежність) – стохастична залежність між випадковими величинами, при якій спостерігається *функціональна залежність між значеннями однієї величини й середніми значеннями іншої величини*. Зв'язок між кількістю добрив і зібраним урожаєм кореляційний, тому що, як показує досвід, середній урожай і кількість внесених у ґрунт добрив можуть бути пов'язані між собою функціональною залежністю.

Зображені на координатній площині точки (x_i, y_i) , де x_i і y_i – значення незалежної і залежної змінних, називаються кореляційним полем (рис. 3.7). Аналітична функція, що апроксимує (наближено описує) спостережувані емпіричні значення, називається функцією регресії.

Наявність кореляційної залежності між змінними не завжди означає наявність безпосереднього зв'язку цих величин одна з одною: спостережуваний зв'язок часто існує завдяки іншим змінним (не цим двом розглянутим), а досліджувані величини можуть бути пов'язані між собою через латентні (приховані від дослідника) змінні.

Кореляційний зв'язок, на відміну від функціонального, *показує лише тенденцію* зміни однієї величини під дією іншої, отже, на підставі кореляції можна стверджувати лише про ступінь зв'язку між змінними, але не про існування однозначної причинно-наслідкової залежності між ними. Інакше кажучи, факт кореляції змінних аж ніяк не означає, що одна з них викликає іншу, однак *дає можливість висунути таку гіпотезу*.

Кореляційні зв'язки розрізняються за тісністю (силою) зв'язку й кількістю змінних.

За силою кореляційного зв'язку прийнято виділяти: 1) функціональну; 2) тісну (сильну); 3) середню (помірну); 4) слабку й 5) нульову (що є відсутньою).

За кількістю змінних кореляція може бути парною (між двома змінними) і множинною (між декількома змінними).

Форма парної кореляції може бути лінійною, описуваною лінійною функцією регресії, і нелінійною (криволінійною), описуваною нелінійними функціями (рис. 3.7б). Нелінійні зв'язки у дослідженнях трапляються значно частіше.

Як видно з рис. 3.7, у випадку парної кореляції кореляційне поле («хмара» даних) являє собою еліпс. При цьому, чим тісніший кореляційний зв'язок, тим еліпс більш стиснутий; у випадку функціонального зв'язку він перетвориться в пряму, а за відсутності - у коло.

Коефіцієнти коваріації й кореляції

Для оцінки тісноти (сили) лінійного зв'язку служать коефіцієнти коваріації й кореляції. Коефіцієнт коваріації (другий змішаний момент) являє собою математичне сподівання добутку відхилень величин від їхніх математичних сподівань:

$$\sigma_{xy} = \overline{(x - m(x))(y - m(y))}, \quad (9.3)$$

де $m(x), m(y)$ - математичні сподівання змінних x, y . Якщо розглянуті величини x, y незалежні, то коефіцієнт коваріації дорівнює нулю. У випадку ж наявності лінійного зв'язку між величинами коефіцієнт коваріації відмінний від нуля.

Оскільки значення коефіцієнта коваріації залежить від одиниць виміру досліджуваної ознаки, то його величина змінюється при зміні масштабу вимірюваної шкали. Для одержання показника, що давав би порівнянні між собою значення, коефіцієнт коваріації нормують – ділять на максимально можливе значення коваріації. Нормоване значення коефіцієнта коваріації називається генеральним коефіцієнтом лінійної кореляції (або просто коефіцієнтом кореляції):

$$\rho(x, y) = \frac{\text{cov}(x, y)}{\sigma_x \sigma_y} = \frac{M[(x - m(x))(y - m(y))]}{\sigma_x \sigma_y}, \quad (9.4)$$

де σ_x, σ_y - стандартне відхилення випадкової величини (дисперсія).

Коефіцієнт кореляції являє собою безрозмірну величину, що змінюється в межах від -1 до $+1$. Значення коефіцієнта кореляції виражає частку від максимально можливої коваріації, у чому і є його перевага перед коефіцієнтом коваріації.

При $\rho = \pm 1$ кореляційний зв'язок являє собою лінійну функціональну залежність, при цьому всі спостережувані значення розміщуються на прямій (рис. 3.7a). При $\rho = 0$ лінійний кореляційний зв'язок відсутній, і кореляційне поле являє собою коло. Чим ближче значення $|\rho|$ до одиниці, тим із більшою ймовірністю можна вважати, що досліджувані величини перебувають у лінійній кореляційній залежності (але не в причинно-наслідковій!).

Для незалежних випадкових величин коефіцієнт кореляції дорівнює нулю. Однак рівність нулю коефіцієнта кореляції ще не означає незалежність випадкових величин: вона свідчить лише про відсутність лінійної кореляційної залежності між досліджуваними величинами, але не залежності взагалі. Коефіцієнт кореляції може дорівнювати нулю у випадку нелінійного зв'язку між змінними.

Напрямок лінійного кореляційного зв'язку (нахил) визначається знаком коефіцієнта кореляції: для «прямого», додатного зв'язку $\rho > 0$, для «зворотного», від'ємного зв'язку $\rho < 0$.

Тіснота (сила) лінійного зв'язку між випадковими величинами визначається абсолютною величиною коефіцієнта кореляції $|\rho|$.

Вибірковий коефіцієнт лінійної кореляції Пірсона

Вибірковий коефіцієнт лінійної кореляції Пірсона використовується для оцінки тісноти (сили) зв'язку між двома змінними у випадках, якщо:

- 1) розглянутий зв'язок лінійний;
- 2) обидві змінні обмірювані в сильних шкалах (реляційній або інтервальній), і являє собою відношення вибіркового коефіцієнта коваріації до добутку вибіркових середніх квадратичних відхилень s_x, s_y :

$$r = \frac{\overline{CO(X,Y)}}{s_x s_y}, \quad (9.5)$$

де $\overline{CO(X,Y)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$; $s_x = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$; $s_y = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}$; x_i, y_i - числові значення розглянутих змінних; N - об'єм вибірки.

Величина вибіркового коефіцієнта лінійної кореляції Пірсона, як і генерального, змінюється в межах від -1 до $+1$.

При малому об'ємі вибірки ($N < 100$) значення вибіркового коефіцієнта лінійної кореляції Пірсона необхідно коригувати за формулою

$$r' = \left[\frac{1-r^2}{2n-3} \right] \quad (9.6)$$

Перевірка статистичної гіпотези про значущість вибіркового коефіцієнта лінійної кореляції Пірсона

Вибірковий коефіцієнт лінійної кореляції Пірсона, як і всі вибіркові характеристики, є випадковою величиною й при повторенні серії вимірювань може набувати інших значень. Тому для незалежних випадкових величин, для яких генеральний коефіцієнт кореляції ρ дорівнює нулю, вибірковий коефіцієнт r може помітно відрізнятися від нуля й навпаки. У зв'язку з цим завжди виникає важлива практична задача, що полягає у перевірці статистичної гіпотези про значущість вибіркового коефіцієнта кореляції.

Статистична гіпотеза h – це припущення, що належить до виду або числових характеристик розподілу випадкових величин, яке може бути перевірене в результаті експерименту. Нульова гіпотеза h_0 полягає у відсутності лінійного кореляційного зв'язку між досліджуваними змінними в генеральній сукупності, тобто $\rho = 0$. Альтернативною

гіпотезою h_1 є твердження про те, що генеральний коефіцієнт кореляції ρ не дорівнює нулю: $\rho \neq 0$.

Будь-яка статистична гіпотеза, як правило, перевіряється на підставі деякого певного правила, що однозначно встановлює умови, при яких цю гіпотезу варто прийняти або спростувати. Це правило називається *статистичним критерієм правильності* гіпотези, або *критерієм згоди* гіпотези з експериментом.

Загальна ідея побудови цього правила полягає в такому. Нехай фактичне значення деякого параметра α дорівнює α_0 . Задавшись припустимою різницею $\Delta\alpha_{\text{до}}$ (критерієм згоди), перевіряємо експериментально значення α . У результаті експерименту знаходимо оцінку параметра $\hat{\alpha}$, яка є випадковою величиною, і в загальному випадку не збігається з α_0 . Однак відхилення оцінки від істинного значення $\Delta\alpha = \hat{\alpha} - \alpha_0$ не повинне бути значним, інакше це не можна пояснити випадковістю, і гіпотеза про рівність $\alpha = \alpha_0$ не підтверджується і повинна бути відхилена.

Хоча такий підхід дозволяє з великою впевненістю відхиляти помилкові гіпотези, він не може бути доказом їхньої справедливості, а тільки підтвердженням факту узгодження з експериментом із досить великою імовірністю.

Перевірка нульової гіпотези здійснюється по-різному, залежно від обсягу вибірки.

1. Великий обсяг вибірки ($N \geq 100$)

Перевірка нульової гіпотези в цьому випадку здійснюється за допомогою *критерію Стьюдента* і полягає в обчисленні величини

$$|t| = \frac{|r|}{\sqrt{1-r^2}} \sqrt{N-2}, \quad (9.7)$$

яка потім порівнюється із критичними значеннями $t_{\alpha}(df)$ для обраного рівня значущості α і числа ступенів вільності $df = N - 2$.

Якщо значення $|t|$ потрапляє в область допустимих значень, тобто якщо виконується умова $|t| \leq t_{\alpha}(N-2)$, нульова гіпотеза $\rho = 0$ не відкидається, але вважається, що в цьому випадку лінійний зв'язок між розглянутими змінними відсутній.

2. Обмежений обсяг вибірки ($N < 100$)

У цьому випадку для *перевірки гіпотези про відсутність кореляції* між досліджуваними величинами використовується *критерій Фішера*, що полягає в обчисленні величини

$$u = \frac{1}{2} \ln \frac{1+r'}{1-r'}, \quad (9.8)$$

де r' – скориговане значення вибіркового коефіцієнта кореляції з наступним порівнянням обчисленого значення u із критичним.

Тема 10. Підбір виду функціональної залежності.

Визначення параметрів залежності.

Наближення функцій за допомогою нейронних мереж.

Визначення адекватності математичної моделі.

Підбір виду функціональної залежності

Якщо факт наявності функціонального зв'язку між змінними встановлений, наступним кроком є визначення виду функціональної залежності.

Іноді вид функціональної залежності відомий апріорі на підставі деяких теоретичних міркувань, і тоді можна перейти безпосередньо до задачі визначення невідомих коефіцієнтів (параметрів) відомої залежності за даними експериментів.

Однак часто вид функціональної залежності не відомий і тоді його намагаються «відгадати» із числа найпоширеніших за характером розташування експериментальних даних (за видом «хмари» даних). Оскільки такий підхід (угадкування) не гарантує задовільного результату, то цей і наступний кроки побудови математичної моделі експериментальним методом мають ітераційний характер: послідовно задаючись певними функціональними залежностями, знаходять невідомі параметри і, порівнюючи ступінь збігу, вибирають остаточно ту залежність, що описує (апроксимує) експериментальні дані найбільш адекватно.

Найбільш часто цю залежність представляють алгебраїчним многочленом. Як правило, спочатку використовують більш прості многочлени, а відхилення експериментальних точок від розрахункових значень порівнюють із випадковою помилкою експерименту. Якщо обидві величини одного порядку, то опис вважають задовільним. Якщо відхилення не можна пояснити випадковою помилкою, то використовують більш складний многочлен. У міру збільшення порядку многочлена точність опису зростає, але одночасно, по-перше, збільшується необхідне число дослідів для знаходження коефіцієнтів многочлена, по-друге, ускладнюється трактування моделі.

Визначення параметрів залежності

Задача визначення невідомих параметрів (коефіцієнтів) відомої функціональної залежності за наявними вимірюваннями на діючому об'єкті виникає як при використанні експериментального методу побудови математичної моделі, так і у випадку застосування теоретичного підходу.

Задача регресійного аналізу

У практичних додатках (особливо у статистиці) задача визначення невідомих параметрів відома як *задача регресійного аналізу*, що у вузькому сенсі зводиться до типових задач апроксимації, а в широкому - відповідає поняттю ідентифікації.

Назву «регресія» (від лат. *regressio* – рух назад) у 1886 році увів Ф. Гальтон (англ.), який, вивчаючи залежність між зростом батьків і їхніх дітей, виявив *явище регресії до середнього*: у дітей, що народилися в дуже високих і низьких батьків, ріст мав тенденцію бути ближче до середньої величини. (Це було інтерпретовано ним як «регресія до посередності»). Помилки у міркуваннях Гальтона були прояснені пізніше.)

Функція регресії відображає тенденцію зміни однієї величини під дією іншої і будується таким чином, щоб емпіричні (отримані в досвіді) точки кореляційного поля лежали якнайближче до неї. Функція регресії може бути лінійною, параболічною, логарифмічною та ін.

Математичні основи регресійного аналізу зручно розглянути на порівняно простому прикладі отримання рівняння лінійної регресії.

Нехай деякі змінні процесу x (вхідна) і y (вихідна) пов'язані лінійною залежністю (візьмемо таке припущення, можливо, підкріплене кореляційним аналізом):

$$y = a + bx, \quad (10.1)$$

де a, b - постійні й невідомі поки що коефіцієнти. Графічно ця функціональна залежність зображується відрізком прямої лінії (див. рис. 3.8) з нахилом, обумовленим коефіцієнтом b , яка пересікає вісь ординат у точці a .

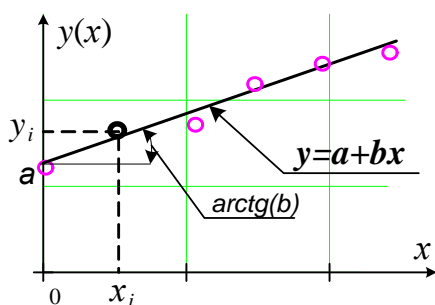


Рисунок 3.8 - До розуміння лінійної регресії

У результаті прове-дення N експериментів отримані значення $X \rightarrow Y \rightarrow X$ вихід-ної змінної при відпо-відних значеннях вхідної змінної $X \rightarrow Y \rightarrow X$. Варто відмітити, що значення вхідної змінної x_i цілком детерміновані (тобто в них немає випадкової складової, якщо не враховувати систематичну похибку виміру), а значення вихідної змінної y_i , що відповідають їм, уже мають випадковий характер. Це пов'язане з тим, що похибки вимірювань, наявність шумів і вплив збурень неминуче призводять до деякого розкиду значень вихідної

змінної, залежного від способу вимірювань й умов експерименту. *Найбільше, що в цих умовах можна вимагати, це те, щоб відстань кожної із експериментальних точок від теоретично очікуваної прямої була порівнянна в розумних межах із похибкою.*

При обробці результатів подібних експериментів завжди виникають дві задачі:

1.1 якщо прийняти той факт, що змінні x і y зв'язані між собою лінійно (або якимось по-іншому), то ми розглядаємо задачу визначення коефіцієнтів рівняння (10.5-1) a і b , таких, які найкраще апроксимували б (описали, наблизили) результати вимірів. Найпростіше ця задача (особливо для лінійного випадку) розв'язується графічно, однак точність апроксимації невисока й похибка непередбачувана. Аналітичні методи максимальної правдоподібності (наприклад, метод найменших квадратів) дають більш задовільні результати. *Знайдена таким способом пряма називається лінійною регресією x на y ;*

2.1 друга задача полягає в тому, щоб визначити, чи дійсно виміряні значення x_i і y_i виправдовують наші очікування щодо обраного виду залежності, тобто виникає задача перевірки адекватності отриманого рівняння експериментальним даним.

Через отримані в результаті експерименту точки (див. рис. 3.8) взагалі можна провести незліченну множину прямих, які відрізняються між собою насамперед точністю апроксимації. Найбільше поширення серед критеріїв оцінки близькості розрахункової прямої (або якої-небудь іншої лінії) до експериментальних даних набув критерій мінімізації суми квадратів відхилень розрахункових значень y_{im} від дослідних y_{ie} :

$$\sum_{i=1}^N (y_{ie} - y_{im})^2 = \sum_{i=1}^N (y_{ie} - (a + bx_{ie}))^2 = S \rightarrow \min, \quad (10.2)$$

де x_{ie} - дослідне значення вхідної змінної, що відповідає y_{ie} . Найкраще наближення буде мати пряма з коефіцієнтами a й b , отриманими з умови мінімуму цього виразу. Як бачимо, ця задача зводиться до класичної задачі мінімізації функції двох невідомих змінних, за які беруть параметри прямої a і b . Щоб розв'язати цю задачу, необхідно продиференціювати вираз (10.2) за шуканими параметрами і прирівняти отримані рівняння до нуля. У результаті одержимо систему із двох рівнянь із двома невідомими параметрами

$$\frac{dS}{da} = -2 \sum_{i=1}^N (y_{ie} - a - bx_{ie}) = 0, \quad (10.3a)$$

$$\frac{dS}{db} = -2 \sum_{i=1}^N (y_{ie} - a - bx_{ie})x_{ie} = 0. \quad (10.3б)$$

Після нескладних перетворень одержимо остаточно систему рівнянь

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N y_{ie} = aN + b \sum_{i=1}^N x_{ie}, \\ \sum_{i=1}^N y_{ie} x_{ie} = a \sum_{i=1}^N x_{ie} + b \sum_{i=1}^N x_{ie}^2, \end{cases} \quad (10.4)$$

яка легко розв'язується відносно a і b . У результаті одержуємо

$$a = \frac{\sum_{i=1}^N y_{ie} \sum_{i=1}^N x_{ie}^2 - \sum_{i=1}^N y_{ie} x_{ie} \sum_{i=1}^N x_{ie}}{N \sum_{i=1}^N x_{ie}^2 - (\sum_{i=1}^N x_{ie})^2};$$

$$b = \frac{N \sum_{i=1}^N y_{ie} x_{ie} - \sum_{i=1}^N y_{ie} \sum_{i=1}^N x_{ie}}{N \sum_{i=1}^N x_{ie}^2 - (\sum_{i=1}^N x_{ie})^2}.$$
(10.5)

Величина $S = \sum_{i=1}^N (y_{ie} - y_{im})^2 = \sum_{i=1}^N \Delta y_i^2$ називається *залишковою сумою квадратів*. Метод гарантує, що ця величина буде мінімально можливою.

Викладений вище підхід може бути легко поширений на будь-яку функціональну залежність (наприклад, поліном будь-якого порядку), однак із зростанням кількості невідомих параметрів ускладнюється система рівнянь і її розв'язок стає громіздким.

В особливо складних випадках замість аналітичних використовують числові методи нелінійного програмування (наприклад, градієнтні, найшвидшого спуску й ін.).

Наближення функцій за допомогою нейронних мереж

Останніми роками з'явився новий алгоритмічний апарат *наближення функцій багатьох змінних за допомогою лінійних операцій і суперпозицій функцій однієї змінної*. Таке наближення здійснюється спеціальними формальними пристроями – *нейронними мережами*, які складаються з формальних *нейронів*.

Нейрон одержує на вході вектор сигналів x , обчислює його скалярний добуток на вектор ваги α і деяку функцію однієї змінної $\varphi(z)$, де z — скалярний добуток x на α . Результат розсилається на входи інших нейронів або передається на вихід. Таким чином, нейронні мережі обчислюють суперпозиції простих функцій однієї змінної і їхніх лінійних комбінацій.

Для опису алгоритмів і пристроїв у нейроінформатиці розроблена спеціальна схемотехніка, у якій елементарні пристрої — суматори, синапси, нейрони і т.п. — поєднуються в нейронні мережі, призначені для розв'язання задач. Найбільш важливі елементи нейросистем — *адаптивний суматор* і *нелінійний перетворювач*. Адаптивний суматор обчислює скалярний добуток вхідного сигналу x на вектор параметрів α (рис. 3.9).

Адаптивним його називають через наявність вектора параметрів α , що налаштовуються. Нелінійний перетворювач одержує скалярний вхідний сигнал z і перетворює його у сигнал $\varphi(z)$ (рис. 3.10).

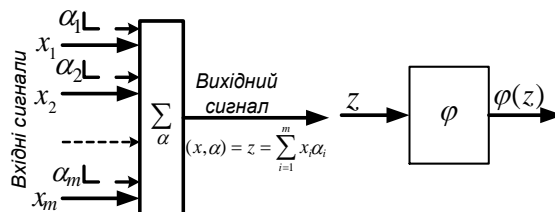


Рисунок 3.9 - Адаптивний суматор

Рисунок 3.10 - Нелінійний перетворювач сигнала

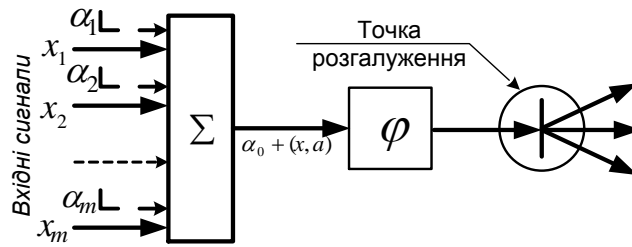


Рисунок 3.11 - Формальний нейрон

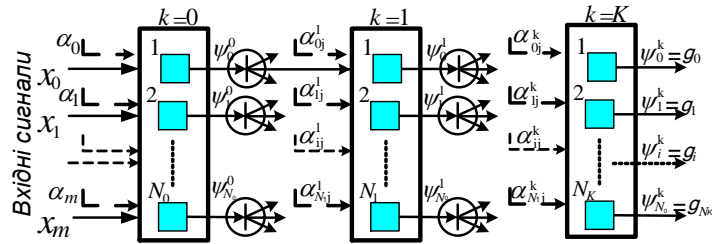


Рисунок 3.12 – Багатошарова мережа

Стандартний формальний нейрон складається із вхідного суматора, нелінійного перетворювача й точки розгалуження (рис. 3.11). Точка розгалуження служить для розсилання одного сигналу по декількох адресах. Вона одержує скалярний вхідний сигнал z і передає його виходам. Серед нейронних мереж можна виділити дві базові архітектури: *багатошарові* й *повнозв'язні мережі*. У *багатошарових нейронних мережах* нейрони розташовані в кілька шарів (рис. 3.12). Нейрони першого шару одержують вхідні сигнали, перетворюють їх і через точки розгалуження передають нейронам другого шару. Далі спрацьовує другий шар і т.д. до k -го шару, що видає вихідні сигнали для користувача. Якщо не зазначене протилежне, то кожний вихідний сигнал i -го шару подається на вхід усіх нейронів $(i+1)$ -го шару. Число нейронів у кожному шарі може бути будь-яким і ніяк заздалегідь не пов'язане з кількістю нейронів в інших шарах. Стандартний спосіб подачі вхідних сигналів: *усі нейрони першого шару одержують кожний вхідний сигнал*. Особливого поширення набули тришарові мережі, в яких кожний шар має своє найменування: перший - вхідний, другий - прихований, третій - вихідний.

У *повнозв'язаних нейронних мережах* кожний нейрон передає свій вихідний сигнал іншим нейронам, включаючи самого себе. Вихідними сигналами мережі можуть бути всі або деякі вихідні сигнали нейронів після декількох тактів функціонування мережі. Всі вихідні сигнали подаються всім нейронам.

Таким способом нейронні мережі обчислюють лінійні функції, нелінійні функції однієї змінної, а також усі можливі суперпозиції - функції від функцій, одержувані при каскадному з'єднанні мереж.

Розглянемо більш докладно багатошарову мережу (рис. 3.12). Її структура характеризується числом шарів K і кількістю нейронів m у кожному шарі. Відмітимо, що в багатошаровій мережі зв'язки між нейронами в шарі відсутні.

Уведемо нові позначення: вхід i -го нейрона k -го шару — ψ_i^k , вихід i -го нейрона — z_i^k , кількість нейронів в k -му шарі — $N_k, k=1, \dots, K$. Тоді суперпозиція вхідних сигналів i -го нейрона має вигляд

$$z_i^k = \sum_{j=0}^{N_{k-1}} \alpha_{ij}^k \psi_j^{k-1}, \quad i = \overline{1, N_k}, k = \overline{1, K}, \quad (10.6)$$

де α_{ij}^k — вагові коефіцієнти, що є параметрами, що налаштовуються і характеризують зв'язок j -го нейрона $(k-1)$ -го шару з i -м нейроном k -го шару.

Для нульового шару маємо $\psi_j^0 = x_j, j = \overline{1, m}$. З урахуванням прийнятих позначень апроксимуюча функція $g_i, i = \overline{1, N_k}$ являє собою персептрон і може бути записана у вигляді

$$g_i = \psi_i^k, \quad i = \overline{1, N_k}; \quad (10.7a)$$

$$\psi_i^k = \varphi(z_i^k), \quad i = \overline{1, N_k}, k = \overline{1, K}; \quad (10.7b)$$

$$\psi_0^k = 1, \quad k = \overline{0, K-1}. \quad (10.7e)$$

Як функції активації нейронів (нелінійного перетворювача нейронів φ) часто використовують гладкі функції вигляду

$$\varphi(z) = z, \quad \varphi(z) = \frac{1}{1 - \exp(-z)}, \quad \varphi(z) = \frac{\exp(z) - \exp(-z)}{\exp(z) + \exp(-z)}. \quad (10.8)$$

Наближення функцій за допомогою нейронних мереж зводиться до навчання останніх. При цьому вхідні сигнали x подаються до мережі, яка навчається, на обробку, задаються значення вагових коефіцієнтів α , а одержувані вихідні сигнали g порівнюються з експериментальними даними y . Потім будується функція оцінки роботи мережі на основі, наприклад, критерію максимальної правдоподібності

$$E(\alpha) = -\sum_{i=1}^P \ln \sum_{j=1}^K \exp(\alpha_j x_i^{(j)}), \quad (10.9)$$

де $g_i(x^{(j)}, \alpha)$ — i -й вихід мережі, що відповідає векторам вхідних сигналів $x^{(j)}$ і вагових коефіцієнтів α ; P — обсяг навчальної вибірки $(x^{(j)}, y_j)$.

Пошук оптимальних значень вагових коефіцієнтів α , при яких критерій $E(\alpha)$ буде мінімальним, виконується за допомогою відомих методів розв'язку екстремальних задач.

При навчанні нейронних мереж часто використовують методи регуляризації, які дозволяють одержувати згладжені функції $g_i(x^{(j)}, \alpha)$. При цьому оцінка роботи мережі вибирається у вигляді

$$\hat{E}(\beta, \alpha) = E(\alpha) + \beta \Omega(\alpha), \quad (10.10)$$

де β — параметр регуляризації; $\Omega(\alpha)$ — рівномірно опукла функція, наприклад, $\Omega(\alpha) = \sum_{i=1}^K \alpha_i^2$. Оптимальне значення параметра регуляризації β підбирається ітераційним методом.

Визначення адекватності математичної моделі

Перше питання, що нас цікавить після обчислення параметрів моделі, це *перевірка її придатності*, що називається перевіркою адекватності моделі.

Для характеристики середнього розкиду щодо лінії регресії цілком підходить залишкова сума квадратів. Незручність полягає в тому, що вона залежить від числа коефіцієнтів у рівнянні: якщо кількість коефіцієнтів дорівнює кількості незалежних дослідів, то одержимо залишкову суму, що дорівнює нулю (інтерполяція). Тому прагнуть відносити її на один «вільний» дослід. Кількість таких «вільних» дослідів визначає *число ступенів вільності f* — різниця між числом дослідів і числом коефіцієнтів, які вже обчислені за результатами цих дослідів незалежно один від одного.

Залишкова сума квадратів, ділена на число ступенів вільності $f = N - m$, де $m (N > m)$ — число оцінюваних параметрів, називається залишковою дисперсією, або *дисперсією адекватності s_{ad}^2* :

$$s_{ad}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{f}. \quad (10.11)$$

У статистиці розроблений критерій, що дуже зручний для перевірки гіпотези про адекватність моделі. Він називається *F-критерієм Фішера* і визначається за такою формулою:

$$F = \frac{s_{ad}^2}{s_{\{y\}}^2}, \quad (10.12)$$

де $s_{\{y\}}^2$ — це дисперсія відтворюваності зі своїм числом ступенів вільності.

Зручність використання критерію Фішера полягає у тому, що перевірку гіпотези можна звести до порівняння розрахункового значення критерію з табличним значенням.

Якщо розраховане значення F -критерію не перевищує табличного значення, то з відповідною довірчою ймовірністю модель можна вважати адекватною. Однак позитивний результат статистичної перевірки не гарантує достовірної адекватності, а тим більше істинності моделі (хоча й не суперечить такому припущенню). При перевищенні табличного значення цю прийнятну гіпотезу доводиться відкидати. Подальше застосування неадекватної моделі наразі недоцільне, і треба вжити заходів з її вдосконалювання.

Загальна оцінка експериментальних методів

Експериментальні (емпіричні) методи корисні й прийнятні для вивчення складних систем, якщо їхня структура не змінюється в часі, а теорія процесу не відома і (або) коли необхідно швидко одержати модель без дослідження процесу. Їхні найважливіші переваги:

- простота опису;
- доступність одержання моделей;
- можливість побудови моделі за відсутності теорії процесу.

Разом з тим метод не позбавлений *недоліків*, до числа яких входять:

- неможливість застосування моделі для режимів, при яких не проводилися виміри;
- неможливість застосування моделі при переході до інших установок;
- неможливість екстраполяції результатів.

Для демонстрації труднощів розглянемо умовний приклад побудови математичної моделі експериментальним методом (див. рис. 3.13).

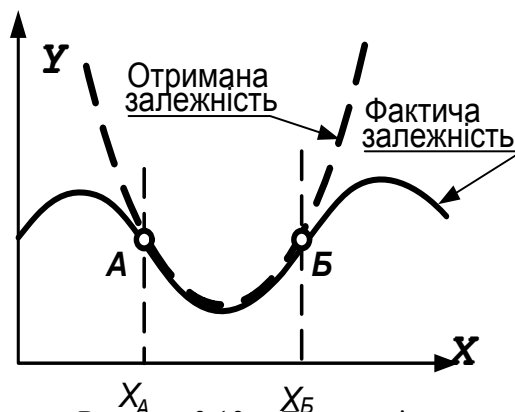


Рисунок 3.13 - До розуміння обмежень прогнозуючих можливостей експериментальних моделей

Припустимо, що математична модель будувалася для значень вхідної змінної в інтервалі $[X_A, X_B]$. У результаті апроксимації експериментальних і розрахункових значень отримана квадратична залежність (пунктирна лінія на рис. 3.13). Також видно, що в досліджуваному інтервалі $[X_A, X_B]$ математична модель добре описує процес, що проходить в об'єкті і відображається фактичною (невідомою) залежністю (суцільна лінія). Однак при виході вхідної змінної X за межі відрізка $[X_A, X_B]$ модель дає значне відхилення, тобто використовувати її при цих значеннях неприпустимо.

Експериментально-аналітичний метод одержання математичних моделей

При використанні цього методу дослідник попередньо намагається визначити фізичну сутність явищ, що відбуваються в об'єкті. Для цього використовується метод декомпозиції складного явища, тобто на основі теоретичного аналізу визначаються найбільш прості, елементарні процеси, які можна досліджувати доступними способами.

Після аналізу впливу елементарних процесів на процес у цілому несуттєві фактори відкидаються, і вибирається той елементарний процес, що впливає найбільш істотно. Потім складається математичний опис, причому не в довільній формі, а у вигляді залежності, що

характерна для даного елементарного процесу. Вплив інших елементарних процесів враховується зміною коефіцієнтів, що входять у цю залежність.

Як приклад розглянемо побудову моделі для опису процесу перенесення тепла в нерухомому зернистому шарі в аксіальному напрямку. Перенесення тепла здійснюється за рахунок таких процесів: теплопровідність; конвекція; випромінювання. При температурах менше 800 К и малих лінійних швидкостях потоку газу тепловий потік q в основному визначається теплопровідністю й описується рівнянням Фур'є:

$$q = -L \frac{dT}{dx}, \quad (10.13)$$

де L - коефіцієнт теплопровідності; T - температура; x - координата.

Однак користуватися наведеним рівнянням ще не можна, тому що в ньому не враховані такі елементарні складові процесу перенесення тепла, як конвекція і випромінювання. Для їхнього урахування замість істинного значення коефіцієнта теплопровідності вводиться деяке "ефективне" значення L_{ef} , яке визначається експериментально. Тоді рівняння (4-1) набуває вигляду

$$q = -L_{\text{ef}} \frac{dT}{dx}. \quad (10.14)$$

Останнє рівняння є експериментально-аналітичною моделлю процесу перенесення тепла в нерухомому зернистому шарі. Очевидно, що L_{ef} не є фізичною константою, а залежить від умов експериментів, при яких вона була отримана, і від масштабів установки.

Експериментально-аналітичний метод має ту перевагу, що він якоюсь мірою відображає теорію процесів і, отже, краще описує властивості об'єкта моделювання, тобто дозволяє однозначно й більш надійно вибирати вид рівняння. Як і при використанні експериментального методу, у цьому випадку необхідно проводити експерименти, однак якщо в першому випадку вони були необхідні для одержання моделі в цілому, то при використанні експериментально-аналітичного методу вони використовуються для визначення її коефіцієнтів.

Разом з тим слабким місцем методу є та обставина, що обумовлені подібним чином ефективні коефіцієнти змінюються залежно від умови проведення дослідів, тому експериментально-аналітична модель справедлива лише в тому діапазоні зміни змінних, у якому проводився експеримент.

Рекомендації з вибору методу побудови математичної моделі

Вибір методу побудови математичної моделі залежить від важливості і ступеня складності процесу. Для великих багатотоннажних виробництв необхідні хороші моделі, тут краще застосовувати теоретичний метод. Цим же методом користуються при створенні принципово нових технологічних процесів. Для дрібних виробництв зі складним характером процесу частіше використовують експериментальний метод. На практиці однак, як правило, використовується розумне поєднання всіх методів.

Незалежно від методу до розроблюваних математичних моделей висуваються насамперед вимоги вірогідності (точності) і простоти. Ці дві вимоги є суперечливими. Достовірна модель, що правильно описує поведження об'єкта, може виявитися досить складною. Складність моделі визначається, як правило, складністю досліджуваного об'єкта і ступенем точності, що вимагається практикою від результатів розрахунку. При побудові математичної моделі необхідно виходити з розумного компромісу між складністю моделі, істинністю одержуваних із її допомогою характеристик об'єкта і їхньою точністю. Крім того, необхідно, щоб складність не перевершувала деякої межі, обумовленої можливостями існуючого математичного апарата, тобто модель повинна бути досить простою у математичному відношенні, щоб її можна було розв'язати наявними методами й засобами. Єдиним критерієм практичної застосовності отриманого математичного опису є найбільша простота рівнянь при гарній апроксимації експериментальних даних.

Список використаної літератури

- Бондарь А. Г. Математическое моделирование в химической технологии. - К.: Вища школа, 1973. – 280 с.
- Закгейм А. Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. - 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Химия, 1982. – 288 с.
- Гартман Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учеб. пособие для вузов / Т. Н. , Д. В. Клушин. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 406 с.
- Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. - изд. 2-е. - М.: Химия, 1971. – 379 с.
- Фрэнкс Р. Математическое моделирование в химической технологии. - М.: Химия, 1971. – 272 с.
- Бояринов А. И. Методы оптимизации в химической технологии / А. И. Бояринов, В. В. Кафаров. - изд. 2-е. М.: Химия, 1975. – 576 с.
- Слинко М. Г. Моделирование химических реакторов. Новосибирск: Наука, Сибирское отд., 1968. – 258 с.
- Веников В. А. Теория подобия и моделирование применительно к задачам электроэнергетики. - М.: Высшая школа, 1966.
- Кафаров В. В. Принципы математического моделирования химико-технологических систем / В. В. Кафаров, В. Л. Перов, В. П. Мешалкин. - М.: Химия, 1974. – 344 с.
- Берг А. И. Кибернетика – наука об оптимальном управлении. - М.;Л.: Энергия, 1964.

Навчально-методичне видання

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

Математичне моделювання і застосування ЕОМ в хімічній технології

конспект лекцій

Друкується в авторській редакції