

Учреждение образования
«БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

В. Г. Матыс, А. А. Черник

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ОТРАСЛИ

**Тексты лекций для студентов специальности
1-48 01 04 «Технология электрохимических производств»**

Минск 2019

УДК 66.011:001.89(075.8)
ББК 35.115я73
М34

Рассмотрены и рекомендованы редакционно-издательским советом Белорусского государственного технологического университета.

Рецензенты:

кандидат технических наук,
доцент кафедры электронной техники и технологии
УО «Белорусский государственный университет информатики
и радиоэлектроники» *И. В. Бычек*;
кандидат технических наук,
старший научный сотрудник лаборатории физики плазменных
процессов ГНУ «Физико-технический институт
Национальной академии наук Беларуси» *А. А. Паршута*

Матыс, В. Г.

М34 Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов в отрасли : тексты лекций для студентов специальности 1-48 01 04 «Технология электрохимических производств» / В. Г. Матыс, А. А. Черник. – Минск : БГТУ, 2019. – 156 с.

Пособие состоит из трех разделов, в которых рассматриваются два основных типа моделей: теоретические и эмпирические. Использование подхода с информационными матрицами для решения больших систем уравнений, возникающих при математическом описании процессов в теоретических моделях, позволяет наглядно составить и представить алгоритмы численных методов решения систем уравнений.

УДК 66.011:001.89(075.8)
ББК 35.115я73

© УО «Белорусский государственный технологический университет», 2019
© Матыс В. Г., Черник А. А., 2019

ПРЕДИСЛОВИЕ

Электрохимический процесс – это преобразование исходного сырья в целевые продукты на электродах в электролите под действием внешнего электрического тока. Условия процесса, позволяющие производить заданное количество продукта требуемого качества при минимальных затратах, называются оптимальными. Поиск оптимальных условий – оптимизация – осуществляется как на стадии проектирования электрохимических технологических систем, так и во время оперативного управления. При оптимизации используются математические модели, описывающие закономерности электрохимических технологических процессов и позволяющие предсказывать их результат.

Дисциплина «Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов в отрасли» входит в обязательный компонент цикла общепрофессиональных и специальных дисциплин учебного плана специальности. Успешное овладение основами дисциплины требует от студентов обязательного знания основных разделов физической химии, теоретической электрохимии, прикладной электрохимии, процессов и аппаратов химических производств, высшей математики, информатики и компьютерной графики, а также умения активно использовать вычислительную технику в решении различных задач.

Цель изучения дисциплины – формирование у студентов академических, социально-личностных и профессиональных компетенций, необходимых для решения теоретических и практических задач в учебной, производственной, исследовательской и управленческой деятельности, углубление теоретических знаний студентов по математическому моделированию и расчетам электрохимических процессов.

Предмет дисциплины – теоретические основы и практические приемы математического моделирования, расчета и оптимизации процессов, протекающих в электрохимических системах различной сложности.

Задачами изучения дисциплины являются:

– приобретение студентами знаний и умений в области синтеза, анализа и оптимизации электрохимических систем, которые необходимы в повседневной практике инженера-химика-технолога, проектировщика, технического руководителя;

– формирование у студентов знаний основных методов формализованного описания электрохимических процессов;

- формирование навыков работы с программным обеспечением для моделирования электрохимических процессов;
- изучение методов экспериментально-статистического описания электрохимических процессов;
- формирование у студентов навыков по постановке и решению задач оптимизации электрохимических процессов.

Объектами профессиональной деятельности специалистов являются: химические источники тока, печатные платы и микросхемы, технологические процессы подготовки металлической поверхности перед нанесением металлических и неметаллических покрытий; химические и электрохимические методы водоподготовки и очистки сточных вод на предприятиях по производству печатных плат и микросхем, на металлургических заводах и предприятиях машино-, приборо-, автомобилестроения; технологические процессы нанесения металлических и оксидных покрытий электрохимическими и химическими методами; установки и аппараты для проведения электрохимических и химических процессов; приборы и методы исследования свойств наносимых покрытий в производственно-коммерческих, научно-исследовательских и образовательных учреждениях. Знания в области моделирования и оптимизации химико-технологических процессов будущих инженеров приобретают особенно важное значение при использовании новых материалов, повышении надежности современной техники, уменьшении энергозатрат технологических процессов электрохимических производств.

Приобретенные навыки в области моделирования электрохимических процессов способствуют проведению исследований по темам учебно-исследовательской работы студентов, выполнению курсовых проектов по дисциплинам «Гальванотехника» и «Оборудование и основы проектирования электрохимических производств».

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Современные достижения в области компьютерного моделирования химических процессов дают возможность более строго и с большей точностью решать задачи проектирования и управления химическими производствами. При этом широко используется методология системного анализа, с применением которой успешно решаются задачи анализа, оптимизации и синтеза новых и реконструируемых технологий. Рассчитываемые в этом случае оптимальные режимные и конструкционные параметры процессов составляют основу технологических регламентов производств, позволяют наиболее эффективно управлять ими и в наибольшей степени удовлетворяют требованиям энерго- и ресурсосбережения.

Развитие и широкое распространение информационных технологий, внедрение локальных и глобальных вычислительных сетей, интернет-технологий дают возможность развивать и совершенствовать современные системы прикладной информатики – автоматизированные системы (АС), направленные на решение задач из различных сфер человеческой деятельности. Можно выделить следующие виды АС:

- автоматизированные информационные системы (АИС);
- системы автоматизированного проектирования (САПР);
- автоматизированные системы научных исследований (АСНИ);
- автоматизированные системы управления (АСУ);
- автоматизированные обучающие системы (АОС).

Применение АС для решения задач химической технологии предполагает использование компьютерных моделей реальных процессов и производств. Современные АС должны включать в себя методологии решения задач с применением систем искусственного интеллекта (ИИ) и экспертных систем (ЭС), использование которых позволяет моделировать некоторые интеллектуальные функции специалистов в конкретной проблемной области и, соответственно, и увеличить надежность решений неформализованных задач (НФЗ).

В отличие от формализованных задач (ФЗ), решения которых выполняются по заранее заданному алгоритму, рациональные решения НФЗ получаются в результате творческой деятельности специалистов,

которая требует переработки большого количества смысловой (семантической) информации и непосредственно не связана с проведением каких-либо вычислений. Для поиска семантических решений НФЗ необходимо применять не вычислительные алгоритмы, как в случае с ФЗ, а *эвристическо-эволюционные процедуры*.

Экспертные системы (ЭС) – это интеллектуальные системы, которые способны в диалоге с квалифицированным пользователем – *лицом, принимающим решение*, на основе накопления и переработки специальных знаний и правил принятия решений проводить экспертизу, консультировать и давать рекомендации по выбору действий, распознавать ситуации, ставить диагноз и обосновывать заключения при поиске решений НФЗ некоторой проблемной области. ЭС можно рассматривать как своеобразные программно-технические усилители интеллектуальной творческой деятельности лица, принимающего решение. Такие интеллектуально-диалоговые системы представляют собой сложные *человеко-машинные системы*, так называемые *системы эргатического типа*, применение которых обеспечивает получение наиболее надежных результатов решения задач химической технологии.

Компьютерное моделирование химико-технологических процессов предполагает решение следующих основных задач:

- построения математической модели процесса и ее реализации на компьютере;

- идентификации (отождествления) разработанной математической модели с моделируемым процессом с целью обеспечения ее адекватности, т. е. качественного и количественного соответствия модели реальному процессу;

- оптимизации процесса с использованием его математической модели, т. е. определения оптимальных режимных и конструктивных параметров процессов, которые обеспечивают наибольшее или наименьшее значение выбранного критерия оптимальности, характеризующего эффективность реального процесса.

1.1. Системный подход к описанию химико-технологических процессов

Для решения задач компьютерного моделирования применяется *системный подход*, в соответствии с которым химико-технологический процесс (ХТП) рассматривается как некоторая функциональ-

ная система («объект» на рис. 1.1), характеризующаяся следующими основными совокупностями переменных:

1) \bar{X} – вектор *входных переменных*, которые влияют на состояние процесса и, в общем случае, определяют его состояние;

2) \bar{y} – вектор *выходных переменных*, которые характеризуют состояние процесса и зависят от входных переменных \bar{X} .

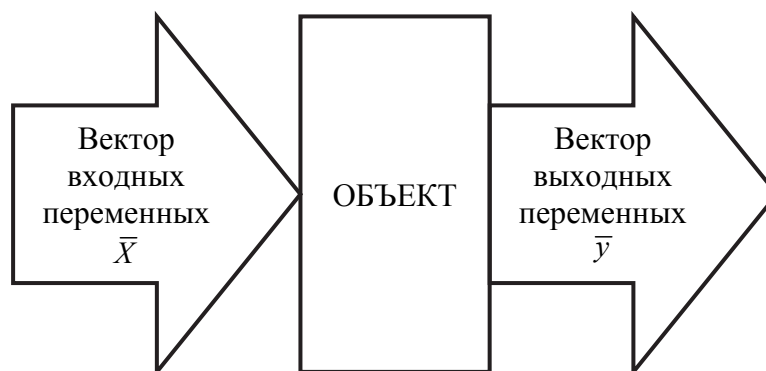


Рис. 1.1. Схематическое представление ХТП как функциональной системы

Системный подход дает возможность осуществить математическую формализацию задачи при построении математических моделей как процессов в отдельных аппаратах (типовой ХТП), так и в их совокупности (химическое производство), обеспечивая возможности познания физико-химических механизмов протекающих процессов и получение широких обобщений и количественных закономерностей.

Любая система состоит из взаимосвязанных и взаимодействующих между собой и с внешней средой частей и, в определенном смысле, представляет собой замкнутое целое.

Объект, являющийся совокупностью соединенных между собой аппаратов (химическое производство), в частности, для производства некоторого целевого продукта, называется *химико-технологической системой (ХТС)*.

Для отображения зависимости выходных переменных \bar{y} от входных переменных \bar{X} используется физико-химический оператор (для ФХС) или химико-технологический оператор (для ХТС) Ω :

$$\bar{y} = \Omega(\bar{X}). \quad (1.1)$$

В выражении (1.1) оператор Ω отображает пространство входных переменных \bar{X} в пространство значений выходных переменных \bar{y} . Отображение (1.1) отражает все реально протекающие процессы и

представляет собой отображение объективной реальности, для которой требуется построить приближенную математическую модель процесса.

При этом к *входным переменным* \bar{X} относят не только *собственно входные переменные*, как, например, свойства перерабатываемого сырья – его расход, состав, температуру, а также *возмущающие переменные* (значения которых изменяются случайным образом во времени и по тем или иным причинам не могут быть измерены) и компенсирующие их *управляющие переменные* (которые могут быть измерены и имеется возможность на них воздействовать в соответствии с теми или иными требованиями).

Для нестационарных режимов объектов одним из компонентов вектора \bar{X} может быть время, от которого могут зависеть и другие компоненты вектора входных переменных \bar{X} .

Важнейшим этапом построения адекватной математической модели химических процессов является анализ структуры химико-технологического или физико-химического операторов Ω (1.1). При этом осуществляется декомпозиция сложной системы на более простые подсистемы в соответствии со следующими принципами:

а) *определения иерархической структуры системы*, т. е. выделения ее иерархических ступеней и взаимосвязей между ними на основе фундаментальных знаний, экспериментальных данных и опыта специалистов;

б) *реализации принципа иерархической соподчиненности* при формализации знаний об изучаемых элементах системы и принятии разумных допущений, что выражается в учете наиболее важных (приоритетных) процессов, протекающих на низких ступенях иерархии системы и оказывающих влияние на процессы на верхних уровнях иерархии;

в) *комплексного исследования отдельных процессов* с учетом влияния переменных не только на рассматриваемом уровне иерархии системы, но и на низших уровнях, и на более высоких ступенях иерархии системы.

В химической промышленности целесообразно выделить пять ступеней иерархии системы:

1) *микроуровень* – процессы и явления рассматриваются без учета влияния закономерностей движения потоков фаз в аппаратах;

2) *макроуровень – ФХС* – представляет собой секцию аппарата (например, слой насадки или тарелку) или отдельный аппарат (все процессы рассматриваются с учетом движения материальных и тепловых потоков);

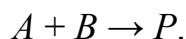
3) *уровень химического производства – ХТС* – представляет собой совокупность аппаратов, связанных между собой материальными, тепловыми и информационными потоками;

4) уровень *предприятия* – это несколько производств, составляющих предприятие, при анализе работы которого необходимо учитывать экономические и управленческие закономерности протекания бизнес-процессов функционирования предприятия;

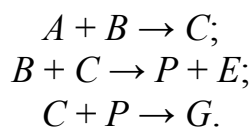
5) уровень *компании* или объединения – это несколько предприятий, объединенных в компанию (Газпром, Лукойл, Сибур и др.).

Следует отметить, что на каждом из перечисленных уровней иерархии совместно решаются задачи *оптимизации технологических процессов и автоматизации управления производством*.

Рассмотрим первые три уровня иерархии химического предприятия на примере получения продукта P , принципиальная технологическая схема получения которого представлена на рис. 1.2. Продукт P получают по следующей кинетической схеме реакции:



При этом основные стадии химической реакции получения целевого продукта P с учетом образующихся побочных продуктов можно условно описать уравнениями:



Целевой продукт P образует с компонентом E азеотроп с максимальной температурой кипения, в результате чего часть его попадает в куб ректификационной колонны. Чтобы снизить потери целевого продукта P при технологическом оформлении процесса его получения, необходимо организовать рециклический (обратный) поток в реактор.

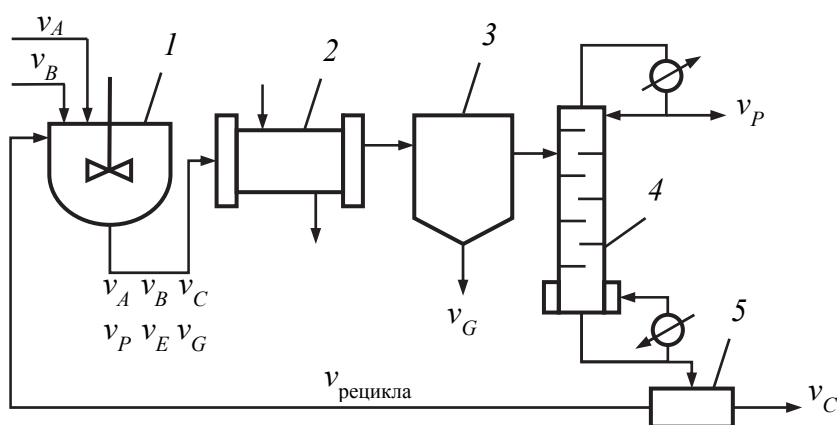


Рис. 1.2. Принципиальная технологическая схема получения целевого продукта P :
 1 – реактор с мешалкой; 2 – теплообменник; 3 – отстойник;
 4 – ректификационная колонна; 5 – делитель потока

При этом химическое производство рассматривается как химико-технологическая система (ХТС), а процессы в отдельных аппаратах – как физико-химические системы (ФХС). Схематическое изображение ХТС (рис. 1.2) в виде совокупностей ФХС представлено на рис. 1.3. На вход ХТС поступают потоки, характеризующиеся вектором входных переменных \bar{X} (например, составы потоков на входе в аппараты, температуры и давления в аппаратах и т. д.). В пределах ФХС входные переменные \bar{X} претерпевают целенаправленное физико-химическое превращение в вектор выходных переменных \bar{y} .

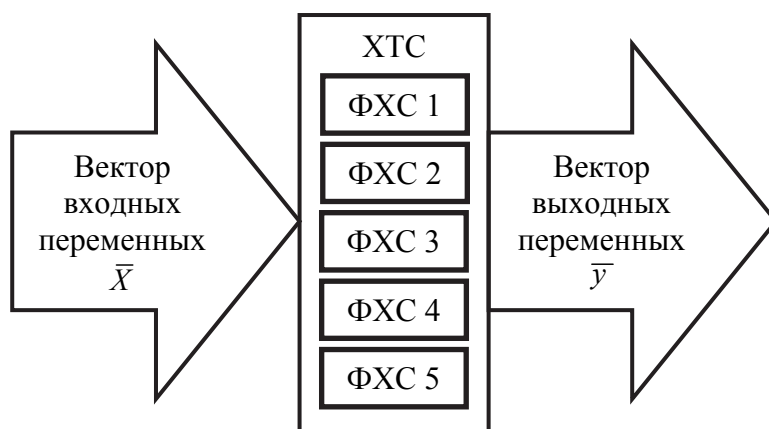


Рис. 1.3. Схематическое представление модели ХТС, технологическая схема которой представлена на рис. 1.2, в виде совокупности ФХС

Химико-технологическая система (ХТС) – это технологическая схема процесса, которая рассматривается как совокупность тесно связанных подсистем (процессов в отдельных аппаратах, или химико-технологических процессов – ХТП), имеющих единую цель функционирования и подчиняющихся основным принципам системного анализа, комплексности, иерархичности и иерархической соподчиненности.

Физико-химическая система (ФХС) – это сплошная многофазная многокомпонентная среда в отдельном аппарате или секции аппарата, распределенная в пространстве и во времени, в каждой точке гомогенности которой и на границе раздела фаз происходит перенос вещества, энергии и импульса при наличии их источников (стоков).

На рис. 1.2 подсистемами ХТС являются следующие ФХС: реактор, теплообменник, отстойник, ректификационная колонна, делитель потока. Каждая из подсистем имеет цель функционирования – проведение химического взаимодействия, нагревание (охлаждение) потоков, выделение компонентов из потока и т. п. Подсистемы ХТС (от-

дельные аппараты) связаны между собой технологическими потоками (трубопроводами), что обеспечивает получение целевого продукта P – т. е. достижение единой цели функционирования всей ХТС.

1.2. Математическое описание химико-технологических процессов

Так как структура химико-технологического или физико-химического оператора досконально неизвестна, то вместо него пользуются функциональным оператором Φ (1.2), являющимся приближением истинного оператора Ω (1.1).

Превращение входных переменных \bar{X} в оценки выходных переменных \hat{y} может быть отображено с использованием функционального оператора Φ :

$$\hat{y} = \Phi(\bar{X}, \bar{a}), \quad (1.2)$$

где Φ – функциональный оператор, который отображает пространство входных переменных \bar{X} в пространство оценок выходных переменных \hat{y} ; \bar{a} – коэффициенты уравнений, описывающих физико-химические процессы.

Соотношение (1.2) представляет собой систему уравнений математического описания (МО) химико-технологического процесса (ХТП) с начальными и граничными условиями. Для синтеза функционального оператора Φ для ХТС необходимо на основе системного анализа ХТС идентифицировать функциональные операторы всех ФХС, составляющих ее (находящихся на более низких уровнях иерархии).

Математическое описание процессов в отдельных аппаратах химического производства может быть теоретическим или эмпирическим, в соответствии с чем получают теоретические или эмпирические модели (рис. 1.4).



Рис. 1.4. Типы моделей ХТП (ФХС)

Математическое описание *фундаментальных комбинированных моделей* ХТП – это сложные интегро-дифференциальные уравнения, детально описывающие процессы, в том числе и на атомно-молекулярном уровне.

Математическое описание *физико-химических блочно-структурных* моделей ХТП – это модельное описание «элементарных» процессов, в основе которого лежат балансовые уравнения, записываемые с учетом гидродинамических закономерностей движения потоков фаз и включающие интенсивности источников массы, теплоты и импульса соответственно в уравнениях балансов массы, теплоты и импульса.

Математическое описание *эмпирических вероятностно-статистических моделей* ХТП может быть получено в виде полиномиального представления зависимости выходных переменных $\bar{y}^{\text{расч}}$ от входных \bar{X} в явном виде при обработке опытных данных.

Математическое описание (МО) теоретических моделей строится на основе знания механизмов протекания процессов химической технологии:

– для *фундаментальных комбинированных моделей* – это детальное описание механизмов процессов;

– для *физико-химических блочно-структурных моделей* – приближенное описание процессов, базирующееся на модельном представлении гидродинамических, массо- и теплообменных процессов, а также процессов химических превращений, называемых в этом случае «элементарными» процессами.

В результате получают системы уравнений математического описания большой размерности для *фундаментальных комбинированных моделей* и менее сложные системы уравнений – для *физико-химических блочно-структурных моделей*.

Как правило, для моделирования *химических производств* используются *физико-химические* блочно-структурные модели, которые по функциональным возможностям вполне удовлетворяют точности, необходимой для расчетов технологических схем реальных производств. Основные описываемые в этом случае «элементарные» процессы представлены на рис. 1.5. Данные процессы входят в уравнения балансов потоков вещества и теплоты.

Для совокупности этих «элементарных» процессов получают три основных типа уравнений математического описания:

1) системы конечных уравнений (СКУ): системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) или системы нелинейных уравнений (СНУ);

- 2) системы обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ);
- 3) системы дифференциальных уравнений в частных производных (СДУЧП).

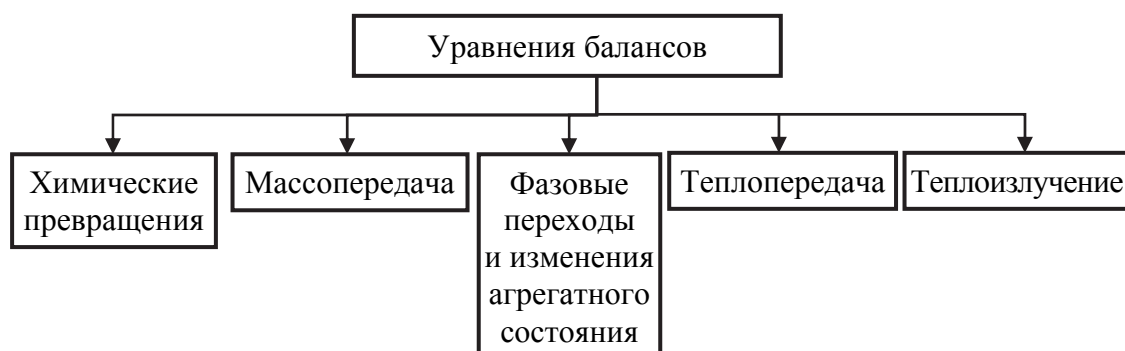


Рис. 1.5. Основные «элементарные» процессы при построении физико-химических блочно-структурных моделей ХТП

Для получения зависимости выходных переменных $\bar{y}^{\text{расч}}$ от входных \bar{X} система уравнений МО (1.2) должна быть решена относительно выходных переменных. В этом случае решается так называемая *прямая задача* математического моделирования, когда известен вид уравнений МО (оператор Φ) и значения его коэффициентов \bar{a} (1.2). Из-за того, что эти модели основываются на знании физико-химических механизмов протекающих процессов, они могут использоваться для экстраполяции свойств реальных объектов за пределы диапазонов изменения переменных, в которых проводилась их экспериментальная проверка и определение коэффициентов моделей \bar{a} .

Для *эмпирических моделей* не требуется решение уравнений математического описания процесса. Для этих моделей зависимости $\bar{y}^{\text{расч}}$ (число этих зависимостей равно размеру вектора $\bar{y}^{\text{расч}}$) от \bar{X} и \bar{a} получаются в явном виде путем непосредственного решения *задачи аппроксимации* экспериментальных данных, т. е. при решении так называемой *обратной задачи* математического моделирования, когда по опытным данным определяется и вид уравнений математического описания (МО) (*структурная идентификация*), и значения их коэффициентов \bar{a} (*параметрическая идентификация*). Эти модели, как правило, лишены физического смысла и справедливы только в том диапазоне изменения параметров реального процесса, где был поставлен эксперимент. За пределами этого диапазона *экстраполяция поведения процессов* с использованием *эмпирических моделей* нежелательна.

1.3. Математическая модель и ее адекватность

Для *физико-химических блочно-структурных моделей* алгоритм решения системы уравнений МО (1.2) отображается с использованием вектор-функции следующим образом:

$$\bar{y}^{\text{расч}} = \bar{\varphi}(\bar{X}, \bar{a}), \quad (1.3)$$

где $\bar{\varphi}$ – вектор-функция, которая отражает последовательность аналитического или численного (приближенного) решения системы уравнений (1.2), определяемой функциональным оператором Φ .

Отображение (1.3) помимо того, что задает количественные соотношения между входными и выходными переменными процесса, несет в себе еще очень важную информацию о способе получения решения, т. е. об алгоритме решения задачи.

По существу, вектор-функцию $\bar{\varphi}$ можно рассматривать как формальное представление алгоритма решения системы уравнений МО химико-технологического процесса (1.2). Этот алгоритм, называемый *моделирующим алгоритмом (МА)* или *алгоритмом математического моделирования (alg MM)*, представляет собой комбинацию известных алгоритмов вычислительной математики, *функции* (1.2) для которых записаны с учетом физико-химических механизмов протекающих реальных процессов.

Для разработки оптимального МА целесообразно провести *анализ системы уравнений МО* (1.2) с использованием ее *информационной матрицы*, а сам алгоритм представлять в виде *блок-схемы алгоритма расчета ХТП*.

Реализацией на компьютере МА завершается этап построения математической модели – первый этап компьютерного моделирования ХТП. Основные этапы построения физико-химической блочно-структурной математической модели ХТП изображены на рис. 1.6 и включают в себя следующие последовательные стадии:

- 1) построение системы уравнений математического описания (МО);
- 2) разработка моделирующего алгоритма (МА);
- 3) реализация моделирующего алгоритма решения системы уравнений математического описания ХТП на компьютере, в результате чего получается *математическая модель (ММ)* процесса или ее *расчетный модуль* (расчетный модуль ФХС/ХТС).

В результате можно привести два определения математической физико-химической блочно-структурной модели ХТП:

1) *математическая модель* – это реализованный на компьютере алгоритм решения системы уравнений математического описания;

2) *математическая модель* – это система уравнений, которая связывает между собой входные и выходные переменные реального процесса (МО), для прогнозирования свойств которого необходимо с помощью специального алгоритма решить эту систему уравнений, а сам алгоритм должен быть реализован на компьютере.



Рис. 1.6. Этапы построения математической модели ХТП

Следует упомянуть о важной разновидности компьютерных моделей, так называемых *имитационных моделях*. Имитационное моделирование, как правило, связано с моделированием динамических процессов, т. е. нестационарных режимов работы реальных объектов. Изменение ситуаций во времени – тот феномен, который изучается с использованием имитационных моделей. В результате могут быть получены новые знания и выработаны разного рода решения для управления реальным динамическим процессом. Разработка таких моделей обычно сложнее разработки математических моделей, описывающих стационарные режимы работы объектов. Это связано с тем, что уравнения МО нестационарных режимов объектов включают в себя обыкновенные и частные производные функций переменных процессов по времени, а соответствующие алгоритмы их решения – МА – требуют реализации эффективных методов решения *систем обыкновенных дифференциальных уравнений* и *систем дифференциальных уравнений в частных производных*.

Разработанную математическую модель процесса необходимо использовать для исследования и прогнозирования поведения реального объекта, т. е. ее свойства и поведение с определенной степенью приближения должны совпадать с моделируемым процессом. Это свойство ММ называется свойством *традуктивности*, или *переносимости* результатов расчета, получаемых с помощью ММ, на поведение реальных ХТП. В результате вместо анализа свойств реальных объектов или их физических моделей, реализуемых обычно на пилотных или

полупромышленных установках, большинство исследований можно проводить с применением разработанной ММ, что существенно дешевле, быстрее и безопаснее.

Для корректного решения этих задач необходимо, чтобы математическая модель была *адекватна реальному процессу*. Под *адекватностью математической модели* понимается соответствие ее реальному объекту как *качественное* (тенденции изменения переменных в модели и в объекте должны быть одинаковы), так и *количественное* (экспериментальные данные должны совпадать с расчетными).

Адекватность ММ проверяется с помощью с выражения (1.4), включающего норму вектора рассогласования:

$$\left\| \bar{y}^{\text{расч}} - \bar{y}^{\text{эксп}} \right\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i^{\text{расч}} - y_i^{\text{эксп}})^2} \leq \varepsilon, \quad (1.4)$$

где $\bar{y}^{\text{расч}}$ – значения выходных параметров, рассчитанные по ММ; $\bar{y}^{\text{эксп}}$ – значения выходных параметров, полученные экспериментально на реальном объекте при тех же значениях входных переменных \bar{X} (1.3), что $\bar{y}^{\text{расч}}$; ε – погрешность модели, которая должна быть близка к погрешности экспериментальных измерений.

Если адекватность ММ не достигнута, необходимо решать *задачу идентификации*, т. е. отождествления МО объекта моделирования с описанием закономерностей реально протекающих процессов.

Процедура решения задачи идентификации математического описания объекта моделирования – это поиск наиболее подходящего вида уравнений МО – структуры оператора Φ (1.2) и коэффициентов (параметров) этих уравнений \bar{a} с использованием экспериментальных данных и *алгоритмов идентификации (alg ИДЕНТ)*, т. е. алгоритмов оптимизации, когда определяется наименьшее значение критерия рассогласования:

$$\min_{\substack{\Phi \in \Phi^{\text{допуст}} \\ \bar{a} \in \bar{a}^{\text{допуст}}}} \left\| \bar{y}^{\text{расч}} - \bar{y}^{\text{эксп}} \right\|, \quad (1.5)$$

где $\Phi^{\text{допуст}}$ и $\bar{a}^{\text{допуст}}$ – область допустимых значений структуры уравнений МО и их коэффициентов.

Идентификация может быть *структурной* – это определение вида уравнений МО, описывающих реальный процесс (1.2), и *параметрической* – определение коэффициентов (параметров) \bar{a} уравнений МО (1.2) процесса.

Адекватная ММ ХТП подвергается исследованию, в ходе которого анализируется *параметрическая чувствительность модели*, т. е. определяется влияние различных переменных и коэффициентов, в том числе и физико-химических моделей, на выходные переменные процесса. В результате выявляются наиболее подходящие ресурсы для управления реальным процессом и его оптимизации. Одновременно ХТП моделируется (симулируется) на компьютере, т. е. проводятся его *расчетные исследования* с целью анализа поведения процесса при различных условиях и всевозможных режимах работы. Это позволяет с использованием *адекватных компьютерных моделей* определять «узкие места» химических производств и возможности их совершенствования и модернизации.

1.4. Оптимизация химико-технологических процессов

Объективная тенденция к проведению химико-технологических процессов в оптимальных (наилучших) условиях – важнейшая задача химической технологии. Это соответствует современным требованиям к технологическим процессам, в том числе с позиций энергоресурсосбережения, экологической безопасности, противоаварийной работы и др. Успешное решение задачи оптимизации определяется, прежде всего, правильным выбором *критерия оптимальности* или *целевой функции*, которая в полной мере должна характеризовать эффективность технологического процесса с учетом требований, являющихся наиболее приоритетными при решении конкретной задачи.

Это связано с тем обстоятельством, что результат решения задачи оптимизации может зависеть от вида математического выражения критерия оптимальности (целевой функции). Поэтому на практике часто приходится решать задачи *многокритериальной (многоцелевой) оптимизации* с использованием весовых коэффициентов нескольких критериев (целевых функций), объединенных в один критерий оптимальности. В результате определяемые оптимальные условия обеспечивают требуемые наилучшие (в соответствии с выбранной *многоцелевой функцией*) условия проведения технологического процесса.

При этом критерий оптимальности (целевая функция) R обязательно должен характеризоваться некоторым числовым показателем, т. е. быть количественным, и зависеть от переменных процесса, в частности, от выходных (зависимых) переменных производства (\bar{y}).

Вид функциональной зависимости критерия оптимальности (целевой функции) от выходных (зависимых) переменных имеет вид

$$R = R(\bar{y}), \quad (1.6)$$

зависит от типа выбранного критерия (технологического, экономического, технико-экономического, термодинамического и т. п.) и, как правило, задается специалистами. В свою очередь, для определения значений выходных переменных в зависимости от входных (\bar{X}) в критерии (1.6) используется математическая модель процесса (1.3):

$$\bar{y}^{\text{расч}} = \bar{\varphi}(\bar{x}, \bar{u}, \bar{a}). \quad (1.7)$$

В этом случае входные переменные процесса \bar{X} рассматриваются как некоторый вектор, состоящий из двух подвекторов:

$$\bar{X} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{u} \end{bmatrix}, \quad (1.8)$$

где \bar{x} – собственно входные переменные процесса, влияющие на процесс, но на которые нельзя воздействовать, вследствие чего они не могут быть ресурсами оптимизации; \bar{u} – оптимизирующие (управляющие) переменные процесса, которые поддаются целенаправленным изменениям, и определение оптимальных значений которых является целью решения задачи оптимизации.

Для корректного решения задачи оптимизации ММ процесса (1.7) должна быть адекватной, по возможности, в широком диапазоне изменения режимных и конструкционных параметров, т. е. для нее должны быть однозначно определены:

- вид уравнений математического описания (МО);
- коэффициенты уравнений МО (\bar{a}).

Одновременно для ММ должен быть выбран наиболее эффективный алгоритм (моделирующий алгоритм – МА) решения системы уравнений МО.

В связи с тем, что собственно входные переменные \bar{x} не могут быть ресурсами оптимизации, а коэффициенты уравнений МО \bar{a} определены при решении задачи идентификации, в частности, задачи параметрической идентификации, то с позиций решения задачи оптимизации процесс решения системы уравнений МО (1.7) может быть представлен в виде зависимости (1.9) с вектор-функцией (1.3), учитывающей влияние на значения выходных переменных $\bar{y}^{\text{расч}}$ только *оптимизирующих* или *управляющих* переменных \bar{u} :

$$\bar{y}^{\text{расч}} = \bar{\varphi}(\bar{u}). \quad (1.9)$$

Более эффективным для решения задачи оптимизации является применение *теоретических моделей*, в частности *физико-химических блочно-структурных*, в общем случае справедливых в широком диапазоне изменения параметров процессов, но требующих реализации достаточно сложных вычислительных алгоритмов.

В этом случае с учетом подстановки выражения (1.9) в (1.6) задачу оптимизации можно рассматривать как математическую задачу на поиск экстремума функции многих переменных $R = R(\bar{u})$ с использованием *алгоритма оптимизации (alg ОПТ)*.

Менее привлекательным для решения задачи оптимизации является применение *эмпирических вероятностно-статистических моделей*, которые обычно представляют собой простые линейные относительно коэффициентов зависимости (1.7), в частности, полиномиального вида, и позволяют достаточно просто определять выходные переменные при известных значениях собственно входных переменных \bar{x} и оптимизирующих или управляющих переменных \bar{u} . Однако из-за того, что эмпирические модели, как правило, справедливы в достаточно узких диапазонах изменения параметров процессов, и для их определения требуется постановка специальных экспериментов (*пассивных* или *активных*), которые обрабатываются статистическими методами, то задачу оптимизации для таких моделей решают так называемыми *вероятностно-статистическими методами*. В этом случае при решении задачи оптимизации вычисления чередуются с постановкой экспериментов, статистической обработкой последних и расчетом экстремумов целевых функций, т. е. с помощью так называемого *экспериментально-статистического метода оптимизации* или *оптимального экспериментирования*.

Для физико-химических моделей отображение вектора входных переменных \bar{x} и вектора управляющих воздействий \bar{u} в вектор выходных переменных $\bar{y}^{\text{расч}}$ может быть представлено с помощью вектор-функции $\bar{\varphi}$ (1.3), как показано на рис. 1.7.

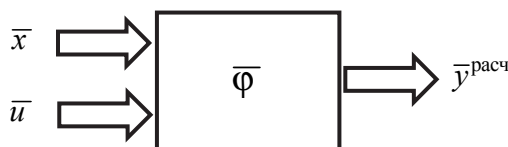


Рис. 1.7. Преобразование входных переменных и управляющих воздействий в выходные переменные моделирующим алгоритмом (*alg MM*) системы уравнений математического описания

Реализация *alg* ММ в соответствии с соотношениями (1.6) и (1.7) необходима каждый раз при расчете критерия оптимальности (целевой функции) в процессе выполнения *alg* ОПТ.

Формулировка задачи оптимизации химико-технологического процесса для многих переменных выражается следующей записью:

$$\underset{\bar{u} \in \bar{u}^{\text{допуст}}}{\text{opt}} R(\bar{u}), \quad (1.10)$$

где *opt* (оптимум) – глобальный экстремум (минимум или максимум в зависимости от характера целевой функции *R*).

При этом уравнения МО процесса (1.2) обязательно должны иметь решение. Это требование можно рассматривать как обязательное ограничение при решении задачи оптимизации.

Результаты решения задачи оптимизации сокращенно могут быть записаны:

$$\left. \begin{array}{l} \bar{u}^{\text{опт}} \\ R^{\text{опт}} \end{array} \right| \text{alg ОПТ}, \quad (1.11)$$

т. е. оптимальные значения оптимизирующих переменных $\bar{u}^{\text{опт}}$ и соответствующее минимальное или максимальное (оптимальное) значение критерия оптимальности целевой функции $R^{\text{опт}}$, полученные с помощью алгоритма оптимизации (*alg* ОПТ).

В общем случае *задача оптимизации формулируется* следующим образом: необходимо найти такие значения оптимизирующих переменных $\bar{u}^{\text{опт}}$ из области их допустимых значений $[\bar{u}^{\text{min}}, \bar{u}^{\text{max}}]$ ($\bar{u}^{\text{min}}, \bar{u}^{\text{max}}$ – границы области допустимых значений оптимизирующих переменных), которые обеспечат оптимальную (наибольшую или наименьшую) величину критерия оптимальности (целевой функции) процесса $R^{\text{опт}}$.

Решение задачи оптимизации для одной переменной (одномерная оптимизация) с областью допустимых значений $[u^{\text{min}}, u^{\text{max}}]$ можно представить, как показано на рис. 1.8.

В данном случае оптимизация – это поиск оптимального значения критерия оптимальности как функции управляющей переменной *u* (значения *u* находятся в интервале от u^{min} до u^{max}):

$$\underset{u^{\text{min}} \leq u \leq u^{\text{max}}}{\text{opt}} R(u). \quad (1.12)$$

Результат решения задачи одномерной оптимизации:

$$\left. \begin{array}{l} u^{\text{опт}} \\ R^{\text{min}} \end{array} \right| \text{alg ОПТ}. \quad (1.13)$$

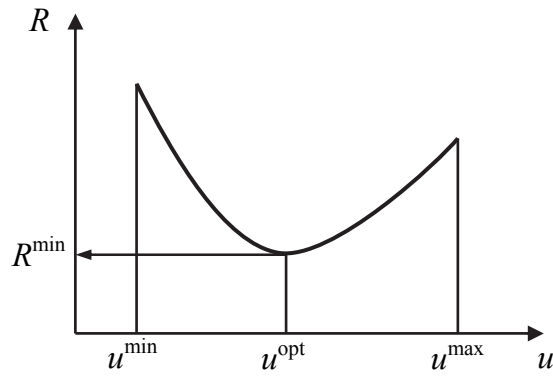


Рис. 1.8. Графическое изображение решения задачи оптимизации по одной переменной

Для двух оптимизирующих переменных оптимальное значение в параметрической плоскости можно изобразить графически с помощью линий постоянного уровня, каждая из которых состоит из точек с одинаковым значением целевой функции, как представлено на рис. 1.9.

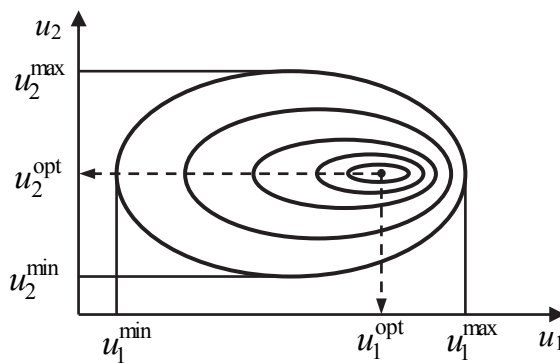


Рис. 1.9. Графическое изображение решения задачи оптимизации с двумя оптимизирующими переменными

Задача двумерной оптимизации формулируется математически следующим образом:

$$\begin{array}{l} \text{opt} \\ u_1^{\min} \leq u_1 \leq u_1^{\max} \\ u_2^{\min} \leq u_2 \leq u_2^{\max} \end{array} R(u_1, u_2). \quad (1.14)$$

Результат решения задачи двумерной оптимизации:

$$\begin{array}{l} u_1^{\text{опт}}, u_2^{\text{опт}} \\ R^{\text{опт}} \end{array} \Bigg| \text{alg ОПТ}. \quad (1.15)$$

Задача оптимизации ХТП с использованием компьютерной модели может быть сформулирована как задача *нелинейного программирования* (НЛП) с ограничениями первого рода, накладываемыми на оптимизирующие (управляющие) переменные, и второго рода, накладываемыми на физико-химические переменные и параметры процесса, зависимость которых от других переменных (собственно входных, оптимизирующих-управляющих и выходных), в общем случае, носит нелинейный характер:

$$\text{opt } R(\bar{u}), \quad (1.16)$$

ограничения первого рода: $\bar{u}^{\min} \leq \bar{u} \leq \bar{u}^{\max}$
ограничения второго рода: $\bar{\Psi}(\bar{x}, \bar{u}, \bar{y}) \leq 0$

где $\bar{\Psi}$ – заданная вектор-функция технологического процесса.

По аналогии с (1.10) здесь также математическое описание процесса (1.2) следует рассматривать как обязательное ограничение при решении задач НЛП.

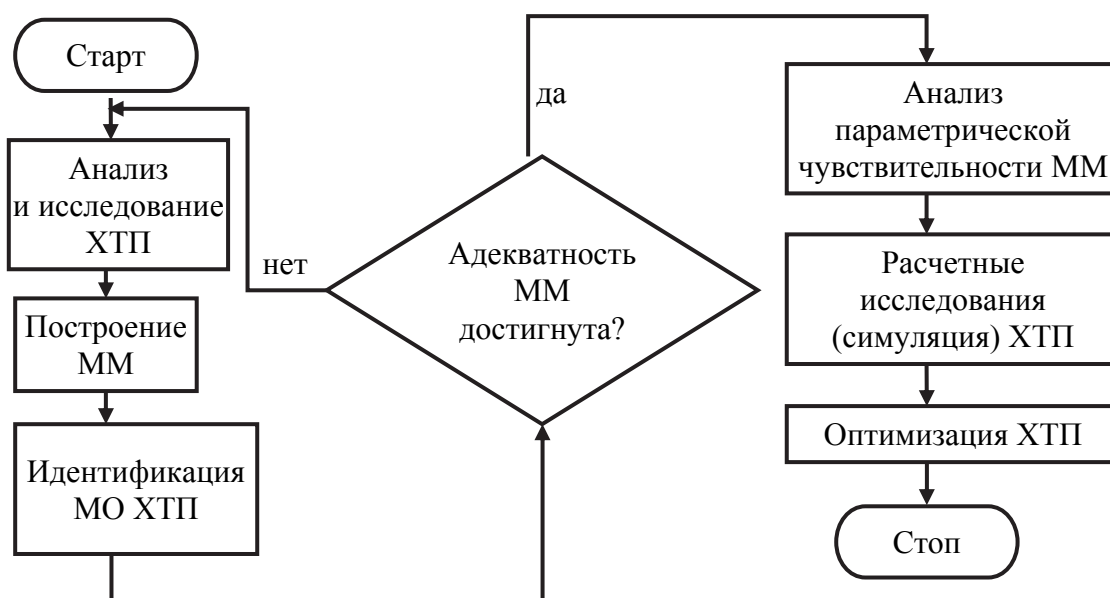


Рис. 1.10. Блок-схема процедуры компьютерного моделирования ХТП

Итак, процедура компьютерного моделирования с оптимизацией химико-технологического процесса состоит из семи основных этапов (рис. 1.10):

- 1) анализ и исследование ХТП – экспериментальное и теоретическое;
- 2) построение математической модели (ММ);
- 3) идентификация математического описания (МО) ХТП с использованием опытных данных, полученных на объекте моделирования;

- 4) проверка адекватности ММ;
- 5) анализ параметрической чувствительности ММ;
- 6) расчетные исследования (симуляция) ХТП;
- 7) оптимизация ХТП.

1.5. Анализ, оптимизация и синтез химико-технологических систем

При решении задач компьютерного моделирования необходимо более детальное представление математической модели химико-технологического процесса всего производства – химико-технологической системы (ХТС), которая учитывает топологические особенности технологической схемы, конструкционные особенности отдельных аппаратов и их размеры, типы аппаратов, а также физико-химические способы проведения отдельных процессов, например, на стадии разделения или в реакторном узле.

В результате адекватная ММ ХТП с учетом (1.3) с помощью вектор-функции $\bar{\varphi}$ может быть записана следующим образом:

$$\bar{y}^{\text{расч}} = \bar{\varphi}(\bar{x}, \bar{T}, \bar{K}, \bar{S}, \bar{A}, \bar{V}), \quad (1.17)$$

где \bar{x} – вектор собственно входных переменных, аналогичный \bar{x} в (1.7) и (1.8); \bar{T} – вектор режимных (технологических) переменных; \bar{K} – вектор конструкционных переменных, характеризующих размеры конструкций аппаратов; \bar{S} – вектор, характеризующий топологические особенности технологической схемы производства (сколько аппаратов включает производство, как они соединены между собой и т. д.); \bar{A} – вектор типовых аппаратов для реализации конкретных технологических процессов; \bar{V} – вектор, характеризующий физико-химический способ технологической реализации процессов химических превращений, разделения, изменения агрегатных состояний потоков химических производств и т. д.

В общем случае для характеристики совершенства производства используется *коэффициент эффективности производства* $K_{\text{э}}$, который зависит от перечисленных ранее переменных:

$$K_{\text{э}} = K_{\text{э}}(\bar{x}, \bar{T}, \bar{K}, \bar{S}, \bar{A}, \bar{V}). \quad (1.18)$$

Коэффициент эффективности производства – это некоторый количественный показатель, по которому оценивается степень приспособ-

собленности химико-технологических систем к выполнению поставленных целей функционирования. Его следует рассматривать в более широком плане, чем просто как характеристику технико-экономических показателей производства, как, например, в случае критерия оптимальности R . При его определении должно быть учтено влияние технологического процесса на экономические, природоохранные и социальные факторы окружающей среды и прилегающего региона.

Именно такие компьютерные модели химических производств (ХТС) позволяют наиболее рационально подойти к решению задач проектирования и управления химико-технологическими процессами.

1.5.1. Анализ химико-технологических систем

Анализ ХТС – это операция определения выходных переменных ($\bar{y}^{\text{расч}}$) и коэффициента эффективности производства ($K_{\text{Э}}$) при варьировании значений остальных переменных и параметров производства \bar{x} , \bar{T} , \bar{K} , \bar{S} , когда известны значения вектора типовых аппаратов (\bar{A}) и вектора физико-химического способа технологической реализации процессов (\bar{V}). Учитывая, что в данном случае моделируется не отдельный процесс, а химическое производство, включающее много потоков и аппаратов, добиться корректной постановки и наилучших результатов решения задачи можно с использованием *пакетов моделирующих программ* (ПМП), таких как ASPEN, HYSYS, PRO-II и ChemCAD.

Для расчета $\bar{y}^{\text{расч}}$ и $K_{\text{Э}}$ используется алгоритм математического моделирования (alg MM), получаемый при построении компьютерной модели химического производства (ХТС). В общем случае задача анализа ХТС может быть представлена схемой, изображенной на рис. 1.11.

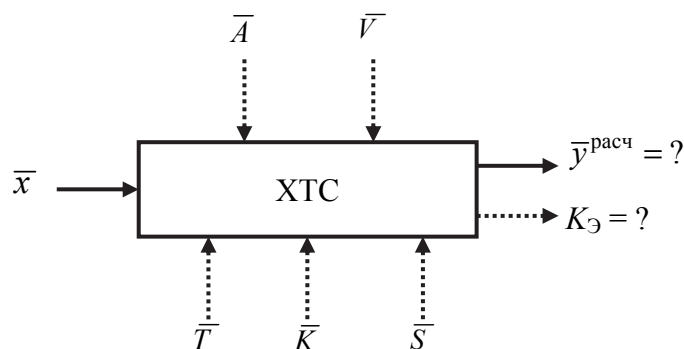


Рис. 1.11. Схематическое изображение процедуры анализа ХТС

Исходными данными для решения задачи являются векторы параметров производства $(\bar{T}, \bar{K}, \bar{S}, \bar{A}, \bar{V})$ и входные переменные (\bar{x}) . Нужно найти вектор выходных переменных $(\bar{y}^{\text{расч}})$, из которого можно выразить коэффициент эффективности производства $(K_{\text{Э}})$. Решением задачи будет являться алгоритм математического моделирования (alg MM).

1.5.2. Оптимизация химико-технологических систем

Оптимизация ХТС – это операция определения оптимальных значений векторов $\bar{T}^{\text{opt}}, \bar{K}^{\text{opt}}, \bar{S}^{\text{opt}}$ при выбранном виде выражения для определения критерия оптимальности (целевой функции) R и заданных значениях векторов $\bar{x}, \bar{A}, \bar{V}$. В общем случае задача оптимизации ХТС может быть представлена схемой на рис. 1.12.

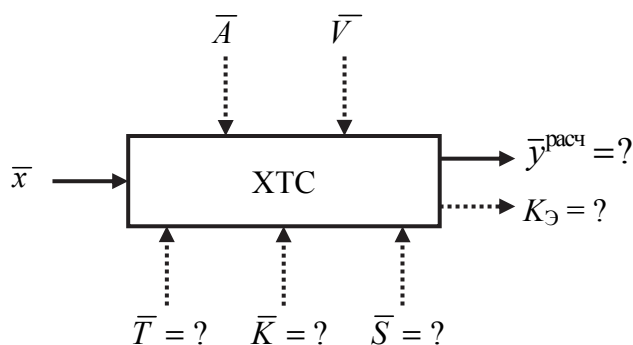


Рис. 1.12. Схематическое изображение процедуры оптимизации ХТС

Исходными данными для решения задачи являются заданные типовые аппараты (\bar{A}) и способы реализации процессов (\bar{V}) . На основе вектора исходных переменных ХТС (\bar{x}) и из условия оптимума выбранного критерия оптимизации (R) находят оптимальные значения параметров производства $(\bar{T}^{\text{opt}}, \bar{K}^{\text{opt}}, \bar{S}^{\text{opt}})$. Решением задачи будет алгоритм оптимизации (alg ОПТ), для выполнения которого потребуется результат решения задачи анализа ХТС – алгоритм математического моделирования (alg MM).

Математическая формулировка задачи оптимизации имеет вид

$$\begin{aligned} & \text{opt} \quad R(\bar{T}, \bar{K}, \bar{S}). \quad (1.19) \\ & \bar{T} \in \bar{T}^{\text{допуст}} \\ & \bar{K} \in \bar{K}^{\text{допуст}} \\ & \bar{S} \in \bar{S}^{\text{допуст}} \end{aligned}$$

Оптимальные значения режимных (технологических) \bar{T}^{opt} , конструкционных \bar{K}^{opt} параметров и компонентов вектора \bar{S}^{opt} , характеризующие топологические особенности технологической схемы производства, определяются из области их допустимых значений $\bar{T}^{\text{допуст}}$, $\bar{K}^{\text{допуст}}$, $\bar{S}^{\text{допуст}}$ соответственно. Они обеспечивают наилучшее значение выбранного критерия оптимальности (целевой функции) R .

Как было показано, критерий оптимальности R зависит от $\bar{y}^{\text{расч}}$, т. е. для его определения при очередных приближениях оптимизирующих переменных $\bar{T}, \bar{K}, \bar{S}$, генерируемых алгоритмом оптимизации (alg ОПТ), необходимо каждый раз рассчитывать значения выходных переменных $\bar{y}^{\text{расч}}$ с использованием алгоритма математического моделирования (alg ММ). Поэтому будет справедливо считать, что во внешнем цикле процедуры решения задачи оптимизации химико-технологической системы используется alg ОПТ, а во внутреннем – alg ММ.

1.5.3. Синтез химико-технологических систем

Синтез ХТС – это операция ее создания для производства заданной химической продукции с учетом определенных требований к функционированию ХТС, а также различных физико-химических и технологических ограничений на их выполнение.

Поскольку процедуры синтеза ХТС включают как формализованные задачи (ФЗ), так и неформализованные задачи (НФЗ), то наряду с алгоритмом математического моделирования (alg ММ) и алгоритмом оптимизации (alg ОПТ) для их решения необходим также алгоритм синтеза (alg СИНТ), широко использующий эволюционно-эвристические процедуры и тесно связанный с применением методов *искусственного интеллекта* и *экспертных систем*. В общем случае задача синтеза ХТС может быть представлена схемой на рис. 1.13.

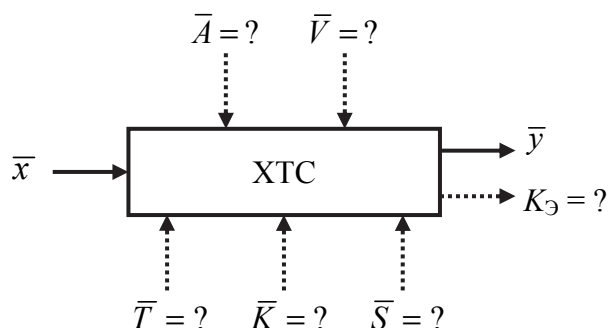


Рис. 1.13. Схематическое изображение процедуры синтеза ХТС

В данном случае известны только входные и выходные переменные процесса (\bar{x} и \bar{y}), а также физико-химические и технологические ограничения для них. Требуется определить наряду с оптимальными значениями параметров производства (\bar{T}^{opt} , \bar{K}^{opt} , \bar{S}^{opt}) оптимальные типовые аппараты (\bar{A}^{opt}) и способы реализации процессов (\bar{V}^{opt}).

Все перечисленные определяемые переменные при решении задачи синтеза находятся с учетом ограничений первого и второго рода (1.16), накладываемых из физико-химических и технологических соображений как на искомые переменные (ограничения первого рода), так и на вычисляемые с их помощью переменные, характеризующие качество проведения ХТП (ограничения второго рода).

Задачи анализа, оптимизации и синтеза ХТС тесно связаны между собой (рис. 1.14). Анализ ХТС позволяет определить выходные переменные процесса, на основании которых находится критерий оптимальности, и поэтому предшествует решению задачи оптимизации ХТС. Задачи анализа и оптимизации ХТС являются необходимыми этапами решения ФЗ синтеза ХТС и необходимыми для реализации эволюционно-эвристических процедур решения НФЗ синтеза ХТС.

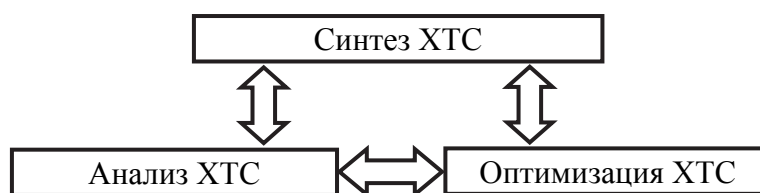


Рис. 1.14. Взаимосвязь постановки и решения задач анализа, оптимизации и синтеза ХТС

Комплексное решение задач анализа, оптимизации и синтеза химических производств является важнейшим этапом проектирования новых и модернизации действующих производств и широко используется в системах автоматизированного проектирования (САПР) в химической промышленности.

1.6. Численные методы решения нелинейных уравнений

При построении различного рода математических моделей ХТП возникает задача решения систем уравнений: СКУ, СОДУ или СДУЧП. При построении компьютерных моделей данные системы

уравнений должны быть решены в численном виде. Численные методы решения систем уравнений представленных выше типов достаточно сложны. При составлении математического описания стационарных ХТП в системах с сосредоточенными параметрами (реактор идеального смешения) возникают системы конечных уравнений большой размерности. Во многих случаях данные системы удается редуцировать к системам значительно меньшей размерности или даже к одному нелинейному уравнению, которое необходимо решить численным методом. При построении компьютерных моделей левые и правые части уравнений задаются с помощью программных функций, которые могут представлять собой не просто вычисление какого-то выражения, а последовательность вычислений многих выражений. В программных функциях можно реализовать условные вычисления, когда последовательность расчетов зависит от некоторых условий, промежуточных результатов. Таким образом, программные функции позволяют сводить большие и сложные системы уравнений к одному сложному уравнению. Однако решение уравнений, в которых части заданы программными функциями, возможно только численными методами. Ниже рассмотрим основные принципы решения нелинейных уравнений, зависящих от одной неизвестной.

Уравнение с одним неизвестным в общем виде можно записать двумя способами:

$$f(x) = 0 \quad (1.20)$$

или

$$f_1(x) = f_2(x). \quad (1.21)$$

Решение или корень уравнения – это всякое число ξ , которое обращает уравнение в тождество:

$$f(\xi) \equiv 0 \text{ или } f_1(\xi) \equiv f_2(\xi). \quad (1.22)$$

Корни нелинейных уравнений могут быть действительными или комплексными числами, и их может быть несколько или даже бесконечно много. Полезно помнить, что алгебраическое нелинейное уравнение (полиномиальное уравнение) n -й степени

$$a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_n = 0 \quad (1.23)$$

имеет не более n действительных корней.

Численное решение нелинейных уравнений состоит из следующих этапов:

1) отделение корней – нахождение интервалов $[\alpha; \beta]$, которые содержат только один корень;

2) уточнение корней – вычисление значений корней в найденных интервалах с заданной точностью ε .

1.6.1. Отделение корней

Все известные методы численного решения нелинейных уравнений (метод дихотомии, метод хорд, метод Ньютона и т. д.) представляют собой фактически методы уточнения корней. Отделение корней – в общем случае достаточно сложная задача, так что трудно себе представить какой-нибудь алгоритм отделения всех корней нелинейного уравнения. На практике обычно и не требуется нахождение всех корней уравнения, достаточно найти тот корень, который удовлетворяет практике, и в этом случае более важными являются методы уточнения корней. Тем не менее существуют способы и принципы, с помощью которых можно оценить число корней в заданном интервале для заданного уравнения. Ниже рассмотрим два способа отделения корней: графический и расчетный. Графический способ малоприменим для практики, где часто требуется решать нелинейные уравнения в автоматическом режиме как часть решения более крупной задачи. Расчетный способ представлен описанием принципов, на основе которых можно проверить число корней в заданном интервале.

1.6.1.1. Графический способ. Несмотря на то, что этот способ малоприменим для практики, тем не менее с его помощью можно наглядно представить принципы расчетного способа отделения корней, который единственно возможен при численном решении уравнений.

Рассмотрим вначале графический способ отделения корней для уравнения, заданного в виде (1.20). Если изобразить график функции $f(x)$ на координатной плоскости (рис. 1.15), то корнями уравнения (1.20) будут абсциссы точек пересечения этого графика с осью « x ». На рис. 1.15 можно выделить три корня ξ_1 , ξ_2 и ξ_3 , которые находятся в интервалах $[\alpha_1; \beta_1]$, $[\alpha_2; \beta_2]$ и $[\alpha_3; \beta_3]$, соответственно.

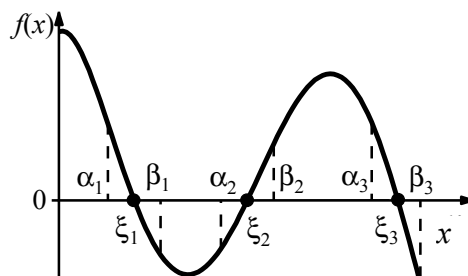


Рис. 1.15. Графический способ отделения корней уравнения вида (1.20)

Если же нелинейное уравнение задано в виде (1.21), то для графической интерпретации решения уравнения необходимо построить графики функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$ на координатной плоскости (рис. 1.16).

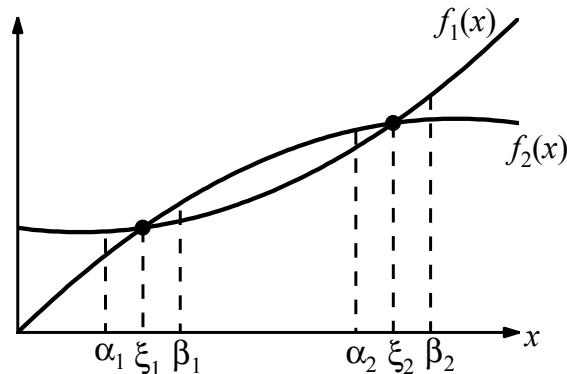


Рис. 1.16. Графический способ отделения корней уравнения вида (1.21)

Абсциссы точек пересечения двух функций дают приближенные значения корней уравнения. Так на рис. 1.16 можно выделить два корня ξ_1 и ξ_2 , которым соответствуют интервалы $[\alpha_1; \beta_1]$ и $[\alpha_2; \beta_2]$.

1.6.1.2. Расчетный способ. Отделение корней расчетным путем основано на следующих положениях:

1) если на концах интервала $[\alpha; \beta]$ функция $f(x)$ имеет разные знаки, что равносильно условию

$$f(\alpha) \cdot f(\beta) < 0, \quad (1.24)$$

то между точками α и β имеется нечетное число корней;

2) если на концах интервала $[\alpha; \beta]$ функция $f(x)$ имеет одинаковые знаки, что равносильно условию

$$f(\alpha) \cdot f(\beta) > 0, \quad (1.25)$$

то между точками α и β либо нет корней, либо имеется нечетное число корней;

3) если на концах интервала $[\alpha; \beta]$ функция $f(x)$ имеет разные знаки и производная $f'(x)$ не меняет знак на данном интервале, то уравнение имеет единственный корень на интервале $[\alpha; \beta]$.

1.6.2. Уточнение корней

Численное уточнение корней производится итерационными методами или методами последовательных приближений. Метод состоит из повторяющихся вычислительных операций, которые называют ша-

гами или итерациями. На каждой итерации получают приближенное значение корня. Итерационный процесс начинается заданием начального приближения для корня, обозначаемого $x^{(0)}$. Далее проводится 1-я итерация и получают приближенное значение корня $x^{(1)}$, затем после второй итерации получают $x^{(2)}$ и т. д. Если при последовательных итерациях $k = 1, 2, 3, \dots$ получают сходящуюся последовательность чисел $x^{(k)}$, то эта последовательность сходится к корню уравнения ξ . Если же последовательность получается расходящейся, то корень получить не удастся. Последовательность $x^{(k)}$ будет сходящейся, если модуль разности последовательных приближенных значений корня уменьшается с каждой последующей итерацией, т. е.

$$|x^{(1)} - x^{(0)}| > |x^{(2)} - x^{(1)}| > \dots > |x^{(k)} - x^{(k-1)}| > \dots \quad (1.26)$$

При этом модуль разности будет выступать естественной оценкой точности вычисления корня.

Для реализации любого итерационного процесса должны быть заданы начальное приближение корня $x^{(0)}$ и точность ε , с которой требуется найти решение. Начальное приближение корня следует задавать из физических соображений и по результатам отделения корней. Условие окончания итерационного процесса имеет вид

$$|x^{(k)} - x^{(k-1)}| \leq \varepsilon. \quad (1.27)$$

Одним из самых простых методов уточнения корней является метод половинного деления или метод дихотомии. Допустим, мы отделили один корень уравнения вида (1.20) на интервале $[\alpha; \beta]$. В основе метода дихотомии лежит деление интервала $[\alpha; \beta]$ пополам. Итерационная формула для данного метода имеет вид

$$x^{(k+1)} = \frac{\alpha^{(k)} + \beta^{(k)}}{2}. \quad (1.28)$$

Обозначим границы начального интервала, на котором имеется один корень $\alpha^{(0)}$ и $\beta^{(0)}$. На каждой итерации интервал $[\alpha^{(k)}; \beta^{(k)}]$ делят пополам и выбирается та половина интервала, на которой функция $f(x)$ имеет разные знаки по условию (1.24), а именно: если $f(\alpha^{(k)}) \cdot f(x^{(k+1)}) < 0$, то $\beta^{(k+1)} := x^{(k+1)}$, иначе — $\alpha^{(k+1)} := x^{(k+1)}$. Процесс деления каждого нового интервала пополам продолжается до тех пор, пока не выполнится условие окончания итерационного процесса:

$$\beta^{(k)} - \alpha^{(k)} \leq \varepsilon. \quad (1.29)$$

Блок-схема алгоритма уточнения корней методом дихотомии представлена на рис. 1.17.

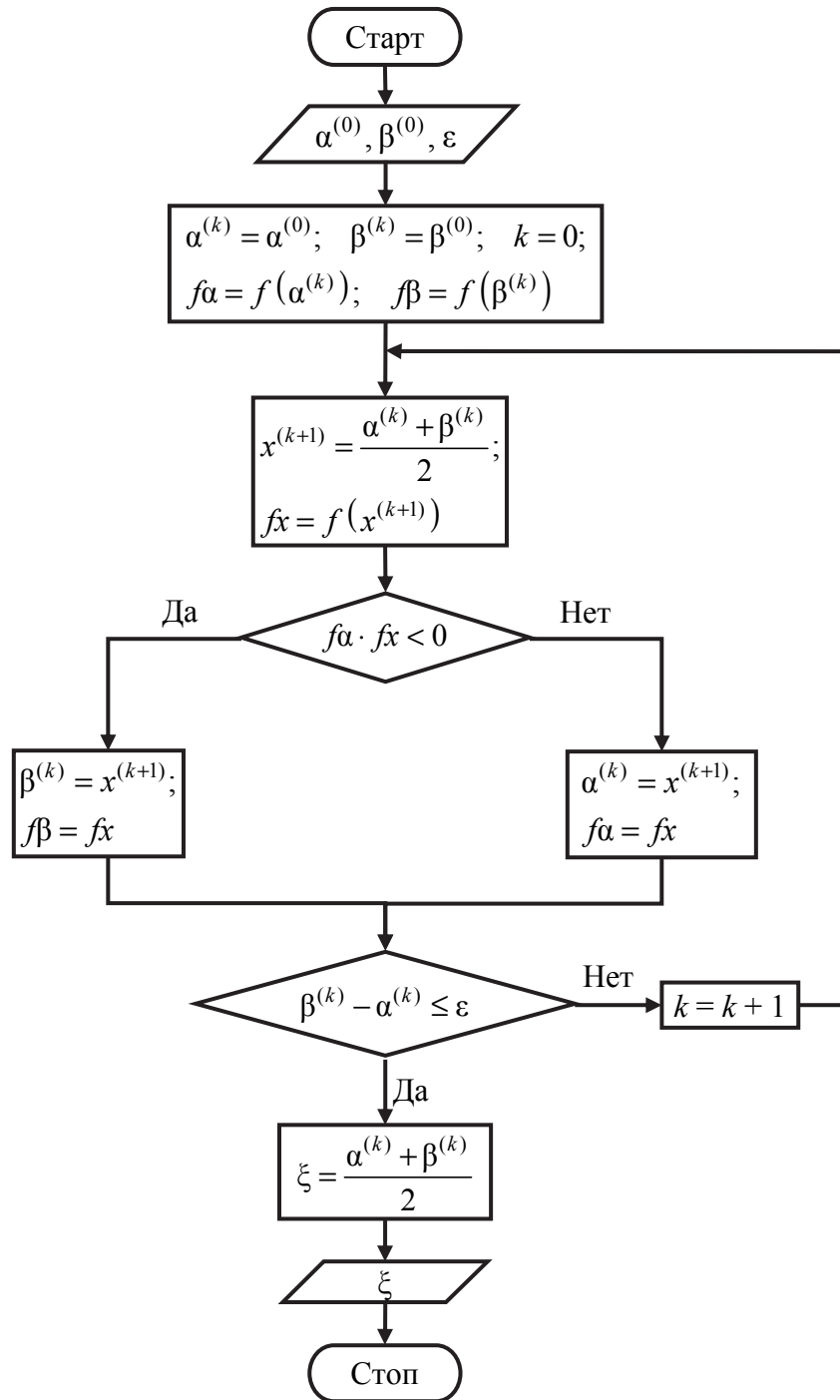


Рис. 1.17. Блок-схема алгоритма уточнения корней методом дихотомии

Число итераций, необходимых для достижения заданной точности, зависит от размера начального интервала $[\alpha^{(0)}; \beta^{(0)}]$ и от точности

сти ε . Через k итераций исходный интервал уменьшится в 2^k раз:

$$\frac{\beta^{(0)} - \alpha^{(0)}}{\beta^{(k)} - \alpha^{(k)}} = 2^{(k)}. \quad (1.30)$$

Необходимое для этого число итераций найдем из условия окончания итерационного процесса:

$$\frac{\beta^{(0)} - \alpha^{(0)}}{2^{(k)}} \leq \varepsilon \Rightarrow 2^{(k)} \geq \frac{\beta^{(0)} - \alpha^{(0)}}{\varepsilon} \Rightarrow k \geq \frac{1}{\lg 2} \lg \left(\frac{\beta^{(0)} - \alpha^{(0)}}{\varepsilon} \right). \quad (1.31)$$

Например, если требуется исходный интервал уменьшить в 10^3 раз, то потребуется совершить не менее 10 итераций:

$$\frac{\beta^{(0)} - \alpha^{(0)}}{\varepsilon} = 10^3 \Rightarrow k \geq \frac{3}{\lg 2} \approx 10. \quad (1.32)$$

Если же необходимо исходный интервал уменьшить в 10^9 , то необходимое число итераций составит не менее 30:

$$\frac{\beta^{(0)} - \alpha^{(0)}}{\varepsilon} = 10^9 \Rightarrow k \geq \frac{9}{\lg 2} \approx 30. \quad (1.33)$$

Метод дихотомии сходится значительно медленнее, чем другие известные численные методы решения нелинейных уравнений (метод Ньютона, касательных, хорд и т. д.).

2. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ БЛОЧНО-СТРУКТУРНЫЕ МОДЕЛИ

Физико-химические модели строятся на основе знания механизмов протекания реальных процессов. Важнейшим условием применения этих моделей является обеспечение их адекватности путем решения *задачи идентификации*. Основной целью применения физико-химических моделей является *решение задачи оптимизации*, в результате чего определяются оптимальные (наилучшие) условия проведения химико-технологических процессов.

2.1. Общие принципы построения физико-химических моделей

В общем случае для моделирования химико-технологических процессов (ХТП) на компьютерах необходимо знание физико-химических закономерностей их протекания, а также данных лабораторных и/или полупромышленных (реже промышленных) экспериментов для подтверждения справедливости (адекватности) моделей.

Физико-химические модели основаны на учете действительных закономерностей протекающих процессов, и поэтому могут применяться для прогнозирования поведения промышленных производств в достаточно широких диапазонах изменения параметров. При их построении сначала *изучается теория процесса*, исходя из чего строится система уравнений *математического описания* (МО), после анализа которой разрабатывается *моделирующий алгоритм* (МА) ее решения. Последний, чаще всего, представляет собой комбинацию известных численных методов решения стандартных задач вычислительной математики. В результате реализации моделирующего алгоритма (МА) на компьютере одновременно вычисляются все выходные переменные технологического процесса при известных значениях входных переменных, т. е. решается так называемая *прямая задача* математического моделирования.

Не менее важным является также и решение *обратной задачи* математического моделирования, когда на основе экспериментальных данных определяются как вид уравнений, описывающих физико-

химические закономерности протекающих процессов (гидродинамики, химических и фазовых превращений, массо- и теплопередачи и других), так и значения параметров (коэффициентов массопередачи, теплопередачи, констант фазовых равновесий и др.) этих уравнений. Только при успешном решении обратной задачи удастся добиться адекватности математической модели (ММ) и использовать ее для исследования поведения реальных процессов.

Обратные задачи математического моделирования тесно связаны с задачами идентификации МО ХТП. Идентификация МО объектов заключается в определении вида уравнений системы (структурная идентификация) и ее коэффициентов (параметрическая идентификация) на основании ограниченной выборки (статистики) экспериментальных данных. С практической точки зрения однозначного решения задачи идентификации не существует в том смысле, что при различных наблюдениях экспериментальных данных получаются отличающиеся друг от друга результаты. Для эмпирических моделей задача идентификации решается при их построении статистическими методами. В случае физико-химических моделей для решения задачи идентификации приходится реализовывать специальные оптимизационные алгоритмы, которые минимизируют отклонения между расчетными и экспериментальными параметрами ХТП.

Для решения задачи оптимизации с использованием *физико-химических моделей* применяются *численные методы одномерной и многомерной оптимизации*. Проведение дополнительных экспериментов при этом не требуется, так как модели справедливы в широком диапазоне изменения параметров процессов и допускается возможность экстраполяции их свойств. Рассчитываемые оптимальные условия проведения процессов при условии адекватности используемой компьютерной модели обычно соответствуют действительности.

С позиций математического моделирования химико-технологических процессов объекты моделирования принято разделять на *объекты (процессы) с сосредоточенными параметрами* и *объекты (процессы) с распределенными параметрами*.

Объекты с сосредоточенными параметрами характеризуются одинаковым значением свойств (параметров и переменных) во всем объеме (на всей поверхности) единицы технологического оборудования или его секции. Как правило, *стационарные режимы* этих объектов описываются системами конечных нелинейных (линейных) уравнений – СКУ: СНУ (СЛАУ), а *нестационарных режимов* – системами с обыкновенными дифференциальными уравнениями – СОДУ. Чаще

всего для описания гидродинамической структуры движущихся потоков фаз в этом случае используются модели идеального смешения.

Объекты с распределенными параметрами характеризуются изменением параметров процессов, как минимум, вдоль одной пространственной переменной. В этом случае для описания гидродинамической структуры движущихся потоков фаз используется либо модель идеального вытеснения, либо *однопараметрическая* диффузионная модель, и математическое описание *стационарных режимов процессов* может быть представлено системой обыкновенных дифференциальных уравнений – СОДУ. При изменении параметров процессов вдоль двух и более пространственных координат МО стационарных режимов процессов записывается с помощью системы дифференциальных уравнений в частных производных – СДУЧП. *Нестационарные режимы объектов (процессов)* с распределенными параметрами всегда описываются системами дифференциальных уравнений в частных производных – СДУЧП.

2.2. Типовые гидродинамические модели движения потоков фаз в описании химико-технологических процессов

Химико-технологические процессы обычно протекают в движущихся потоках фаз (парогазовых, жидкостных и твердых), гидродинамические закономерности перемещения которых оказывают влияние на эффективность химических производств. Выбор конструкций аппаратов химической технологии во многом связан с необходимостью обеспечения требуемых гидродинамических условий проведения процессов. Поэтому основу уравнений МО ХТП составляют балансовые уравнения для потоков вещества (массы), теплоты (энтальпии) и импульса (количества движения), записанные с учетом гидродинамических закономерностей их движения.

Характерной особенностью перечисленных балансовых уравнений является то обстоятельство, что они должны включать выражения, описывающие интенсивности источников (стоков) веществ, теплоты и импульсов, характеризующих скорости их образования (выделения) и расходования (поглощения) в потоках за счет различных «элементарных» физико-химических процессов – химических реакций, массо-передачи, фазовых переходов и т. д.

Принципиально можно построить гидродинамические модели потоков различной сложности, наиболее отвечающие используемым конструкциям технологического оборудования. Для этой цели при построении физико-химических моделей реальных процессов применяются так называемые *комбинированные гидродинамические модели* движения потоков. Они представляют собой комбинации описаний зон аппаратов с более простыми гидродинамическими моделями движения потоков, в частности комбинации моделей *идеального смешения*, *идеального вытеснения* и *однопараметрической диффузионной модели*. Основная особенность этих моделей состоит в том, что они содержат минимальное число параметров:

- модель идеального смешения – объем;
- модель идеального вытеснения – объем и длину;
- однопараметрическая диффузионная модель – объем, длину и коэффициент продольного перемешивания.

Химико-технологические процессы обычно сопровождаются перемещением некоторых материальных потоков жидкости, газа (пара) или твердых частиц. Потоки могут быть *однофазными*, т. е. целиком состоять из частиц одной фазы (например, жидкости), которые перемещаются в некотором объеме аппарата, и *многофазными* (в частности, двухфазными), когда процесс проходит в условиях взаимодействия нескольких фаз, например, газ – жидкость, жидкость – твердое вещество, газ – твердое вещество и т. д. В связи с этим основу уравнений математического описания ХТП составляют балансовые уравнения движения потоков.

Уравнения гидродинамики реальных потоков обычно очень сложны (например, уравнения Навье – Стокса) и часто не могут быть записаны в общем виде (например, для многофазных потоков из-за отсутствия возможности задания граничных условий на нестационарной поверхности раздела фаз). Поэтому на практике при составлении математических описаний обычно используют приближенные (модельные) представления о структуре движущихся потоков отдельных фаз – гидродинамические модели *идеального смешения*, *идеального вытеснения* и *однопараметрические диффузионные модели*.

Для зон потоков, описываемых этими приближенными моделями, составляются балансовые уравнения гидродинамики в соответствии с рис. 2.1.

В общем случае балансовые уравнения гидродинамики записывают отдельно для: общей массы системы; количества (массы) компо-

нентов потоков фаз; теплоты (энтальпии) и импульса. Балансовые уравнения распространяют на всю движущуюся систему потоков фаз с учетом ее полного объема и длины (для модели идеального вытеснения и однопараметрической диффузионной модели).

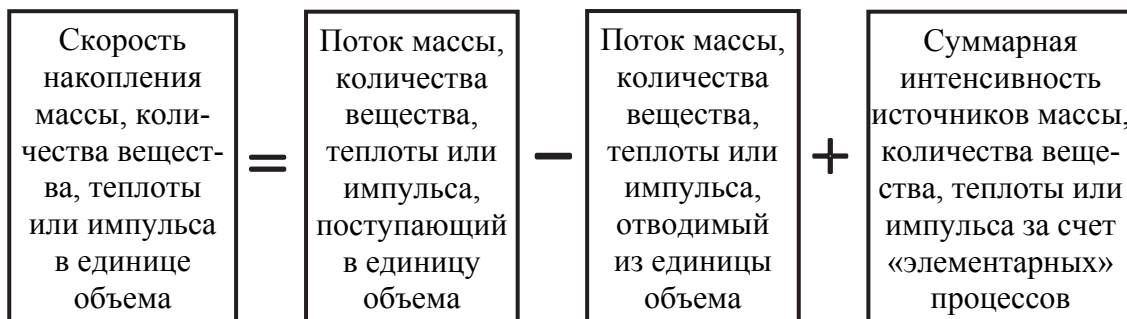


Рис. 2.1. Общий принцип составления балансовых уравнений для идеальных гидродинамических моделей движущихся потоков фаз

Под *потоком массы* понимают общую массу многокомпонентной смеси, протекающую в единицу времени в рассматриваемой системе. Единица измерения потока массы, например, [кг/ч] или [кг/с].

Поток вещества (компонента) является частным случаем потока массы. Термин относится только к массе выбранного i -го компонента. Единица измерения потока вещества (компонента), например, [молей i -го компонента смеси/ч] или [молей i -го компонента смеси/с]. Из определения закона сохранения массы следует, что внутри системы сумма потоков компонентов равна потоку массы.

Поток теплоты или энтальпии в инженерных расчетах является энергетической характеристикой системы. Под этим термином понимают поступающее (отводимое) в единицу времени в (от) систему (системы) количество теплоты (энтальпии), отнесенное к стандартному состоянию. Единицы измерения потока теплоты или энтальпии, например, [ккал/ч] или [ккал/с].

Поток импульса (количества движения) характеризуется значением подводимого (отводимого) в единицу времени к (от) системе импульса. Единица его измерения, например, [кгм/ч²] или [кгм/с²].

Следует отметить, что уравнения балансов импульса при МО ХТП используются достаточно редко. Это связано с тем, что они существенно усложняют процедуру решения систем уравнений МО, в то время как дополнительная информация, получаемая при их применении, как правило, не столь важна. На этом основании уравнения балансов импульса в дальнейшем не рассматриваются.

2.2.1. Источники вещества и теплоты для элементарных процессов

Движущийся поток рассматривается как многофазная, многокомпонентная система (число компонентов = n), для каждой из фаз которой записывают уравнения балансов, базирующиеся на принятой гидродинамической модели движения потока: модели идеального смещения (МИС); модели идеального вытеснения (МИВ); однопараметрической диффузионной модели (ОДМ). Реальный поток движущейся фазы может быть представлен в виде комбинированной гидродинамической модели идеального смещения, состоящей из зон МИС, МИВ и зон, соответствующих ОДМ, причем для каждой зоны записывается своя система уравнений балансов.

Для каждой зоны записываются следующие уравнения балансов:

- уравнения покомпонентных балансов, которые характеризуют изменение концентраций компонентов в зоне; число уравнений – n ;
- уравнение общего материального баланса, характеризующее изменение расхода потока в зоне; число уравнений – 1;
- уравнение теплового баланса, которое характеризует изменение температуры в зоне; число уравнений – 1.

Общее число балансовых уравнений для отдельной зоны без учета уравнения баланса импульса составляет $n + 2$.

Основу уравнений математического описания составляют гидродинамические уравнения балансов для потоков, в которые включаются интенсивности источников вещества (компонентов) и теплоты.

Если уравнения балансов включают производные по времени, то строятся динамические математические модели, которые описывают нестационарные режимы движения потока фазы. Если в системе уравнений нет производных по времени, то строятся статические математические модели, которые описывают стационарные режимы движения потока.

Интенсивности источников веществ характеризуют скорости образования или расходования компонентов в потоке за счет элементарных процессов (рис. 1.5). Интенсивности источников теплоты характеризуют скорости выделения или поглощения теплоты в потоке за счет элементарных процессов.

К основным элементарным процессам относятся:

- **химические превращения** или **реакции**, для которых *интенсивность источников вещества* обозначается G_i^R ($i = 1, \dots, n$), а *интенсивность источников теплоты* – ΔQ^R ;

– *массопередача*, для которой *интенсивность источников вещества* обозначается G_i^M ($i = 1, \dots, n$), а *интенсивность источников теплоты* – ΔQ^M ;

– *изменение агрегатного состояния* или *фазовые переходы*, для которых *интенсивность источников вещества* обозначается G_i^A ($i = 1, \dots, n$), а *интенсивность источников теплоты* – ΔQ^A ;

– *теплопередача*, для которой *интенсивность источников теплоты* обозначается ΔQ^T ;

– *теплоизлучение*, для которого *интенсивность источников теплоты* обозначается ΔQ^H .

Общая суммарная интенсивность источников вещества обозначается G_i^Σ ($i = 1, \dots, n$), суммарная интенсивность источников теплоты – ΔQ^Σ . Суммарные интенсивности источников веществ и теплоты определяются как сумма от элементарных процессов:

$$G_i^\Sigma = G_i^R + G_i^M + G_i^A + G_i^H, \quad (i = 1, \dots, n), \quad (2.1)$$

$$\Delta Q^\Sigma = \Delta Q^R + \Delta Q^M + \Delta Q^A + \Delta Q^H + \Delta Q^T + \Delta Q^I. \quad (2.2)$$

Интенсивности источников вещества и теплоты – это экстенсивные параметры зоны потока, которые зависят от ее размера. Независимые от размера зоны величины, характеризующие скорость образования или расходования вещества или теплоты в единице объема зоны или на единице поверхности, будем называть *локальными интенсивностями источников* вещества или теплоты и обозначать малыми латинскими буквами. Различают *объемные* интенсивности источников элементарных процессов, локальные интенсивности которых g_i ($i = 1, \dots, n$) и Δq , относятся к единице объема и *поверхностные* интенсивности источников элементарных процессов, локальные интенсивности которых g_i ($i = 1, \dots, n$) и Δq , относятся к единице поверхности.

Так, для *химической реакции в объеме* локальная интенсивность источника вещества i -го компонента будет обозначаться g_i^R , а теплоты – Δq^R . Тогда общая интенсивность источников вещества компонента в зоне потока за счет химической реакции в *объеме* будет даваться выражением

$$G_i^R = V^R \cdot g_i^R \quad (i = 1, \dots, n), \quad (2.3)$$

где V^R – объем зоны потока, в которой протекает химическая реакция.

Общая интенсивность источников теплоты за счет химической реакции в объеме будет выражаться так:

$$\Delta Q^R = V^R \cdot \Delta q^R. \quad (2.4)$$

В этом случае g_i^R – локальная скорость химической реакции по компоненту i (скорость, отнесенная к единице объема), Δq^R – локальная скорость выделения или поглощения теплоты за счет химической реакции (также отнесенная к единице объема).

Для процесса *массопередачи* локальные интенсивности источника веществ g_i^M ($i = 1, \dots, n$) и источника теплоты Δq^M относятся к единице поверхности рассматриваемой зоны массопередачи. Общие интенсивности источников вещества и теплоты выражаются через площадь поверхности массопередачи F^M :

$$G_i^M = F^M \cdot g_i^M \quad (i = 1, \dots, n); \quad (2.5)$$

$$\Delta Q^M = F^M \cdot \Delta q^M. \quad (2.6)$$

В этом случае g_i^M – локальные скорости массопередачи по каждому компоненту, отнесенные к единице поверхности, F^M – поверхность массопередачи, Δq^M – локальная скорость выделения или поглощения теплоты за счет массопередачи, отнесенная к единице поверхности.

Выражения для локальных интенсивностей элементарных процессов записываются на основе физико-химических закономерностей этих процессов и зависят от различных переменных процесса.

Например, локальная скорость химической реакции по компоненту i в уравнении (2.3) для реакции с m «элементарными» стадиями определяется следующим выражением:

$$g_i^R = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} r_j \quad (i = 1, \dots, n), \quad (2.7)$$

где r_j – скорость j -й стадии химической реакции; α_{ij} – стехиометрический коэффициент i -го компонента в j -й стадии реакции (если i -й компонент не участвует в j -й стадии химической реакции, то соответствующий стехиометрический коэффициент равен нулю); n – число компонентов многокомпонентной системы; m – число элементарных стадий сложной химической реакции.

Выражение для скорости стадии «элементарной» химической реакции в соответствии с законом действующих масс имеет вид

$$r_j = k_j \prod_{i=1}^n x_i^{\chi_{ij}} \quad (j=1, \dots, m), \quad (2.8)$$

где k_j – константа скорости j -й стадии химической реакции, определяемая по уравнению Аррениуса; Π – обозначение произведения, а χ_{ij} принимает значения: $\chi_{ij} = -\alpha_{ij}$ (если i – реагент j -й стадии реакции) и $\chi_{ij} = 0$ (если i – продукт j -й стадии реакции или отсутствует на этой стадии).

В свою очередь локальная скорость выделения или поглощения теплоты за счет химической реакции в уравнении (2.4) определяется следующим выражением:

$$\Delta q^R = \sum_{j=1}^m |\alpha_{pj}| (-\Delta H_{pj}^R) r_j, \quad (2.9)$$

где ΔH_{pj}^R – тепловой эффект элементарной стадии реакции, относящийся к одному молю продукта p на этой стадии, перед которым стоит знак минус, так как его величина рассматривается относительно движущегося потока, а не окружающей среды, как общепринято в химии.

Локальная скорость массопередачи по компоненту i в уравнении (2.5) определяется следующим выражением:

$$g_i^M = \sum_{j=1}^n K_{ij}^M (x_j^{(*)} - x_j) \quad (i=1, \dots, n), \quad (2.10)$$

где K_{ij}^M – коэффициент массопередачи; $x_j^{(*)}$ – равновесная концентрация компонента j .

В свою очередь, локальная скорость выделения или поглощения теплоты за счет массопередачи определяется с помощью следующего соотношения:

$$\Delta q^M \cong \sum_{i=1}^n (-\Delta H_i^M) g_i^M, \quad (2.11)$$

где ΔH_i^M – изменение энтальпии процесса переноса единицы массы (химического количества) i -го компонента через поверхность массопередачи F^M .

Выражения для интенсивностей источников вещества и теплоты от элементарных процессов в зоне потока сведены в табл. 2.1.

Для процесса, связанного с изменением агрегатного состояния или фазового перехода, в предположении термодинамического равно-

веса для данного процесса скорость изменения количества (массы) i -го компонента можно выразить следующим уравнением:

$$G_i^A = -\tilde{v} \cdot \tilde{x}_i^{(*)}, \quad (2.12)$$

где \tilde{v} – расход (скорость) потока в зоне, контактирующей с рассматриваемой; $\tilde{x}_i^{(*)}$ – термодинамически равновесное содержание i -го компонента в зоне потока, контактирующей с рассматриваемой.

Таблица 2.1

Интенсивности источников элементарных процессов в потоках

Элементарный процесс	Тип источника	Интенсивность источника в зоне	
		Общая	Локальная
Химическая реакция в объеме V^R	Вещество	$G_i^R = V^R \cdot g_i^R$	$g_i^R = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} \cdot r_j$
	Теплота	$\Delta Q^R = V^R \cdot \Delta q^R$	$\Delta q^R = \sum_{j=1}^m \alpha_{pj} (-\Delta H_{pj}^R) r_j$
Массопередача через поверхность площадью F^M	Вещество	$G_i^M = F^M \cdot g_i^M$	$g_i^M = \sum_{j=1}^n K_{ij}^M (x_j^{(*)} - x_j)$
	Теплота	$\Delta Q^M = F^M \cdot \Delta q^M$	$\Delta q^M \cong \sum_{i=1}^n (-\Delta H_i^M) g_i^M$
Изменение агрегатного состояния при фазовом равновесии	Вещество	$G_i^A = -\tilde{v} \cdot \tilde{x}_i^{(*)}$	$\tilde{x}_i^{(*)}$
	Теплота	$\Delta Q^A = -\tilde{v} \cdot \Delta \tilde{H}^A$	$\Delta \tilde{H}^A \cong \sum_{i=1}^n (-\Delta H_i^A) \tilde{x}_i^{(*)}$
Теплопередача через поверхность площадью F^T	Теплота	$\Delta Q^T = F^T \cdot \Delta q^T$	$\Delta q^T = K^T (\tilde{T} - T)$
Теплоизлучение с поверхности площадью F^H	Теплота	$\Delta Q^H = F^H \cdot \Delta q^H$	$\Delta q^H = K^H (\tilde{T}^4 - T^4)$
Сумма всех процессов	Вещество	$G_i^\Sigma = G_i^R + G_i^M + G_i^A$	
	Теплота	$\Delta Q^\Sigma = \Delta Q^R + \Delta Q^M + \Delta Q^A + \Delta Q^T + \Delta Q^H$	

Интенсивность источника теплоты для процесса изменения агрегатного состояния или фазового перехода дается следующим выражением:

$$\Delta Q^A = -\tilde{v} \cdot \Delta \tilde{H}^A, \quad (2.13)$$

где $\Delta \tilde{H}^A$ – тепловой эффект фазовых переходов в единице объема (массы) потока, который вычисляется по уравнению

$$\Delta\tilde{H}^A \cong \sum_{i=1}^n (-\Delta H_i^A) \tilde{x}_i^{(*)}, \quad (2.14)$$

где ΔH_i^A – тепловой эффект изменения агрегатного состояния или фазового перехода в расчете на единицу массы (химического количества) i -го компонента.

Процесс теплопередачи в различных типах теплообменных аппаратов осуществляется через поверхность. Скорость изменения теплоты в зоне потока, контактирующей с поверхностью теплообмена площадью F^T , дается следующим выражением:

$$\Delta Q^T = F^T \cdot \Delta q^T, \quad (2.15)$$

где Δq^T – локальная интенсивность теплопередачи, т. е. скорость изменения теплоты, приходящаяся на единицу площади поверхности теплообмена. Локальная интенсивность теплопередачи прямо пропорциональна разности температур контактирующих зон:

$$\Delta q^T = K^T (\tilde{T} - T), \quad (2.16)$$

где K^T – коэффициент теплопередачи; \tilde{T} – температура в зоне потока, контактирующей с рассматриваемой; T – температура в рассматриваемой зоне потока.

Интенсивность источника теплоты за счет излучения теплоты с поверхности $F^И$ задается выражением

$$\Delta Q^И = F^И \cdot \Delta q^И, \quad (2.17)$$

где $\Delta q^И$ – локальная интенсивность источника (стока) теплоты за счет теплоизлучения. Поскольку плотность энергии, излучаемой телом, пропорциональна 4-й степени температуры (закон Стефана – Больцмана), то локальная интенсивность теплоизлучения с единицы поверхности дается следующим выражением:

$$\Delta q^И = K^И (\tilde{T}^4 - T^4), \quad (2.18)$$

где $K^И$ – коэффициент теплоизлучения.

2.2.2. Модель идеального смешения

Объекты, описываемые моделью идеального смешения, относятся к *объектам с сосредоточенными параметрами*. Для них характерно, что все переменные и параметры процесса одинаковы во всем объеме зоны идеального смешения (рис. 2.2).

2.2.2.1. Динамическая модель. Система балансовых уравнений для динамической модели объекта с сосредоточенными параметрами будет включать три типа уравнений балансов.

1. Уравнения покомпонентных балансов (n уравнений обозначаются $\bar{I}_{(n)}$):

$$\frac{d(V^R x_i)}{dt} = v^{(0)} x_i^{(0)} - v x_i + G_i^\Sigma, \quad (i=1, \dots, n), \quad (2.19)$$

где V^R – объем зоны потока; $v^{(0)}$, v – расход потока на входе и на выходе рассматриваемой зоны потока, соответственно; $x_i^{(0)}$, x_i – содержание i -го компонента на входе и выходе рассматриваемой зоны потока, соответственно. Содержание компонента на выходе равно содержанию компонента во всем объеме зоны потока.

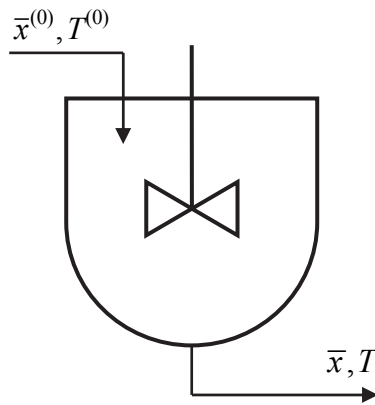


Рис. 2.2. Объект с сосредоточенными параметрами

2. Уравнение общего баланса массы ($\sum_{i=1}^n x_i = 1$):

$$\frac{dV^R}{dt} = v^{(0)} - v + \sum_{i=1}^n G_i^\Sigma. \quad (2.20)$$

3. Уравнение теплового баланса:

$$\frac{d(V^R C_p T)}{dt} = v^{(0)} C_p^{(0)} T^{(0)} - v C_p T + \Delta Q^\Sigma, \quad (2.21)$$

где $C_p^{(0)}$, C_p – теплоемкости потока на входе и на выходе рассматриваемой зоны потока, соответственно.

Система ($n + 2$) обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ) (2.19)–(2.21) используется для математического описания

нестационарных режимов процессов с сосредоточенными параметрами. В систему уравнений дополнительно должны быть включены выражения для определения интенсивностей источников всех компонентов G_i^Σ ($i = 1, \dots, n$) и теплоты ΔQ^Σ (табл. 2.1).

Результатом решения системы уравнений (2.19)–(2.21) должны стать функции, отражающие зависимость от времени концентрации компонентов x_i реакционного объема V^R и температуры потока T :

$$x_i^* = x_i^*(t) \quad (i = 1, \dots, n), \quad V^{R*} = V^{R*}(t), \quad T^* = T^*(t). \quad (2.22)$$

2.2.2.2. Статическая модель. Статическая модель означает, что процесс протекает в стационарном режиме, т. е. переменные процесса не зависят от времени. Система уравнений для статической модели будет аналогична системе уравнений для динамической модели за исключением того, что производные по времени будут равны нулю. Статическая модель объекта с сосредоточенными параметрами описывается системой конечных уравнений (СКУ): либо линейных (СЛАУ), либо нелинейных (СНУ).

1. Уравнения покомпонентных балансов:

$$v^{(0)}x_i^{(0)} - vx_i + G_i^\Sigma = 0. \quad (2.23)$$

2. Уравнение общего баланса массы ($\sum_{i=1}^n x_i = 1$):

$$v^{(0)} - v + \sum_{i=1}^n G_i^\Sigma = 0. \quad (2.24)$$

3. Уравнение теплового баланса:

$$v^{(0)}C_p^{(0)}T^{(0)} - vC_pT + \Delta Q^\Sigma = 0. \quad (2.25)$$

Система $(n + 2)$ конечных уравнений (СКУ) (2.23)–(2.25) используется для описания стационарных режимов процессов с сосредоточенными параметрами. В эту систему уравнений должны быть включены выражения для определения интенсивностей источников всех компонентов G_i^Σ ($i = 1, \dots, n$) и теплоты ΔQ^Σ (табл. 2.1).

Результатом решения конечной системы уравнений должны стать расчетные значения концентраций, расхода реакционного потока и температуры:

$$\bar{x}^*, \quad V^{R*}, \quad T^*. \quad (2.26)$$

2.2.3. Модель идеального вытеснения

Объекты, описываемые такими моделями, относятся к объектам с распределенными параметрами. Для них характерно, что все переменные и параметры процесса изменяются вдоль пространственной координаты зоны идеального вытеснения. Схематическое изображение объекта с распределенными параметрами приведено на рис. 2.3. Такой поток представляется совокупностью бесконечного числа зон, описываемых гидродинамическими моделями идеального перемешивания.

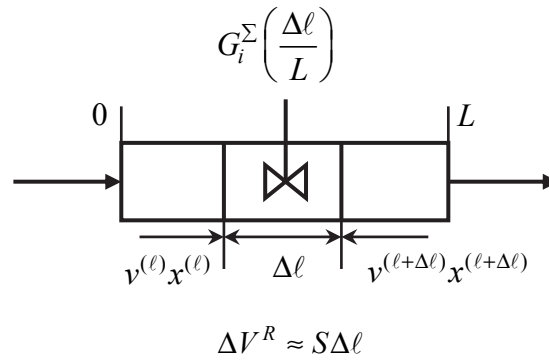


Рис. 2.3. Схематическое изображение движения потока, представляемого гидродинамической моделью идеального вытеснения (бесконечным числом ячеек идеального перемешивания)

2.2.3.1. Динамическая модель. Приведем вывод уравнения покомпонентного баланса для динамической модели объекта с распределенными параметрами.

Уравнения покомпонентных балансов для произвольной зоны идеального смешения длиной $\Delta\ell$ и объемом ΔV^R в данном случае можно представить так:

$$\frac{d(\Delta V^R x_i)}{dt} = -\left(v^{(\ell+\Delta\ell)} x_i^{(\ell+\Delta\ell)} - v^{(\ell)} x_i^{(\ell)}\right) + G_i^\Sigma \frac{\Delta\ell}{L}. \quad (2.27)$$

Если разделить данное уравнение на $\Delta\ell$, получим

$$\frac{d(\Delta V^R x_i)}{\Delta\ell dt} = -\frac{\left(v^{(\ell+\Delta\ell)} x_i^{(\ell+\Delta\ell)} - v^{(\ell)} x_i^{(\ell)}\right)}{\Delta\ell} + \frac{G_i^\Sigma}{L}. \quad (2.28)$$

Если $\Delta\ell \rightarrow 0$, то получим дифференциальное уравнение в частных производных для покомпонентных балансов. Также примем во внимание, что отношение объема зоны потока к длине остается вели-

чиной постоянной по длине зоны и равной площади поперечного сечения зоны потока (S):

$$\frac{\Delta V^R}{\Delta \ell} = \frac{V^R}{L} = S. \quad (2.29)$$

Система балансовых уравнений для динамической модели объекта с распределенными параметрами будет включать три типа уравнений балансов.

1. Уравнения покомпонентных балансов:

$$\frac{\partial(V^R x_i)}{L \partial t} = -\frac{\partial(v x_i)}{\partial \ell} + \frac{G_i^\Sigma}{L}, \quad (i=1, \dots, n). \quad (2.30)$$

2. Уравнение общего баланса массы ($\sum_{i=1}^n x_i = 1$):

$$\frac{1}{L} \frac{\partial V^R}{\partial t} = -\frac{\partial v}{\partial \ell} + \sum_{i=1}^n \frac{G_i^\Sigma}{L}. \quad (2.31)$$

3. Уравнение теплового баланса записывается подобно уравнениям покомпонентных балансов с учетом замены x_i на $C_p T$:

$$\frac{\partial(V^R C_p T)}{L \partial t} = -\frac{\partial(v C_p T)}{\partial \ell} + \frac{\Delta Q^\Sigma}{L}. \quad (2.32)$$

В результате получена система $(n + 2)$ дифференциальных уравнений в частных производных (2.30)–(2.32). В эту систему должны быть включены выражения для определения интенсивностей источников всех компонентов G_i^Σ ($i = 1, \dots, n$) и теплоты ΔQ^Σ (табл. 2.1).

Таким образом, для описания нестационарных режимов процессов с распределенными параметрами, движение потока фаз в которых представляется гидродинамической моделью идеального вытеснения (трубчатый аппарат), используется *система дифференциальных уравнений в частных производных* (СДУЧП) (2.30)–(2.32).

Результатом решения системы уравнений должны стать расчетные значения концентраций \bar{x}^* , расхода реакционного потока V^{R*} и температуры T^* в зависимости от двух независимых координат – времени t и длины реактора ℓ :

$$x_i^* = x_i^*(t, \ell) \quad (i=1, \dots, n), \quad V^{R*} = V^{R*}(t, \ell), \quad T^* = T^*(t, \ell). \quad (2.33)$$

2.2.3.2. Статическая модель. Уравнения покомпонентных балансов в данном случае будут иметь такой же вид, как для динамической модели, только производные по времени для стационарных режимов процессов в системе будут равны нулю.

1. Уравнения покомпонентных балансов:

$$\frac{d(vx_i)}{d\ell} = \frac{G_i^\Sigma}{L}. \quad (2.34)$$

2. Уравнение общего материального баланса ($\sum_{i=1}^n x_i = 1$):

$$\frac{dv}{d\ell} = \sum_{i=1}^n \frac{G_i^\Sigma}{L}. \quad (2.35)$$

3. Уравнение теплового баланса:

$$\frac{d(vC_p T)}{d\ell} = \frac{\Delta Q^\Sigma}{L}. \quad (2.36)$$

Для описания стационарных режимов процессов с распределенными параметрами, движение потока в которых представляется гидродинамической моделью идеального вытеснения, когда изменение переменных происходит вдоль одной пространственной координаты ℓ , используется система обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ) (2.34)–(2.36). В эту систему уравнений должны быть включены выражения для определения интенсивностей источников всех компонентов G_i^Σ ($i = 1, \dots, n$) и теплоты ΔQ^Σ (см. табл. 2.1).

Решением данной системы уравнений математического описания должны стать зависимости концентрации \bar{x}^* , расхода реакционной смеси v^* и температуры T^* от пространственной координаты ℓ :

$$x_i^* = x_i^*(\ell) \quad (i = 1, \dots, n), \quad v^* = v^*(\ell), \quad T^* = T^*(\ell). \quad (2.37)$$

Другими словами, решением системы (2.34)–(2.36) являются изменения температуры, концентраций, расходов вдоль длины реактора.

2.2.4. Однопараметрическая диффузионная модель

Объекты, описываемые этими моделями, как и моделями идеального вытеснения, относятся к объектам с распределенными параметрами. Схематическое изображение потока, в котором движение фазы представляется однопараметрической диффузионной гидродинамической моделью, приведено на рис. 2.4.

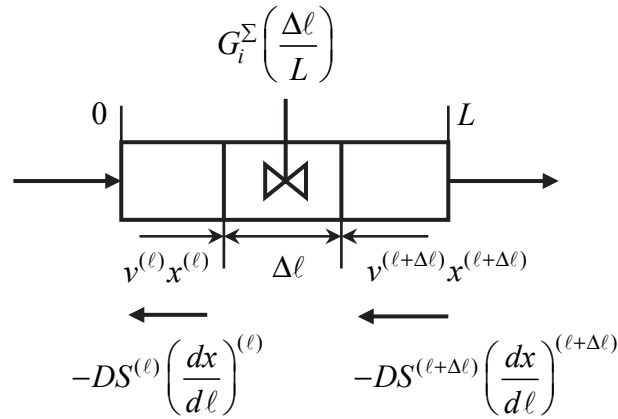


Рис. 2.4. Схематическое представление однопараметрической диффузионной гидродинамической модели движения потока

В этом случае наряду с *конвективными потоками* компонентов ($i = 1, \dots, n$) на входе ($v^{(\ell)} x_i^{(\ell)}$) в бесконечно малую ячейку с координатами $[\ell, \ell + \Delta\ell]$ и потоками компонентов на выходе ($v^{(\ell+\Delta\ell)} x_i^{(\ell+\Delta\ell)}$) из нее, как это было показано для гидродинамической модели идеального вытеснения, существуют и обратные диффузионные потоки $[vx]^{диф}$ (со знаком «минус» на рис. 2.4), как на входе в бесконечно малую ячейку $\left(-DS^{(\ell)} \frac{dx^{(\ell)}}{d\ell}\right)$, так и на выходе из нее $\left(-DS^{(\ell+\Delta\ell)} \frac{dx^{(\ell+\Delta\ell)}}{d\ell}\right)$.

Частичное перемещение фазы навстречу конвективному потоку (так называемое «обратное перемешивание») описывается уравнением, аналогичным уравнению молекулярной диффузии (закон Фика):

$$[vx]^{диф} = -DS \frac{dx}{d\ell}. \quad (2.38)$$

Коэффициент D называется коэффициентом продольного перемешивания и является эмпирическим параметром, который определяется из экспериментальных данных. Он в совокупности учитывает и молекулярную диффузию, и турбулентность, и неравномерность поля скоростей в потоке; принимается постоянным для всей зоны потока, описываемой однопараметрической диффузионной гидродинамической моделью.

В то же время площадь поперечного сечения потока S может изменяться в различных сечениях. Поэтому на входе в элементарную ячейку S определяется так:

$$S^{(\ell)} = \frac{V^{R(\ell)}}{L}, \quad (2.39)$$

а на выходе из нее:

$$S^{(\ell+\Delta\ell)} = \frac{V^{R(\ell+\Delta\ell)}}{L}. \quad (2.40)$$

В результате для многокомпонентной системы вместо обыкновенных производных следует использовать частные производные, и с учетом равенств (2.39) и (2.40) величина диффузионного потока на входе в элементарную ячейку с координатами $[\ell, \ell + \Delta\ell]$ будет равна

$$-\frac{D}{L} \frac{\partial (V^{R(\ell)} x_i^{(\ell)})}{\partial \ell}, \quad (2.41)$$

а на выходе из нее

$$-\frac{D}{L} \frac{\partial (V^{R(\ell+\Delta\ell)} x_i^{(\ell+\Delta\ell)})}{\partial \ell}. \quad (2.42)$$

2.2.4.1. Динамическая модель. Уравнение покомпонентного баланса для элементарной ячейки (рис. 2.4) с координатами $[\ell, \ell + \Delta\ell]$ в соответствии с (2.41) и (2.42) может быть записано:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\Delta V^R x_i)}{\partial t} = & - \left[-\frac{D}{L} \frac{\partial (V^{R(\ell+\Delta\ell)} x_i^{(\ell+\Delta\ell)})}{\partial \ell} - \left(-\frac{D}{L} \frac{\partial (V^{R(\ell)} x_i^{(\ell)})}{\partial \ell} \right) \right] - \\ & - \left(v^{(\ell+\Delta\ell)} x_i^{(\ell+\Delta\ell)} - v^{(\ell)} x_i^{(\ell)} \right) + G_i^\Sigma \frac{\Delta\ell}{L}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

После чего будет справедливо:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (V^R x_i)}{L \partial t} = & \frac{\frac{D}{L} \frac{\partial (V^{R(\ell+\Delta\ell)} x_i^{(\ell+\Delta\ell)})}{\partial \ell} - \frac{D}{L} \frac{\partial (V^{R(\ell)} x_i^{(\ell)})}{\partial \ell}}{\Delta\ell} - \\ & - \frac{\left(v^{(\ell+\Delta\ell)} x_i^{(\ell+\Delta\ell)} - v^{(\ell)} x_i^{(\ell)} \right)}{\Delta\ell} + \frac{G_i^\Sigma}{L}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

В результате после перехода к частным производным с учетом $\Delta\ell \rightarrow 0$ для описания динамического режима рассматриваемого объекта с помощью покомпонентного баланса получим уравнение (2.45).

Математическое описание динамической модели объекта, описываемого однопараметрической диффузионной моделью, будет включать три вида балансовых уравнений, как и в предыдущих случаях.

1. Уравнения покомпонентных балансов:

$$\frac{\partial(V^R x_i)}{L \partial t} = \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R x_i)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial(v x_i)}{\partial \ell} + \frac{G_i^\Sigma}{L}. \quad (2.45)$$

2. Уравнение общего материального баланса ($\sum_{i=1}^n x_i = 1$):

$$\frac{\partial(V^R)}{L \partial t} = \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial(v)}{\partial \ell} + \sum_{i=1}^n \frac{G_i^\Sigma}{L}. \quad (2.46)$$

3. Уравнение теплового баланса записывается подобно уравнениям покомпонентных балансов с учетом замены x_i на $C_p T$:

$$\frac{\partial(V^R C_p T)}{L \partial t} = \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R C_p T)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial(v C_p T)}{\partial \ell} + \frac{\Delta Q^\Sigma}{L}. \quad (2.47)$$

В результате для математического описания зоны потока, которая может быть представлена однопараметрической диффузионной гидродинамической моделью, может использоваться система $(n + 2)$ дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка (СДУЧП2) (2.45)–(2.47). Полученная система должна быть дополнена уравнениями для интенсивностей различных элементарных физико-химических процессов для всех компонентов G_i^Σ и теплоты ΔQ^Σ (см. табл. 2.1) в рассматриваемой зоне, а также зависимостями для физико-химических коэффициентов элементарных процессов.

После этого СДУЧП2 (2.45)–(2.47) может быть решена одним из известных методов, и полученные решения, как и для процессов, движение потоков фаз которых описывается гидродинамической моделью идеального вытеснения, являются функцией двух независимых переменных – времени t и пространственной координаты ℓ (2.33).

Однако, в отличие от модели идеального вытеснения, процедура решения системы уравнения для однопараметрической диффузионной модели оказывается более сложной по двум причинам:

1) в данном случае приходится решать СДУЧП второго порядка, тогда как в случае модели идеального вытеснения решается СДУЧП первого порядка;

2) для решения требуется определить коэффициент продольного перемешивания D , что связано с проведением специальных экспериментальных исследований.

2.2.4.2. Статическая модель. При описании стационарных режимов объектов, движение потока фазы которых представляется однопараметрической диффузионной гидродинамической моделью, производные по времени в системе уравнений, описывающей динамические режимы (2.45)–(2.47), равны нулю. Поэтому для случая однопараметрической диффузионной модели для описания стационарных режимов СДУЧП2 преобразуется в систему обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка (СОДУ2) с одной независимой переменной – пространственной координатой ℓ . Данная система будет опять состоять из трех типов уравнений.

1. Уравнения покомпонентных балансов:

$$\frac{D}{L} \frac{\partial^2 (V^R x_i)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial (v x_i)}{\partial \ell} + \frac{G_i^\Sigma}{L} = 0. \quad (2.48)$$

2. Уравнение общего материального баланса ($\sum_{i=1}^n x_i = 1$):

$$\frac{D}{L} \frac{\partial^2 (V^R)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial (v)}{\partial \ell} + \sum_{i=1}^n \frac{G_i^\Sigma}{L} = 0. \quad (2.49)$$

3. Уравнение теплового баланса:

$$\frac{D}{L} \frac{\partial^2 (V^R C_p T)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial (v C_p T)}{\partial \ell} + \frac{\Delta Q^\Sigma}{L} = 0. \quad (2.50)$$

Так как объекты, движение фаз которых описывается однопараметрическими диффузионными моделями, также относятся к объектам с распределенными параметрами, общий вид решений *системы обыкновенных дифференциальных уравнений* (СОДУ) (2.48)–(2.50) не будет отличаться от решений, получаемых при описании гидродинамики процесса моделью идеального вытеснения (2.34)–(2.36).

Однако, поскольку в этом случае решается СОДУ второго порядка, алгоритм решения оказывается более сложным, и, как упоминалось выше, возникает задача определения коэффициента продольного перемешивания D путем проведения специальных экспериментальных исследований.

В табл. 2.2 сведены все уравнения, используемые для динамических и статических моделей зон потока, движение которых описывается гидродинамическими моделями идеального смешения, идеального вытеснения и однопараметрической диффузионной моделью.

Таблица 2.2

Уравнения балансов гидродинамических моделей

Модель	Динамическая	Статическая
МИС	$\frac{d(V^R x_i)}{dt} = v^{(0)} x_i^{(0)} - vx_i + G_i^\Sigma$	$vx_i - v^{(0)} x_i^{(0)} = G_i^\Sigma$
	$\frac{dV^R}{dt} = v^{(0)} - v + \sum_{i=1}^n G_i^\Sigma$	$v - v^{(0)} = \sum_{i=1}^n G_i^\Sigma$
	$\frac{d(V^R C_p T)}{dt} = v^{(0)} C_p^{(0)} T^{(0)} - v C_p T + \Delta Q^\Sigma$	$v C_p T - v^{(0)} C_p^{(0)} T^{(0)} = \Delta Q^\Sigma$
МИВ	$\frac{\partial(V^R x_i)}{L \partial t} = - \frac{\partial(vx_i)}{\partial \ell} + \frac{G_i^\Sigma}{L}$	$\frac{d(vx_i)}{d\ell} = \frac{G_i^\Sigma}{L}$
	$\frac{1}{L} \frac{\partial V^R}{\partial t} = - \frac{\partial v}{\partial \ell} + \sum_{i=1}^n \frac{G_i^\Sigma}{L}$	$\frac{dv}{d\ell} = \sum_{i=1}^n \frac{G_i^\Sigma}{L}$
	$\frac{\partial(V^R C_p T)}{L \partial t} = - \frac{\partial(v C_p T)}{\partial \ell} + \frac{\Delta Q^\Sigma}{L}$	$\frac{d(v C_p T)}{d\ell} = \frac{\Delta Q^\Sigma}{L}$
ОДМ	$\frac{\partial(V^R x_i)}{L \partial t} = \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R x_i)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial(vx_i)}{\partial \ell} + \frac{G_i^\Sigma}{L}$	$\frac{\partial(vx_i)}{\partial \ell} - \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R x_i)}{\partial \ell^2} = \frac{G_i^\Sigma}{L}$
	$\frac{\partial(V^R)}{L \partial t} = \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial(v)}{\partial \ell} + \sum_{i=1}^n \frac{G_i^\Sigma}{L}$	$\frac{\partial(v)}{\partial \ell} - \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R)}{\partial \ell^2} = \sum_{i=1}^n \frac{G_i^\Sigma}{L}$
	$\frac{\partial(V^R C_p T)}{L \partial t} = \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R C_p T)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial(v C_p T)}{\partial \ell} + \frac{\Delta Q^\Sigma}{L}$	$\frac{\partial(v C_p T)}{\partial \ell} - \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R C_p T)}{\partial \ell^2} = \frac{\Delta Q^\Sigma}{L}$

2.2.5. Принципы составления и решения систем уравнений математического описания на основе уравнений балансов

Коэффициенты в уравнениях для локальных интенсивностей источников вещества и теплоты зависят от различных переменных процесса (температуры, концентрации и др.). Например, для химической реакции нужно включить в систему уравнений математического описания выражение для k_j – константы скорости на j -й стадии химической реакции (2.8) в соответствии с законом Аррениуса, а для процесса массопередачи – выражение для K^T – коэффициента массопередачи (2.16).

В результате получается *система уравнений математического описания* процесса (МО). Проводится анализ полученной системы уравнений МО процесса, который состоит в следующем:

- исключаются зависимые уравнения, которые можно получить комбинацией других уравнений системы;
- проверяется совпадение размерностей физических величин левых и правых частей уравнений МО;
- по возможности, уравнения системы заменяются более простыми, например, уравнения покомпонентных балансов для потоков веществ в химических реакторах выражаются через потоки других веществ (их составы) с использованием стехиометрических соотношений, вытекающих из кинетической схемы конкретной реакции.

После составления МО процесса выбираются определяемые переменные процесса, относительно которых решается система уравнений. Число определяемых переменных должно равняться числу уравнений МО. Если в число определяемых переменных включаются переменные размеров аппаратов и их конструкционные параметры, реализуемое решение рассматривается как *проектный расчет*. При отсутствии указанных параметров среди определяемых при решении систем уравнений МО, т. е. когда они заданы, процесс решения считается *поверочно-оценочным* расчетом.

В зависимости от того, к какому математическому типу уравнений относится математическое описание (МО) процесса, выбирается *моделирующий алгоритм* для решения системы уравнений МО. *Моделирующий алгоритм* (МА) представляет собой либо известный численный алгоритм решения системы уравнений МО, либо комбинацию численных алгоритмов. При разработке МА пользуются специальными приемами для сокращения размерности решаемой задачи и уменьшения числа итерационных процедур решения. Для этой цели используется метод *декомпозиции* решаемой задачи, который реализуется с использованием *информационной матрицы системы уравнений МО*. Для обеспечения сходимости расчетов важно правильно выбирать ограниченный набор итерируемых переменных, начальные приближения для них и условия сходимости с предварительно задаваемой точностью, связанной с завершением вычислений. Разработанный МА реализуется на компьютере в виде *расчетного модуля* ХТП.

Анализ параметрической чувствительности разработанной математической модели проводится для выявления тех ее параметров (переменные и коэффициенты), которые наиболее сильно влияют на свойства и поведение технологического процесса.

Разработанная модель должна соответствовать объекту. Такая модель будет называться адекватной. Для определения адекватности модели нужно иметь набор экспериментальных данных. После оценки адекватности математической модели в случае отрицательного результата решается *задача идентификации математического описания ХТП* с целью обеспечения адекватности модели.

Если модель адекватна, то можно решать основную, наиболее важную задачу – *задачу оптимизации ХТП*, и определения оптимальных режимных и/или конструкционных параметров, обеспечивающих оптимальность процесса по выбранному *критерию оптимальности*.

Следует отметить, что отдельные из перечисленных этапов компьютерного моделирования ХТП с использованием физико-химических моделей могут быть пропущены в силу различных причин. Например, если известна приоритетность и степень влияния различных переменных на поведение процесса, *анализ параметрической чувствительности* модели не проводится, или если нет необходимости в решении *задачи оптимизации*, то определение оптимальных параметров процесса не проводится. Однако, для комплексного решения задач компьютерного моделирования ХТП желательно выполнение всех перечисленных выше этапов.

Системы уравнений МО химико-технологических процессов представляют собой, в основном, *системы конечных (обычно нелинейных) уравнений (СКУ)* и *системы дифференциальных, чаще всего, обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ)*.

Системы конечных (обычно нелинейных) уравнений описывают процессы с *сосредоточенными параметрами*, в которых переменные и параметры процессов *не изменяются* ни по пространственной координате (процессы с идеальным перемешиванием среды), ни во временной координате (*стационарные процессы*).

Системы дифференциальных уравнений описывают процессы:

– с изменяющимися во времени параметрами – так называемые *распределенные во времени процессы (динамические процессы)*;

– с изменяющимися по одной или нескольким пространственным координатам параметрами – так называемые *процессы с распределенными параметрами*.

Следует отметить, что разделение объектов на объекты с *сосредоточенными и распределенными параметрами* в известной степени является условным, и четкое разграничение этих процессов невозможно. Тем не менее, с методической точки зрения при разработке физико-химических математических моделей ХТП такое разделение является весьма полезным.

Таким образом, для решения *прямых задач математического моделирования* ХТП необходимо располагать тремя основными алгоритмами решения систем уравнений:

- алгоритмом решения СКУ: СЛАУ или СНУ;
- алгоритмом решения СОДУ;
- алгоритмом решения СДУЧП.

2.3. Декомпозиционный метод решения систем конечных и дифференциальных уравнений

Системы уравнений математического описания ХТП обычно включают в себя большое число уравнений и определяемых переменных. Особенностью этих систем является то, что уравнения не содержат все определяемые переменные, а только их часть. В этом случае для решения системы уравнений часто удается снизить размерность решаемой задачи, т. е. свести большую систему уравнений к системам уравнений с небольшим числом определяемых переменных (часто с одной или двумя переменными). Алгоритмы численного решения одного уравнения или систем уравнений с небольшим числом переменных значительно проще и эффективнее, чем решение больших систем уравнений. Метод решения систем уравнений большой размерности путем разложения ее на системы уравнений меньшей размерности называется *декомпозиционным*.

Для реализации алгоритма декомпозиционного метода решения системы уравнений большой размерности удобно использовать так называемые информационные матрицы систем уравнений.

2.3.1. Информационные матрицы систем уравнений математического описания и блок-схемы алгоритмов их решений

Информационная матрица системы уравнений МО представляет собой квадратную матрицу, строки которой соответствуют номерам уравнений, а столбцы – обозначению определяемых переменных. Информационная матрица формируется следующим образом: на пересечении i -й строки, соответствующей i -му уравнению, с j -м столбцом ставится знак плюс, если i -е уравнение включает j -ю определяемую переменную. Эта процедура повторяется для всех независимых уравнений и определяемых переменных системы.

Заголовки строк информационной матрицы обозначают номера уравнений и имеют следующие условные обозначения:

1 – конечное уравнение номер 1;

$1_{\text{диф.ур}}^*$ – обыкновенное дифференциальное уравнение номер 1, представленное в конечно-разностном виде;

$\overline{10}$ – система конечных уравнений под номером 10;

$\overline{11}^*$ – система обыкновенных дифференциальных уравнений, представленных в конечно-разностном виде под номером 11;

$5_{\text{кор.ур}}$ – корректирующее уравнение 5 в системе для нахождения определяемой переменной;

$\overline{12}_{\text{кор.ур}}$ – система конечных корректирующих уравнений под номером 12 для нахождения определяемых переменных.

В поле информационных матриц применяются условные обозначения, представленные на рис. 2.5.

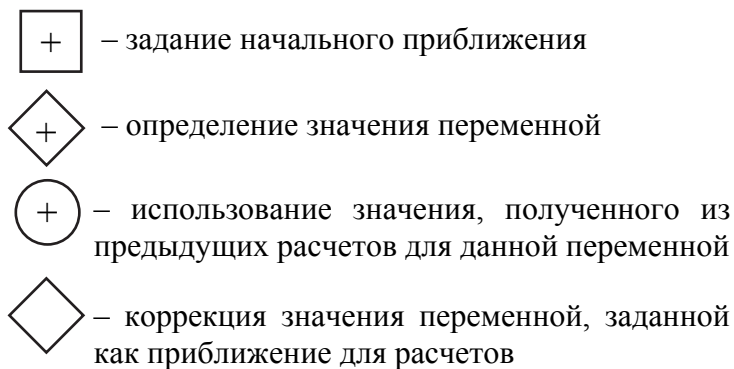


Рис. 2.5. Условные обозначения, применяемые для построения информационных матриц уравнений математического описания

В правом столбце информационных матриц приводятся номера операций последовательного исключения неизвестных в системе, что приводит к получению системы уравнений меньшей размерности. Согласно правому столбцу информационной матрицы составляется алгоритм декомпозиционного метода решения системы уравнений.

Алгоритм декомпозиционного метода решения системы – *моделирующий алгоритм (МА)* – представляют в виде блок-схемы. При этом предлагается пользоваться условными обозначениями графических блоков, изображенными на рис. 2.6.

Далее представлены примеры составления информационных матриц и блок-схем алгоритмов решения произвольных систем уравнений, записанных в самом общем виде.

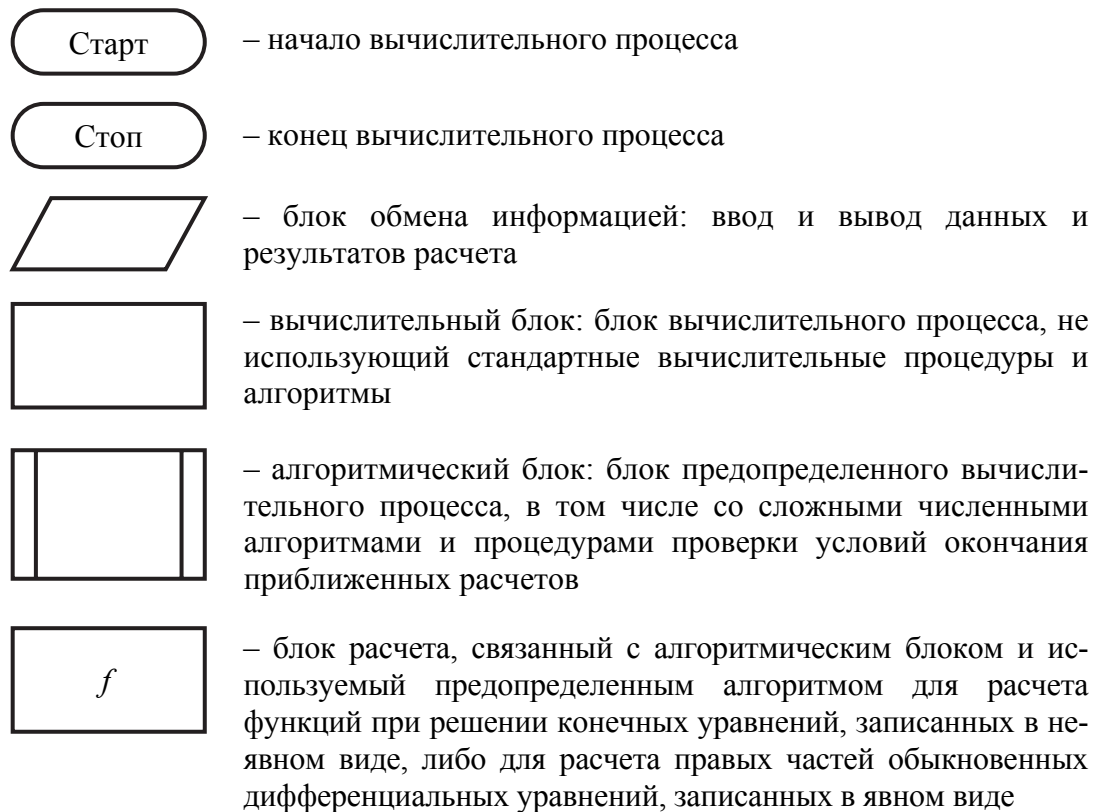


Рис. 2.6. Изображение основных блоков в блок-схемах алгоритмов расчета

2.3.2. Система конечных нелинейных уравнений

В общем случае система конечных (обычно нелинейных) уравнений (можно предположить, что она описывает стационарный режим некоторого процесса) с пятью определяемыми переменными $\bar{x} = [x_1, x_2, x_3, x_4, x_5]$ в неявном виде может быть записана следующим образом:

$$\begin{aligned}
 1 \quad & f_1(x_1, x_2, x_5) = 0; \\
 2 \quad & f_2(x_1, x_3, x_5) = 0; \\
 3 \quad & f_3(x_1, x_2, x_4) = 0; \\
 4 \quad & f_4(x_1, x_5) = 0; \\
 5 \quad & f_5(x_3, x_4) = 0.
 \end{aligned}
 \tag{2.51}$$

2.3.2.1. Информационная матрица системы конечных нелинейных уравнений. Информационная матрица для системы уравнений (2.51) представлена в табл. 2.3.

Анализ информационной матрицы проводится следующим образом. Каждое из пяти уравнений содержит по 2 и 3 определяемые пе-

ременные, поэтому ни одно из уравнений не может быть решено самостоятельно.

Таблица 2.3

Информационная матрица системы конечных нелинейных уравнений (2.51)

Номер уравнения	Переменные					Номер шага
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	
1	⊕	⊠			⊕	2
2	⊕		⊠		⊕	3
3	⊕	⊕		⊠		4
4	⊠				⊠	1
$5_{\text{кор.ур}}$	⊠		⊕	⊕		5

Для получения решения этой системы уравнений необходимо задать начальное приближение по одной переменной (в табл. 2.3 – по переменной x_1). Начальное приближение для переменной обозначается с верхним значком «тильда»: \tilde{x}_1 . Начальное приближение в информационной матрице обозначается «квадратиком».

В крайнем правом столбце матрицы указаны номера шагов последовательности вычислений переменных. В соответствии с табл. 2.3, после того как задано приближение \tilde{x}_1 , по уравнению 4 определяется значение переменной x_5 . Это будет *1-й шаг* последовательности вычислений. Операция вычисления переменной x_5 из 4-го уравнения обозначена в информационной матрице «ромбиком» (табл. 2.3). После 1-го шага значение переменной x_5 становится известным для всех уравнений системы (2.51), поэтому в информационной матрице для переменной x_5 в остальных уравнениях системы, содержащих эту переменную (уравнения 1 и 2), «плюсики» обводятся в «кружочки» (табл. 2.3). После этого вычисляется x_2 из уравнения 1 (*шаг 2*): в информационной матрице для переменной x_2 в уравнении 1 «плюсик» обводится в «ромбик», а для уравнения 3 – в «кружочек». Далее вычисляется значение переменной x_3 из уравнения 2 (*шаг 3*): для переменной x_3 в уравнении 2 «плюсик» обводится в «ромбик», а для уравнения 5 – в «кружочек». На 4-м шаге вычисляется значение переменной x_4 из уравнения 3: в информационной матрице для переменной x_4

в уравнении 3 «плюсик» обводится в «ромбик», а для уравнения 5 – в «кружочек».

В результате в уравнении 5 обе переменные (x_3 и x_4) известны из предыдущих расчетов. Они зависят от начального приближения \tilde{x}_1 , заданного на шаге 1, т. е. значения этих переменных являются некоторой функцией от x_1 : $x_3 = x_3(x_1)$ и $x_4 = x_4(x_1)$.

Критерием получения решения x_1^* является превращение уравнения 5, включающего $x_3(x_1)$ и $x_4(x_1)$, в тождество.

Поэтому уравнение 5 является корректирующим уравнением для x_1 , т. е. для него будет справедливо

$$f_5(x_3(x_1), x_4(x_1)) = 0. \quad (2.52)$$

Это означает, что каждое новое приближение по x_1 должно получаться путем реализации итерационного алгоритма решения уравнения с одной неизвестной (2.52). Когда результат решения уравнения (2.52) x_1^* будет получен, одновременно рассчитаются и оставшиеся четыре переменные – x_2^*, x_3^*, x_4^* и x_5^* . Они получаются на последней итерации решения уравнения (2.52).

Таким образом, систему из пяти конечных нелинейных уравнений удалось решить путем реализации алгоритма решения одного уравнения (2.52) с одной итерлируемой переменной x_1 . В результате удалось снизить размерность решаемой задачи с 5 до 1 и вместо решения системы 5 уравнений с пятью неизвестными (2.51) необходимо решить одно уравнение с одной неизвестной (2.52).

2.3.2.2. Блок-схема алгоритма решения системы конечных нелинейных уравнений. Блок-схема алгоритма расчета (рис. 2.7) строится в соответствии с крайним правым столбцом информационной матрицы (табл. 2.3), где указана последовательность выполнения расчетов. Корректирующему уравнению 5 системы (2.51) соответствует алгоритмический блок 5 с выбранным численным методом решения одного уравнения с одним неизвестным и блок расчета функции f_5 , определяющей на каждом шаге итерационного процесса левую часть уравнения (2.52).

Процесс последовательных приближений (итерационный процесс) для итерлируемой переменной x_1 , приводящий к решению корректирующего уравнения (2.52) и соответственно всей системы (2.51), отображается пунктирной линией, направленной в противоположную сторону от основного направления последовательности расчетов.

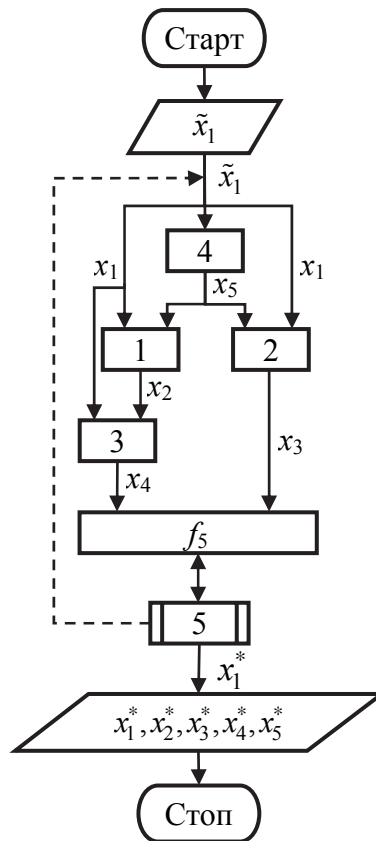


Рис. 2.7. Блок-схема алгоритма решения системы конечных нелинейных уравнений (2.51) декомпозиционным методом

2.3.3. Система с обыкновенным дифференциальным уравнением

Предположим, что в системе уравнений имеется обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка, записанное в явном виде, с независимой переменной t (производная по $x_1 - dx_1/dt$), описывающее нестационарный режим некоторого процесса. Система уравнений МО, включающая такое уравнение для пяти определяемых переменных $\bar{x} = [x_1, x_2, x_3, x_4, x_5]$, имеет вид:

$$\begin{aligned}
 1 \quad & \frac{dx_1}{dt} = f_1(x_1, x_2, x_5); \\
 2 \quad & f_2(x_1, x_3, x_5) = 0; \\
 3 \quad & f_3(x_1, x_2, x_4) = 0; \\
 4 \quad & f_4(x_1, x_5) = 0; \\
 5 \quad & f_5(x_3, x_4) = 0.
 \end{aligned}
 \tag{2.53}$$

Для получения частного, физически обоснованного решения дифференциального уравнения 1 в (2.53) необходимо задать дополнительные условия, например, начальное условие при $t = t^{(0)}$ в виде

$$1' \quad x_1(t^{(0)}) = x_1^{*(0)}. \quad (2.54)$$

Система уравнений МО (2.53), (2.54) составляется с использованием таблиц балансовых уравнений гидродинамических моделей и основных интенсивностей источников элементарных процессов в потоках, куда включены выражения для описания движения потоков и выражения для определения интенсивностей различных элементарных процессов в потоках (табл. 2.1 и 2.2).

Результатом решения дифференциального уравнения и системы с таким уравнением является функция зависимости переменных от времени $\bar{x}^*(t) = [x_1^*(t), x_2^*(t), x_3^*(t), x_4^*(t), x_5^*(t)]$.

2.3.3.1. Информационная матрица системы с обыкновенным дифференциальным уравнением. Численное решение дифференциального уравнения и системы с таким уравнением будет представлять собой таблицу значений переменных в определенные моменты времени $t^{(k)}$, $k = 0, \dots, n$:

$$\begin{bmatrix} t^{(0)} & t^{(1)} & \dots & t^{(n)} \\ \bar{x}^{*(0)} & \bar{x}^{*(1)} & \dots & \bar{x}^{*(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t^{(0)} & t^{(1)} & \dots & t^{(n)} \\ x_1^{*(0)} & x_1^{*(1)} & \dots & x_1^{*(n)} \\ x_2^{*(0)} & x_2^{*(1)} & \dots & x_2^{*(n)} \\ x_3^{*(0)} & x_3^{*(1)} & \dots & x_3^{*(n)} \\ x_4^{*(0)} & x_4^{*(1)} & \dots & x_4^{*(n)} \\ x_5^{*(0)} & x_5^{*(1)} & \dots & x_5^{*(n)} \end{bmatrix}. \quad (2.55)$$

Обычно шаг по времени $t^{(k+1)} - t^{(k)}$ выбирают постоянным. Обозначим шаг по времени Δt . Тогда моменты времени не нужно заносить в таблицу, т. к. они будут определяться индексом k по формуле

$$t^{(k)} = t^{(0)} + k\Delta t. \quad (2.56)$$

В дифференциальном уравнении 1 (2.53) производную можно заменить конечной разностью на малом отрезке времени $[t^{(k)}, t^{(k+1)}]$:

$$\frac{dx_1}{dt} \approx \frac{x_1(t^{(k+1)}) - x_1(t^{(k)})}{\Delta t} = \frac{x_1^{(k+1)} - x_1^{(k)}}{\Delta t}. \quad (2.57)$$

Тогда вместо дифференциального уравнения 1 для данного отрезка времени можно записать конечно-разностное уравнение 1*, используя явную схему Эйлера:

$$1^* \quad \frac{x_1^{(k+1)} - x_1^{(k)}}{\Delta t} \approx f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_5^{(k)}). \quad (2.58)$$

Запишем систему уравнений (2.53) для k -го отрезка времени с дифференциальным уравнением, представленным в конечно-разностном виде, согласно явной схеме Эйлера:

$$\begin{aligned} 1^* \quad & \frac{x_1^{(k+1)} - x_1^{(k)}}{\Delta t} \approx f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_5^{(k)}); \\ 2 \quad & f_2(x_1^{(k)}, x_3^{(k)}, x_5^{(k)}) = 0; \\ 3 \quad & f_3(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_4^{(k)}) = 0; \\ 4 \quad & f_4(x_1^{(k)}, x_5^{(k)}) = 0; \\ 5 \quad & f_5(x_3^{(k)}, x_4^{(k)}) = 0. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Такие уравнения составляются для всех отрезков времени $k = 0, \dots, n-1$.

В результате для каждого отрезка $[t^{(k)}, t^{(k+1)}]$ получили систему конечных уравнений с неизвестными $x_1^{(k+1)}, x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_3^{(k)}, x_4^{(k)}, x_5^{(k)}$ – всего 6 неизвестных. Но одна из неизвестных ($x_1^{(k)}$) фактически будет известна. Так, при $k = 0$ в системе (2.59) неизвестная $x_1^{(0)}$ уже дана как начальное условие, и число неизвестных в системе ($x_1^{(1)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)}, x_4^{(0)}, x_5^{(0)}$) будет равно числу уравнений. Решая систему (2.59) при $k = 0$, найдем $x_1^{*(1)}$ – значение переменной x_1 – в момент времени $t^{(1)}$. Далее решается система уравнений (2.59) при $k = 1$, где фактически неизвестными будут $x_1^{(2)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)}, x_4^{(1)}, x_5^{(1)}$. Таким образом, на каждом k -м цикле решения системы уравнений (2.59) будем получать значения переменных x_2, x_3, x_4 и x_5 в k -й момент времени и значение переменной x_1 в $(k + 1)$ -й момент времени. Однако с методической точки зрения систему уравнений (2.59) удобнее дополнить 6-м уравнением и определять алгоритм решения системы с использованием информационной матрицы, где будет 6 уравнений и 6 неизвестных. Это 6-е уравнение – уравнение начального условия для неизвестной x_1 и диффе-

ренциального уравнения 1 в системе (2.53) – в выбранных обозначениях неизвестных можно записать в следующем виде:

$$1' \quad x_1^{(k)} = x_1^{*(k)}. \quad (2.60)$$

Таким образом, система конечных уравнений для k -го отрезка времени, соответствующая исходной системе (2.53) с дифференциальным уравнением 1-го порядка, может быть записана в следующем виде:

$$\begin{aligned} 1^* \quad & \frac{x_1^{(k+1)} - x_1^{(k)}}{\Delta t} \cong f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_5^{(k)}); \\ 1' \quad & x_1^{(k)} = x_1^{*(k)}; \\ 2 \quad & f_2(x_1^{(k)}, x_3^{(k)}, x_5^{(k)}) = 0; \\ 3 \quad & f_3(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_4^{(k)}) = 0; \\ 4 \quad & f_4(x_1^{(k)}, x_5^{(k)}) = 0; \\ 5 \quad & f_5(x_3^{(k)}, x_4^{(k)}) = 0. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Информационная матрица для данной системы представлена в табл. 2.4. Порядок заполнения информационной матрицы аналогичен предыдущей матрице (табл. 2.3).

Таблица 2.4

Информационная матрица системы (2.61) и, соответственно, (2.53) с обыкновенным дифференциальным уравнением первого порядка

Номер уравнения	Переменные						Номер шага
	$x_1^{(k)}$	$x_1^{(k+1)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$x_4^{(k)}$	$x_5^{(k)}$	
1*	+	+	+			+	6
1'	+						1
2	+			+		+	3
3	+		+		+		5
4	+					+	2
5				+	+		4

Последовательность вычислений, представленная в крайнем правом столбце информационной матрицы, выполняется для каждого k -го момента времени. На 6-м шаге k -го цикла вычислений определяется значение $x_1^{*(k+1)}$, которое является исходным для следующего $(k + 1)$ -го цикла.

2.3.3.2. Блок-схема алгоритма решения системы с обыкновенным дифференциальным уравнением. Блок-схема алгоритма решения (рис. 2.8) составляется в соответствии с правым столбцом информационной матрицы.

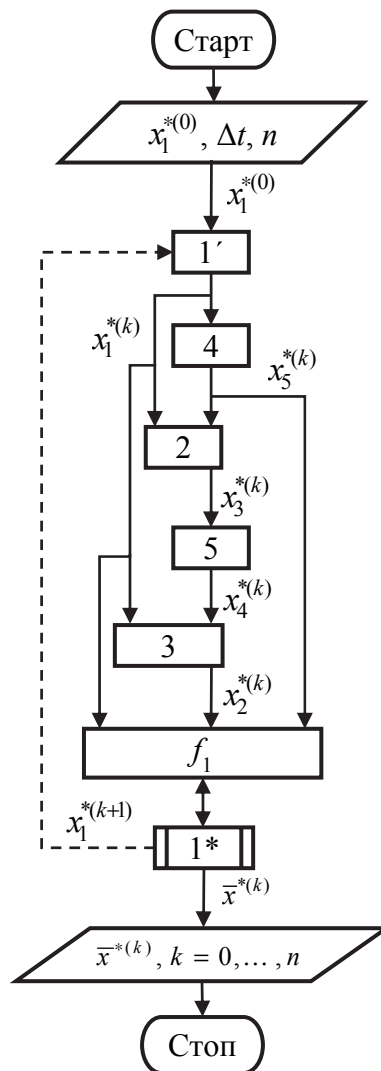


Рис. 2.8. Блок-схема алгоритма решения системы (2.61), соответствующей (2.53) с обыкновенным дифференциальным уравнением первого порядка

В алгоритмическом блоке 1* определяются значения $x_1^{*(k+1)}$, а в блоке расчета функции f_1 проводится расчет правой части уравнения

1* (2.61). Цикл решения системы уравнений для различных k изображается пунктиром, направленным в противоположную сторону от основного направления последовательности вычислений.

Необходимо отметить, что применение *информационных матриц систем уравнений для анализа математического описания процессов и графическое изображение соответствующих алгоритмов их решения в виде блок-схем расчетов* позволяет наиболее рационально решать проблемы сокращения размерностей решаемых задач и выбора эффективных моделирующих алгоритмов при построении физико-химических моделей ХТП.

2.4. Математические модели движения жидкости в простых гидравлических системах

К простым гидравлическим системам относятся технологические схемы трубопроводов, для которых принимается ряд допущений:

– во всех трубах протекает однофазный поток жидкости, температура которого одинакова на всех участках;

– все трубы располагаются на одном уровне, в системе нет рециркуляционных (обратных) потоков, или рециклов, не учитываются местные сопротивления и перепады давлений в трубах, т. е. рассматриваются так называемые короткие трубопроводы;

– системы включают только клапаны (вентили) с постоянными, не изменяющимися коэффициентами пропускной способности и закрытые емкости (аккумуляторы), давление газа в которых подчиняется идеальным законам.

Реальные гидравлические системы включают насосы, компрессоры и другие единицы оборудования; в них наряду с жидкостью могут перемещаться потоки газа, газо- и парожидкостной смеси. Тем не менее, изучение общих принципов построения математических моделей простых гидравлических систем позволяет получить представление о стратегии их математического моделирования.

2.4.1. Математическая модель стационарного режима движения жидкости в простой гидравлической системе

Рассмотрим простую гидравлическую систему (рис. 2.9), состоящую из двух аккумуляторов и пяти клапанов. Для построения статической модели представленной гидравлической системы необходимо выполнить три последовательных этапа:

- 1) изучить и/или ознакомиться с теорией протекающих процессов;
- 2) построить и проанализировать систему уравнений математического описания (МО) процесса;
- 3) выбрать и реализовать на компьютере моделирующий алгоритм (МА) решения системы уравнений МО гидравлического процесса.

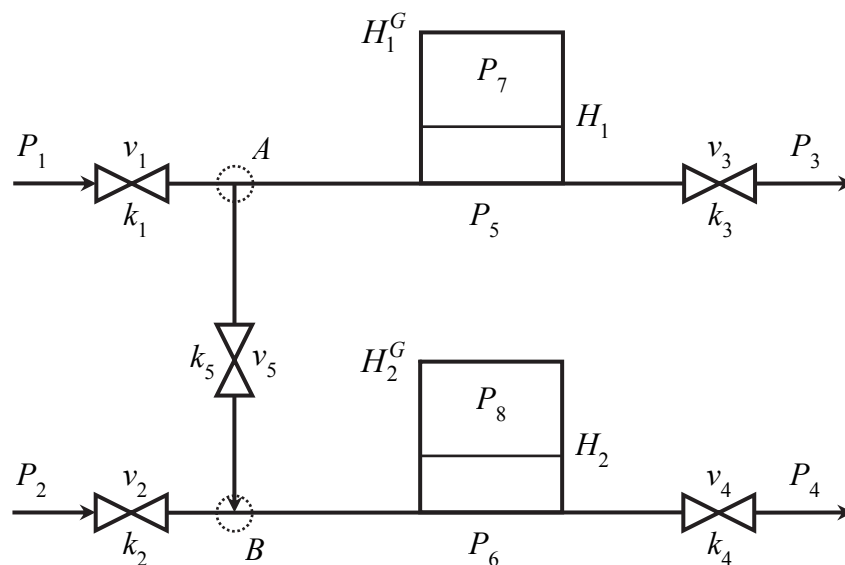


Рис. 2.9. Схема простой гидравлической системы

Изучение теории процесса осуществляется с целью построения системы уравнений МО гидравлической системы, которая включает в себя четыре типа уравнений:

- балансовые;
- для скоростей движения жидкостей через клапаны;
- давления газа в аккумуляторе;
- давления жидкости на дне аккумулятора.

Для системы, изображенной на рис. 2.9, будут справедливы два уравнения массового баланса (третье возможное балансовое уравнение – уравнение общего баланса – получается сложением двух других, т. е. будет линейно-зависимым) для точек *A* и *B* соответственно:

$$v_1 - v_3 - v_5 = 0. \quad (2.62)$$

$$v_2 + v_5 - v_4 = 0. \quad (2.63)$$

Формула для определения скорости протекания жидкости через клапан в соответствии с уравнением Бернулли для суммарной удельной энергии элементарной струи идеальной жидкости при установившемся движении и с учетом допущений о простой гидравлической системе имеет вид

$$v = k \sqrt{|P_{\text{вх}} - P_{\text{вых}}|}, \quad (2.64)$$

где k – коэффициент пропускной способности клапана; $P_{\text{вх}}$, $P_{\text{вых}}$ – давления жидкости на входе и на выходе из клапана.

Более общая запись формулы (2.64), учитывающая направление потока жидкости, имеет вид

$$v = k \cdot \text{sgn}(P_{\text{вх}} - P_{\text{вых}}) \sqrt{|P_{\text{вх}} - P_{\text{вых}}|}, \quad (2.65)$$

где $\text{sgn}(x)$ – функция знака. Эта функция может принимать только три значения в соответствии со схемой:

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} -1 & x < 0, \\ 0 & x = 0, \\ 1 & x > 0. \end{cases} \quad (2.66)$$

В соответствии с формулой (2.65) знак скорости потока жидкости становится отрицательным, если направление ее движения будет противоположным направлению на схеме (рис. 2.9). Так как гидравлическая система (рис. 2.9) содержит 5 клапанов, то приведенных уравнений (2.65) в системе должно быть 5.

Уравнения, определяющие давление жидкости на дно аккумулятора и давление газа над поверхностью жидкости в аккумуляторе, составляются на основе следующих допущений:

- давление газа подчиняется закону идеального газа;
- аккумулятор представляет собой закрытую цилиндрическую емкость с площадью поперечного сечения S и высотой H^G ;
- исходное давление газа в аккумуляторах, не заполненных жидкостью, одинаково и равно P_N .

В соответствии со следствием из закона Паскаля давление жидкости $P_{\text{жидк}}$ на дно аккумулятора емкости определяется по формуле

$$P_{\text{жидк}} = P_{\text{газ}} + \rho g H, \quad (2.67)$$

где $P_{\text{газ}}$ – давление газа над поверхностью жидкости, Па; ρ – плотность жидкости, кг/м³; H – уровень жидкости в аккумуляторе, м; g – ускорение свободного падения, 9,8 м/с².

Для определения давления газа $P_{\text{газ}}$ используется соотношение для идеального газа, учитывающее постоянство температуры:

$$P_{\text{газ}} V_{\text{газ}} = P_N V_N, \quad (2.68)$$

где V_N – объем аккумулятора, не заполненного жидкостью, м^3 ; $V_{\text{газ}}$ – объем газа в аккумуляторе, заполненном жидкостью на высоту H , м^3 . Объем аккумулятора равен

$$V_N = S \cdot H^G, \quad (2.69)$$

а объем газа в аккумуляторе с жидкостью

$$V_{\text{газ}} = S(H^G - H). \quad (2.70)$$

В результате будет справедливо:

$$P_{\text{газ}} S(H^G - H) = P_N S H^G, \quad (2.71)$$

или

$$P_{\text{газ}} = P_N \frac{H^G}{H^G - H}. \quad (2.72)$$

Формулы для определения давления жидкости $P_{\text{жидк}}$ (2.67) и давления газа $P_{\text{газ}}$ (2.72) используются для описания поведения двух закрытых емкостей в гидравлической системе, изображенной на рис. 2.9.

2.4.1.1. Система уравнений математического описания стационарного режима движения жидкости в простой гидравлической системе. Система независимых уравнений (2.73), приводимая ниже и описывающая поведение простой гидравлической системы в стационарном состоянии, состоит из следующих уравнений:

1. $v_1 = k_1 \cdot \text{sgn}(P_1 - P_5) \sqrt{|P_1 - P_5|};$
2. $v_2 = k_2 \cdot \text{sgn}(P_2 - P_6) \sqrt{|P_2 - P_6|};$
3. $v_3 = k_3 \cdot \text{sgn}(P_5 - P_3) \sqrt{|P_5 - P_3|};$
4. $v_4 = k_4 \cdot \text{sgn}(P_6 - P_4) \sqrt{|P_6 - P_4|};$
5. $v_5 = k_5 \cdot \text{sgn}(P_5 - P_6) \sqrt{|P_5 - P_6|};$
6. $v_1 - v_3 - v_5 = 0;$
7. $v_2 + v_5 - v_4 = 0;$
8. $P_5 = P_7 + \rho g H_1;$
9. $P_7 = P_N \frac{H_1^G}{H_1^G - H_1};$
10. $P_6 = P_8 + \rho g H_2;$
11. $P_8 = P_N \frac{H_2^G}{H_2^G - H_2}.$

(2.73)

Уравнения 1–5 – это уравнения для скорости потоков жидкости через клапаны (2.65). Уравнения 6 и 7 – уравнения балансов для точек соединения трубопроводов. Уравнения 8 и 10 – уравнения для давления жидкости на дно аккумулятора (2.67). Уравнения 9 и 11 – для давления газа в аккумуляторах (2.72).

Так как система конечных уравнений (2.73) включает 11 независимых уравнений (в дальнейшем используется последовательная нумерация уравнений от 1 до 11), она может быть решена, в принципе, относительно любых 11 переменных, которые называются *определяемыми переменными*. Все остальные переменные системы (2.73) должны задаваться.

Кроме этого, должны быть специфицированы коэффициенты (например, коэффициенты пропускной способности клапанов – вектор \bar{k}), а также постоянные в системе уравнений (2.73) – геометрические высоты емкостей H_1^G , H_2^G , давление в незаполненной жидкостью емкости P_N и плотность жидкости ρ .

Исходя из физических соображений, при гидравлическом расчете систем трубопроводов (рис. 2.9), представляющем собой решение системы 11 уравнений (2.73), определяемыми переменными выбираются:

- расходы жидкости на всех участках трубопроводов, отходящих от точек соединения A и B – v_1, v_2, v_3, v_4 и v_5 ;
- давления жидкости в трубопроводах внутри системы P_5 и P_6 ;
- давления газов в аккумуляторах P_7 и P_8 ;
- уровни жидкости в аккумуляторах H_1 и H_2 .

Давления на входе в систему P_1 и P_2 , а также давления на выходе из системы P_3 и P_4 задаются независимо в соответствии с физическим смыслом решаемой задачи. Это означает, что, если предполагается движение жидкости в соответствии со стрелками, изображенными на рис. 2.9, давления на входе в систему P_1 и P_2 должны быть больше давлений на выходе P_3 и P_4 .

Система 11 конечных уравнений (2.73), решаемая относительно 11 определяемых переменных, является системой нелинейных уравнений.

Для ее решения наиболее целесообразно использовать *декомпозиционный метод*, который позволяет существенно снизить размерность решаемой задачи и определять все искомые переменные путем решения системы (или систем) уравнений значительно меньшей размерности, чем размерность исходной системы.

Размерность исходной системы уравнений (2.73) равна 11. Для выбора *алгоритма декомпозиции*, который позволит определить 11 искомых переменных путем последовательного решения одного

нелинейного уравнения размерностью 1 и одного квадратного уравнения, необходимо построить и проанализировать информационную матрицу системы уравнений МО (табл. 2.5).

2.4.1.2. Информационная матрица. Построение и анализ информационной матрицы (табл. 2.5) системы уравнений математического описания стационарного режима движения жидкости в простой гидравлической системе позволит определить оптимальный алгоритм декомпозиционного метода решения системы (2.73).

Таблица 2.5

Информационная матрица системы уравнений (2.73) МО стационарного режима движения жидкости в гидравлической системе (рис. 2.9)

Номер уравнения	Определяемые переменные										Номер шага	
	v_1	v_2	v_3	v_4	v_5	P_5	P_6	P_7	P_8	H_1		H_2
1	+					+						3
2		+					+					7
3			+			+						4
4				+			+					8
5					+	+	+					6
6	+		+		+							5
7 _{кор.ур}		+		+	+							9
8						+		+		+		2
9								+		+		1
10							+		+		+	10, 11
11									+		+	10, 11

Каждое уравнение системы (2.73) содержит несколько определяемых переменных: как минимум две. Начальные приближения для итерационных расчетов при решении нелинейных уравнений следует задавать в тех уравнениях, которые содержат наименьшее число опре-

деляемых переменных (в данном случае две) и могут быть хорошо обоснованы из физических соображений. Например, значение приближения H_1 может быть задано в интервале $[0; H_1^G]$, так как высота емкости H_1^G задана в условии задачи.

Для обозначения задания начального приближения итерационного процесса вычисления в информационной матрице ставится знак плюс, соответствующий задаваемой переменной в конкретном уравнении, и обводится квадратом.

Первым шагом вычислительной процедуры будет определение переменной P_1 в уравнении 9 (*1-й шаг* в правом столбце информационной матрицы). Для обозначения переменной, которая определяется в уравнении 9, соответствующий ей плюс в строке 9 обводится ромбом. Заданное значение приближения \tilde{H}_1 и найденная переменная P_1 справедливы для всей системы уравнений, и поэтому эти величины должны использоваться и другими уравнениями системы (см. строку 8 в информационной матрице). Для обозначения распространения значений переменных на все уравнения системы соответствующие им плюсы в столбцах обводятся окружностями. В уравнении 8 окружностями обведены плюсы, соответствующие H_1 и P_7 , что позволяет решить это уравнение относительно P_5 на *шаге 2* вычислительной процедуры. Дальнейшие последовательные шаги расчетов дают возможность определить только приближенные значения $v_1, v_3, v_5, P_6, v_2, v_4$, что связано с выбором в самом начале реализуемой процедуры вычисления приближения величины \tilde{H}_1 .

Таким образом, определение корректного значения H_1 приведет, соответственно, к получению корректных значений и $P_7, P_5, v_1, v_3, v_5, P_6, v_2, v_4$, т. е. 9 из 11 искомым переменных.

Для коррекции H_1 должно использоваться уравнение 7, в котором все переменные известны из предыдущих расчетов (соответствующие им плюсы обведены окружностями) – *шаг 9*. Когда система уравнений МО решена, то уравнение 7 вида

$$v_2 \{H_1\} + v_5 \{H_1\} - v_4 \{H_1\} = 0 \quad (2.74)$$

должно превратиться в равенство. Переменная H_1 в фигурных скобках в этом случае означает, что каждое слагаемое этого уравнения зависит от переменной H_1 , а уравнение (2.74) должно быть решено относительно H_1 для получения ее корректного значения.

Реализацию алгоритма решения уравнения 7 можно рассматривать как процедуру коррекции переменной H_1 и, соответственно,

определение значений переменных $P_7, P_5, v_1, v_3, v_5, P_6, v_2$ и v_4 . Для обозначения того факта, что уравнение 7 является корректирующим для H_1 в строке 7 информационной матрицы в позиции, соответствующей переменной H_1 , стоит пустой ромб.

Наиболее эффективным алгоритмом для коррекции переменной H_1 и решения уравнения 7 является метод половинного деления, с нижней границей интервала поиска – 0 и верхней границей $H_1^G - 1,0 \cdot 10^{-5}$, так как только в этом случае знаменатель уравнения 9 системы уравнений МО (2.73) не станет равным нулю при подстановке в него верхней границы H_1^G .

На 6-м шаге из 5-го уравнения необходимо вычислить значение переменной P_6 . Так как на предыдущих этапах расчетов v_5 может получиться как положительным, так и отрицательным, выражение для определения P_6 должно учитывать это обстоятельство – используется функция знака $\text{sgn}(x)$ (2.66) выражения переменной P_6 :

$$P_6 = P_5 - \text{sgn}(v_5) \left(\frac{v_5}{k_5} \right)^2. \quad (2.75)$$

Для определения двух оставшихся переменных P_8 и H_2 в уравнение 10 подставляется P_8 из уравнения 11 системы уравнений МО (2.73). В результате получается квадратное уравнение относительно H_2 (P_6 известно из предыдущих расчетов):

$$P_6 = P_N \frac{H_2^G}{H_2^G - H_2} + \rho g H_2. \quad (2.76)$$

Для определения значения H_2 используется алгоритм вычисления корней квадратного уравнения и выбирается тот из корней, который располагается в интервале $[0; H_2^G]$.

2.4.1.3. Блок-схема алгоритма расчета. В блок-схеме алгоритма расчета стационарного режима гидравлической системы (рис. 2.10) используются два алгоритмических блока, в которых реализуются два численных алгоритма:

– алгоритм метода половинного деления: алгоритмический блок (7) для определения H_1 ;

– алгоритм вычисления корней квадратного уравнения: алгоритмический блок (10, 11) для определения H_2 и P_8 .

После вычисляются три коэффициента функции $f_{10,11}$, представляющей собой многочлен 2-й степени, получаемый после соответст-

вующего преобразования квадратного уравнения (2.76). Алгоритмический блок (10, 11) реализует стандартный алгоритм решения квадратного уравнения с конкретными значениями коэффициентов ($f_{10,11}$), в результате чего определяется высота жидкости во второй емкости H_2 .

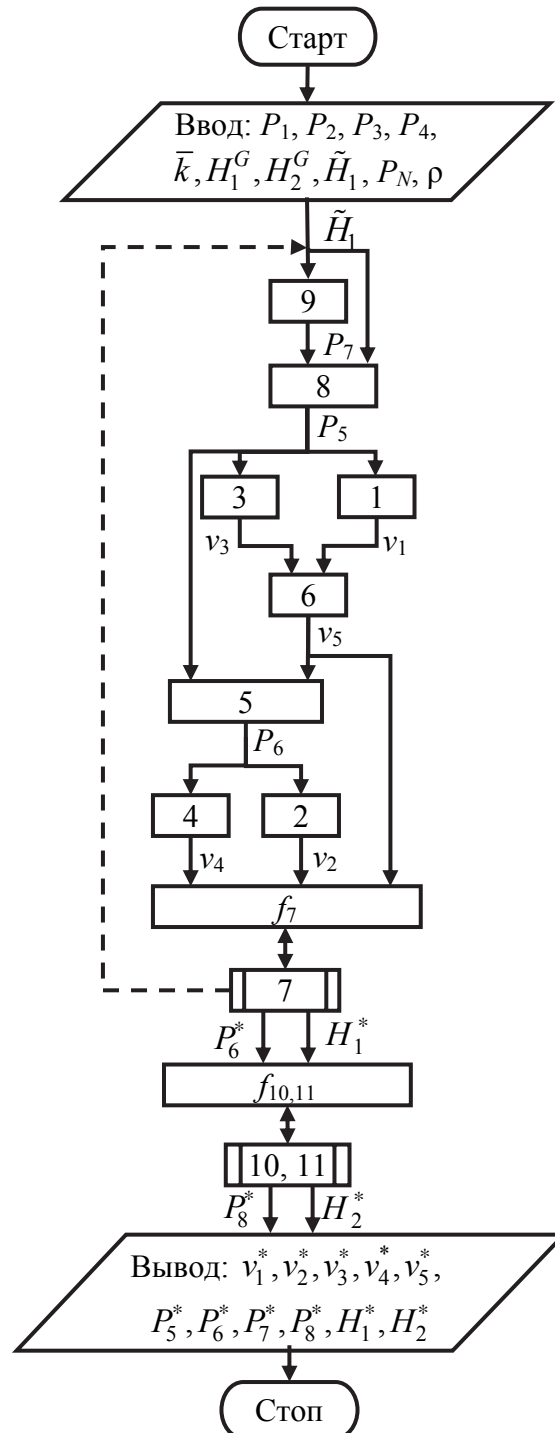


Рис. 2.10. Блок-схема алгоритма расчета стационарного режима движения жидкости в гидравлической системе (рис. 2.9)

Топология гидравлической системы отображается вычислительными блоками выше алгоритмического блока (7). Результатом расчета по вычислительным блокам (9), (8), (1), (3), (6), (5), (2), (4) является значение величины функции

$$f_7(H_1) = v_2(H_1) + v_5(H_1) - v_4(H_1), \quad (2.77)$$

которая используется стандартным модулем метода половинного деления в алгоритмическом блоке (7) для определения уровня жидкости H_1 в первой емкости.

2.4.2. Математическая модель нестационарного режима движения жидкости в простой гидравлической системе

2.4.2.1. Математическое описание нестационарного режима движения жидкости в простой гидравлической системе. При построении динамических моделей конечные балансовые уравнения 6 и 7 в системе уравнений МО (2.73) превращаются в обыкновенные дифференциальные уравнения вида:

$$\frac{dV_1}{dt} = v_1 - v_3 - v_5; \quad (2.78)$$

$$\frac{dV_2}{dt} = v_2 + v_5 - v_4, \quad (2.79)$$

где V_1 и V_2 – объемы жидкости в аккумуляторах гидравлической системы, представленной на рис. 2.9.

Если эти емкости являются цилиндрическими, то объем жидкости в них определяется как

$$V = S \cdot H, \quad (2.80)$$

где S – площадь поперечного сечения цилиндра. Тогда вышеприведенные обыкновенные дифференциальные уравнения (2.78) и (2.79) принимают следующий вид (в нумерации системы (2.73) – это будут уравнения 6 и 7):

$$6 \quad \frac{dH_1}{dt} = \frac{v_1 - v_3 - v_5}{S_1}; \quad (2.81)$$

$$7 \quad \frac{dH_2}{dt} = \frac{v_2 + v_5 - v_4}{S_2}. \quad (2.82)$$

Для получения частного решения системы дифференциальных уравнений необходимо задать начальные условия, в нумерации системы (2.73) – это будут уравнения 6' и 7':

$$6' \quad H_1(t^{(0)}) = H_1^{*(0)}, \quad (2.83)$$

$$7' \quad H_2(t^{(0)}) = H_2^{*(0)}. \quad (2.84)$$

При этом решается задача Коши или задача с начальными условиями, и получаемые частные решения представляют собой функции $H_1(t)$ и $H_2(t)$. Численное решение будет представлять собой таблицу значений определяемых переменных в моменты времени $t^{(k)}$, которые выбираются с постоянным интервалом Δt , от начального момента времени $t^{(0)}$, согласно формуле (2.56). Индекс k определяет моменты времени и изменяется от 0 до n . При этом в начальный момент времени $t^{(0)}$ значения неизвестных H_1 и H_2 заданы, а конечный индекс n может принимать любое натуральное число и определяется временем, до которого требуется рассчитать изменение переменных системы.

На малом отрезке времени $[t^{(k)}, t^{(k+1)}]$ производные в уравнениях можно заменить конечными разностями (см. п. 2.2.3.1). Тогда дифференциальные уравнения (2.81) и (2.82) можно представить в конечно-разностном виде с использованием явной схемы Эйлера:

$$6^* \quad \frac{H_1^{(k+1)} - H_1^{(k)}}{\Delta t} \approx \frac{v_1^{(k)} - v_3^{(k)} - v_5^{(k)}}{S_1} = f_5(H_1^{(k)}, H_2^{(k)}), \quad (2.85)$$

$$7^* \quad \frac{H_2^{(k+1)} - H_2^{(k)}}{\Delta t} \approx \frac{v_2^{(k)} + v_5^{(k)} - v_4^{(k)}}{S_2} = f_7(H_1^{(k)}, H_2^{(k)}). \quad (2.86)$$

А уравнения для начальных условий будут иметь вид (см. п. 2.2.3.1):

$$6' \quad H_1^{(k)} = H_1^{*(k)}, \quad (2.87)$$

$$7' \quad H_2^{(k)} = H_2^{*(k)}. \quad (2.88)$$

Последние уравнения означают, что при последовательных вычислениях на каждом k -м шаге значения переменных H_1 и H_2 будут известны.

Таким образом, математическое описание нестационарного режима движения жидкости в простой гидравлической системе представляет собой систему уравнений (2.73), в которой балансовые уравнения 6 и 7 заменены на дифференциальные уравнения (2.81) и (2.82), и в систему включены два начальных условия (2.83) и (2.84) для получения частного решения. При этом система уравнений записывается для каждого отрезка времени $[t^{(k)}, t^{(k+1)}]$, а дифференциальные уравнения представляют в конечно-разностном виде (2.85) и (2.86), а начальные

условия в виде (2.87) и (2.88). В итоге для отрезка времени $[t^{(k)}, t^{(k+1)}]$ получим следующую систему конечных уравнений:

$$\begin{aligned}
1 \quad v_1^{(k)} &= k_1 \cdot \operatorname{sgn}(P_1 - P_5^{(k)}) \sqrt{|P_1 - P_5^{(k)}|}; \\
2 \quad v_2^{(k)} &= k_2 \cdot \operatorname{sgn}(P_2 - P_6^{(k)}) \sqrt{|P_2 - P_6^{(k)}|}; \\
3 \quad v_3^{(k)} &= k_3 \cdot \operatorname{sgn}(P_5^{(k)} - P_3) \sqrt{|P_5^{(k)} - P_3|}; \\
4 \quad v_4^{(k)} &= k_4 \cdot \operatorname{sgn}(P_6^{(k)} - P_4) \sqrt{|P_6^{(k)} - P_4|}; \\
5 \quad v_5^{(k)} &= k_5 \cdot \operatorname{sgn}(P_5^{(k)} - P_6^{(k)}) \sqrt{|P_5^{(k)} - P_6^{(k)}|}; \\
6^* \quad \frac{H_1^{(k+1)} - H_1^{(k)}}{\Delta t} &= \frac{v_1^{(k)} - v_3^{(k)} - v_5^{(k)}}{S_1} = f_6(H_1^{(k)}, H_2^{(k)}); \\
6' \quad H_1^{(k)} &= H_1^{*(k)}; \\
7^* \quad \frac{H_2^{(k+1)} - H_2^{(k)}}{\Delta t} &= \frac{v_2^{(k)} + v_5^{(k)} - v_4^{(k)}}{S_2} = f_7(H_1^{(k)}, H_2^{(k)}); \\
7' \quad H_2^{(k)} &= H_2^{*(k)}; \\
8 \quad P_5^{(k)} &= P_7^{(k)} + \rho g H_1^{(k)}; \\
9 \quad P_7^{(k)} &= P_N \frac{H_1^G}{H_1^G - H_1^{(k)}}; \\
10 \quad P_6^{(k)} &= P_8^{(k)} + \rho g H_2^{(k)}; \\
11 \quad P_8^{(k)} &= P_N \frac{H_2^G}{H_2^G - H_2^{(k)}}.
\end{aligned} \tag{2.89}$$

2.4.2.2. Информационная матрица системы. Информационная матрица системы уравнений МО, соответствующая системе уравнений (2.89), приведена в табл. 2.6. В систему входит 13 уравнений и 13 определяемых переменных для каждого k -го момента времени. Крайний правый столбец информационной матрицы содержит номера шагов последовательного вычисления переменных. Так на 1 -м и 6 -м шагах вычислений для данного момента времени мы просто берем значения переменных H_1 и H_2 , вычисленные на предыдущем этапе, и затем последовательно вычисляем все остальные переменные. После вычисления всех переменных в k -й момент времени на последних двух шагах вычислений (12 -й и 13 -й шаги) вычисляются значения переменных H_1 и H_2 для следующего $(k+1)$ -го момента времени из уравнений 6^* и 7^* .

Эти значения переменных затем используются для вычисления всех переменных на следующем $(k + 1)$ -м моменте времени. Таким образом, реализуется последовательная схема численного решения системы с дифференциальными уравнениями на основе явного метода Эйлера.

Таблица 2.6

Информационная матрица системы уравнений (2.89) МО нестационарного режима движения жидкости в гидравлической системе (рис. 2.9)

Но- мер урав- не- ния	$v_1^{(k)}$	$v_2^{(k)}$	$v_3^{(k)}$	$v_4^{(k)}$	$v_5^{(k)}$	$P_5^{(k)}$	$P_6^{(k)}$	$P_7^{(k)}$	$P_8^{(k)}$	$H_1^{(k)}$	$H_1^{(k+1)}$	$H_2^{(k)}$	$H_2^{(k+1)}$	Но- мер шага
1	+					+								4
2		+					+							9
3			+			+								5
4				+			+							10
5					+	+	+							11
6*	+		+		+					+	+			12
7*		+		+	+							+	+	13
6'										+				1
7'												+		6
8						+		+		+				3
9								+		+				2
10							+		+			+		8
11									+			+		7

2.4.2.3. Блок-схема алгоритма расчета. Блок-схема алгоритма расчета простой гидравлической системы (см. рис. 2.9) при нестационарном режиме движения жидкости изображена на рис. 2.11.

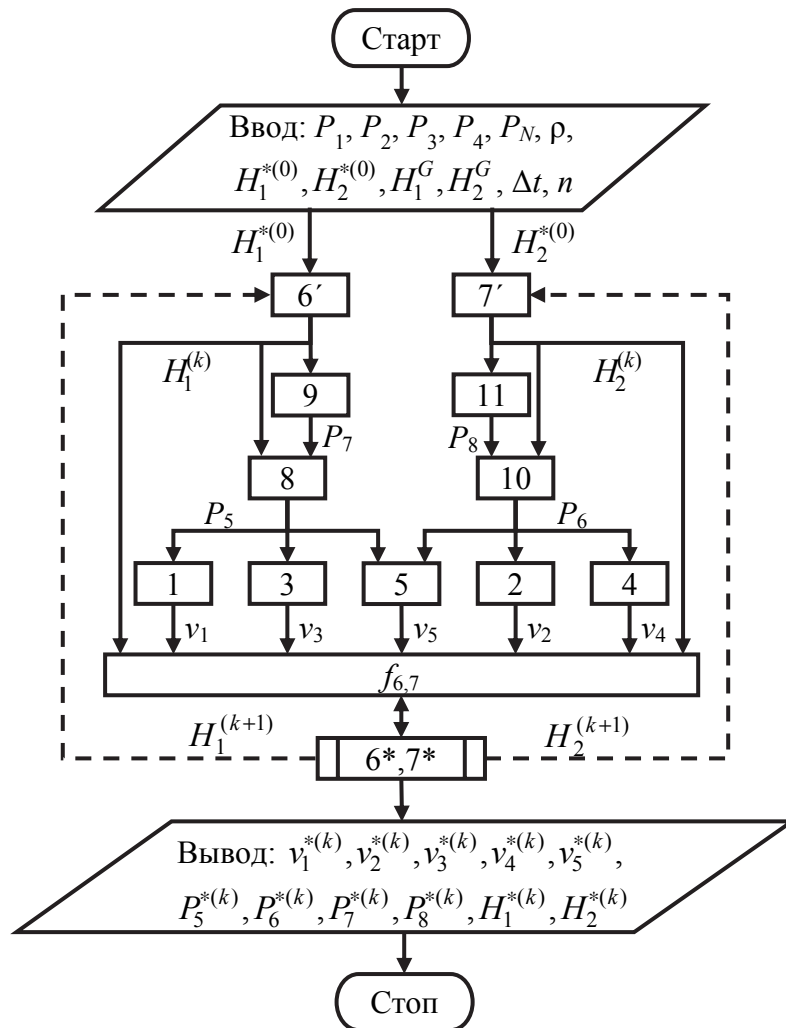


Рис. 2.11. Блок-схема алгоритма расчета нестационарного режима движения жидкости в простой гидравлической системе (рис. 2.9)

В блоке $f_{6,7}$ рассчитываются правые части дифференциальных уравнений 6 и 7, записанных в конечно-разностном виде 6* и 7*. Алгоритмический блок «6*, 7*» представляет собой алгоритм явного метода Эйлера для решения дифференциальных уравнений, который в свою очередь выражается простым вычислением $H_1^{(k+1)}$ и $H_2^{(k+1)}$ из уравнений (2.85) и (2.86), соответственно.

2.5. Математические модели процессов теплопередачи

В теплообменных аппаратах (теплообменниках) часть энтальпии более теплой среды передается более холодной среде. Для этой цели используются различные типы теплообменников, которые широко

распространены в химической промышленности. Теплообменники применяются для нагрева и охлаждения веществ, находящихся в различных агрегатных состояниях, испарения жидкостей и конденсации паров, перегонки и сублимации, абсорбции и адсорбции, расплавления твердых тел и кристаллизации, отвода и подвода теплоты при проведении экзо- и эндотермических реакций и т. д.

По конструкционным характеристикам теплообменники подразделяются на кожухотрубные, трубчатые, пластинчатые, змеевиковые, спиральные и др. (рис. 2.12)

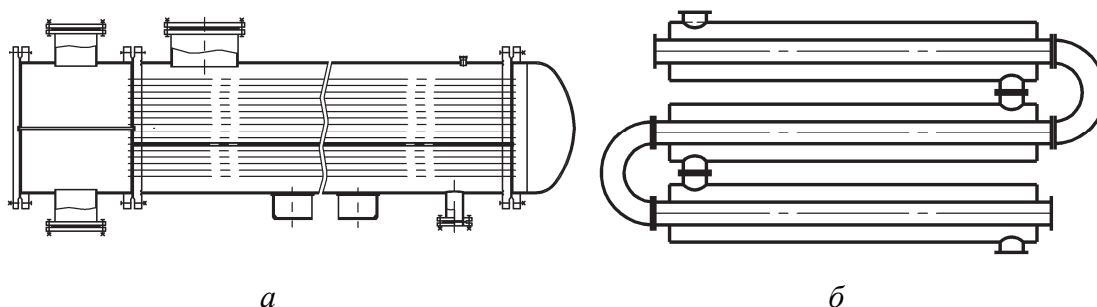


Рис. 2.12. Поверхностные теплообменники:
a – кожухотрубный; *б* – трубчатый

Движение потоков теплоносителей в теплообменниках для целей компьютерного моделирования представляется идеальными гидродинамическими моделями, что позволяет получать адекватные компьютерные модели без излишнего усложнения математического описания.

Гидродинамическую модель идеального смешения и идеального вытеснения для потоков теплоносителей можно применять для поверхностных теплообменников следующих типов:

- кожухотрубных теплообменников (рис. 2.12, *a*);
- трубчатых теплообменников (рис. 2.12, *б*);
- аппаратов воздушного охлаждения;
- пластинчатых теплообменников;
- змеевиковых теплообменников.

Ниже представлены алгоритмы поверочно-оценочного расчета стационарных режимов типовых фрагментов поверхностных теплообменников, в которых учитываются только процессы теплопередачи.

2.5.1. Математическая модель стационарного режима процесса теплопередачи в теплообменнике типа «смешение – смешение»

Построение компьютерной модели теплообменника включает следующие этапы:

- изучение и/или ознакомление с теорией процесса теплообмена для данного типа теплообменных аппаратов;
- построение математического описания (МО) конкретного процесса теплообмена;
- выбор и реализация алгоритма (моделирующего алгоритма – МА) решения уравнений МО модели данного теплообменника.

Представленная на рис. 2.13 схема теплообменника включает в себя два потока теплоносителей – например, охлаждаемый поток с начальной температурой (на входе в аппарат) $T_1^{(0)}$, конечной температурой (на выходе) T_1 , расходом v_1 , теплоемкостью C_{p1} и нагреваемый поток с начальной температурой (на входе в аппарат) $T_2^{(0)}$, конечной температурой (на выходе) T_2 , расходом v_2 , теплоемкостью C_{p2} . Поверхность теплообмена имеет площадь F^T . Коэффициент теплопередачи обозначен K^T .

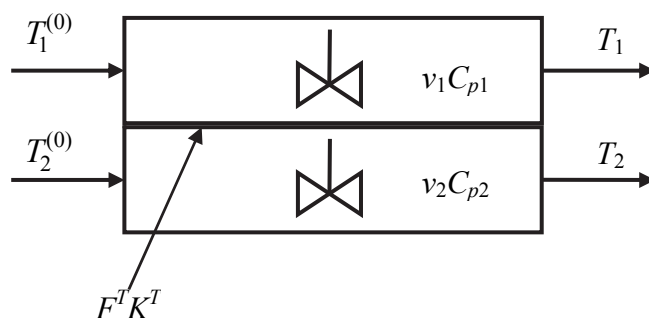


Рис. 2.13. Схематическое изображение теплообменника «смешение – смешение»

Для упрощения построения математического описания рассматриваемого процесса принимаются следующие допущения:

- рассматривается стационарный режим теплопередачи;
- оба потока теплоносителя описываются моделью идеального смешения;
- происходит только процесс теплопередачи.

Так как рассматривается стационарный режим, следовательно, уравнение теплового баланса для потока первого теплоносителя для рассматриваемой гидродинамической модели идеального смешения записывается следующим образом (см. табл. 2.2) – производная по времени равна нулю:

$$1 \quad v_1^{(0)} C_{p1} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 + F^T \Delta q_1^T = 0, \quad (2.90)$$

где Δq^T – локальная интенсивность теплопередачи.

В систему уравнений МО в соответствии с принципами построения компьютерных моделей, сформулированными в разделе 2, необходимо включить выражение для локальной интенсивности теплопередачи для первого потока теплоносителя (см. табл. 2.1):

$$2 \quad \Delta q_1^T = K^T (T_2 - T_1). \quad (2.91)$$

Уравнение теплового баланса для потока второго теплоносителя для рассматриваемой гидродинамической модели идеального перемешивания записывается аналогично (2.90) – производная по времени также равна нулю:

$$3 \quad v_2^{(0)} C_{p2}^{(0)} T_2^{(0)} - v_2 C_{p2} T_2 + F^T \Delta q_2^T = 0. \quad (2.92)$$

Выражение для локальной интенсивности теплопередачи для второго потока теплоносителя также включается в систему уравнений МО:

$$4 \quad \Delta q_2^T = K^T (T_1 - T_2). \quad (2.93)$$

Учитывая, что локальные интенсивности теплопередачи обоих потоков совпадают по величине, но различны по знаку, можно записать

$$\Delta q^T = \Delta q_1^T = -\Delta q_2^T. \quad (2.94)$$

Это дает возможность сократить количество уравнений, входящих в систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) математического описания для данной модели теплообменника. В результате эта система записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} 1 \quad & v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 + F^T \Delta q^T = 0; \\ 2 \quad & v_2^{(0)} C_{p2}^{(0)} T_2^{(0)} - v_2 C_{p2} T_2 + F^T (-\Delta q^T) = 0; \\ 3 \quad & \Delta q^T = K^T (T_2 - T_1). \end{aligned} \quad (2.95)$$

Рассмотрим следующие частные случаи.

Первый частный случай – принимается допущение о том, что константа теплопередачи через поверхность теплообмена F^T постоянна ($K^T = \text{const}$). Это означает, что, в частности, теплоемкости потоков C_{p1} и C_{p2} постоянны и не зависят от температуры.

В этом случае система из трех уравнений (2.95) позволяет найти три определяемых переменных. В качестве определяемых переменных выбираем температуры потоков на выходе из теплообменника T_1 и T_2 и локальную интенсивность теплопередачи Δq^T .

Найдем решение системы уравнений МО рассматриваемой модели теплообменника (2.95). Для этого преобразуем систему (2.95) путем подстановки в уравнения 1 и 2 выражения для локальной интенсивности теплопередачи Δq^T :

$$\begin{aligned} 1 \quad & \underbrace{(v_1 C_{p1} + F^T K^T)}_{a_{11}} T_1 + \underbrace{(-F^T K^T)}_{a_{12}} T_2 = \underbrace{v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)}}_{b_1}; \\ 2 \quad & \underbrace{(-F^T K^T)}_{a_{21}} T_1 + \underbrace{(v_2 C_{p2} + F^T K^T)}_{a_{22}} T_2 = \underbrace{v_2^{(0)} C_{p2}^{(0)} T_2^{(0)}}_{b_2}. \end{aligned} \quad (2.96)$$

Обозначив коэффициенты перед переменными T_1 и T_2 как « a » с соответствующими индексами и свободные члены уравнений 1 и 2 системы (2.96) как « b » с соответствующими индексами, получаем возможность записать СЛАУ (2.96) в матричном виде:

$$\begin{aligned} \bar{A} \cdot \bar{x} &= \bar{b}; \\ \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.97)$$

откуда методом обратной матрицы находим значения температур потоков на выходе из теплообменника T_1, T_2 :

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}. \quad (2.98)$$

После определения температур потоков на выходе из теплообменника из уравнения 3 системы (2.95) определяется значение локальной интенсивности теплопередачи Δq^T . Таким образом определяются все три искомые переменные.

Второй частный случай – константа теплопередачи непостоянна и зависит от температур, теплоемкостей и расходов потоков ($K^T \neq const$), также учитывается зависимость теплоемкостей потоков (C_{p1}, C_{p2}) от температуры.

В этом случае к уравнениям 1, 2 и 3 системы уравнений МО (2.95) должны быть добавлены уравнения (2.99), (2.100) и (2.101), являющиеся выражениями для константы теплопередачи и теплоемкостей потоков:

$$K^T = K^T(T_1, T_2, v_1, v_2, C_{p1}, C_{p2}); \quad (2.99)$$

$$C_{p1} = a_1 + b_1 T_1 + c_1 T_1^2 + d_1 T_1^3; \quad (2.100)$$

$$C_{p2} = a_2 + b_2 T_2 + c_2 T_2^2 + d_2 T_2^3, \quad (2.101)$$

где a , b , c и d – константы для конкретных теплоносителей, значения которых доступны в справочной литературе.

В результате система уравнений МО теплообменника типа «смешение – смешение» (2.95) записывается следующим образом:

$$\begin{aligned}
 1 \quad & v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 + F^T \Delta q^T = 0; \\
 2 \quad & v_2^{(0)} C_{p2}^{(0)} T_2^{(0)} - v_2 C_{p2} T_2 + F^T (-\Delta q^T) = 0; \\
 3 \quad & \Delta q^T = K^T (T_2 - T_1); \\
 4 \quad & K^T = K^T (T_1, T_2, v_1, v_2, C_{p1}, C_{p2}); \\
 5 \quad & C_{p1} = a_1 + b_1 T_1 + c_1 T_1^2 + d_1 T_1^3; \\
 6 \quad & C_{p2} = a_2 + b_2 T_2 + c_2 T_2^2 + d_2 T_2^3.
 \end{aligned}
 \tag{2.102}$$

В данном случае из шести уравнений системы уравнений МО (2.102) возможно найти шесть определяемых переменных. Выберем переменные температуры потоков на выходе из теплообменника T_1 и T_2 , локальную интенсивность теплопередачи Δq^T , константу теплопередачи K^T и теплоемкости потоков C_{p1} и C_{p2} :

$$T_1, T_2, \Delta q^T, K^T, C_{p1}, C_{p2}. \tag{2.103}$$

Информационная матрица системы уравнений (2.102) с определяемыми переменными (2.103) представлена в табл. 2.7.

Таблица 2.7

Информационная матрица системы уравнений МО стационарного режима процесса теплопередачи в теплообменнике типа «смешение – смешение»

Номер уравнения	Определяемые переменные						Номер шага
	T_1	T_2	Δq^T	K^T	C_{p1}	C_{p2}	
1	⊕		⊕		⊕		2
2 _{кор.ур}		⊕	⊕			⊕	4
3 _{кор.ур}	⊕	⊕	⊕	⊕			6
4	⊕	⊕		⊕	⊕	⊕	5
5	⊕				⊕		1
6		⊕				⊕	3

Блок-схема алгоритма расчета составлена в соответствии с информационной матрицей (табл. 2.7) и изображена на рис. 2.14.

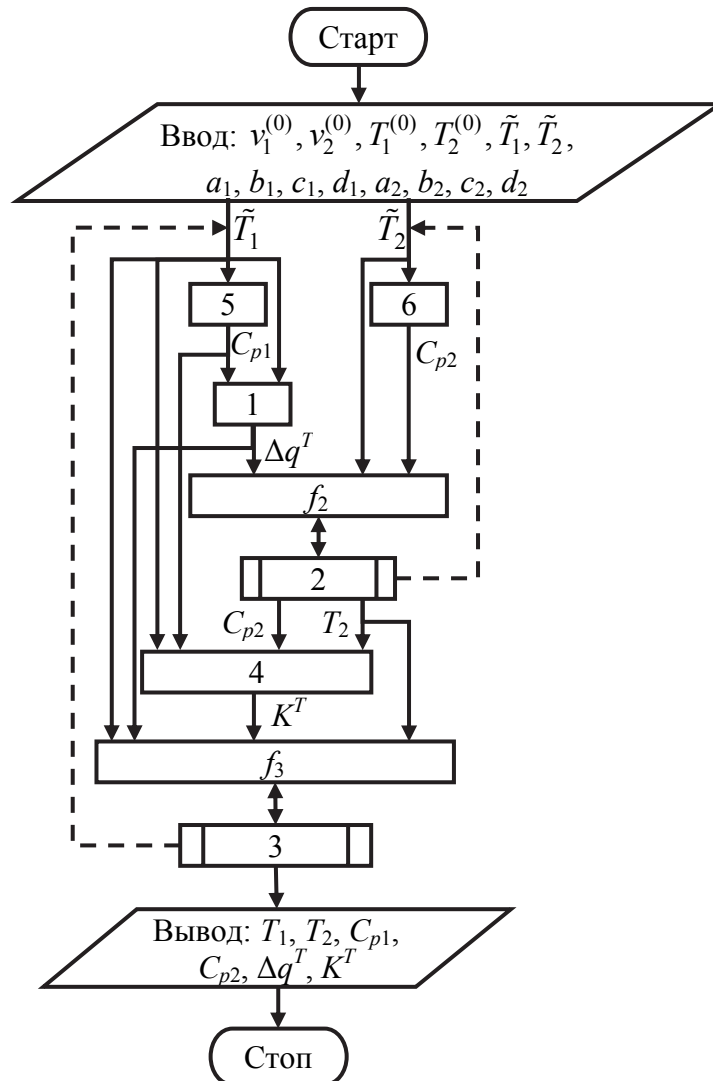


Рис. 2.14. Блок-схема алгоритма расчета стационарного режима процесса теплопередачи в теплообменнике типа «смешение – смешение»

Шаг 1 решения системы уравнений (2.102) – задание начального приближения, в данном случае – произвольное задание температуры первого потока на выходе из теплообменника T_1 и определение теплоемкости первого потока C_{p1} по уравнению 5. После этого на втором этапе вычислений (шаг 2) определяется значение локальной интенсивности теплопередачи Δq^T по уравнению 1. Шаг 3 – задание начального приближения по температуре второго потока на выходе из теплообменника T_2 и определение теплоемкости второго потока C_{p2} по уравнению 6. Шаг 4 – определение во *внутреннем итерационном цик-*

ле значения температуры второго потока на выходе из теплообменника T_2 по уравнению 2 (коррекция значения T_2):

$$f_2 \equiv v_2^{(0)} C_{p2}^{(0)} T_2^{(0)} - v_2 C_{p2} \{T_2\} T_2 - F^T \Delta q^T \{T_2\} = 0 \rightarrow T_2, \quad (2.104)$$

где f_2 – функция уравнения (2.104), решаемого относительно T_2 .

Следующий шаг (шаг 5) – определение значения константы теплопередачи K^T по уравнению 4. Последний, 6-й шаг решения – определение во *внешнем итерационном цикле* точного значения температуры первого потока на выходе из теплообменника T_1^* по уравнению 3 – коррекция значения T_1 :

$$f_3 \equiv \Delta q^T \{T_1\} - K^T \{T_1\} \cdot (T_2 \{T_1\} - T_1) = 0, \quad (2.105)$$

где f_3 – функция уравнения (2.105), решаемого относительно T_1 .

2.5.2. Математическая модель стационарного режима процесса теплопередачи в теплообменнике типа «смешение – вытеснение»

Такая модель может использоваться для описания процесса теплопередачи в резервуаре со змеевиковым теплообменником. Схематически такую систему можно изобразить, как показано на рис. 2.15.

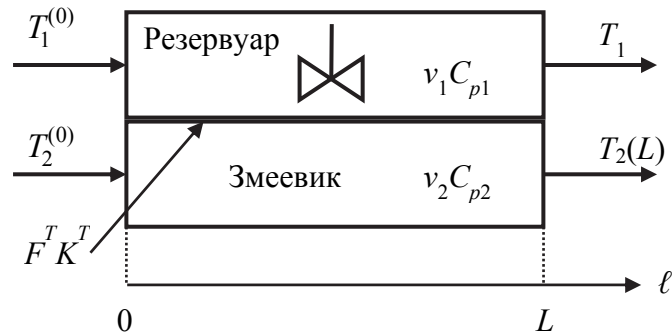


Рис. 2.15. Схематическое изображение теплообменника «смешение – вытеснение»

Эта схема включает в себя два потока теплоносителей – поток в резервуаре с начальной температурой (на входе в аппарат) $T_1^{(0)}$, конечной температурой (на выходе) T_1 , расходом v_1 , теплоемкостью C_{p1} , и поток в змеевике с начальной температурой (на входе в аппарат) $T_2^{(0)}$, конечной температурой (на выходе) $T_2(L)$, расходом v_2 , теплоемкостью C_{p2} . Длина змеевика обозначена L .

Для построения математического описания данной модели примем следующие допущения:

- поток, проходящий через резервуар, описывается гидродинамической моделью идеального смешения;
- поток в змеевике описывается гидродинамической моделью идеального вытеснения;
- рассматривается стационарный режим работы теплообменника;
- коэффициент теплопередачи считается постоянным;
- никаких процессов кроме теплопередачи не происходит;
- теплоемкости теплоносителей одинаковы и не меняются с изменением температуры.

Уравнение теплового баланса для *потока теплоносителя в резервуаре* для рассматриваемой гидродинамической модели идеального смешения записывается следующим образом (см. табл. 2.2):

$$1 \quad v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 + F^T \Delta q_1^T = 0. \quad (2.106)$$

Выражение для локальной интенсивности теплопередачи для потока теплоносителя в резервуаре:

$$2 \quad \Delta q_1^T = K^T (T_2 - T_1). \quad (2.107)$$

Уравнение теплового баланса для *потока в змеевике* (гидродинамический режим идеального вытеснения):

$$3 \quad v_2 C_{p2} \frac{dT_2}{d\ell} = \frac{F^T}{L} \Delta q_2^T. \quad (2.108)$$

Температура теплоносителя меняется по длине змеевика, для учета чего используется дифференциальное уравнение (2.108). Координата ℓ направлена вдоль движения потока теплоносителя в змеевике. Начало координат совпадает со входом теплоносителя в змеевик (рис. 2.15).

Выражение для локальной интенсивности теплопередачи для потока теплоносителя в змеевике:

$$4 \quad \Delta q_2^T = K^T (T_1 - T_2). \quad (2.109)$$

С учетом равенства (2.94) выведем уравнение общего теплового баланса в резервуаре:

$$v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 + [F^T \Delta q^T]_{\text{ср}} = 0. \quad (2.110)$$

В уравнении (2.110) произведение $[F^T \Delta q^T]_{\text{ср}}$ представляет собой усредненную по длине змеевика скорость теплопередачи.

Уравнение теплового баланса для потока в змеевике (2.108) записывается через Δq^T с учетом (2.94) следующим образом (табл. 2.1 и 2.2):

$$v_2 C_{p2} \frac{dT_2}{d\ell} = \frac{F^T}{L} (-\Delta q^T). \quad (2.111)$$

Для того чтобы определить усредненную скорость теплопередачи в рассматриваемой модели теплообменника, необходимо найти площадь криволинейной трапеции под линией $[F^T \Delta q^T]$ на рис. 2.16, т. е. проинтегрировать функцию $[F^T \Delta q^T]$ по длине змеевика и разделить на длину змеевика, в результате чего получается усредненное значение скорости теплопередачи $[F^T \Delta q^T]_{\text{ср}}$:

$$[F^T \Delta q^T]_{\text{ср}} = \frac{1}{L} \int_0^L F^T \Delta q^T d\ell. \quad (2.112)$$

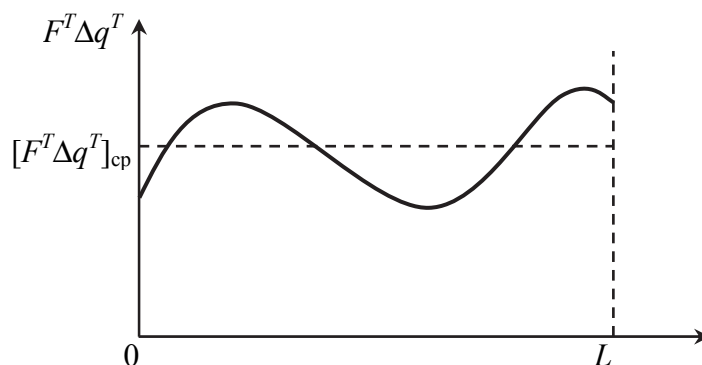


Рис. 2.16. Зависимость функции $[F^T \Delta q^T]$ от длины змеевика

При интегрировании (2.112) с учетом (2.111) будет справедливо:

$$[F^T \Delta q^T]_{\text{ср}} = -v_2 C_{p2} \int_0^L \frac{dT_2}{d\ell} d\ell = -v_2 C_{p2} [T_2(L) - T_2(0)]. \quad (2.113)$$

Подставляя выражение для функции $[F^T \Delta q^T]_{\text{ср}}$ (2.113) в (2.110), получаем уравнение общего теплового баланса для змеевикового теплообменника:

$$v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 - v_2 C_{p2} [T_2(L) - T_2(0)] = 0. \quad (2.114)$$

Система уравнений МО рассматриваемой модели теплообменника таким образом будет состоять из следующих уравнений:

- уравнения общего теплового баланса (2.114);
- обыкновенного дифференциального уравнения в явном виде для потока теплоносителя в змеевике (2.108);

– выражения для локальной скорости теплопередачи

$$\Delta q^T = K^T (T_1 - T_2). \quad (2.115)$$

Кроме этого, для решения дифференциального уравнения (2.108) (вычисления частного решения на компьютере) к данной системе уравнений МО необходимо добавить начальное условие:

$$2' \quad T_2(0) = T_2^{(0)}. \quad (2.116)$$

Таким образом, система уравнений математического описания стационарного режима теплопередачи в теплообменнике типа «смешение – вытеснение» будет состоять из четырех уравнений:

$$\begin{aligned} 1 \quad & v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 - v_2 C_{p2} [T_2(L) - T_2(0)] = 0; \\ 2 \quad & v_2 C_{p2} \frac{dT_2}{d\ell} = \frac{F^T}{L} (-\Delta q^T); \\ 3 \quad & \Delta q^T = K^T (T_1 - T_2); \\ 2' \quad & T_2(0) = T_2^{*(0)}. \end{aligned} \quad (2.117)$$

В качестве определяемых переменных для решения системы уравнений (2.117) выбираются: функции зависимости температуры теплоносителя в змеевике и локальной скорости теплопередачи от длины змеевика (рис. 2.17), температура теплоносителя в резервуаре и начальная температура теплоносителя в змеевике:

$$T_2 = T_2(\ell), \Delta q^T(\ell), T_1, T_2(0). \quad (2.118)$$

В данном случае дополнительное условие 2' задается при одном значении независимой переменной, т. е. решается задача Коши. Решение $T_2 = T_2(\ell)$ дифференциального уравнения 2 схематически показано на рис. 2.17.

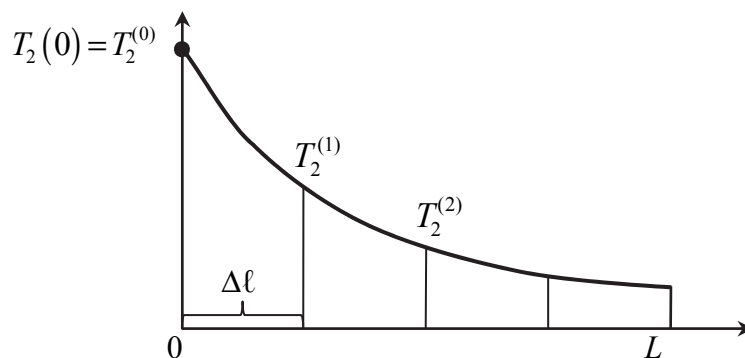


Рис. 2.17. Зависимость температуры теплоносителя в змеевике от длины змеевика

Уравнение 2 для решения на компьютере представляется в конечно-разностной форме с использованием явной схемы Эйлера. Согласно нумерации системы (2.117) это будет уравнение 2*:

$$2^* \quad \frac{T_2^{(k+1)} - T_2^{(k)}}{\Delta \ell} \cong \frac{F^T}{Lv_2 C_{p2}} (-\Delta q^{T(k)}) \equiv f_2, \quad (2.119)$$

где f_2 – правая часть дифференциального уравнения (2.111) и конечно-разностного уравнения (2.119). Последнее уравнение записано для малого интервала длины змеевика. Вся длина змеевика разбивается на n интервалов одинаковой длины

$$\Delta \ell = \frac{L}{n}, \quad (2.120)$$

чему на координатной оси ℓ будет соответствовать $(n + 1)$ точка с индексом k , начинающимся с 0 (при $\ell = 0$) и заканчивающимся n (при $\ell = L$). Эти точки называют также узловыми точками или узлами сетки для численного решения дифференциальных уравнений. Уравнение (2.119) записывается для каждого интервала k , номер которого в соответствии с (2.119) будет меняться от 0 до $(n - 1)$. Для численного решения системы фактически должно быть записано n конечно-разностных уравнений 2*, $(n + 1)$ уравнений 3 (2.117), одно уравнение для граничного условия 2' и одно уравнение для теплового баланса в резервуаре 1. Всего получается $2(n+1)+1$ уравнений, из которых можем определить такое же число неизвестных. Такими неизвестными будут значения температуры теплоносителя в змеевике и локальной интенсивности теплопередачи в узловых точках змеевика $T_2^{(k)}$, $\Delta q^{T(k)}$ ($k = 0, \dots, n$), температура теплоносителя в резервуаре T_1 . Система уравнений будет выглядеть так:

$$\begin{aligned} 1 \quad & v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 - v_2 C_{p2} [T_2^{(n)} - T_2^{(0)}] = 0; \\ 2^* \quad & \frac{T_2^{(k+1)} - T_2^{(k)}}{\Delta \ell} = \frac{F^T}{Lv_2 C_{p2}} (-\Delta q^{T(k)}), \quad (k = 0, \dots, n-1); \\ 3 \quad & \Delta q^{T(k)} = K^T (T_1 - T_2^{(k)}), \quad (k = 0, \dots, n); \\ 2' \quad & T_2^{(0)} = T_2^{*(0)}. \end{aligned} \quad (2.121)$$

Здесь в уравнении 1 значения температуры теплоносителя в начале и в конце змеевика представляют собой значения температуры в узловых точках 0 и n , соответственно.

Значения переменных T_2 и Δq в узловых точках находят последовательно, начиная от $k = 0$ из уравнений 2*, 3 и 2'. При этом необходимо использовать значение температуры в резервуаре T_1 , которое неизвестно. Поэтому расчет начинается с начального приближения для температуры в резервуаре \tilde{T}_1 , которое впоследствии корректируется с использованием уравнения 1 (табл. 2.8). При этом процедура решения дифференциального уравнения, выражаемая на блок-схеме (рис. 2.18) алгоритмическим блоком «2*», входит в состав функции, вычисляющей левую часть корректирующего уравнения 1 (табл. 2.8).

В информационной матрице системы уравнений МО стационарного режима процесса теплопередачи в теплообменнике типа «смешение – вытеснение» (табл. 2.8) уравнение 1 (корректирующее уравнение) – это внешний цикл решения задачи; уравнение 2* (цикл решения дифференциального уравнения) – это внутренний цикл решения задачи. Вычисления, соответствующие 4-му шагу, проводятся после повторения шагов 1–3 для всех узловых точек, чтобы вычислить значение T_2 в последней узловой точке $T_2^{(n)}$, которое используется в уравнении 1.

Таблица 2.8

Информационная матрица системы уравнений МО стационарного режима процесса теплопередачи в теплообменнике типа «смешение – вытеснение»

Номер уравнения	Определяемые переменные				Номер шага
	T_1	$T_2^{(k)}(T_2^{(0)})$	$T_2^{(k+1)}(T_2^{(n)})$	Δq^T	
1 _{кор.ур}	⊕	⊕	⊕		4
2*		⊕	⊕	⊕	3
3	⊕	⊕		⊕	2
2'		⊕			1

Функция f_1 (рис. 2.17) представляется в следующем виде:

$$f_1(T_1) = v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 - v_2 C_{p2} [T_2^{(n)} \{T_1\} - T_2^{(0)}], \quad (2.122)$$

где $T_2^{(n)} \{T_1\}$ представляет собой программную функцию от неизвестной T_1 , включающую в себя алгоритм решения дифференциального уравнения 2 путем последовательных вычислений всех значений пере-

менных T_1 и Δq^T в узловых точках. Функция f_2 (рис. 2.18) представляет собой программную функцию вычисления правой части уравнения 2* (2.121) в зависимости от T_2 , вычисляемую по шагам 1 и 2 (табл. 2.8):

$$f_2(T_2) = \frac{F^T}{Lv_2C_{p2}}(-\Delta q^T\{T_2\}). \quad (2.123)$$

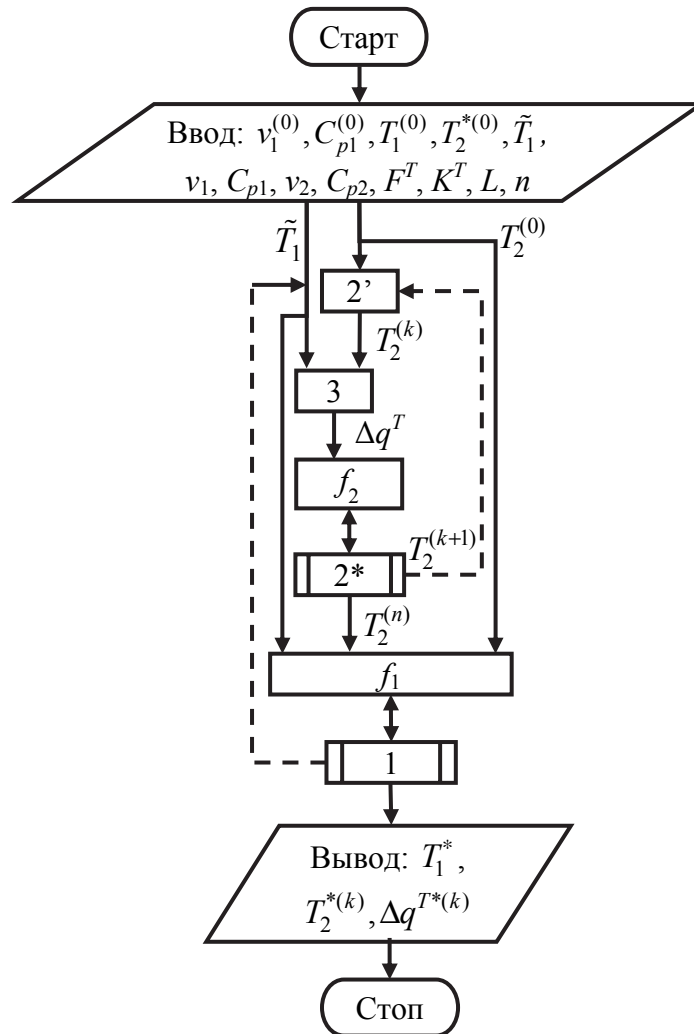


Рис. 2.18. Блок-схема алгоритма расчета стационарного режима процесса теплопередачи в теплообменнике типа «смешение – вытеснение»

В соответствии с выбранным алгоритмом решения задачи (рис. 2.18) во *внешнем цикле* решения может быть применен, например, метод половинного деления для решения одного уравнения (2.120). Во *внутреннем цикле* решается дифференциальное уравнение (2.111) или, соответственно, (2.119) (например, методом Эйлера) при каждом очередном приближении T_1 .

2.6. Математические модели процессов химических превращений

Химические реакторы являются основными аппаратами в химической технологии. В них в результате химических превращений из исходных веществ получают целевые продукты. Скорость химических реакций описывается на основе известных законов: закона действующих масс, описывающего влияние концентрации реагирующих веществ на скорость реакции, и уравнения Аррениуса, которое описывает влияние температуры на скорость реакции. Однако эти уравнения применимы для описания микрокинетики реакции, т. е. для описания закономерностей скорости реакции в единице объема или для единицы поверхности реагирующей системы. При описании макрокинетики процессов в химических реакторах уравнения микрокинетики составляют только часть описания. Основу математического описания процессов в химических реакторах составляют уравнения балансов (табл. 2.2). Уравнения микрокинетики используют для задания интенсивностей источников вещества и теплоты (табл. 2.1) в уравнениях балансов.

Химические реакторы бывают разных типов и видов, число которых очень велико. Можно предложить следующие признаки, по которым классифицируют химические реакторы:

- режим движения реакционной среды (реакторы смешения, трубчатые реакторы);
- условия теплообмена между реактором и окружающей средой (изотермические, адиабатические);
- метод организации теплообмена (реакторы с внешним теплообменом, реакторы с внутренним теплообменом, автотермические реакторы);
- фазовый состав реакционной смеси (реакторы для гомогенных процессов: газофазные, жидкофазные; реакторы для гетерогенных процессов: газожидкостные и т. д.);
- метод организации процесса (периодические, непрерывные, полупериодические);
- характер изменения параметров процесса во времени (стационарные и нестационарные);
- конструкционные характеристики (емкостные реакторы, колонные реакторы, реакторы-теплообменники, реакционные печи, автоклавы и т. д.).

Для целей моделирования следует выделить следующие виды реакторов:

– по режиму движения реакционной среды: *реакторы с мешалкой* и *трубчатые реакторы*;

– по условиям теплообмена: *адиабатические* и *изотермические*;

– по организации процесса: *периодические*, *непрерывные* и *полупериодические*.

Реакторы с мешалкой представляют собой резервуары, снабженные перемешивающими устройствами (мешалками или насосами). Как правило, перемешивание осуществляется настолько интенсивно, что обеспечивает равномерность состава и температуры в объеме реактора. Такие реакторы также называют *реакторами идеального смешения*. Для математического описания процессов в таких реакторах можно использовать модель идеального смешения. При принятии допущения об идеальном перемешивании реакционной смеси реактор с мешалкой рассматривается как объект с сосредоточенными параметрами, и задача математического моделирования заключается в определении параметров выходного потока в стационарном и нестационарном режимах.

Трубчатые реакторы представляют собой полую трубу или систему из таких труб, через которые непрерывно проходит реакционная смесь. Для математического описания таких реакторов можно использовать модель идеального вытеснения или однопараметрическую диффузионную модель. При использовании модели идеального вытеснения часто пользуются термином *реактор идеального вытеснения*. Он представляет собой длинный канал, через который реакционная смесь движется в поршневом режиме. Каждый элемент потока, условно выделенный двумя плоскостями, перпендикулярными оси канала, движется через него как твердый поршень, вытесняя предыдущие элементы потока и не перемешиваясь ни с предыдущими, ни со следующими за ним элементами.

Идеальное вытеснение возможно при выполнении следующих допущений:

– движущийся поток имеет плоский профиль линейных скоростей;

– отсутствует обусловленное любыми причинами перемешивание в направлении оси потока;

– в каждом отдельно взятом сечении, перпендикулярном оси потока, параметры процесса (концентрации, температуры и т. д.) полностью выровнены.

Следует отметить, что строго эти допущения в реальных реакторах не выполняются.

Поэтому более предпочтительным является использование однопараметрической диффузионной модели для описания движения потока реакционной смеси в трубчатых реакторах. В отличие от модели идеального вытеснения, в этой модели учитывается наличие перемешивания реакционной среды в осевом направлении, вызванного продольной диффузией.

Изотермические реакторы – это реакторы, в которых температура поддерживается постоянной. Такой тип реакторов иногда называют *реактор с рубашкой*. *Адиабатические реакторы* – это реакторы, в которых отсутствует теплообмен с окружающей средой.

Периодические реакторы – это реакторы, в которых реагенты подаются в реактор перед началом реакции, продукты отводятся из реактора после завершения реакции: время пребывания реагентов в реакторе и время реакции совпадают. *Непрерывные реакторы* – это реакторы, в которых подвод реагентов и отвод продуктов реакции осуществляются в одно и то же время непрерывно или параллельно: время пребывания реагентов в реакторе и время реакции, как правило, не совпадают. *Полупериодические реакторы* – это реакторы, в которых подвод некоторых реагентов или отвод некоторых продуктов осуществляется непрерывно, а других – периодически.

2.6.1. Описание микрокинетики химических реакций

Рассмотрим протекающие в гомогенном химическом реакторе процессы в общем случае с участием n компонентов и m элементарных химических реакций. При этом компоненты будем нумеровать индексом i , который меняется от 1 до n , а химические реакции в системе – индексом j , меняющимся от 1 до m .

Для математического описания процессов используем более четкие понятия скоростей реакций. Вначале определим скорость образования (расходования) некоторого i -го компонента за счет всех реакций в системе (локальная интенсивность источника вещества данного компонента за счет химических реакций, табл. 2.1):

$$g_i^R = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} r_j, \quad (2.124)$$

где r_j – скорость j -й химической реакции, записанной в расчете на 1 моль любого компонента данной реакции; α_{ij} – стехиометрический коэффициент i -го компонента в j -й химической реакции, причем, если

i -й компонент является продуктом j -й реакции, то $\alpha_{ij} > 0$ (компонент образуется и его количество в системе увеличивается), если i -й компонент – реагент j -й реакции, то $\alpha_{ij} < 0$ (компонент расходуется в реакции и его количество в системе уменьшается), если i -й компонент не участвует в j -й реакции, то $\alpha_{ij} = 0$. Локальная интенсивность g_i^R может быть как положительной, так и отрицательной величиной. Совокупность стехиометрических коэффициентов α_{ij} образует прямоугольную матрицу стехиометрических коэффициентов для всех компонентов и химических реакций в системе:

$$\bar{\alpha} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \cdots & \alpha_{1m} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \cdots & \alpha_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \cdots & \alpha_{nm} \end{bmatrix}. \quad (2.125)$$

Скорость химической реакции записывается на основе закона действующих масс

$$r_j = k_j \prod_{i=1}^n x_i^{\beta_{ij}}, \quad (2.126)$$

где k_j – константа скорости j -й реакции; x_i – концентрация i -го компонента в системе; β_{ij} – стехиометрический коэффициент i -го компонента как реагента в j -й реакции, причем $\beta_{ij} = -\alpha_{ij}$, если i -й компонент – реагент в j -й химической реакции и $\beta_{ij} = 0$, если i -й компонент – продукт в j -й химической реакции или не участвует в ней. Скорость r_j – только положительная величина.

Выражения для локальных интенсивностей источников вещества в системе за счет химических реакций (2.124) можно записать в матричном виде, если ввести вектор-столбец локальных интенсивностей источников вещества для компонентов системы $\bar{g}^R = [g_1^R, g_2^R, \dots, g_n^R]$ и вектор-столбец скоростей реакций $\bar{r} = [r_1, r_2, \dots, r_m]$:

$$\begin{bmatrix} g_1^R \\ g_2^R \\ \vdots \\ g_n^R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \cdots & \alpha_{1m} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \cdots & \alpha_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \cdots & \alpha_{nm} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_m \end{bmatrix} \quad (2.127)$$

или

$$\bar{g}^R = \bar{\alpha} \cdot \bar{r}. \quad (2.128)$$

Константы скоростей реакций в уравнении (2.126) можно выразить по уравнению Аррениуса для учета влияния температуры на скорость реакции:

$$k_j = A_j \cdot e^{-\frac{E_j}{RT}}, \quad (2.129)$$

где A_j , E_j – предэкспоненциальный множитель и энергия активации, соответственно, для скорости j -й реакции. Константы скорости, предэкспоненциальные множители и энергии активации также можно представлять в виде векторов, обозначаемых соответственно \bar{k} , \bar{A} , \bar{E} .

2.6.2. Математическая модель стационарного режима процесса в реакторе с мешалкой и рубашкой

Реактор с мешалкой и рубашкой означает, что при составлении уравнений балансов используется гидродинамическая модель идеального смешения и процессы протекают при постоянной температуре (изотермические процессы). Схема такого реактора представлена на рис. 2.19.

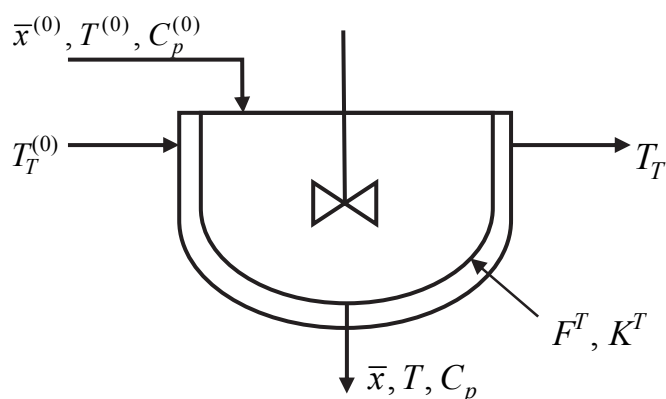


Рис. 2.19. Схема реактора с мешалкой и рубашкой

Для построения математической модели химического превращения в реакторе в стационарном состоянии принимаются следующие допущения:

- движение потоков реакционной смеси в реакторе (основной поток) и теплоносителя в рубашке (вспомогательный поток) представляется гидродинамическими моделями идеального смешения;
- параметры потока теплоносителя в рубашке (обозначаются нижним индексом T) постоянны, кроме температуры;
- учитываем только процессы химических превращений и теплопередачи в системе;

– коэффициент и поверхность теплопередачи между основным и вспомогательным потоками являются постоянными.

Уравнение баланса массы i -го компонента в реакторе будет иметь вид (табл. 2.2):

$$v^{(0)}x_i^{(0)} - vx_i + V^R g_i^R = 0. \quad (2.130)$$

Число компонентов в системе равно n , следовательно $i = 1, \dots, n$. Уравнение общего баланса массы запишется так:

$$v^{(0)} - v + V^R \sum_{i=1}^n g_i^R = 0. \quad (2.131)$$

Уравнение теплового баланса в реакторе будет выглядеть так:

$$v^{(0)}C_p^{(0)}T^{(0)} - vC_pT + V^R \Delta q^R + F^T \Delta q^T = 0. \quad (2.132)$$

Уравнение теплового баланса для теплоносителя в рубашке:

$$v_T^{(0)}C_{pT}T_T^{(0)} - v_T C_{pT}T_T + V_T (-\Delta q^T) = 0, \quad (2.133)$$

где V_T – объем теплоносителя в рубашке. Обозначения остальных величин приведены в подразделе 2.2.

В систему уравнений математического описания следует также включить уравнения для локальных интенсивностей источников вещества (2.124), теплоты (2.9) и (2.16). Зависимость теплоемкости реагирующей смеси в реакторе от состава можно выразить следующим модельным уравнением:

$$C_p \approx \sum_{i=1}^n C_{pi} x_i, \quad (2.134)$$

где C_{pi} – теплоемкость индивидуального i -го компонента. Кроме того учтем, что теплоемкости компонентов зависят от температуры согласно известному эмпирическому кубическому закону:

$$C_{pi} = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3, \quad (2.135)$$

где a_i, b_i, c_i, d_i – коэффициенты зависимостей, приводимые в справочниках.

Таким образом, система уравнений математического описания стационарного режима процесса в реакторе с мешалкой и рубашкой будет состоять из n уравнений балансов массы по каждому компоненту, n уравнений для локальных интенсивностей источников вещества каждого компонента, n уравнений для теплоемкостей компонентов, m

уравнений для скоростей реакций, m уравнений для констант скоростей реакций, по одному уравнению общего баланса массы в реакторе, общей теплоемкости реакционной смеси в реакторе, теплового баланса в реакторе, теплового баланса в рубашке, локальной интенсивности источника теплоты за счет реакции и за счет теплопередачи:

$$\begin{aligned}
 \bar{1} \quad & v^{(0)}x_i^{(0)} - vx_i + V^R g_i^R = 0; \\
 \bar{2} \quad & g_i^R = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} r_j; \\
 \bar{3} \quad & r_j = k_j \prod_{i=1}^n x_i^{\beta_{ij}}; \\
 \bar{4} \quad & k_j = A_j e^{-\frac{E_j}{RT}}; \\
 5 \quad & v^{(0)} - v + V^R \sum_{i=1}^n g_i^R = 0; \\
 6 \quad & v^{(0)}C_p^{(0)}T^{(0)} - vC_p T + V^R \Delta q^R + F^T \Delta q^T = 0; \quad (2.136) \\
 7 \quad & \Delta q^R = \sum_{j=1}^m |\alpha_{pj}| (-\Delta H_{pj}^R) r_j; \\
 8 \quad & \Delta q^T = K^T (T_T - T); \\
 9 \quad & C_p \approx \sum_{i=1}^n C_{pi} x_i; \\
 \bar{10} \quad & C_{pi} = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3; \\
 11 \quad & v_T^{(0)} C_{pT} T_T^{(0)} - v_T C_{pT} T_T - F^T \Delta q^T = 0.
 \end{aligned}$$

Данная система состоит из $(3n + 2m + 6)$ уравнений и представляет собой систему конечных уравнений. В качестве определяемых переменных выберем концентрации компонентов в реакторе (x_i), локальные интенсивности источников вещества компонентов (g_i^R), теплоемкости индивидуальных компонентов (C_{pi}), скорости и константы скорости реакций (r_i и k_i), объем, температуру и теплоемкость реагирующей смеси в реакторе (V^R , T и C_p), локальные интенсивности источников теплоты за счет химических реакции и теплопередачи (Δq^R и Δq^T) и температуру теплоносителя в рубашке (T_T) – всего $(3n + 2m + 6)$ переменных. Информационная матрица данной системы представлена в табл. 2.9, а соответствующая блок-схема алгоритма решения – на рис. 2.20.

Таблица 2.9

**Информационная матрица системы уравнений МО
стационарного режима процесса в реакторе с мешалкой и рубашкой**

Номер уравнения	Определяемые переменные											Номер шага
	\bar{x}	\bar{g}^R	\bar{r}	\bar{k}	T	Δq^T	Δq^R	C_p	V^R	\bar{C}_p	T_T	
$\bar{1}_{\text{кор.ур}}$	⊕	⊕			◇				⊕			6
$\bar{2}$		⊕	⊕									4
$\bar{3}$	⊕		⊕	⊕								3
$\bar{4}$				⊕	⊕							1
5		⊕							⊕			5
6					⊕	⊕	⊕	⊕	⊕			9
7			⊕				⊕					8
8					⊕	⊕					⊕	10
9	⊕							⊕		⊕		7
$\bar{10}$					⊕					⊕		2
$11_{\text{кор.ур}}$	◇				◇	⊕					⊕	11

Рассмотрим алгоритм решения системы, в соответствии с крайним правым столбцом матрицы. На 1-м шаге задается начальное приближение для температуры в реакторе T и вычисляется вектор констант скоростей реакций \bar{k} по уравнениям $\bar{4}$. На 2-м шаге из T вычисляется вектор теплоемкостей компонентов \bar{C}_p по уравнениям $\bar{10}$. На 3-м шаге задается начальное приближение вектора концентраций компонентов \bar{x} и находится вектор скоростей реакций \bar{r} . Далее последовательность вычислений в соответствии с крайним правым столбцом информационной матрицы приводит к системе корректирующих уравнений $\bar{1}$ и 11 для переменных \bar{x} и T . Таким образом, размерность системы уравнений (2.136) снижается до $(n + 1)$ -го уравнения.

$$\bar{f}_1(\bar{x}, T) = v^{(0)}\bar{x}^{(0)} - v\bar{x} + V^R\{\bar{x}, T\} \cdot \bar{g}^R\{\bar{x}, T\} \quad (2.137)$$

и обычной функции

$$f_{11}(\bar{x}, T) = v_T^{(0)}C_{pT}T_T^{(0)} - v_T C_{pT}T_T\{\bar{x}, T\} - F^T \Delta q^T(\bar{x}, T). \quad (2.138)$$

Эти функции будут зависеть от корректируемых переменных и представлять собой последовательность вычислений в соответствии с правым столбцом информационной матрицы. Решение системы полученных корректирующих уравнений можно организовать в виде двух вложенных циклов (рис. 2.19). Во внутреннем цикле проводится решение системы уравнений $\bar{1}$ с использованием вектор-функции (2.137) и алгоритмического блока « $\bar{1}$ » при заданном значении переменной T , которое задается во внешнем цикле решения уравнения 11 с использованием функции (2.138). При этом функция (2.138) должна зависеть только от T и включать в себя алгоритмический блок « $\bar{1}$ » с внутренним циклом вычисления вектора концентраций \bar{x} .

2.6.3. Математическая модель стационарного режима процесса в трубчатом реакторе с рубашкой

Трубчатый реактор предполагает использование гидродинамической модели идеального вытеснения (табл. 2.2) при составлении уравнений балансов. В таком реакторе концентрации компонентов, температура и другие переменные изменяются по длине реактора. Рубашка указывает на использование теплоносителя для контроля температуры в реакторе. Будем считать, что поток в рубашке для трубчатого реактора будет также описываться моделью идеального вытеснения и температура теплоносителя будет меняться по длине реактора и рубашки. Схема такого реактора может быть представлена рис. 2.21.

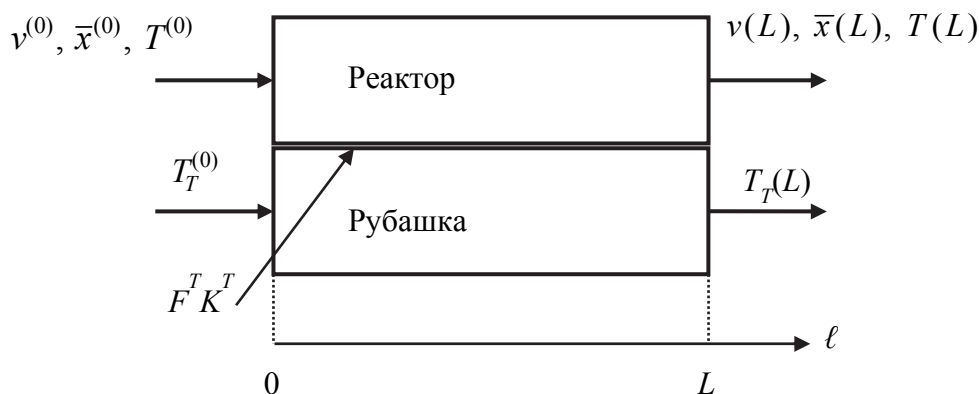


Рис. 2.21. Схема трубчатого реактора с рубашкой

Перечислим основные допущения, используемые при построении математической модели такого реактора:

1) движение реакционной смеси в реакторе и потока теплоносителя в рубашке представляется гидродинамическими моделями идеального вытеснения;

2) параметры потока теплоносителя в рубашке постоянны, кроме температуры потока теплоносителя в рубашке;

3) реакции в реакторе – гомогенные, без фазовых переходов;

4) тепловые эффекты реакции не зависят от температуры.

5) коэффициент теплопередачи – постоянен.

Система уравнений математического описания будет включать те же уравнения, что и для реактора с мешалкой и рубашкой (2.136), только уравнения балансов записываются для гидродинамической модели идеального вытеснения (табл. 2.2). Эти уравнения представляют собой обыкновенные дифференциальные уравнения первого порядка, и решение данной системы будет представлять собой функции зависимости определяемых переменных по длине реактора, т. е. функции от переменной ℓ .

Уравнения баланса массы по компонентам будут выглядеть так:

$$\frac{d(vx_i)}{d\ell} = \frac{V^R}{L} g_i^R, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.139)$$

Уравнение общего баланса массы запишется так:

$$\frac{dv}{d\ell} = \frac{V^R}{L} \sum_{i=1}^n g_i^R. \quad (2.140)$$

Уравнение теплового баланса в реакторе учитывает два процесса – химическое превращение и теплопередачу:

$$\frac{d(vT)}{d\ell} = \frac{V^R}{C_p L} \Delta q^R + \frac{F^T}{C_p L} \Delta q^T, \quad (2.141)$$

а уравнение теплового баланса в рубашке – только теплопередачу:

$$\frac{dT_T}{d\ell} = \frac{F^T}{C_{pT} L v_T} (-\Delta q^T). \quad (2.142)$$

Для получения частного решения дифференциального уравнения необходимо задать в данном случае одно граничное условие. Такими условиями для уравнений (2.139)–(2.142) будут значения переменных на входе в реактор, т. е. при $\ell = 0$:

$$\bar{x}(0) = \bar{x}^{(0)}; v(0) = v^{(0)}; T(0) = T^{(0)}; T_T(0) = T_T^{(0)}. \quad (2.143)$$

Для сокращения числа определяемых переменных в системе (2.136) подставим уравнения $\bar{4}$ в $\bar{3}$, а $\bar{3}$ в $\bar{2}$ и 7. Также подставим уравнение 8 в 6 и 11, а уравнения $\bar{10}$ в 9. В итоге число уравнений и определяемых переменных в системе уменьшится на $(n + 2m + 1)$, и после замены балансовых уравнений получим следующую систему уравнений математического описания процессов в трубчатом реакторе с рубашкой:

$$\begin{aligned} \bar{1} \quad & \frac{d(vx_i)}{d\ell} = \frac{V^R}{L} g_i^R; \\ \bar{2} \quad & g_i^R = \sum_{j=1}^m \left(\alpha_{ij} A_j e^{-\frac{E_j}{RT}} \prod_{i=1}^n x_i^{\beta_{ij}} \right); \\ 3 \quad & \frac{dv}{d\ell} = \frac{V^R}{L} \sum_{i=1}^n g_i^R; \\ 4 \quad & \frac{d(vT)}{d\ell} = \frac{V^R}{C_p L} \Delta q^R + \frac{F^T}{C_p L} K^T (T_T - T); \\ 5 \quad & \Delta q^R = \sum_{j=1}^m \left(|\alpha_{pj}| (-\Delta H_{pj}^R) A_j e^{-\frac{E_j}{RT}} \prod_{i=1}^n x_i^{\beta_{ij}} \right); \\ 6 \quad & C_p \approx \sum_{i=1}^n (a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3) x_i; \\ 7 \quad & \frac{dT_T}{d\ell} = \frac{F^T}{C_{pT} L v_T} (-K^T (T_T - T)). \end{aligned} \quad (2.144)$$

Всего получилось $(2n + 5)$ уравнений. Определяемыми неизвестными будут функции

$$x_i(\ell), g_i^R(\ell), v(\ell), T(\ell), \Delta q^R(\ell), C_p(\ell), T_T(\ell). \quad (2.145)$$

Для численного решения дифференциальных уравнений необходимо разбить отрезок $[0; L]$ на n равных интервалов длиной $\Delta\ell$ и искать значения переменных в узловых точках, являющихся границами интервалов. Для решения этой задачи нужно для каждого интервала записать дифференциальные уравнения в конечно-разностном виде, а остальные уравнения записать для каждой узловой точки. Для составления конечно-разностных уравнений будем использовать явную схе-

му Эйлера, отличающуюся простым алгоритмом вычислений. С учетом граничных условий (2.143) получим следующую систему конечных уравнений:

$$\begin{aligned}
\bar{1}^* \quad & \frac{v^{(k+1)}\bar{x}^{(k+1)} - v^{(k)}\bar{x}^{(k)}}{\Delta\ell} = \frac{V^R}{L} \bar{g}^{R(k)}; \\
\bar{1} \quad & \bar{x}^{(k)} = \bar{x}^{*(k)}; \\
\bar{2} \quad & \bar{g}^{R(k)} = \sum_{j=1}^m \left(\alpha_{ij} A_j e^{-\frac{E_j}{RT^{(k)}}} \prod_{i=1}^n (x_i^{(k)})^{\beta_{ij}} \right); \\
3 \quad & \frac{v^{(k+1)} - v^{(k)}}{\Delta\ell} = \frac{V^R}{L} \sum_{i=1}^n g_i^{R(k)}; \\
3' \quad & v^{(k)} = v^{*(k)}; \\
4 \quad & \frac{v^{(k+1)}T^{(k+1)} - v^{(k)}T^{(k)}}{\Delta\ell} = \frac{V^R}{C_p^{(k)}L} \Delta q^{R(k)} + \frac{F^T}{C_p^{(k)}L} K^T (T_T^{(k)} - T^{(k)}); \quad (2.146) \\
4' \quad & T^{(k)} = T^{*(k)}; \\
5 \quad & \Delta q^{R(k)} = \sum_{j=1}^m \left(\left| \alpha_{pj} \right| (-\Delta H_{pj}^R) A_j e^{-\frac{E_j}{RT^{(k)}}} \prod_{i=1}^n (x_i^{(k)})^{\beta_{ij}} \right); \\
6 \quad & C_p^{(k)} \approx \sum_{i=1}^n \left(a_i + b_i T^{(k)} + c_i (T^{(k)})^2 + d_i (T^{(k)})^3 \right) x_i^{(k)}; \\
7 \quad & \frac{T_T^{(k+1)} - T_T^{(k)}}{\Delta\ell} = \frac{F^T}{C_{pT} L v_T} (-K^T (T_T^{(k)} - T^{(k)})); \\
7' \quad & T_T^{(k)} = T_T^{*(k)}.
\end{aligned}$$

Данную систему можно рассматривать как систему 11 уравнений, записанную для каждого интервала, нумеруемого индексом k от 0 до $(n-1)$. При этом уравнения для начальных условий $\bar{1}'$, $3'$, $4'$, $7'$ означают тот факт, что на каждом цикле вычислений для интервала под номером k значения переменных \bar{x} , v , T , T_T будут вычислены на предыдущем цикле, а для $k=0$ значения этих переменных даны как граничные условия (2.143).

Алгоритм решения системы с дифференциальными уравнениями, записанными с использованием явной схемы Эйлера, достаточно прост и заключается в последовательном вычислении значений переменных, входящих в дифференциальные уравнения (\bar{x} , v , T , T_T) для

$(k + 1)$ -го интервала на основе значений этих переменных для k -го интервала. Информационная матрица системы (2.146), приведенная в табл. 2.10, позволяет наглядно определить последовательность таких вычислений в крайнем правом столбце.

Таблица 2.10

Информационная матрица системы уравнений МО стационарного режима процесса в трубчатом реакторе с рубашкой

Номер уравнения	Определяемые переменные											Номер шага
	$\bar{x}^{(k+1)}$	$\bar{x}^{(k)}$	$\bar{g}^{R(k)}$	$v^{(k+1)}$	$v^{(k)}$	$T^{(k+1)}$	$T^{(k)}$	$\Delta q^{R(k)}$	$C_p^{(k)}$	$T_T^{(k+1)}$	$T_T^{(k)}$	
$\bar{1}^*$	◇+	⊕	⊕	⊕	⊕							10
$\bar{1}'$		◇+										1
$\bar{2}$		⊕	◇+				⊕					5
3^*			⊕	◇+	⊕							9
$3'$					◇+							2
4^*				⊕	⊕	◇+	⊕	⊕	⊕		⊕	11
$4'$							◇+					3
5		⊕					⊕	◇+				6
6		⊕					⊕		◇+			7
7^*							⊕			◇+	⊕	8
$7'$											◇+	4

Шаги 1–4 могут выполняться в любом порядке или параллельно, что и изображается на блок-схеме алгоритма расчета (рис. 2.22). Также параллельно могут выполняться шаги 5–8, в которых вычисляются переменные $\bar{g}^{R(k)}$, $\Delta q^{R(k)}$, $C_p^{(k)}$, $T_T^{(k+1)}$ из уравнений $\bar{2}$, 5, 6 и 7^* , соответственно. Блок « $f_{1,3,5,7}$ » представляет собой программную функцию, включающую в себя всю последовательность шагов 1–10 (табл. 2.10) и заканчивающуюся вычислением значений переменных \bar{x} , v , T , T_T

для следующего интервала длины реактора. Алгоритмический блок, обозначенный на блок-схеме «1*, 3*, 4*, 7*», представляет собой программную процедуру, выполняющую сохранение значений переменных, полученных для текущего k -го интервала длины реактора, и обеспечивающую повторение цикла расчетов с использованием функции « $f_{1,3,5,7}$ » для следующего интервала.

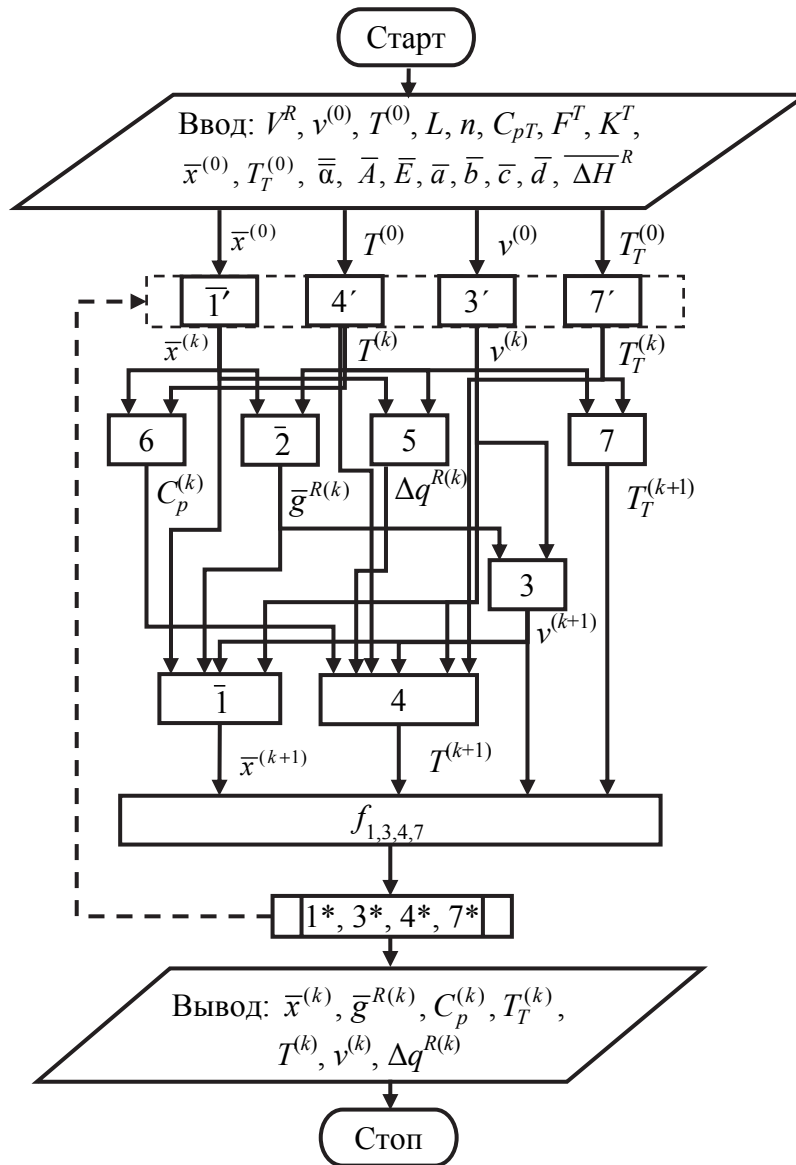


Рис. 2.22. Блок-схема алгоритма расчета стационарного режима процесса в трубчатом реакторе с рубашкой

3. ЭМПИРИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Эмпирические модели применяются в тех случаях, когда либо нет информации о механизме протекающих процессов, либо они плохо поддаются описанию с использованием физико-химических блочно-структурных моделей. В этом случае объект (ХТП) представляется в виде так называемого черного ящика (рис. 3.1) – кибернетической системы, в которой единственно доступной информацией являются ее входные (\bar{x}) и выходные (\bar{y}) переменные: где $\bar{x} = [x_1, \dots, x_m]$ – вектор входных переменных, влияющих на состояние системы и ее свойства, $\bar{y} = [y_1, \dots, y_l]$ – вектор выходных переменных, характеризующих состояние системы.



Рис. 3.1. Изображение ХТП в виде «черного ящика»

В общем случае эмпирические модели строятся для каждой отдельной выходной переменной из всех y_i ($i = 1, \dots, l$) в зависимости от всех входных переменных x_i ($i = 1, \dots, m$) т. е.

$$y_i = f(x_1, \dots, x_m, \bar{\alpha}), \quad (3.1)$$

где $\bar{\alpha} = [\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_m]$ – $(m + 1)$ коэффициентов эмпирической модели.

Конкретный вид функциональной зависимости (f) и значения коэффициентов ($\bar{\alpha}$) определяются из опытных данных, т. е. эмпирически.

Так как результаты опытных измерений являются случайными величинами, то для их обработки используются методы математической статистики – *метод регрессионного и корреляционного анализа*.

В соответствии с методом регрессионного анализа Y считается случайной величиной, распределенной по нормальному закону распределения, а компоненты вектора \bar{x} – детерминированными (неслучайными) величинами. Поэтому, согласно закономерностям теории вероятностей, при каждом фиксированном значении вектора \bar{x}

величина Y является случайной величиной с определенным (зависящим от \bar{x}) условным распределением вероятностей.

В связи с этим для описания функции (3.1) используется зависимость условного математического ожидания случайной величины Y ($M [Y |_{\bar{x}}]$) от \bar{x} . Зависимости такого типа принято называть *уравнениями регрессии*:

$$M [Y |_{\bar{x}}] = f(\bar{x}, \bar{\alpha}), \quad (3.2)$$

а коэффициенты уравнения (3.2) $\bar{\alpha} = [\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_m]$ называются *теоретическими коэффициентами регрессии*.

Так как коэффициенты ($\bar{\alpha}$) определяются по ограниченной выборке (статистике) экспериментальных данных, то их значения отличаются от истинных (теоретических) и обозначаются \bar{a} (так называемые *выборочные коэффициенты регрессии*). В результате пользуются *приближенным уравнением регрессии*, в котором вместо условного математического ожидания величины Y $M [Y |_{\bar{x}}]$ фигурирует ее оценка \hat{y} и выборочные коэффициенты регрессии \bar{a} :

$$\hat{y} = f(\bar{x}, \bar{a}). \quad (3.3)$$

Для приближенного уравнения регрессии – эмпирической статистической модели – на выборке экспериментальных данных необходимо решить три основные задачи:

1) определить конкретный вид функции (3.3), т. е. решить задачу структурной идентификации;

2) определить выборочные (эмпирические) коэффициенты регрессии \bar{a} , т. е. решить задачу параметрической идентификации;

3) провести статистический (регрессионный и корреляционный) анализ полученных результатов с целью оценки погрешностей полученной модели.

Таким образом, задача идентификации математического описания процесса в этом случае, в отличие от физико-химических моделей, решается уже при построении эмпирической модели и не является отдельной задачей компьютерного моделирования.

В то же время оптимизация процесса с использованием эмпирической модели выполняется с применением уравнений регрессии, выходные переменные которых являются критериями оптимальности (целевыми функциями) технологического процесса. В результате упрощается процедура решения задачи оптимизации, так как явный вид зависимости целевой функции от входных (в данном случае оптими-

зирующих) переменных позволяет определять оптимальные условия проведения процесса с использованием необходимых условий экстремума функции многих переменных. Это позволяет свести решение задачи оптимизации к решению систем конечных (линейных или нелинейных уравнений).

Следует отметить, что редко удается решить задачу оптимизации с применением эмпирических моделей без постановки дополнительных экспериментов. Это связано с тем, что определяемые расчетным путем оптимальные условия проведения процессов оказываются за пределами диапазонов изменения их переменных, в которых эмпирические модели справедливы, т. е. адекватны реальному процессу. В этих случаях, как правило, следует провести дополнительную серию экспериментов, чтобы уточнить (скорректировать) параметры эмпирических моделей с учетом новых обстоятельств.

3.1. Элементы корреляционного анализа

3.1.1. Понятие корреляции

Статистический анализ эмпирических моделей, как правило, проводится методами регрессионного и корреляционного анализа.

Для иллюстрации метода корреляционного анализа рассмотрим две случайные величины X и Y , для которых известны законы распределения. Предположим, что для них будет справедливо простейшее приближенное уравнение регрессии (3.3):

$$\hat{y} = a_0 + a_1x. \quad (3.4)$$

Представим *поле корреляции* y, x в виде чертежа с результатами опытов, отмеченных точками в соответствующей системе координат (рис. 3.2). Поле корреляции является графической формой систематизации опытных данных.

Наличие *корреляционной зависимости* часто можно определить интуитивно по результатам опытов. Наличие такой зависимости характеризует некоторую тенденцию изменения y от x . При установлении зависимости между этими параметрами возникает задача определения *тесноты связи*.

Рассмотрим два поля корреляции величин y и x (см. рис. 3.2, *а, б*). Пусть линии регрессии в обоих полях расположены одинаково. Однако точки поля рис. 3.2, *б* значительно ближе примыкают к линии регрессии (3.4), чем точки поля рис. 3.2, *а*. Очевидно, что чем сильнее

влияние неконтролируемых факторов на y , тем больше отклоняются экспериментальные точки от линии регрессии и тем слабее проявляется зависимость y от x . И, наоборот, чем слабее влияние неконтролируемых факторов на y , тем менее отклоняются экспериментальные данные от линии регрессии и тем теснее связь между y и x .

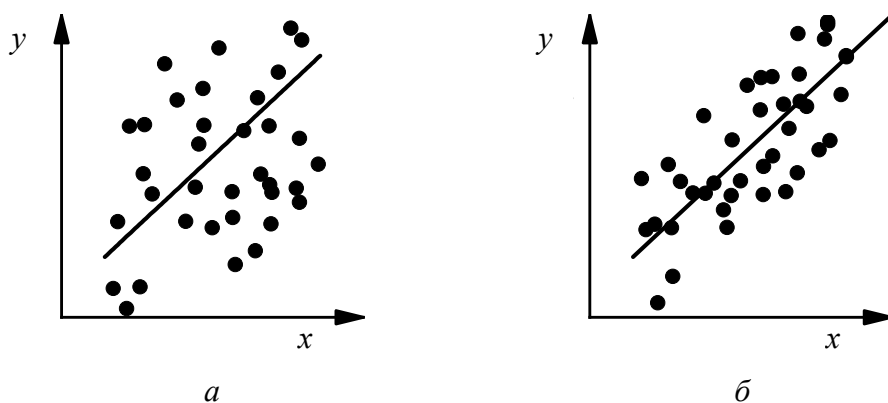


Рис. 3.2. Изображение поля корреляции:
 a – с меньшей теснотой связи; b – с большей теснотой связи

Если теснота связи мала, то влияние x на y обнаруживается лишь в среднем по уравнению регрессии. В каждом же отдельном наблюдении оно перекрывается действием неконтролируемых параметров.

Эмпирическое корреляционное отношение, характеризующее тесноту связи между y и x , определяется следующим образом:

$$\eta = \sqrt{1 - \frac{(n-p)S_R^2}{(n-1)S_y^2}}, \quad (3.5)$$

где S_R^2 – остаточная дисперсия, характеризует погрешность используемого уравнения регрессии (3.3); S_y^2 – дисперсия относительно среднего, характеризует разброс полученных экспериментальных данных для выходной переменной y .

При этом остаточная дисперсия рассчитывается по формуле

$$S_R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i^{\text{эксп}} - \hat{y}_i)^2}{n-p}, \quad (3.6)$$

где p – число значимых коэффициентов регрессии. А дисперсия относительно среднего находится по формуле

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i^{\text{эксп}} - y_{\text{ср}})^2}{n-1}, \quad (3.7)$$

где $y_{\text{ср}}$ – среднее значение экспериментальных данных для выходной переменной. Оно рассчитывается как среднее арифметическое:

$$y_{\text{ср}} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i^{\text{эксп}}}{n}. \quad (3.8)$$

Корреляционное отношение (3.5) характеризует связи между случайными величинами X и Y . Чем больше величина η , тем сильнее связь.

Величина η находится в пределах

$$0 \leq \eta \leq 1. \quad (3.9)$$

Между случайными величинами обычно существует такая связь, при которой с изменением одной величины меняется распределение другой. Такая связь называется *стохастической*. Изменение случайной величины Y , соответствующее изменению величины X , разбивается при этом на две компоненты: функциональную (связанную с зависимостью Y от X) и случайную. Если первая компонента отсутствует, то величины Y и X независимы. Если отсутствует вторая компонента, Y и X связаны функциональной зависимостью. При наличии обеих компонент соотношение между ними определяет *силу (тесноту) связи*. Существуют показатели, оценивающие те или иные стороны стохастической связи. Из них важнейшими являются *корреляционное отношение* (3.5) для нелинейных моделей и *коэффициент корреляции* для линейных моделей.

Если две случайные величины независимы, то дисперсия суммы равна сумме дисперсий этих величин:

$$D\{X + Y\} = D\{X\} + D\{Y\}. \quad (3.10)$$

Из определения дисперсии и математического ожидания следует:

$$\begin{aligned} D\{X + Y\} &= M[X + Y - M(X + Y)]^2 = M[X - M(X)]^2 + \\ &+ 2M\{[X - M(X)][Y - M(Y)]\} + M[Y - M(Y)]^2 = \\ &= D(X) + 2M\{[X - M(X)][Y - M(Y)]\} + D(Y). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Зависимость между X и Y вытекает из неравенства

$$M\{[X - M(X)][Y - M(Y)]\} \neq 0. \quad (3.12)$$

Величина (3.12) называется *корреляционным моментом*, *моментом связи* или *ковариацией* случайных величин X и Y и обозначается $COV\{XY\}$, COV_{XY} . Безразмерная величина

$$\rho_{XY} = \frac{M\{[X - M(X)][Y - M(Y)]\}}{\sqrt{D(X)D(Y)}} \quad (3.13)$$

называется *коэффициентом парной корреляции*. Для независимых случайных величин коэффициент корреляции равен нулю, но он может быть равен нулю и в случае нелинейных зависимостей между величинами, например такой, как на рис. 3.3. Для случайных величин, имеющих нормальное распределение, отсутствие корреляции, $\rho_{XY} = 0$, означает и отсутствие всякой зависимости. Если $\rho_{XY} = \pm 1$, то связь между Y и X является строго линейной и знак указывает направление связи.

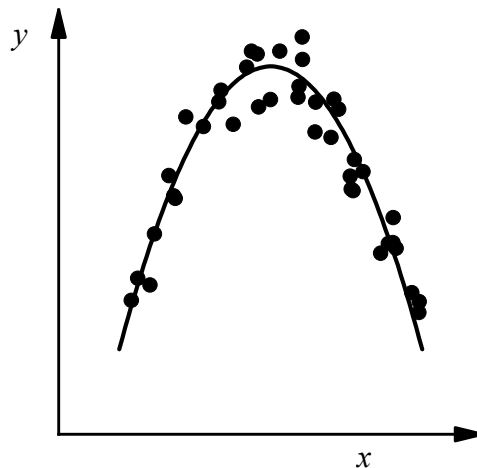


Рис. 3.3. Изображение поля корреляции с нелинейной зависимостью между y и x , для которой коэффициент парной корреляции близок к нулю

На практике тесноту связи между величинами определяют по выборочным (опытным) данным, которые составляют небольшую часть от всех гипотетически возможных данных. В статистике в этом случае используют понятия *выборки* и *генеральной совокупности*. Допустим, имеется выборка, являющаяся результатом измерения двух величин x и y : (x_i, y_i) , где $i = 1, \dots, n$; n – объем выборки. По выборке можно рас-

считать выборочную оценку коэффициента парной корреляции или *выборочный коэффициент парной корреляции*. Он рассчитывается по формуле, аналогичной (3.13), в которой математические ожидания и дисперсии заменяются на соответствующие выборочные оценки. Выборочная оценка математического ожидания величины x находится как среднее арифметическое выборочных значений:

$$x_{\text{cp}} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}. \quad (3.14)$$

Выборочная оценка дисперсии величины x обозначается s_x^2 и находится по формуле

$$s_x^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - x_{\text{cp}})^2}{n}. \quad (3.15)$$

Выборочный коэффициент парной корреляции в соответствии с (3.13), (3.14) и (3.15) будет выражаться так:

$$\begin{aligned} r_{xy} &= \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - x_{\text{cp}})(y_i - y_{\text{cp}})}{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - x_{\text{cp}})^2}{n} \cdot \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - y_{\text{cp}})^2}{n}}} = \\ &= \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - x_{\text{cp}})(y_i - y_{\text{cp}})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - x_{\text{cp}})^2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - y_{\text{cp}})^2}}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Для практических расчетов более удобно использовать формулу

$$r_{xy} = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \cdot \sum_{i=1}^n y_i}{\sqrt{\left(n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 \right) \cdot \left(n \sum_{i=1}^n y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2 \right)}}, \quad (3.17)$$

а процесс расчета оформлять в виде табл. 3.1.

**Процесс расчета выборочного коэффициента парной корреляции
с использованием формулы (3.17)**

Номер измерения	x_i	y_i	x_i^2	y_i^2	$x_i y_i$
1	x_1	y_1	x_1^2	y_1^2	$x_1 y_1$
2	x_2	y_2	x_2^2	y_2^2	$x_2 y_2$
...
n	x_n	y_n	x_n^2	y_n^2	$x_n y_n$
Σ	Σx_i	Σy_i	Σx_i^2	Σy_i^2	$\Sigma x_i y_i$

Коэффициент корреляции r_{xy} характеризует не любую зависимость, а только линейную. Линейная вероятностная зависимость случайных величин заключается в том, что при возрастании одной случайной величины другая имеет тенденцию возрастать (или убывать) по линейному закону. Коэффициент корреляции характеризует степень тесноты линейной зависимости. Если величины x и y связаны точной линейной функциональной зависимостью $y = a_0 + a_1 x$, то $r_{xy} = \pm 1$; причем знак соответствует знаку коэффициента a_1 . В общем случае, когда величины x и y связаны произвольной стохастической зависимостью, коэффициент корреляции может иметь значение в пределах

$$-1 \leq r_{xy} \leq 1. \quad (3.18)$$

При $r_{xy} > 0$ существует положительная корреляционная связь между величинами x и y , при $r_{xy} < 0$ – отрицательная.

Коэффициент корреляции, существенно отличный от ± 1 , характеризует и слишком большую долю случайности, и слишком большую криволинейность связи между случайными величинами. Зависимость x и y может быть строго функциональной, а коэффициент корреляции может оказаться близким к нулю (рис. 3.3). О наличии или отсутствии корреляции между двумя случайными величинами качественно можно судить по виду *поля корреляции*.

На рис. 3.4 приведены корреляционные графики для двух величин x и y . Каждая точка показывает значения x и y для некоторого объекта. Рис. 3.4, *а* соответствует слабой отрицательной корреляции между x и y ; рис. 3.4, *б* – сильной положительной корреляции; рис. 3.4, *в* – отсутствию корреляции ($r_{xy} \approx 0$).

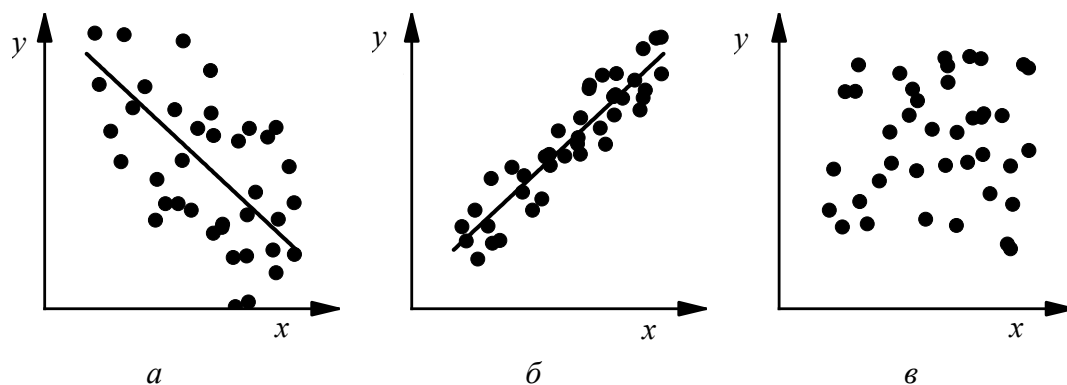


Рис. 3.4. Изображение полей корреляции:
a – со слабой отрицательной корреляцией;
б – с сильной положительной корреляцией; *в* – без корреляции

Следует отметить, что при малых объемах выборки ($n < 15$) лучшей выборочной оценкой коэффициента парной корреляции является

$$r_{xy}^* = r_{xy} \left(1 + \frac{1 - r_{xy}^2}{2(n - 3)} \right). \quad (3.19)$$

Однако эта формула на практике редко используется, ввиду оценочной природы выборочных оценок. Более важным является необходимость оценки точности рассчитанного коэффициента корреляции. Для этого можно использовать стандартные методы проверки статистических гипотез, в частности, оценку значимости определения доверительного интервала коэффициента парной корреляции с использованием статистических критериев.

3.1.2. Значимость коэффициента парной корреляции

Если рассчитанное значение r_{xy} находится достаточно далеко от 0 и 1, что как правило встречается на практике, то возникает вопрос о значимости этого коэффициента, т. е. с какой вероятностью можно судить о том, что он равен нулю. Для этого можно использовать метод проверки статистических гипотез о значимости выборочных оценок. *Основная гипотеза* будет состоять в том, что коэффициент парной корреляции равен нулю $\rho_{xy} = 0$, *альтернативная гипотеза* – $\rho_{xy} \neq 0$. Чтобы проверить гипотезу, нужно знать закон распределения для r_{xy} . В случае, если величины x и y подчиняются нормальному закону распределения, выражение плотности вероятности распределения для выборочного коэффициента парной корреляции r_{xy} будет иметь следующий, достаточно сложный вид:

$$p(r_{xy}) = \frac{(1 - \rho_{xy}^2)^{\frac{n-1}{2}}}{\pi \Gamma(n-2)} (1 - r_{xy}^2)^{\frac{n-4}{2}} \frac{d^{n-2}}{d(r_{xy} \rho_{xy})^{n-2}} \left(\frac{\arccos(-\rho_{xy} r_{xy})}{\sqrt{1 - \rho_{xy}^2 r_{xy}^2}} \right), \quad (3.20)$$

где ρ_{xy} – математическое ожидание для r_{xy} или «истинный» коэффициент парной корреляции; Γ – гамма-функция. Вид функции (3.20) зависит от объема выборки n и от математического ожидания ρ_{xy} . Так при $n = 3$ плотность вероятности для r_{xy} будет иметь выглядеть так:

$$p(r_{xy}) = \frac{1 - \rho_{xy}^2}{\pi \sqrt{1 - r_{xy}^2} (1 - \rho_{xy}^2 r_{xy}^2)} \left(1 + \frac{(\pi - \arccos(\rho_{xy} r_{xy})) \rho_{xy} r_{xy}}{\sqrt{1 - \rho_{xy}^2 r_{xy}^2}} \right). \quad (3.21)$$

На рис. 3.5 приведены графики плотности вероятности распределения выборочного коэффициента парной корреляции в зависимости от объема выборки n и от математического ожидания ρ_{xy} .

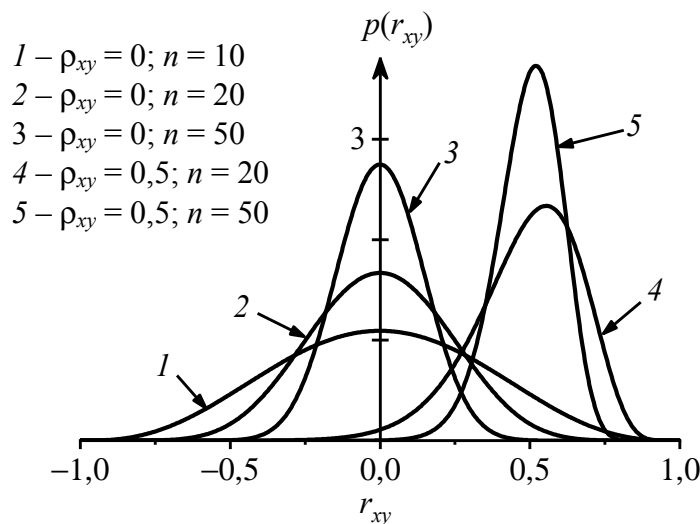


Рис. 3.5. Графики плотности распределения выборочного коэффициента парной корреляции при различных значениях ρ_{xy} и n

Из графиков видно, что точность выборочных оценок коэффициента парной корреляции сильно зависит от объема выборки. Причем достаточно точные оценки, соответствующие узким максимумам распределения (кривые 3 и 5 на рис. 3.5), получаются при достаточно больших объемах выборки ($n = 50$). Также точность оценок сильно увеличивается, если ρ_{xy} приближается к ± 1 .

Для проверки значимости коэффициента парной корреляции необходимо использовать закон распределения при $\rho_{xy} = 0$ (кривые 1–3 на рис. 3.5). Функции плотности вероятности при $\rho_{xy} = 0$ симметричны относительно $r_{xy} = 0$. При выбранном уровне значимости α на графике плотности вероятности (рис. 3.6) выделяют «хвосты», соответствующие значениям $r_{xy} = \pm r_{\alpha,n}$, таким образом, чтобы площадь под каждым хвостом была по $\alpha/2$. Тогда площадь под кривой в диапазоне значений r_{xy} от $-r_{\alpha,n}$ до $+r_{\alpha,n}$ будет равна $(1 - \alpha)$. Это значит, что при «истинном» значении коэффициента парной корреляции $\rho_{xy} = 0$ вероятность того, что выборочный коэффициент корреляции попадет в интервал $[-r_{\alpha,n}; r_{\alpha,n}]$, составляет $(1 - \alpha)$. Или же наоборот: если выборочный коэффициент парной корреляции находится в интервале $[-r_{\alpha,n}; r_{\alpha,n}]$, то с вероятностью $(1 - \alpha)$ можно утверждать, что «истинное» значение коэффициента будет равно нулю, т. е. что он будет *незначим*. Последнее утверждение можно сформулировать в рамках альтернативы: если выборочный коэффициент парной корреляции находится вне интервала $[-r_{\alpha,n}; r_{\alpha,n}]$, то с вероятностью $(1 - \alpha)$ можно утверждать, что «истинное» значение коэффициента не будет равно нулю, т. е. что он будет *значим*.

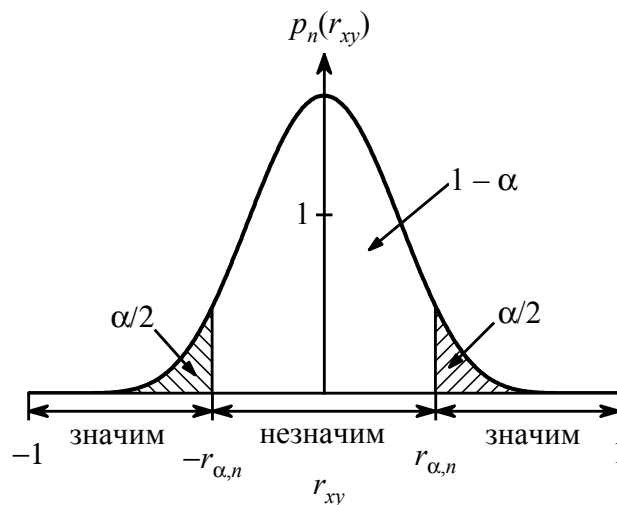


Рис. 3.6. Определение значимости выборочного коэффициента парной корреляции с использованием закона распределения

Таким образом, *условие значимости* выборочного коэффициента выглядит так:

$$|r_{xy}| \geq r_{\alpha,n}, \quad (3.22)$$

где $r_{\alpha,n}$ – критическое значение коэффициента парной корреляции, определяемое из закона распределения (рис. 3.6) для объема выборки n

при выбранном уровне значимости α . Обычно выбирают уровни значимости равными 0,1 или 0,05, реже – 0,01.

Поскольку закон распределения выборочного коэффициента парной корреляции (3.20) достаточно сложный, особенно при больших n , то для определения $r_{\alpha,n}$ можно использовать различные приближения.

3.1.2.1. Приближение 1. При достаточно большом объеме выборки ($n > 200$) закон распределения выборочного коэффициента парной корреляции приближается к нормальному закону:

$$p(r_{xy}) = \frac{1}{\sigma_{r_{xy}} \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(r_{xy} - \rho_{xy})^2}{2\sigma_{r_{xy}}^2}}, \quad (3.23)$$

где $\sigma_{r_{xy}}$ – среднее квадратичное отклонение, зависящее от объема выборки и от математического ожидания ρ_{xy} :

$$\sigma_{r_{xy}} = \sqrt{\frac{1 - \rho_{xy}^2}{n - 1}}. \quad (3.24)$$

Проверка значимости выборочного коэффициента парной корреляции в данном случае проводится в два этапа. Вначале r_{xy} преобразуется в стандартную случайную величину со средним $\rho_{xy} = 0$ по формуле

$$u_r = \frac{r_{xy} - \rho_{xy}}{\sigma_{r_{xy}}} = \frac{r_{xy}}{\sigma_{r_{xy}}} = r_{xy} \sqrt{n - 1}. \quad (3.25)$$

Затем значимость полученной величины определяется на основе закона распределения (3.23) аналогично рис. 3.6. Условие значимости будет даваться неравенством, аналогичным (3.22):

$$|u_r| \geq u_{1-\alpha/2}, \quad (3.26)$$

где $u_{1-\alpha/2}$ – квантиль уровня $(1 - \alpha/2)$ стандартного нормального распределения, который находится либо по статистическим таблицам, либо с помощью функций, встроенных в различные доступные программы (Excel, Mathcad и др.).

Определение значимости можно также провести, рассчитав на основе квантиля стандартного нормального распределения приближенное критическое значение коэффициента парной корреляции

$$r_{\alpha,n}^{(H)} = \frac{u_{1-\alpha/2}}{\sqrt{n - 1}}. \quad (3.27)$$

Тогда для проверки значимости используем условие (3.22):

$$|r_{xy}| \geq r_{\alpha, n}^{(H)}. \quad (3.28)$$

3.1.2.2. Приближение 2. Если на основе выборочного коэффициента парной корреляции рассчитать величину

$$z = \frac{1}{2} \ln \frac{1+r_{xy}}{1-r_{xy}}, \quad (3.29)$$

то полученная случайная величина будет значительно лучше (уже при $n > 5$) подчиняться нормальному закону распределения, чем r_{xy} . Преобразование (3.29) называется ***z-преобразованием Фишера***. Параметры нормального распределения полученной величины следующие:

– математическое ожидание:

$$\zeta = \frac{1}{2} \ln \frac{1+\rho_{xy}}{1-\rho_{xy}}; \quad (3.30)$$

– среднеквадратичное отклонение:

$$\sigma_z = \sqrt{\frac{1}{n-3}}. \quad (3.31)$$

Проверка значимости далее проводится аналогично приближению 1. Учитывая, что при $\rho_{xy} = 0$ математическое ожидание для z (3.29) тоже будет равно 0, преобразуем z в стандартную нормальную случайную величину по формуле

$$u_z = \frac{z - \zeta}{\sigma_z} = \frac{z}{\sigma_z} = z\sqrt{n-3}. \quad (3.32)$$

Условие значимости будет даваться неравенством (3.26):

$$|u_z| \geq u_{1-\alpha/2}. \quad (3.33)$$

Можно также из формул (3.32) и (3.29) рассчитать приближенное значение критического коэффициента парной корреляции (3.22), подставив в формулу (3.32) вместо u_z квантиль $u_{1-\alpha/2}$:

$$r_{\alpha, n}^{(z)} = \frac{e^{\frac{2u_{1-\alpha/2}}{\sqrt{n-3}}} - 1}{e^{\frac{2u_{1-\alpha/2}}{\sqrt{n-3}}} + 1}. \quad (3.34)$$

Тогда условие значимости выборочного коэффициента парной корреляции запишется в виде

$$|r_{xy}| \geq r_{\alpha, n}^{(z)}. \quad (3.35)$$

3.1.2.3. Приближение 3. Если на основе выборочного коэффициента r_{xy} рассчитать величину

$$t_r = r_{xy} \sqrt{\frac{n-2}{1-r_{xy}^2}}, \quad (3.36)$$

то получим стандартную случайную величину, имеющую распределение Стьюдента с $(n-2)$ степенями свободы при условии $\rho_{xy} = 0$. Распределение Стьюдента с $(n-2)$ степенями свободы для величины t_r в точности следует из закона распределения выборочного коэффициента парной корреляции (3.20) при $\rho_{xy} = 0$. Условие значимости для r_{xy} будет иметь вид

$$|t_r| \geq t_{1-\alpha/2}, \quad (3.37)$$

где $t_{1-\alpha/2}$ – квантиль уровня $(1-\alpha/2)$ распределения Стьюдента с $(n-2)$ степенями свободы, который находится так же, как и квантиль стандартного нормального распределения по статистическим таблицам или с использованием специальных функций в таких программах, как Excel, Mathcad и др.

Также на основе квантиля $t_{1-\alpha/2}$ можно рассчитать критическое значение коэффициента парной корреляции r_{α} , которое точно совпадает со значением, определенным из закона распределения (3.20) при $\rho_{xy} = 0$:

$$r_{\alpha, n} = \frac{t_{1-\alpha/2}}{\sqrt{n-2 + t_{1-\alpha/2}^2}}. \quad (3.38)$$

Тогда для проверки значимости используется неравенство (3.22).

3.1.3. Доверительный интервал для коэффициента парной корреляции

Доверительный интервал для выборочного коэффициента парной корреляции при выбранном уровне значимости α представляет собой интервал $[r_{\min}; r_{\max}]$, вероятность попадания в который «истинного» коэффициента парной корреляции ρ_{xy} составляет $(1-\alpha)$. Доверительный интервал для r_{xy} естественно определяется в соответствии с рис. 3.6, как интервал, в котором площадь под графиком плотности распределения равна $(1-\alpha)$. Но при этом используется закон распре-

деления (3.20) при данном объеме выборки n и математическом ожидании, равном выборочному коэффициенту, т. е. при $\rho_{xy} = r_{xy}$. Примеры распределений при ρ_{xy} , равном 0 и 0,5, приведены на рис. 3.5. Как видно, при ρ_{xy} , отличном от нуля, функция плотности распределения имеет несимметричный вид и значит доверительный интервал будет несимметричным относительно выборочного r_{xy} .

Поскольку закон распределения (3.20) имеет сложный вид, для построения доверительного интервала используют z -преобразование Фишера. Построение доверительного интервала для величины, имеющей нормальное распределение, не составляет труда, т. к. доверительный интервал является симметричным относительно среднего, а соответствующие квантили легко находятся по статистическим таблицам или с использованием стандартных легкодоступных программ. Приведем последовательность этапов построения доверительного интервала для выборочного коэффициента парной корреляции с использованием z -преобразования Фишера.

1. На основе выборочного коэффициента парной корреляции r_{xy} рассчитывают величину z по формуле (3.29).

2. Рассчитывают радиус доверительного интервала для величины z при выбранном уровне значимости α по следующей формуле:

$$\Delta z = u_{1-\alpha/2} \cdot \sigma_z = \frac{u_{1-\alpha/2}}{\sqrt{n-3}}. \quad (3.39)$$

3. Определяют доверительный интервал $[z_{\min}; z_{\max}]$ при выбранном уровне значимости для величины z :

$$z_{\min} = z - \Delta z; \quad z_{\max} = z + \Delta z. \quad (3.40)$$

4. Выполнение обратного преобразования Фишера для преобразования доверительного интервала для величины z $[z_{\min}; z_{\max}]$ в соответствующий интервал для r_{xy} $[r_{\min}; r_{\max}]$:

$$r_{\min} = \frac{e^{2z_{\min}} - 1}{e^{2z_{\min}} + 1}, \quad r_{\max} = \frac{e^{2z_{\max}} - 1}{e^{2z_{\max}} + 1}. \quad (3.41)$$

3.2. Основы регрессионного анализа

Эмпирические модели в общем виде могут быть представлены в виде *приближенных уравнений регрессии* типа (3.3). Для построения эмпирической модели в форме приближенного уравнения регрессии необходимо решить следующие задачи:

1) найти конкретный вид функции f в уравнении (3.3), в частности, линейна или не линейна ли она относительно коэффициентов \bar{a} ;

2) определить значения коэффициентов \bar{a} модели – коэффициентов регрессии;

3) провести статистический анализ полученных результатов.

Регрессионный анализ проводится после того, как определен вид уравнения регрессии (3.3) и найдены значения его коэффициентов. Этот анализ состоит в следующем: проверяется *значимость всех коэффициентов уравнения регрессии* и *устанавливается адекватность уравнения*.

При проведении регрессионного анализа принимаются следующие допущения:

1) входные переменные x измеряются с пренебрежимо малой ошибкой. Появление ошибки в определении y объясняется наличием в процессе невыявленных переменных и случайных воздействий, не вошедших в уравнение регрессии;

2) результаты наблюдений выходной переменной $\bar{y}^{\text{эксп}}$ представляют собой *независимые нормально распределенные случайные величины*;

3) при проведении экспериментов с объемом выборки n при условии, что каждый опыт повторен одинаковое число раз, выборочные дисперсии S_1^2, \dots, S_n^2 однородны.

Первое допущение означает, что входные переменные \bar{x} можно рассматривать как детерминированные величины. В соответствии со вторым допущением с экспериментальными значениями выходных переменных следует оперировать как с независимыми нормально распределенными случайными величинами. Согласно третьему допущению оценки дисперсий S_i^2 ($i = 1, \dots, n$), получаемые по различным выборкам экспериментальных данных, могут усредняться и будут справедливы для всего рассматриваемого пространства входных и выходных переменных.

Следует отметить, что существуют статистически обоснованные критерии проверки как справедливости нормального закона распределения для выходных переменных $\bar{y}^{\text{эксп}}$, так и критерии оценки однородности дисперсий S_i^2 ($i = 1, \dots, n$).

Важным условием проведения регрессионного анализа является хорошая организация опытных исследований. В любом хорошо организованном эксперименте необходимо предусмотреть меры для обеспечения независимости ошибок измерений. Одной из важнейших мер такого рода является *рандомизация* (от англ. *random* – беспорядочно,

случайно). Рандомизация заключается в том, что планируемые опыты выбираются случайным образом, и именно в таком случайном порядке опыты производят. При этом важно, чтобы при наличии параллельных опытов каждому из них присваивался свой номер, и номера всех опытов, включая параллельные, рандомизировали совместно.

Построение эмпирических моделей включает следующие этапы:

1) выбираются *входные переменные*, влияющие на протекание процесса, – так называемые *факторы*;

2) определяется *выходная (зависимая) переменная*, характеризующая состояние процесса, его *эффективность*, которую можно рассматривать как критерий оптимальности (целевую функцию), – так называемая *функция отклика*;

3) определяется вид приближенного уравнения регрессии;

4) вычисляются коэффициенты регрессии;

5) определяется значимость коэффициентов регрессии с использованием критерия Стьюдента t ;

6) устанавливается адекватность уравнения регрессии с применением критерия Фишера F ;

7) определяется совместная доверительная область для коэффициентов регрессии.

3.2.1. Определение вида приближенного уравнения регрессии

В общем случае необходимо анализировать графики зависимостей экспериментальных данных выходных переменных (функции отклика) \bar{y} от входных переменных (факторов) \bar{x} и по их виду выбирать конкретную форму функциональной зависимости (3.3).

Для случая *одной входной переменной* x по опытным данным рекомендуется построить эмпирическую линию регрессии (рис. 3.7) и с ее помощью выбирать конкретный вид функции (3.3).

При этом весь диапазон изменения x разбивается на s равных интервалов Δx . Все точки, попавшие в данный интервал Δx_j , относят к его середине x_j^* . После этого подсчитывают частные средние y_j^* для каждого интервала:

$$y_j^* = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} y_{ji}}{n_j}, \quad j = 1, \dots, s, \quad (3.42)$$

где n_j – число точек в интервале Δx_j .

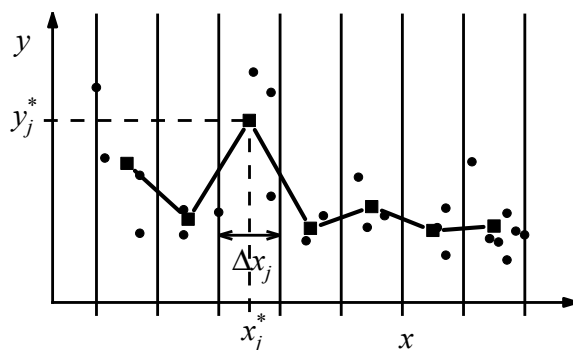


Рис. 3.7. Построение эмпирической линии регрессии по опытным данным

В результате объем выборки определяется по формуле

$$n = \sum_{j=1}^s n_j . \quad (3.43)$$

Эмпирическая линия регрессии y по x получается в виде ломаной линии путем последовательного соединения отрезками прямой линии точек

$$(x_j^*, y_j^*), \quad j = 1, \dots, s . \quad (3.44)$$

Для определения вида приближенного уравнения регрессии для случая *одной входной переменной* желательно привести его к линейному виду путем преобразования осей координат в соответствии с табл. 3.2.

Таблица 3.2

Преобразование к линейному виду функции одной переменной

Уравнение	Координаты прямой		Уравнение прямой
	Ось x	Ось y	
1) $\frac{1}{y} = \alpha + \beta x$	x	$\frac{1}{y}$	$\frac{1}{y} = \alpha + \beta x$
2) $y = \alpha + \frac{\beta}{x}$	$\frac{1}{x}$	y	$y = \alpha + \beta \frac{1}{x}$
3) $\frac{x}{y} = \alpha + \beta x$ $y = \frac{x}{\alpha + \beta x}$	x	$\frac{x}{y}$	$\frac{x}{y} = \alpha + \beta x$
или $\frac{1}{y} = \frac{\alpha}{x} + \beta$	$\frac{1}{x}$	$\frac{1}{y}$	$\frac{1}{y} = \beta + \alpha \frac{1}{x}$
3a) $y = \frac{x}{\alpha + \beta x} + \gamma$	x	$\frac{x - x_1}{y - y_1}$	$\frac{x - x_1}{y - y_1} = \alpha + \beta x_1 + \frac{\beta}{\alpha} (\alpha + \beta x_1) x$

Уравнение	Координаты прямой		Уравнение прямой
	Ось x	Ось y	
4) $y = \alpha x^\beta$	$\log x$	$\log y$	$\log y = \log \alpha + \beta \log x$
4a) $y = \alpha x^\beta + \gamma$	$\log x$	$\log (y - \gamma)$	$\log (y - \gamma) = \log \alpha + \beta \log x$
4b) $y = \gamma \cdot 10^{\alpha x^\beta}$	$\log x$	$\log (\log y - \log \gamma)$	$\log (\log y - \log \gamma) = \log \alpha + \beta \log x$
5) $y = \alpha \beta^x$	x	$\log y$	$\log y = \log \alpha + x \log \beta$

Графики зависимостей y от x для уравнений, включающих дробные зависимости 1–3, представлены на рис. 3.8. Графики 1–4 на рис. 3.8 соответствуют значениям коэффициентов α и β для уравнений 1–3, представленным в табл. 3.3.

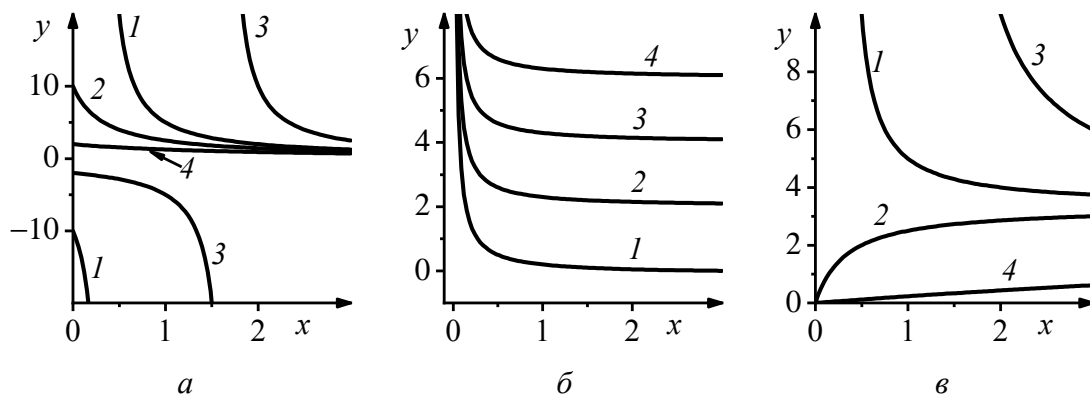


Рис. 3.8. Графики зависимостей y от x для уравнений дробного типа 1 (а), 2 (б), 3 (в) (табл. 3.2)

На рис. 3.9 представлены графики показательных зависимостей 4 и 5 (табл. 3.2) со значениями коэффициентов α и β , представленными в табл. 3.3.

Вид функции одной переменной может быть выбран (решение задачи структурной идентификации) путем анализа графиков функций (рис. 3.8), оси координат которых преобразованы в соответствии с табл. 3.2. В результате преобразованные функции y становятся линейными не только по коэффициентам регрессии, но и по преобразованным переменным x .

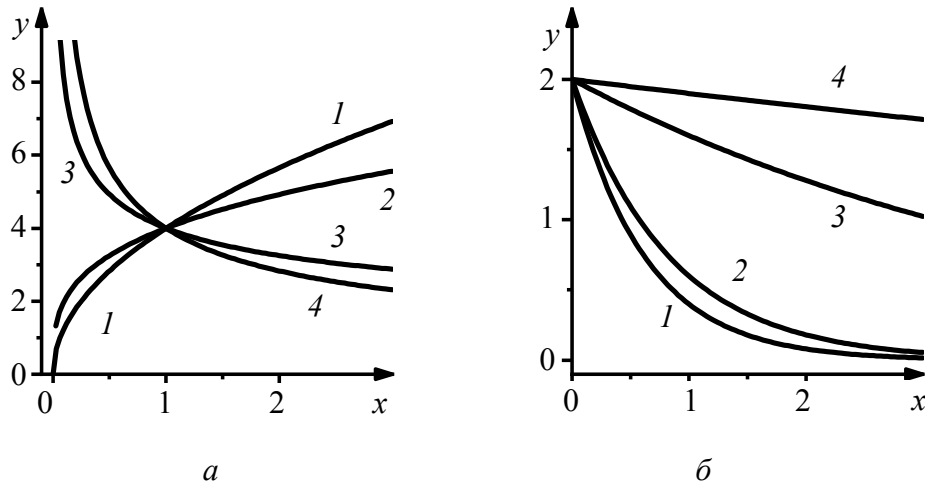


Рис. 3.9. Графики зависимостей y от x для уравнений показательного типа 4 (а) и 5 (б) (табл. 3.2)

При выборе вида функции (3.3) для случая *нескольких входных переменных* $\bar{x} = (x_1, \dots, x_m)$ задача определения вида приближенного уравнения регрессии существенно усложняется.

Таблица 3.3

Значения коэффициентов уравнений 1–5 (табл. 3.2), соответствующих графикам зависимостей 1–4 на рис. 3.8 и 3.9

Номер уравнения	Уравнение	Коэффициенты для графиков зависимостей							
		1		2		3		4	
		α	β	α	β	α	β	α	β
1	$\frac{1}{y} = \alpha + \beta x$	-0,1	0,3	0,1	0,3	-0,5	0,3	0,5	0,3
2	$y = \alpha + \frac{\beta}{x}$	-0,1	0,3	2,0	0,3	4,0	0,3	6,0	0,3
3	$\frac{x}{y} = \alpha + \beta x$	-0,1	0,3	0,1	0,3	-0,4	0,3	4,0	0,3
4	$y = \alpha x^\beta$	4,0	0,5	4,0	0,3	4,0	-0,3	4,0	-0,5
5	$y = \alpha \beta^x$	2,0	0,2	2,0	0,3	2,0	0,8	2,0	0,95

В общем случае различают два вида уравнений регрессии (эмпирических моделей) – *нелинейные по параметрам* \bar{a} , статистический анализ которых осуществляется методом «нелинейной регрессии», и

линейные по параметрам \bar{a} , статистический анализ которых проводится методом «линейной регрессии».

Линейные по параметрам модели могут быть представлены в следующем виде:

$$\hat{y} = \sum_{j=0}^m a_j \varphi_j(\bar{x}), \quad (3.45)$$

где $\varphi_j(\bar{x})$ ($j = 0, 1, \dots, m$) – линейные или нелинейные функции входных переменных (x_1, \dots, x_m) ; \hat{y} – верхний символ над выходной переменной y обозначает ее оценочное (приближенное) расчетное значение, так как коэффициенты \bar{a} получаются по выборкам из генеральной совокупности, т. е. по экспериментальным данным.

Определение параметров (коэффициентов) \bar{a} линейных моделей и их регрессионный анализ существенно проще, чем для нелинейных моделей. Поэтому нелинейные модели, по возможности, стараются линеаризовать и привести к виду (3.4).

Частными случаями уравнения линейной регрессии с одной независимой переменной x являются:

1) **полиномиальная регрессия**, когда

$$\varphi_j(\bar{x}) = x^j, \quad j = 0, 1, \dots, m, \quad (3.46)$$

и ее разновидности – линейная регрессия от одной переменной ($m = 1$):

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x \quad (3.47)$$

и параболическая регрессия ($m = 2$):

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x + a_2 x^2; \quad (3.48)$$

2) **трансцендентная регрессия** и ее разновидности в виде зависимости *показательного* типа:

$$\hat{y} = a_0 a_1^x, \quad (3.49)$$

которая линеаризуется путем логарифмирования:

$$\ln \hat{y} = \ln a_0 + x \ln a_1, \quad (3.50)$$

и *дробно-показательного* типа:

$$\hat{y} = a_0 x^{a_1}, \quad (3.51)$$

которая также линеаризуется путем логарифмирования:

$$\ln \hat{y} = \ln a_0 + a_1 \ln x; \quad (3.52)$$

3) **множественная регрессия** является частным случаем уравнения линейной регрессии (3.21) с многими независимыми (входными) переменными \bar{x} . В этом случае число входных переменных больше единицы, т. е. $(\varphi_j(\bar{x}) = x_j)$:

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x_1 + \dots + a_m x_m. \quad (3.53)$$

3.2.2. Определение параметров эмпирических моделей (коэффициентов регрессии)

3.2.2.1. Линейная модель с одной независимой переменной. Параметры (коэффициенты) эмпирических моделей можно определить *методом наименьших квадратов (МНК)*. Этот метод решает задачу *аппроксимации* экспериментальных данных в соответствии с выбранным уравнением регрессии.

На рис. 3.10 приведена графическая интерпретация МНК для случая линейной регрессии от одной переменной x ($y_i^{\text{эксп}}$ – экспериментальные данные, $y_i^{\text{расч}}$ – расчетные данные по уравнению регрессии, $i = 1, \dots, n$). При этом результаты экспериментов могут представлять собой таблицу вида табл. 3.4.

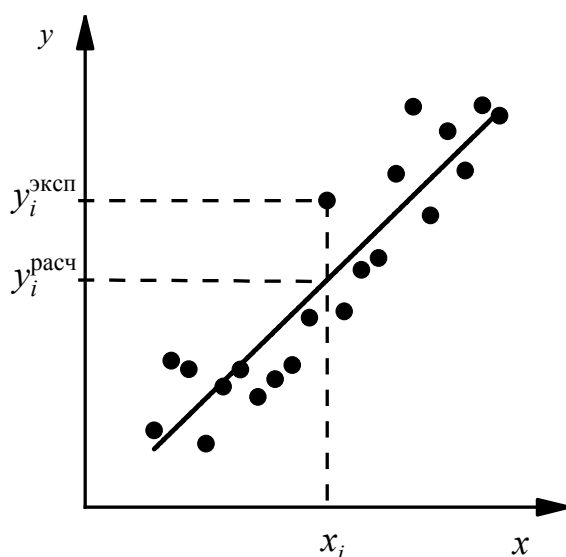


Рис. 3.10. Графическая интерпретация метода наименьших квадратов

Таблица проведения экспериментов для определения параметров уравнения регрессии с одной входной (независимой) переменной

Номер измерения	x	$y^{\text{эксп}}$
1	x_1	$y_1^{\text{эксп}}$
2	x_2	$y_2^{\text{эксп}}$
...
n	x_n	$y_n^{\text{эксп}}$

В этом случае для простейшей линейной модели (3.47) задача формулируется следующим образом. Пусть требуется определить параметры a_0 и a_1 для линейной зависимости вида

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x \quad (3.54)$$

по выборке объемом n :

$$\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ y_1 & y_2 & \dots & y_n \end{array} \quad (3.55)$$

В методе МНК параметры определяются из условия минимума критерия – суммы квадратов отклонений экспериментальных и расчетных значений выходной переменной y :

$$R = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2. \quad (3.56)$$

При использовании необходимых условий экстремума функции двух переменных a_0 и a_1 получается система нормальных уравнений вида:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_i) = 0, \\ \sum_{i=1}^n y_i x_i - \sum_{i=1}^n (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_i) x_i = 0, \end{cases} \quad (3.57)$$

или

$$\begin{cases} n\hat{a}_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i\right)\hat{a}_1 = \sum_{i=1}^n y_i, \\ \left(\sum_{i=1}^n x_i\right)\hat{a}_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i^2\right)\hat{a}_1 = \sum_{i=1}^n y_i x_i, \end{cases} \quad (3.58)$$

и, после вычисления определителей, получаем:

$$\hat{a}_0 = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \sum_{i=1}^n x_i^2 - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i x_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}; \quad \hat{a}_1 = \frac{n \sum_{i=1}^n y_i x_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}. \quad (3.59)$$

3.2.2.2. Линейные по параметрам модели при произвольном числе входных переменных. При определении элементов вектора наблюдений $y_i^{\text{эксп}}$ ($i = 1, \dots, n$) зависимых (выходных) переменных (табл. 3.5) при постановке экспериментов для произвольного числа r факторов x_j ($j = 1, \dots, r$) матрица входных (независимых) переменных \bar{x} размером $n \times r$ может быть представлена: $\bar{x}_i^T = [x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ir}]$ ($i = 1, \dots, n$).

Для линейных или линеаризованных по параметрам моделей необходимо выражение (3.45) подставить в критерий МНК (3.57):

$$R = \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=0}^m a_j \varphi_j(\bar{x}) - y_i^{\text{эксп}} \right)^2, \quad (3.60)$$

и, воспользовавшись необходимым условием экстремума функции многих переменных, решать полученную систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ):

$$\begin{cases} \frac{\partial R}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=0}^m a_j \varphi_j(\bar{x}_i) - y_i^{\text{эксп}} \right) \varphi_0(\bar{x}_i) = 0; \\ \frac{\partial R}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=0}^m a_j \varphi_j(\bar{x}_i) - y_i^{\text{эксп}} \right) \varphi_1(\bar{x}_i) = 0; \\ \dots; \\ \frac{\partial R}{\partial a_m} = 2 \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=0}^m a_j \varphi_j(\bar{x}_i) - y_i^{\text{эксп}} \right) \varphi_m(\bar{x}_i) = 0. \end{cases} \quad (3.61)$$

Перегруппировав члены в системе уравнений (3.61), можно записать СЛАУ в виде

$$\sum_{j=0}^m a_j \left(\sum_{i=1}^n \varphi_u(\bar{x}_i) \varphi_j(\bar{x}_i) \right) = \sum_{i=1}^n \varphi_u(\bar{x}_i) y_i^{\text{эксп}}, \quad u = 0, 1, \dots, m. \quad (3.62)$$

**Таблица проведения эксперимента при произвольном числе
входных переменных**

Номер измерения	x_1	x_2	...	x_r	$y_i^{\text{эксп}}$
1	x_{11}	x_{12}	...	x_{1r}	$y_1^{\text{эксп}}$
2	x_{21}	x_{22}	...	x_{2r}	$y_2^{\text{эксп}}$
...
n	x_{n1}	x_{n2}	...	x_{nr}	$y_n^{\text{эксп}}$

И, если ввести в рассмотрение *информационную матрицу* I_{uj} ($j = 0, 1, \dots, m$ и $u = 0, 1, \dots, m$):

$$I_{uj} = \sum_{i=1}^n \varphi_u(\bar{x}_i) \varphi_j(\bar{x}_i), \quad j = 0, 1, \dots, m, \quad u = 0, 1, \dots, m, \quad (3.63)$$

то она окажется квадратной, симметричной, и значения ее элементов зависят только от входных переменных и конкретного вида функций $\varphi_j(\bar{x})$ ($j = 0, 1, \dots, m$).

В матричном виде информационную матрицу \bar{I} можно представить в виде произведения транспонированной и исходной матрицы входных переменных $\bar{\Phi}$:

$$\bar{I} = \bar{\Phi}^T \cdot \bar{\Phi}. \quad (3.64)$$

При этом матрица $\bar{\Phi}$ размерностью $n \times (m + 1)$, зависящая от входных переменных и конкретного вида функций $\varphi_j(\bar{x})$ ($j = 0, 1, \dots, m$), имеет вид

$$\bar{\Phi}_{n \times (m+1)} = \begin{bmatrix} \varphi_0(\bar{x}_1) & \varphi_1(\bar{x}_1) & \cdots & \varphi_m(\bar{x}_1) \\ \varphi_0(\bar{x}_2) & \varphi_1(\bar{x}_2) & \cdots & \varphi_m(\bar{x}_2) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \varphi_0(\bar{x}_n) & \varphi_1(\bar{x}_n) & \cdots & \varphi_m(\bar{x}_n) \end{bmatrix}. \quad (3.65)$$

Соответственно правую часть СЛАУ (3.62) по аналогии с (3.63) можно записать:

$$b_u = \sum_{i=1}^n \varphi_u(\bar{x}_i) y_i^{\text{эксп}}, \quad u = 0, 1, \dots, m \quad (3.66)$$

или в матричном виде:

$$\bar{b} = \bar{\Phi}^T \cdot \bar{y}^{\text{эксп}}. \quad (3.67)$$

В результате СЛАУ (3.62), решаемая для определения коэффициентов эмпирической модели, может быть представлена:

$$\sum_{j=0}^m I_{uj} a_j = b_u, \quad u = 0, 1, \dots, m \quad (3.68)$$

или в матричном виде:

$$\bar{I} \cdot \bar{a} = \bar{b}. \quad (3.69)$$

Если для определения коэффициентов \bar{a} воспользоваться методом обратной матрицы, то получается

$$\bar{I}^{-1} \cdot \bar{I} \cdot \bar{a} = \bar{I}^{-1} \cdot \bar{b}, \quad (3.70)$$

и, так как произведение $\bar{I}^{-1} \cdot \bar{I}$ равно единичной матрице \bar{E} , т. е.

$$\bar{E} = \bar{I}^{-1} \cdot \bar{I}, \quad (3.71)$$

то

$$\bar{E} \cdot \bar{a} = \bar{I}^{-1} \cdot \bar{b} \quad (3.72)$$

или

$$\bar{a} = \bar{I}^{-1} \cdot \bar{b}. \quad (3.73)$$

Матричная формула для определения коэффициентов линейной регрессии (параметров эмпирической модели) получается после подстановки в (3.73) матричных равенств (3.64) и (3.67):

$$\hat{\bar{a}} = (\bar{\Phi}^T \cdot \bar{\Phi})^{-1} \cdot \bar{\Phi}^T \cdot \bar{y}^{\text{эксп}}. \quad (3.74)$$

Таким образом, для определения коэффициентов линейной или линеаризованной регрессионной модели необходимо выполнить следующую последовательность действий:

1) сформировать вектор наблюдений $\bar{y}^{\text{эксп}}$ и вычислить его элементы (только для линеаризованных моделей);

2) сформировать и рассчитать элементы матрицы, зависящей от входных переменных $\bar{\Phi}$ и конкретного вида функций $\phi_j(\bar{x})$ ($j = 0, 1, \dots, m$);

3) транспонировать матрицу $\bar{\Phi} \Rightarrow \bar{\Phi}^T$;

4) перемножить транспонированную матрицу $\bar{\bar{\Phi}}^T$ на исходную матрицу $\bar{\bar{\Phi}}$: $\bar{\bar{\Phi}}^T \cdot \bar{\bar{\Phi}}$;

5) выполнить обращение информационной матрицы – $(\bar{\bar{\Phi}}^T \cdot \bar{\bar{\Phi}})^{-1}$;

6) умножить полученную обратную матрицу на матрицу $\bar{\bar{\Phi}}^T$;

7) умножить полученный результат на вектор наблюдений $\bar{y}^{\text{экс}}$ и получить выборочные коэффициенты регрессии \hat{a} (3.74).

Наиболее трудоемким этапом в данной последовательности является получение матрицы входных переменных (3.65), вид которой полностью определяется используемым уравнением регрессии. Рассмотрим примеры матриц входных переменных для некоторых регрессионных моделей.

Линейная модель от одной переменной вида (3.54) или полином 1-й степени. Матрица входных переменных будет иметь вид

$$\bar{\bar{\Phi}} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix}. \quad (3.75)$$

Полиному 2-го порядка или параболической модели от одной переменной вида (3.48) будет соответствовать матрица

$$\bar{\bar{\Phi}} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{bmatrix}. \quad (3.76)$$

Полином 3-го порядка или кубическая модель от одной переменной будет иметь вид

$$\hat{y} = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3. \quad (3.77)$$

Матрица входных переменных для этой модели выглядит так:

$$\bar{\bar{\Phi}} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & x_n^3 \end{bmatrix}. \quad (3.78)$$

Полином произвольной степени m или полиномиальная модель степени m от одной переменной в общем виде может быть записана так:

$$\hat{y} = \sum_{j=0}^m a_j x^j. \quad (3.79)$$

Матрица входных переменных такой модели будет иметь вид

$$\bar{\bar{\Phi}} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^m \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^m \end{bmatrix}. \quad (3.80)$$

Матрица входных переменных для *линейной* модели вида (3.53) от m входных переменных $\bar{x} = [x_1, x_2, \dots, x_m]$ (табл. 3.5) запишется так:

$$\bar{\bar{\Phi}} = \begin{bmatrix} 1 & (x_1)_1 & (x_2)_1 & \cdots & (x_m)_1 \\ 1 & (x_1)_2 & (x_2)_2 & \cdots & (x_m)_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & (x_1)_n & (x_2)_n & \cdots & (x_m)_n \end{bmatrix}. \quad (3.81)$$

Полином 2-го порядка от двух входных переменных будет выглядеть так:

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_1^2 + a_4 x_2^2 + a_5 x_1 x_2. \quad (3.82)$$

Матрица входных переменных и последовательность получаемых коэффициентов регрессии определяются формой записи уравнения полинома. Для записи полинома в форме (3.82) матрица входных переменных будет иметь вид

$$\bar{\bar{\Phi}} = \begin{bmatrix} 1 & (x_1)_1 & (x_2)_1 & (x_1)_1^2 & (x_2)_1^2 & (x_1)_1(x_2)_1 \\ 1 & (x_1)_2 & (x_2)_2 & (x_1)_2^2 & (x_2)_2^2 & (x_1)_2(x_2)_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & (x_1)_n & (x_2)_n & (x_1)_n^2 & (x_2)_n^2 & (x_1)_n(x_2)_n \end{bmatrix}. \quad (3.83)$$

3.3. Статистический анализ линейных по параметрам уравнений регрессии

Определение коэффициентов линейной или линеаризованной модели вида (3.45) методом аппроксимации (конкретно МНК) приводит к матричной формуле (3.74), где значения элементов матрицы независимых переменных $\bar{\Phi}$ (3.65) зависят только от входных переменных \bar{x} и вида функций $\bar{\varphi}(x)$, а вектор экспериментальных значений (вектор наблюдений) $\bar{y}^{\text{эксп}}$ присутствует в этом матричном соотношении в качестве линейного сомножителя.

Поэтому целесообразно ввести матрицу \bar{L} :

$$\bar{L} = (\bar{\Phi}^T \cdot \bar{\Phi})^{-1} \cdot \bar{\Phi}^T. \quad (3.84)$$

После чего можно записать матричную формулу МНК для определения коэффициентов модели (3.74) с учетом того, что их значения являются оценками истинных значений (поэтому обозначаются \hat{a}) и получены по выборке вектора наблюдений выходной переменной $\bar{y}^{\text{эксп}}$:

$$\hat{a} = \bar{L} \cdot \bar{y}^{\text{эксп}}. \quad (3.85)$$

Если принять, что расчет по этой формуле происходит при конкретной реализации $\bar{y}^{\text{эксп}}$ элементов случайного вектора наблюдений выходной переменной \bar{y} , то элементы вектора коэффициентов регрессии \bar{a} в соответствии со свойством линейности нормального закона распределения также будут случайными величинами, определяемыми по аналогии с (3.85) по формуле:

$$\bar{a} = \bar{L} \cdot \bar{y}. \quad (3.86)$$

Статистический анализ результатов вычисления \hat{a} необходим, так как вектор $\bar{y}^{\text{эксп}}$, который влияет на значения a в соответствии с (3.85), является реализацией случайного вектора \bar{y} (это приводит к тому, что \bar{a} – также случайный вектор).

Причины случайного характера вектора \bar{y} , полученного в результате опытных измерений, следующие:

- используется случайная выборка для определения вектора наблюдений $\bar{y}^{\text{эксп}}$;
- результаты измерения каждого $\bar{y}_i^{\text{эксп}}$ ($i = 1, \dots, n$) – реализации случайных величин.

Один из видов статистического анализа – *регрессионный анализ* – предполагает, что элементы вектора $\bar{y}^{\text{эксп}}$ – реализации независимых случайных величин \bar{y} , распределенных по нормальному закону распределения, т. е. для плотности распределения y_i (i -го измерения) будет справедливо:

$$f(y_i) = \frac{1}{\sigma_{y_i} \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(y_i - m_{y_i})^2}{\sigma_{y_i}^2}\right), \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.87)$$

и числовыми характеристиками случайной величины y_i будут:

- 1) m_{y_i} – математическое ожидание;
- 2) $\sigma_{y_i}^2$ – дисперсия;
- 3) $\sigma_{y_i} = \sqrt{\sigma_{y_i}^2}$ – среднеквадратичное отклонение или стандарт.

Допущение о нормальном законе распределения элементов вектора \bar{y} – это *первое допущение* регрессионного анализа. *Второе допущение* регрессионного анализа – о неслучайности элементов вектора \bar{x} , т. е. x_i ($i = 1, \dots, r$) – неслучайные величины.

Из этих двух допущений следует, что, как уже указывалось, в соответствии со свойством линейности нормального закона распределения элементы вектора \bar{a} (3.62) также являются случайными величинами со следующими числовыми характеристиками:

- 1) m_{a_j} – математическое ожидание;
- 2) $\sigma_{a_j}^2$ – дисперсия;
- 3) σ_{a_j} среднеквадратичное отклонение или стандарт.

Третье допущение регрессионного анализа заключается в предположении об однородности дисперсии случайных величин \bar{y} . Свойство однородности дисперсий предполагает несущественное отличие дисперсий \bar{y} , что позволяет усреднять их оценки или значения, полученные по ограниченным выборкам, и распространять на всю исследуемую область изменения входных и выходных переменных (условие однородности дисперсий проверяется с помощью специальных критериев, которые здесь не рассматриваются).

В соответствии с регрессионным анализом всегда рассчитывается оценка коэффициентов $\hat{\bar{a}}$ (оценка обозначается $\hat{}$) (3.74), в результате получается *приближенная зависимость* (3.45):

$$\hat{y} = \sum_{j=0}^m \hat{a}_j \varphi_j(\bar{x}). \quad (3.88)$$

Для получения строгой зависимости, и так как y – случайная величина, необходимо строить зависимость условного математического ожидания $m_{y|\bar{x}}$ (при условии известных экспериментальных значений \bar{x}) от факторов \bar{x} , с помощью *теоретического уравнения регрессии*:

$$m_{y|\bar{x}} = \sum_{j=0}^m a_j \varphi_j(\bar{x}), \quad (3.89)$$

где a_j – истинные значения коэффициентов регрессии, называемые теоретическими коэффициентами регрессии; $m_{y|\bar{x}}$ – условное математическое ожидание случайной величины y .

При этом *регрессионный анализ* экспериментальных данных включает три этапа:

- 1) определение оценок коэффициентов регрессии методом наименьших квадратов по формуле (3.74);
- 2) определение значимости коэффициентов регрессии, т. е. существенного отличия их от нуля с помощью критерия Стьюдента t ;
- 3) определение адекватности уравнения регрессии (3.88) с помощью критерия Фишера F .

3.3.1. Определение дисперсии и ковариаций для элементов вектора наблюдений выходной переменной

Обозначим вектор математических ожиданий для n экспериментов как $\bar{m}_y = M \left[\bar{Y} \mid \bar{x} \right]$.

Соответственно, для дисперсий y_i ($i = 1, \dots, n$) для n случайных величин будет справедливо

$$\sigma_{y_i}^2 = M \left[\left(y_i - m_{y_i} \right)^2 \right], \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.90)$$

Ковариация двух случайных величин y_i и y_j равна математическому ожиданию произведения $(y_i - m_{y_i})(y_j - m_{y_j})$:

$$COV_{y_i y_j} = M \left[(y_i - m_{y_i})(y_j - m_{y_j}) \right], \quad i, j: 1, \dots, n; \quad i \neq j. \quad (3.91)$$

Для независимых нормально-распределенных случайных величин y_i и y_j

$$COV_{y_i y_j} = 0. \quad (3.92)$$

Для нормально-распределенных случайных величин вместо размерной величины $COV_{y_i y_j}$ целесообразно пользоваться безразмерным коэффициентом корреляции:

$$r_{y_i y_j} = \frac{COV_{y_i y_j}}{\sigma_{y_i} \sigma_{y_j}}, \quad i, j: 1, \dots, n; \quad i \neq j. \quad (3.93)$$

Для независимых случайных величин y_i и y_j : $r_{y_i y_j} = 0$ ($i, j: 1, \dots, n; j \neq i$).

Для дисперсий $\overline{\sigma}_y^2$ в n экспериментальных точках создается специальная матрица дисперсий-ковариаций размерностью $n \times n$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \overline{\overline{COV}}_{\bar{y}} &= M[(\bar{y} - \bar{m}_y)(\bar{y} - \bar{m}_y)^T] = \\ &= \begin{bmatrix} M[(y_1 - m_{y_1})^2] & \dots & M[(y_1 - m_{y_1})(y_n - m_{y_n})] \\ M[(y_2 - m_{y_2})(y_1 - m_{y_1})] & \dots & M[(y_2 - m_{y_2})(y_n - m_{y_n})] \\ \vdots & \dots & \vdots \\ M[(y_n - m_{y_n})(y_1 - m_{y_1})] & \dots & M[(y_n - m_{y_n})^2] \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.94)$$

В результате матрица дисперсий-ковариаций для экспериментальных значений $y_i^{\text{экс}} (i = 1, \dots, n)$ имеет вид

$$\overline{\overline{COV}}_{\bar{y}} = \begin{bmatrix} \sigma_{y_1}^2 & COV_{y_1 y_2} & \dots & COV_{y_1 y_n} \\ COV_{y_2 y_1} & \sigma_{y_2}^2 & \dots & COV_{y_2 y_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ COV_{y_n y_1} & COV_{y_n y_2} & \dots & \sigma_{y_n}^2 \end{bmatrix}. \quad (3.95)$$

Допущение об однородности дисперсий случайных величин y_i означает, что их дисперсии приблизительно равны. Примем, что

$$\sigma_{y_1}^2 \approx \sigma_{y_2}^2 \approx \dots \approx \sigma_{y_n}^2 = \sigma_y^2. \quad (3.96)$$

Принимая во внимание допущение о независимости величин y_i (3.92), матрица дисперсий-ковариаций для элементов вектора наблюдений выходной переменной будет диагональной с одинаковыми дисперсиями на диагонали, что можно записать в следующем виде:

$$\overline{\overline{COV}}_{\bar{y}} = \sigma_y^2 \cdot \overline{\overline{E}}. \quad (3.97)$$

$(n \times n)$ $(n \times n)$

3.3.2. Определение дисперсии и ковариаций для элементов вектора коэффициентов регрессии

Так как вектор \bar{a} – случайная величина, распределенная по нормальному закону, то для него можно определить математическое ожидание $\bar{m}_a = M[\bar{a}]$. По аналогии с (3.94) и (3.95) составим матрицу дисперсий-ковариаций для элементов вектора \bar{a} :

$$\begin{aligned} \overline{\overline{COV}}_{\bar{a}} &= M[(\bar{a} - \bar{m}_a)(\bar{a} - \bar{m}_a)^T] = \\ &= \begin{bmatrix} \sigma_{a_0}^2 & COV_{a_0 a_1} & \dots & COV_{a_0 a_m} \\ COV_{a_1 a_0} & \sigma_{a_1}^2 & \dots & COV_{a_1 a_m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ COV_{a_m a_0} & COV_{a_m a_1} & \dots & \sigma_{a_m}^2 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.98)$$

В соответствии с (3.86):

$$\bar{m}_a = \overline{\overline{L}} \cdot \bar{m}_y. \quad (3.99)$$

Для определения элементов матрицы дисперсий-ковариаций необходимо подставить (3.86) и (3.99) в матричную формулу (3.98).

Если в результате подстановки матрица (3.98) получится диагональной, то коэффициенты регрессии можно считать статистически независимыми.

Выполним эту подстановку, пользуясь тем, что $(\overline{\overline{A}} \cdot \overline{\overline{B}})^T = \overline{\overline{B}}^T \cdot \overline{\overline{A}}^T$:

$$\begin{aligned} \overline{\overline{COV}}_{\bar{a}} &= M \left[\left(\overline{\overline{L}} \cdot \bar{y} - \overline{\overline{L}} \cdot \bar{m}_y \right) \left(\overline{\overline{L}} \cdot \bar{y} - \overline{\overline{L}} \cdot \bar{m}_y \right)^T \right] = \\ &= M \left[\left\{ \overline{\overline{L}} \cdot (\bar{y} - \bar{m}_y) \right\} \left\{ \overline{\overline{L}} \cdot (\bar{y} - \bar{m}_y) \right\}^T \right] = \\ &= M \left[\overline{\overline{L}} \cdot (\bar{y} - \bar{m}_y) (\bar{y} - \bar{m}_y)^T \cdot \overline{\overline{L}}^T \right] = \\ &= \overline{\overline{L}} \cdot M \left[(\bar{y} - \bar{m}_y) (\bar{y} - \bar{m}_y)^T \right] \cdot \overline{\overline{L}}^T = \overline{\overline{L}} \cdot \overline{\overline{COV}}_{\bar{y}} \cdot \overline{\overline{L}}^T = \\ &= \overline{\overline{L}} \cdot \sigma_y^2 \cdot \overline{\overline{E}} \cdot \overline{\overline{L}}^T = \sigma_y^2 \underbrace{\left(\overline{\overline{\Phi}}^T \cdot \overline{\overline{\Phi}} \right)^{-1} \cdot \overline{\overline{\Phi}}^T \cdot \overline{\overline{\Phi}} \cdot \left(\overline{\overline{\Phi}}^T \cdot \overline{\overline{\Phi}} \right)^{-1}}_{\overline{\overline{E}}}. \end{aligned} \quad (3.100)$$

Таким образом, матрица дисперсий ковариаций для элементов вектора коэффициентов регрессии может быть вычислена по формуле

$$\overline{\overline{COV}}_{\bar{a}} = \sigma_y^2 \left(\overline{\overline{\Phi^T \Phi}} \right)^{-1}. \quad (3.101)$$

Матрица $\left(\overline{\overline{\Phi^T \Phi}} \right)^{-1}$ называется корреляционной матрицей и обозначается

$$\overline{\overline{C}} = \left(\overline{\overline{\Phi^T \Phi}} \right)^{-1} = \begin{bmatrix} C_{00} & C_{01} & \dots & C_{0m} \\ C_{10} & C_{11} & \dots & C_{1m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{m0} & C_{m1} & \dots & C_{mm} \end{bmatrix}. \quad (3.102)$$

Из сопоставления (3.101), (3.102) и (3.98) следует, что дисперсии коэффициентов регрессии можно выразить формулой

$$\sigma_{a_j}^2 = \sigma_y^2 C_{jj}, \quad (3.103)$$

где C_{jj} – диагональный элемент ковариационной матрицы; j – индекс коэффициента регрессии в уравнении общего вида для линейных по параметрам моделей (3.45). Ковариации коэффициентов регрессии будут выражаться формулой

$$COV_{a_i a_j} = \sigma_y^2 C_{ij}, \quad i \neq j, \quad (3.104)$$

где C_{ij} – элемент ковариационной матрицы; i, j – индексы элемента ковариационной матрицы и коэффициентов регрессии в уравнении (3.45).

Таким образом, независимость коэффициентов определяется тем, будут ли недиагональные элементы в ковариационной матрице $\overline{\overline{C}}$ (3.102) равны нулю.

Значения элементов ковариационной матрицы зависят только от экспериментальных величин вектора входных переменных \bar{x} (табл. 3.5), т. е. определяются тем, какие значения входных переменных выбраны в эксперименте. Фактически ковариационная матрица определяется тем, как поставлен (спланирован) эксперимент.

В случае *активного эксперимента* (например, полного факторного эксперимента или ортогонального центрального композиционного плана эксперимента) его проводят так, чтобы матрица $\overline{\overline{C}}$ стала диаго-

нальной, т. е. коэффициенты регрессии будут статистически независимы. В случае произвольного *пассивного эксперимента* матрица $\bar{\bar{C}}$ оказывается недиагональной, и поэтому коэффициенты будут статистически зависимы.

Матрица $\bar{\bar{C}}$ (3.102) называется также *корреляционной*, так как с помощью ее элементов можно рассчитать корреляции коэффициентов регрессии:

$$r_{a_i a_j} = \frac{C_{ij}}{\sqrt{C_{ii} C_{jj}}}. \quad (3.105)$$

3.3.3. Определение дисперсий воспроизводимости, адекватности и остаточной дисперсии

Оценка дисперсии выходной переменной y (3.96) важна для определения оценок дисперсий и ковариаций коэффициентов регрессии (3.103) и (3.104). Эта оценка определяется из *параллельных опытов* – повторных экспериментов для одного и того же набора значений входных переменных \bar{x} . Поэтому ее также можно назвать оценкой дисперсии воспроизводимости или просто *дисперсией воспроизводимости* и обозначить S_e^2 . Дисперсия воспроизводимости характеризует погрешность эксперимента.

Из экспериментальных данных, полученных в *различных опытных точках* \bar{x}_i (табл. 3.5), после определения коэффициентов уравнения регрессии по формуле (3.74) можно определить *дисперсию адекватности* S_{ad}^2 , характеризующую разброс экспериментальных значений выходной переменной относительно рассчитанных по уравнению регрессии. Дисперсия адекватности характеризует погрешность используемого для описания данных уравнения регрессии, или погрешность эмпирической модели.

Если экспериментальные данные получены в различных экспериментальных точках и при этом в этих точках проводились повторные опыты, то из данных можно рассчитать остаточную дисперсию S_R^2 , которая будет характеризовать и погрешность уравнения регрессии, и погрешность эксперимента.

Пусть выходная переменная y зависит от r входных переменных $\bar{x} = [x_1, \dots, x_r]$. Различные опытные точки \bar{x}_i будем характеризовать индексом i , изменяющимся от 1 до n (числа различных опытных точек).

3.3.3.1. Определение оценок дисперсий с различным числом параллельных опытов в каждой экспериментальной точке. Число параллельных опытов в каждой i -й экспериментальной точке будем обозначать k_i ($i = 1, \dots, n$). Данные, получаемые в таких экспериментах, могут быть сведены в таблицу вида табл. 3.6.

Таблица 3.6

Данные экспериментов с различным числом параллельных опытов в каждой точке

Номер точки	Номер параллельного опыта	Входные переменные \bar{x}			Выходные переменные
		x_1	...	x_r	
1	1	x_{11}	...	x_{1r}	$y_{11}^{\text{эксп}}$
	2				$y_{12}^{\text{эксп}}$

	k_1				$y_{1k_1}^{\text{эксп}}$
2	1	x_{21}	...	x_{2r}	$y_{21}^{\text{эксп}}$

	k_2				$y_{2k_2}^{\text{эксп}}$
...
n	1	x_{n1}	...	x_{nr}	$y_{n1}^{\text{эксп}}$

	k_n				$y_{nk_n}^{\text{эксп}}$

Остаточная дисперсия, характеризующая погрешность уравнения регрессии и эксперимента, может быть вычислена по следующей формуле:

$$S_R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{u=1}^{k_i} (\hat{y}_i - y_{iu}^{\text{эксп}})^2}{\sum_{i=1}^n k_i - p} \equiv \frac{SS_R}{V_R}, \quad (3.106)$$

где p – число значимых коэффициентов регрессии, в частности (когда все коэффициенты значимы) $p = m + 1$ (3.45); \hat{y}_i ($i = 1, \dots, n$) – значения, определяемые расчетным путем с помощью уравнения регрессии (3.64) в различных опытных точках; $y_{iu}^{\text{эксп}}$ ($i = 1, \dots, n; u = 1, \dots, k_i$) – значения,

определяемые экспериментально в i -й экспериментальной точке и параллельном опыте под номером u ; SS_R – сумма квадратов остаточной дисперсии, равная числителю формулы (3.106); ν_R – число степеней свободы остаточной дисперсии, равное знаменателю формулы (3.82).

Сумма квадратов остаточной дисперсии SS_R (3.106) равна сумме квадратов дисперсии адекватности SS_{ad} , характеризующей погрешность уравнения регрессии, и сумме квадратов дисперсии воспроизводимости SS_e , характеризующей погрешность экспериментов:

$$SS_R = SS_{ad} + SS_e. \quad (3.107)$$

Соответственно, для числа степеней свободы остаточной дисперсии S_R^2 будет справедливо:

$$\nu_R \equiv \sum_{i=1}^n k_i - p = \nu_{ad} + \nu_e. \quad (3.108)$$

Дисперсия воспроизводимости, характеризующая погрешность эксперимента, рассчитывается только на основе опытных данных по следующей формуле:

$$S_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{u=1}^{k_i} (y_{iu}^{\text{эксп}} - y_i^{\text{эксп}*})^2}{\sum_{i=1}^n (k_i - 1)} \equiv \frac{SS_e}{\nu_e}, \quad (3.109)$$

где $y_i^{\text{эксп}*}$ – среднее экспериментальное значение результатов параллельных опытов в i -й опытной точке. Это среднее значение определяется следующим образом:

$$y_i^{\text{эксп}*} = \frac{\sum_{u=1}^{k_i} y_{iu}^{\text{эксп}}}{k_i}. \quad (3.110)$$

При этом числитель формулы (3.109) равен сумме квадратов дисперсии воспроизводимости SS_e , а знаменатель – числу степеней свободы дисперсии воспроизводимости ν_e .

Дисперсия адекватности в этом случае может быть рассчитана по формуле

$$S_{ad}^2 = \frac{SS_{ad}}{\nu_{ad}}. \quad (3.111)$$

В соответствии с приведенными ранее равенствами (3.107) и (3.108), сумма квадратов дисперсии адекватности SS_{ad} и число степеней свободы дисперсии адекватности v_{ad} определяются, соответственно:

$$SS_{ad} = SS_R - SS_e; \quad (3.112)$$

$$v_{ad} = v_R - v_e. \quad (3.113)$$

3.3.3.2. Определение оценок дисперсий с одинаковым числом параллельных опытов в каждой экспериментальной точке. Допустим, в каждой экспериментальной точке число параллельных опытов одинаково и равно k . В этом случае дисперсия воспроизводимости для i -й экспериментальной точки определяется как

$$S_{ei}^2 = \frac{\sum_{u=1}^k (y_{iu}^{\text{эксп}} - y_i^{\text{эксп}*})^2}{k-1} \equiv \frac{SS_{ei}}{v_{ei}}, \quad (3.114)$$

где $y_{ij}^{\text{эксп}}$ – экспериментальные значения, полученные в параллельных опытах в i -й точке; $y_i^{\text{эксп}*}$ – усредненное экспериментальное значение в i -й точке; SS_{ei} – сумма квадратов дисперсии воспроизводимости в i -й экспериментальной точке; $v_{ei} = k - 1$ – число степеней свободы дисперсии воспроизводимости в i -й точке. Среднее значение выходной переменной в i -й экспериментальной точке находится по формуле

$$y_i^{\text{эксп}*} = \frac{\sum_{u=1}^k y_{iu}^{\text{эксп}}}{k}. \quad (3.115)$$

Дисперсия воспроизводимости на основе параллельных опытов во всех экспериментальных точках вычисляется как среднее арифметическое дисперсий в каждой точке, и формула для расчета будет иметь вид

$$S_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{u=1}^k (y_{iu}^{\text{эксп}} - y_i^{\text{эксп}*})^2}{n(k-1)} \equiv \frac{SS_e}{v_e}. \quad (3.116)$$

Для одинакового числа параллельных опытов в каждой экспериментальной точке *дисперсия адекватности* определяется как

$$S_{ad}^2 = \frac{k \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i^{\text{эксп}*})^2}{n-p} \equiv \frac{SS_{ad}}{v_{ad}}. \quad (3.117)$$

3.3.3.3. Определение оценок дисперсий при постановке параллельных опытов в одной экспериментальной точке по отдельной серии экспериментов. Если опыты в каждой точке проведены без параллельных, и для получения дисперсии воспроизводимости проведена отдельная серия из k параллельных экспериментов в одной опытной точке, то дисперсия воспроизводимости вычисляется по формуле

$$S_e^2 = \frac{\sum_{u=1}^k (y_u^{\text{эксп}} - y^{\text{эксп}*})^2}{k-1} \equiv \frac{SS_e}{v_e}, \quad (3.118)$$

где $y^{\text{эксп}*}$ – среднее значение выходной переменной в параллельных опытах. Оно рассчитывается как среднее арифметическое:

$$y^{\text{эксп}*} = \frac{\sum_{u=1}^k y_u^{\text{эксп}}}{k}. \quad (3.119)$$

Дисперсия адекватности в этом случае рассчитывается из экспериментальных данных, полученных в различных опытных точках, по уравнению

$$S_{ad}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i^{\text{эксп}})^2}{n-p} \equiv \frac{SS_{ad}}{v_{ad}}. \quad (3.120)$$

Для оценки дисперсии выходной переменной σ_y^2 целесообразно использовать S_e^2 , а при отсутствии параллельных опытов – S_{ad}^2 .

Для определения оценок дисперсий коэффициентов регрессии по формуле (3.103) используют дисперсию воспроизводимости S_e^2 в качестве оценки дисперсии выходной переменной σ_y^2 .

3.3.4. Определение значимости коэффициентов регрессии

Для определения значимости коэффициентов регрессии (3.74) используется подчиняющаяся t -распределению Стьюдента нормированная случайная величина:

$$t_j = \frac{\hat{a}_j - m_{a_j}}{S_{a_j}}, \quad (3.121)$$

где S_{a_j} – выборочная оценка среднеквадратичного отклонения для коэффициента регрессии a_j . Воспользовавшись оценкой дисперсии воспроизводимости S_e^2 и принимая во внимание, что выборочная оценка дисперсии вычисляется аналогично дисперсии (3.103), можно записать

$$S_{a_j}^2 = S_e^2 C_{jj}. \quad (3.122)$$

Соответственно выборочная оценка среднеквадратичного отклонения для коэффициентов регрессии будет равна

$$S_{a_j} = \sqrt{S_{a_j}^2} = S_e \sqrt{C_{jj}}. \quad (3.123)$$

Из определения случайной величины, подчиняющейся распределению Стьюдента, можно записать следующее вероятностное соотношение для коэффициентов регрессии \hat{a} (3.74):

$$P \left(\frac{|\hat{a}_j - m_{a_j}|}{S_e \sqrt{C_{jj}}} \leq t_{1-\alpha/2}(v_e) \right) = 1 - \alpha, \quad (3.124)$$

где α – выбранный уровень значимости для проверки статистической гипотезы; $t_{1-\alpha/2}(v_e)$ – квантиль уровня $(1 - \alpha/2)$ распределения Стьюдента с числом степеней свободы v_e ; j – индекс коэффициента регрессии в уравнении (3.45).

Квантиль рассматривается как табличное значение t и определяется в зависимости от выбранного уровня значимости α (чаще всего 0,05) и числа степеней свободы дисперсии воспроизводимости v_e . Проверка значимости коэффициентов регрессии представляет собой стандартную процедуру проверки статистической гипотезы о равенстве нулю среднего значения нормально распределенной величины. Для этого используют вероятностное соотношение (3.124) в предположении, что среднее значение коэффициента регрессии равно нулю:

$$m_{a_j} = 0. \quad (3.125)$$

Тогда вероятностное соотношение запишется

$$P \left(\frac{|\hat{a}_j|}{S_e \sqrt{C_{jj}}} \leq t_{1-\alpha/2}(v_e) \right) = 1 - \alpha. \quad (3.126)$$

Это соотношение означает, что если выполняется неравенство в скобках, то с вероятностью $(1 - \alpha)$ коэффициент регрессии a_j будет равен 0 и таким образом будет *незначим*. Другими словами, проверка значимости будет заключаться в расчете критерия Стьюдента для данного коэффициента регрессии по формуле

$$t_j^{\text{расч}} = \frac{|\hat{a}_j|}{S_e \sqrt{C_{jj}}} \quad (3.127)$$

и сравнении его с табличным значением квантиля при выбранном уровне значимости. Коэффициент регрессии a_j будет *незначим*, если рассчитанный для него критерий Стьюдента (3.127) будет меньше табличного значения квантиля:

$$t_j^{\text{расч}} \leq t_{1-\alpha/2}(v_e). \quad (3.128)$$

В противном случае коэффициент регрессии будет *значим*.

Если раскрыть вероятностное неравенство (3.124) для коэффициента регрессии, то можно получить *интервальную оценку* для математического ожидания коэффициента регрессии или доверительный интервал при выбранном уровне значимости:

$$\hat{a}_j - S_e \sqrt{C_{jj}} \cdot t_{1-\alpha/2}(v_e) \leq m_{a_j} \leq \hat{a}_j + S_e \sqrt{C_{jj}} \cdot t_{1-\alpha/2}(v_e). \quad (3.129)$$

Величина

$$\Delta a_j = t_{1-\alpha/2}(v_e) \cdot S_e \cdot \sqrt{C_{jj}} \quad (3.130)$$

называется радиусом доверительного интервала и является по сути случайной ошибкой для коэффициента регрессии a_j :

$$a_j = \hat{a}_j \pm \Delta a_j. \quad (3.131)$$

Это означает, что вместо точечной оценки коэффициентов регрессии \hat{a}_j можно пользоваться их интервальными оценками (3.131). Результат построения уравнения регрессии (3.88) (эмпирической модели) для случая одной входной переменной x можно представить графически (рис. 3.11). При использовании интервальной оценки на таком графике вместо одной кривой получится три. Одна кривая строится по точечным оценкам \hat{a}_j , другая – по максимальным оценкам:

$$a_j^{\text{max}} = \hat{a}_j + \Delta a_j, \quad (3.132)$$

третья – по минимальным оценкам:

$$a_j^{\min} = \hat{a}_j - \Delta a_j. \quad (3.133)$$

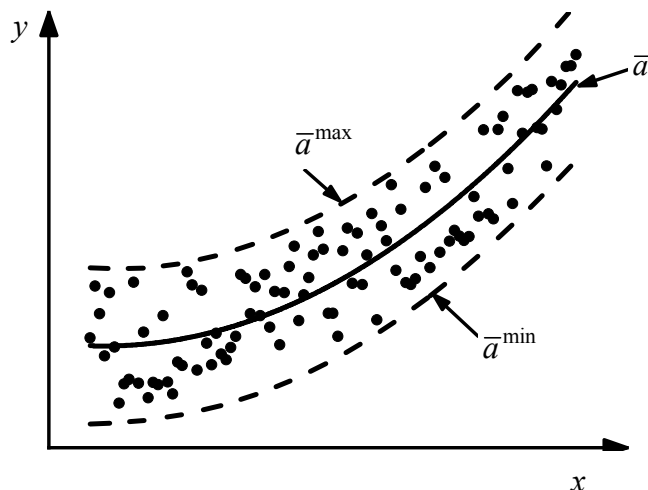


Рис. 3.11. Кривые уравнений регрессии, полученные при оценочном и критических (крайних) значениях коэффициентов регрессии

3.3.5. Процедура исключения незначимых коэффициентов регрессии

Если какой-то коэффициент уравнения регрессии (3.74) оказался незначим, то его и соответствующее слагаемое нужно исключить из уравнения регрессии. При этом будет получено новое уравнение регрессии с меньшим числом коэффициентов. Так как корреляционная матрица $\bar{\bar{C}}$ (3.102) в общем случае недиагональная и коэффициенты статистически зависимы, то после исключения одного коэффициента необходимо пересчитать оставшиеся.

В случае *незначимости нескольких коэффициентов* всегда исключается только один (так как существует статистическая зависимость коэффициентов), причем тот, для которого критерий Стьюдента (3.127) является наименьшим.

Если корреляционная матрица является диагональной (эксперимент проводился при использовании методов планирования эксперимента), то получаемые коэффициенты корреляции будут независимы и в случае незначимости нескольких коэффициентов их можно сразу все исключить из уравнения регрессии. При этом оставшиеся коэффициенты пересчитывать нет необходимости.

3.3.6. Проверка адекватности уравнения регрессии – адекватности эмпирической модели

При определении вида приближенного уравнения регрессии (3.3) и коэффициентов регрессии (3.74) практически решаются задачи структурной и параметрической идентификации эмпирической модели.

В результате успешного решения задачи идентификации (параметрической и структурной) должна получиться адекватная математическая (эмпирическая) модель (ММ). Под *адекватностью ММ* понимается качественное и количественное соответствие поведения ММ и объекта моделирования.

Качественное соответствие поведения модели и объекта моделирования определяется путем установления приближенного совпадения тенденций изменения переменных процесса в модели и объекте.

Для количественной оценки адекватности уравнения регрессии используют статистический критерий Фишера, с помощью которого проверяется однородность дисперсий адекватности и воспроизводимости. Критерий Фишера рассчитывается как отношение дисперсии адекватности к дисперсии воспроизводимости:

$$F^{\text{расч}} = \frac{S_{ad}^2}{S_e^2}. \quad (3.134)$$

Это отношение сравнивается с табличным значением распределения Фишера F при выбранном уровне значимости α (0,1; 0,05; 0,01) и двух числах степеней свободы – дисперсии адекватности (v_{ad}) и дисперсии воспроизводимости (v_e). Это табличное значение представляет собой квантиль уровня $(1 - \alpha)$ распределения Фишера с числом степеней свободы v_{ad} и v_e , которое $F_{1-\alpha}(v_{ad}, v_e)$. Модель считается *адекватной*, если рассчитанное значение критерия Фишера меньше или равно табличному:

$$F^{\text{расч}} \leq F_{1-\alpha}(v_{ad}, v_e). \quad (3.135)$$

В *противном случае* модель считается *неадекватной*. Неравенство (3.135) эквивалентно утверждению, что дисперсия адекватности значимо не превышает дисперсию воспроизводимости или что погрешность эмпирической модели (уравнения регрессии) не превышает погрешности эксперимента.

Если нет параллельных опытов и, следовательно, дисперсия воспроизводимости отсутствует, то можно оценить *эффективность* модели, сравнив дисперсию адекватности с дисперсией эксперименталь-

ных данных в различных точках относительно простого среднего. Дисперсию относительно среднего рассчитывают по уравнению

$$S_{\text{cp}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y^{\text{cp}})^2}{n-1} \equiv \frac{SS_{\text{cp}}}{\nu_{\text{cp}}}, \quad (3.136)$$

где y^{cp} – простое среднее, которое рассчитывается по формуле

$$y^{\text{cp}} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}. \quad (3.137)$$

Показатель эффективности модели может быть рассчитан как отношение дисперсии относительно среднего к дисперсии адекватности:

$$F_u = \frac{S_{\text{cp}}^2}{S_{\text{ad}}^2}. \quad (3.138)$$

Модель считается эффективной, если показатель эффективности больше 3–5.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учеб. пособие для вузов / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – М.: Академкнига, 2006. – 416 с.
2. Колесников, В. Л. Компьютерное моделирование и оптимизация химико-технологических систем: учеб. пособие для вузов / В. Л. Колесников, И. М. Жарский, П. П. Урбанович. – Минск: БГТУ, 2004. – 533 с.
3. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств: учеб. пособие для вузов / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. – М.: Высшая школа, 1991. – 400 с.
4. Кафаров, В. В. Анализ и синтез химико-технологических систем / В. В. Кафаров, В. П. Мешалкин. – М.: Химия, 1991. – 432 с.
5. Юсевич, А. И. Расчет химико-технологических систем средствами Mathcad / А. И. Юсевич. – Минск: БГТУ, 2005. – 100 с.
6. Дьяконов, В. П. Mathcad 2001: учебный курс / В. П. Дьяконов. – СПб.: ПИТЕР, 2001. – 621 с.
7. Практическое руководство по решению некоторых вычислительных задач с использованием MICROSOFT EXCEL: учеб. пособие / под ред. Т. Н. Гартмана. – М.: РХТУ, 2006. – 68 с.
8. Методы и средства автоматизированного расчета химико-технологических систем / Н. В. Кузичкин [и др.]. – Л.: Химия, 1987. – 152 с.
9. Боровиков, В. П. Statistica. Статистический анализ и обработка данных в среде Windows / В. П. Боровиков, И. П. Боровиков. – М.: Филинь, 1998. – 600 с.
10. Грачев, Ю. П. Математические методы планирования экспериментов / Ю. П. Грачев, Ю. М. Плаксин. – М.: ДеЛи принт, 2005. – 295 с.
11. Ахназарова, С. Л. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии / С. Л. Ахназарова, В. В. Кафаров: учеб. пособие для хим.-технол. спец. вузов. – М.: Высшая школа, 1985. – 327 с.
12. Слинько, М. Г. Моделирование и оптимизация каталитических процессов / М. Г. Слинько. – М.: Наука, 1965. – 354 с.
13. Пижурин, А. А. Основы научных исследований в деревообработке / А. А. Пижурин, А. А. Пижурин. – М.: ГОУ ВПО МГУЛ, 2005. – 305 с.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ.....	5
1.1. Системный подход к описанию химико-технологических процессов	6
1.2. Математическое описание химико-технологических процессов	11
1.3. Математическая модель и ее адекватность.....	14
1.4. Оптимизация химико-технологических процессов	17
1.5. Анализ, оптимизация и синтез химико-технологических систем	23
1.5.1. Анализ химико-технологических систем	24
1.5.2. Оптимизация химико-технологических систем.....	25
1.5.3. Синтез химико-технологических систем.....	26
1.6. Численные методы решения нелинейных уравнений.....	27
1.6.1. Отделение корней.....	29
1.6.2. Уточнение корней	30
2. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ БЛОЧНО-СТРУКТУРНЫЕ МОДЕЛИ ..	34
2.1. Общие принципы построения физико-химических моделей	34
2.2. Типовые гидродинамические модели движения потоков фаз в описании химико-технологических процессов	36
2.2.1. Источники вещества и теплоты для элементарных процессов.....	39
2.2.2. Модель идеального смешения	44
2.2.3. Модель идеального вытеснения	47
2.2.4. Однопараметрическая диффузионная модель.....	49
2.2.5. Принципы составления и решения систем уравнений математического описания на основе уравнений балансов	54
2.3. Декомпозиционный метод решения систем конечных и дифференциальных уравнений.....	57
2.3.1. Информационные матрицы систем уравнений математического описания и блок-схемы алгоритмов их решений	57

2.3.2. Система конечных нелинейных уравнений.....	59
2.3.3. Система с обыкновенным дифференциальным уравнением	62
2.4. Математические модели движения жидкости в простых гидравлических системах.....	67
2.4.1. Математическая модель стационарного режима движения жидкости в простой гидравлической системе	67
2.4.2. Математическая модель нестационарного режима движения жидкости в простой гидравлической системе	76
2.5. Математические модели процессов теплопередачи	80
2.5.1. Математическая модель стационарного режима процесса теплопередачи в теплообменнике типа «смешение – смешение»	81
2.5.2. Математическая модель стационарного режима процесса теплопередачи в теплообменнике типа «смешение – вытеснение»	87
2.6. Математические модели процессов химических превращений	94
2.6.1. Описание микрокинетики химических реакций	96
2.6.2. Математическая модель стационарного режима процесса в реакторе с мешалкой и рубашкой	98
2.6.3. Математическая модель стационарного режима процесса в трубчатом реакторе с рубашкой.....	103
3. ЭМПИРИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ.....	109
3.1. Элементы корреляционного анализа	111
3.1.1. Понятие корреляции	111
3.1.2. Значимость коэффициента парной корреляции	117
3.1.3. Доверительный интервал для коэффициента парной корреляции	122
3.2. Основы регрессионного анализа	123
3.2.1. Определение вида приближенного уравнения регрессии	125
3.2.2. Определение параметров эмпирических моделей (коэффициентов регрессии)	130
3.3. Статистический анализ линейных по параметрам уравнений регрессии.....	137
3.3.1. Определение дисперсии и ковариаций для элементов вектора наблюдений выходной переменной	139
3.3.2. Определение дисперсии и ковариаций для элементов вектора коэффициентов регрессии	141

3.3.3. Определение дисперсий воспроизводимости, адекватности и остаточной дисперсии.....	143
3.3.4. Определение значимости коэффициентов регрессии	147
3.3.5. Процедура исключения незначимых коэффициентов регрессии	150
3.3.6. Проверка адекватности уравнения регрессии – адекватности эмпирической модели	151
ЛИТЕРАТУРА	153

Учебное издание

Матыс Владимир Генрихович
Черник Александр Александрович

**МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ
В ОТРАСЛИ**

Тексты лекций

Редактор *Ю. Д. Нежикова*
Компьютерная верстка *О. А. Солодкевич*
Корректор *Ю. Д. Нежикова*

Издатель:

УО «Белорусский государственный технологический университет».

Свидетельство о государственной регистрации издателя,
изготовителя, распространителя печатных изданий

№ 1/227 от 20.03.2014.

Ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.