

Учреждение образования
«БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

ПРИМЕНЕНИЕ ЭВМ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Программа, методические указания и контрольные задания по курсу «Применение ЭВМ в химической технологии» для студентов заочного факультета специальностей 1-48 01 02 «Химическая технология органических веществ, материалов и изделий», 1-48 02 01 «Биотехнология»

Минск 2005

УДК 004:66(07)
ББК 32.973:35
П 76

Рассмотрены и рекомендованы к изданию редакционно-издательским советом университета

Составители:

В.П. Кобринец, Д.С. Карпович, А.В. Овсянников

Рецензент

кандидат экономических наук, доцент кафедры
информационных систем и технологий *С.И. Акунович*

По тематическому плану изданий учебно-методической литературы университета на 2005 год. Поз. 184.

Для студентов заочного факультета специальностей 1-48 01 02 «Химическая технология органических веществ, материалов и изделий», 1-48 02 01 «Биотехнология»

© УО «Белорусский государственный
технологический университет», 2005

ПРЕДИСЛОВИЕ

В настоящее время ЭВМ находят широкое применение в химии и химической технологии. Различные средства вычислительной техники, в том числе и ПЭВМ, используются в исследовании, управлении и проектировании химических производств. Это требует от химиков-технологов соответствующих навыков общения с ЭВМ и понимания существа методов решения на них различных задач.

Целью преподавания курса является обучение студентов общим методам использования ЭВМ при исследовании, расчете и оптимизации химико-технологических процессов.

В результате изучения этого курса студент должен знать:

- постановку задач по моделированию и оптимизации процессов химической технологии для решения их на ЭВМ;
- основные программно-аппаратные средства для решения задач химической технологии на ЭВМ;
- методологию математического моделирования и проведения расчетных исследований химико-технологических процессов на ЭВМ и использование их для проектирования и оптимизации химических производств.

В курсе «Применение ЭВМ в химической технологии» рассматривается широкий круг вопросов – от использования ЭВМ в исследованиях по изучению воздействия физико-химических процессов до их применения для управления процессами и производствами химической технологии и их оптимизации. Этот курс тесно связан с другими инженерно-техническими дисциплинами учебного плана, такими, как: «Вышая математика», «Математические модели в расчетах на ЭВМ», «Общая химическая технология», «Процессы и аппараты химической технологии».

Однако, в отличие от других, в этом курсе основной акцент делается на использование ЭВМ для решения практических задач математических моделей, исследования и оптимизации химико-технологических процессов с применением их математических моделей, а также по методике получения данных моделей.

1. ПРОГРАММА КУРСА

Введение

Общие принципы применения ЭВМ в химической технологии.
Современные тенденции развития ЭВМ. Применение ЭВМ для решения практических задач. Системный подход к химическим технологиям.

1.1. Программно-аппаратные средства обработки информации и моделирования химико-технологических процессов

Основные пакеты программ Mathcad, Matlab, Statistica и др. и их характеристики.

Матрицы, их основные характеристики и операции над ними. Решение систем линейных уравнений. Решение нелинейных уравнений и их систем.

Интерполяция и аппроксимация функций. Расчет интегралов. Решение обычных дифференциальных уравнений и их систем. Решение дифференциальных уравнений в частных производных.

1.2. Разработка математических моделей ХТП

Классификация математических моделей и этапы их построения. Системный подход при разработке математических моделей. Принципы построения математических моделей.

1.3. Разработка детерминированных моделей

Математическое описание ХТП на примере уравнений материального и теплового балансов.

Модель структуры потоков как основа построения математической модели ХТП.

Модель идеального смешения. Модель идеального вытеснения. Диффузионные модели: одно- и двухпараметрические. Ячеистая модель.

Использование пакетов программ для решения детерминированных моделей на ЭВМ.

1.4. Разработка статистических моделей и алгоритмов их решения на ЭВМ

Статистический подход к идентификации ХТП. Общая стратегия решения задачи идентификации.

1.5. Получение уравнений математической модели ХТП на базе пассивного эксперимента

Применение методов корреляционного и регрессионного анализа при построении математических моделей.

Метод наименьших квадратов. Уравнение регрессии для одной переменной. Метод множественной корреляции. Регрессионный анализ в матричной форме. Расчет и анализ параметров уравнений регрессии с помощью пакетов программ на ЭВМ.

1.6. Получение статистических моделей на основании активного эксперимента

Полно- и дробнофакторный эксперимент. Описание почти стационарной области. Ортогональные планы второго порядка. Симплексный метод планирования эксперимента. Метод эволюционного планирования.

1.7. Алгоритмы сложения и решения математического описания типовых процессов химической технологии

1.7.1. Математическое моделирование химических реакторов

Математическая модель кинетики химических реакций. Математическое моделирование изотермических химических реакторов идеального смешения, вытеснения и их расчет.

Математическое моделирование и расчет каскадов реакторов: алгебраический метод, метод моделирования на ЭВМ, итерационный метод расчета на ЭВМ. Математические модели адиабатических и политропических реакторов.

1.7.2. Математическое моделирование тепловых процессов

Математические модели теплообменников: прямоточных кожухотрубчатых, противоточных кожухотрубчатых.

Математические модели теплообменников с учетом накопления тепла в стенке.

Математическая модель конденсаторов.

1.7.3. Математическое моделирование массообменных процессов

Математическая модель процессов газовой абсорбции. Математическая модель процессов ректификации. Математическая модель процесса сушки.

1.8. Оптимизация ХТП на основе математических моделей с использованием ЭВМ

1.8.1. Постановка задачи оптимизации

Статистическая оптимизация.

Динамическая оптимизация.

1.8.2. Аналитические методы оптимизации и их алгоритмы

Метод классического анализа функций, метод неопределенных множителей Лагранжа. Метод линейного программирования. Методы нелинейного программирования.

1.8.3. Числовые методы оптимизации и их алгоритмы

Постановка задачи.

Метод равномерного поиска.

Метод поразрядного приближения.

Методы дихотомии и золотого сечения.

Метод квадратичной интерполяции.

Методы многомерной оптимизации.

Реализация методов оптимизации в пакетах Mathcad, Matlab.

2. КОНТРОЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ

2.1. Общие методические указания к выполнению контрольных заданий

Курс «Применение ЭВМ в химической технологии» изучается студентами в основном самостоятельно, путем проработки соответствующих разделов рекомендуемой литературы, выполнения контрольной работы и курсовой работы. Во время очной лабораторно-экзаменационной сессии студенты слушают лекции по курсу и выполняют лабораторные работы.

Изучать курс рекомендуется в той последовательности, в которой построена рабочая программа.


Контрольная работа состоит из пяти задач. Каждая задача, кроме задачи № 4, состоит из трех заданий, каждое задание включает 10 вариантов исходных данных. Задача № 4 состоит из одного задания и также включает 10 вариантов исходных данных.

Выбор номера задания (для каждой задачи) определяется по предпоследней цифре зачетной книжки. При этом задание № 1 выполняется для данных цифр 0–3; задание № 2 – для цифр 4–6; задание № 3 – для цифр 7–9.


Выбор варианта выполнения задания определяется по последней цифре зачетной книжки. Номер варианта задания в задаче № 4 также определяется по последней цифре.

Решение каждой задачи должно содержать методику расчетов, исходные данные, программу решения задачи на ЭВМ с использованием пакета программ Mathcad, таблицы результатов и графики. В [1] приведены все необходимые сведения (встроенные функции пакета Mathcad, примеры решения) для выполнения задач данной контрольной работы.

2.2. Задача № 1. Вычисления в пакете MathCad. Построение графиков

При выполнении задачи № 1 следует воспользоваться методикой для составления программ на языке MathCad, приведенной в [1, раздел 4]. При этом для задания и вычисления констант необходимо использовать оператор присвоения  [1, подраздел 4.1], например:

$$a := 2.5 \quad b1 := 3 \cdot \sin(a).$$

Для создания переменной, имеющей несколько значений, используют векторы-столбцы [1, подраздел 4.4], шаблоны которых можно создать с помощью кнопки  на панели «Matrix». При этом в появившемся диалоговом окне необходимо задать размер матрицы с помощью ячеек «Rows» (количество строк) и «Columns» (количество столбцов). Введя в ячейки необходимые цифры, следует нажать кнопку «ОК». В появившемся шаблоне пустые ячейки заполняются цифрами. В итоге созданный вектор-столбец будет иметь вид


$$\Theta := \begin{pmatrix} 34 \\ 12.1 \\ 7 \end{pmatrix}$$

В случае, когда хотя бы одна из переменных в выражении принимает не одно, а несколько значений, для вычисления выражения необходимо создавать функцию [1, подраздел 4.1]:

$$Nf(\Theta) := \frac{2 \cdot \Theta + 3.98}{4} + 2^{0.14}.$$

Если в последующих выражениях есть обращение к переменной, заданной с помощью функции, то эти выражения записываются следующим образом:

$$Vtoraja_funkcija(\Theta) := \frac{Nf(\Theta) + 4}{10 \cdot \Theta}.$$

После ввода всех необходимых констант, выражений, функций и матриц осуществляют вывод вычислений на экран. При этом перед окончательным выводом необходимо задать ранжированную переменную, с помощью которой вычисления будут производиться последовательно для первого, второго и т. д. числа в векторе-столбце. Ранжированная переменная задается аналогично простой [1, подраздел 4.3], для ее создания надо указать первое и последнее число ряда. Эти два числа разделяются оператором ранжирования, имеющего вид многоточия. Величина шага при этом принимается равной 1. Оператор ранжирования можно ввести с помощью кнопки , находящейся на панели «Matrix». В итоге будет получено следующее выражение:

$$i := 0..2.$$

При создании ранжированной переменной следует иметь в виду, что по умолчанию нумерацию строк и столбцов пакет MathCad произ-

водит начиная не с единицы, а с нуля. Таким образом, приведенное ранее выражение будет означать в последующем адресацию к нулевому, первому и второму элементу вектора.

Для вывода результата вычислений необходимо использовать оператор \equiv [1, подраздел 4.2]. При этом вместо матрицы-столбца обращаются к отдельным элементам:


$$\text{Vtoraja_funkcija}(\Theta_i) = \begin{bmatrix} 0.068 \\ 0.1 \\ 0.137 \end{bmatrix}$$

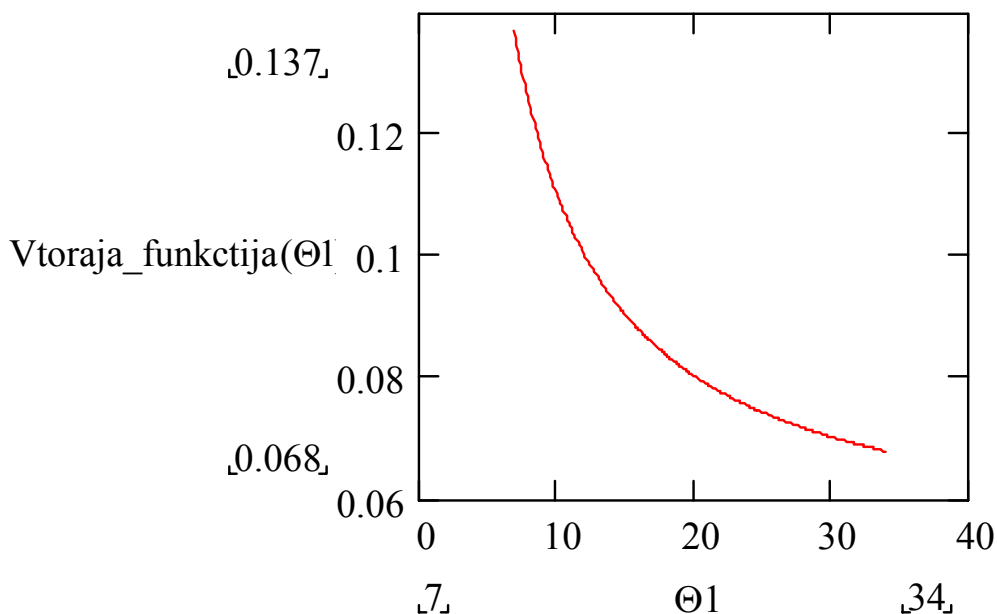
Переход к нижнему индексу при обращении к матрице-столбцу осуществляют с помощью кнопки \times_n на панели «Matrix».

Для вывода графика необходимо создать еще одну ранжированную переменную, но уже с шагом, отличным от единицы:

$$\Theta1 := 7, 7.1..34$$

Число, указанное после запятой, является вторым числом создаваемого ряда. Таким образом, в примере выше переменная $\Theta1$ будет изменяться от 7 до 34 с шагом 0,1.

Шаблон графика [1, раздел 7] можно ввести с помощью кнопки , находящейся на панели «Graph». В нижней ячейке шаблона указывают ранжированную переменную, а в левой ячейке – имя функции с указанием ранжированной переменной в скобках в качестве входного аргумента:



Задание 1

Составить программу в пакете MathCad для расчета мощности электродвигателя привода рамной мешалки. Исходные данные в соответствии с номером варианта необходимо взять из табл. 1. В зависимости от номера варианта один из параметров изменяется согласно заданию. Расчет необходимо провести для всех значений изменяемого параметра.

Также необходимо построить график зависимости мощности электродвигателя от изменяемого параметра. Диапазон изменения параметра задан в табл. 1. Сравнить соответствие вычисленных значений полученному графику.

В ходе составления программы необходимо воспользоваться следующими формулами [2, с. 39].

Диаметр мешалки d , Вт, определяется как

$$d = D - 2 \cdot \delta,$$

где D – диаметр аппарата, м; δ – зазор между лопастями мешалки и стенкой аппарата, м.

Высота мешалки h , м, вычисляется по формуле

$$h = 0,6 \cdot H,$$

где H – высота слоя жидкости в аппарате, м.

Число оборотов n , с^{-1} ,

$$n = \frac{\omega}{\pi \cdot d},$$

где ω – окружная скорость мешалки, м/с.

Значение критерия Рейнольдса Re находят по формуле

$$Re = \frac{n \cdot d^2 \cdot \rho}{\mu},$$

где ρ – плотность жидкости, кг/м^3 ; μ – вязкость жидкости, $\text{Н}\cdot\text{с/м}^2$.

Критерий мощности K_N , затраченной на перемешивание среды, можно определить по формуле

$$K_N = 12 \cdot Re^{0,77} \cdot \left(\frac{h}{d} \right).$$

Мощность N , Вт, затрачиваемую непосредственно на перемешивание среды, можно определить по формуле

$$N = K_N \cdot \mu \cdot n^2 \cdot d^3.$$

Мощность N_c , Вт, теряемую в сальнике, можно вычислить по формуле

$$N_c = 9,84 \cdot (p + 0,98 \cdot 10^5) \cdot f_{\delta} \cdot l_{\text{н}} \cdot n \cdot d_{\text{а}}^2,$$

где p – избыточное давление в аппарате, Н/м²; f_m – коэффициент трения набивки сальника; l_c – длина набивки сальника, м, определяется по формуле $l_{\text{н}} = 4 \cdot d_{\text{а}}$; $d_{\text{в}}$ – диаметр вала мешалки, м.

Для расчета мощности электропривода N_3 , Вт, необходимо воспользоваться следующей формулой:

$$N_y = \frac{K_1 \cdot N + N_{\text{н}}}{\eta},$$

где $K_1 = 0,75 \cdot H/D$ – коэффициент, учитывающий заполнение сосуда перемешиваемой средой; η – коэффициент полезного действия.

Таблица 1

Исходные данные к заданию 1

Вариант	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
D , м	0,75 0,8 1	0,69 0,7 0,9	1,2	1	1,6	1,8	0,6	1	0,9	1,2
δ , м $\times 10^{-3}$	25	35	22, 25, 33	32, 35, 39	30	20	25	30	40	25
H , м	1,1	1,5	1,4	1,3	1,2	1	1,4	1,2	1,5	1,3
ω , м/с	2,8	2,4	3,1	4,2	3,3, 3,8, 3,9	2,2 2,5 2,7	2,5	3,2	4,1	3,4
ρ , кг/м ³	1100	1020	900	910	870	890	950 1090 1120	960 1040 1050	1090	970
μ , Н·с/м ²	5	4,2	3,5	3,2	3,7	5,3	4,1	5,5	3,2, 4, 4,6	3,6, 4, 4,9
p , Н/м ² ·10 ⁵	10	8	5	6	4	7	9	16	18	3
f_m	0,18	0,2	0,22	0,2	0,21	0,19	0,18	0,22	0,21	0,19
$d_{\text{в}}$, м	0,04	0,03	0,045	0,06	0,065	0,04	0,04	0,03	0,05	0,03
N , м	0,9	0,87	0,88	0,85	0,88	0,89	0,9	0,86	0,87	0,85
Диапазон изменения параметра	$D =$ 0,7– 1,1	$D =$ 0,6– 1	$\delta =$ 20–35	$\delta =$ 30–40	$\omega =$ 3,3– 4	$\omega =$ 2– 2,9	$\rho =$ 900– 1200	$\rho =$ 950 – 1100	$\mu =$ 3– 4,6	$\mu =$ 3,6– 5

Задание 2

Составить программу в пакете MathCad для расчета необходимой производительности и эффективной мощности вакуум-насоса, предназначенного для циклической откачки воздуха из сосуда. Про-

цесс разрежения воздуха в сосуде принять политропным. Исходные данные в соответствии с номером варианта необходимо взять из табл. 2. В зависимости от номера варианта один из параметров изменяется в соответствии с заданием. Расчет необходимо провести для всех значений изменяемого параметра.

Также необходимо построить график зависимости эффективной мощности вакуум-насоса от изменяемого параметра. Диапазон изменения параметра задан в табл. 2. Сравнить соответствие вычисленных значений полученному графику.

При расчете необходимо воспользоваться следующими формулами [2, с. 474–475].

Производительность по всасыванию вакуум-насоса $V_{\text{мин}}$, м³/мин, находят по формуле

$$V_{\text{вс}} = \frac{V_{\text{сос}}}{m \cdot z} \cdot 2,3 \cdot \lg \left(\frac{p_2}{p_1} \right),$$

где $V_{\text{сос}}$ – объем сосуда, м³; m – показатель политропы расширения газа; z – время откачки, мин; p_2 – начальное давление в сосуде, $p_2 = 10,2$ Н/см²; p_1 – конечное остаточное давление в сосуде, Н/см².

Из формулы $p_2/p_1 = m^{m/(m-1)}$ можно выразить промежуточную величину p_i , которую необходимо использовать в последующих формулах:

$$p_i = p_2 / m^{\frac{m}{m-1}}.$$

Затем необходимо учесть потери в клапанах $\Delta p_{\text{н}}$ и $\Delta p_{\text{в}}$:

$$p_i = p_2 \cdot \frac{(100 + \Delta p_i)}{100}, \quad p_{\text{а}} = p_1 \cdot \frac{(100 - \Delta p_{\text{а}})}{100},$$

где $p_{\text{н}}$ и $p_{\text{в}}$ – соответственно давление нагнетания и всасывания, Н/см²; $\Delta p_{\text{н}}$ и $\Delta p_{\text{в}}$ – потери в клапанах, %.

Температура в конце сжатия T_2 , К, составит

$$T_2 = T_1 \cdot \left(\frac{p_i}{p_{\text{а}}} \right)^{\frac{m-1}{m}},$$

где T_1 – температура в начале сжатия, К.

Давление при выравнивании $p_{\text{выр}}$, Н/см², определяют по формуле

$$p_{\text{а\ddot{a}\delta}} = \frac{\frac{\varepsilon + \varepsilon_1}{T_2} \cdot p_i + \frac{1 + \varepsilon + \varepsilon_1}{T_1} \cdot p_{\text{а}}}{1 + 2 \cdot \varepsilon + 2 \cdot \varepsilon_1} \cdot T_1,$$

где ε – коэффициент мертвого пространства; ε_1 – коэффициент объема выравнивания или перепуска.

Далее необходимо определить объем газа $v_{\text{выр}}$, м³/кг, в момент выравнивания давления при температуре выравнивания $T_{\text{выр}} = T_1$ и найденном значении давления $p_{\text{выр}}$

$$v_{\text{âüð}} = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{T_1}{273} \cdot \frac{p_i}{p_{\text{âüð}}},$$

где ρ – плотность газа при температуре 273К и давлении p_n , кг/м³.

Полная мощность вакуум-насоса $N_{\text{пол}}$, Вт, может быть найдена по формуле

$$N_{\text{îë}} = \frac{V_{\text{îë}} \cdot c_p \cdot (T_2 - T_1)}{60 \cdot v_{\text{âüð}} \cdot \lambda_p \cdot \lambda_t \cdot \lambda_{\text{â}}},$$

где c_p – весовая теплоемкость, Дж·кг/град; λ_p , λ_t и $\lambda_{\text{â}}$ – конструктивные коэффициенты, характеризующие вакуум-насос. В расчетах следует произведение $\lambda_p \cdot \lambda_t \cdot \lambda_{\text{â}}$ принять равным 0,85.

Эффективная мощность $N_{\text{эф}}$, Вт, при этих условиях равна

$$N_{\text{ýð}} = \frac{N_{\text{îë}}}{\eta_{\text{âð}}},$$

где $\eta_{\text{мех}}$ – механический КПД вакуум-насоса.

Таблица 2

Исходные данные к заданию 2

Вариант	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$V_{\text{сос}}, \text{м}^3$	1 1,2 1,7	1,8 2 2,5	1,5	3	2,5	4	5	1,5	6	3,5
m	1,1	1	1,2	1,3	1,1	1,5	1,3	1,4	1,5	1,2
$z, \text{мин}$	10	11	13	12	15	14	13	9	14	7
$p_1, \text{Н/см}^2$	0,199	0,133	0,266 0,27 0,281	0,199 0,201 0,21	0,332	0,144	0,274	0,214	0,399	0,142
$\Delta p_n, \%$	7	8	9	8	6, 8, 9	5, 7, 8	9	7	8	8
$\Delta p_b, \%$	6	5	7	5	4	6	5, 8, 9	4, 7, 8	5	7
$T_1, \text{К}$	286	295	290	300	305	301	293	310	307 302 290	287 290 295

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
ε	0,06	0,055	0,058	0,053	0,04	0,059	0,05	0,03	0,056	0,051
ε_1	0,04	0,032	0,031	0,033	0,032	0,035	0,03	0,034	0,031	0,037
ρ , кг/м ³	1,25	0,771	0,09	1,293	1,429	0,717	1,25	2,02	1,977	1,356
c_p , Дж·кг/град	1040	2220	1425	1030	910	220	1040	1860	840	1730
$\eta_{\text{мех}}$	0,85	0,93	0,9	0,86	0,94	0,87	0,88	0,92	0,91	0,95
Диапазон изменения параметра	$V_{\text{сос}}=$ 1–2	$V_{\text{сос}}=$ 1,5– 2,5	$p_1=$ 0,26– 0,281	$p_1=$ 0,19– 0,21	$\Delta p_{\text{н}}=$ 6–10	$\Delta p_{\text{н}}=$ 5–8	$\Delta p_{\text{в}}=$ 5–9	$\Delta p_{\text{в}}=$ 4–8	$T_1=$ 290– 310	$T_1=$ 280– 295

Задание 3

Составить программу в пакете MathCad для расчета вспомогательного времени, затрачиваемого на загрузку, разогрев охлаждения и опорожнение периодического реактора. При проведении вычислений время опорожнения реактора принять равным времени загрузки. Исходные данные в соответствии с номером варианта необходимо взять из табл. 3. В зависимости от номера варианта один из параметров изменяется в соответствии с заданием. Расчет необходимо провести для всех значений изменяемого параметра.

Также необходимо построить график зависимости вспомогательного времени от изменяемого параметра. Диапазон изменения параметра задан в табл. 3. Сравнить соответствие вычисленных значений полученному графику.

Для расчетов необходимо использовать следующие формулы [2, с. 64–66].

Тепло, затрачиваемое на нагрев реактора и реакционной смеси $Q_{\text{н}}$, Дж, от начальной температуры $T_{\text{н}}$

$$Q_{\text{н}} = (G_{\text{р}} \cdot \tilde{c}_{\text{р}} + G \cdot c) \cdot (T_{\text{р}} - T_{\text{н}}),$$

где $G_{\text{р}}$ – масса реактора, кг; $c_{\text{р}}$ – теплоемкость материала реактора, Дж·кг/град; G – масса загрузки, кг; c – теплоемкость реакционной массы, Дж·кг/град; $T_{\text{р}}$ – температура реакции, К; $T_{\text{н}}$ – начальная температура, К. Величину $T_{\text{н}}$ следует принять равной 293К.

Средняя разность температур $\Delta T_{\text{р}}$, К, при разогреве реактора

$$\Delta T_{\text{р}} = \frac{T_{\text{р}} - T_{\text{н}}}{2,3 \cdot \lg \left(\frac{T_{\text{н}} - T_{\text{н}}}{T_{\text{н}} - T_{\text{р}}} \right)},$$

где T_n – температура водяного пара, К.

Время разогрева τ_p , ч, можно рассчитать по формуле

$$\tau_\delta = \frac{Q_i}{K_2 \cdot F \cdot \Delta T_\delta \cdot 3600},$$

где K_2 – коэффициент теплопередачи при обогреве паром, Вт/м²·град;
 F – фактическая поверхность теплообмена, м².

Тепло, отнимаемое при охлаждении Q_o , Дж, до конечной температуры T_k

$$Q_i = (G_\delta \cdot \tilde{n}_p + G \cdot c) \cdot (T_\delta - T_\epsilon),$$

где T_k – конечная температура, К.

Средняя разность температур при охлаждении ΔT_o , К, рассчитывается по формуле

$$\Delta T_i = \frac{T_\delta - T_\epsilon}{2,3 \cdot \lg \left(\frac{T_\delta - \theta_1}{T_\epsilon - \theta_1} \right)} \cdot \frac{A - 1}{2,3 \cdot \lg(A)},$$

где θ_1 – температура хладоносителя, поступающего в реактор, К. Величину A в данном выражении можно найти по следующему отношению

$$A = \frac{T_\epsilon - \theta_1}{T_\epsilon - \theta_2},$$

где θ_2 – температура хладоносителя, уходящего из реактора в конце охлаждения, К.

Время охлаждения реактора τ_o , ч, равно

$$\tau_i = \frac{Q_i}{K_3 \cdot F \cdot \Delta T_i \cdot 3600},$$

где K_3 – коэффициент теплопередачи при охлаждении хладоносителем, Вт/м²·град.

Расход реакционной массы при заполнении V , м³/ч,

$$V = 0,785 \cdot d^2 \cdot \omega \cdot 3600,$$

где d – диаметр трубы заполнения, м; ω – линейная скорость реакционной массы при заполнении, м/с.

Время заполнения реактора τ_3 , ч,

$$\tau_\varphi = \frac{V_\delta \cdot \varphi}{V},$$

где V_p – объем реактора, м³; φ – коэффициент заполнения.

Вспомогательное время $\tau_{\text{всп}}$, ч, находят как сумму времени нагрева, охлаждения, заполнения и опорожнения:

$$\tau_{\text{всп}} = \tau_{\text{н}} + \tau_{\text{о}} + \tau_{\text{з}} + \tau_{\text{оп}}$$

где $\tau_{\text{оп}}$ – вспомогательное время, ч.

Если время опорожнения принять равным времени заполнения, то вспомогательное время можно найти по формуле

$$\tau_{\text{всп}} = \tau_{\text{н}} + \tau_{\text{о}} + 2 \cdot \tau_{\text{з}}$$

Таблица 3

Исходные данные к заданию 3

Вариант	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
G_p , кг	950	1010	1330	425	1600	850	960	1250	920	1550
c_p , Дж·кг/град	551	463	452	505	512	468	497	457	530	503
G , кг	2040	3450	5141	1246	6720	1479	2610	4914	2366	6336
c , Дж·кг/град	1822	1587	1681	1791	1879	1755	1846	1745	1846	1795
T_p , К	368 374 379	383 385 390	413	390	405	418	383	376	378	398
$T_{\text{п}}$, К	394	411	434 438 439	411 419 420	432	446	413	403	415	417
K_2	350	195	120	220	112	280	300	190	207	105
F , м ²	6,26	9,79	13,15	3,65	15,66	4,24	7,83	13,15	6,78	16,7
T_k , К	303	319	344	326	332 338 340	350 351 353	317	312	314	330
θ_1 , К	293	291	297	294	303	288	289 292 293	292 293 295	299	300
θ_2 , К	304	300	307	305	312	298	300	304	302 307 308	308 310 311
K_3	305	175	110	198	100	265	270	170	190	93
d , м	0,05	0,04	0,03	0,06	0,07	0,05	0,06	0,04	0,07	0,08
ω , м/с	1,5	1,4	1,3	1,6	1,7	1,6	1,4	1,7	1,9	1,6
φ	0,6	0,75	0,8	0,7	0,75	0,65	0,6	0,8	0,65	0,8
V_p , м ³	4	5	6,3	2	8	2,5	5	6,3	4	8
Диапазон изменения параметра	$T_p =$ 380–390	$T_p =$ 380– 390	$T_{\text{п}} =$ 430– 440	$T_{\text{п}} =$ 410– 420	$T_k =$ 330– 340	$T_k =$ 350– 360	$\theta_1 =$ 285– 293	$\theta_1 =$ 290– 295	$\theta_2 =$ 302– 310	$\theta_2 =$ 305– 311

2.3. Задача № 2. Решение нелинейных уравнений и их систем

При выполнении задачи № 2 следует использовать методiku, приведенную в [1, раздел 10] для составления программы.

В процессе моделирования и расчетов процессов химической технологии часто возникает необходимость в решении уравнений, имеющих вид

$$f(x) = 0, \quad (1)$$

где функция $f(x)$ определена и непрерывна на некотором интервале $a \leq x \leq b$ ($[a, b]$). Если функция представляет собой многочлен, то уравнение (1) называется алгебраическим. Если в запись уравнения (1) входят трансцендентные функции (показательная a^x , логарифмическая $\log_a x$, тригонометрическая $\sin(x)$, $\operatorname{tg}(x)$ и др.), то такое уравнение называется трансцендентным. Значение x , при котором выполняется условие $f(x) = 0$, называется корнем уравнения (1).

В общем случае функция $f(x)$ не имеет аналитических формул для определения корней. В силу этого разработаны численные методы решения уравнений вида (1), которые позволяют определить приближенные значения корней с заданной степенью точности.

Процесс нахождения приближенных корней уравнения (1) состоит из двух этапов: 1) определение корней, т. е. разбиение области определения функции $f(x)$ на отрезки, в каждом из которых содержится только один корень уравнения (1); 2) уточнение приближенных корней, т. е. доведение их до заданной степени точности.

Применяется несколько численных методов определения корней уравнений с применением ЭВМ.

Метод простых итераций. Данный метод основан на представлении (1) в виде

$$x = \varphi(x) \quad (2)$$

и многократном применении итерационной формулы $x_{n+1} = \varphi(x_n)$ до тех пор, пока соблюдается условие

$$|x_{n+1} - x_n| \geq \varepsilon, \quad (3)$$

где ε – заданная погрешность вычисления корня \bar{x} . Итерационный процесс сходится (т. е. $x_n \rightarrow \bar{x}$ при $n \rightarrow \infty$), если соблюдается условие $f'(x) < 1$ при $a < x < b$.

В качестве первого приближенного значения искомого корня можно взять любую точку $a < x_0 < b$, которая называется начальным

приближением. Для получения следующего приближения x_1 в правую часть уравнения (2) вместо x подставим x_0 , так что

$$x_1 = \varphi(x_0).$$

Далее находим

$$x_2 = \varphi(x_1);$$

$$x_{n+1} = \varphi(x_n).$$

На каждом этапе вычислений проверяется условие (3).

Метод деления отрезка $[a, b]$ пополам (метод дихотомии). Данный метод реализуется следующим алгоритмом (для $f(a) > 0$):

1) находится $x = \frac{a+b}{2}$; 2) вычисляется $f(x)$; 3) если $f(x) > 0$, задается $a = x$, иначе $b = x$; 4) проверяется условие $b-a > \varepsilon$: если оно выполняется, переходим к п. 1, если не выполняется, вычисления заканчиваются и считается, что $x = \bar{x}$ с заданной точностью ε .

Число итераций при использовании этого метода

$$N = \frac{\ln((b-a)/\varepsilon)}{\ln(2)} \quad (4)$$

значительно. Однако при любой ширине отрезка $[a, b]$ сходимость гарантирована.

Метод Ньютона (касательных). Данный метод основан на замене $f(x)$ в точке начального приближения $x = x_0$ касательной, пересечение которой с осью X дает первое начальное приближение x_1 и т. д. Таким образом, итерационный процесс схождения к корню реализуется формулой

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n) \quad (5)$$

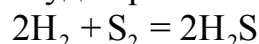
до тех пор, пока соблюдается условие (3).

Метод обеспечивает быструю (квадратичную) сходимость, если

$$f(x_0) \cdot f''(x_0) > 0. \quad (6)$$

В качестве x_0 выбирают тот конец отрезка $[a, b]$, на котором знаки $f(x_0)$ и $f''(x_0)$ совпадают. Выигрыш во времени вычислений за счет быстрой сходимости уменьшается из-за необходимости вычисления помимо $f(x_n)$ производной $f'(x_n)$.

Задание 1. В закрытом сосуде протекает реакция



Исходные концентрации компонентов реакции равны соответственно C_{H_2} , C_{S_2} , $C_{\text{H}_2\text{S}}$, константа равновесия процесса K_c . В результа-

те установления в системе состояния равновесия концентрация сероводорода изменилась на x моль/дм³. Уравнение, связывающее приведенные величины, имеет следующий вид:

$$0,5K_c x^3 + x^2(1 - K_c \cdot C_{S_2} - K_c \cdot C_{H_2}) + x \cdot (2C_{H_2S} + 2K_c \cdot C_{H_2} \cdot C_{S_2}) + 0,5K_c \cdot C_{H_2}^2 + C_{H_2S} - K_c \cdot C_{H_2}^2 C_{S_2} = 0. \quad (7)$$

Найти значение x для следующих вариантов задания (табл. 4). Начальные приближения для нахождения корней выбрать на интервале $[0, 0,5]$.

Таблица 4

Исходные данные к заданию 1

Вариант	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
K_c	105	107	113	95	86	92	102	82	102	100
C_{H_2} , моль/л	0,72	0,75	0,68	0,89	0,84	0,80	0,90	0,92	0,78	0,82
C_{S_2} , моль/л	0,15	0,18	0,22	0,16	0,25	0,19	0,25	0,17	0,24	0,17
C_{H_2S} , моль/л	0,004	0,006	0,007	0,004	0,007	0,008	0,009	0,010	0,012	0,005

Задание 2. Вычисление степени окисления азота.

Оксид азота окисляется по реакции $2NO + O_2 \rightleftharpoons 2NO_2$. Скорость реакции описывается уравнением

$$\frac{d([NO])}{d\tau} = K \cdot [NO]^2 \cdot [O_2] = K \cdot (1-x)^2 \cdot (b-x), \quad (8)$$

где τ – время реакции; $b = 2[O_2]_0/[NO]_0$ – удвоенное отношение концентраций кислорода и окиси азота в исходном газе; K – константа скорости реакции; x – степень окисления окиси азота. Принимаем $b = 2$.

Для решения данной задачи необходимо получить интегральную форму кинетического уравнения, т. е. проинтегрировать уравнение (8). В результате получаем

$$\frac{x}{(1-x)(b-x)} - \frac{2,3}{(b-x)^2} \lg \frac{b-x}{b(1-x)} = K\tau[NO]_0^2. \quad (9)$$

Решить данное уравнение при следующих значениях параметров (табл. 5).

В качестве начального приближения принять $x_0 = 0,8$.

Таблица 5

Исходные данные к заданию 2

Вариант	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$[\text{NO}]_0$, моль/л	0,03	0,05	0,04	0,06	0,07	0,15	0,05	0,08	0,12	0,04
K	5,6	7,3	8,2	10,5	6,3	9,5	6,3	7,8	11,0	10,8
τ , с	25	31	40	28	45	51	35	40	56	48

Задание 3. Система уравнений материального баланса для установившегося режима работы биореактора относительно утилизируемого субстрата и образующейся биомассы микроорганизмов имеет следующий вид

$$\frac{\mu_m \cdot S \cdot x}{K_s + S} - D(x - x_0) = 0;$$

$$D(S_0 - S) - \alpha^s \frac{\mu_m \cdot S \cdot x}{K_s + S} = 0,$$

где S , x – концентрации субстрата и биомассы; μ_m – максимальная скорость роста микроорганизмов; S_0 , x_0 – начальные концентрации субстрата и биомассы; D – скорость протока; α^s – экономический коэффициент, K_s – коэффициент пропорциональности.

Решить данную систему нелинейных уравнений, т. е. определить x и S при следующих значениях параметров (табл. 6). Величину x_0 принять равной 0,1 г/л, а D – равной 0,4 ч⁻¹.

Таблица 6

Исходные данные к заданию 3

Вариант	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
μ_m , ч ⁻¹	0,22	0,25	0,13	0,16	0,28	0,17	0,33	0,25	0,16	0,19
α^s , г/г	0,37	0,32	0,41	0,32	0,45	0,63	0,52	0,37	0,29	0,45
S_0 , г/л	20	25	27	18	29	32	22	35	34	41
K_s , г/л	0,21	0,18	0,24	0,31	0,20	0,28	0,33	0,26	0,31	0,35

2.4. Задача № 3. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений и их систем

При выполнении задачи № 3 следует использовать методику, приведенную в [1, раздел 11] для составления программы.

Рассмотрим некоторые численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений.

Постановка задачи.

Дано обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка

$$y' = f(x, y). \quad (10)$$

Требуется найти решение $y = y(x)$ этого уравнения, удовлетворяющее начальному условию

$$y(x_0) = y_0. \quad (11)$$

Такая задача называется задачей Коши. Геометрический смысл решения этой задачи состоит в нахождении интегральной кривой $y = y(x)$, проходящей через заданную точку $A_0(x_0, y_0)$ (рис. 1).

Численное решение задачи Коши состоит в нахождении значений y_1, y_2, \dots, y_n в точках $x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h, \dots, x_n = x_0 + nh$ отрезка $[a, b]$, где h – шаг интегрирования $x_0 = a, x_n = b$.

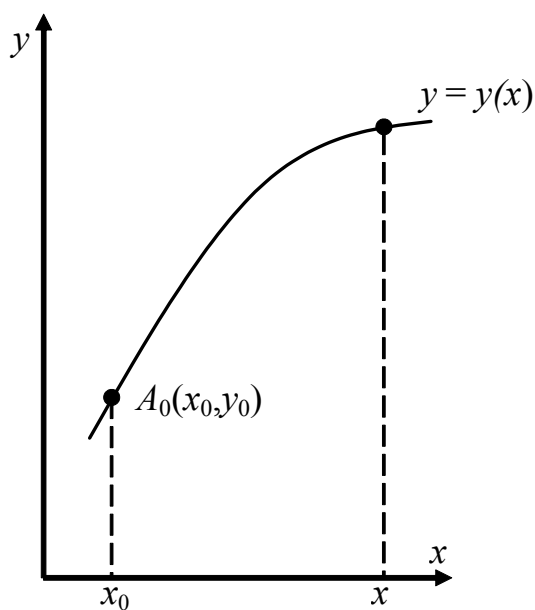


Рис. 1. График интегральной кривой $y = y(x)$, проходящей через заданную точку $A_0(x_0, y_0)$

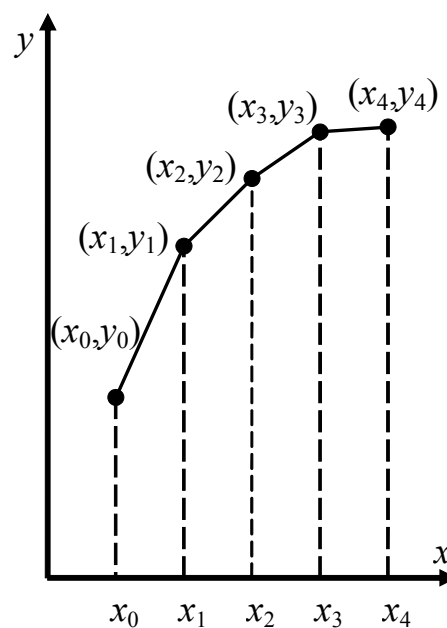


Рис. 2. Ломаная Эйлера

Нанеся точки $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_2, y_2)$ на координатную плоскость и соединив их отрезками прямой, получим ломаную линию, называемую ломаной Эйлера (приближенное изображение интегральной кривой (рис. 2)).

Метод Эйлера.

Обозначим $\Delta y_0 = y_1 - y_0, \Delta y_1 = y_2 - y_1, \dots, \Delta y_{n-1} = y_n - y_{n-1},$
 $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i = h \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n - 1).$ Заменив производную в уравнении (10) отношением конечных разностей, запишем

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = f(x, y), \quad (12)$$

откуда $\Delta y = f(x, y) \cdot \Delta x.$

При $x = x_0$ будем иметь $\frac{\Delta y_0}{\Delta x} = f(x_0, y_0), \Delta y_0 = f(x_0, y_0) \cdot \Delta x$ или

$$y_1 - y_0 = f(x_0, y_0) \cdot h.$$

Следовательно, $y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0).$

При $x = x_1$ уравнение (12) примет вид

$$\Delta y_1 = f(x_1, y_1) \cdot \Delta x$$

или $y_2 - y_1 = h \cdot f(x_1, y_1), y_2 = y_1 + h \cdot f(x_1, y_1).$

Аналогично находим:

$$y_3 = y_2 + h \cdot f(x_2, y_2);$$

$$\dots\dots\dots$$

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

$$\dots\dots\dots$$

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

Метод Эйлера – простейший и сравнительно грубый численный метод интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений и применяется в основном для ориентировочных расчетов.

Метод Эйлера может быть применен к решению систем дифференциальных уравнений. Пусть задана система двух уравнений первого порядка

$$\begin{aligned} y' &= f_1(x, y, z); \\ z' &= f_2(x, y, z) \end{aligned} \quad (13)$$

с начальными условиями $y(x_0) = y_0, z(x_0) = z_0.$

Приближенные значения $y(x_i) = y_i, z(x_i) = z_i$ находятся по формулам:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + \Delta y_i; \\ z_{i+1} &= z_i + \Delta z_i, \end{aligned} \quad (14)$$

где $\Delta y_i = h \cdot f_1(x_i, y_i, z_i); \Delta z_i = h \cdot f_2(x_i, y_i, z_i) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n - 1).$

Метод Рунге – Кутта.

Последовательность вычислений по методу Рунге – Кутта следующая:

1) разбиваем отрезок $[a, b]$ на n равных частей точками $x_i = x_0 + i \cdot h$ ($i = 1, 2, \dots, n$), где $h = \frac{b-a}{n}$, $x_0 = a, x_n = b$;

2) находим для каждого i ($i = 1, 2, \dots, n$) значения

$$\begin{aligned}R_1^i &= h \cdot f(x_i, y_i); \\R_2^i &= h \cdot f(x_i + h/2, y_i + R_1^i/2); \\R_3^i &= h \cdot f(x_i + h/2, y_i + R_2^i/2); \\R_4^i &= h \cdot f(x_i + h, y_i + R_3^i); \end{aligned}$$

3) вычисляем

$$\Delta y_i = (R_1^i + 2R_2^i + 2R_3^i + R_4^i)/6;$$

4) определяем последовательные значения y_i ($i = 1, 2, \dots, n$) искомой функции $y = y(x)$:

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

Метод Рунге – Кутта является одним из методов повышенной точности и, несмотря на свою трудоемкость, широко используется при численном решении дифференциальных уравнений.

Метод Рунге – Кутта может быть также применен для приближенного решения систем, состоящих из нескольких обыкновенных дифференциальных уравнений.

Пусть дана система дифференциальных уравнений первого порядка

$$\begin{aligned}y' &= f(x, y, z); \\z' &= \varphi(x, y, z)\end{aligned}$$

с начальными условиями $x = x_0, y(x_0) = y_0, z(x_0) = z_0$. Задав шаг h , найдем:

$$\begin{aligned}R_1^i &= h \cdot f(x_i, y_i, z_i); \\l_1^i &= h \cdot \varphi(x_i, y_i, z_i); \\R_2^i &= h \cdot f(x_i + h/2, y_i + R_1^i/2, z_i + l_1^i/2); \\l_2^i &= h \cdot \varphi(x_i + h/2, y_i + R_1^i/2, z_i + l_1^i/2); \\R_3^i &= h \cdot f(x_i + h/2, y_i + R_2^i/2, z_i + l_2^i/2); \\l_3^i &= h \cdot \varphi(x_i + h/2, y_i + R_2^i/2, z_i + l_2^i/2); \end{aligned}$$

$$R_4^i = h \cdot f(x_i + h/2, y_i + R_3^i/2, z_i + l_3^i/2);$$

$$l_2^i = h \cdot \varphi(x_i + h/2, y_i + R_3^i/2, z_i + l_3^i/2).$$

Теперь можем определить:

$$\Delta y_i = (R_1^i + 2R_2^i + 2R_3^i + R_4^i)/6;$$

$$\Delta z_i = (l_1^i + 2l_2^i + 2l_3^i + l_4^i)/6.$$

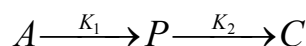
Итоговые значения искомым функций можно найти по выражениям:

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

$$z_{i+1} = z_i + \Delta z_i,$$

где $i = 0, 1, 2, \dots, n-1$.

Задание 1. Уравнение скорости последовательно протекающей реакции



записывается следующим образом:

$$\frac{d[P]}{dt} = K_1[A_0]e^{-K_1 t} - K_2[P], \quad (15)$$

где $[P]$ – концентрация соединения P к моменту времени t от начала протекания реакции; K_1 – константа скорости первой стадии процесса; K_2 – константа скорости второй стадии последовательной реакции; $[A_0]$ – исходная концентрация соединения A .

Решить уравнение (15) при следующих вариантах значений параметров (табл. 7).

Таблица 7

Исходные данные к заданию 1

Вариант	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$K_1,$ дм ³ /моль·мин	5×10^{-2}	6×10^{-2}	7×10^{-2}	$6,5 \times 10^{-2}$	$5,5 \times 10^{-2}$	$6,2 \times 10^{-2}$	$5,3 \times 10^{-2}$	8×10^{-2}	7×10^{-2}	9×10^{-2}
$K_2,$ дм ³ /моль·мин	$6,5 \times 10^{-2}$	$6,0 \times 10^{-2}$	$6,2 \times 10^{-2}$	$7,2 \times 10^{-2}$	$8,1 \times 10^{-2}$	$5,5 \times 10^{-2}$	7×10^{-2}	$4,5 \times 10^{-2}$	$6,3 \times 10^{-2}$	$6,2 \times 10^{-2}$
$[A_0],$ $\frac{\text{г}}{\text{л}}$	10	15	16	21	35	25	15	18	23	55

Задание 2. Дифференциальное уравнение, используемое для описания зависимости скорости роста клеток микроорганизмов от их концентрации в среде, имеет вид

$$\frac{dx}{dt} = \varepsilon x - \beta x^2,$$

где x – концентрация клеток; ε и β – кинетические коэффициенты.

Определить зависимость $x = f(t)$ при следующих значениях параметров (табл. 8).

Таблица 8

Исходные данные к заданию 2

Вариант	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\varepsilon, \text{ч}^{-1}$	0,25	0,23	0,28	0,30	0,35	0,33	0,25	0,38	0,32	0,42
$\beta, \frac{\text{г}^3}{\text{л}^3 \cdot \text{ч}}$	0,005	0,006	0,007	0,005	0,08	0,009	0,07	0,010	0,006	0,012

Задание 3. Система уравнений материального баланса относительно изменений концентраций утилизируемого субстрата (S) и образующейся биомассы микроорганизмов (x) имеет вид

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\mu_m \cdot S \cdot x}{K_s + S} - D(x - x_0),$$

$$\frac{dS}{dt} = D(S_0 - S) - \alpha^s \frac{\mu_m \cdot S \cdot x}{K_s + S},$$

где μ_m – максимальная скорость роста микроорганизмов; D – скорость протока; α^s – экономический коэффициент; K_s – коэффициент пропорциональности; S_0, x_0 – начальные концентрации субстрата и биомассы.

Решить данную систему нелинейных уравнений при следующих значениях параметров (табл. 9).

Таблица 9

Исходные данные к заданию 3

Вариант	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\mu_m, \text{ч}^{-1}$	0,19	0,16	0,25	0,33	0,17	0,28	0,16	0,13	0,22	0,25
$\alpha^s, \text{г/г}$	0,45	0,29	0,37	0,52	0,45	0,63	0,32	0,41	0,37	0,41
$S_0, \text{г/л}$	41	35	34	32	22	18	29	27	20	25
$x_0, \text{г/л}$	0,5	1,3	0,6	0,8	1,5	1,7	0,9	1,0	1,3	2,0
$K_s, \text{г/л}$	0,35	0,31	0,26	0,28	0,33	0,31	0,20	0,24	0,21	0,18

**2.5. Задача № 4. Получение статистических моделей
химико-технологических процессов с применением методов
регрессионного и корреляционного анализа**

При выполнении задачи № 4 для составления программы следует использовать методику, приведенную в [1, разделы 12–13].

Постановка задачи.

Задача определения параметров уравнения регрессии сводится практически к нахождению минимума функции нескольких переменных.

Если функция

$$\hat{y} = f(x, b_0, b_1, b_2, \dots) \quad (16)$$

дифференцируется и требуется b_0, b_1, b_2, \dots выбрать так, чтобы

$$\Phi = \sum_{i=1}^N [y_i - f(x_i, b_0, b_1, b_2, \dots)]^2 = \min, \quad (17)$$

то необходимым условием минимума $\Phi(b_0, b_1, b_2, \dots)$ является выполнение равенств

$$\frac{\partial \Phi}{\partial b_0} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial b_1} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial b_2} = 0 \dots \quad (18)$$

или

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N 2[y_i - f(x_i, b_0, b_1, b_2, \dots)] \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_0} &= 0; \\ \sum_{i=1}^N 2[y_i - f(x_i, b_0, b_1, b_2, \dots)] \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_1} &= 0, \end{aligned} \quad (19)$$

.....

После выполнения преобразования получим

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N y_i \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_0} - \sum_{i=1}^N f(x_i, b_0, b_1, b_2, \dots) \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_0} &= 0; \\ \sum_{i=1}^N y_i \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_1} - \sum_{i=1}^N f(x_i, b_0, b_1, b_2, \dots) \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_1} &= 0, \end{aligned} \quad (20)$$

.....

Система уравнений (20) содержит столько уравнений, сколько неизвестных коэффициентов b_0, b_1, b_2, \dots входит в уравнение регрес-

сии, и называется в математической статистике системой нормальных уравнений.

Линейная регрессия от одного параметра.

Требуется определить по методу наименьших квадратов коэффициенты линейного уравнения регрессии, включающего только одну входную переменную x ,

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x \quad (21)$$

по выборке объема N .

Система нормальных уравнений для этого случая имеет вид

$$\sum_{i=1}^N y_i - \sum_{i=1}^N (b_0 + b_1 x_i) = 0; \quad \sum_{i=1}^N y_i x_i - \sum_{i=1}^N (b_0 + b_1 x_i) x_i = 0$$

или

$$N b_0 + b_1 \sum_{i=1}^N x_i = \sum_{i=1}^N y_i; \quad b_0 \sum_{i=1}^N x_i + b_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 = \sum_{i=1}^N x_i y_i. \quad (22)$$

Коэффициент b_1 легко найти в этом случае из уравнений (22):

$$b_1 = \frac{N \sum_{i=1}^N x_i y_i - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N y_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}. \quad (23)$$

Коэффициент b_0 можно найти по известному b_1 из первого уравнения системы (22):

$$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x}, \quad (24)$$

где \bar{x}, \bar{y} – средние значения x и y .

Последнее уравнение показывает, в частности, что между коэффициентами b_0 и b_1 линейного уравнения существует корреляционная зависимость.

Для оценки силы линейной связи между входной величиной x и выходной величиной y вычисляется выборочный коэффициент корреляции r^* :

$$r^* = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{(N-1)S_x S_y}, \quad (25)$$

где S_x, S_y – выборочные среднеквадратичные отклонения.

Из уравнений (23) и (25) имеем

$$r^{*} = \frac{b_1 S_x}{S_y} = b_1 \sqrt{\frac{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}{N \sum_{i=1}^N y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N y_i \right)^2}}. \quad (26)$$

После того, как уравнение регрессии найдено, необходимо провести регрессионный анализ результатов. Этот анализ состоит из двух этапов. На первом этапе проверяется значимость всех коэффициентов регрессии в сравнении с ошибкой воспроизводимости. На втором этапе устанавливается адекватность уравнения на основании сравнения дисперсии воспроизводимости и остаточной дисперсии.

Определение дисперсии воспроизводимости сводится к следующему:

1) определяется среднее y по результатам параллельных опытов

$$\bar{y}_i = \frac{\sum_{u=1}^m y_{iu}}{m} \quad i = 1, 2, \dots, m; \quad (27)$$

2) определяются выборочные дисперсии

$$S_i^2 = \frac{\sum_{u=1}^m (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{m-1} \quad i = 1, 2, \dots, m; \quad (28)$$

3) составляется отношение

$$G_{\max} = \frac{S_{\max}^2}{\sum_{i=1}^N S_i^2}, \quad (29)$$

где S_{\max}^2 – максимальное значение выборочной дисперсии; $\sum_{i=1}^N S_i^2$ – суммарная дисперсия.

Если дисперсии однородны, то выполняется следующее неравенство

$$G_{\max} < G_p(N, m-1), \quad (30)$$

где $G_p(N, m-1)$ – табличное значение критерия Кохрена при уровне значимости p .

Если выборочные дисперсии однородны, рассчитывается дисперсия воспроизводимости

$$S_{\text{âî ñî ð.}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N S_i^2}{N}. \quad (30)$$

Число степеней свободы этой дисперсии

$$f = N(m - 1). \quad (31)$$

Дисперсия воспроизводимости необходима для оценки значимости коэффициентов уравнения регрессии (16). Оценка значимости коэффициентов производится по критерию Стьюдента

$$t_j = \frac{|b_j|}{Sb_j}, \quad (32)$$

где b_j – j -й коэффициент уравнения регрессии; Sb_j – среднее квадратичное отклонение j -го коэффициента.

Если t_j больше табулированного $t_p(f)$ для выбранного уровня значимости p и числа степеней свободы f , то коэффициент b_j значительно отличается от нуля; величину Sb_j определяют по закону накопления ошибок:

$$Sb_j = \sqrt{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial b_j}{\partial y_i} \right)^2 S_i^2}. \quad (33)$$

Незначимые коэффициенты исключаются из уравнения регрессии. Оставшиеся коэффициенты пересчитываются заново, поскольку коэффициенты закоррелированы друг с другом. Адекватность уравнения проверяется по критерию Фишера

$$F = \frac{S_{\text{î ñî.}}^2}{S_{\text{âî ñî ð.}}^2}, \quad (34)$$

где $S_{\text{âî ñî ð.}}^2$ – дисперсия воспроизводимости; $S_{\text{î ñî.}}^2$ – остаточная дисперсия;

$$S_{\text{î ñî.}}^2 = \frac{m \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{m \cdot N - 1} \cdot l = n + 1, \quad (35)$$

где $l = n + 1$.

Если отношение (34) меньше табличного $F_p(f_1, f_2)$, полученное уравнение можно считать адекватным, в противном случае найденное уравнение будет неадекватно описывать связь между x и y .

При отсутствии параллельных опытов и дисперсии воспроизводимости можно оценить качество аппроксимации принятым уравнением, сравнив $S_{i\text{нб.}}^2$ и дисперсию относительно среднего S_y^2 :

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{N-1}; \quad (36)$$

по критерию Фишера

$$F = \frac{S_y^2}{S_{i\text{нб.}}^2}. \quad (37)$$

В этом случае критерий Фишера показывает, во сколько раз уменьшается рассеяние относительно полученного уравнения регрессии по сравнению с рассеянием относительно среднего. Чем больше значение F превышает табличное $F_p(f_1, f_2)$ для выбранного уровня значимости p и чисел степеней свободы $f_1 = N-1$ и $f_2 = N-l$, тем эффективнее уравнение регрессии.

Параболическая регрессия.

Если уравнение регрессии представляет собой полином некоторой степени, то при применении метода наименьших квадратов коэффициенты этого полинома находят решением системы линейных уравнений. Например, требуется определить по методу наименьших квадратов коэффициенты функции-параболы второго порядка:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x + b_n x^2. \quad (38)$$

В этом случае

$$\frac{\partial f(x)}{\partial b_0} = 1 \quad \frac{\partial f(x)}{\partial b_1} = x \quad \frac{\partial f(x)}{\partial b_n} = x^2$$

и система нормальных уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} b_0 N + b_1 \sum x_i + b_n \sum x_i^2 &= \sum y_i; \\ b_0 \sum x_i + b_1 \sum x_i^2 + b_n \sum x_i^3 &= \sum x_i y_i; \\ b_0 \sum x_i^2 + b_1 \sum x_i^3 + b_n \sum x_i^4 &= \sum x_i^2 y_i. \end{aligned} \quad (39)$$

Аналогичными по структуре уравнениями будут определяться коэффициенты параболы любого порядка.

Трансцендентная регрессия.

При малых объемах выборки N увеличение порядка полинома может привести к росту остаточной дисперсии. Для того чтобы уменьшить число неопределенных коэффициентов, используют

трансцендентную регрессию. Вычисление коэффициентов трансцендентной регрессии может оказаться весьма трудоемким вследствие необходимости решения системы нелинейных уравнений. Вычисление упрощается, если провести замену переменных.

Например, зависимости показательного и дробно-степенного типа

$$\hat{y} = b_0 b_1^x, \quad \hat{y} = b_0 x^{b_1} \quad (40)$$

линеаризуются путем логарифмирования

$$\lg \hat{y} = \lg b_0 + x \lg b_1; \quad \lg \hat{y} = \lg b_0 + b_1 \lg x. \quad (41)$$

Положив

$$\lg \hat{y} = \hat{z}; \quad \lg b_0 = a;$$

$$\lg b_1 = a_1; \quad \lg x = t,$$

получим линейные уравнения относительно новых переменных:

$$\hat{z} = a_0 + a_1 x; \quad z = a_0 + b_1 t. \quad (42)$$

Коэффициенты a_0, a_1, b_1 определяются по методу наименьших квадратов. По полученным a_0 и a_1 определяются коэффициенты b_0 и b_1 . Следует, однако, иметь в виду, что полученные таким образом коэффициенты регрессии (40) являются смешанными оценками для соответствующих генеральных коэффициентов.

Задание 1. Требуется определить зависимость растворимости хлорида бария в воде (y) и в присутствии хлорида кальция (x) при 70°C . Объем выборки $n = 6$.

Определить коэффициенты уравнения линейной регрессии вида $\hat{y} = b_0 + b_1 x$ и выборочный коэффициент корреляции.

Экспериментальные данные приведены в табл. 10.

Таблица 10

Исходные данные к заданию 1

$x, \%$	0	5	8	10	15	20
$y, \%$	32	25	20	17	11	5

Задание 2. Найти зависимость содержания Fe, % (y), в кристаллах медного купороса $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ от содержания FeSO_4 , г/л (x), в маточном растворе: а) определить коэффициенты полиномиального

уравнения регрессии второго порядка; б) определить выборочный коэффициент корреляции.

Каждый опыт повторяется два раза. Результаты опытов приведены в табл. 11.

Таблица 11

Исходные данные к заданию 2

x , г/л	50		60		70		85		100		105	
y , %	0,65	0,84	0,96	0,84	0,93	1,2	1,33	1,47	1,75	1,86	2,32	2,48

Задание 3. Опытным путем определены значения константы скорости реакции K при 6 различных температурах t . Зависимость константы скорости реакции от абсолютной температуры T выражается показательной функцией вида

$$K = K_0 e^{-\frac{E}{RT}}.$$

Найти численные значения коэффициентов K_0 и E/R . Экспериментальные данные приведены в табл. 12.

Таблица 12

Исходные данные к заданию 3

T , °C	400	452	493	528	561	604
K	3,23	7,80	15,43	24,21	37,95	60,09

Задание 4. Исследовать зависимость степени окисления хромита CrO в хромат CrO_2 (y) от продолжительности прокаливания шихты (x) при 83°C . Каждый опыт повторяется два раза. Экспериментальные данные приведены в табл. 13. Принять зависимость степени окисления от времени нелинейной (полином второго порядка). Определить уравнение регрессии, провести регрессионный анализ и найти выборочный коэффициент корреляции.

Таблица 13

Исходные данные к заданию 4

x	0,3		1,2		2,0		3,0		4,0		5,0	
y	8,2	12,3	28,0	32,0	43,1	47,2	49,3	51,4	52,0	53,0	36,5	57,4

Задание 5. Найти коэффициенты кинетической модели K_s и μ_{\max} для уравнения Моно $\mu = \frac{\mu_{\max} \cdot S}{K_s + S}$ на основании опытных данных при выращивании дрожжей на парафинах.

Данные кинетического эксперимента следующие: 1-й опыт: $\mu_1 = 0,2 \text{ д}^{-1}$, $S_1 = 0,40 \text{ г/л}$; 2-й опыт: $\mu_2 = 0,28 \text{ д}^{-1}$, $S_2 = 0,80 \text{ г/л}$.

Задание 6. Скорость мономолекулярной реакции выражается уравнением (43)

$$\frac{dx}{dt} = -Kx, \quad (43)$$

где x – концентрация; $K > 0$ – константа скорости реакции.

Решение уравнения (43) имеет вид

$$x = ae^{-Kt}. \quad (44)$$

По данным эксперимента (табл. 14), используя метод наименьших квадратов, найти параметры a и K .

Таблица 14

Исходные данные к заданию 6

$t, \text{ с}$	2	5	8	11	14	17	20	23
$x, \text{ г/л}$	56,6	40,7	31,1	23,8	16,5	12,2	8,7	6,5

Задание 7. Аппроксимировать линейным уравнением регрессии зависимость температуры воды в химическом реакторе y от расхода имеющегося пара x . Экспериментально полученные данные приведены в табл. 15. Определить выборочный коэффициент корреляции.

Таблица 15

Исходные данные к заданию 7

$y, \text{ }^\circ\text{C}$	22	23,9	25,6	27,2	28,9	19,7	31,2
$x, \text{ кг/ч}$	18	19,1	20,5	22,0	22,9	24,0	25,0

Задание 8. Аппроксимировать нелинейным уравнением регрессии второго порядка статическую зависимость давления y в рубашке, обогревающей реактор, от расхода пара x . Экспериментальные данные приведены в табл. 16. Найти коэффициент корреляции.

Таблица 16

Исходные данные к заданию 8

y , кг/см ²	0,16	0,1	0,26	0,43	0,4	0,55	0,61	0,8
x , кг/ч	23,0	22,8	24,2	25,5	25,0	27,0	26,4	29,1

Задание 9. В результате проведения опытов по выращиванию дрожжевой биомассы из смеси углеводов получены экспериментальные данные, представленные в табл. 17.

Таблица 17

Исходные данные к заданию 9

α^s , кг/ т	0,85	0,9	0,98	1,05	1,28	1,18	1,25	1,42
$1/D$, ч	3,5	4,5	4,9	6,8	7,1	7,9	10,8	16,8

Величины $\alpha^s = (S_0 - S)/x$, S_0, S – начальная и конечная концентрация субстрата, г/л; x – концентрация биомассы, г/л; D – скорость протока среды, ч⁻¹.

Необходимо определить зависимость в виде линейного уравнения регрессии

$$y = b_0 + b_1 Z,$$

которым аппроксимируется выражение

$$\alpha^s = a_0 + a_1 / D,$$

и оценить коэффициент корреляции.

Задание 10. Аппроксимировать линейным уравнением регрессии зависимость удельного веса водяного пара во влажном воздухе y при относительной влажности 30% от температуры x , заданную в виде табл. 18. Вычислить коэффициент корреляции и сделать вывод о применимости линейной регрессии.

Таблица 18

Исходные данные к заданию 10

x , °С	0	20	40	60	80
y , кг _{воды} /кг _{сух.возд.}	1,54	5,19	15,34	39,06	88,02

2.6. Задача № 5. Оптимизация процессов в химической технологии

При выполнении задачи № 5 для составления программы следует использовать методику, приведенную в [1, раздел 14].

Постановка задачи.

При оптимизации часто необходимо найти экстремум (экстремумы) некоторой целевой функции $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ n переменных x_i (проектных параметров). Такая функция описывает $(n+1)$ -мерную поверхность. Соответственно функция $F(x)$ одного параметра $x_1 = x$ описывает некоторую кривую на плоскости (рис. 3, а). Поиск экстремумов функций одной переменной является часто встречающейся задачей. Кроме того, к нему сводится гораздо более сложная задача поиска экстремумов функций нескольких переменных.

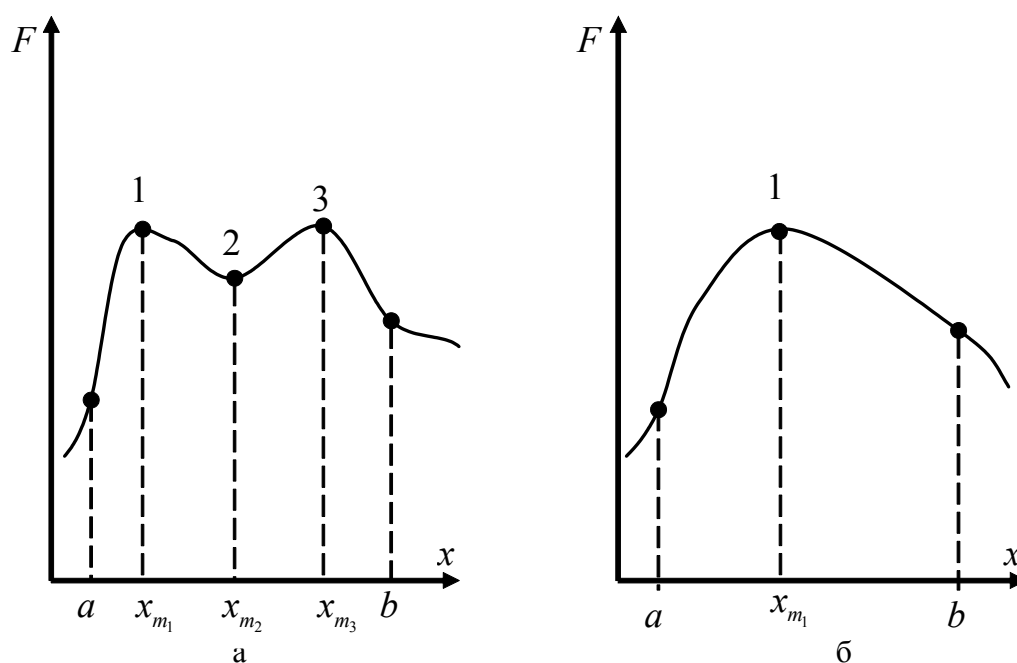


Рис. 3. Функция $F(x)$:

а – с несколькими экстремумами, б – с одним экстремумом

В общем случае функция $F(x)$ может иметь несколько экстремумов (максимумов или минимумов). Из них главный (оптимальное решение для пространства проектирования) называется глобальным. Задача поиска экстремумов сводится к их локализации и уточнению значений x и $F(x)$ в точке экстремума. В дальнейшем для функции одной переменной под экстремумом будем подразумевать максимум $F(x)$. Поскольку максимуму функции $F(x)$ соответствует минимум

функции $-F(x)$, то, сменив знак у $F(x)$, программами поиска максимума можно пользоваться и для поиска минимума функций. Будем полагать, что на изменения x (если это особо не оговорено) накладываются ограничения в виде неравенства $a \leq x \leq b$, где a и b – границы интервала поиска. В пределах отрезка $[a, b]$ функцию считаем унимодальной, т. е. содержащей один максимум (рис. 3, б).

Метод равномерного поиска.

Метод равномерного поиска основан на том, что переменной x присваиваются значения с шагом $\Delta x = \text{const}$ ($x_{n+1} = x_n + \Delta x$) и вычисляются значения $F(x)$. Если $F(x_{n+1}) > F(x_n)$, переменной x дается новое приращение. Как только $F(x_{n+1})$ станет меньше $F(x_n)$, поиск останавливается. При малой заданной погрешности этот метод неэкономичен по затратам машинного времени.

Метод поразрядного приближения.

Метод поразрядного приближения является разновидностью метода равномерного поиска и реализуется следующим алгоритмом:

- 1) задаем начальное приближение $x = x_0$ и вычисляем $F(x_0)$. Задаем $D = h$, где $h = \Delta x$ – начальный шаг поиска;
- 2) полагаем $G = F(x_n)$, где вначале $F(x_n) = F(x_0)$. Задаем $x = x + D$ и вычисляем $F(x_{n+1}) = F(x)$;
- 3) проверяем условие $F(x_{n+1}) > G$; если оно выполняется, переходим к п. 2, если нет – переходим к п. 4;
- 4) полагаем $D = -D/4$. Проверяем условие $|D| > E/4$, где E – заданная погрешность вычисления x_m в точке максимума. Если оно выполняется, переходим к п. 2, т. е. обеспечиваем поиск максимума в другом направлении с шагом в 4 раза меньше прежнего. Если данное условие выполняется, заканчиваем счет.

Метод дихотомии.

Метод дихотомии (деление интервала поиска $[a, b]$ пополам) реализуется следующим алгоритмом:

- 1) проверяем условие $|b - a| < 2E$, где E – заданная погрешность вычисления x_m . Если это условие выполняется, переходим к п. 6, если не выполняется, переходим к п. 2;
- 2) делим интервал поиска $[a, b]$ пополам и вычисляем две абсциссы, симметрично расположенные относительно точки $x = (a + b)/2$; $x_1 = (a + b - E)/2$ и $x_2 = (a + b + E)/2$;

- 3) для этих значений x вычисляем $F(x_1)$ и $F(x_2)$;
- 4) проверяем условие $F(x_1) > F(x_2)$. Если оно выполняется, полагаем $b = x_2$ и переходим к п. 1. Если не выполняется, переходим к п. 5;
- 5) полагаем $a = x_1$ и переходим к п. 1;
- 6) выводим на печать $x_m = (a + b)/2$ и вычисляем $F(x_m)$.

Метод золотого сечения.

Метод золотого сечения основан на делении отрезка $[a, b]$ по правилу золотого сечения (см. алгоритм ниже). Он позволяет сужать отрезок $[a, b]$, каждый раз вычисляя лишь одно значение $F(x)$, а не два, как в методе дихотомии. Данный метод реализуется следующим алгоритмом:

- 1) определяем коэффициент дробления $R = (\sqrt{5} - 1)/2$ отрезка $[a, b]$;
- 2) находим абсциссу $x_1 = a + (1 - R)(b - a)$ и вычисляем $F(x_1)$;
- 3) находим абсциссу $x_2 = a + R(b - a)$ и вычисляем $F(x_2)$;
- 4) проверяем выполнение условия $|x_2 - x_1| < E$, где E – заданная погрешность вычисления x_m . Если это условие выполняется, вычисляем $x_m = (x_1 + x_2)/2$ и $F(x_m)$, после чего останавливаем счет с выдачей значений x_m и $F(x_m)$. Если данное условие не выполняется, переходим к п. 5;
- 5) проверяем условие $F(x_1) < F(x_2)$. Если оно выполняется, полагаем $a = x_1$, $x_1 = x_2$ и $F(x_1) = F(x_2)$, после чего выполняем п. 3 и п. 4;
- 6) если $F(x_1) \geq F(x_2)$, полагаем $b = x_2$, $x_2 = x_1$, $f(x_2) = f(x_1)$, после чего выполняем п. 2. и п. 4.

Метод квадратичной интерполяции.

Метод квадратичной интерполяции-экстраполяции заключается в замене $F(x)$ в промежутке $x_1 \pm h$ (где x_1 – начальное приближение) параболой, экстремум которой вычисляется аналитически. После нахождения экстремума \bar{x}_m (максимума или минимума) можно задать $x_1 = \bar{x}_m$ и повторить поиск. Таким образом, с помощью итерационной процедуры значение x_m уточняется до получения его с заданной погрешностью E . Этот метод обеспечивает поиск как экстремумов, так и минимумов $F(x)$, в том числе для случая $F(x) = 0$, причем точка x_m может лежать в интервале $x_1 \pm h$ (интерполяция) и быть вне его (экстраполяция). Алгоритм реализации этого метода следующий:

- 1) задаем начальное приближение x_1 для x_m и вычисляем два смежных значения аргумента $F(x)$: $x_0 = x_1 - h$ и $x_2 = x_1 + h$, где h – полуинтервал интерполяции-экстраполяции;
- 2) вычисляем три значения $F(x)$: $F(x_0) = F_0$, $F(x_1) = F_1$ и $F(x_2) = F_2$;
- 3) находим коэффициенты

$$c = \frac{F_0}{2h^2} - \frac{F_1}{h^2} + \frac{F_2}{2h^2} = \frac{1}{2h^2}(F_0 - 2F_1 + F_2);$$

$$b = \frac{-F_0(2x_1 + h) + 4F_1x_1 - F_2(2x_1 - h)}{2h^2}$$

параболы $y(x) = x^2 + bx + c$, проходящей через выбранные три узла интерполяции-экстраполяции $F(x)$, и по ним вычисляем аналитически положение экстремума

$$\tilde{x}_m = -\frac{b}{2c} = \frac{1}{2} \frac{F_0(2x_1 + h) + 4F_1x_1 + F_2(2x_1 - h)}{F_0 - 2F_1 + F_2};$$

- 4) проверяем выполнение условия ($x_1 = \tilde{x}_m$) и переходим к п. 1. Если выполняется, считаем \tilde{x}_m найденным с заданной погрешностью E , вычисляем $F(x_m)$ и останавливаем счет.

Сравнение методов одномерной оптимизации.

Сравнение методов одномерной оптимизации показывает, что для простой функции $F(x)$ они обеспечивают примерно одинаковое время поиска. В большинстве случаев для гладких $F(x)$ метод квадратичной интерполяции дает заметный выигрыш времени вычислений. Удобно и то, что он без всякой перестройки обнаруживает как максимумы, так и минимумы $F(x)$, причем даже за пределами первоначального интервала поиска. Преимущество метода золотого сечения перед методами поразрядного приближения и дихотомии для простых $F(x)$ не выявляется, поскольку программная реализация первого метода сложнее и необходимо выполнение ряда вспомогательных операций. Однако для сложных $F(x)$ метод золотого сечения может давать существенный выигрыш во времени. Для поиска экстремумов пользуются также методом с числами Фибоначчи, однако особым преимуществом перед методом золотого сечения он не обладает.

Задание 1. Газовая смесь состоит из окиси азота и кислорода. Определить концентрацию кислорода, при которой содержащаяся в смеси окись азота окисляется с максимальной скоростью.

В условиях практической необратимости скорость реакции $2\text{NO} + \text{O}_2 = 2\text{NO}_2$ выражается формулой

$$V = Kx^2y,$$

где x – концентрация NO в любой момент времени; y – концентрация O_2 ; K – константа скорости реакции.

Концентрацию газов выразим в процентах. Тогда

$$x + y = 100;$$

$$y = 100 - x;$$

$$V = Kx^2(100 - x) = K(100x^2 - x^3).$$

Варианты задания параметров приведены в табл. 19.

Таблица 19

Исходные данные к заданию 1

Вариант	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$K, \text{ч}^{-1}$	0,30	0,35	0,42	0,52	0,37	0,45	0,36	0,48	0,55	0,65

Задание 2. В изотермическом реакторе идеального смешения протекает последовательная реакция $A \xrightarrow{K_1} P \xrightarrow{K_2} S$. Определить оптимальные условия (время пребывания τ), максимизирующие концентрацию промежуточного продукта P на выходе реактора.

Для данного реактора концентрация продукта P на выходе аппарата C_P равна

$$C_P = C_{A_0} \frac{\tau K_1}{(1 + K_1 \tau)(1 + K_2 \tau)}.$$

Задачу решить для следующих значений параметров (табл. 20).

Таблица 20

Исходные данные к заданиям 2 и 3

Вариант	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$K_1, \text{ч}^{-1}$	0,20	0,25	0,32	0,41	0,35	0,27	0,45	0,38	0,43	0,50
$K_2, \text{ч}^{-1}$	0,30	0,35	0,32	0,45	0,42	0,38	0,53	0,46	0,33	0,38
$C_{A_0}, \text{г/л}$	5,0	3,5	4,0	4,8	5,8	6,3	3,8	4,6	6,0	6,5

Задание 3. Решить ту же задачу, что и в задании 2 при тех же исходных данных для реактора идеального вытеснения, для которого

$$C_P = \frac{K_1 C_{A_0}}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 \tau} - e^{-K_2 \tau}).$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Дятко А.А., Кишкурно Т.В. Математический пакет Mathcad 6.0 Plus: Учебное пособие для сотрудников, аспирантов и студентов всех специальностей. – Мн.: БГТУ, 1999.
2. Козулин Н.А., Соколов В.Н., Шапиро А.Я. Примеры и задачи по курсу оборудования заводов химической промышленности. – М.: Машиностроение, 1966.
3. Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. – М.: Химия, 1976.
4. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии. – М.: Химия, 1977.
5. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. – М.: Химия, 1982.
6. Кафаров В.В., Глебов М.В. Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высшая школа, 1991.
7. Кафаров В.В., Винаров А.Ю., Гордеев Л.С. Моделирование биохимических реакторов. – М.: Лесная промышленность, 1979.
8. Тюрин Ю.Н., Макаров А.А. Анализ данных на компьютере. – М.: Финансы и статистика, 1995.

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие.....	3
1. Программа курса	4
2. Контрольные задания.....	7
2.1. Общие методические указания к выполнению контрольных заданий	7
2.2. Задача № 1. Вычисления в пакете MathCad. Построение графиков.....	7
2.3. Задача № 2. Решение нелинейных уравнений и их систем ...	17
2.4. Задача № 3. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений и их систем.....	20
2.5. Задача № 4. Получение статистических моделей химико-технологических процессов с применением методов регрессионного и корреляционного анализа.....	26
2.6. Задача № 5. Оптимизация процессов в химической технологии	35
Литература	40

ПРИМЕНЕНИЕ ЭВМ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Составители: **Кобринец** Виктор Павлович
Карпович Дмитрий Семенович
Овсянников Андрей Витальевич

Редактор Р.М. Рябая

Подписано в печать 28.09.2005. Формат 60×84 $\frac{1}{16}$.
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 2,3. Уч. изд. л. 2,5.

Тираж 100 экз. Заказ .

Учреждение образования

«Белорусский государственный технологический университет».

220050. Минск, Свердлова, 13а.

ЛИ № 02330/0133255 от 30.04.2004.

Отпечатано в лаборатории полиграфии учреждения образования
«Белорусский государственный технологический университет».

220050. Минск, Свердлова, 13.

ЛП № 02330/0056739 от 22.01.2004.