

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ «КПІ»
Кафедра кібернетики хіміко-технологічних процесів

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ДО ВИКОНАННЯ ЛАБОРАТОРНІХ РОБІТ З
ДИСЦИПЛІНИ

«Математичне моделювання та застосування ЕОМ в хімічній технології»
(4 курс ХТФ)

Схвалено на засіданні кафедри КХТП
Протокол № 3 від «20 вересня 2007р.
Завідувач кафедри КХТП
Статюха Г.О.

Київ 2007

Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з дисципліни «Математичне моделювання та застосування електронно-обчислювальних машин в хімічній технології» для студентів хіміко-технологічного факультету / Укл. Бойко Т.В., Бендум В.І., Потяженко І.О., Жигір О.М., Шахновський А.М., Бондаренко О.С. К.: НТУУ «КПІ», 2007- 126 с.

Навчальне видання

Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з дисципліни «Математичне моделювання та застосування електронно-обчислювальних машин в хімічній технології» для студентів хіміко-технологічного факультету

Укладачі

Бойко Тетяна Владиславівна

Бендум Владислав Іванович

Потяженко Іван Олександрович

Жигір Ольга Миколаївна

Шахновський Аркадій Маркусович

Бондаренко Олена Сергіївна

Відповідальний редактор

Статюха Геннадій Олексійович

Рецензент

Концевий Андрій Леонідович

Редактор

Бендум Владислав Іванович

Графік виконання лабораторних робіт

<i>№</i>	<i>НАЗВА РОБОТИ</i>	<i>Обсяг Годин</i>
1	Основи роботи з інтегрованим середовищем Mathcad. Отримання моделей на основі обробки статистичних даних (лінійна регресія на учебовому прикладі)	2
2	Побудова математичних моделей процесів з використанням методу найменьших квадратів (нелінійна регресія)	2
3	Моделювання гідродинаміки потоку у насадковій колоні за допомогою коміркової моделі	4
4	Дослідження теплообмінних апаратів на основі математичних моделей	2
5	Комп'ютерне визначення констант швидкості зворотної хімічної реакції <i>Видача завдань на ДКР по темі «Розробка статистичної моделі процеса хімічної технології методом повного факторного експерименту»</i>	2
6	Комп'ютерне дослідження реактора ідеального змішування періодичної дії	4
7	Розробка обчислювальних модулів реакторів для автоматизованого розрахунку та проектування СХТС	4
8	Оптимізація роботи реактора <i>Здача ДКР на перевірку</i>	2
	Модульна контрольна робота за всіма темами	2
	Залікове заняття	2

Всі лабораторні роботи виконуються в середовищі Mathcad.

Студенти, що не здали ДКР до МКР не допускаються

ЗМІСТ

<u>ВСТУП</u>	<u>6</u>
<u>1 РОЗРОБКА СТАТИСТИЧНИХ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ЛІНІЙНОГО ТИПУ В ІНТЕГРОВАНОМУ СЕРЕДОВИЩІ MATHCAD</u>	<u>8</u>
<u> 1.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ</u>	<u>8</u>
<u> 1.1.1 Призначення й мети моделювання</u>	<u>8</u>
<u> 1.1.2 Основні види моделей й їхні властивості</u>	<u>9</u>
<u> 1.1.3 Основні принципи моделювання</u>	<u>11</u>
<u> 1.1.4 Технологія моделювання</u>	<u>11</u>
<u> 1.1.5 Основні методи рішення завдань моделювання</u>	<u>12</u>
<u> 1.1.6 Контроль правильності моделі</u>	<u>16</u>
<u> 1.1.7 Побудова експериментально-статистичної моделі</u>	<u>17</u>
<u> 1.1.8 Короткі відомості про середовище Mathcad</u>	<u>19</u>
<u> 1.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ</u>	<u>24</u>
<u> 1.2.1 Визначення вихідних сум.</u>	<u>24</u>
<u> 1.2.2 Визначення параметрів рівняння регресії A_0, A_1 і коефіцієнта кореляції R</u>	<u>26</u>
<u> 1.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ</u>	<u>29</u>
<u>2 ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕСІВ З ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДУ НАЙМЕНЬШИХ КВАДРАТІВ (НЕЛІНІЙНА РЕГРЕСІЯ)</u>	<u>33</u>
<u> 2.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ</u>	<u>33</u>
<u> 2.1.1 Лінійна регресія</u>	<u>33</u>
<u> 2.1.2 Реалізація лінійної регресії загального виду</u>	<u>36</u>
<u> 2.1.3 Реалізація одномірної поліноміальної регресії</u>	<u>38</u>
<u> 2.1.4 Проведення багатомірної регресії</u>	<u>40</u>
<u> 2.1.5 Проведення нелінійної регресії загального виду</u>	<u>41</u>
<u> 2.1.6 Нові функції для проведення регресії у Mathcad 2000/2001</u>	<u>43</u>
<u> 2.1.7 Приклад виконання експоненціальної регресії</u>	<u>44</u>
<u> 2.1.8 Приклад виконання синусоїdalnoї регресії</u>	<u>45</u>
<u> 2.1.9 Побудова лінійної апроксимуючої залежності</u>	<u>46</u>
<u> 2.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ</u>	<u>50</u>
<u> 2.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ</u>	<u>51</u>
<u>3 МОДЕЛЮВАННЯ ГІДРОДИНАМІКИ ПОТОКУ У НАСАДКОВІЙ КОЛОНІ ЗА ДОПОМОГОЮ КОМІРКОВОЇ МОДЕЛІ</u>	<u>54</u>
<u> 3.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ</u>	<u>54</u>
<u> 3.1.1 Дослідження гідродинаміки потоку за допомогою методу стандартних збурень</u>	<u>54</u>
<u> 3.1.2 Опис насадкового колонного абсорбера за допомогою коміркової моделі</u>	<u>56</u>
<u> 3.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ</u>	<u>58</u>
<u> 3.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ</u>	<u>59</u>
<u>4 ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕПЛООБМІННИХ АПАРАТІВ НА ОСНОВІ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ</u>	<u>63</u>
<u> 4.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ</u>	<u>63</u>

<u>4.1.1 Моделі ідеального витіснення та ідеального змішування при дослідженні теплообмінних апаратів</u>	63
<u>4.1.2 Розрахунок теплообмінного апарату для моделі «витіснення-витіснення»</u>	65
<u>4.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ</u>	68
<u>4.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ</u>	68
 <u>5 КОМП'ЮТЕРНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НА ЕОМ КОНСТАНТ ШВИДКОСТІ ЗВОРОТНОЇ ХІМІЧНОЇ РЕАКЦІЇ</u>	 71
<u>5.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ</u>	71
<u>5.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ</u>	72
<u>5.2.1 Приклад розрахунку констант швидкості реакції етерифікації етилового спирту та оцтової кислоти</u>	72
<u>5.2.2 Алгоритм розрахунку кінетичних констант</u>	74
<u>5.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ</u>	76
 <u>6 ДОСЛІДЖЕННЯ ІДЕАЛЬНОГО РЕАКТОРА ЗМІШУВАННЯ ПЕРІОДИЧНОЇ ДІЇ</u>	 80
<u>6.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ</u>	80
<u>6.1.1 Математичний опис реактора ідеального змішування періодичної дії</u>	80
<u>6.1.2 Приклад розрахунку проточного реактора ідеального змішування періодичної дії</u>	84
<u>6.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ</u>	88
<u>6.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ</u>	89
 <u>7 РОЗРОБКА ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ МОДУЛІВ РЕАКТОРІВ ДЛЯ АВТОМАТИЗОВАНОГО РОЗРАХУНКУ ТА ПРОЕКТУВАННЯ СХТС</u>	 96
<u>7.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ</u>	96
<u>7.1.1 Моделювання проточного реактора ідеального змішування</u>	96
<u>7.1.2 Математичний опис і розрахунок ізотермічного трубчатого реактора ідеального витіснення</u>	97
<u>7.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ</u>	99
 <u>8 ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЖИМУ РОБОТИ РЕАКТОРА</u>	 103
<u>8.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ</u>	103
<u>8.1.1 Метод сканування</u>	104
<u>8.1.2 Методи виключення інтервалів</u>	104
<u>8.1.3 Метод половинного ділення інтервалів (метод дихотомії)</u>	105
<u>8.1.4 Завдання програмних модулів в середовищі Mathcad</u>	107
<u>8.1.5 Найпростіші приклади створення програмних модулів</u>	111
<u>8.1.6 Обробка помилок у програмних модулях</u>	114
<u>8.1.7 Модуль побудови точок у просторі</u>	115
<u>8.1.8 Побудова фрактала «кукурудза»</u>	116
<u>8.1.9 Заключні зауваження по програмуванню</u>	118
<u>8.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ</u>	120
<u>8.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ</u>	120
 <u>ЛІТЕРАТУРА</u>	 125

ВСТУП

Моделювання – це один із прогресивних методів, що широко застосовується у сучасній науці, і в першу чергу, в прикладних галузях. Моделювання дозволяє прискорити технічний прогрес, суттєво змінити терміни освоєння нових виробництв. Математичне моделювання є одним із найучасніших напрямків, що тісно пов’язано з впровадженням сучасної комп’ютерної техніки та інформаційних технологій.

Основною метою курсу «Математичне моделювання та застосування ЕОМ в хімічній технології» є формування навичок використання системного підхода та методів математичного моделювання в хімічній інженерії.

Процеси хімічної технології – це складні фізико-хімічні системи, що мають подвійну детерміновано-стохастичну природу. Такі системи характеризуються занадто складною взаємодією фаз та компонентів, що їх утворюють. Ключ до вирішення проблеми вивчення хіміко-технологічних процесів надає метод математичного моделювання, що базується на стратегії системного аналізу, зміст якого полягає в уявленні процесу як складної ієрархічної системи, що взаємодіє, із наступним якісним аналізом її структури, розробкою математичного опису і оцінкою невідомих параметрів.

Під *математичним моделюванням* розуміють вивчення властивостей об’єкту на математичній моделі. Його метою є визначення оптимальних умов протікання процесу, управління їм на основі математичної моделі та перенесення результатів на об’єкт. При цьому *математичною моделлю* називається приблизний опис деякого явища чи процесу зовнішнього світу, який наданий за допомогою математичної символіки. Частіше це системи

рівнянь, нерівностей, алгоритми та інші математичні структури, що описують орігінал.

Математичне моделювання поєднує три взаємозв'язаних етапи:

- складання математичного опису об'єкту, що вивчається;
- вибір методу рішення системи рівнянь математичного опису та реалізація його у формі моделюючої програми;
- встановлення відповідності (адекватності) моделі об'єкту.

Ці *Методичні вказівки* орієтовані на виконання комплексу лабораторних робіт, що поєднують усталені на даний час методи і прийоми розробки та застосування математичного моделювання в хімічній технології. Викладання і послідовність відповідає лекційному курсу та матеріалу, що виведено на самостійне вивчення. При виконанні лабораторних робіт в якості програмного забезпечення застосовується програмний комплекс Mathcad. Виконання лабораторного практикуму орієтовано на індивідуальну роботу.

Основна література:

Бондарь А.Г. Математическое моделирование в химической технологии.-

К.: Вища школа, 1973.- 280 с.

Кудрявцев Е.М. Mahtcad 8-М. ДМК, 2000. – 320 с.

В.П Дьяконов Энциклопедия Mathcad 2001i и Mathcad 11. – М. СОЛОН-

Пресс, 2004.- 832 с.

Ілюстративний матеріал:

Введення в Mahtcad (керівництво користувача);

Покрокові інструкції до виконання лабораторних робіт.

Матеріал для СРС.

1 РОЗРОБКА СТАТИСТИЧНИХ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ

ЛІНІЙНОГО ТИПУ В ІНТЕГРОВАНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

MATCAD

Лабораторна робота № 1

(2 години)

ТЕМА: розробка математичних моделей на основі експериментальних статистичних даних із застосуванням інтегрованого програмного середовища Mathcad.

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

1.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

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

1.1.1 Призначення й мети моделювання

Моделювання — заміщення досліджуваного об'єкта (оригіналу) його умовним образом, описом або іншим об'єктом (моделлю) і вивчення властивостей оригіналу шляхом дослідження властивостей моделі. З моделями та моделюванням ми зіштовхуємося в нашому житті щодня. У дитинстві дитину оточують іграшки: машинки, ляльки, кубики та ін. -

моделі, що повторюють окремі властивості реально існуючих предметів. Граючи, дитина одержує важливі знання про їх. У процесі мислення людина оперує образами об'єктів навколошнього світу, які є різновидами моделей - когнітивними (уважними) моделями.

Реальна користь від моделювання може бути отримана при виконанні двох головних умов:

модель повинна бути адекватної оригіналу, у тому розумінні, що повинна з достатньою точністю відображати характеристики оригіналу, які цікавлять дослідника;

модель повинна усувати проблеми, пов'язані з фізичним виміром якихось сигналів або характеристик оригіналу.

Моделювання може здійснюватися із двома головними цілями:

для вивчення механізму явищ (пізнавальна мета);

для керування об'єктом, тобто для виробітку по моделі оптимальних керованих впливів.

В обох випадках модель створюється для визначення й прогнозу характеристик, що цікавлять, або сигналів об'єкта.

1.1.2 Основні види моделей й їхні властивості

Залежно від способу реалізації всі моделі можна розділити на два класи.

Фізичні моделі — припускають, як правило, реальне втілення тих фізичних властивостей оригіналу, які цікавлять дослідника. Фізичні моделі спрощені й менші й називаються *макети*. Фізичне моделювання інакше називається *макетування*.

Математичні моделі являють собою формалізовані описи об'єкта або системи за допомогою деякої абстрактної мови, наприклад у вигляді сукупності математичних співвідношень або схеми алгоритму.

Розрізняють різні виду математичного моделювання: вербальні (словесні), графічні, табличні, аналітичні й алгоритмічні.

Іноді математична модель описується рівняннями, які випливають із розгляду фізичної сутності явища або системи, які моделюються. Однак частіше опис об'єктів і систем, які моделюються, носить чисто формальний характер і базується на тім, що багато явищ часом всілякої природи описуються рівняннями (алгебраїчними, диференціальними й іншими) того самого виду. У цьому випадку говорять про *формальні* моделі.

Крім того, явища, системи і їхні моделі можуть бути нестационарними й стаціонарними. *Нестационарні* моделі характеризуються залежністю їхніх параметрів від часу. У *стаціонарних* моделей такої залежності немає. Природно, що моделювання нестационарних явищ набагато складніше, ніж стаціонарних.

Моделі володіють рядом властивостей, від яких залежить успіх їхнього застосування. Відзначимо деякі з них, найбільш важливі.

Адекватність — це ступінь відповідності моделі досліджуваному реальному об'єкту. Вона ніколи не може бути повною. На практиці модель уважають адекватної, якщо вона із задовільною точністю дозволяє досягти цілей дослідження.

Простота (складність) — також є однієї з характеристик моделі. Чим більша кількість властивостей об'єкта описує модель, тим більш складною вона виявляється. Не завжди чим складніше модель, тим вище її адекватність. Треба прагнути знайти найбільш просту модель, що дозволяє досягти необхідні результати вивчення.

Потенційність (передбачуваність) — здатність моделі дати нові знання про досліджуваний об'єкт, спрогнозувати його поведіння або властивості.

1.1.3 Основні принципи моделювання

Моделювання базується на декількох основних принципах. Розглянемо їх.

Принцип інформаційної достатності. При повній відсутності інформації про досліджуваний об'єкт побудова його моделі неможлива. З іншого боку, при наявності повної інформації про об'єкт побудова його моделі не має сенсу. Існує деякий рівень априорної інформації про об'єкт, при досягненні якої може бути побудована його адекватна модель.

Принцип здійснюваності. Створювана модель повинна забезпечувати досягнення поставленої мети дослідження з імовірністю, що істотно відрізняється від нуля.

Принцип множинності моделей. Даний принцип є ключовим. Мова йде про те, що створювана модель повинна відбивати в першу чергу ті властивості реальної системи, які цікавлять дослідника. Відповідно, при використанні будь-якої конкретної моделі пізнаються лише деякі сторони реальності. Для більш повного її дослідження необхідний ряд моделей, що дозволяє з різних сторін і з різним ступенем деталізації розглянути досліджуваний об'єкт.

Принцип агрегування. У більшості випадків складну систему можна представити такою, яка складається з агрегатів (підсистем), для адекватного математичного опису яких виявляються придатними деякі стандартні математичні схеми.

Принцип параметризації. Цей принцип означає, що модель будується у вигляді відомої системи, параметри якої не відомі.

1.1.4 Технологія моделювання

Ступінь реалізації перерахованих принципів кожної конкретної моделі може бути різною. Це залежить не тільки від бажання дослідника,

але й від дотримання їм технологій моделювання, а будь-яка технологія має на увазі певну послідовність дій.

У цей час найпоширенішою технологією моделювання є *комплексне моделювання*, під яким розуміється математичне моделювання з використанням засобів обчислювальної техніки. Відповідні технології комплексного моделювання представляють виконання наступних дій:

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

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

1.1.5 Основні методи рішення завдань моделювання

На етапі програмної реалізації моделі й плану експериментів необхідний вибір методів рішення завдань моделювання. При цьому використаються три основні групи методів:

- графічні - оцінні наближені методи, засновані на побудові й аналізі графіків;
- аналітичні - рішення, строго отримані у вигляді аналітичних виражень

(придатні для вузького кола завдань);

чисельні - основний інструмент для рішення складних математичних завдань, заснований на застосуванні різних чисельних методів.

Аналітичне рішення вдається одержати рідко й частіше лише при спрощеному формулюванні завдання в лінійному наближенні. Основним засобом рішення є алгоритмічний підхід, що реалізує обчислювальний експеримент на ЕОМ. Одержане на ЕОМ рішення майже завжди містить деяку погрішність (похибку). Нагадуємо, що є абсолютна похибка:

$$\varepsilon = \underline{x} - \underline{x}_u$$

у вигляді різниці між наближенним і точним значеннями результату й відносна похибка:

$$\Delta = \varepsilon / \underline{x}_u$$

Наявність погрішності рішення обумовлено рядом причин.

Перелічимо основні джерела погрішності.

Математична модель є лише наближенним описом реального процесу (погрішність моделі).

Вихідні дані, як правило, містять погрішності, тому що є або результатами експериментів (вимірювань), або рішеннями допоміжних завдань (погрішність даних).

Застосовані для рішення завдання методи в більшості випадків є наближеними (погрішність методу).

При уведенні вихідних даних в ЕОМ, виконанні операцій, виробляються округлення (обчислювальна погрішність).

Погрішності 1 й 2 - непереборні на даному етапі рішення, для їхнього зменшення доводиться повернутися знову до побудови математичної, а й іноді й концептуальної моделі, проводити додаткове експериментальне уточнення умов завдання.

Оцінка обумовленості обчислювального завдання - ще одна обов'язкова вимога при виборі методу рішення й побудові математичної моделі.

Нехай обчислювальне завдання коректне. Теоретично стійкість завдання означає, що її рішення може бути знайдене з як завгодно малою погрішністю, якщо тільки гарантувати досить малу погрішність вхідних даних. Однак на практиці їхня точність обмежена (і величиною набагато більшої, ніж $= 2^{-p+1}$ — машинна точність, p — порядок, округлення виконується усіканням).

Як впливають малі, але кінцеві погрішності вхідних даних на рішення? Як сильно вони спотворюють результат? Відповідь на це дає поняття *обумовленості* завдання, тобто чутливість рішення обчислювального завдання до малих погрішностей вхідних даних.

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

$$\Delta(y^*) \leq \nu_\Delta \cdot \Delta(x^*)$$

абсолютне число обумовленості або

$$\delta(y^*) \leq \nu_\delta \cdot \delta(x^*)$$

відносне число обумовленості (замість похибки можуть фігурувати її граници). Для погано обумовлених завдань $\gg 1$ (нестійкість $= \infty$).

При яких значеннях можна вважати завдання погано обумовленої? Це залежить від вимог до точності рішення й від рівня забезпечуваної точності вихідних даних.

Якщо потрібно знайти рішення з точністю 0,1 %, а вхідна інформація

задається з точністю в 0,02 %, то при $\epsilon = 10^{-10}$ уже буде погана обумовленість.

Однак якщо вихідні дані задаються з $\epsilon^* \leq 0,0001\%$, то при $\epsilon = 10^{-3}$ — завдання добре обумовлене ($\epsilon^{**} = 0,1\%$).

Обчислювальні методи перетворяться до виду, зручного для програмної реалізації. Можна виділити наступні класи чисельних методів:
метод еквівалентних перетворень — вихідне завдання заміняють іншим, що має те ж рішення: знаходження кореня нелінійного рівняння $\psi(x) = 0$ зводять до пошуку точок глобального мінімуму $\psi(x) = (f(x))^2$;

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

методи кінцево-різницеві, засновані на заміні похідних кінцевими різницями, наприклад $\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$;

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

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

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

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

1.1.6 Контроль правильності моделі

Для контролю правильності отриманої моделі може використатися ряд прийомів:

аналіз розмірності — величини в лівій і правій частині вираження, окремі доданки в кожній із частин повинні мати однакову розмірність;

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

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

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

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

його рішення існує при будь-яких припустимих вхідних даних;

це рішення єдине (однозначно визначене);

рішення неперервно залежить від даних завдання - стійке стосовно малих збурювань вхідних даних.

Рішення обчислювального завдання називається *стійким* за вхідними даними , якщо воно залежить від вхідних даних безперервним чином; тобто для будь-якого $x^* \in \Omega$ існує $\delta(\varepsilon) > 0$ таке, що всім вихідним даним $x^* \in \Omega$, які задовольняють умові $|x^* - x| < \delta$, відповідає наближене рішення $u^*(x)$, для якого $|u^*(x) - u^*(x^*)| < \varepsilon$.

Далеко не всі практичні завдання є коректними. До них, наприклад, не відносяться зворотні завдання геофізики, астрофізики, спектрографії, розпізнавання образів, синтез і багато інших важливих прикладних проблем. Властивість коректності завдання має велике значення для вибору методу рішення. До некоректних завдань незастосовні звичайні чисельні методи обчислювальної математики. Строгий аналіз коректності в багатьох випадках математично складний, і обмежується перевіркою відповідності кількості невідомих й рівнянь моделі, які їх зв'язують.

1.1.7 Побудова експериментально-статистичної моделі

Основна задача при обробці статистичних даних складається у встановленні тісноти і форми зв'язку між досліджуваними явищами, подіями, параметрами і т.д. Форма зв'язку визначає характер зміни (лінійний, експонентний...) досліджуваної ознаки (результативної ознаки, залежної перемінної) зі зміною ознаки-фактора (факторної ознаки, незалежної змінної). Якщо статистичні дані представити на графіку, то одержимо поле кореляції (поле статистичних даних - точок). Якщо спробувати провести лінію в максимальній близькості від точок по полю кореляції, то вона буде називатися лінією регресії. Існує багато способів побудови і визначення параметрів рівняння регресії. Обмежимося

використанням одного з найбільш розповсюджених - способу найменших квадратів (с.13-16).

Необхідно провести автоматизацію обробки експериментально-статистичних даних у системі Mathcad. Як метод оцінки тісноти кореляційного зв'язку використовувати коефіцієнт кореляції, а в якості способу визначення форми зв'язку - метод найменших квадратів. Треба визначити такі параметри рівняння регресії, що забезпечать оптимальне розташування лінії регресії серед множини точок поля кореляції. Обробка експериментально-статистичних даних виконується із застосуванням різних операцій і вбудованих функцій Mathcad. В якості вихідної інформації використати дані, представлені в Табл.1.1.

Таблиця 1.1

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

Обмежимося в даній задачі визначенням параметрів рівняння регресії лінійного виду:

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

де A_0 - вільний член рівняння регресії; A_1 - коефіцієнт рівняння регресії.

Для визначення вільного члена A_0 і коефіцієнта рівняння регресії A_1 використовуємо загальновідомі формули [2]:

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

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

де N - число пар вихідних експериментально-статистичних даних; X_i , Y_i - значення i -их факторної і результативної ознак. Тіснота зв'язку між

факторною ознакою X_i і результативною Y_i оцінюється коефіцієнтом кореляції R , що визначається за формулою:

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

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

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

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

1.1.8 Короткі відомості про середовище Mathcad

Mathcad - це інтегроване середовище для рішення різноманітних математичних задач. Основні функціональні компоненти Mathcad наведені на рис. 1.1.

Mathcad має ієрархічну систему меню, що складається з головного меню і системи падаючих, спливаючих і контекстно-залежних меню (підменю). Після запуску система Mathcad готова до роботи.

Рис. 1.1 - Основні функціональні компоненти Mathcad

Кожний документ у Mathcad складається з окремих *блоків* різного типу: тексти (коментарі), формули, графіки, таблиці і т.д. Блок займає на робочому листі визначену область прямокутної форми. Розташування блоків у документі, крім текстового, має принципове значення. Виконання розрахунків у системі Mathcad відбувається з ліва на право, а потім згори до низу у суворій послідовності. Тому блоки не повинні перетинатися і мають бути розташовані у послідовності, яка необхідна для виконання розрахунків. При конструюванні блоків використовують три убудованих редактори - текстовий, формульний і графічний. Розрізняють: *математичну область*, яка містить математичний вираз чи графік. Вона є робочою; це означає, що будь-яка зміна, зроблена в ній, відіб'ється на

всіх інших математичних областях, розташованих нижче в робочому документі;

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

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

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

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

Для присвоєння значень змінним, константам та функціям у системі використовується символ := (оператор присвоєння). При цьому ліворуч від оператора присвоєння (:=) знаходиться вираз якому присвоюється значення, а праворуч – вираз, що треба присвоїти (наприклад, $= 4$, $= x^2 + 3x + 5$). Для отримання результату розрахунку необхідно записати ім'я змінної чи функція та поставити знак = (дорівнює) після нього. Mathcad автоматично виконає розрахунок якщо ви клацнете мишею

поза межами блоку або виберете команду *Розрахувати* на панелі керування.

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

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

Кожен вираз має *точку прив'язки*. Mathcad використовує ці точки, щоб визначити порядок проходження виразів.

Далі пояснимо деякі визначення, що використовуються в середовищі Mathcad.

Операнд – число чи вираз, на яке діє оператор.

Функція - вираз, відповідно до якого проводяться деякі обчислення з його аргументами і визначається його числове значення. Функції в Mathcad можуть бути убудованими і визначеними користувачем.

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

Усі змінні, які використовуються у виразі, що записаний в полі введення, повинні бути визначені заздалегідь або входити в список

аргументів. У іншому випадку змінні, що не мають значення, будуть відзначені на екрані дисплея червоним кольором.

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

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

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

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

Оператори являють собою елементи мови, за допомогою яких можна створювати математичні вирази.

Робочі файли Mathcad мають розширення *.mcd і можуть бути відкриті тільки в середовищі Mathcad тієї версії, в якій були створені чи в новішій версії Mathcad. Для можливості відкриття вашого файлу у попередніх версіях Mathcad необхідно обрати пункт меню *File (Файл) → Save as... (Зберегти як...)*. У діалоговому вікні що з'явиться у полі *Save as type: (Тип файлу:)* вкажіть версію Mathcad в якій необхідно буде відкрити

файл (наприклад, *Mathcad 2000 Worksheet (*.mcd)*). Для можливості перегляду файлів, створених у середовищі Mathcad, на комп'ютері де Mathcad не встановлено, необхідно виконати дії описані вище, але у полі *Save as type: (Type файлу:)* вказати *Rich Text Format File (*.rtf)*. Після цього файл можна переглядати у текстовому редакторі (наприклад, MS Word), але редагування файлу та зміни будуть неможливі. Тому перед цим треба обов'язково зберігати файл у форматі Mathcad при потребі подальшої роботи з ним.

1.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Перед початком виконання першої роботи необхідно у вказаному викладачем місці створити на жорсткому диску комп'ютера папку з назвою своєї групи. В цю папку потрібно зберігати всі файли з результатами виконання лабораторних робіт.

Робота виконується у два етапи. На першому здійснюється розранунок за традиційним методом, а на другому - здійснюється розв'язання задачі із використанням вбудованих функцій Mathcad.

Включіть комп'тер і запустіть програму Mathcad вказаним викладачем способом.

1 etap

Обробка експериментально-статистичних даних має наступний порядок дій:

1.2.1 Визначення вихідних сум.

Уведіть спочатку пояснівальний текст у робочому листі. Для цього розмістіть курсор у місці введення. Виберіть мову для введення (українську чи російську). Потім виберіть пункт *Insert* (Вставка) головного меню Mathcad. У спадаючому меню клацніть по пункту *Text Region*

(Текстова область) чи в місці розташування курсору натисніть клавішу з подвійними лапками (команда для введення тексту). В обох випадках виникне шаблон, що вказує місце і початок уведення, після чого можна приступити до виконання цієї операції. Текстова область буде автоматично збільшуватися по мірі введення тексту. Для закінчення введення досить вивести курсор за рамки цієї області. Можна вводити текст і через буфер обміну з текстового редактора (наприклад, MS Word).

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

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

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

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

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

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

1.2.2 Визначення параметрів рівняння регресії A_0, A_1 і коефіцієнта кореляції R

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

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

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

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

У цьому випадку шукані параметри можна буде визначити наступним чином:

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

$$A_1 = C / A;$$

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

Збережіть створений документ у своїй папці на жорсткому диску.

На закінчення дамо графічне зображення теоретичного рівняння регресії для нашої задачі, використовуючи для цього убудовані оператори зображення графіків у Mathcad. Виконаємо побудову на робочому листі, точніше, на його продовженні. Для цього ми попередньо повинні набрати на робочому листі теоретичне рівняння регресії. У нашій задачі воно може бути представлене в такому виді:

$$Y = A_0 + A_1 \cdot$$

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

На робочому листі в місці розташування курсору з'являться дві рамки з мітками. Для швидкої побудови графіка досить у мітку, розташовану на середині осі ординат *Y*, ввести ім'я функції, що ми хочемо

зобразити, а в мітку, розташовану на середині осі абсцис X - ім'я її аргументу. У нашій задачі вводимо в мітку на осі ординат ім'я функції $Y(X)$, а на осі абсцис - ім'я аргументу X . Потім виводимо курсор з області графіка чи натискаємо клавішу $F9$. Відразу ж з'являється графік з теоретичною лінією рівняння регресії.

Таким чином отримані результати за традиційним методом розрахунку (1 етап). Збережіть результати виконання роботи.

2 етап

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

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

Для виконання завдання потрібні наступні вбудовані функції Mathcad:

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

slope(vx,vy) - функція повертає значення другого члену рівняння лінійної регресії; де vx - вектор, елементи якого повинні йти у

порядку зростання і відповідати значенням x ; vy - це вектор одного розміру з vx . Його елементи відповідають значенням y .

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

Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.

Перейти до оформлення звіту.

1.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТИВ

Тексти програм мають бути такими, як наведені нижче.

1 етап.

Розранку за традиційним методом

Вихідні дані:

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

Розв'язання:

$$SX := \sum X \quad SX = 64$$

$$SY := \sum Y \quad SY = 6.7 \times 10^3$$

$$SXX := SX^2 \quad SXX = 4.096 \times 10^3$$

$$SYY := SY^2 \quad SYY = 4.489 \times 10^7$$

$$SXY := SX \cdot SY \quad SXY = 4.288 \times 10^5$$

$$SXK := \sum X^2 \quad SXK = 680$$

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

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

$$XY := X \cdot Y$$

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

$$n :=$$

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

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

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

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

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

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

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

$$A1 = 5.833$$

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

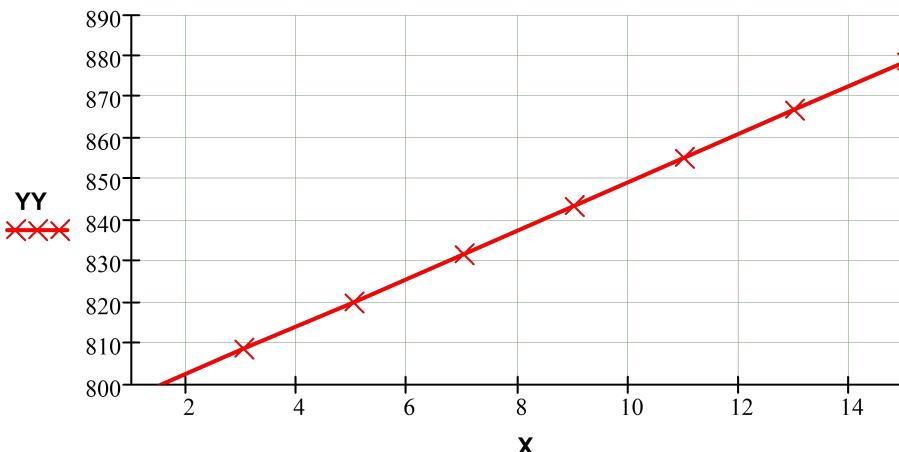
$$A0 = 790.833$$

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

$$R = 0.98$$

Геометрична інтерпретація результатів:

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



2 етап

Визначення параметрів рівняння регресії за допомогою вбудованих функцій
Вихідні експериментальні точки та їх значення:

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

Визначення вільного члена рівняння регресії:

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

Визначення коефіцієнта A1:

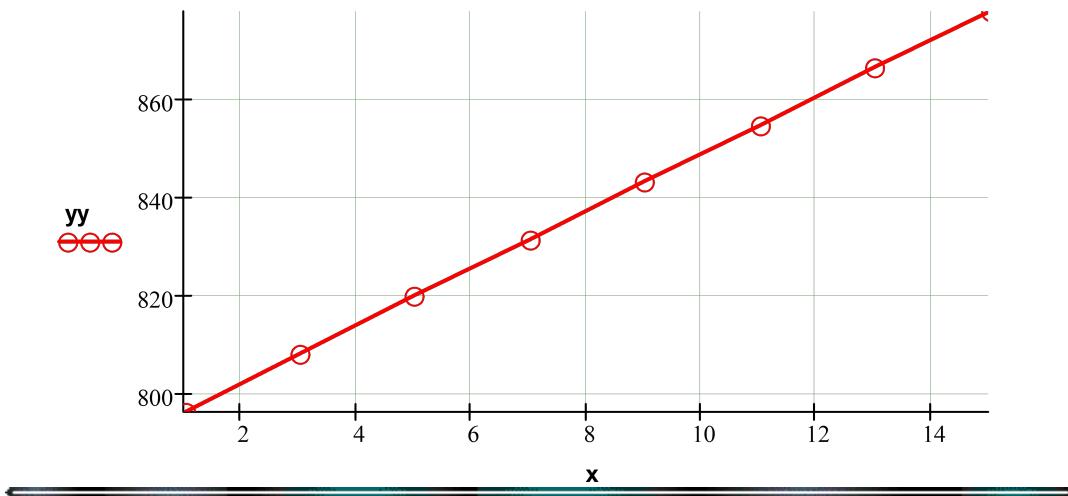
$$a1 := \text{slope}(x, y) \quad a1 = 5.833$$

Визначення коефіцієнта кореляції:

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

Геометрична інтерпретація результатів:

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



Порівняйте отримані результати і зробіть висновки щодо ефективності використання.

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №1

Що таке математичне моделювання, фізичні та математичні моделі?

Основні властивості моделей: адекватність, простота, потенційність.

Надайте основні принципи моделювання.

В чому заключаються технології моделювання?

Наведіть основні методи рішення завдань моделювання.

Охарактеризуйте класи чисельних методів.

У чому полягає контроль правильності моделі?

У чому полягає задача обробки експериментально-статистичних даних?

Які Ви знаєте методи визначення кореляційного зв'язку, що таке коефіцієнт кореляції?

Порівняйте розв'язання задачі традиційними методами і вбудованими функціями Mahtcad.

Що таке шаблони в Mahtcad? Для чого вони застосовуються?

Що таке «математична область», «текстова область», «текстовий абзац», «операнд», «робоча область» у Mahtcad?

.

2 ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕСІВ З ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДУ НАЙМЕНЬШИХ КВАДРАТІВ (НЕЛІНІЙНА РЕГРЕСІЯ)

Лабораторна робота № 2

(4 години)

ТЕМА: побудова математичних моделей процесів з використанням методу найменьших квадратів (нелінійна регресія)

МЕТА: оволодіння методикою побудови експериментально-статистичних математичних моделей з використанням *метода найменьших квадратів* (МНК) та придбання навичок побудови математичних моделей нелінійного типу у інтегрованому програмному середовищі Mathcad.

2.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

2.1.1 Лінійна регресія

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

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

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

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

Математично постановка задачі регресії зводиться до наступного.

Нехай є набір точно визначених значень x_i і відповідних їм неточних значень y_i . Припустимо, що існує деяка залежність $\epsilon_i, a_0, a_1, \dots, a_k$, яка може розглядатись як наближення до залежності $y(x)$, чиї точки представлені як $y_i(x_i)$. Таким чином, ми маємо право записати:

$$= f(x_i, a_0, a_1, \dots, a_k) + \xi_i$$

Тут ξ_i - незалежні випадкові величини із нормальним законом розподілення, які визначають похибку завдання y_i . Зазвичай їх вважають наслідком помилок експерименту. Задача регресії полягає у тому, щоб знайти параметри a_1, \dots, a_k такими, при яких представлення $y(x)$ нашою функцією $f(x)$ мало найменшу середньоквадратичну похибку. Для цього треба мінімізувати функцію:

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

Наприклад, для найширше розповсюдженої лінійної регресії, коли $y(x) = a_0 + a_1 x$ (часто замінюють $= a$ та $= b$), треба мінімізувати наступний вираз:

$$\Phi(a_0, a_1) = \sum (a_0 + a_1 x_i - y_i)^2$$

Якщо прирівняти $\partial/\partial a_0$ та $\partial/\partial a_1$ до нуля, то для лінійної регресії

можна знайти її параметри та у явній формі:

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

Аналогічним чином можна отримати вираз і для інших видів регресії: поліноміальної, експоненціальної, логарифмічної та ін. З огляду

на складність відповідних виразів вони не наводяться - деякі з формул можна знайти у літературі. Багато задач нелінійної регресії можна звести до розглянутої вище лінійної, використовуючи аналогічні перестановки. Але Mathcad для багатьох видів регресії задає потрібні формули явно, що робить перетворення даних непотрібними.

Функції системи Mathcad для проведення лінійної регресії наведені на рис. 2.1.

Рис. 2.1 - Функції системи Mathcad для проведення лінійної регресії

Далі показаний фрагмент документа Mathcad із прикладом проведення лінійної регресії для даних, представлених значеннями елементів у векторах VX та VY .

ЛІНІЙНА РЕГРЕСІЯ

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

$\text{ORIGIN} := 1$

Обчислення коефіцієнтів a та b лінійної регресії:

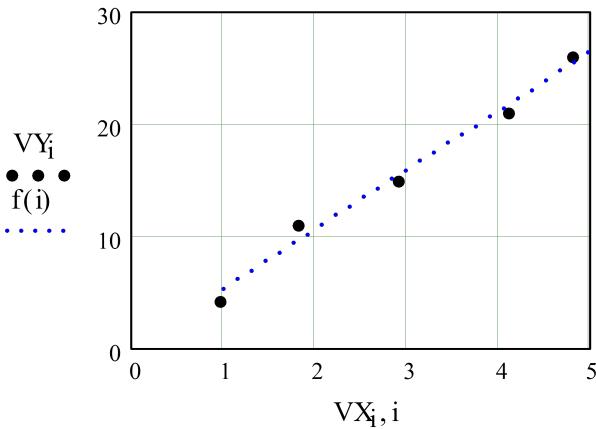
$$a := \text{intercept}(\text{VX}, \text{VY}) \quad b := \text{slope}(\text{VX}, \text{VY})$$

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

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

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

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



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

2.1.2 Реалізація лінійної регресії загального виду

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

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

Таким чином, функція регресії є лінійною комбінацією функцій $F_1(x), F_2(x), \dots, F_n(x)$, причому самі ці функції можуть бути нелінійними, що різко розширює можливості такої апроксимації та поширює її на безліч нелінійних функцій.

Для реалізації лінійної регресії загального виду використовується функція $\text{fit}(VX, VY, F)$, яка повертає вектор коефіцієнтів лінійної регресії загального виду, при яких середньоквадратична похибка наближення «хмари» вихідних точок, координати яких зберігаються у векторах VY , стає мінімальною. Вектор F повинен містити функції $F_1(x), F_2(x), \dots, F_n(x)$, записані у символному виді.

Приклад пояснює проведення лінійної регресії загального виду з використанням функції *fit*. Процедура проведення обчислень настільки проста, що не потребує особих коментарів.

ЛІНІЙНА РЕГРЕСІЯ ЗАГАЛЬНОГО ВИДУ

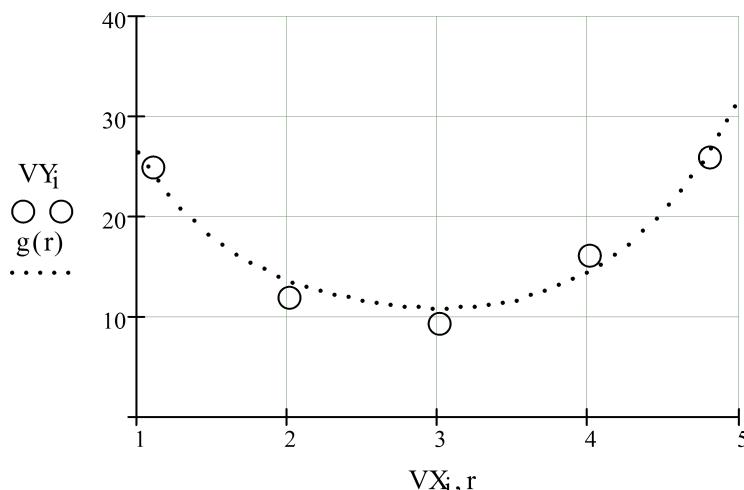
$$VX := \begin{pmatrix} 1.1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 4.8 \end{pmatrix} \quad VY := \begin{pmatrix} 25 \\ 12 \\ 9.4 \\ 16.2 \\ 26 \end{pmatrix} \quad F(x) := \begin{pmatrix} \frac{1}{x} \\ x^2 \\ \exp(x) \end{pmatrix}$$

$$i := 0..4 \quad K := \text{linfi}(VX, VY, F) \quad g(t) := F(t) \cdot K$$

$$r := 1, 1.25..5$$

Коефіцієнти функції регресії

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



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

2.1.3 Реалізація одномірної поліноміальної регресії

У Mathcad введена і функція для проведення поліноміальної регресії довільного ступеня полінома регресії. Регресія здійснюється функцією $\text{regress}(VX, VY, n)$. Вона повертає вектор , який запитує функція $\text{erp}(VS, VX, VY, x)$, і який містить коефіцієнти багаточлена -го ступеня, що найкращим чином наближує «хмару» точок з координатами, які зберігаються у векторах та .

В прикладі наведено фрагмент виконання поліноміальної регресії в Mathcad. Для розрахунку коефіцієнтів полінома регресії використовується функція submatrix .

ПОЛІНОМІАЛЬНА РЕГРЕСІЯ

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

Ступінь поліному $k := 3$

Створення векторів X та Y вихідних даних

$$\begin{aligned} X &:= \text{data}^{\langle 0 \rangle} & Y &:= \text{data}^{\langle 1 \rangle} \\ n &:= \text{rows}(\text{data}) & n &= 6 \\ z &:= \text{regress}(X, Y, k) & \text{fit}(x) &:= \text{interp}(z, X, Y, x) \end{aligned}$$

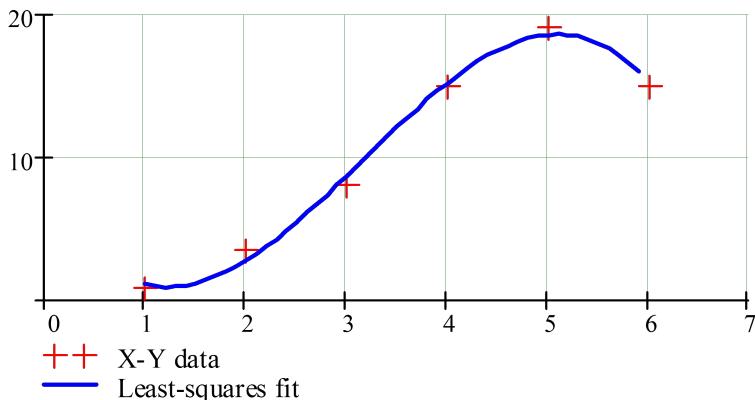
$$\text{coeffs} := \text{submatrix}(z, 3, \text{length}(z) - 1, 0, 0)$$

$$(\text{coeffs})^T = (7.133 \quad -11.231 \quad 5.734 \quad -0.606)$$

$$i := 0..n - 1 \qquad j := 0..4$$

$$\begin{aligned} tx_j &:= \min(X) + j \cdot \frac{\max(X) - \min(X)}{50} \\ &\qquad\qquad\qquad \xrightarrow{\sum (fit(x) - \text{mean}(Y))^2} \\ &\qquad\qquad\qquad \xrightarrow{\sum (Y - \text{mean}(Y))^2} = 0.995 \end{aligned}$$

R2:



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

Функція `press` створює єдиний наближений поліном, коефіцієнти якого розраховуються по всій сукупності заданих точок. Іноді корисна інша функція поліноміальної регресії, яка дає локальні наближення відрізками поліномів другого ступеня `ss(VX,VY,span)`. Вона повертає вектор VS , для функції `erp(VS,VX,VY,x)` для найкращого наближення даних векторів VX та VY відрізками поліномів другого ступеня. Аргумент $in > 0$ показує розмір локальної області наблизених даних (рекомендоване початкове значення - 0,75). Чим більше in , тим сильніше виявляється згладження даних. При великих значеннях in ця функція наближається до функції `press(VX,VY,2)`.

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

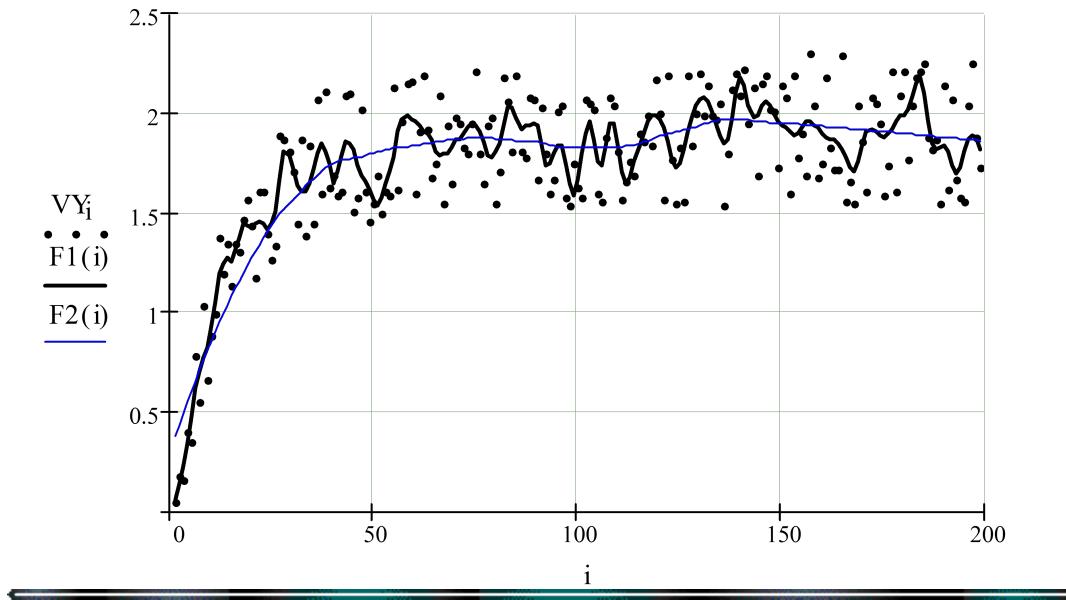
РЕГРЕСІЯ ВІДРІЗКАМИ ПОЛІНОМУ ДРУГОГО СТУПЕНЯ

$i := 1..199$

```

VXi := i
VYi := atan( $\frac{i}{5}$ ) ·  $\left(1 - \exp\left(\frac{-i}{10}\right) + 0.5 \cdot \text{rnd}(1)\right)$ 
span1 := 0.05
span2 := 0.5
VS1 := loess(VX, VY, span1)
VS2 := loess(VX, VY, span2)
F1(x) := interp(VS1, VX, VY, x)
F2(x) := interp(VS2, VX, VY, x)

```



З рисунку неважко помітити, що при значенні $n = 0.5$ крива регресії становиться практично гладкою. Але, через відсутність простого опису апроксимуючої функції у виді відрізків поліномів, цей вид регресії широкого використання не знайшов.

2.1.4 Проведення багатомірної регресії

Mathcad дозволяє робити також багатомірну регресію. Більш розповсюджений випадок її використання - наближення поверхонь у тривимірному просторі. Їх можна описати, задаючи масив значень висот y , що відповідають двомірному масиву координат точок (x, y) на горизонтальній площині.

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

$\text{ress}(Mxy, Vz, n)$ - повертає вектор, який запитує функція
 $\text{erp}(Vs, Mxy, Vz, V)$ для обчислення багаточлена n-го ступеня, який найкращим чином наближує точки множини \mathbf{y} та (\mathbf{y}) -матриця розміру $\times 2$, яка містить координати та, - m -мірний вектор, який містить -координати, відповідні точкам, вказаним у \mathbf{y});
 $\text{ss}(Mxy, Vz, span)$ - аналогічна $\text{ss}(VX, VY, span)$, але для багатовимірного випадку;
 $\text{erp}(Vs, Mxy, Vz, V)$ - повертає значення по відомим значенням (створюється функціями ress або ss) та \mathbf{y} , та (вектор координат та заданої точки, для якої знаходиться).

У цілому багатомірна регресія використовується дуже рідко у зв'язку із складністю збору вихідних даних.

2.1.5 Проведення нелінійної регресії загального виду

Під нелінійною регресією загального виду ми маємо на увазі знаходження вектора параметрів довільної функції $\mathbf{r}, k_1, k_2, \dots, k_n$, при якому забезпечується мінімальна середньоквадратична похибка наближення «хмари» вихідних точок.

Для проведення нелінійної регресії загального виду використовується функція $\text{nfit}(VX, VY, VS, F)$, яка повертає вектор параметрів функції, що дає мінімальну середньоквадратичну похибку наближення функцією $\mathbf{r}, k_1, k_2, \dots, k_n$, вихідних даних.

Вектор повинен бути вектором із символьними елементами, причому вони повинні містити аналітичні вирази для вихідної функції та її похідних за всіма параметрами. Вектор повинен містити початкові

значення елементів вектора \vec{v} , необхідні для рішення системи нелінійних рівнянь регресії ітераційним методом.

У фрагменті документу в Mathcad наведений прикладом виконання нелінійної регресії загального виду за допомогою нелінійної функції.
 $v, a, b) = a \cdot \exp(-b \cdot x) + a \cdot b$

НЕЛІНІЙНА РЕГРЕСІЯ ЗАГАЛЬНОГО ВИДУ

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

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

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

$$ORIGIN := 1$$

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

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

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

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

$$P := \text{genfit}(VX, VY, VS, F1)$$

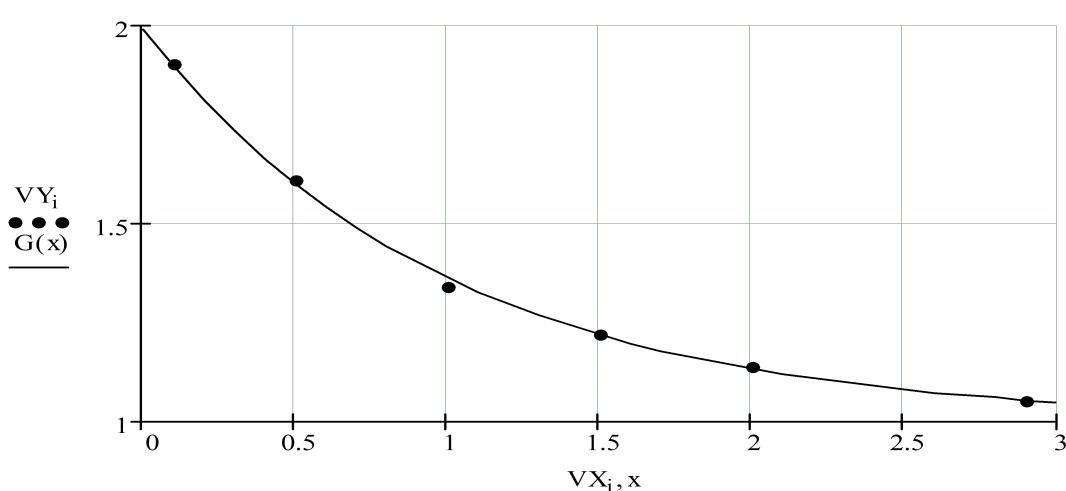
$$i := 1 .. 6$$

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

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

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

Вектор P повертає значення $a=k_1$ и $b=k_2$ для найкращого середньоквадратичного наближення $F(x, a, b)$



При вирішенні цієї задачі виникають дві проблеми. По перше, треба обчислити значення похідних по змінним a та b . Як показано на прикладі,

це зроблено засобами символічних операцій (перші рядки фрагменту), що наглядно показує користь від таких операцій.

Друга проблема пов'язана із необхідністю використання функції $nfit$ у її стандартному виді, через це прийшлося замінити параметр α на b , а параметр β на c . Решта операцій у прикладі достатньо очевидні.

2.1.6 Нові функції для проведення регресії у Mathcad

2000/2001

У версії Mathcad 2000/2001 і вище було введено ряд нових функцій регресії:

$afit(VX, VY, Vg)$ - повертає вектор, що містить коефіцієнти b, c, α

апроксимуючого виразу виду $e^{(b \cdot x) + c}$, графік якого кращим чином наближається до точок, координати яких зберігаються у векторах

та α (вектор α містить перше наближене рішення);

$bfit(VX, VY, Vg)$ - те ж, але для виразу $(1 + b \cdot e^{(-c \cdot x)})^{-1}$;

$ifit(VX, VY)$ - те ж, але для виразу $\ln(x + b) + c$ (початкового наближення не);

$dfit(VX, VY)$ - те ж, але для виразу $-bx$ (початкового наближення не потрібно);

$rfit(VX, VY, Vg)$ - те ж, але для виразу $x^b + c$ (вектор α містить перше наближення до рішення);

$sfit(VX, VY, Vg)$ - те ж, але для виразу $\sin(x + b) + c$.

Цілеспрямоване введення цих функцій викликає легкий сумнів. За допомогою алгоритму реалізації нелінійної регресії загального виду можна легко здійснити регресію будь-якого частинного виду, у тому числі і всіх тих видів, які реалізуються приведеними вище функціями. Неважко це зробити і за допомогою функції $nerror$. Тим не менше якщо користувач

потребує данні види регресії, то до його послуг тепер є і ряд функцій, які можна застосувати без «довгих роздумів».

2.1.7 Приклад виконання експоненціальної регресії

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

ЕКСПОНЕНЦІЙНА РЕГРЕСІЯ

data :=

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

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

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

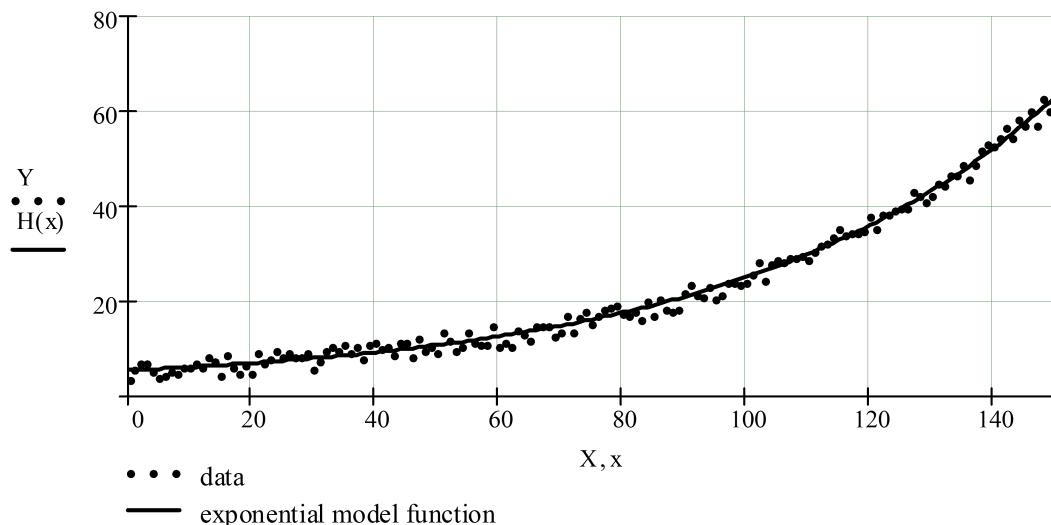
$$X := \text{data}^{\langle 0 \rangle}$$

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

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

$$Y := \text{data}^{\langle 1 \rangle}$$

$$E = \begin{pmatrix} 3.167 \\ 0.02 \\ 2.129 \end{pmatrix}$$



Коефіцієнт кореляції

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

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

2.1.8 Приклад виконання синусоїdalnoї регресії

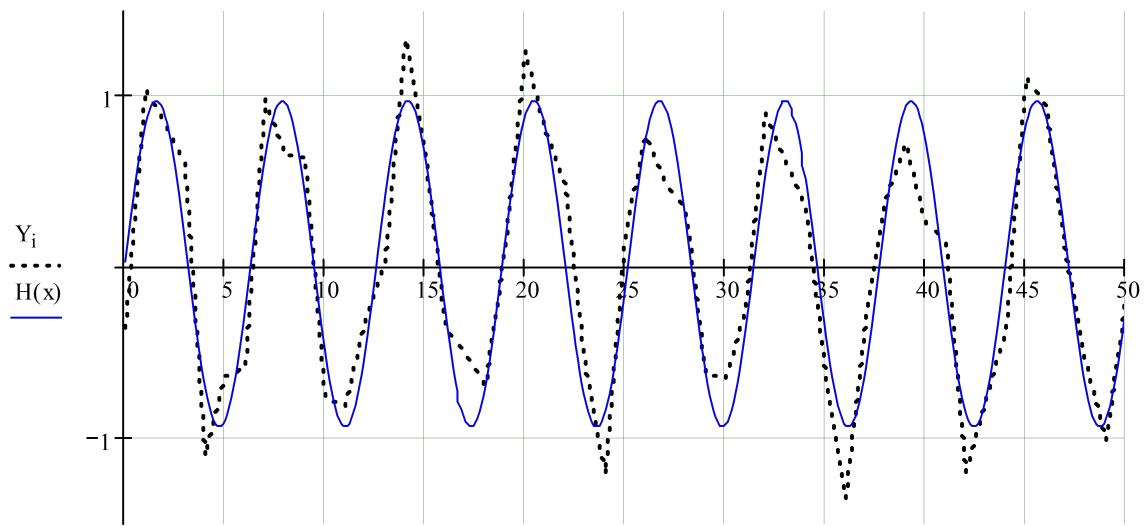
Ще один вид регресії – синусоїdalний - представляє фрагмент документа Mathcad, який наведено нижче. Тут вихідні вектори даних формуються шляхом додавання до значень синусоїdalної функції випадкових чисел. Регресія реалізується функцією fit .

СИНУСОЇDALНА РЕГРЕСІЯ

$$\begin{aligned} i &:= 0..50 & x &:= 0, 0.1..50 \\ X_i &:= i & Y_i &:= \sin(i) - 0.5 + \text{rnd}(1) \\ \text{Guess} &:= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & E &:= \text{sinfit}(X, Y, \text{Guess}) \end{aligned}$$

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

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



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

2.1.9 Побудова лінійної апроксимуючої залежності

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

$$= a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n \quad (2.1)$$

Застосування поліномів має ту перевагу, що невідомі коефіцієнти (параметри) a_i , входять у рівняння лінійно, що спрощує їх розрахунок.

Крім того, збільшуючи степінь такого полінома, можна досягнути практично будь-якої міри наближення розрахункових даних до експериментальних аж до повного збігу.

Задача побудови математичного опису процесу у вигляді (2.1) зводиться до знаходження таких значень коефіцієнтів a_i , при яких досягається найкращий збіг експериментально одержаних y_e та розрахованих за допомогою апроксимуючої залежності вихідних значень y_p .

Одним із методів знаходження коефіцієнтів апроксимуючих поліномів є метод найменших квадратів (МНК), умова якого полягає у тому, що сума квадрата різниць між експериментальними значеннями функції та розрахованими за допомогою апроксимуючого полінома при одних і тих же значеннях аргументу повинна бути мінімальною, тобто:

$$S = \sum_{i=1}^N [y_e(x_i) - y_p(x_i)]^2 = \sum [Y_{ei} - Y_{pi}] \rightarrow \min \quad (2.2)$$

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

$$S = \sum_{i=1}^N [Y_{ei} - (a_0 x_i^0 + a_1 x_i^1 + a_2 x_i^2 + \dots + a_n x_i^n)] \rightarrow \min \quad (2.3)$$

де a_1, a_2, \dots, a_n - невідомі (ті, що потрібно знайти) коефіцієнти поліноміальної емпіричної моделі процесу; n - порядок поліному; N - кількість дослідних значень функції Y . Змінна x вводиться у рівняння (2.3) для одноманітності запису.

Як відомо, функція S має мінімум при умові, що похідні незалежних змінних, (у даному випадку похідні коефіцієнтів $a_1, a_2 \dots a_n$) будуть рівними нулеві:

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = \frac{\partial S}{\partial a_1} = \frac{\partial S}{\partial a_2} = \dots = \frac{\partial S}{\partial a_n} = 0 \quad (2.4)$$

чому відповідає наступна система:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N (y_{ei} - a_0 x_i^0 - a_1 x_i^1 - a_2 x_i^2 - \dots - a_n x_i^n) x_i^0 = 0 \\ \sum_{i=1}^N (y_{ei} - a_0 x_i^0 - a_1 x_i^1 - a_2 x_i^2 - \dots - a_n x_i^n) x_i^1 = 0 \\ \dots \\ \sum_{i=1}^N (y_{ei} - a_0 x_i^0 - a_1 x_i^1 - a_2 x_i^2 - \dots - a_n x_i^n) x_i^n = 0 \end{cases} \quad (2.5)$$

Приведемо одержану систему рівнянь до наступного вигляду (так званої системи нормальних рівнянь):

експериментально - статистичної моделі, тобто дослідні значення вхідної змінної y та відповідні значення вхідної змінної x . Потрібно за допомогою програмного комплексу Mathcad знайти поліноміальну залежність $y=f(x)$.

При обробці дослідних даних з допомогою МНК важливо не тільки розраховувати значення коефіцієнтів апроксимуючого полінома, але й знайти такий його ступінь, якому буде відповідати задовільна помилка апроксимації, которую, як правило, оцінюють у вигляді середньої відносної похибки:

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

Максимальну відносну похибку апроксимації рекомендується прийняти $\epsilon=5-10\%$.

Якщо нанести експериментальні дані на графік, можна скласти уявлення про приблизне значення степені полінома, 1 чи 2 (крива близька до прямої), або 2 чи 3 (кривизна є достатньо великою). На рис. 2.2 нанесені результати обробки експериментальних даних для полінома 4-го порядку.

Апроксимація вважається задовільною, якщо помилка ϵ буде мати значення близькі до значень середньої відносної похибки δ . У випадку незадовільних результатів апроксимації степінь полінома можна підвищувати та знов обробляти експериментальні дані за допомогою МНК.

Після розрахунку на ЕОМ треба нанести одержану розрахункову криву на той же графік що й експериментальні точки, та записати вираз статистичної математичної моделі.

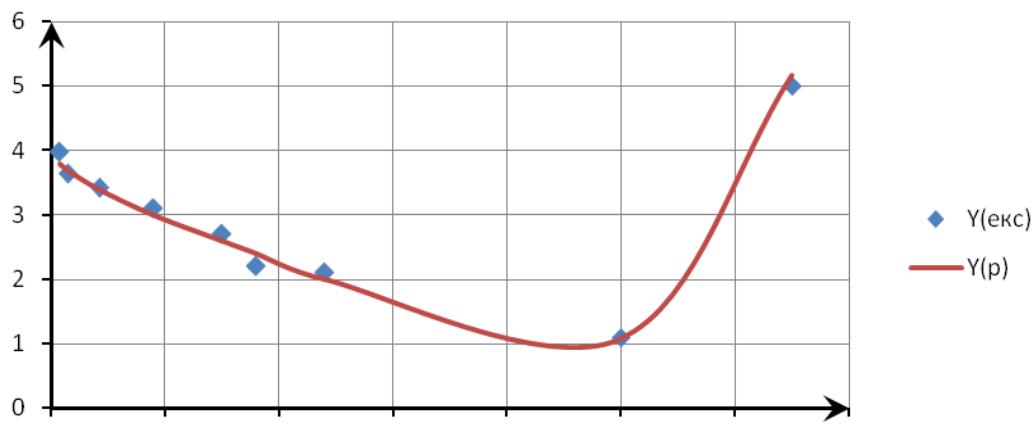


Рис. 2.2 - Експериментальні точки та розрахункова крива

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

2.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.

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

Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.

Отримати результати та проаналізувати їх.

Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.

Перейти до оформлення звіту.

2.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Приклад результатів програмування задачі і геометричної інтерпретації результатів

Вихідні дані по об'єму i ph:

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

Визначимо ступінь поліному, що задовільняє похиби

$$k := 4 \quad (k - \text{ступінь поліному})$$

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

$$Y := \begin{pmatrix} \text{interp}(H, V, PH, V_0) \\ \text{interp}(H, V, PH, V_1) \\ \text{interp}(H, V, PH, V_2) \\ \text{interp}(H, V, PH, V_3) \\ \text{interp}(H, V, PH, V_4) \\ \text{interp}(H, V, PH, V_5) \end{pmatrix} \quad Y = \begin{pmatrix} 3.4 \\ 3.001 \\ 2.596 \\ 2.403 \\ 1.999 \\ 1.08 \end{pmatrix}$$

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

$$Ep = 0.244 \quad (\text{результативна відносна похибка})$$

Визначимо коефіцієнти поліному

$$X := \begin{pmatrix} \sum v^0 & \sum v^1 & \sum v^2 & \sum v^3 & \sum v^4 \\ \sum v^1 & \sum v^2 & \sum v^3 & \sum v^4 & \sum v^5 \\ \sum v^2 & \sum v^3 & \sum v^4 & \sum v^5 & \sum v^6 \\ \sum v^3 & \sum v^4 & \sum v^5 & \sum v^6 & \sum v^7 \\ \sum v^4 & \sum v^5 & \sum v^6 & \sum v^7 & \sum v^8 \end{pmatrix} \quad YX := \begin{pmatrix} PH \cdot v^0 \\ PH \cdot v^1 \\ PH \cdot v^2 \\ PH \cdot v^3 \\ PH \cdot v^4 \end{pmatrix}$$

X та YX - це вектори системи $X^*AI=YX$, де AI - шукані коефіцієнти.

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

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

Коефіцієнти поліному знайдені:

Перевіримо вірність обчислень:

$$yy(z) := AI_0 + AI_1 \cdot z + AI_2 \cdot z^2 + AI_3 \cdot z^3 + AI_4 \cdot z^4$$

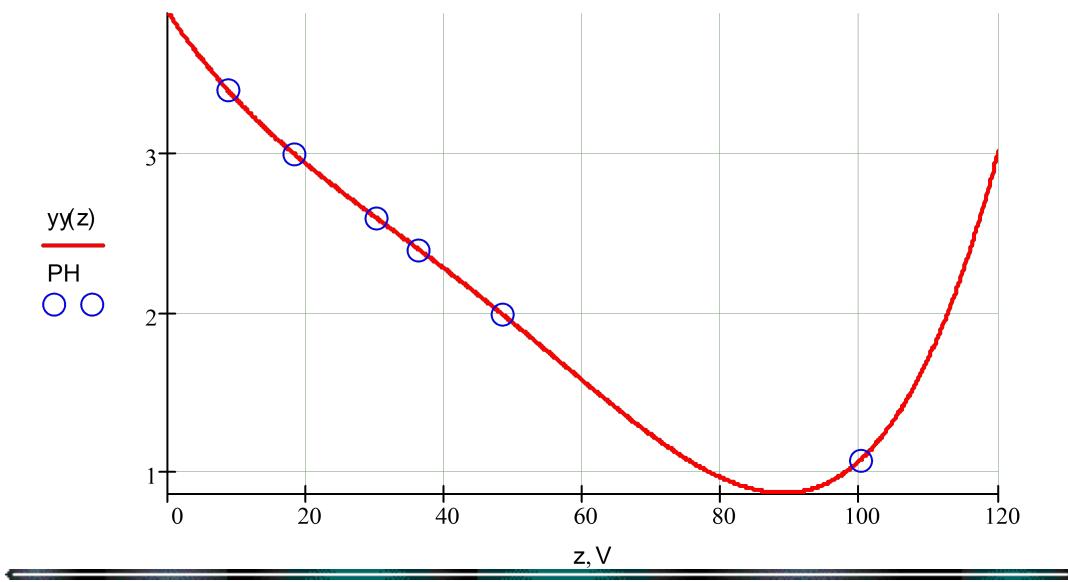
$$Y := \begin{pmatrix} yy(v_0) \\ yy(v_1) \\ yy(v_2) \\ yy(v_3) \\ yy(v_4) \\ yy(v_5) \end{pmatrix} \quad Y = \begin{pmatrix} 3.4 \\ 3.001 \\ 2.596 \\ 2.403 \\ 1.999 \\ 1.08 \end{pmatrix}$$

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

$$Ep := \frac{6}{6}$$

$$Ep = 0.244 \quad (\text{розрахункова відносна похибка})$$

Відобразимо поліном графічно:



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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 2

Характеристика МНК, та формулювання його умови.

До чого зводиться задача побудови поліноміальної математичної моделі?

Які можливості використання МНК у разі складних апроксимуючих залежностей (логарифмічної, показникової)?

Який вигляд має алгоритм обробки експериментальних даних із метою побудування поліноміальної математичної моделі?

Які початкові дані необхідно визначити для виконання стандартної програми на ЕОМ?

Який підхід (детермінований або статистичний) було використано для постановки даної задачі? Дайте характеристику визначеного підходу.

З МОДЕЛЮВАННЯ ГІДРОДИНАМІКИ ПОТОКУ У НАСАДКОВІЙ КОЛОНІ ЗА ДОПОМОГОЮ КОМІРКОВОЇ МОДЕЛІ

Лабораторна робота № 3

(4 години)

ТЕМА: моделювання гідродинаміки потоку у насадковій колоні за допомогою коміркової моделі.

МЕТА: визначення за експериментальною кривою відгуку кількості комірок n -коміркової моделі, яка описує гідродинаміку насадкової колони.

3.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

3.1.1 Дослідження гідродинаміки потоку за допомогою методу стандартних збурень

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

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

Основні параметрами гідродинамічних моделей реальних процесів зображені на рис. 3.1.



Рис. 3.1 - Основні параметрами гідродинамічних моделей реальних процесів

Одним із методів визначення структури реального потоку та розрахунку параметрів гідродинамічних моделей є експериментальне дослідження реакції ОХТ на стандартні збурення у початковім потоці. На початку проведення експерименту об'єкт зображають у вигляді «чорного ящика».

Імпульсний метод полягає у визначенні параметра n через статистичні оцінки диференціальної функції розподілу часу перебування речовини. Цю функцію знаходять експериментально за даними дослідів із використанням трасера. При цьому час перебування часток (молекул) речовини в апараті розглядають як випадкову величину, дискретний розподіл та ідеальність якої можуть бути описані за допомогою теоретично ймовірних характеристик.

Трасер (індикатор) вибирають із тим розрахунком, щоби він не руйнував гідродинаміки потоку в апараті і в той же час легко аналізувався. Трасерами, як правило, служать розчини солей, фарб, інертні тверді частки, радіоактивні речовини тощо. Обраний трасер уводять у початковий потік у вигляді стандартного сигналу (східцевого або імпульсного).

Частіше збурення вносять у вигляді імпульсу $\delta(t)$, оскільки воно легше реалізується, а також спрощує наступну аналітичну обробку експериментальних даних (при відсутності випадкових збурень).

У певні моменти часу після вводу індикатора відбирають проби з вихідного потоку та аналізують вміст трасера в них. Згідно з експериментальними даними будують F -або C -криві відгуку. На основі форми експериментальної кривої припускають можливий вигляд гідродинамічної моделі (наприклад коміркової) і проводять математичну обробку кривої, в результаті чого розраховують значення параметрів моделі і роблять висновки про адекватність прийнятої моделі реальному об'єкту. При цьому у загальному випадку час перебування τ часток речовини в апараті розглядають як випадкову величину, що має диференційну функцію розподілення - (t) .

3.1.2 Опис насадкового колонного абсорбера за допомогою коміркової моделі

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

$$(t) = \frac{1}{\tau} \cdot \frac{n^n}{(n-1)!} \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^{n-1} \cdot e^{-n \cdot t / \tau} \quad (3.1)$$

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

$$M[t] = \int_0^{\infty} t \cdot C_{kp}(t) dt \quad (3.2)$$

Розрахункові (теоретичні) криві коміркової моделі зазвичай наводяться у безрозмірних координатах, оскільки у математичних викладках припускається, що одиничне імпульсне збурення й концентрація не мають конкретної фізичної розмірності.

Під безрозмірними величинами (час і диференційна крива $Z(\theta)$) розуміють:

$$\tau = t/\tau, \quad Z(\theta) = C_{kp}(t) \quad (3.3)$$

Таким чином, для порівняння експериментальної кривої з теоретичними кривими (рис. 3.1) необхідно вирахувати τ згідно із залежністю (3.2) і зробити відповідні перерахунки згідно з формулою (3.3). Необхідно також провести нормування експериментальних значень концентрації $x^{(i)}$ до загальної енергії імпульсу індикатора KCl , введеного у колону:

$$(3.4)$$

Чисельні значення визначних інтегралів, що входять у рівняння (3.2, 3.4) можна знайти, наприклад, за методом трапеції, який у загальному випадку має наступний вигляд:

$$f(x)dx = \frac{h}{2} \cdot [y_0 + y_n + 2(y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1})] \quad (3.5)$$

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

Для виконання необхідних розрахунків доречно використати ЕОМ. Після цього потрібно нанести на один графік C - криві відгуку, розраховані згідно коміркової гідродинамічної моделі (див. рис. 3.2.), а також експериментальну C - криву у безрозмірній формі.

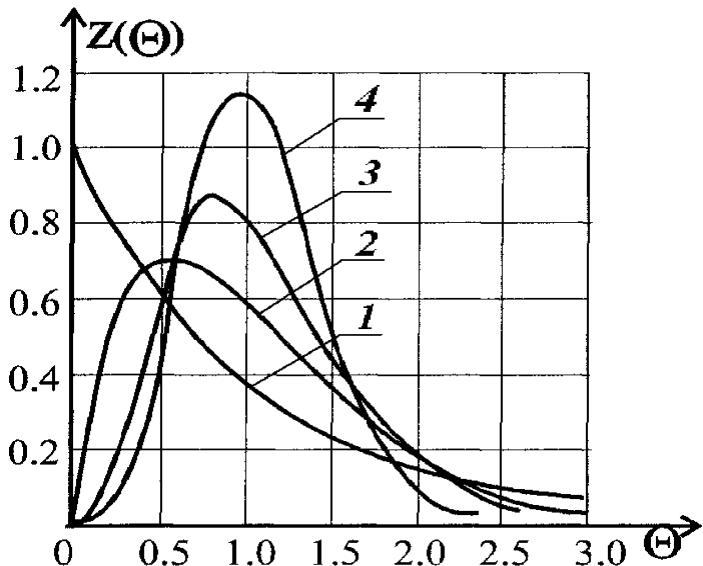


Рис. 3.2 - Порівняння експериментальної кривої з теоретичними кривими при різній кількості комірок (видповідно 1,2,6,8)

Шляхом порівняння потрібно знайти необхідну кількість комірок n , яка буде визначена як основний параметр моделі.

Інструкції по роботі з інтегрованим програмним середовищем Mathcad надаються при роботі в лабораторії обчислювальної техніки. Робота виконується у програмному середовищі Mathcad (версії 8 і вище) на персональному комп'ютері.

3.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.

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

Розробити алгоритм вирішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.

Отримати результати та їх проаналізувати.

Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.

Перейти до оформлення звіту.

3.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Приклад результатів програмування задачі і геометричної інтерпретації результатів

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

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

Розвязок:

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

$$C_{\text{нн}} := \frac{\frac{Cv^{\langle 1 \rangle}}{2 \cdot \sum Cv^{\langle 1 \rangle} - Cv_{0,1} - Cv_{9,1}}}{2}$$

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

Визначимо середній час перебування потоку в ОХТ:

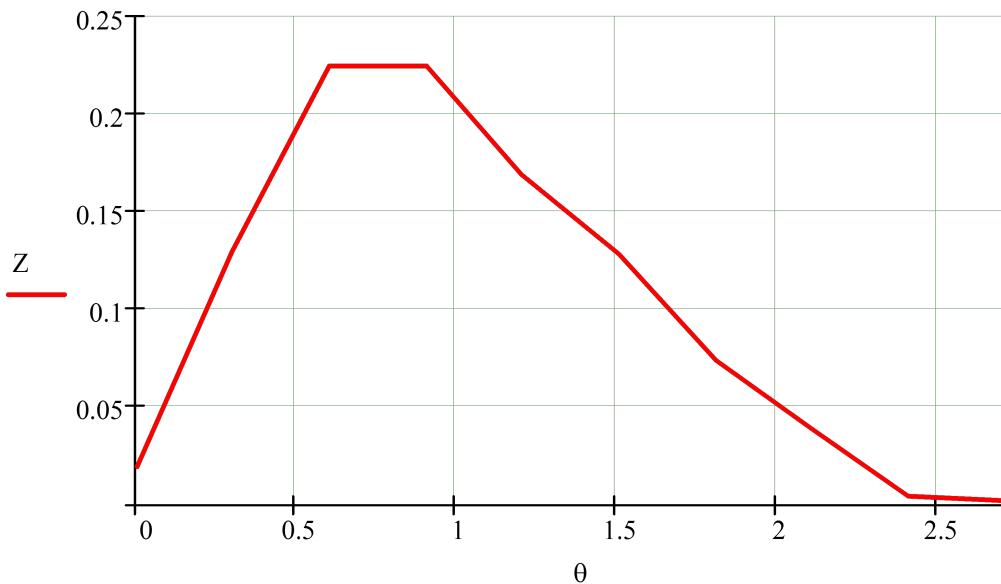
$$\tau := \frac{2 \cdot Cv^{\langle 0 \rangle} \cdot C - Cv_{0,0} \cdot C_0 - Cv_{9,0} \cdot C_9}{2} \quad \tau = 3.321$$

Визначимо безрозмірні величини:

$$\theta := \frac{C_V \langle 0 \rangle}{\tau}$$

$$Z := C$$

Графік у безрозмірних координатах має вигляд:



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

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

$$n := 4$$

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

$$P(t) := \frac{t}{\tau}$$

Перевіримо адекватність моделі:

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

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

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

$$\sigma = 0.021$$

Результати оцінки (1 рядок – значення кількості комірок, 2- середньо квадратичне відхилення)

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

Таким чином, параметр моделі $n=4$

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 3

Які типові гідродинамічні моделі ви знаєте?

Назвіть основні параметри гідродинамічних моделей.

Для яких моделей розподіл часу перебування речовини можна розглядати як випадкову величину?

Надайте характеристику комірковій моделі.

Як визначається передавальна функція коміркової моделі?

Який вигляд мають F- та C- криві для коміркової моделі з різною кількістю комірок?

Яка послідовність експериментального визначення параметрів гідродинамічних моделей?

Для чого і яким чином проводиться нормування експериментально одержаних даних?

Надайте характеристику ідеальним гідродинамічним моделям, які є поодинокими випадками коміркової моделі (при $n = 1$ та $n = \infty$).

4 ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕПЛООБМІННИХ АПАРАТІВ НА ОСНОВІ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ

Лабораторна робота № 4

(2 години)

ТЕМА: дослідження теплообмінних апаратів на основі математичної моделі.

МЕТА: дослідження стаціонарного режиму протиточного кожухотрубчатого теплообмінника, побудова терпературних профілей теплоносіїв.

4.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

4.1.1 Моделі ідеального витіснення та ідеального змішування при дослідженні теплообмінних апаратів

Теплообмінний апарат (ТОА) є одним із найшироковживаних і різноманітних видів устаткування хіміко-технологічних та інших виробництв. Капіталовкладення і експлуатаційні витрати на ТОА досягають 40-50% від вартості та витрат на все обладнання хіміко-технологічної системи (ХТС). Отже, від характеристик ТОА буде значним чином залежати якість всієї ХТС.

У теперішній час проектування, дослідження та оптимізацію ТОА проводять, як правило, на основі математичних моделей.

Структуру потоків в ТОА частіше за все надають у вигляді моделі ідеального перемішування або моделі ідеального витіснення. Тоді з

врахуванням джерела тепла, що виникає в потоці за рахунок теплопередачі, рівняння моделі будуть записані:

модель змішування:

$$Vc_T \frac{dT}{dt} = \vartheta c_T (T_{ex} - T) \pm FK_T \Delta T \quad (4.1)$$

модель витиснення:

$$Sc_T \frac{\partial T}{\partial t} = \vartheta c_T \frac{\partial T}{\partial l} \pm \frac{F}{L} K_T \Delta T, \quad (4.2)$$

де V - об'єм апарату, m^3 ; ϑ - об'ємна швидкість потоку, m^3/c ; c - теплоємність теплоносія, $Дж/m^3 град$; F – поверхня теплообміну, m^2 ; K_T - коефіцієнт теплопередачі, $Bm/m^2 град$; ΔT - рушійна сила теплопередачі, N ; L - довжина апарату, m ; l - координата довжини, m ; T – температура, $град$; t – час, s .

Види моделей ТОА в залежності від вигляду моделі структури потоку первинного та вторинного теплоносія наведені на рис. 4.1.



Рис. 4.1 - Види моделей ТОА в залежності від вигляду моделі структури потоку

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

$$\begin{cases} S_1 c_{T_1} \frac{dT_1}{dt} = -\vartheta_1 c_{T_1} \frac{dT_1}{dl} - \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) \\ S_2 c_{T_2} \frac{dT_2}{dt} = \pm \vartheta_2 c_{T_2} \frac{dT_2}{dl} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2), \end{cases} \quad (4.3)$$

де індекс 1 - відповідає гарячому, а 2 - холодному теплоносіям; $+\vartheta_2$ - противотік; $-\vartheta_1$ - прямотік.

4.1.2 Розрахунок теплообмінного апарату для моделі «витіснення-витіснення»

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

$$\begin{cases} -\vartheta_1 c_{T_1} \frac{dT_1}{dt} - \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0 \\ \vartheta_2 c_{T_2} \frac{dT_2}{dt} + \frac{F}{L} K_T (T_1 - T_2) = 0. \end{cases} \quad (4.4)$$

Межові умови відповідають протиточному руху теплоносіїв: при $I=0, \textcolor{brown}{T}_1 =_1$; при $I=L, \textcolor{brown}{T}_2 =_1$.

Хай потрібно отримати розподіл температур по довжині проточного кожухотрубного ТОА. У цьому випадку початковими даними, наприклад можуть бути: $\vartheta_1 = 0,267 \text{ } m^3/c$; $T_1 = 76$; $T_2 = 16$; $F = 13 \text{ } m^2$; $L = 1,5 \text{ } m$; $K = 60 \text{ } Bm/m^2 \text{ grad}$; $c_1 = 1670 \text{ } \text{дж}/m^3 \text{ grad}$; $c_2 = 4185 \times 10^3 \text{ } \text{дж}/m^3 \text{ grad}$; $V_1 = 0,26 \times 10^{-3} \text{ } m^3/c$.

Записані рівняння дозволяють розрахувати розподіл температур по довжині ТОА (так званий температурний профіль), а також температуру кожного теплоносія на виході з апарату - , . Можна одержати аналітичне рішення цих рівнянь при крайових умовах $T_1(0) = T_{1\pi}$, $T_2(L) = T_{2\pi}$, чисельними методами із застосуванням ЕОМ.

Таким чином, для розв'язання задачі на ЕОМ необхідно підібрати такі початкові умови $T_2(0)$, в результаті чого наприкінці рішення температура другого теплоносія дорівнюватиме заданому значенню на вході.

Для наведених початкових даних $T_1(0) = T_{1\pi} = 76^{\circ}\text{C}$. Схема потоків для розв'язання рівнянь відповідно для заданих граничних умов надана на рис. 4.2.

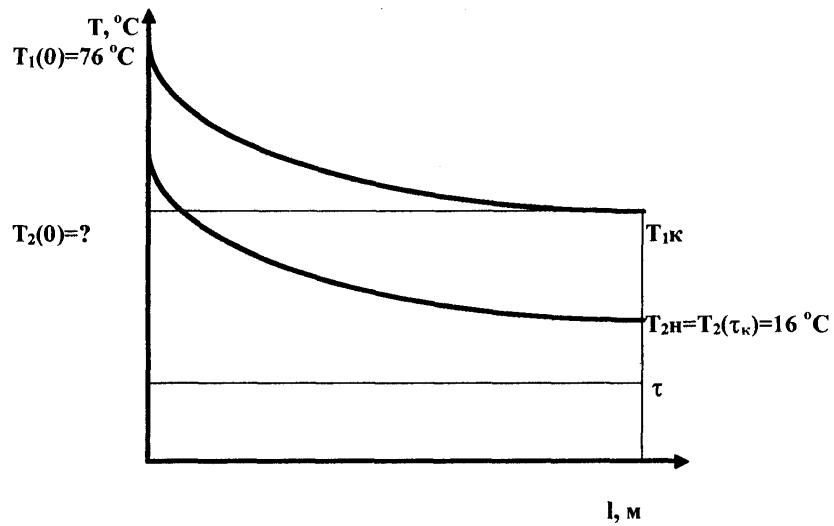


Рис. 4.2 - Профілі температур

При виконанні роботи розглядається той же теплообмінний апарат, що і в прикладі, тобто кужухотрубний, протиточний ТОА в стаціонарному режимі, із тими ж конструктивними та технологічними характеристиками.

Границні умови та надаються в індивідуальному завданні: точність розрахунків можна обрати 0,01.

Потрібно побудувати температурні профілі, які характеризували б залежність температур теплоносіїв від довжини апарату.

Розв'язуючи систему рівнянь (4.4) з допомогою ЕОМ, проводиться підбір \dot{x}_0 послідовно задаючись значеннями \dot{x} . Рекомендується починати з $\dot{x} = 20^\circ\text{C}$, і змінювати значення температури з кроком -10°C , доки не буде отримане кінцеве значення \dot{x}_0 .

Після закінчення розрахунків необхідно нанести на графік одержані температурні профілі.

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

Для роз'язання математичної моделі ТОА можна використати наступну вбудовану функцію:

rkfixed (y , x_0 , x_f , n , F) – видає таблицю результатів рішення систем звичайних диференціальних рівнянь методом Рунге-Кутта четвертого порядку з фіксованим кроком інтегрування. Ця функція має п'ять аргументів: y - вектор початкових значень шукані функції; x_0 - початкове значення незалежної змінної; x_f - кінцеве значення незалежної змінної; n - фіксоване число кроків інтегрування; F - праві частини системи рівнянь, записані у векторі в символьному виді. Функція *rkfixed* (y , x_0 , x_f , n , F) видає таблицю результатів рішень з $(m + 1)$ стовпцями і n рядками (m - число рівнянь у системі). Нульовий стовпець таблиці - це поточні значення незалежної змінної (аргументу) x . Вони визначаються через x_0 , Δx і n . Наступні стовпці рішення визначають значення ординат шуканих y_1 , y_2 , ..., для відповідних поточних значень аргументу x .

Результат рішення системи звичайних диференціальних рівнянь з використанням функції *rkfixed* (y , x_0 , x_f , n , F) у Mathcad представлений у виді таблиці - певним чином побудованої матриці. При цьому перший

стовпець таблиці (матриці) містить значення незалежної змінної на кожнім кроці інтегрування. Другий – значення першої шуканої функції для заданого значення незалежної змінної на кожнім кроці інтегрування. Третій – значення другої шуканої функції й і т.д.

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

4.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.

Включити комп’тер і запустити програму Mathcad вказаним викладачем способом.

Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.

Отримати результати та їх проаналізувати.

Представити результати роботи на комп’ютері викладачу.

Перейти до оформлення звіту.

4.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

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

$$v1 := 0.267 \quad T1h := 90 \quad F := 13 \quad K := 60 \quad Ct2 := 4185 \cdot 10^3$$

$$v2 := 0.26 \cdot 10^{-3} \quad T2h := 40 \quad L := 1.5 \quad Ct1 := 1670 \quad h := 0.15$$

Вихідні дані:

Розв’язання задачі:

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

(матриця температур теплоносіїв у точці входу гарячого теплоносія).

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

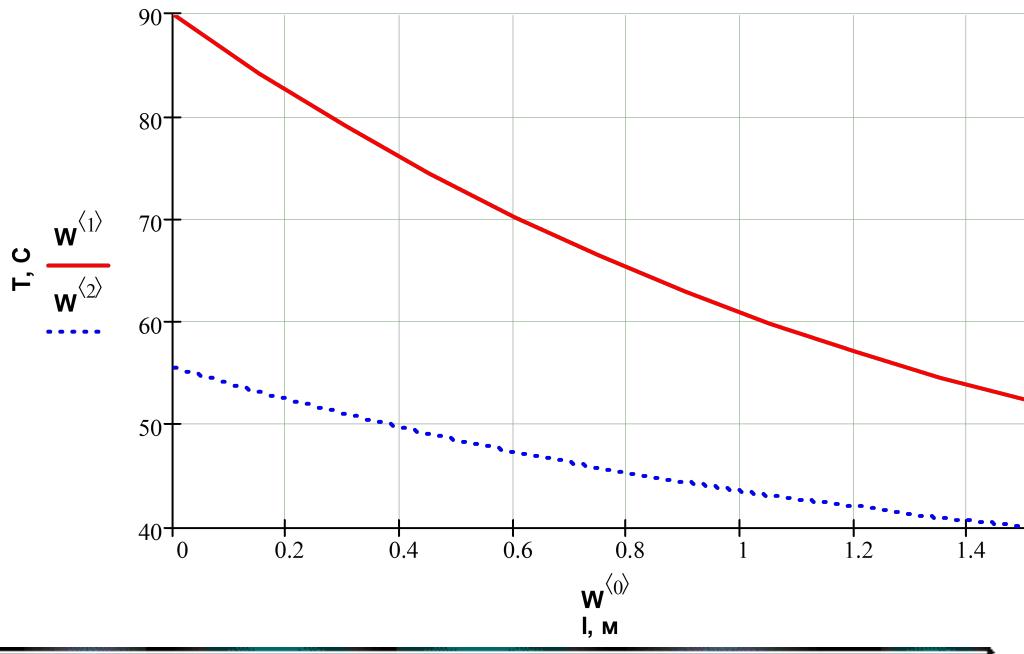
(матриця правих частин диференціальних рівнянь математичної моделі ТОА)

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

Рішення математичної моделі:

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

Профілі розрахованих температур наведені на графіку



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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 4

Які типові моделі використовуються для опису гідродинаміки теплоносіїв у теплообмінних апаратах? Навести приклади.

Охарактеризуйте основні коефіцієнти і змінні, які входять у математичний опис ТОА, та їх розмірність.

Який вигляд має блочний принцип при побудові математичної моделі ТОА?

4. Охарактеризуйте математичний опис протиточного теплообмінного апарату у стаціонарному режимі, межові умови?

У чому полягає особливість рішення моделі ТОА у випадку протиточного руху теплоносіїв?

Які припущення приймають при урахування теплопередачі в математичній моделі ТОА?

5 КОМПЮТЕРНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НА ЕОМ КОНСТАНТ

ШВИДКОСТІ ЗВОРОТНОЇ ХІМІЧНОЇ РЕАКЦІЇ

Лабораторна робота № 5

(2 години)

ТЕМА: комп'ютерне визначення на ЕОМ констант швидкості зворотної хімічної реакції.

МЕТА: набуття навичок моделювання кінетики хімічних реакцій на ЕОМ та розрахунок кінетичних констант.

5.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Розрахунок кінетичних параметрів (констант, порядків реакції) є одним з етапів побудови кінетичної моделі хімічної реакції (див. рис. 5.1)

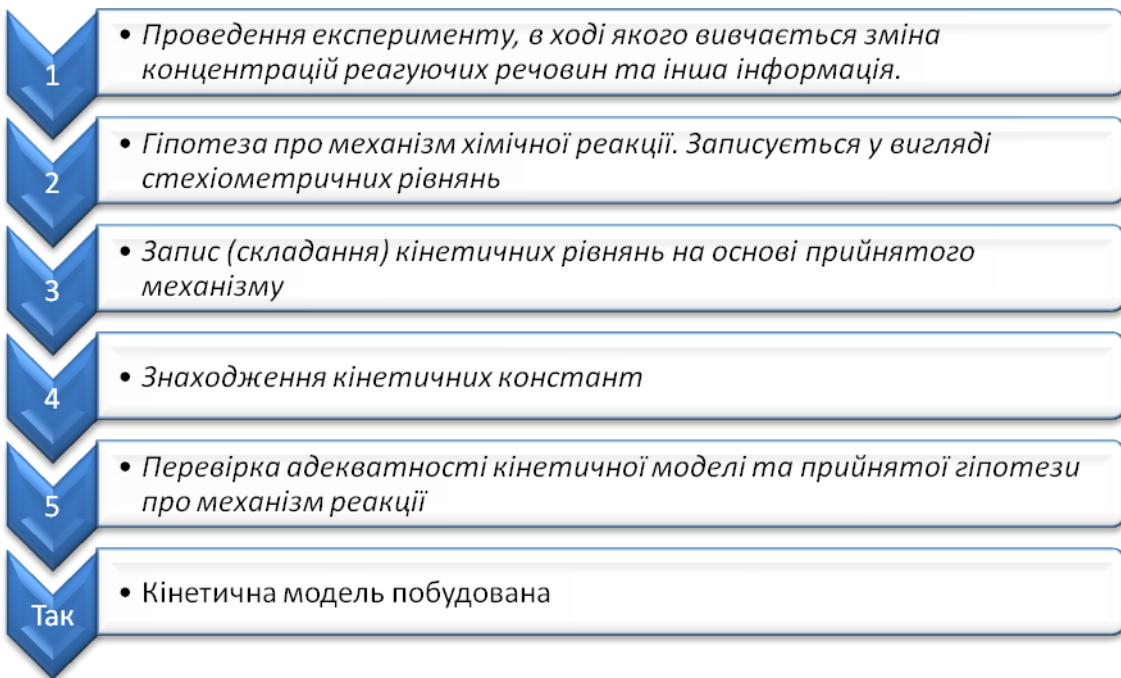
Кінетична модель (рівняння) зв'язує швидкість хімічної реакції з параметрами, від яких вона залежить. Такими параметрами виступають: концентрації реагуючих речовин, температура тощо. Звичайно кінетичні рівняння являють собою систему диференційних рівнянь і містять поряд із концентраціями кінетичні константи та порядки реакцій.

Методи, що існують для знаходження констант моделей безпосередньо зв'язані з обробкою експериментальних даних відповідно до рівнянь швидкості реакцій.

В загальному випадку задача знаходження кінетичних констант формулюється так: необхідно знайти значення констант, при яких кінетичні рівняння найкращим чином описували б експериментальні дані.

У тому випадку, коли кінетична модель має простий вигляд, порядок хімічної реакції відомий і диференційні рівняння моделі можуть бути

аналітично розв'язані, то розрахунок кінетичних констант рекомендується виконувати безітераційними методами, наприклад, методом середніх, методом найменших квадратів, тощо.



Rис 5.1 Основні етапи побудови кінетичної моделі

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

5.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

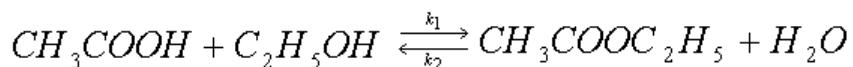
5.2.1 Приклад розрахунку констант швидкості реакції етерифікації етилового спирту та оцтової кислоти

Розглядається реакція етерифікації етилового спирту та оцової кислоти. Необхідно скласти кінетичну модель процесу, знайти значення констант швидкостей і підтвердити механізм реакції, що досліджується.

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

$$= k_1/k_2 = 4 \quad (5.1)$$

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



або у загальному вигляді:



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

$$\dot{C}_A = -k_1 C_A C_B + k_2 C_R C_S. \quad (5.3)$$

Початкові умови:

$$C_A(0) = C_{A_{\text{пк}}}, \quad C_B(0) = C_{B_{\text{пк}}}, \quad C_R(0) = C_S(0) = 0.$$

Якщо припустити, що початкові концентрації і рівні, то у відповідності до стехіометричних рівнянь (5.2) можна записати:

$$C_A = C_B, \quad C_R = C_S = C_{A_{\text{пк}}} - C_A.$$

Після підстановки останніх співвідношень у (5.3) маємо:

$$\dot{C}_A = -k_1 C_A^2 + k_2 C_R C_S.$$

Якщо $\frac{k_1}{k_2} = 1$ моль/л, а, як відомо, $k_1 = 4k_2$, то кінетична модель остаточно приймає вигляд нелінійного диференційного рівняння:

$$\dot{C}_A = k_2 (3C_A^2 + 2C_A - 1) \quad (5.4)$$

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

5.2.2 Алгоритм розрахунку кінетичних констант

Алгоритм розрахунку кінетичних констант може бути таким:

Задається орієнтовне (довільне) значення k_2 (рекомендується 0,01 або 0,02).

Кінетичну модель (5.4) із прийнятым значенням константи чисельно інтегрують на інтервалі від 0 до 1, використовуючи, наприклад, методи Ейлера або Рунге-Кутта. Результат інтегрування на ЕОМ - розрахункові значення концентрації C_A у різні моменти часу.

Розраховується на ЕОМ значення критерію середньоквадратичного відхилення S для перевірки адекватності моделі:

$$= \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_{A_e} - C_{A_p})^2}, \quad (5.5)$$

де N - кількість експериментальних даних; C_{A_e} - значення концентрацій компонента A експериментальне та розрахункове, відповідно.

Початкове значення S рекомендується задати рівним нулеві.

Змінюється (наприклад, збільшується) значення константи k_2 (наприклад, на 0,01). Розрахунок повторюють відповідно з п.п. 2 та 3. Порівнюють попереднє та останнє значення критерію S . Якщо значення S зменшилося, то продовжують змінювати константу k_2 у тому ж напрямку. Якщо значення S збільшилося - у зворотному.

Розрахунки виконують у діалоговому режимі з ЕОМ; константи змінюють, доки не буде одержано мінімальне значення критерію S .

У цьому випадку пошук k_2 припиняється. На графік наносять залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості реакції k_2 , на якому відзначають мінімум S та знайдене значення константи k_2 (рис. 5.2).

Значення константи прямої реакції k_1 розраховують згідно з формулою константи рівноваги (5.1): $k_1 = 4k_2$.

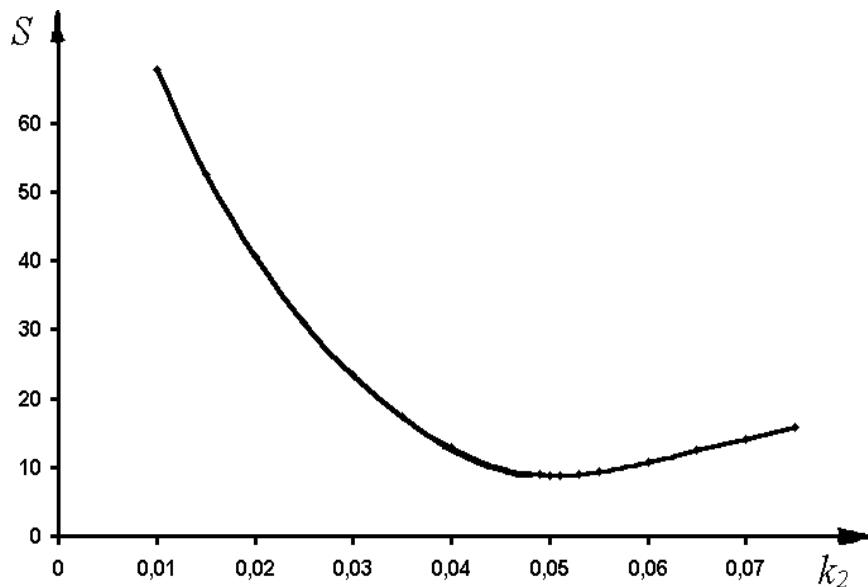


Рис. 5.2 - Залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості реакції k_2

Після закінчення розрахунку констант k_1 та k_2 необхідно нанести розрахункові та експериментальні залежності концентрації компонента A від часу на графік і провести візуальний аналіз збігу, тобто оцінити адекватність розробленої кінетичної моделі експериментальним даним (рис. 5.3).

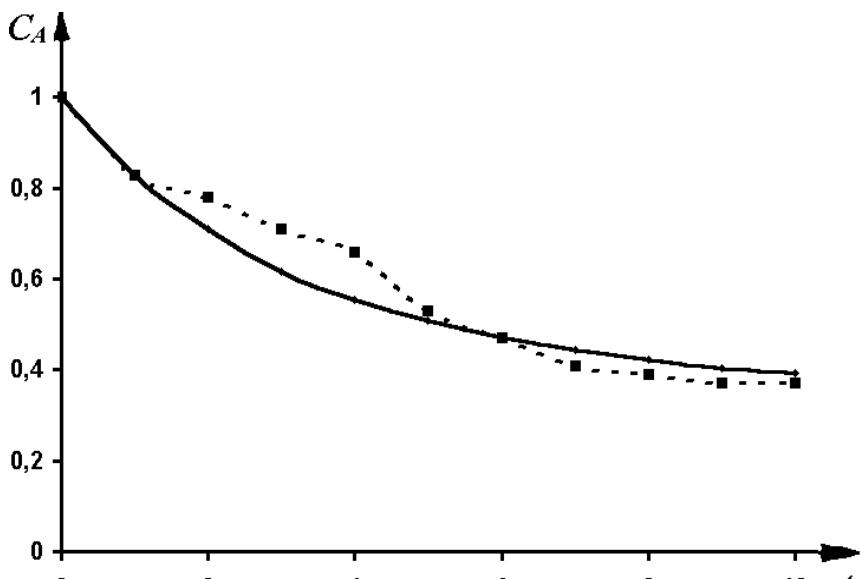


Рис. 5.3 - Залежність концентрації компоненту A від часу

5.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТИВ

Початкові дані:

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

Пошук адекватного рівняння кінетичної моделі:

Kр

Прийняте значення константи швидкості зворотної реакції $k2$:

$k2 := 0.04$

$$\begin{aligned} \text{Ca} &:= \begin{pmatrix} \text{Cae}_{0,1} \\ \text{Cae}_{0,1} \end{pmatrix} \\ D(t, \text{Ca}) &:= -k_2(3 \cdot \text{Ca}^2 + 2 \cdot \text{Ca} - 1) \end{aligned}$$

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

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

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

$$\text{Cap} := C^{<1>}$$

Середньоквадратичне відхилення розрахункових значень концентрації від експериментальних:

$$S := \sqrt{\frac{\sum (\text{Cae}^{<1>} - \text{Cap})^2}{11}} \quad S = 0.042$$

Значення константи швидкості прямої реакції k_1 :

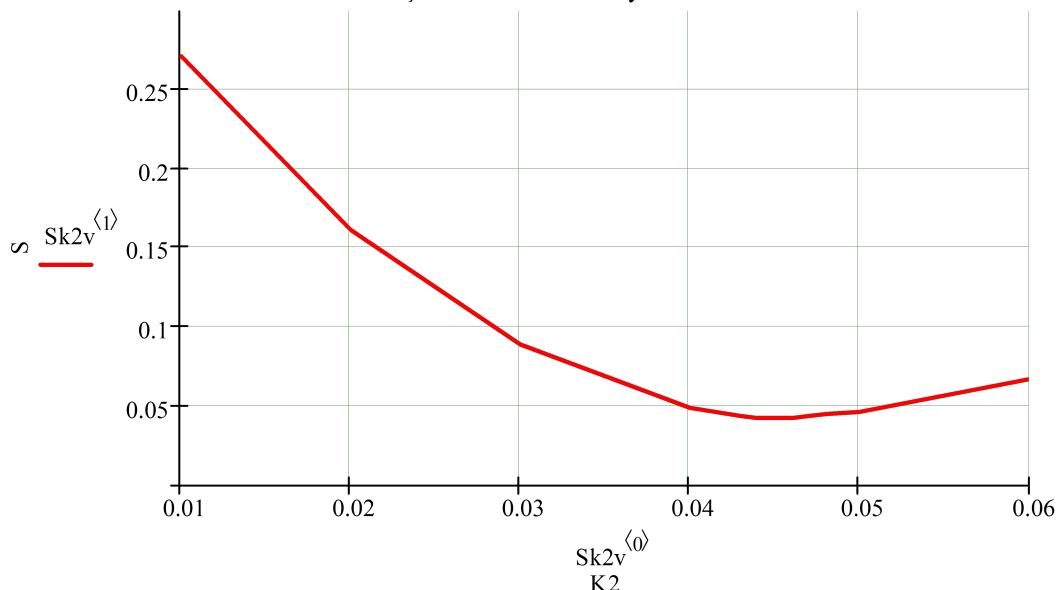
$$k_1 := K_p \cdot k_2 \quad k_1 = 0.18$$

Розраховані значення константи швидкості зворотної реакції k_2 (1-й рядок)
та відповідне їй значення середньоквадратичного відхилення (2-й рядок)

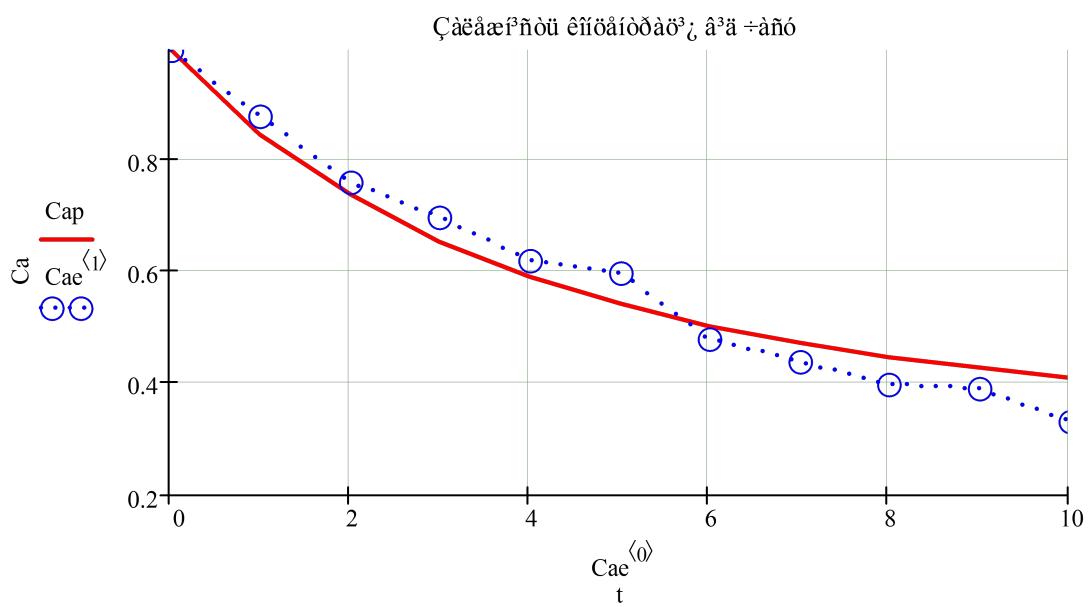
Транспонуємо матрицю отриманих значень для можливості побудови графічної залежності:

$$Sk2v := Sk2^T$$

Çàëåæ³ñòü â³äðèëáíý â³ä êíñò. øâ.



Залежність середньоквадратичного відхилення від константи швидкості зворотної реакції $k2$



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

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №5

Що називається кінетичною моделлю? Від чого залежить швидкість реакції?

Як формулюється задача розрахунку кінетичних параметрів?

В чому полягає знаходження кінетичних констант при використанні EOM?

Сформулюйте умову закінчення пошуку кінетичних констант.

Як складається кінетична модель для різних типів кінетичних реакцій?

Охарактеризуйте структурну схему побудови кінетичної моделі.

6 ДОСЛІДЖЕННЯ ІДЕАЛЬНОГО РЕАКТОРА

ЗМІШУВАННЯ ПЕРІОДИЧНОЇ ДІЇ

Лабораторна робота № 6

(6 години)

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

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

6.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

6.1.1 Математичний опис реактора ідеального змішування періодичної дії

Багато з хімічних процесів відбуваються у реакторах із змішуванням реакційної суміші близьким до режиму ідеального змішування (РІЗ). В реакторах подібного типу забезпечується майже миттєве і повне змішування речовин, що надходять в апарат. При цьому концентрація компонентів на виході з реактору дорівнює концентрації у реакційній зоні.

У загальному випадку стаціонарний режим описується системою алгебраїчних рівнянь матеріального та теплового балансів відносно до кожного з компонентів

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau}(C_{ex_i} - C_i) + W_{ri} = 0 \\ \frac{1}{\tau}(T_{ex} - T) + \frac{1}{C_T}(\pm \Delta H) |W_r| - \frac{K_T F}{C_T V}(T - T_x) = 0 \\ \frac{1}{\tau}(T_{ex} - T_x) + \frac{K_T F}{C_x V_x}(T - T_x) = 0 \end{cases} \quad (6.1)$$

де $1, 2, \dots, n$ - кількість компонентів реакції;

x - середній час перебування потоку в реакторі та холодаагенту в сорочці;

C_i - вхідна, поточна (вихідна) концентрація i -го компонента;

T, T_x - вхідна, поточна (вихідна) температури потоку та температура холодаагенту, відповідно;

c_x - об'ємна теплоємність реакційної суміші та холодаагенту, відповідно;

V - робочий об'єм реактора та сорочки;

F - коефіцієнт та поверхня теплопередачі;

- швидкість перетворення i -го компонента в хімічній реакції;

H - сумарний тепловий ефект;

- сумарна швидкість реакції для усіх стадій.

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

У статичному ізотермічному режимі процес в РІЗ можна описати рівнянням матеріального балансу:

$$C_{ex_i} - C_i) + W_{ri} = 0 \quad (6.2)$$

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



Відомі: концентрації компонентів у вхідному потоці: $x = 1 \text{ кмоль/м}^3$;

$C_{P_{\text{вх}}} = C_{S_{\text{вх}}} = 0$, константи швидкостей окремих стадій реакції:
 $= 0,5 \text{ год}^{-1}$; $= 0,4 \text{ год}^{-1}$;
 $= k_4 = 0,3 \text{ год}^{-1}$; — час перебування потоку в реакторі.

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

$$\left\{
 \begin{aligned}
 Wr_A &= \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \\
 Wr_B &= \frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S \\
 Wr_S &= \frac{dC_S}{dt} = k_2 C_B - k_3 C_S \\
 Wr_P &= \frac{dC_p}{dt} = k_4 C_B
 \end{aligned}
 \right. \quad (6.4)$$

Тоді модель ізотермічного реактора у статиці запишемо так:

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau}(C_{A_{ex}} - C_A) - k_1 C_A = 0 \\ \frac{1}{\tau}(C_{B_{ex}} - C_B) + k_1 C_A - (k_2 + k_4) C_B + k_3 C_S = 0 \\ \frac{1}{\tau}(C_{S_{ex}} - C_S) + k_2 C_B - k_3 C_S = 0 \\ \frac{1}{\tau}(C_{P_{ex}} - C_P) + k_4 C_B = 0 \end{cases} \quad (6.5)$$

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

$$\begin{cases} C_{A_{ex}} = (1 + k_1 \tau) C_A \\ C_{B_{ex}} = -k_1 \tau C_A - [1 + (k_2 + k_4) \tau] C_B + k_3 \tau C_S \\ C_{S_{ex}} = -k_2 \tau C_B - (1 + k_3 \tau) C_S \\ C_{P_{ex}} = -k_4 \tau C_B + C_P \end{cases} \quad (6.6)$$

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

Систему (6.6) зручно навести у матричному вигляді для подальшого розв'язання на ЕОМ:

$$C_{\text{вх}} = K \cdot C$$

де C - вектори-стовпці вхідних та вихідних концентрацій компонентів, відповідно.

$$C = \begin{vmatrix} C_A \\ C_B \\ C_S \\ C_P \end{vmatrix}; \quad C_{ex} = \begin{vmatrix} C_{Aex} \\ C_{Bex} \\ C_{Sex} \\ C_{Pex} \end{vmatrix};$$

$$K = \begin{vmatrix} (1 + k_1\tau) & 0 & 0 & 0 \\ -k_1\tau & 1 + (k_2 + k_4)\tau & -k_3\tau & 0 \\ 0 & -k_2\tau & (1 + k_3\tau) & 0 \\ 0 & -k_4\tau & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

- матриця коефіцієнтів (6.8)

Після обернення квадратичної матриці коефіцієнтів за допомогою ЕОМ можна записати остаточний розв'язок математичного опису реактора:

$$C = K^{-1} \cdot C_{Bex} \quad (6.9)$$

6.1.2 Приклад розрахунку проточного реактора ідеального змішування періодичної дії

Згідно із заданим викладачем механізмом реакції потрібно скласти статичну математичну модель ізотермічного РІЗ у статиці й підготувати матриці коефіцієнтів для п'яти значень часу перебування = 1, 2, 3, 4, 5. За допомогою ЕОМ одержати обернені матриці. Після розрахункових робіт накреслити залежність концентрації кожного компоненту від часу перебування речовин у потоці.

Розглянемо на прикладі.

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

Вихідні дані. Початкові концентрації реагуючих компонентів, кмоль/м³: $\text{A} = 1,15$; $\text{B} = 0,01$; $\text{C} = 0$. Теплота реакції $= 13100 \text{ Дж/кмоль}$. Температурні залежності констант швидкості мають вигляд

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

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

Температура вихідної реакційної суміші 0°C ; температура теплоносія 100°C . Щільність і теплоємність реакційної суміші відповідно рівні 810 кг/м^3 , $1600 \text{ Дж/кг}\text{ЧК}$. Обсяг реакційної суміші в РІЗ - П складає $0,8 \text{ м}^3$; поверхня теплопередачі $2,1 \text{ м}^2$; коефіцієнт теплопередачі $280 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \text{ ЧК})$.

Припущення:

Гідродинамічний режим в апараті і тепло-обмінному пристрої типу сорочка - ідеальне змішування.

Густина, теплоємність реакційної суміші і теплота реакції від температури не залежать.

Реакція протікає без зміни об'єму.

Розв'язання задачі

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

$$\frac{dn_j}{dt} = \frac{d(V\rho N_j)}{dt} = \sum_{i=1}^p v_i^0 \cdot \rho_i^0 \cdot N_{ji}^0 - v \cdot \rho \cdot N_j + \sum F_{j_\Sigma}, \quad (6.10)$$

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{d(V\rho c_p T)}{dt} = \sum_{i=1}^p v_i^0 \cdot \rho_i^0 \cdot c_{p_i}^0 \cdot T_i^0 - v \cdot \rho \cdot c_p \cdot T + \sum F_{T_\Sigma}, \quad (6.11)$$

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

Оскільки періодичний реактор ідеального змішування непроточний, то в його математичному описі відсутні два перших члени в правій частині рівнянь (6.10), (6.11). Тоді рівняння покомпонентного балансу приймає вигляд

$$\frac{d(V\rho N_j)}{dt} = \sum F_{j_\Sigma}, \quad (6.13)$$

теплового балансу

$$\frac{d(V\rho C_p T)}{dt} = \sum F_{T_\Sigma}. \quad (6.14)$$

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

$$\sum F_{A_\Sigma} = f_{A,V} \cdot V = W_A \cdot V = -k_1 \cdot C_A \cdot V; \quad (6.15)$$

$$\sum F_{R_\Sigma} = f_{R,V} \cdot V = W_R \cdot V = (k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_R) \cdot V; \quad (6.16)$$

$$\sum F_{S_\Sigma} = f_{S,V} \cdot V = W_S \cdot V = k_2 \cdot C_R \cdot V; \quad (6.17)$$

$$\sum F_{T_\Sigma} = q_{T,V} \cdot V + q_{T,F} \cdot F_T = -Q_P \cdot W_S \cdot V + K_T \cdot (T_T - T) \cdot F_T; \quad (6.18)$$

де W_A, W_R, W_S - швидкості відповідно перетворення й утворення, $\text{кмоль}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})$; V - об'єм реакційної суміші, м^3 ; F_T - поверхня теплопередачі, м^2 ; k_1 та k_2 - константи швидкості стадій реакції, с^{-1} ; K_T - коефіцієнт теплопередачі, $\text{Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$; Q_p - теплота реакції, $\text{кДж}/\text{кмоль}$; T_T - температура теплоносія, K ; T - температура реакційної суміші, K .

Ввівши в рівняння (6.13), (6.14) залежності (6.15) - (6.18), температурні залежності констант швидкості і співвідношення після нескладних перетворень отримаємо

$$k_1 = k_{01} \cdot \exp(-E_1 / R \cdot T); \quad (6.19)$$

$$k_2 = k_{02} \cdot \exp(-E_2 / R \cdot T); \quad (6.20)$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 \cdot C_A; \quad (6.21)$$

$$\frac{dc_R}{dt} = k_1 \cdot c_A - k_2 \cdot c_R; \quad (6.22)$$

$$\frac{dC_S}{dt} = k_2 \cdot C_R; \quad (6.23)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{K_T \cdot F_T}{V \cdot \rho \cdot c_P} \cdot (T_T - T) - \frac{Q_p}{\rho \cdot c_P} \cdot k_2 \cdot C_R. \quad (6.24)$$

Для адіабатичного теплового режиму рівняння (6.24) прийме вигляд

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{Q_p}{\rho \cdot c_P} \cdot k_2 \cdot C_R. \quad (6.25)$$

Ізотермічний тепловий режим забезпечується рівністю теплоприходу і теплозатрат, тобто

$$\frac{dT}{dt} = 0. \quad (6.26)$$

Вибір чисельного методу розв'язання

Математичний опис РІЗ-П для розглянутих теплових режимів (6.19) - (6.26) являє собою систему звичайних диференційних рівнянь першого порядку. Для її рішення скористаємося методом Ейлера з постійним кроком інтегрування. Сутність методу полягає в тому, що похідна замінюється відношенням кінцевих різниць. Тоді чисельне інтегрування зводиться до обчислення за рекурентним співвідношенням:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot F(x, y), \quad (6.27)$$

де h - крок інтегрування; $F(x, y)$ - права частина диференційного рівняння; y_i - попереднє наближення шуканої величини.

Для узгодження розмірностей у вихідній інформації необхідно розмірність теплоти реакції представити в Дж/кмоль (по речовині):

$$= 13100 \text{ кДж/кмоль} \cdot 1000 = 131 \cdot 10^5 \text{ Дж/кмоль} .$$

Температуру реакційної суміші і теплоносія необхідно виразити в градусах Кельвіна. Інші величини задані в погоджених розмірностях.

Інструкції по роботі з інтегрованим програмним середовищем Mathcad надаються при роботі в лабораторії обчислювальної техніки. Робота виконується у програмному середовищі Mathcad (версії 8 і вище) на персональному комп'ютері.

6.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.

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

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

Отримати результати та їх проаналізувати.

Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.

Перейти до оформлення звіту

6.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

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

Константи швидкості реакції, 1/с

$$k1(\text{tem}) := 1.84 \cdot 10^9 \cdot e^{\frac{-60910}{8.31 \cdot \text{tem}}}$$
$$k2(\text{tem}) := 1.93 \cdot 10^8 \cdot e^{\frac{-58100}{8.31 \cdot \text{tem}}}$$

$i := 1..900$ - кроки інтегрування

$$\Delta t := 0.1$$
 - величина кроку інтегрування, с

Концентрації речовин (кмоль/м³) і температура (К) у початковий момент часу

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

$$Ca_0 := 1.15$$
 $Cr_0 := 0.01$ $Cs_0 := 0$

$$Qps := 1.31 \cdot 10^7$$
 - тепловий ефект реакції по речовині S, Дж/кмоль

$$cp := 1600$$
 - питома теплоємність реакційної суміші, Дж/(кг*К)

$$\rho := 810$$
 - щільність реакційної суміші, кг/м³

$$V := 0.8$$
 - обєм реакційної суміші, м³

$$Ft := 2.1$$
 - поверхня теплопередачі, м²

$$Kt := 280$$
 - коефіцієнт теплопередачі, Вт/(м² · К)

$$Tt := 383$$
 - температура теплоносія, К

Ліві частини системи диференціальних рівнянь

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

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

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

Моделювання РІЗ-П (ізотермічний режим)

Реалізація метода Ейлера

$$\begin{pmatrix} t_i \\ Ca_i \\ Cr_i \\ Cs_i \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} t_{i-1} + \Delta t \\ Ca_{i-1} + FCa(Ca_{i-1}, tem_0) \cdot \Delta t \\ Cr_{i-1} + FCr(Ca_{i-1}, Cr_{i-1}, tem_0) \cdot \Delta t \\ Cs_{i-1} + FCs(Cr_{i-1}, tem_0) \cdot \Delta t \end{pmatrix}$$

$$\Delta_i := |FCa(Ca_i, tem_0)|$$

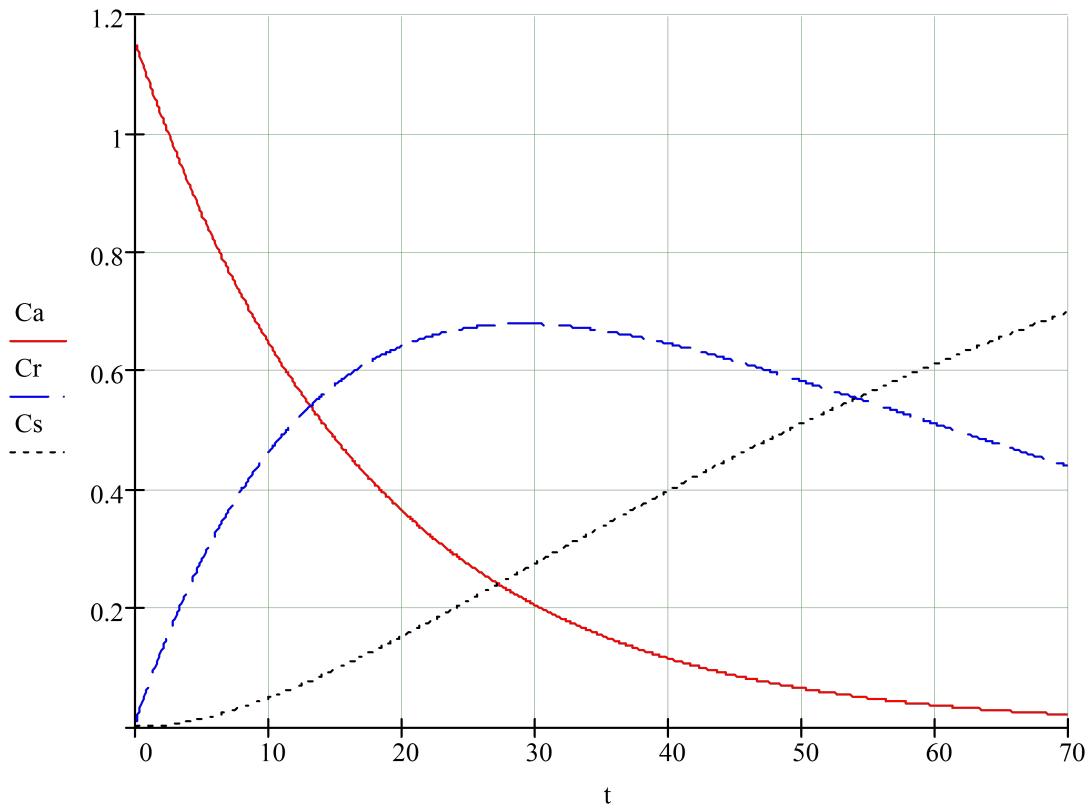
	0
0	0
1	0.066
2	0.065
3	0.065
4	0.065

	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4

	0
0	1.15
1	1.143
2	1.137
3	1.13
4	1.124

	0
0	0.01
1	0.017
2	0.023
3	0.03
4	0.036

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



Моделювання РІЗ-П (адіабатичний режим)

$$\begin{aligned}
 F_{\text{tem}}(\text{Cr}, \text{tem}) &:= \frac{Q_{\text{ps}}}{c_p \cdot \rho} \cdot |F_{\text{Cs}}(\text{Cr}, \text{tem})| \\
 \begin{pmatrix} t_i \\ \text{Ca}_i \\ \text{Cr}_i \\ \text{Cs}_i \\ \text{tem}_i \end{pmatrix} &:= \begin{pmatrix} t_{i-1} + \Delta t \\ \text{Ca}_{i-1} + F_{\text{Ca}}(\text{Ca}_{i-1}, \text{tem}_{i-1}) \cdot \Delta t \\ \text{Cr}_{i-1} + F_{\text{Cr}}(\text{Ca}_{i-1}, \text{Cr}_{i-1}, \text{tem}_{i-1}) \cdot \Delta t \\ \text{Cs}_{i-1} + F_{\text{Cs}}(\text{Cr}_{i-1}, \text{tem}_{i-1}) \cdot \Delta t \\ \text{tem}_{i-1} + F_{\text{tem}}(\text{Cr}_{i-1}, \text{tem}_{i-1}) \cdot \Delta t \end{pmatrix} \\
 \Delta_i &:= |F_{\text{Ca}}(\text{Ca}_i, \text{tem}_i)|
 \end{aligned}$$

	0
0	0
1	0.066
2	0.065
3	0.065
4	0.065

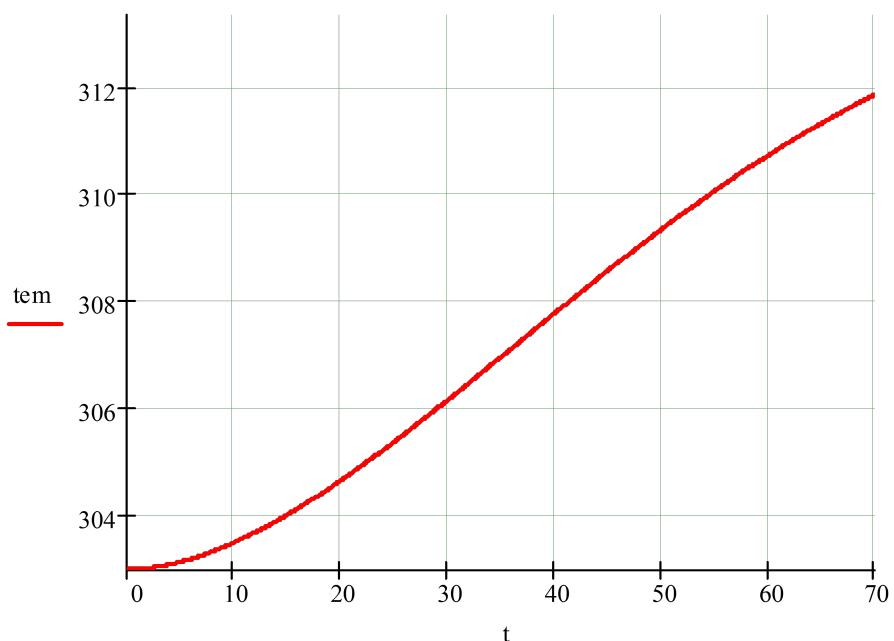
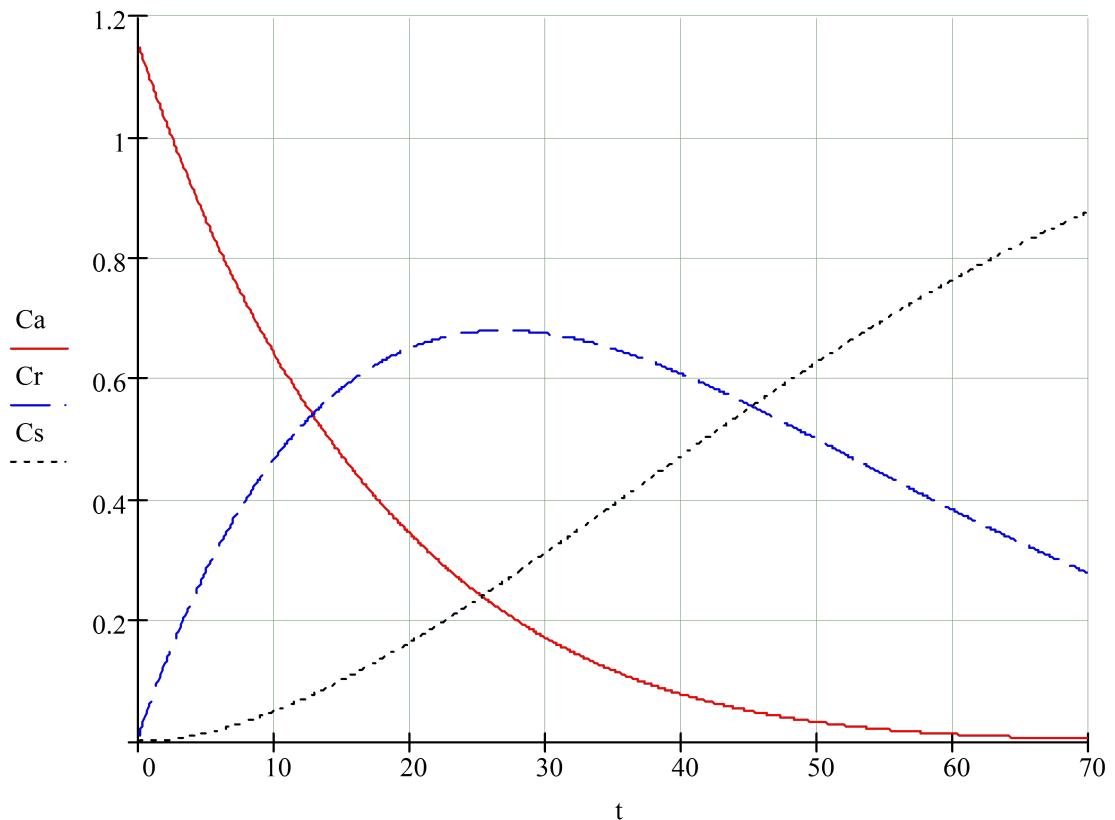
	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4

	0
0	1.15
1	1.143
2	1.137
3	1.13
4	1.124

	0
0	0.01
1	0.017
2	0.023
3	0.03
4	0.036

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

	0
0	303
1	303
2	303
3	303.001
4	303.001



Моделювання РІЗ-П (політропічний режим)

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

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

$$\Delta_i := |FCa(Ca_i, tem_i)|$$

	0
0	0
1	0.066
2	0.065
3	0.065
4	0.065

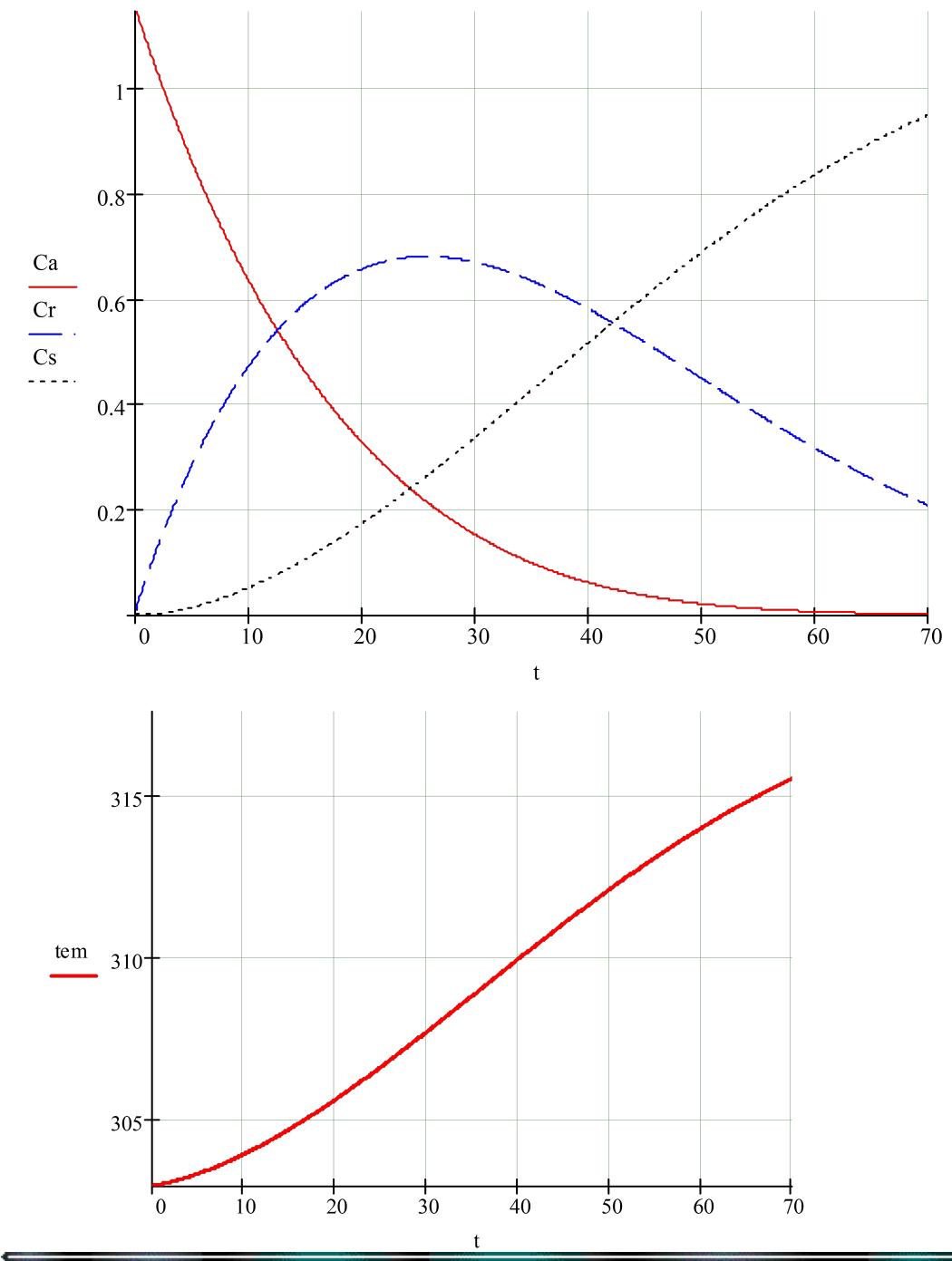
	0
0	1.15
1	1.143
2	1.137
3	1.13
4	1.124

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

	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4

	0
0	0.01
1	0.017
2	0.023
3	0.03
4	0.036

	0
0	303
1	303.005
2	303.01
3	303.015
4	303.02



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

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

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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 6

Що таке математичне моделювання?

Яким чином будується математична модель хімічного реактора?

Дайте визначення кінетичній моделі хімічного процесу?

Сформулюйте правила побудови кінетичної моделі хімічного процесу?

Яким чином при моделюванні хімічного реактора враховується вплив температури процесу?

Як класифікують хімічні реактори за температурним режимом?

Як класифікують хімічні реактори за гідродинамічним режимом?

7 РОЗРОБКА ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ МОДУЛІВ РЕАКТОРІВ

ДЛЯ АВТОМАТИЗОВАНОГО РОЗРАХУНКУ ТА

ПРОЕКТУВАННЯ СХТС

Лабораторна робота № 7

(6 годин)

ТЕМА: математичне моделювання хімічних процесів в системах автоматизованого проектування.

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

7.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

7.1.1 Моделювання проточного реактора ідеального змішування

Опис математичної моделі проточного реактора ідеального змішування детально був описаний в розділі 6.1.1. Для побудови даної математичної моделі використовуються залежності (6.1)-(6.9).

Згідно із заданим викладачем механізмом реакції потрібно скласти статичну математичну модель ізотермічного РІЗ у статиці й підготувати матриці коефіцієнтів K для п'яти значень часу перебування $= 1, 2, 3, 4, 5$. За допомогою ЕОМ одержати обернені матриці. Після розрахункових робіт накреслити залежність концентрації кожного компоненту від часу перебування речовин у потоці.

7.1.2 Математичний опис і розрахунок ізотермічного трубчатого реактора ідеального витіснення

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

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

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -U \frac{\partial C_i}{\partial l} + W r_i \quad (7.1)$$

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

$$-U \frac{\partial C_i}{\partial l} + W r_i = 0, \quad (7.2)$$

$$C_i(0) = C_{ex_i}$$

де U - середня лінійна швидкість потоку в PIB;

l - координата довжини реактора.

Враховуючи, що $U = dt/dl$, систему (6.9) запишемо так:

$$\frac{dC_i}{d\tau} = W r_i, \quad (7.3)$$

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

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

В цьому випадку математична модель РІВ буде мати вигляд системи звичайних диференційних рівнянь (6.4) з відповідними граничними умовами:

$$x = 1 \text{ кмоль/}m^3; x = C_{S_{\text{вх}}} = C_{P_{\text{вх}}} = 0 .$$

Система диференційних рівнянь (6.4) описує зміну концентрацій реагуючих речовин від часу перебування в РІВ (або по його довжині).

Для розв'язання системи (6.4) можна скористатися яким-небудь із відомих чисельних методів, наприклад, методом Ейлера.

Результати рішення моделі РІВ на ЕОМ потрібно накреслити як графічну залежність $= f(\tau)$ (див. рис. 7.1)

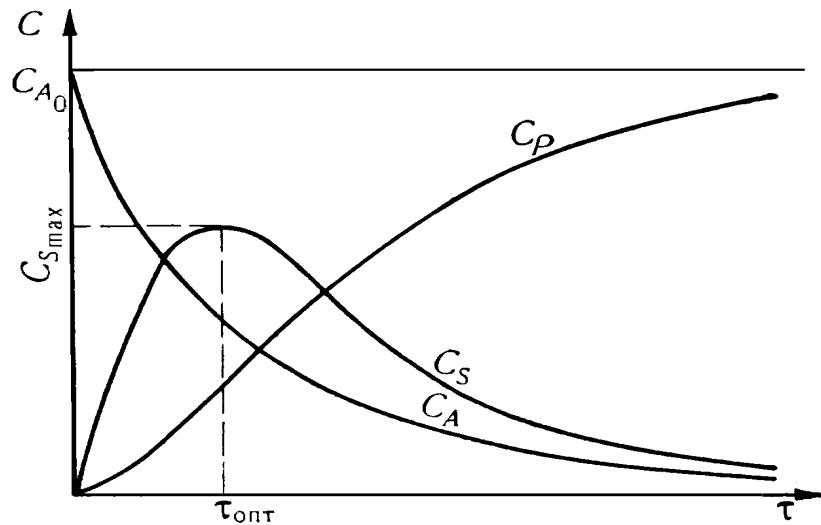


Рис. 7.1 - Графічна залежність $= f(\tau)$ (для реакції типу $\overset{k_2}{\leftarrow} S \rightarrow P$)

7.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

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

Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.

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

Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.

Отримати результати та їх проаналізувати.

Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.

Перейти до оформлення звіту.

7.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Моделювання проточного реактору ідеального змішування

Початкова концентрація компонентів, кмоль/м³ та константи швидкості хімічної реакції, год⁻¹

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

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

Час перебування: $i := 0..5$

Матриці коефіцієнтів:

$$K(\tau) := \begin{bmatrix} 1 + k_0 \cdot \tau & 0 & 0 & 0 \\ -k_0 \cdot \tau & 1 + (k_1 + k_3) \cdot \tau & -k_2 \cdot \tau & 0 \\ 0 & -k_1 \cdot \tau & 1 + k_2 \cdot \tau & 0 \\ 0 & -k_3 \cdot \tau & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\tau := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix}$$

Розв'язання системи матричним методом при різних термінах перебування

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

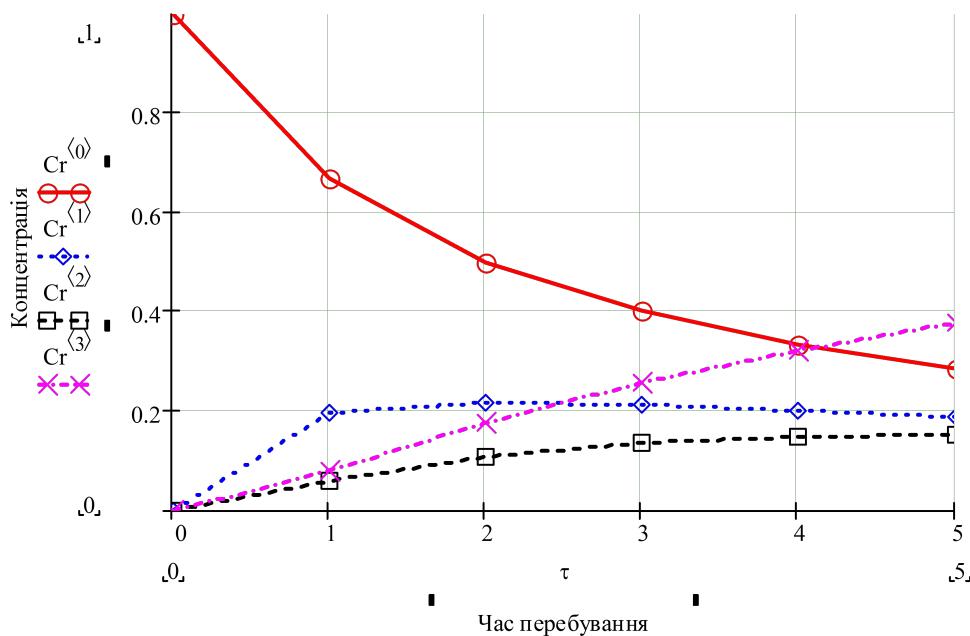
Поточні концентрації знайдені:

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

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

$$Cr := C^T$$

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



Моделювання ізотермічного трубчатого реактору ідеального витіснення

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

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

$$D(t, C_{inp}) := \begin{bmatrix} -k_0 \cdot C_{inp_0} \\ k_0 \cdot C_{inp_0} - (k_1 + k_3) \cdot C_{inp_1} + k_2 \cdot C_{inp_2} \\ k_1 \cdot C_{inp_1} - k_2 \cdot C_{inp_2} \\ k_3 \cdot C_{inp_1} \end{bmatrix}$$

За допомогою вбудованої функції для вирішення системи звичайних

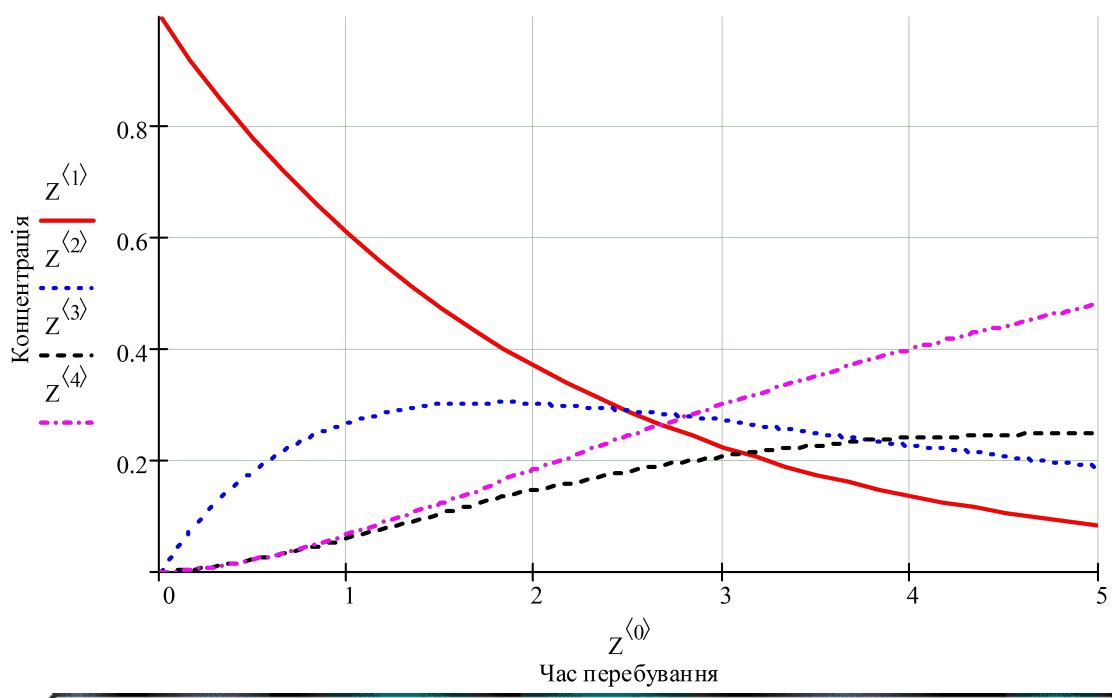
диференційних рівнянь знайдемо розподіл концентрацій компонентів в часі:

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

Тоді з першого по четвертий стовпчик матриці-розв'язку міститиметься концентрація компонентів A, B, S та P відповідно:

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

Графічна інтерпретація розв'язку матиме вигляд:



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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ № 7

З яких складових частин складаються автоматизовані програми моделювання ХТС?

Основні вимоги до оформлення моделей елементів ХТС?

Чому модуль реактора дуже складно стандартизувати?

Який вигляд мають математичні моделі реакторів ідеального змішування й ідеального витіснення в загальному випадку для статичного режиму?

Які обчислювальні методи використовуються для розв'язання рівнянь математичного опису реакторів?

Який вигляд мають результати розв'язку моделей реакторів змішування та витіснення.

8 ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЖИМУ РОБОТИ РЕАКТОРА

Лабораторна робота № 8

(2 години)

ТЕМА: використання математичних методів для визначення оптимальних технологічних параметрів хімічного процесу у реакторі.

МЕТА: набуття навичок розв'язання оптимізаційних задач для об'єктів хімічної технології, що мають цільову функцію, яка залежить від однієї змінної.

8.1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

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

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

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

Задача оптимізації, в якій критерій оптимальності є функцією однієї змінної (наприклад, вихід цільового компоненту в ізотермічному реакторі

ідеального змішування є функцією часу перебування в апараті), належить до найбільш простого типу оптимізаційних задач.

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

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

8.1.1 Метод сканування

Інтервал a , на якому потрібно знайти мінімум $f(x)$, поділяється на рівних відрізків довжини: $h = b - a/n$. Точками розподілу будуть : $x_0 = a$, $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h$, ..., $x_n = x_0 + n \cdot h = b$. Послідовно обчислюються значення цільової функції $f(x)$ у цих точках, а найменше значення запам'ятується. Екстремум може бути знайденим із точністю до кроку пошуку h . Обчислення продовжується до тих пір, поки не буде розглянуто весь інтервал a [1].

Переваги методу: простота алгоритму та можливість пошуку глобального екстремуму. До недоліків методу слід віднести великий обсяг обчислень. Блок-схема алгоритму мінімізації функції $f(x)$ на відрізку a , b наведена у Додатку 1.

8.1.2 Методи виключення інтервалів

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

Досліджувана функція $\textcolor{blue}{f}$ на розглянутому інтервалі $\textcolor{brown}{b}$ повина бути унімодальною. Функція $\textcolor{blue}{f}$ являється унімодальною на відрізку $\textcolor{brown}{b}$ тільки в тому випадку, якщо вона монотонна по обидва боки від єдиної на цьому інтервалі точки оптимуму $\textcolor{brown}{x}_0$, тобто коли для точок x_1 та x_2 із цього інтервалу $\textcolor{brown}{x}_1 \leq x_2$ випливає, що $\textcolor{brown}{f}(x_0) \leq f(x_1) \leq f(x_2)$ та $x_1 \geq x_2$ випливає, що $\textcolor{brown}{f}(x_0) \geq f(x_1) \geq f(x_2)$ [1].

Унімодальна функція не обов'язково повинна бути неперервною. Для унімодальної функції $\textcolor{blue}{f}$ порівняння значень $\textcolor{brown}{f}$ у двох різних точках інтервалу пошуку дозволяє визначити, в якому із заданих двома вказанними точками підінтервалів точка оптимуму відсутня.

Методи виключення інтервалів можна використовувати для аналізу як неперервних, так і дискретних функцій, а також у випадках, коли змінні приймають значення із дискретної множини. Єдиною вимогою є можливість визначення значень функції $\textcolor{blue}{f}$ в заданих точках за допомогою прямих розрахунків або імітаційних експерементів.

Ефективність цих методів пов'язана з тим, що це методи спрямованого пошуку.

У багатьох задачах умова унімодальності не виконується, або не може бути легко перевірена. Тоді можна вихідний інтервал визначеності (особливо якщо він великий) поділити на маленькі інтервали, знайти $f(x)$ на кожному з підінтервалів, а потім вибрати з них найменший.

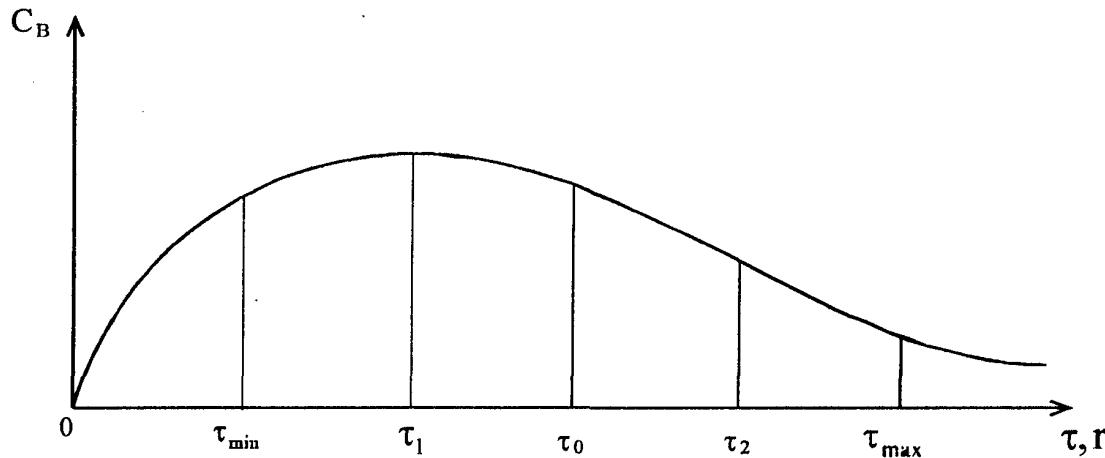
8.1.3 Метод половинного ділення інтервалів (метод дихотомії)

Цей метод дозволяє виключити в точності половину інтервалу на кожній ітерації [2].

Для прикладу розглянемо проточний реактор із мішалкою, режим якого з достатнім наближенням відповідає умовам ідеального змішування. В реакторі протікає складна реакція. Необхідно визначити максимально можливу концентрацію напівпродукту , який є цільовим компонентом, і відповідний час перебування потоку в апараті t . При такій постановці задачі критерієм оптимальності є концентрація речовини , а змінною - час перебування .

Для визначення t , зручно у даному випадку використати метод половинного ділення (дихотомії), який дозволяє зробити мінімальну кількість розрахунків згідно з моделлю для знаходження t і t_{\max} .

Розглянемо алгоритм цього методу, припускаючи, що функція (t) , яка оптимізується, має один максимум (див. рис. 8.1)



Ruc.8.1 - Графік функції (t)

Алгоритм методу дихотомії.

Розбиваємо інтервал $(\tau_{\min}, \tau_{\max})$ на два рівних підінтервала (точка),

кожний з яких ділимо на дві рівних частини (т.т. τ_2):

$$\tau_1 = \frac{\tau_{\min} + \tau_{\max}}{2}; \quad \tau_0 = \frac{\tau_{\min} + \tau_1}{2}; \quad \tau_2 = \frac{\tau_1 + \tau_{\max}}{2}$$

Розраховуємо значення критерію оптимальності (τ) на межах усіх підінтервалів, включаючи кінцеві точки $[n, \tau_{max}]$:
 $(\tau_1), (\tau_2), (\tau_{max})$.

Серед отриманих значень знаходимо найбільше, тобто те, яке відповідає типу екстремума (максимума), котрий потрібно знайти. Виходячи з певних уявлень (рис. 8.1) найбільше значення критерію спостерігається у точці .

Вибираємо новий інтервал, який вміщує два підінтервали з найбільшим розрахованим значенням на їх загальній межі. У даному випадку таким інтервалом є $\tau_{min}, \tau_0]$.

Повторюємо процедуру розрахунків для нового інтервалу, починаючи з п.1 доки різниця між значеннями в сусідніх точках не стане меншою за задану точність визначення екстремуму - .

Послідовність дій для знаходження мінімуму цим методом зображена на блок-схемі (*Додаток 2*).

8.1.4 Завдання програмних модулів в середовищі Mathcad

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

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

Mathcad починаючи з 8.0/2000. Засоби програмування зосереджені в палітрі програмних елементів, показаної на рис. 8.2.

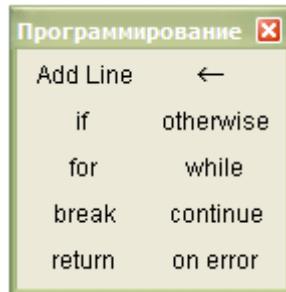


Рис.8.2 - Елементи для створення програмних модулів

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

ПРОГРАМНІ БЛОКИ

$x := 25$ Задане значення x

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

$$\begin{cases} x \leftarrow 12 \\ \sqrt{x} \end{cases}$$
 Локально задане $x=12$ і обчислений квадратний корінь з $x=12$

$x = 25$ За межами програмного блоку x зберегло значення 25

Приклад завдання функції звичним способом:

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

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

Програмним блоком:

$$FP(x, y, z) := \begin{cases} a \leftarrow x + y \cdot z \\ \frac{x + y + z}{a} \end{cases}$$

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

Неважко помітити (див. палітру програмних елементів на рис. 8.2), що набір інструкцій для створення програмних модулів досить обмежений і містить наступні елементи наведені на рис. 8.3.

Rис. 8.3 - Набір інструкцій для створення програмних модулів

Інструкція додавання ліній у модуль Add Line

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

Оператор внутрішнього присвоювання

Оператор \leftarrow виконує функції внутрішнього (локального) присвоювання. Наприклад, вираження $\text{--}123$ привласнює змінної значення 123. Локальний характер присвоювання означає, що таке значення змінної зберігається тільки в тілі програмного модуля. За

межами тіла програми значення змінної може бути невизначенім або рівним значенню, що задається поза програмним блоком операторами локального $=$ або глобального \equiv присвоювання.

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

Умовна інструкція if

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

Вираження if Умова Якщо Умова виконується, то повертається значення Вираження, інакше - 0. Разом із цією інструкцією часто використаються інструкції переривання break й іншого вибору otherwise.

Інструкція організації циклу for

Інструкція for служить для організації циклів із заданим числом повторень. Вона записується у вигляді:

for Var \in Nmin .. Nmax Цей запис означає, що вираження, поміщене в розташоване нижче місце уведення, буде виконуватися для значень змінної Var, що міняються від Nmin до Nmax із кроком +1. Змінну лічильника Var можна використати у виразі, що виконується.

Інструкція організації циклу while

Інструкція while служить для організації циклів, що діють доти, поки виконується деяка умова. Вона записується у вигляді:

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

Інструкція otherwise

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

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

всіх інших випадках.

Інструкція переривання `break`

Інструкція `break` викликає переривання виконання програми.

Найчастіше ця інструкція використається разом з умовною інструкцією `if` і інструкціями циклів `while` та `for`, забезпечуючи перехід у кінець тіла циклу.

Інструкція `continue`

Інструкція `continue` використається для продовження роботи після переривання програми. Вона також найчастіше використається разом з інструкціями циклів `while` та `for`, забезпечуючи повернення в точку переривання й продовження обчислень.

Інструкція `return`

Особлива інструкція `return` перериває виконання програми та повертає значення операнда, що розташований слідом за нею. Наприклад, у наведеному нижче випадку буде повертатися значення 0 при `x < 0`.

`return 0 if x < 0` **Інструкція `on error` і функція `error`**

Інструкція `on error` дозволяє створювати процедури обробки помилок. Ця інструкція задається у вигляді:

`Вираження_1 on error Вираження_2` Якщо при виконанні

Вираження_1 виникає помилка, то виконується Вираження_2. Для обробки помилок корисна також функція `error (S)`, що, будучи поміщененої в програмний модуль, при виникненні помилки виводить спливаючу підказку з повідомленням, що зберігається в символній змінній `S`.

8.1.5 Найпростіші приклади створення програмних модулів

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

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

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

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

краще цього не робити й призначати різні імена для локальних змінних програмних модулів і змінних документа.

ЗАСТОСУВАННЯ ПРОГРАМНИХ БЛОКІВ

Застосування умовного оператора if в програмному блоці:

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

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

Застосування оператора циклу for для обчислення суми та добутку

послідовності цілих чисел від 1 до n:

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

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

$$\text{prod}(n) := \begin{cases} p \leftarrow 1 \\ \text{for } i \in 1..n \\ \quad p \leftarrow p \cdot i \\ p \end{cases}$$

$$\text{prod}(3) = 6 \quad \text{prod}(10) = 3.629 \times 10^6$$

Застосування операторів while та break для обчислення факторіалу:

$$\text{Fact}(n) := \begin{cases} f \leftarrow 1 \\ \text{while } n \leftarrow n - 1 \\ \quad f \leftarrow f \cdot (n + 1) \\ f \end{cases}$$

$$\text{Fact}(3) = 6 \quad \text{Fact}(10) = 3.629 \times 10^6$$

$$F(n) := \begin{cases} f \leftarrow n \\ \text{while } 1 \\ \quad \begin{cases} f \leftarrow f \cdot (n - 1) \\ n \leftarrow n - 1 \\ \text{break if } n = 1 \end{cases} \\ f \end{cases}$$

$$F(3) = 6 \quad F(10) = 3.629 \times 10^6$$

8.1.6 Обробка помилок у програмних модулях

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

У цих прикладах треба звернути увагу на два моменти. Перший - можливість застосування інструкції `on error` поза програмним блоком для завдання функції $\text{c} := \sin(x)/x$ з довизначенням її при $x = 0$: $y(0) = 1$. Другий - застосування цієї інструкції для рішення рівняння, що має комплексних корінь. Коли при такому рішенні задається початкове значення x (дійсне число), то функція $\text{t}(f, x)$ викликає помилку. Вона виправляється за допомогою інструкції `on error` при завданні функції (f, x) , що має процедуру обробки помилок.

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

ЗАСТОСУВАННЯ СИСТЕМНИХ ДИРЕКТИВ `return` ТА `on error`

```
F(i) := | return "One"  if i = 1  
           | return "Two"   if i = 2  
           | error("Çíà÷åííÿ íåàò!!!!") otherwise  
F(1) = "One"  
F(2) = "Two"
```

F(3) = []

Значення немає!!!

```
S(x) := | return 1  if x = 0  
           | sin(x) / x  otherwise  
S(0) = 1          S(1) = 0.841          S(-1) = 0.841
```

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

$$y(0) = 1 \quad y(1) = 0.841$$

$$y(x) := 1 \text{ on error } y1(x)$$

$$y(-1) = 0.841$$

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

$$x := -1$$

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

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

Помилка!

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

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

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

Помилки немає

8.1.7 Модуль побудови точок у просторі

Нижче показаний фрагмент документа Mathcad із прикладом застосування програмного модуля для зображення в тривимірному просторі точок з координатами (x, y) , де $f(x, y)$ - деяка функція. Точки зображені на тлі паралелепіпеда, усередині якого вони перебувають.

Цей приклад ілюструє можливість застосування усередині програмного модуля графічних функцій - у цьому випадку функції mesh.

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

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

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

```

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

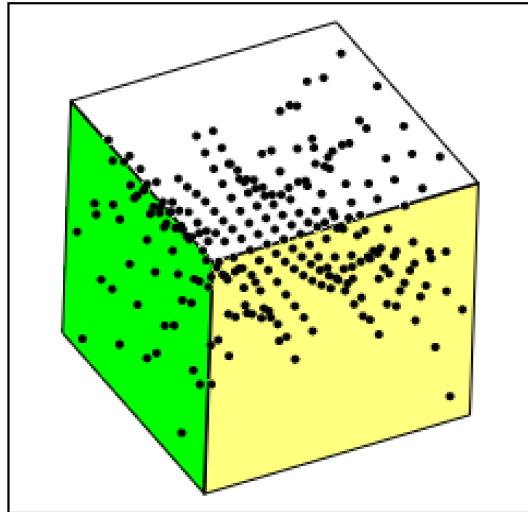
```

$XYZ := S(mesh, xr, yr)$

$X := XYZ^{⟨0⟩}$

$Y := XYZ^{⟨1⟩}$

$Z := XYZ^{⟨2⟩}$



(X, Y, Z)

8.1.8 Побудова фрактала «кукурудза»

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

ПОБУДОВА ФРАКТАЛУ - "КУКУРУДЗА"

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

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

$$\frac{dx}{dt} = -f(y)$$

$$\frac{dy}{dt} = -f(x)$$

$$f(z) := \sin(z + \tan(3 \cdot z))$$

popcorn (N, h, a) :=

```

t ← -1
d ← 2 · a
for j ∈ 0.. N
    for k ∈ 0.. N
        t ← t + 1
        x_t ← d · j - a
        y_t ← d · k - a
        for n ∈ 0.. N
            xx ← x_t - h · f(y_t)
            yy ← y_t - h · f(x_t)
            t ← t + 1
            x_t ← xx
            y_t ← yy
            z_t ← x_t + y_t · i

```

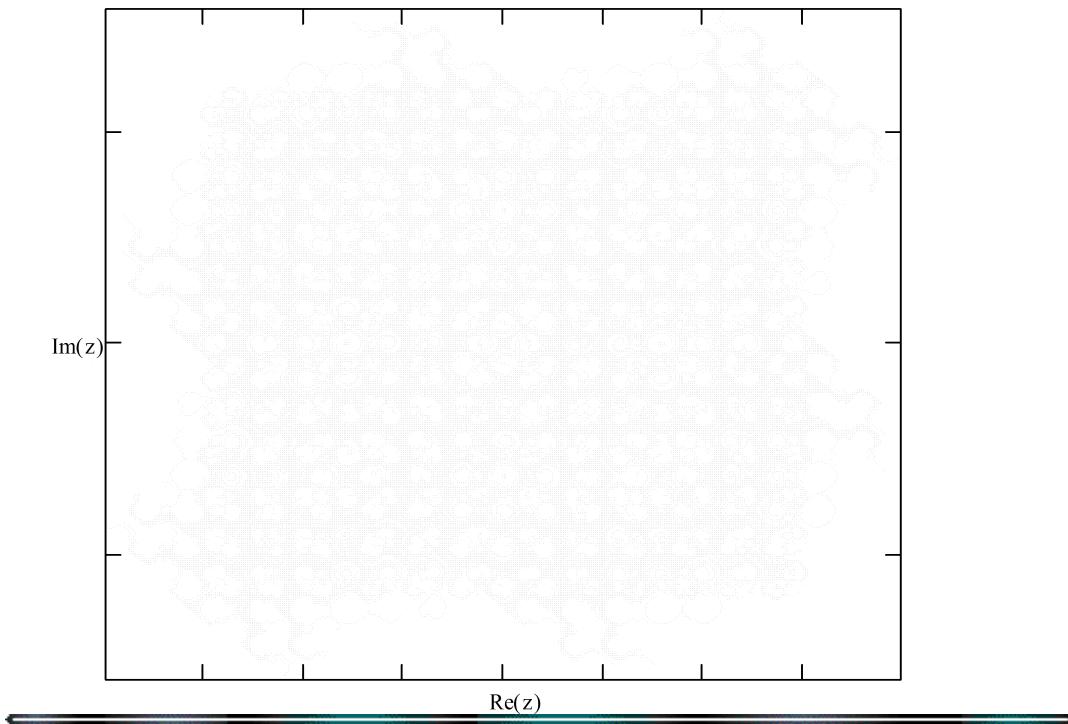
z

$$N := 50$$

$$h := 0.05$$

$$a := 6$$

z := popcorn (N, h, a)



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

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

8.1.9 Заключні зауваження по програмуванню

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

Взагалі треба відзначити, що проблема включення в документи Mathcad програмних блоків вирішенні добірно й красиво - такі блоки часом просто прикрашають документи й дають можливість користуватися всіма

способами не тільки математично орієнтованої вхідної мови Mathcad, але й класичного програмування.

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

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

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

8.2 ХІД ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Ознайомитися із темою і метою роботи. Вивчити основні теоретичні

положення.

Отримати індивідуальне завдання і вказівки від викладача.

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

Розробити алгоритм рішення задачі відповідно до вимог програмного середовища Mathcad.

Отримати результати та проаналізувати їх.

Представити результати роботи на комп'ютері викладачу.

Перейти до оформлення звіту.

8.3 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТИВ

Тексти програм мають бути такими, як наведено нижче.

Завдання роботи.

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

$$C0 := 5 \quad k1 := 5.7 \cdot 10^{-3} \quad k2 := 3.2 \cdot 10^{-3}$$

$$F(x) := \frac{k1 \cdot C0 \cdot x}{(1 + k1 \cdot x) \cdot (1 + k2 \cdot x)}$$

$$a := 0 \quad b := 180 \quad \varepsilon := 0.01$$

1. Максимізація функції методом сканування:

Задайтесь будь ласка кроком: $h := 0.1$

```

T1(a,b,E,h) := | x1 ← a
                  |
                  | F1 ← F(x1)
                  |
                  | x ← a
                  |
for i ∈ 1 ..  $\frac{(b - a)}{h}$ 
                  |
                  | x ← x + h
                  |
                  | F2 ← F(x)
                  |
                  | if F2 > F1
                  |
                  |   | F1 ← F2
                  |   |
                  |   | x1 ← x
                  |
                  |   [ x1
                  |   |
                  |   | F1
                  |   |
                  |   |  $\frac{(b - a)}{h}$ 
                  |   ]

```

$\text{Arg}_1 := \text{T1}(a, b, E, h)_0$

Func1 := T1(a,b,E,h)1

$$\text{Iter}_1 := \frac{(b - a)}{h}$$

Максимум заданної Вами функції на заданому Вами інтервалі знаходиться в

точні аргументу:

$$\text{Arg}_1 = 1.634$$

Значення максимуму функції:

$$\text{Func}_1 = 234.1$$

Знайдено за наступну кількість ітерацій:

$$\text{Iter}_1 = 1.8 \times 10^4$$

2. Максимізація функції методом діхотомії

```

T2(a,b, $\varepsilon$ ) := | Len ← b - a
                  |  $x_0 \leftarrow \frac{(a + b)}{2}$ 
                  | F0 ← F( $x_0$ )
                  | k ← 1
                  | while Len ≥  $\varepsilon$ 
                  |   |  $x_1 \leftarrow a + \frac{Len}{4}$ 
                  |   |  $x_2 \leftarrow b - \frac{Len}{4}$ 
                  |   | F1 ← F( $x_1$ )
                  |   | F2 ← F( $x_2$ )
                  |   | k ← k + 2
                  |   | if F1 = F2
                  |   |   | a ←  $x_1$ 
                  |   |   | b ←  $x_2$ 
                  |   | otherwise
                  |   |   | if F1 > F0
                  |   |   |   | b ←  $x_0$ 
                  |   |   |   |  $x_0 \leftarrow x_1$ 
                  |   |   |   | F0 ← F1
                  |   |   | otherwise
                  |   |   |   | a ←  $x_0$ 
                  |   |   |   |  $x_0 \leftarrow x_2$ 
                  |   |   |   | F0 ← F2
                  |   | Len ← b - a
                  |   | q ← 1
                  |   |  $\begin{pmatrix} x_0 \\ F0 \\ k \end{pmatrix}$ 

```

$$\text{Arg}_2 := T2(a, b, \varepsilon)_0 \quad \text{Func}_2 := T2(a, b, \varepsilon)_1 \quad \text{Iter}_2 := T2(a, b, \varepsilon)_2$$

Максимум заданої Вами функції на заданому Вами інтервалі знаходиться в

точці аргументу: $\text{Arg}_2 = 1.634$

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

Знайдено за наступну кількість ітерацій: $\text{Iter}_2 = 37$

3. Максимізація функції методом «Золотого перетину»

$$T3(a, b, \varepsilon) := \left| \begin{array}{l} k \leftarrow \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \\ L \leftarrow b - a \end{array} \right.$$

$x_1 \leftarrow b - L \cdot k$

$x_2 \leftarrow a + L \cdot k$

$s \leftarrow 2$

while $L > \varepsilon$

$F_1 \leftarrow F(x_1)$

$F_2 \leftarrow F(x_2)$

if $F_1 = F_2$

$a \leftarrow x_1$

$b \leftarrow x_2$

$L \leftarrow b - a$

break if $L \leq \varepsilon$

otherwise

$x_1 \leftarrow b - L \cdot k$

$x_2 \leftarrow a + L \cdot k$

$s \leftarrow s + 2$

otherwise

if $F_1 > F_2$

$b \leftarrow x_2$

$L \leftarrow b - a$

break if $L \leq \varepsilon$

otherwise

$x_2 \leftarrow x_1$

$x_1 \leftarrow b - L \cdot k$

$s \leftarrow s + 1$

otherwise

$a \leftarrow x_1$

$L \leftarrow b - a$

break if $L \leq \varepsilon$

otherwise

$x_1 \leftarrow x_2$

$x_2 \leftarrow a + L \cdot k$

$s \leftarrow s + 1$

$$\left(\begin{array}{c} \frac{a+b}{2} \\ F\left(\frac{a+b}{2}\right) \end{array} \right)$$

$$\left(\begin{array}{c} \frac{a+b}{2} \\ s \end{array} \right)$$

$$\text{Arg}_3 := \text{B}(a, b, E)_0$$

$$\text{Func}_3 := \text{B}(a, b, E)_1$$

$$\text{Iter}_3 := \text{T3}(a, b, \varepsilon)_2$$

Максимум заданої Вами функції на заданому Вами інтервалі знаходиться в

точці аргументу:

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

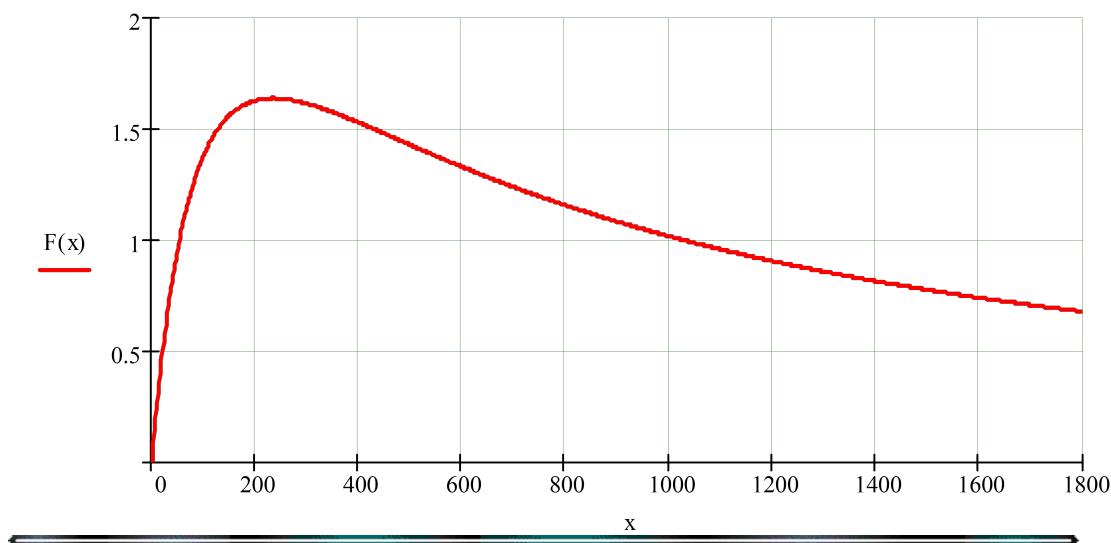
Значення максимуму функції:

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

Знайдено за наступну кількість ітерацій:

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

Графік функції $F(x)$:



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

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДО РОБОТИ №8

Коли використовуються методи детермінованного одновимірного пошуку?

Яка функція називається унімодальною?

У чому полягає ідея методу сканування?

Дайте характеристику методам виключення інтервалів?

Наведіть приклад використання методу половинного ділення. У чому переваги цього метода?

ЛІТЕРАТУРА

Бондарь А.Г. Математическое моделирование в химической

технологии.-К.: Вища школа, 1973.- 280 с.

Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных

*процессов химических производств.- М.: Высшая школа, 1991.- 400
с.*

Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии.-

М.: Химия, 1985.- 448 с.

Кудрявцев Е.М. Mahtcad 8 - М.: ДМК, 2000.- 320 с.

Левештиль О. Инженерное оформление химических процессов. - М.:

Химия, 1969. - 621с.

ДОДАТКИ

Додаток 1

Блок-схема алгоритму мінімізації функції $f(x)$ методом сканування

Додаток 2

Блок-схема алгоритму мінімізації функції $f(x)$ методом дихотомії