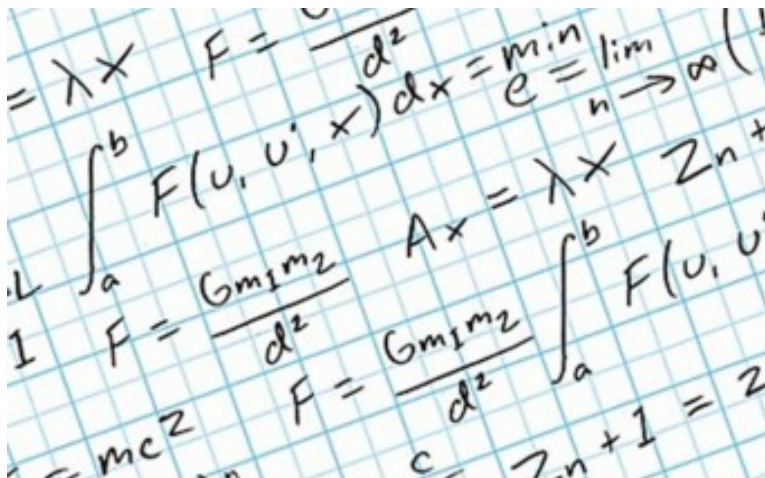


Д. С. ДВОРЕЦКИЙ, С. И. ДВОРЕЦКИЙ,  
Е. В. ПЕШКОВА, М. С. ТЕМНОВ

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКИХ, ПИЩЕВЫХ И БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ



Тамбов

◆ Издательство ФГБОУ ВПО «ТГТУ» ◆  
2014

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Тамбовский государственный технический университет»

**Д. С. ДВОРЕЦКИЙ, С. И. ДВОРЕЦКИЙ,  
Е. В. ПЕШКОВА, М. С. ТЕМНОВ**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ  
ХИМИЧЕСКИХ, ПИЩЕВЫХ И  
БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ  
ПРОИЗВОДСТВ**

Утверждено Учёным советом университета  
в качестве учебного пособия для студентов, обучающихся  
по направлениям: 260100 – Продукты питания из растительного сырья и  
240700 – Биотехнология



---

Тамбов  
Издательство ФГБОУ ВПО «ТГТУ»  
2014

УДК 3966-01я73-1  
ББК 51.001.57  
Д243

Рецензенты:

Доктор технических наук, профессор ФГБОУ ВПО «ТГТУ»  
*Е. Н. Туголуков*

Доктор технических наук, профессор,  
зам. директора по научной работе ГНУ ВНИИТиН Россельхозакадемии  
*С. А. Нагорнов*

Д243

**Математическое** моделирование процессов и аппаратов химических и пищевых производств : учебное пособие / Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий, Е. В. Пешкова, М. С. Темнов. – Тамбов : Изд-во ФГБОУ ВПО «ТГТУ», 2014. – 80 с.  
ISBN 978-5-8265-1283-8

Учебное пособие посвящено математическому моделированию технологических процессов и оборудования в био-, химической и пищевой технологиях. Рассмотрены общие подходы и методология компьютерного моделирования, дана классификация моделей и методов их построения, приведены примеры вывода уравнений математических моделей конкретных процессов и аппаратов био-, химической и пищевой технологий. Особое внимание уделено аналитическому методу построения моделей и методологии имитационного моделирования.

Предназначено для студентов, обучающихся по направлениям: 260100 – Продукты питания из растительного сырья и 240700 – Биотехнология.

УДК 3966-01я73-1  
ББК 51.001.57

**ISBN 978-5-8265-1283-8**

© Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Тамбовский государственный технический университет» (ФГБОУ ВПО «ТГТУ»), 2014

## ВВЕДЕНИЕ

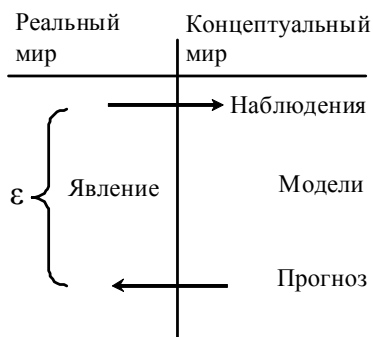
В настоящее время компьютерное моделирование стало составной частью общих подходов, характерных для современных информационных технологий. Принципиально важно то, что компьютерное моделирование позволило объединить формальное и неформальное мышление и естественным образом сочетать способность ЭВМ во много раз быстрее, точнее и лучше человека делать формальные арифметические операции, отслеживать логические цепочки с удивительными свойствами человеческого интеллекта – интуицией, способностью к ассоциациям и т.д. [1]. Не менее важно и то, что современные средства интерфейса дают возможность вести с ЭВМ диалог – анализировать альтернативы, проверять гипотезы, экспериментировать с математическими моделями.

Практическая реализация возможностей компьютерного моделирования существенно повышает эффективность инженерных разработок особенно при создании принципиально новых, не имеющих прототипов технологических машин и приборов, материалов и технологий, что позволяет сократить затраты времени и средств на использование в технике и технологиях передовых достижений физики, химии, механики и других фундаментальных наук. Отмеченные возможности компьютерного моделирования ещё далеко не исчерпаны, представляются достаточно перспективными и поэтому заслуживают детального рассмотрения.

### 1. ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О МОДЕЛЯХ И КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

*Компьютерное моделирование* – один из самых мощных инструментов познания, анализа и проектирования, которым располагают специалисты, ответственные за разработку и функционирование сложных химических, биотехнологических и пищевых производств. Идея компьютерного моделирования даёт возможность инженеру (исследователю) экспериментировать с объектами в тех случаях, когда делать это на реальном объекте практически невозможно или нецелесообразно. Сущность методологии компьютерного моделирования состоит в замене исходного технологического объекта его «образом» – математической моделью – и в дальнейшем изучении объекта с помощью реализуемых на компьютерах вычислительно-логических алгоритмов.

В жизни мы условно разделяем окружающий нас мир на реальный и концептуальный [11] (рис. 1). В реальном мире мы можем наблюдать различные явления, естественные по своей природе и созданные искусственно. Концептуальный мир – виртуальный мир, где



**Рис. 1. Иллюстрация процесса моделирования**

мы находимся, когда пытаемся понять, что происходит в реальном, окружающем нас мире. Оценка концептуального мира проходит через три стадии: *наблюдение, моделирование и прогноз*. На стадии наблюдения мы стараемся измерить те явления, которые происходят в реальном мире. Здесь мы собираем эмпирические данные и факты. Наблюдения могут быть прямыми, когда мы используем наши ощущения, или косвенными, в этом случае мы пользуемся описанием явления, сделанным другими людьми,

которые наблюдали рассматриваемое явление. Далее осуществляется построение какой-либо модели, по ней делается прогноз. Результаты прогноза сравниваются с данными, полученными на реальном объекте моделирования. В случае если расхождение между ними приемлемое для данной задачи, модель считается адекватной.

Этот метод познания, конструирования, проектирования сочетает в себе достоинства как теории, так и эксперимента. Работа не с самим объектом (явлением, процессом), а с его моделью даёт возможность относительно быстро и без существенных затрат исследовать свойства и поведение объекта в различных ситуациях (преимущества теории). В то же время вычислительные (имитационные) эксперименты с моделями объектов позволяют подробно и глубоко изучать объекты в достаточной полноте, не доступной чисто теоретическим подходам (преимущества эксперимента).

Современные промышленные объекты химической, био- и пищевой технологий состоят из большого количества взаимосвязанных подсистем, между которыми существуют отношения соподчинённости в виде 3-уровневой иерархической структуры. Первый уровень образуют типовые процессы химической, био- и пищевой технологий с определённым аппаратным оформлением (механические, гидродинамические, тепловые, диффузионные, био- и химические процессы) и локальные системы автоматического управления ими. Основу второго уровня иерархии составляют производственные цеха и системы автоматизированного управления цехами. Цех представляет собой совокупность отдельных технологических процессов, аппаратов и систем автоматического контроля и управления ими. Третий, высший уровень иерархической структуры предприятия химической, био- и пищевой технологий – это системы организации и оперативного планирования и управления всем производством.

На этом уровне возникают задачи ситуационного анализа и оптимального управления всем предприятием (совокупностью всех цехов).

Основу современного кибернетического подхода к решению задач химической, био- и пищевой технологий составляет системный анализ, в соответствии с которым задачи исследования, анализа и расчёта отдельных технологических процессов, компьютерного моделирования и оптимизации сложных химических, био- и пищевых систем, оптимального проектирования технологических комплексов решаются в тесной связи друг с другом, объединены общей стратегией и подчинены единой цели – созданию высокоэффективного производства [2].

Сущность системного анализа определяется его стратегией, в основе которой лежат общие принципы, применимые к решению любой системной задачи. К ним можно отнести чёткую формулировку цели исследования, постановку задачи по достижению заданной цели и определение критерия эффективности решения задачи; разработку развёрнутой стратегии исследования с указанием основных этапов и направлений в решении задачи: последовательно-параллельное продвижение по всему комплексу взаимосвязанных этапов и возможных направлений; организация последовательных приближений и повторных циклов исследований на отдельных этапах; принцип нисходящей иерархии анализа и восходящей иерархии синтеза при решении составных частных задач.

Центральным понятием системного анализа является понятие системы, т.е. объекта, взаимодействующего с внешней средой и обладающего сложным внутренним строением, большим числом составных частей и элементов. Элемент системы – самостоятельная и условно неделимая единица. Совокупность элементов и связей между ними образует структуру системы. Элементы взаимодействуют между собой и окружающей средой, иначе говоря, между ними существует материальная, энергетическая и информационная связь. Расчленение системы на подсистемы позволяет вскрыть иерархию структуры и рассматривать систему на разных уровнях её детализации. Сложность системы определяется сложностью её структуры, количеством элементов и связей, числом уровней иерархии, объёмом информации, циркулирующей в системе. Система характеризуется алгоритмом функционирования, направленным на достижение определённой цели.

Формализация системы осуществляется с помощью математической модели, отображающей связь между выходными переменными системы, параметрами состояния и входными управляющими и возмущающими воздействиями. Сложная система обычно формализуется как детерминированно-стохастическая модель. С позиций системного анализа решаются задачи компьютерного моделирования, оптимизации, управления и оптимального проектирования био-, химических и пищевых технологических систем в масштабе цеха, предприятия. Сущность системного подхода состоит в том, что вся информация, получаемая в лабораториях, на опытно-

промышленных установках, последовательно накапливается и обогащается в процессе разработки полной математической модели технологической системы, которая затем используется для оптимизации того или иного производства.

Компьютерное моделирование есть процесс конструирования модели реального объекта (системы) и постановки вычислительных экспериментов на этой модели с целью либо понять (исследовать) поведение этой системы, либо оценить различные стратегии (алгоритмы), обеспечивающие функционирование данной системы. Таким образом, процесс компьютерного моделирования включает и конструирование модели, и её применение для решения поставленной задачи: анализа, исследования, оптимизации или синтеза (проектирования) технологических процессов и оборудования. Все эти задачи чрезвычайно сложны и включают в себя почти бесконечное число элементов, переменных, параметров, ограничений и т.д. Чтобы построить точную модель, можно попытаться включить все эти элементы (явления) и потратить уйму времени, собирая мельчайшие факты, касающиеся любой ситуации, и устанавливая связи между ними. Сходство модели с объектом, который она отображает, называется степенью изоморфизма. Для того, чтобы быть изоморфной, модель должна удовлетворять двум условиям: 1) однозначное соответствие между элементами модели и элементами представляемого объекта; 2) точные соотношения или взаимодействия между элементами.

Степень изоморфизма модели относительна, и большинство моделей скорей гомоморфны, чем изоморфны. Под гомоморфизмом мы понимаем сходство по форме при различии основных структур, причём имеет место лишь поверхностное подобие между различными группами элементов модели и объекта. Гомоморфные модели являются результатом процессов упрощения и абстракции.

Основой успешной методики компьютерного моделирования является тщательная отработка моделей. Обычно, начав с простой модели, постепенно продвигаются к более совершенной её форме, отражающей сложную ситуацию точнее. Аналогии и ассоциации с хорошо построенными структурами играют важную роль в определении отправной точки процесса совершенствования и отработки деталей, который связан с учётом постоянного взаимодействия и обратной связи между реальной ситуацией и моделью. Между процессом модификации модели и процессом обработки данных, генерируемых реальным объектом, имеет место непрерывное взаимодействие. Таким образом, искусство моделирования состоит в способности анализировать проблему, выделить из неё путём абстракции её существенные черты, выбрать и должным образом модифицировать предположения, характеризующие систему, а затем отрабатывать и совершенствовать модель до тех пор, пока она не станет давать полезные для практики результаты.

Разработка и применение компьютерных моделей – ещё в большей степени искусство, нежели наука. Следовательно, как и в других видах искусства, успех или неудача определяется не столько методом, сколько тем, как он применяется. Искусством моделирования могут овладеть те, кто обладает оригинальным мышлением, изобретательностью и находчивостью, равно как и глубокими знаниями систем и физических явлений, которые необходимо моделировать.

## 2. МЕТОДОЛОГИЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Изучая сложные технологические объекты, процессы, аппараты и физико-химические явления, мы не можем учесть все факторы: какие-то оказываются существенными, а какими-то можно пренебречь. При этом формируется модель объекта исследования. В процессе компьютерного моделирования исследователь имеет дело с тремя объектами: системой (реальной, проектируемой, воображаемой), математической моделью и программой ЭВМ, реализующей алгоритм решения уравнений модели. Традиционная схема компьютерного моделирования как единого процесса построения и исследования модели, имеющего соответствующую программную поддержку, представлена на рис. 2.

Исходя из того, что компьютерное моделирование применяется для исследования, оптимизации и проектирования реальных технологических объектов (систем), можно выделить следующие этапы этого процесса:

- 1) определение объекта – установление границ, ограничений и измерителей эффективности функционирования объекта;
- 2) формализация объекта (построение модели) – переход от реального объекта к некоторой логической схеме (абстрагирование);
- 3) подготовка данных – отбор данных, необходимых для построения модели, и представление их в соответствующей форме;

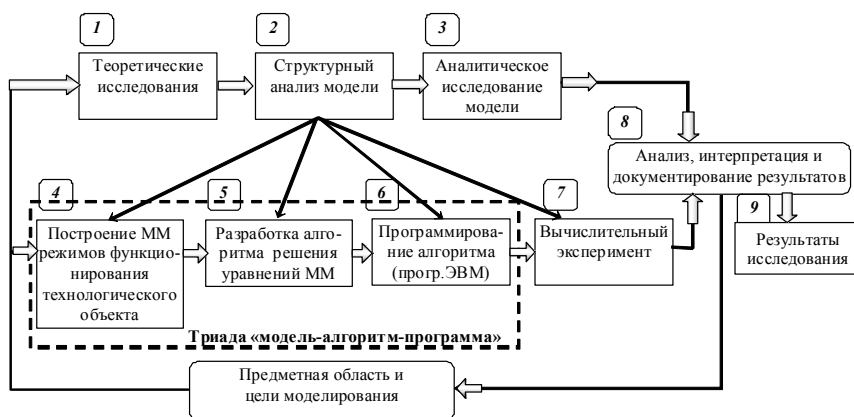


Рис. 2. Схема организации процесса компьютерного моделирования



4) разработка моделирующего алгоритма и программы ЭВМ, проведение тестовых расчётов;

5) оценка адекватности триады «модель – алгоритм – программа»: повышение до приемлемого уровня степени уверенности, с которой можно судить относительно корректности выводов о реальном объекте, полученных на основании использования модели;

6) стратегическое планирование – планирование вычислительного эксперимента, который должен дать необходимую информацию;

7) тактическое планирование – определение способа проведения каждой серии испытаний, предусмотренных планом эксперимента;

8) вычислительный эксперимент – процесс осуществления имитации с целью получения желаемых данных и анализа чувствительности;

9) интерпретация – анализ полученных данных и построение выводов;

10) реализация – практическое использование модели и результатов моделирования;

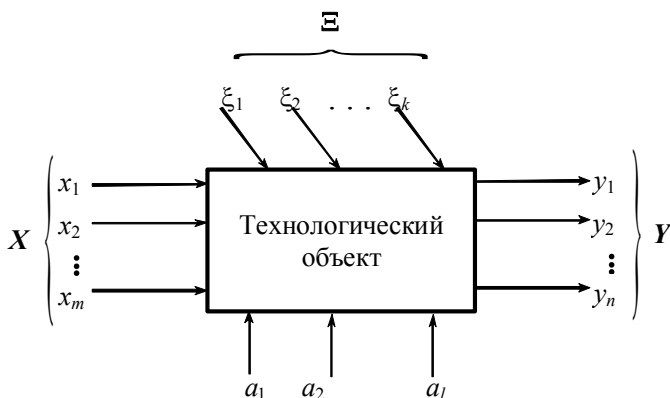
11) документирование – регистрация хода осуществления процесса и его результатов, а также документирование процесса создания и использования модели.

Перечисленные этапы создания и использования модели определены в предположении, что задача будет решена наилучшим образом с помощью компьютерного моделирования. Однако, возможно, это не самый эффективный способ. В том случае, если задача может быть сведена к простой модели и решена *аналитически*, нет никакой нужды в компьютерном моделировании и имитации. Следует изыскивать все возможные средства, подходящие для решения данной конкретной задачи, стремясь при этом к оптимальному сочетанию стоимости и желаемых результатов. Прежде чем приступить к оценке возможностей имитации, следует убедиться, что простая аналитическая модель для данного случая не пригодна.

В представленной на рис. 2 схеме организации процесса компьютерного моделирования (имитации) основная цепочка (реальный технологический объект (система) – математическая модель – моделирующий алгоритм – программа ЭВМ – вычислительный эксперимент) соответствует традиционной схеме, но во главу угла теперь ставится триада: модель – алгоритм – программа (блоки 4, 5, 6), стратегическое и тактическое планирование вычислительного эксперимента (блок 7), интерпретация и документирование его результатов (блок 8).

Определение. Математическая модель – система уравнений (алгебраических, дифференциальных и др.), связывающая выходные переменные  $Y$  объекта с входными переменными  $X$ , внутренними параметрами и возмущающими параметрами  $\Xi$ .

На первом этапе построения математической модели (ММ) выбирается (или строится) «эквивалент» технологического объекта (рис. 3), отражающий в математической форме важнейшие его свойства – законы,



- $\{x\}=X$  – множество входных переменных
- $\{y\}=Y$  – множество выходных переменных
- $\{a\}=A$  – множество внутренних параметров
- $\{\xi\}=\Xi$  – множество возмущающих воздействий

**Рис. 3. Структурное представление математической модели**

которым он подчиняется, связи, присущие составляющим его элементам, и т.д.

Математическая модель (или её фрагменты) исследуется теоретическими методами, что позволяет получить важные предварительные знания об объекте.

Второй этап связан с разработкой метода расчёта сформулированной математической задачи, или, как говорят, вычислительного или моделирующего алгоритма. Фактически он представляет собой совокупность алгебраических формул, по которым ведутся вычисления, и логических условий, позволяющих установить нужную последовательность применения этих формул. Вычислительные алгоритмы должны не исказить основные свойства модели и, следовательно, исходного технологического объекта, быть экономичными и адаптирующимися к особенностям решаемых задач, программного обеспечения и используемых компьютеров.

Как правило, для одной и той же математической задачи можно предложить множество вычислительных алгоритмов. Однако требуется построение эффективных вычислительных методов, которые позволяют получить решение поставленной задачи с заданной точностью за минимальное количество действий (арифметических, логических), т.е. с минимальными затратами машинного времени. Эти вопросы весьма существенны и составляют предмет теории численных методов.

Решение любой прикладной задачи зависит от многочисленных входных переменных и параметров. Для расчёта технологической установки имеется множество различных режимных переменных и конструк-

тивных параметров, среди которых нужно определить их оптимальный набор, обеспечивающий эффективное функционирование этой установки.

Третий этап – создание программы для реализации разработанного моделирующего алгоритма на ЭВМ (создание компьютерной модели) с использованием одного из языков программирования, например Matlab.

Создав триаду «модель – алгоритм – программа», исследователь получает в руки универсальный, гибкий и сравнительно недорогой инструмент, который вначале отлаживается, тестируется в «пробных» вычислительных экспериментах. После того как *адекватность* триады исходному технологическому объекту удостоверена, с моделью можно проводить разнообразные «опыты», дающие все требуемые качественные и количественные свойства и характеристики объекта.

Определение. Модель называется адекватной в том случае, если она описывает поведение объекта с удовлетворительной точностью:

$$\left| \bar{y}_i^p - \bar{y}_i^э \right| = \sqrt{\sum_{i=1}^n (\bar{y}_i^p - \bar{y}_i^э)^2} = \varepsilon < \varepsilon_{\text{зад}} > \varepsilon_{\text{погр}},$$

где  $\varepsilon$  не меньше погрешности экспериментальных измерений. Адекватность модели определяется сравнением экспериментальных данных, полученных на реальном объекте, и данных, полученных при использовании ММ при одинаковых значениях входных переменных, внутренних и возмущающих параметров.

Процесс компьютерного моделирования сопровождается улучшением и уточнением, по мере необходимости, всех звеньев триады.

Обратимся теперь к блоку 7. Вычислительный эксперимент – это собственно проведение расчётов на ЭВМ и получение информации, представляющей интерес для исследователя. Конечно, точность этой информации определяется достоверностью прежде всего модели, моделирующего алгоритма и программы ЭВМ. Именно по этой причине в серьёзных прикладных исследованиях полномасштабные расчёты по только что написанной программе не проводят. Им всегда предшествует период тестовых расчётов. Они необходимы не только для того, чтобы «отладить» программу, т.е. отыскать и исправить все ошибки и опечатки, допущенные как при создании алгоритма, так и при его программной реализации. В этих предварительных расчётах тестируется также сама математическая модель, выясняется её адекватность исследуемому объекту. Для этого проводится расчёт некоторых контрольных экспериментов, по которым имеются достаточно надёжные измерения.

При оптимизации или проектировании технологического объекта из-за сложности и высокой размерности математической модели проведение расчётов по описанной выше схеме может стоить дорого. Поэтому идут на упрощение модели, на построение своего рода инженерных методик (формул), дающих возможность получить необходимую информацию

значительно более дешёвым способом. При этом проводится работа по анализу и трансформации сложных моделей, квинтэссенцией которой и являются простые формулы.

При массовом использовании методов компьютерного моделирования в технических проектах следует добиваться резкого сокращения сроков разработки моделей, обеспечивающих различные этапы проектирования. Решение этой задачи возможно при соответствующем уровне развития технологии компьютерного моделирования.

Технология компьютерного моделирования является основой целенаправленной деятельности, смысл которой состоит в обеспечении возможности фактического эффективного выполнения на ЭВМ исследований функционирования сложных систем. С ее помощью организуются действия исследователя на всех этапах его работы с моделями, начиная от изучения предметной области и выделения моделируемой проблемной ситуации и заканчивая построением и реализацией компьютерных экспериментов для анализа поведения системы.

При построении экономичных моделей важную роль играет понимание полноты ММ, которое можно проиллюстрировать схемой, изображённой на рис. 4.

Причинно-следственную связь между нашими параметрами будем задавать с помощью множества функциональных связей  $\{f\} = \Phi$ , которое определено над множествами  $\{x\} = X$ ,  $\{a\} = A$ ,  $\{\xi\} = \Xi$ . Элементами множеств  $X, A, Y$  могут быть числа или функции, а элементами  $\Phi$  – соответственно функции или операторы. Все множества конечны, однако число элементов в них достаточно велико.

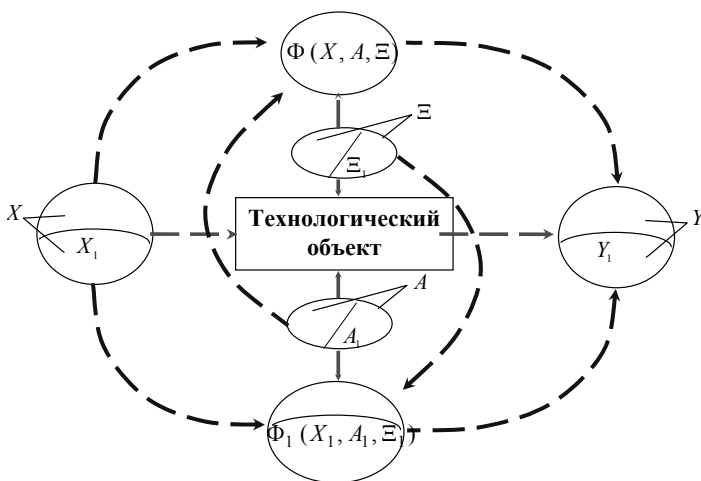


Рис. 4. Иллюстрация понятия полноты математической модели

Множество  $\Phi$ , отображающее зависимости вектора выходных переменных  $Y$  технологического объекта от его входных переменных  $X$ , внутренних параметров  $A$  и возмущающих воздействий  $\Xi$ , будем называть математической моделью.

Отсутствие однозначного правила формирования множеств  $X, A, \Xi$  (так как для каждой конкретной задачи мы должны принять свой уровень детализации описываемого явления, исходя из целей конкретной задачи) приводит к тому, что можно определить множество моделей, отражающих те или иные свойства объекта. Практические цели заставляют исследователя выделить в модели существенные связи, т.е. определить подмножество  $\Phi_1 \subset \Phi$ . Модель, определяемая оператором  $\Phi$ , более полна, чем модель, определяемая  $\Phi_1$ .

Полнота модели определяется допущениями, которые мы приняли при составлении системы уравнений математической модели.

Определение. Допущения – перечень явлений, влияние которых на поведение рассматриваемого объекта мы не учитываем при построении ММ.

### 3. КЛАССИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ

В общем случае модель является представлением объекта, системы или понятия в некоторой форме, отличной от формы их реального существования. Модель какого-либо объекта может быть или точной копией этого объекта, или отображать некоторые характерные свойства объекта в абстрактной форме. Модель служит обычно средством, помогающим нам в объяснении, понимании или совершенствовании системы. Можно указать по крайней мере пять узаконенных и ставших привычными случаев применения моделей в качестве:

- 1) средства осмысления действительности;
- 2) средства общения;
- 3) средства обучения и тренинга;
- 4) инструмента прогнозирования;
- 5) средства постановки экспериментов.

Иными словами, модель применяется для достижения одной из двух основных целей: либо описательной, если модель служит для объяснения и (или) лучшего понимания объекта; либо предписывающей, когда модель позволяет предсказать и (или) воспроизвести характеристики объекта, определяющие его поведение. Модель предписывающего типа обычно является и описательной, но не наоборот.

Прежде чем начать разработку модели, необходимо понять, что собой представляют структурные элементы, из которых она строится. В самом общем виде структуру модели математически можно представить в виде

$$E = \Phi(y, x, a, \xi),$$

где  $E$  – результат действия системы;  $x = (x_1, x_2, \dots, x_m)$  – вектор входных переменных, которыми мы можем управлять;  $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$  – вектор выходных переменных;  $a = (a_1, a_2, \dots, a_l)$  – вектор внутренних параметров объекта (системы);  $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k)$  – вектор неопределённых параметров (часть входных переменных и внутренних параметров системы, значения которых мы не знаем точно) и возмущающих воздействий.

Компонентами векторов  $x$  и  $y$  являются расходы и составы потоков веществ, концентрации веществ, температура, давление в потоках и т.п., компонентами вектора  $a$  – коэффициенты и параметры, характеризующие свойства перерабатываемых веществ, физико-химические процессы в системе (константы скоростей химических реакций, коэффициенты тепло- и массообмена, диффузии и т.п.), геометрические размеры и конструктивные особенности технологического оборудования.

В зависимости от масштаба технологической системы и наших предположениях о его свойствах математические модели принимают конкретный вид. Можно говорить о ММ технологической машины или аппарата, технологического процесса, производства, предприятия и даже целой отрасли. Эти ММ отличаются одна от другой полнотой учёта и глубиной описания различных процессов в системе, а также размерностями векторов  $y, x, a, \xi$  и вектор-функций  $\Phi$  их связи  $E = \Phi(y, x, a, \xi)$ . Если, например, ММ аппарата содержит чаще всего не более 10 – 15 уравнений, то в модель производства, предприятия и тем более отрасли может входить несколько десятков или сотен уравнений.

Функциональные зависимости  $\Phi$  описывают поведение переменных и внутренних параметров в пределах компонента системы или выражают соотношения между компонентами системы. Эти соотношения, или операционные характеристики, по своей природе являются либо детерминированными, либо стохастическими. Детерминированные соотношения – это тождества или определения, которые устанавливают зависимость между определёнными переменными или параметрами системы в тех случаях, когда процесс на выходе системы однозначно определяется заданной информацией на входе. В отличие от этого стохастические соотношения представляют собой такие зависимости, которые при заданной входной информации дают на выходе системы неопределённый результат. Оба типа соотношений обычно выражаются математическими уравнениями, которые устанавливают зависимость между переменными состояния (выходными) системы  $y$ , её входными переменными  $x$ , внутренними параметрами системы  $a$  и возмущающими воздействиями (неопределёнными параметрами)  $\xi$ . Обычно эти соотношения строятся на основе гипотез или выводятся с помощью статистического или математического анализа.

При построении моделей технологических объектов обычно вводят *ограничения*, представляющие собой устанавливаемые пределы изменения

значений переменных или ограничивающие условия распределения и расходования тех или иных ресурсов (энергии, материалов, запасов сырья, времени и т.п.). Они могут вводиться либо разработчиком (искусственные ограничения), либо самой системой вследствие присущих ей свойств (естественные ограничения).

*Целевая функция или критерий E* – это точное отображение целей или задач системы и необходимых правил оценки их выполнения. Можно указать два типа целей: сохранение и приобретение.

Цели сохранения связаны с сохранением или поддержанием каких-либо ресурсов (временных, энергетических, творческих и т.д.) или состояний (безопасности, комфорта, качественных показателей выпускаемой продукции и т.д.).

Цели приобретения связаны с приобретением новых ресурсов (прибыли, более высокого качества, заказчиков и т.п.) или достижением определённых состояний, к которым стремится предприятие или руководитель (завоевание части рынка, повышение уровня занятости, экологической безопасности и т.п.). Целевая функция (критерий) обычно является органической составной частью модели, и весь процесс манипулирования с моделью направлен на удовлетворение или улучшение заданного критерия.

Модели можно классифицировать различными способами, хотя ни один из них не является полностью удовлетворительным. Укажем некоторые типовые группы моделей:

- 1) натурные, аналоговые, символические;
- 2) экспериментальные (регрессионные) и аналитические;
- 3) статические и динамические;
- 4) детерминированные и стохастические;
- 5) дискретные и непрерывные;
- 6) стационарные, нестационарные, квазистационарные;
- 7) линейные и нелинейные.

Различие ММ обуславливается их назначением: исследование эффективности режимов функционирования технологических объектов; оптимизация установившихся (статических) и переходных (динамических) режимов их работы; оптимальное проектирование технологических объектов и управление ими. Структура и вид уравнений ММ зависят от свойств объекта.

Поведение технологического объекта с сосредоточенными координатами  $y, x$  (*т.е. когда характеристики объекта не меняются в зависимости от координат*) в статике и неизменными во времени  $t$  свойствами (стационарный объект) описывается уравнениями ММ вида

$$F [y, x, a, \xi] = 0 \text{ или } y = f(x, a, \xi).$$

ММ статики нестационарного объекта с сосредоточенными координатами (квазистатическая модель) представляет собой систему уравнений вида:

$$F\left[y, x, a(t), \xi\right] \approx 0, \quad \frac{da}{dt} = f_1(y, a, \xi).$$

Поведение технологического объекта с сосредоточенными координатами  $y, x$  в динамике и неизменными во времени  $t$  свойствами описывается уравнениями ММ вида

$$F\left[\frac{dy}{dt}, y(t), x(t), a, \xi\right] = 0 \quad \text{или} \quad \frac{dy}{dt} = f(y(t), x(t), a, \xi).$$

ММ динамики нестационарного объекта с сосредоточенными координатами представляет собой систему уравнений вида

$$F\left[\frac{dy}{dt}, x(t), a(t), \xi\right] \approx 0, \quad \frac{da}{dt} = f_1(y(t), a, \xi).$$

Если координаты объекта  $x, y$  распределены по пространственной переменной  $l$  (длина, радиус, высота) и его свойства неизменны во времени  $t$ , то мы имеем дело со стационарными ММ статики или динамики технологического объекта с распределёнными координатами, которые имеют вид, соответственно:

$$F\left[\frac{dy}{dl}, y(l), x(l), a(l), \xi\right] = 0, \quad F\left[\frac{\partial y}{\partial t}, \frac{\partial y}{\partial l}, y(t, l), x(l), a(l), \xi\right] = 0.$$

По структуре  $F$  ММ технологических объектов разделяются на линейные и нелинейные. Решение  $y(x, a)$  системы уравнений ММ, линейной по  $y$ , удовлетворяет следующим условиям (принципу суперпозиции):

- 1) аддитивности  $y(x_1 + x_2, a) = y(x_1, a) + y(x_2, a)$ ;
- 2) однородности  $y(c \times x, a) = c \times y(x, a)$ ;

где  $x_1$  и  $x_2$  – произвольные функции  $t, l$  или некоторые числа;  $c$  – любое вещественное число.

Решение  $y(x, a)$  называется линейным по  $a$ , если

$$y(x, a_1 + a_2) = y(x, a_1) + y(x, a_2) \quad \text{и} \quad y(x, c \times a) = c \times y(x, a),$$

где  $a_1, a_2$  – произвольные параметры ММ.

Если для некоторой ММ не выполняется хотя бы одно из условий принципа суперпозиции, то она относится к классу нелинейных.

Технологические объекты химической, пищевой и биотехнологической промышленности практически всегда описываются *нелинейными* математическими моделями.



#### 4. ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О МЕТОДАХ ПОСТРОЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

В процессе преобразования наших знаний о технологической системе в её математическую модель мы должны определить: назначение модели; какие компоненты системы должны быть включены в состав модели; переменные и параметры, относящиеся к этим компонентам; функциональные соотношения  $F$ ,  $f$  между компонентами, параметрами и переменными.

Побочным результатом этой фазы общей ориентировки явится определение точной цели или назначения данной программы компьютерного моделирования. Вычислительные эксперименты проводятся с весьма разнообразными целями, в числе которых могут быть:

*оценка* – определение, насколько хорошо технологическая система предлагаемой структуры будет соответствовать некоторым критериям;

*сравнение* – сопоставление конкурирующих технологических систем;

*прогноз* – оценка поведения системы при некотором предполагаемом сочетании рабочих условий;

*анализ чувствительности* – выявление из большого числа действующих факторов тех, которые в наибольшей степени оказывают влияние на функционирование технологической системы;

*оптимизация* – определение условий осуществления (режимов функционирования) технологических процессов в объекте или конструктивных параметров технологического объекта, при которых заданный критерий достигает экстремального значения.

Этот список никак нельзя считать исчерпывающим: в нём просто перечислены некоторые наиболее распространённые цели компьютерного моделирования. Чёткое определение назначения модели оказывает существенное влияние на весь процесс её конструирования и экспериментальной проверки.

После того как мы определили (по меньшей мере качественно) конкретную цель, для которой понадобилось создание модели, наступает этап определения необходимого состава компонентов модели. После составления полного списка компонентов для каждого из них решается вопрос, следует ли включить его в состав модели. Но сделать это трудно, поскольку на данном этапе разработки модели не всегда ясно, насколько важен тот или иной компонент для достижения общей цели моделирования. При этом необходимо уточнить: следует ли включить данный компонент в состав модели или же в состав окружающей среды?

Назначение компонентов системы состоит в том, чтобы преобразовать входные сигналы в выходные. Имеются три разных вида компонентов, составляющих основные функциональные блоки сложных систем: 1) элементы преобразования, в которых один или несколько входных сиг-

налов, будучи обработанными некоторым наперед заданным образом, преобразуются в один или несколько выходных сигналов; 2) элементы сортировки, в которых один или несколько входных сигналов распределяются (сортируются) по двум или нескольким разным выходам; 3) элементы обратной связи, в которых входной сигнал некоторым образом меняется в зависимости от выходного сигнала.

При решении вопроса о том, какие компоненты надо включить, а какие исключить, важным соображением является число переменных, которые необходимо включить в модель. Определить число выходных переменных, как правило, не трудно, если хорошо проработан вопрос о целях и назначении исследования. Трудности возникают при определении, какие входные переменные и переменные состояния вызывают наблюдаемые эффекты и какими из этих переменных необходимо манипулировать, чтобы получить желаемые эффекты. К тому же здесь мы сталкиваемся с противоречием: с одной стороны, мы стремимся сделать модель как можно проще, чтобы облегчить её понимание, упростить задачу её конструирования и повысить эффективность компьютерного моделирования; с другой стороны, мы хотим получить как можно более точную модель. Следовательно, реальную технологическую систему необходимо упростить до тех пор, пока это не приводит к существенной потере точности.

Если решено, какие компоненты и переменные мы включаем в нашу модель, необходимо далее определить функциональные связи между ними, а также значения используемых параметров. При этом перед нами снова встают труднопреодолимые проблемы. Во-первых, может быть трудно (а то и просто невозможно) количественно определить или измерить некоторые переменные, важные для поведения технологической системы. Во-вторых, соотношения между компонентами и переменными могут быть неопределёнными. В-третьих, необходимая нам информация и числовые данные могут либо отсутствовать, либо быть в непригодном для использования виде. Все эти обстоятельства более подробно мы рассмотрим в следующих разделах пособия.

По методу составления уравнений (функциональных зависимостей  $F, f$ ) ММ можно подразделить на *формальные* (эмпирические, регрессионные) и *неформальные* (аналитические). При построении эмпирических (регрессионных) ММ структура функциональных зависимостей  $F, f$  задаётся на основе некоторых формальных соображений, не имеющих связи с типом технологического объекта, его конструктивными особенностями, механизмами протекающих процессов. Задание  $F, f$  в формальных ММ производится с учётом удобства последующего использования уравнений или простоты определения вектора  $a$  по экспериментальным данным. Под удобством использования ММ понимается возможность получения аналитического решения  $y(x, a)$  или экономичного нахождения приближённого решения на ЭВМ.

Следует отметить, что формальные ММ применяют для описания стационарных и нестационарных объектов только с сосредоточенными координатами. При этом модели динамики, как правило, выбираются линейными, а уравнения статики задаются в таком виде, чтобы решение  $u(x, a)$  было линейным по  $a$ .

При построении неформальных (аналитических) ММ функции  $F, f$  выводят на основе теоретического анализа физико-химических процессов, происходящих в технологическом объекте.

При выводе уравнений ММ технологических объектов учитывают:

- гидродинамические режимы перемещения веществ;
- скорости химических превращений, диффузии, передачи тепла, хемосорбции и т.д.;
- уравнения материального и энергетического (теплового) баланса;
- уравнения фазовых превращений и др.

В функции  $F, f$  входят (в явной или косвенной форме) основные конструктивные размеры аппарата (поверхность теплообмена, диаметры и длины труб реакторов, объёмы и число реакторов смешения и т.п.). Чем детальнее и полнее неформальная ММ, тем сложнее структуры  $F, f$  и выше размерность вектора  $a$ , компонентами которого являются параметры уравнений кинетики (константы скоростей, энергии активации, коэффициенты тепло- и массоотдачи, диффузии и т.п.) и характеристики веществ (теплоёмкости, плотности и т.д.).

В процессе вывода уравнений ММ приходится применять ряд допущений, например, об (не)учёте некоторых физико-химических процессов, протекающих в технологическом объекте. Вследствие этого составлению ММ предшествует трудоёмкий этап экспериментального исследования этих процессов на лабораторных установках с целью определения уравнений кинетики и оценки значимости скоростей этих процессов. В зависимости от принимаемых допущений ММ одного и того же технологического объекта могут иметь существенно различный вид. Тем более могут различаться структуры функций  $F, f$  неформальных ММ объектов разного типа.

Неформальные ММ технологических объектов, как правило, нелинейны, нахождение их приближённых решений  $u(x, a, \xi)$  обычно осуществляется численными методами на ЭВМ. Решения  $u(x, a, \xi)$  чаще всего нелинейны по  $a$ , что значительно затрудняет определение параметра по экспериментальным данным.

Неформальные ММ технологических объектов содержат разнообразную и обширную информацию о конструкциях объектов, механизмах и скоростях протекающих в них физико-химических процессов. Это позволяет использовать неформальные ММ для исследования на ЭВМ технологических объектов, оптимизации режимов их работы, оптимального проектирования объектов, оптимального управления ими.



**Рис. 5. Схема классификации методов построения ММ**

В зависимости от способа построения  $F, f$  и определения вектора параметров  $a$  можно указать три метода построения ММ технологических объектов (рис. 5): экспериментальный, аналитический и комбинированный [3].

При экспериментальном методе построения формальных ММ параметры  $a$  определяются по опытным данным  $y^3, x^3$ , полученным на действующем объекте.

Построенные экспериментальным методом ММ не нуждаются в проверке на адекватность, но они справедливы только для того объекта, на котором проводились опыты.

Аналитический метод построения ММ заключается в теоретическом расчёте или определении параметра  $a$  неформальных уравнений статики и динамики по опытным данным  $y^3, x^3$ , которые получены при исследовании отдельных физико-химических процессов, происходящих в объекте, на лабораторных установках. В ММ, построенных аналитическим методом, параметр  $a$  имеет отчётливую физическую трактовку и представляет собой самостоятельную ценность, так как может быть использован в других задачах. Поэтому к задаче определения вектора параметра  $a$  предъявляют следующие требования: единственности  $a$ , устойчивости  $a$  к ошибкам измерения  $y^3$  и расчёта; адекватности ММ объекту.

Комбинированный (экспериментально-аналитический) метод построения ММ заключается в нахождении параметра  $a$  неформальных

уравнений статики и динамики по сигналам  $y^3$ ,  $x^3$ , полученным на действующем объекте. Параметр  $a$  в таких ММ имеет физическую трактовку, поэтому к задаче определения вектора  $a$  предъявляют те же требования, что и при аналитическом методе.

Математические модели, построенные экспериментальным и комбинированным методами, используются для оптимизации статических режимов действующего объекта, оптимального проектирования технологических объектов и конструирования систем автоматического управления ими.

## **5. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ**

Основным принципом моделирования технологических систем, содержащих стохастические или вероятностные элементы, является разыгрывание выборок по методу Монте-Карло. В этом методе данные предыдущего опыта вырабатываются искусственно путём использования некоторого генератора случайных чисел в сочетании с интегральной функцией распределения вероятностей для исследуемого процесса. Таким генератором может быть подпрограмма ЭВМ или какой-либо другой источник равномерно распределённых случайных чисел. Подлежащее разыгрыванию распределение вероятностей может быть основано на эмпирических данных или представлять собой известное теоретическое распределение. Случайные числа используются для получения дискретного ряда случайных переменных, имитирующего результаты, которые можно было бы ожидать в соответствии с разыгрываемым вероятностным распределением.

Способ применения метода Монте-Карло довольно прост. Чтобы получить искусственную случайную выборку из совокупности величин, описываемую некоторой функцией распределения вероятностей, следует обеспечить возможность получения равномерно распределённых случайных чисел и далее использовать эти числа для генерации случайных величин с требуемыми характеристиками. Библиотеки программ большинства ЭВМ включают с этой целью специальные стандартные программы для наиболее распространённых законов распределения. При разработке имитационной модели, содержащей стохастические или вероятностные элементы, всегда возникает вопрос, следует ли при методе Монте-Карло применять непосредственно эмпирические данные или же нужно воспользоваться одним из теоретических распределений. Этот вопрос очень важен и фундаментален по трём причинам. Во-первых, при использовании «сырых» эмпирических данных подразумевается, что моделируется только прошлое. Данные, полученные вчера, строго говоря, отображают лишь вчерашнее поведение системы; возможными событиями оказываются только те, что уже произошли. Следовательно, необходимо предположить, что основная форма распределения вероятностей останется неиз-

менной во времени и что его особенности, относящиеся к определённому периоду времени, будут повторяться. Во-вторых, использование теоретического распределения в большинстве случаев даёт лучшие результаты с точки зрения затрат машинного времени и требуемого объёма памяти ЭВМ. В-третьих, при использовании теоретического распределения гораздо легче изменять параметры генератора случайных чисел, когда требуется проверить чувствительность модели или «проиграть» на ней различные возможные ситуации. Поэтому целесообразно сразу же проверить, не согласуются ли имеющиеся эмпирические данные с известным теоретическим распределением (на статистически приемлемом доверительном уровне). Если да, то следует воспользоваться теоретическим распределением.

Для проверки совместимости экспериментальных данных (гистограмм) с некоторым теоретическим распределением исследователь подбирает одно или несколько теоретических распределений (например, нормальное, Пуассона, биномиальное, экспоненциальное, гамма-распределение и т.д.). После этого ему следует определить параметры распределения с тем, чтобы подвергнуть их проверке по статистическим критериям.

Для статистической оценки гипотезы о том, что совокупность эмпирических или выборочных данных незначительно отличается от той, которую можно ожидать при некотором теоретическом законе распределения, применяется критерий «хи-квадрат», предложенный Пирсоном. В этом случае статистика  $\chi^2$  определяется выражением

$$\chi^2 = \sum (f_0 - f_1)^2 / f_1,$$

где  $f_0$  – наблюдаемая частота для каждой группы или интервала;  $f_1$  – ожидаемая частота для каждой группы или интервала;  $\sum$  – сумма, предсказанная теоретическим распределением, по всем группам или интервалам.

Если  $\chi^2 = 0$ , то наблюдаемые и теоретически предсказанные значения частот точно совпадают; если  $\chi^2 > 0$ , то полного совпадения нет. В последнем случае мы должны сравнивать наши расчётные значения с табличными (критическими) значениями  $\chi^2$ , полученными Фишером для различных чисел степеней свободы и уровней доверительной вероятности  $1 - \alpha$ . При практическом использовании этой статистики высказывается так называемая нулевая гипотеза  $H_0$  о том, что между наблюдаемым и ожидаемым теоретическим распределением с теми же параметрами нет значительных расхождений. Если расчётная величина  $\chi^2$  оказывается больше критического табличного значения, то можно заключить, что при данном

уровне доверительной вероятности наблюдаемые частоты значительно отличаются от ожидаемых, и тогда следовало бы отвергнуть гипотезу  $H_0$ .

Ещё один широко используемый критерий для статистической проверки гипотез был предложен Смирновым и Колмогоровым. Он применяется в тех случаях, когда применяемое распределение непрерывно. Проверка осуществляется путём задания интегральной функции, следующей из теоретического распределения, и её сравнения с интегральной функцией распределения эмпирических данных. Сравнение основывается на выборочной группе, в которой экспериментальное распределение имеет наибольшее абсолютное отклонение от теоретического. Далее эта абсолютная разность сопоставляется с критическими значениями с целью определения, может ли такое отклонение быть случайным при данном законе распределения.

Естественно возникает вопрос, когда следует пользоваться критерием  $\chi^2$ , а когда критерием Смирнова–Колмогорова? При относительно малых объёмах выборок критерий  $\chi^2$  вообще неприменим и следует пользоваться критерием Смирнова–Колмогорова. Однако, если объём выборки велик, предпочтителен, по всей вероятности, критерий  $\chi^2$ .

Во многих подсистемах технологического объекта имеет место функциональная связь между двумя или более переменными, и желательно эту связь выявить. Чаще всего эта связь чрезвычайно сложна или совершенно не известна. В таких случаях мы можем столкнуться с необходимостью ввести некоторую гипотезу о характере функциональной зависимости, т.е. аппроксимировать её некоторым относительно простым математическим выражением, например, многочленом. Для поиска таких функциональных или структурных зависимостей между двумя или более переменными по накопленным экспериментальным данным весьма полезны методы регрессионного и корреляционного анализа [4]. Регрессионный анализ даёт возможность построить, исходя из имеющейся совокупности экспериментальных данных, уравнение, вид которого задаёт исследователь, а корреляционный анализ позволяет судить о том, насколько хорошо экспериментальные данные согласуются с выбранным уравнением («ложатся» на соответствующую кривую).

Экспериментальный метод заключается в проведении на действующем объекте эксперимента (подаче экспериментального сигнала  $x^3$  и записи реакции на него выходных координат  $y^3$ ) и аппроксимации опытных данных  $x^3$ ,  $y^3$  некоторой формальной математической зависимостью  $F$ . Структура  $F$  не зависит явно от свойств перерабатываемых в объекте веществ и характеристик физико-химических процессов.

В зависимости от способа задания  $x^3$  различают активные и пассивные экспериментальные методы. В активных методах экспериментатор

сам создаёт испытательный сигнал  $x^3$  желаемой формы, в пассивных методах используются естественные случайные изменения входных и выходных координат объекта.

Экспериментальный метод построения ММ базируется на трёх допущениях: 1) объект есть система с сосредоточенными координатами; 2) статические и динамические свойства объекта неизменны во времени; 3) уравнения статики и динамики линеаризуемы в малом, т.е. при небольших отклонениях  $y$  от установившегося состояния.

Справедливость второго и третьего допущений проверяется экспериментальным путём.

## 6. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТАТИКИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

При исследовании статики технологических объектов наиболее часто встречаются объекты со следующими типами структурных схем (рис. 6):  $O_1$  – с одной входной  $x$  и одной выходной  $y$  переменными;  $O_2$  – с двумя входными  $x_1$  и  $x_2$  и выходной  $y$  переменными;  $O_m$  – с  $m$  линейно независимыми входными  $x_1, x_2, \dots, x_m$  и выходной  $y$  переменными. Во многих случаях при проведении эксперимента переменная  $y$  измеряется с некоторой погрешностью  $\tilde{y} = y + z$ , где  $z$  – случайный стационарный процесс с нулевым средним и дисперсией  $\sigma_z^2$ . Структурные схемы для таких случаев будем обозначать  $O_1, O_2, O_m$  и  $O_1^z$ .

Математические модели статики объекта со структурными схемами  $O_1, O_2, O_m$  и  $O_1^z$  имеют вид:

$$y = f_1(x); \quad y = f_2(x_1, x_2); \quad y = f_m(x_1, x_2, \dots, x_m); \quad M\{\tilde{y} | x\} = f(x).$$

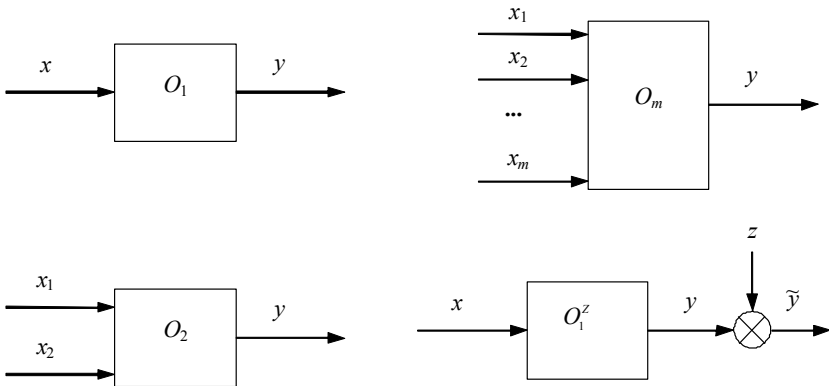


Рис. 6. Структурные схемы технологических объектов



### Построение модели статики объекта $O_1$ .

А. Подготовка и планирование эксперимента.

На этом этапе изучается объект, составляется его структурная схема, экспериментальная установка оборудуется приборами для контроля (регистрации) переменных  $x$  и  $y$ . Определяется диапазон  $[\underline{x}, \bar{x}]$  возможных изменений входной переменной  $x$ , оценивается время  $T_0 = t_2 - t_1$  окончания переходного процесса  $y(t)$ , вызванного ступенчатым возмущением  $x(t)$  в момент времени  $t_1$ . Здесь  $t_2$  – момент времени, когда  $\dot{y}(t)$  становится приближённо равной нулю.

Планирование эксперимента сводится к выбору числа опытов  $d = \frac{\bar{x} - \underline{x}}{\Delta x}$ ,  $\Delta x = \text{const}$  (обычно  $d \geq 5 \dots 10$ ) и оценке времени эксперимента

$$T_3 \geq d \cdot \Delta t, \text{ где } \Delta t \geq (1 \dots 1,5) \cdot T_0.$$

Б. Проведение эксперимента.

Экспериментатор устанавливает  $x(t) = \underline{x} = x(1)$  и спустя время  $\Delta t$  регистрирует значение выходной переменной  $y(1)$ . Затем устанавливается значение входной переменной  $x(2) = x(1) + \Delta x$ , измеряется  $y(2)$  и т.д. В конце эксперимента получаем таблицу  $x(j)$ ,  $y(j)$ ,  $j = 1, 2, \dots, d$ .

В. Обработка результатов эксперимента.

На этом этапе производится статистическая обработка опытных данных и собственно построение математической модели статики технологического объекта (статической характеристики). Статическая характеристика объекта  $y = f(x)$  используется для оптимизации объекта и расчёта линейных систем автоматического регулирования.

Иногда из каких-то дополнительных соображений известно, что приближающую функцию целесообразно искать в виде

$$y \approx f(x, a_1, a_2, \dots, a_n).$$

Если параметры  $a_1, a_2, \dots, a_n$  определяются из условия совпадения  $y(j)$  и приближающей функции  $f(x_j)$  в точках  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , так называемых узлах интерполяции:

$$y(j) = f(x_j, a_1, a_2, \dots, a_n); \quad j = 1, \dots, n,$$

то такой способ приближения называют интерполяцией или интерполированием.

Пусть  $\underline{x}$  – наименьшее из чисел  $x_i$  – узлов интерполяции, а  $\bar{x}$  – наибольшее из них. Если точка  $x$ , в которой вычисляется значение  $f(x)$ , лежит вне отрезка  $[\underline{x}, \bar{x}]$ , то наряду с термином «интерполяция» употребляют термин «экстраполяция».

Наиболее часто используется интерполяция многочленами. Однако это не единственный возможный вид интерполяции. Иногда удобнее приближать функции тригонометрическими функциями, в других задачах целесообразно приближать многочленом не  $f(x)$ , а  $\ln[f(x)]$ , или приближать  $f(x)$  не многочленом от  $x$ , а многочленом от  $\ln[x]$  [5].

**Приближение функций с помощью нейронных сетей.** В последние годы появился новый алгоритмический аппарат приближения функций многих переменных с помощью линейных операций и суперпозиций функций одного переменного. Такое приближение осуществляется специальными формальными устройствами – *нейронными сетями*, состоящими из формальных *нейронов*.

Нейрон получает на входе вектор сигналов  $x$ , вычисляет его скалярное произведение на вектор весов  $\alpha$  и некоторую функцию одного переменного  $\varphi(z)$ , где  $z$  – скалярное произведение  $x$  на  $\alpha$ . Результат рассылается на входы других нейронов или передаётся на выход. Таким образом, нейронные сети вычисляют суперпозиции простых функций одного переменного и их линейных комбинаций.

Для описания алгоритмов и устройств в нейроинформатике выработана специальная схематехника, в которой элементарные устройства – сумматоры, синапсы, нейроны и т.п. – объединяются в сети, предназначенные для решения задач. Наиболее важные элементы нейросистем – *адаптивный сумматор* и *нелинейный преобразователь*. Адаптивный сумматор вычисляет скалярное произведение входного сигнала  $x$  на вектор параметров  $\alpha$  (рис. 7).

Адаптивным его называют из-за наличия вектора настраиваемых параметров  $\alpha$ . Нелинейный преобразователь получает скалярный входной сигнал  $z$  и переводит его в  $\varphi(z)$  (рис. 8).

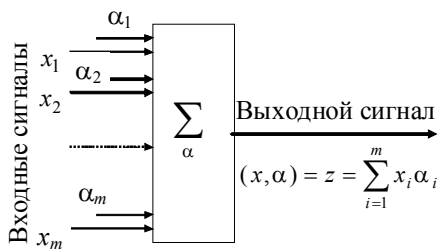


Рис. 7. Адаптивный сумматор

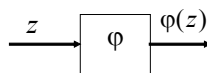
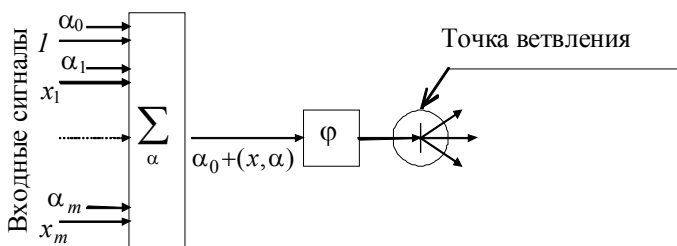


Рис. 8. Нелинейный преобразователь сигнала



**Рис. 9. Формальный нейрон**

Стандартный формальный нейрон составлен из входного сумматора, нелинейного преобразователя и точки ветвления (рис. 9).

Точка ветвления служит для рассылки одного сигнала по нескольким адресам. Она получает скалярный входной сигнал  $z$  и передаёт его выходам. Среди нейронных сетей можно выделить две базовые архитектуры: *слоистые* и *полносвязные* сети.

**Слоистые сети.** Нейроны расположены в несколько слоёв (рис. 10). Нейроны первого слоя получают входные сигналы, преобразуют их и через точки ветвления передают нейронам второго слоя. Далее срабатывает второй слой и т.д. до  $k$ -го слоя, который выдаёт выходные сигналы для пользователя. Если не оговорено противное, то каждый выходной сигнал  $i$ -го слоя подаётся на вход всех нейронов  $(i + 1)$ -го слоя. Число нейронов в каждом слое может быть любым и никак заранее не связано с количеством нейронов в других слоях. Стандартный способ подачи входных сигналов: все нейроны первого слоя получают каждый входной сигнал. Особое распространение получили трёхслойные сети, в которых каждый слой имеет свое наименование: первый – входной, второй – скрытый, третий – выходной.

**Полносвязные сети.** Каждый нейрон передаёт свой выходной сигнал остальным нейронам, включая самого себя. Выходными сигналами сети могут быть все или некоторые выходные сигналы нейронов после нескольких тактов функционирования сети. Все выходные сигналы подаются всем нейронам.

Таким образом, нейронные сети вычисляют линейные функции, нелинейные функции одного переменного, а также все возможные суперпозиции – функции от функций, получаемые при каскадном соединении сетей.

Рассмотрим более подробно слоистую сеть (рис. 10). Её структура характеризуется числом  $K$  и количеством нейронов  $m$  в каждом слое. Заметим, что в слоистой сети связи между нейронами в слое отсутствуют.

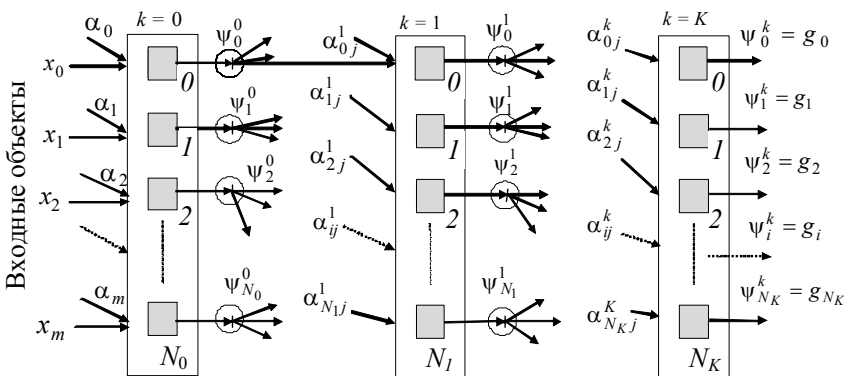


Рис. 10. Слоистая сеть

Введём новые обозначения: вход  $i$ -го нейрона  $k$ -го слоя –  $z_i^k$ , выход  $i$ -го нейрона –  $\psi_i^k$ , количество нейронов в  $k$ -м слое –  $N_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, K$ . Тогда суперпозиция входных сигналов  $i$ -го нейрона имеет вид:

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

Здесь  $\alpha_{ij}^k$  – весовые коэффициенты, являющиеся настраиваемыми параметрами и характеризующими связь  $j$ -го нейрона  $(k - 1)$ -го слоя с  $i$ -м нейроном  $k$ -го слоя.

Для нулевого слоя имеем  $\psi_j^0 = x_j$ ,  $j = \overline{1, m}$ . С учётом принятых обозначений аппроксимирующая функция  $g_i$ ,  $i = 1, N_k$ , представляет собой персептрон и может быть записана в виде

$$g_i = \psi_i^k, \quad i = \overline{1, N_k},$$

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

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

В качестве функций активации нейронов (нелинейного преобразователя нейронов  $\varphi$ ) часто используют гладкие функции вида:

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

Приближение функций с помощью нейронных сетей сводится к их обучению. При этом входные сигналы  $x$  подаются обучаемой сети на об-

работку, задаются значения весовых коэффициентов  $\alpha$ , а получаемые выходные сигналы  $g$  сравниваются с экспериментальными данными  $y$ . Затем строится оценка работы сети, например, как критерий максимального правдоподобия:

$$E(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^P \sum_{i=1}^{N_K} (y_{i\lambda} - g_i(x^{(\lambda)}, \alpha))^2,$$

где  $g_i(x^{(\lambda)}, \alpha)$  –  $i$ -й выход сети, соответствующий вектору входных сигналов  $x^{(\lambda)}$  и весовых коэффициентов  $\alpha$ ;  $P$  – объём обучающей выборки  $(x^{(\lambda)}, y_{\lambda})$ .

Поиск оптимальных значений весовых коэффициентов  $\alpha$ , при которых критерий  $E(\alpha)$  минимален, производится с помощью известных методов решения экстремальных задач.

При обучении нейронных сетей целесообразно использовать метод регуляризации, позволяющий получить сглаженные функции  $g_i(x^{(\lambda)}, \alpha)$ . При этом оценка работы сети выбирается в виде

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

где  $\beta$  – параметр регуляризации;  $\Omega(\alpha)$  – равномерно выпуклая функция, например,  $\Omega(\alpha) = \frac{1}{2} \alpha^T \cdot \alpha$ .

Оптимальное значение параметра регуляризации  $\beta$  подбирается итерационным методом.

## 7. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТАТИКИ ОБЪЕКТОВ $O^Z$

**Подготовка и планирование эксперимента.** На этом этапе изучается объект, выбираются переменные  $x$ ,  $y$  и диапазон изменения  $[x, \bar{x}]$ , определяется время  $T_0$  окончания переходного процесса.

Оценивается дисперсия случайной величины  $z$ . Для этого устанавливается  $x_j = \text{const}$  и регистрируются  $N$  значений  $\tilde{y}_{ji}, i = \overline{1, N}$ ,  $N \geq 30 \dots 50$ . Вычисляются среднее арифметическое  $y_{cp}$  и оценка дисперсии  $\sigma_z^2$ :

$$y_{cp}(j) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tilde{y}_{ji}, \quad \sigma_{zj}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\tilde{y}_{ji} - y_{cp}(j))^2.$$

Величина  $\Delta x$  выбирается в процессе проведения эксперимента из условия, чтобы соответствующее изменение  $\Delta \tilde{y} \geq (2...3)\sigma_z$ . Время проведения одного опыта  $\Delta t$  принимается равным  $T_0 + T_n$ , где время наблюдения  $T_n$  установившегося значения выходной координаты зависит от частотного спектра  $z(t)$  и частоты измерения  $\tilde{y}(t)$  в момент времени  $t_i$ ,  $i = \overline{1, N_1}$ ,  $N_1 < N$  на отрезке  $[T_0, T_0 + T_n]$ . Обычно  $T_n \leq (1...2)T_0$  из-за трудности стабилизации входных переменных объекта.

**Проведение эксперимента.** Проводятся  $N_1$  измерений  $\tilde{y}(t)$  в моменты времени  $t_i$  на отрезках  $[T_0, T_0 + T_n]$ .

Среднее значение  $y_{cp}(j) = \frac{1}{N_1} \sum_{i=1}^{N_1} \tilde{y}_j(t_i)$  соответствует величине  $x(j)$  входной переменной,  $j = 1, 2, \dots, n$ .

**Обработка экспериментальных данных и построение математической модели.** При малом числе  $N_1$  усреднённые значения  $y_{cp}(j)$  будут искажены помехой  $z$ , что затрудняет или делает невозможным построение модели статики и её анализ. Поэтому часто экспериментальные данные предварительно сглаживают, например, методом скользящего среднего или методом четвёртых разностей.

После сглаживания экспериментальных данных для построения моделей применяют вышеизложенные методы интерполяции и аппроксимации сглаженных данных.

Рассмотрим методику построения уравнений моделей статики для объектов  $O^Z$ , выходная координата  $\tilde{y}$  которых – есть случайная величина.

Пусть заданы некоторый объект  $O_1^Z$ , входная и выходная переменные  $X$  и  $Y$ , которые являются случайными величинами. Естественно ожидать, что значения  $y$  величины  $Y$  определяются значениями  $x$ . Однако в подобных ситуациях следует говорить о наличии стохастической (вероятностной) связи между переменными  $X$  и  $Y$  объекта в статике. На практике при исследовании зависимости  $\varphi(x)$  между переменными  $X$  и  $Y$  обычно ограничиваются изучением зависимости между условным математическим ожиданием  $M(Y|_{X=x})$  и переменной  $x$ , т.е.  $M(Y|_{X=x}) = \varphi(x)$ .

Зависимость  $M(Y|_{X=x})$  от  $x$  называется регрессионной. Знание статистической зависимости между случайными переменными имеет большое практическое значение: с её помощью можно прогнозировать значение зависимой случайной переменной в предположении, что незави-

симая переменная примет вполне определённое значение. Однако, поскольку понятие статистической зависимости относится к осреднённым условиям, прогнозы не могут быть безошибочными. Применяя вероятностные методы, как будет показано далее, можно вычислить вероятность того, что ошибка прогноза не выйдет за определённые границы.

Уравнения регрессии классифицируют на линейные (корреляционные) и нелинейные.

Уравнение линейной регрессии (истинное) запишем в следующем виде

$$M \{Y |_{X=x}\} = \eta = \beta_0 + \beta_1 (x - \bar{x}). \quad (7.1)$$

Оценки истинных параметров модели  $\beta_0$  и  $\beta_1$  обозначим через  $b_0$  и  $b_1$ , а оценку  $\eta$  через  $\hat{y}$ . Подставив в (7.1) вместо истинных параметров их оценки, получим уравнение регрессии:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 (x - \bar{x}). \quad (7.2)$$

Оценки  $b_0$  и  $b_1$  уравнения регрессии (7.2) будем находить из условия минимума квадратов отклонений средних значений переменной  $y_{cp}(j)$  от вычисленных по уравнению регрессии  $\hat{y}(x_j)$ , т.е. по методу наименьших квадратов (МНК).

МНК Лежандра состоит в минимизации величины

$$\Phi(b_0, b_1) = \sum_{j=1}^n P_j (y_{cp}(j) - \hat{y}(x_j))^2 = \sum_{j=1}^n P_j [y_{cp}(j) - b_0 - b_1(x_j - \bar{x})]^2,$$

где  $P_j$  – число повторных измерений  $y(j)$  по переменным  $b_0$  и  $b_1$ . Используя необходимые (и для данного случая достаточные) условия минимума функции  $\Phi(b_0, b_1)$ , получим систему нормальных уравнений:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial b_0} = -2 \sum_{j=1}^n P_j [y_{cp}(j) - b_0 - b_1(x_j - \bar{x})] = 0,$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial b_1} = -2 \sum_{j=1}^n P_j [y_{cp}(j) - b_0 - b_1(x_j - \bar{x})](x_j - \bar{x}) = 0.$$

Приводя подобные члены, получим:

$$b_0 \sum_{j=1}^n P_j + b_1 \sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x}) = \sum_{j=1}^n P_j y_{cp}(j),$$

$$b_0 \sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x}) + b_1 \sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x})^2 = \sum_{j=1}^n P_j y_{\text{cp}}(j) (x_j - \bar{x}),$$

откуда имеем:

$$b_0 = \frac{\sum_{j=1}^n P_j y_{\text{cp}}(j)}{\sum_{j=1}^n P_j} = \bar{Y}, \quad b_1 = \frac{\sum_{j=1}^n P_j y_{\text{cp}}(j) (x_j - \bar{x})}{\sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x})^2}.$$

Оценки, полученные по методу наименьших квадратов, обладают минимальной дисперсией в классе линейных оценок, т.е. являются несмещёнными –  $M\{b_0\} = \beta_0$ ,  $M\{b_1\} = \beta_1$ . Их дисперсии рассчитываются следующим образом:

$$M\{(b_0 - \beta_0)^2\} \approx S_{b_0}^2 = \frac{\sigma_{y(j)}^2}{\sum_{j=1}^n P_j}; \quad M\{(b_1 - \beta_1)^2\} \approx S_{b_1}^2 = \frac{\sigma_{y(j)}^2}{\sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x})^2}.$$

Найдём несмещённую оценку  $\sigma_{y(j)}^2$ :

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{P_j} (y_{ji} - \eta_j)^2 &= \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{P_j} (y_{ji} - y_{\text{cp}}(j))^2 + \sum_{j=1}^n P_j (y_{\text{cp}}(j) - \hat{y}(x_j))^2 + \\ &+ (b_0 - \beta_0)^2 \sum_{j=1}^n P_j + (b_1 - \beta_1)^2 \sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x})^2. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Первый член правой части есть мера экспериментальной ошибки, полученной в каждом отдельном опыте, выполненном при различных значениях  $x_i$ , второй член служит мерой эффективности линейной модели для подгонки экспериментальных данных. Левая часть равенства является суммой квадратов с  $\sum_{j=1}^n P_j$  степенями свободы и распределённой как  $\sigma_{y(j)}^2 \cdot \chi^2$ . Можно показать, что каждый член правой части равенства распределён по закону  $\sigma_{y(j)}^2 \cdot \chi^2$  с  $\sum_{j=1}^n P_j - n$ ,  $n - 2$ , 1 и 1 степенями свободы, соответственно.

Если оценивать  $\sigma_{y(j)}^2$  по второму члену правой части равенства (7.3), то получим несмещённую оценку  $S_r^2$  дисперсии адекватности



$$S_r^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{j=1}^n P_j (y_{cp}(j) - \hat{y}(x_j))^2.$$

Величина  $S_r^2$  характеризует влияние переменной  $x$ .

Величина  $S_l^2$  характеризует влияние неучтённых факторов и служит мерой рассеяния, вызванного экспериментальной ошибкой:

$$S_l^2 = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{P_j} (y_{ji} - y_{cp}(j))^2}{\sum_{j=1}^n P_j - n}.$$

Эта величина тоже является несмещённой оценкой. Очевидно, чем меньше влияние неучтённых факторов, тем лучше математическая модель соответствует экспериментальным данным, так как изменение  $y$  в основном объясняется влиянием переменной  $x$ .

Поэтому, прежде чем принять решение по поводу модели, необходимо проверить гипотезу о том, что линейная модель удовлетворительно описывает экспериментальные данные. Для проверки этой гипотезы вычислим статистику  $F = \frac{S_r^2}{S_l^2}$ , которая имеет распределение Фишера с

$f_1 = (n-2)$  и  $f_2 = \sum_{j=1}^n P_j - n$  степенями свободы. По доверительной вероятности  $\rho = 1 - \alpha = \{0,9; 0,95; 0,99\}$  и числу степеней свободы  $f_1, f_2$  находят по таблицам  $F$ -распределения критическое значение  $F(\rho, f_1, f_2)$ . Далее проверяется выполнение условия:

$$F = \frac{S_r^2}{S_l^2} < F(\rho, f_1, f_2).$$

Если это условие выполняется, т.е. вычисленные значения  $F$  меньше табличного значения  $F(\rho, f_1, f_2)$ , то гипотеза о том, что линейная модель адекватна, принимается. В противном случае гипотезу о линейности модели следует отвергнуть и для описания экспериментальных данных необходимо выбрать другую модель.

В случае  $F < F(\rho, f_1, f_2)$  оценки дисперсий  $S_r^2$  и  $S_l^2$  можно объединить, чтобы получить лучшую оценку  $\sigma_{y(j)}^2$  с  $\sum_{j=1}^n P_j - 2$  степенями свободы:

$$S_{y(j)}^2 = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{P_j} (y_{ji} - y_{cp}(j))^2 + \sum_{j=1}^n P_j (y_{cp}(j) - \hat{y}(x_j))^2}{\left( \sum_{j=1}^n P_j - n \right) + (n-2)} =$$

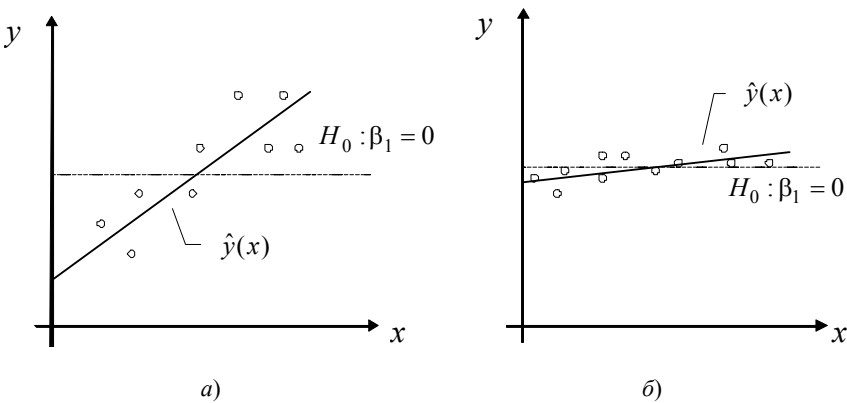
$$= \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{P_j} (y_{ji} - \hat{y}(x_j))^2}{\sum_{j=1}^n P_j - 2}.$$

Конечно, если повторные измерения  $y_{ji}$  при заданном  $x_j$  не производились, то оценку дисперсии  $S_{y(j)}^2$  можно получить лишь по  $S_r^2$ . Без повторных измерений  $F$ -критерий не может быть применён для проверки гипотезы линейности.

Далее можно проверить гипотезу о том, что  $\beta_1 = 0$ , составляя отношение оценок дисперсий:

$$F = \frac{S_3^2}{S_{y(j)}^2} = \frac{\sum_{j=1}^n P_j (\hat{y}(x_j) - \bar{y})^2}{S_{y(j)}^2}, \quad \text{где} \quad \bar{y} = \frac{\sum_{j=1}^n y_{ji}}{\sum_{j=1}^n P_j}.$$

Если это отношение больше табличного значения  $F(\rho, f_1, f_2)$ , гипотеза  $H_0 : \beta_1 = 0$  отвергается (рис. 11).



**Рис. 11. К проверке гипотезы  $H_0 : \beta_1 = 0$ :**  
 а – гипотеза отвергается; б – гипотеза принимается

### Понятие доверительного интервала. Доверительная вероятность.

Оценку неизвестного параметра генеральной совокупности одним числом называют точечной оценкой. Наряду с точечным статистическая теория оценивания параметров занимается вопросами интервального оценивания.

Задачу интервального оценивания в самом общем виде можно сформулировать так: по данным выборки построим числовой интервал, относительно которого с заранее выбранной вероятностью можно сказать, что внутри этого интервала находится оцениваемый параметр. Интервальное оценивание особенно необходимо при малом числе наблюдений, когда точечная оценка мало надёжна.

Доверительным интервалом  $[b, \bar{b}]$  для параметра  $b$  называют такой интервал, относительно которого можно с заранее выбранной вероятностью  $\rho = 1 - \alpha$  близкой к единице, утверждать, что он содержит значение параметра  $b$ , т.е.

$$P[b < b < \bar{b}] = 1 - \alpha.$$

Чем меньше для выбранной вероятности  $[b, \bar{b}]$ , тем точнее оценка неизвестного параметра  $b$  и, наоборот, если этот интервал велик, то оценка, произведённая с его помощью, мало пригодна для практики. Вероятность  $\rho = 1 - \alpha$  принято называть доверительной вероятностью, а число  $\alpha$  – уровнем значимости. Выбор доверительной вероятности определяется конкретно решаемой задачей.

Оценим значимость оценок коэффициентов регрессии и построим интервальные оценки этих коэффициентов. Для этого проверяют гипотезу о равенстве нулю коэффициента регрессии, соблюдая предпосылки нормального распределения  $b$  относительно  $\beta$ . В этом случае вычисляемая для проверки нулевой гипотезы  $H_0 : \beta_1 = 0$  статистика  $t = \left| \frac{b - \beta}{S_b} \right|$  имеет распределение Стьюдента. Тогда для коэффициента  $\beta_0$  имеем:

$$t = \frac{b_0 - \beta_0}{S_{b_0}} = \frac{b_0 - \beta_0}{\frac{S_{y(j)}}{\left( \sum_{j=1}^n P_j \right)^{1/2}}}, \quad f = \sum_{j=1}^n P_j - 2.$$

Величину  $S_{y(j)}$  называют оценкой стандартной ошибки.

По доверительной вероятности  $1 - \frac{\alpha}{2}$  и числу степеней свободы  $f$  находят по таблицам распределения Стьюдента критическое значение  $t_{1-\frac{\alpha}{2}, f}$ . В этом случае доверительный интервал для  $\beta_0$  имеет вид:

$$b_0 - t_{1-\frac{\alpha}{2}, f} S_{b_0} \leq \beta_0 < b_0 + t_{1-\frac{\alpha}{2}, f} S_{b_0}.$$

Аналогично для  $\beta_1$  имеем:

$$t = \frac{b_1 - \beta_1}{S_{b_1}} = \frac{b_1 - \beta_1}{S_{y(j)} / \left( \sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x})^2 \right)^{1/2}}, \quad f = \sum_{j=1}^n P_j - 2.$$

$$b_1 - t_{1-\frac{\alpha}{2}, f} S_{b_1} \leq \beta_1 < b_1 + t_{1-\frac{\alpha}{2}, f} S_{b_1}.$$

Линия регрессии характеризует изменение условного математического ожидания выходной переменной  $\tilde{y}$  от вариации входной переменной  $x$ . Точечной оценкой условного математического ожидания  $\eta = M\{\tilde{y} | x\}$  является  $\hat{y}(x)$ . Построим доверительный интервал для  $\eta = M\{\tilde{y} | x\}$  в точках  $x_j, j = \overline{1, n}$ .

Известно что  $(\hat{y}(x) - M\{y | x\}) / S_{y(j)}$  имеет распределение Стьюдента с  $f = \sum_{j=1}^n P_j - 2$  степенями свободы:

$$t = \frac{\hat{y} - \eta}{S_{\hat{y}}},$$

$$\hat{y} - t_{1-\frac{\alpha}{2}, f} S_{\hat{y}} \leq \eta < \hat{y} + t_{1-\frac{\alpha}{2}, f} S_{\hat{y}},$$

где  $S_{\hat{y}(j)}^2 = S_{y(j)}^2 \left[ \frac{1}{\sum_{j=1}^n P_j} + \frac{\sum_{j=1}^n (x_j - \bar{x})^2}{\sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x})^2} \right]$ .

Доверительные границы интервала для  $\eta = M\{\tilde{y} | x\}$  в точках  $x_j$  можно изобразить графически (рис. 12).

В точке  $x = \bar{x}$  границы интервала наиболее близки друг к другу. Расположение границ доверительного интервала показывает, что прогнозы по уравнению регрессии с заданной точностью (интервальные оценки для  $\eta$ )

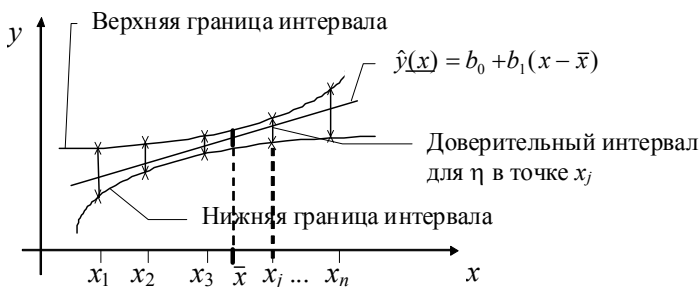


Рис. 12. К понятию «точность» линейной регрессионной модели

допустимы для значений  $x$ , не выходящих за пределы выборки. Иными словами, экстраполяция по уравнению регрессии может приводить к значительным погрешностям.

**Нелинейная регрессия.** Пусть уравнение регрессии задаётся полиномом  $k$ -й степени:

$$\hat{y} = b_0 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_kx^k,$$

коэффициенты которого будем определять методом наименьших квадратов по экспериментальным данным.

Однако нам неизвестна степень полинома  $k$ . Для её определения используем итерационный метод: вначале задаёмся степенью полинома, например  $k = 2$ , и определяем коэффициенты полинома методом наименьших квадратов. Затем вычисляем остаточную дисперсию по формуле

$$S^2_{\text{ост}, k} = \frac{\sum_{j=1}^n (y_j - \hat{y}(x_j))^2}{n - (k + 1)}.$$

Далее увеличиваем заданную степень полинома  $k$  на 1 и повторяем вышеописанную процедуру при увеличенном значении степени полинома. Как только  $S^2_{\text{ост}, k+1}$  перестаёт быть значимо меньше  $S^2_{\text{ост}, k}$ , увеличение степени  $k$  нужно прекратить. Значимость различия между  $S^2_{\text{ост}, k+1}$  и  $S^2_{\text{ост}, k}$  проверяется по критерию Фишера:

$$F = \frac{S^2_{\text{ост}, k}}{S^2_{\text{ост}, k+1}} < F(\rho, f_1, f_2),$$

где  $f_1, f_2$  – число степеней свободы остаточной дисперсии в числителе и знаменателе соответственно.

Если считать, что уравнение регрессии найдено с достаточной точностью, то остаточная дисперсия обусловлена только наличием дисперсии воспроизводимости, т.е.  $S_{\text{ост}}^2 \approx S_{\text{вос}}^2$ . Чем меньше доля  $S_{\text{ост}}^2 \approx S_{\text{вос}}^2$  в общей дисперсии  $S_y^2$ , тем сильнее связь между  $\tilde{y}$  и  $x$ , так как меньше доля случайности в этой связи. Силу связи между  $\tilde{y}$  и  $x$  можно охарактеризовать величиной:

$$\xi = \frac{[n - (k + 1)] \cdot S_{\text{ост}}^2}{(n - 1) S_y^2}; \quad S_y^2 = \frac{\sum_{j=1}^n (y_j - \bar{y})^2}{n - 1}; \quad \bar{y} = \frac{\sum_{j=1}^n y_j}{n}.$$

Связь тем сильнее, чем меньше  $\xi$ . Величина  $\sqrt{1 - \xi} = \Theta$  называется корреляционным отношением. Чем больше  $\Theta$ , тем сильнее связь,  $0 \leq \Theta \leq 1$ .

Если  $\Theta = 1$ , то существует функциональная зависимость между параметрами. Однако при  $\Theta = 0$  величины  $\tilde{y}$  и  $x$  нельзя считать независимыми, так как связь между ними, не сказываясь на дисперсиях, может проявить себя в моментах более высокого порядка. Только при нормальном распределении равенство нулю корреляционного отношения однозначно свидетельствует об отсутствии связи между случайными величинами. Корреляционное отношение, как и коэффициент корреляции в линейной регрессии, характеризует тесноту связи между случайными величинами. Анализ силы связи по  $\Theta$  называют корреляционным анализом.

**Множественная регрессия.** Множественная регрессия применяется для описания взаимной связи входных величин  $x_1, x_2, \dots, x_m$  и выходной величины  $\tilde{y}$ . Уравнение линейной множественной регрессии имеет вид:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^m b_i x_i,$$

где  $b_0, b_1, \dots, b_m$  находятся методом наименьших квадратов:

$$b_i = r_{x_i y} \frac{S_y}{S_{x_i}}, \quad i = \overline{1, m}; \quad b_0 = \bar{y} - \sum_{i=1}^m b_i \bar{x}_i;$$

$$S_{x_i} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_i)^2}{n - 1}}; \quad S_y = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^n (y_j - \bar{y})^2}{n - 1}};$$

$$r_{x_i y} = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x})(y_j - \bar{y}) / (S_{x_i} S_y),$$

где  $r_{x_i y}$  – коэффициент корреляции, оценивающий тесноту линейной связи случайных величин  $x_i$  и  $y$ .

О степени силы связи  $x_1, x_2, \dots, x_m$  и  $\tilde{y}$  можно судить по величине коэффициента множественной линейной корреляции  $R_{x_1, x_2, \dots, x_m y}$ , всегда большей нуля и меньше единицы. Использование этой величины связано, однако, с опасностью получения неверных выводов – при увеличении и неизменном числе опытных данных значение  $R \rightarrow 1$ , хотя теснота линейной зависимости может оставаться неизменной.

Уравнение множественной нелинейной регрессии объекта  $O_m^Z$  задаётся обычно полиномом:

$$\begin{aligned} \hat{y} = & b_0 + b_{11}x_1 + b_{12}x_2 + \dots + b_{1m}x_m + b_{21}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + \dots + b_{2m}x_m^2 + \\ & + c_{12}x_1x_2 + c_{13}x_1x_3 + \dots + c_{1m}x_1x_m + c_{23}x_2x_3 + c_{24}x_2x_4 + \dots \\ & + c_{2m}x_2x_m + \dots + d_{11}x_1^3 + d_{12}x_2^3 + \dots + d_{1m}x_m^3 + \dots \end{aligned}$$

Коэффициенты уравнения определяются методом наименьших квадратов и не имеют статистической трактовки. Наибольшие трудности вызывает выбор порядков полинома по каждой из переменных, а также вычисление определителя плохо обусловленной матрицы, часто встречающееся при нахождении коэффициентов уравнения. Поэтому целесообразно при построении модели нелинейной множественной регрессии применять нейронные сети.

## 8. ЭКСПЕРТНЫЕ ОЦЕНКИ

Когда нет возможности определить значения тех или иных параметров экспериментально или выбрать из ранее зарегистрированных данных, приходится полагаться на субъективные оценки. В подобных случаях чаще всего желательно воспользоваться мнением коллектива экспертов, а не отдельного лица. Такой коллектив должен состоять из специалистов, обладающих глубокими знаниями моделируемого процесса и по возможности облечённых правом принимать ответственные решения. Выявление индивидуальных точек зрения и формирование на их основе единого мнения коллектива экспертов можно осуществлять несколькими методами, но, пожалуй, самым полезным из них является метод Дельфы [7]. Это итерационная процедура, которая позволяет подвергать мнению каждого

эксперта критике со стороны всех остальных, не заставляя их фактически сталкиваться лицом к лицу. Идея метода заключается в том, чтобы создать механизм, обеспечивающий сохранение анонимности точек зрения отдельных лиц и тем самым свести к минимуму влияние красноречивых и обладающих даром убеждать личностей на поведение группы в целом. Все взаимодействия между членами группы находятся под контролем со стороны координатора или руководящего звена, направляющего всю деятельность группы. Групповая оценка вычисляется им путём некоторого усреднения (обычно посредством нахождения среднего значения или медианы) и доводится до сведения всех членов группы.

Рассмотрим в качестве примера задачу определения значения некоторого числа  $N$ . Пусть в группе экспертов будет 12 членов. Метод Дельфы предполагает следующий способ действий.

1. Опросить каждого члена группы по отдельности, какова его оценка числа  $N$ .

2. Разложить ответы на общей шкале в порядке возрастания значений и определить квартили  $Q_1$ ,  $M$ ,  $Q_3$  таким образом, чтобы в каждом из четырёх отрезков шкалы содержалась четвёртая часть всех оценок.

3. Сообщить каждому из членов группы значения  $Q_1$ ,  $M$  и  $Q_3$  и попросить его пересмотреть свою оценку, а если его новая оценка ниже  $Q_1$  или выше  $Q_3$ , попросить его кратко обосновать своё мнение.

4. Подсчитать результаты второго тура и сообщить членам группы новые значения  $Q_1$ ,  $M$  и  $Q_3$  (обычно эти значения будут иметь меньшую дисперсию, чем после первого тура) вместе с письменными обоснованиями предельных значений (сохраняя при этом анонимность мнений). Попросить каждого из представивших письменные ответы учесть новые данные и аргументацию и при желании пересмотреть свою предыдущую оценку. Если в этом третьем туре пересмотренная оценка у данного члена группы будет ниже  $Q_1$  или выше  $Q_3$ , попросить его кратко обосновать, почему он счёл не заслуживающими внимания аргументы, которые могли бы его заставить сместить свою оценку ближе к средней.

5. Повторять эту процедуру столько раз, сколько представляется желательным координатору, или пока промежутки между  $Q_1$  и  $Q_3$  сузятся до некоторой заранее установленной величины. Для этого обычно требуется всего три или четыре тура, поскольку аргументы скоро начинают повторяться. Далее берётся медиана как представляющая групповое мнение относительно того, каким должно быть значение  $N$ .

Возможны и другие варианты метода Дельфы. Этот метод, предполагающий анонимность мнений, итеративную процедуру обработки результатов, управляемую обратную связь, числовые оценки и статистическое определение групповой оценки, может стать ценным инструментом исследования для разработчиков имитационных моделей.



## 9. АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

Аналитическая модель технологического объекта обычно состоит из четырёх групп уравнений: 1) материального и теплового баланса; 2) гидродинамики потоков; 3) термодинамического равновесия (для отсчёта движущей силы процесса); 4) скоростей протекающих процессов (химических реакций, тепло- и массопередачи и др.). Уравнения второй и, особенно часто, третьей группы могут входить в математическую модель неявно.

Методика построения аналитического описания статики и динамики технологических объектов включает следующие этапы [3]:

1. *Изучение объекта.* На данном этапе производится ознакомление с конструкцией технологического объекта и изучение протекающих в нём физико-химических процессов (химического превращения, диффузии, теплопередачи и др.).

2. *Составление структурной схемы объекта.* Исследуемый объект условно разделяется на ряд подсистем. В качестве подсистем в технологических объектах обычно выделяют звенья, которые и являются повторяющимися элементами конструкции аппарата (например, царга колонного аппарата, тарелка в ректификационной колонне, реактормешалка в каскаде реакторов и т.п.), или отличаются от других звеньев типом лимитирующего процесса, или конструктивно представляют самостоятельную часть установки. Следует понимать, что «глубина» декомпозиции объекта на звенья зависит от уровня наших знаний о процессах, реальной возможности определения неизвестных параметров, возможности решения полученных систем уравнений, целевого назначения математических моделей статики и динамики.

С проблемой рациональной декомпозиции технологического объекта на звенья тесно связана задача принятия системы допущений. В общем случае обсуждаются и затем принимаются или отвергаются следующие важнейшие допущения: о стационарности процессов в звене; о сосредоточенности или распределённости параметров; об (не)учёте тех или иных физико-химических явлений, имеющих место в данном звене.

В целом вся система допущений направлена, как правило, на упрощение и обоснование принятой структурной схемы исследуемого объекта. Допущения представляют компромисс между требуемой и желаемой точностью описания статических и динамических свойств объекта и возможностью как количественной оценки физико-химических явлений, так и решения получающихся уравнений математического описания.

3. *Составление математического описания отдельных звеньев.* Для бесконечно малых объёма звена и промежутка времени записываются уравнения теплового и материального баланса в интегральной форме. Затем с помощью теорем «о среднем» и «конечных приращений» осуществляется переход к дифференциальной форме [8]. В математическое описа-

ние звена входят граничные условия для дифференциальных уравнений и связи с другими, соседними, звеньями – для конечных уравнений.

4. *Определение параметров модели звена.* Для нахождения коэффициентов и других параметров уравнений необходимо знать физико-химические свойства перерабатываемых веществ, константы скоростей химических реакций, коэффициенты диффузии, теплопередачи и т.д. Разумеется, необходимо знать все определяющие геометрические размеры звеньев.

Часть интересующей нас информации можно найти в соответствующей технической и научной литературе, для определения же некоторых коэффициентов и констант требуется постановка специальных лабораторных исследований.

5. *Составление и анализ уравнений модели всего технологического объекта.*

В математическое описание всего объекта входят уравнения отдельных звеньев и связей между ними, граничные и начальные условия, а также ограничения на диапазоны изменения входных и выходных переменных.

6. *Выбор методов и разработка вычислительных алгоритмов решения уравнений математической модели.*

7. *Оценка точности математического описания объекта.* Точность описания статических и динамических свойств объекта аналитически составленными уравнениями может оцениваться величиной одного из приведённых ниже показателей:

$$\Phi = \frac{1}{nd} \sum_{i=1}^n \sum_{\beta=1}^d (y_{i\beta} - y_{i\beta}^3)^2 \cdot \omega_{i\beta}; \quad \Phi = \int_0^{t_1} \sum_{i=1}^n \sum_{\beta=1}^d |y_{i\beta}(t) - y_{i\beta}^3(t)|^2 \cdot \omega_{i\beta} dt,$$

где  $\omega_{i\beta}$  – весовые множители

Для вычисления  $\Phi_1, \Phi_2$  на объекте проводится активный или пассивный эксперимент, заключающийся в регистрации  $d$  различных значений входных и соответствующих им установившихся значений (статика) или переходных процессов (динамика) выходных  $y_{i\beta}^3$  переменных. Желательно, чтобы независимые переменные варьировались во всем диапазоне, допустимом технологическим регламентом. Весовые множители  $\omega_{i\beta}$  вводятся в функцию невязки для создания возможности сравнения разнородных переменных при неравноточных их измерениях. Чем больше погрешность измерения  $y_{i\beta}^3$ , тем меньше выбирается множитель  $\omega_{i\beta}$ . В практических задачах далеко не всегда известны ошибки измерения  $y_{i\beta}^3$ , что делает невозможным объективный выбор весовых множителей.

При достаточно больших значениях  $\Phi_1, \Phi_2$  математическое описание считается не адекватным объекту. В этом случае требуется изменение

структурной схемы объекта, т.е. включение в рассмотрение новых звеньев, либо уточнение отдельных «сомнительных» параметров уравнений. Эта операция может осуществляться постановкой дополнительных лабораторных опытов.

Вопрос о том, при каком «критическом» значении  $\Phi_1, \Phi_2$  считать математическое описание адекватным объекту, а при каком требовать уточнения уравнений, является исключительно сложным и, вероятно, не имеет однозначного ответа. Выбор такого «критического» значения функций невязок  $\Phi_1, \Phi_2$  тесно связан с целевым назначением математического описания, а также с представительностью выборки  $y_{i\beta}^3$ . В частном случае, когда  $y_{i\beta}^3$  – независимые случайные величины (процессы), для оценки случайного (неслучайного) характера расхождений между решениями уравнений модели и опытными данными могут быть использованы статистические критерии значимости и согласия [4].

## **10. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОТОКОВ В ТЕХНОЛОГИЧЕСКОМ АППАРАТЕ**

Математические модели структуры потоков в технологическом аппарате являются основой, на которой строится математическое описание любого технологического процесса [10]. Однако точное описание реальных потоков (например, с помощью уравнения Навье–Стокса) приводит к чрезвычайно трудным для постановки и решения задачам. Поэтому разработанные к настоящему времени модели структуры потоков в аппаратах носят полумпирический характер. Тем не менее, они позволяют получить модели, с достаточной для практики точностью отражающие физические процессы.

При осуществлении технологических процессов необходимо знать степень полноты их завершения, которая зависит от времени пребывания частиц (элементов, долей) потока в аппарате, которое, разумеется, неравномерно и имеет стохастическую природу. Наиболее существенными источниками неравномерности распределения частиц потока по их времени пребывания в промышленных аппаратах являются: 1) неравномерность профиля скоростей потока; 2) турбулизация потоков; 3) наличие застойных областей в аппарате; 4) каналообразование, байпасные и перекрестные токи в аппарате; 5) температурные градиенты движущихся сред (потоков); 6) тепло- и массообмен между фазами и т.п.

Для процессов массопередачи описание структуры потоков в аппаратах важно ещё и потому, что позволяет установить перемещение и распределение веществ, находящихся в этих потоках. Поэтому все уравнения гидродинамических моделей потоков составляются преимущественно относительно изменения концентрации вещества в потоке.

**Экспериментальный (импульсный) метод исследования структуры потоков в аппарате.** Сущность экспериментального метода исследования структуры потоков в реальном аппарате заключается в том, что в поток на входе его в аппарат каким-либо способом вводят индикатор, а на выходе потока из аппарата регистрируют изменение концентрации индикатора в зависимости от времени. Полученную таким образом функцию отклика аппарата на ввод индикатора (типовое возмущение по составу потока) обрабатывают по специальной методике и получают нормированную функцию распределения частиц (элементов, долей) потока по их времени пребывания в технологическом аппарате, которую в дальнейшем используют в расчётах технологических процессов и аппаратов или для построения близкой к реальной гидродинамической модели, составленной из комбинации типовых моделей гидродинамики (идеального смешения и вытеснения, диффузионной модели, ячеечной модели и т.п.).

Если принятая модель соответствует реальной структуре потоков, то экспериментальная функция отклика может рассматриваться как график решения уравнений модели при соответствующих начальных и граничных условиях. Сравнивая решение уравнений модели с экспериментальной функцией отклика на типовые (например, импульсные) возмущения, можно определить неизвестные параметры модели.

В качестве индикаторов используют растворы солей и кислот, изотопы, реже красители и другие вещества, которые не вступают во взаимодействие с веществами основного потока и могут быть измерены с помощью приборов. Ввод индикаторов осуществляют в виде стандартных сигналов: импульсного, ступенчатого, циклического и т.п.

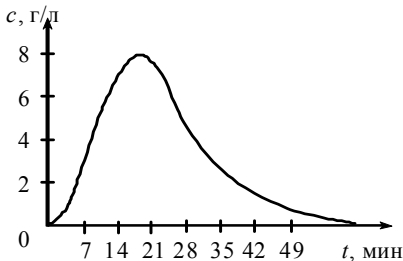
Рассмотрим импульсный метод исследования структуры потока в аппарате, в соответствии с которым определённое количество индикатора на входе в аппарат вводят в виде дельта-функции.

Определение. Импульсной  $\delta$ -функцией называется функция, равная нулю всюду, кроме начала координат, принимающая бесконечное значение в начале координат, и при этом интеграл от неё равен единице:

$$\delta(t) = \begin{cases} 0 & \text{при } t \neq 0; \\ \infty & \text{при } t = 0; \end{cases} \quad \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(t) dt = 1 \text{ при любом } \varepsilon > 0.$$

Предположим, что с помощью специального устройства в поток на входе в аппарат практически мгновенно ввели определённое количество  $q$  индикатора и определили (с помощью регистрирующего прибора) функцию отклика на это импульсное возмущение, изображённую на рис. 13.

Построим экспериментальную кривую  $C^0(t)$  в координатах  $C(\theta) - \theta$ , где  $\theta = \frac{t}{\bar{t}}$  – безразмерное время;  $\bar{t}$  – среднее время пребывания элементов потока в аппарате. Для этого необходимо вначале определить нормиро-



**Рис. 13. Типичная функция отклика аппарата на импульсное возмущение**

Получив таким образом нормированную  $C$ -кривую (ПРВП элементов потока), мы теперь фактически можем распределить всю совокупность элементов (долей) потока по их времени пребывания в аппарате. В самом деле, доля потока, время пребывания которой в аппарате изменяется

от  $\theta$  до  $\theta + \Delta\theta$ , равна величине  $\int_{\theta}^{\theta+\Delta\theta} C(\theta)d\theta$ . Естественно, что

$$\int_0^{\infty} C(\theta)d\theta = 1.$$

Всё многообразие структур потоков в аппарате можно формализовать с помощью тех или иных комбинаций типовых математических моделей: идеального смешения, идеального вытеснения, диффузионной, ячеистой, комбинированной и т.п. Рассмотрим эти модели более подробно.

**Модель идеального смешения.** Модель идеального смешения соответствует гидродинамике аппарата, в котором поступающий в него индикатор мгновенно распределяется по всему его объёму, т.е. в каждой точке аппарата и на выходе из него концентрации индикатора будут равны.

Уравнение модели идеального смешения представляет собой дифференциальное уравнение первого порядка

$$V \frac{dc}{dt} = G(c^{\text{вх}} - c) \quad (10.1)$$

с начальным условием

$$c(0) = c_{\text{н}} = \frac{q}{V}, \quad (10.2)$$

ванную  $C$ -кривую по формуле

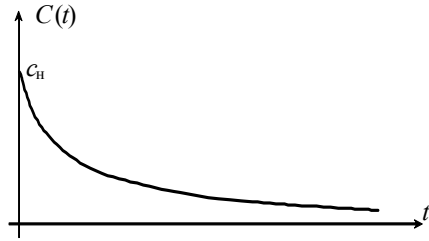
$$C(t) = \frac{C^3(t)}{\int_0^{\infty} C^3(t)dt}$$

$$C(\theta) = C(t) \cdot \bar{t}.$$

Среднее время пребывания элементов потока в аппарате представляет собой случайную величину и по определению его можно вычислить следующим образом:

$$\bar{t} = \int_0^{\infty} tC(t)dt.$$

где  $V$  – объём аппарата;  $c^{\text{вх}}$  – концентрация индикатора в потоке на входе в аппарат;  $G$  – объёмная скорость (расход) потока, поступающего и выходящего из аппарата идеального перемешивания;  $q$  – количество мгновенно введённого индикатора в поток на входе в аппарат;  $c$  – концентрация индикатора в аппарате (зона идеального перемешивания) и на выходе из него.



**Рис. 14. Функция отклика аппарата при идеальном перемешивании входящего в него потока**

При импульсном вводе индикатора он мгновенно распределяется по всему объёму аппарата и начинается его «вымывание», при этом начальная концентрация индикатора в аппарате равна  $c_n = q/V$ . Отклик модели идеального смешения на импульсное возмущение (решение дифференциального уравнения (10.1) с начальным условием (10.2)) соответствует убывающей экспоненциальной зависимости (см. рис. 14) и имеет вид:

$$c(t) = c_n e^{-t/\bar{t}}.$$

**Модель идеального вытеснения.** В основе модели идеального вытеснения лежит допущение о поршневом течении потока без перемешивания в продольном направлении при равномерном распределении индикатора в направлении, перпендикулярном движению. Время пребывания всех элементов потока в таком (например, трубчатом) аппарате одинаково.

Уравнение модели идеального вытеснения записывается в виде дифференциального уравнения с частными производными

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vartheta \frac{\partial c}{\partial \ell} = 0, \quad (10.3)$$

решение которого должно удовлетворять начальному условию

$$c(0, \ell) = c_n(\ell) \quad \text{при} \quad t = 0, \quad 0 \leq \ell \leq L \quad (10.4)$$

и граничному условию

$$c(t, 0) = c^{\text{вх}}(t) = \frac{q}{V} \cdot \delta(t) \quad \text{при} \quad x = 0, \quad t > 0. \quad (10.5)$$

Отклик модели идеального вытеснения на импульсное возмущение (решение дифференциального уравнения (10.3) с условиями (10.4), (10.5)) приведён на рис. 15 и имеет вид:

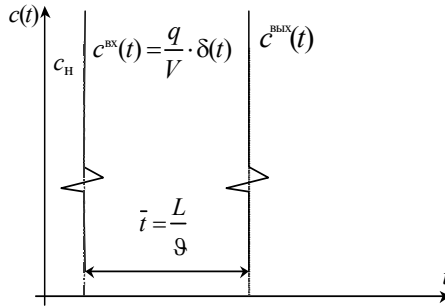


Рис. 15. Отклик модели идеального вытеснения на импульсное возмущение

$$c^{\text{вых}}(t) = c(t, L) = \begin{cases} c_н(L - t9), & t < \frac{L}{9}; \\ c^{\text{вх}}(t - \frac{L}{9}), & t \geq \frac{L}{9}. \end{cases}$$

Из решения следует, что любое изменение концентрации индикатора на входе в аппарат идеального вытеснения появляется на его выходе через время, равное среднему времени пребывания  $\bar{t} = \frac{L}{9}$ , где  $L$  – длина аппарата;

$9$  – скорость потока.

**Диффузионная модель.** В основе диффузионной модели лежит допущение о том, что структура потоков в аппарате описывается уравнением, аналогичным уравнению молекулярной диффузии. Основой данной модели служит модель идеального вытеснения, осложнённая обратным перемешиванием, описываемым формальным законом диффузии.

При составлении однопараметрической диффузионной модели принимаются следующие допущения: изменение концентрации субстанции является непрерывной функцией координаты (расстояния); концентрация субстанции в данном сечении постоянна; объёмная скорость потока и коэффициент продольного перемешивания не изменяются по длине и сечению потока. При таких допущениях уравнение диффузионной модели представляет дифференциальное уравнение с частными производными параболического типа

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -9 \frac{\partial c}{\partial l} + D_l \frac{\partial^2 c}{\partial l^2}. \quad (10.6)$$

Уравнение (10.6) отличается от уравнения (10.3) введением дополнительного члена  $D_\ell \frac{\partial^2 c}{\partial \ell^2}$ , учитывающего турбулентную диффузию или перемешивание.

*Вывод уравнения (10.6).* Согласно закону Нернста масса вещества  $dq$ , протекающего через сечение  $\ell$  за промежуток времени  $(t, t + \Delta t)$ , равна

$$dq = -D_\ell \frac{\partial c(x, t)}{\partial \ell} S dt,$$

где  $S$  – площадь поперечного сечения аппарата. По определению концентрации, количество вещества  $q$  с концентрацией  $c$  в объеме  $V$  равно

$$q = cV,$$

отсюда получаем, что изменение массы вещества на участке аппарата  $(\ell_1, \ell_2)$  при изменении концентрации на  $\Delta c$  равно

$$\Delta q = \int_{\ell_1}^{\ell_2} \Delta c S d\ell.$$

Составим уравнение баланса массы вещества на участке  $(\ell_1, \ell_2)$  за промежуток времени  $(t_1, t_2)$ :

$$\begin{aligned} S \cdot \int_{t_1}^{t_2} \left[ D_\ell(\ell_2) \cdot \frac{\partial c(\ell_2, t)}{\partial \ell} - D_\ell(\ell_1) \cdot \frac{\partial c(\ell_1, t)}{\partial \ell} \right] dt - \\ - S \int_{t_1}^{t_2} [c(\ell_2, t) - c(\ell_1, t)] dt = S \cdot \int_{\ell_1}^{\ell_2} [c(\ell, t_2) - c(\ell, t_1)] d\ell, \end{aligned} \quad (10.7)$$

которое представляет собой уравнение диффузии в интегральной форме.

Чтобы получить уравнение диффузии в дифференциальной форме, предположим, что функция  $c(\ell, t)$  имеет непрерывные производные  $c_{\ell\ell}$ ,  $c_t$ . Требуя дифференцируемости функции  $c(\ell, t)$ , мы можем потерять ряд возможных решений, удовлетворяющих дифференциальному уравнению. Однако в случае уравнений диффузии и теплопроводности мы фактически не теряем возможных решений, так как можно доказать, что если функция удовлетворяет уравнению (10.7), то она обязательно должна быть дифференцируема.

Пользуясь теоремой о среднем, получаем равенство



$$\left[ D_\ell \cdot \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial l} \Big|_{\ell=\ell_2} - D_\ell \cdot \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial l} \Big|_{\ell=\ell_1} \right]_{t=t^1}^{t=t^2} \Delta t -$$

$$- \left[ \mathfrak{G} \cdot (c(\ell, t)|_{\ell=\ell_2} - c(\ell, t)|_{\ell=\ell_1}) \right]_{t=t^2}^{t=t^1} \cdot \Delta t = [c(\ell, t_2) - c(\ell, t_1)]_{\ell=\ell^1} \cdot \Delta \ell,$$

$t^2 \in (t_1, t_2) \qquad \qquad \qquad t^1 \in (t_1, t_2)$   $\ell^1 \in (\ell_1, \ell_2)$

которое с помощью теоремы о конечных приращениях можно преобразовать к виду

$$\frac{\partial}{\partial \ell} \left[ D_\ell \cdot \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial l} \right]_{\ell=\ell^2}^{t=t^1} \cdot \Delta t \cdot \Delta \ell - \left[ \mathfrak{G} \cdot \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial \ell} \right]_{\ell=\ell^3}^{t=t^2} \times$$

$\ell^2 \in (\ell_1, \ell_2) \qquad \qquad \qquad \ell^3 \in (\ell_1, \ell_2)$

$$\times \Delta t \cdot \Delta \ell = \left[ \frac{\partial c}{\partial t} \right]_{t=t^1}^{t=t^3} \cdot \Delta t \cdot \Delta \ell,$$

$t^3 \in (t_1, t_2)$

где  $t^1, t^2, t^3, \ell^1, \ell^2, \ell^3$  – промежуточные точки интервалов  $(t_1, t_2)$  и  $(\ell_1, \ell_2)$ .

Отсюда после сокращения на произведение  $\Delta t \cdot \Delta \ell$  находим:

$$\frac{\partial}{\partial \ell} \left[ D_\ell \cdot \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial l} \right]_{\ell=\ell^2}^{t=t^1} - \mathfrak{G} \cdot \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial \ell} \Big|_{\ell=\ell^3}^{t=t^2} = \frac{\partial c}{\partial t} \Big|_{\ell=\ell^1}^{t=t^3}.$$

Все наши рассуждения относились к произвольным интервалам  $(t_1, t_2)$  и  $(\ell_1, \ell_2)$ . Переходя к пределу при  $\ell_1, \ell_2 \rightarrow \ell$  и  $t_1, t_2 \rightarrow t$ , получим дифференциальное уравнение диффузии:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\mathfrak{G} \cdot \frac{\partial c}{\partial \ell} + D_\ell \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial \ell^2}. \tag{10.8}$$

Далее остановимся на начальных и граничных условиях. В качестве начального условия обычно задаётся профиль концентрации индикатора по длине аппарата в начальный момент времени:

$$c(0, \ell) = c_n(\ell) \text{ при } t = 0. \tag{10.9}$$

Граничные условия обычно задают из условия выполнения материальных балансов на концах аппарата (условия по Данквертсу). Рассмотрим левый конец трубчатого аппарата, в который поступает поток с некоторой средней скоростью  $\mathfrak{G}$  (рис. 16). Сумма потоков веществ, подходя-

щих к границе  $\ell = 0$ , должна быть равна потоку вещества, отходящего от границы, т.е.

$$\begin{aligned} \vartheta c^{\text{BX}} + D_\ell \frac{dc}{d\ell} &= \vartheta c, \quad \text{или} \\ \vartheta(c^{\text{BX}} - c) + D_\ell \frac{dc}{d\ell} &= 0. \end{aligned} \quad (10.10)$$

Аналогично для правого конца аппарата имеем:

$$\vartheta(c - c^{\text{ВЫХ}}) = D_\ell \frac{dc}{d\ell}, \quad (10.11)$$

На практике часто принимают  $c \approx c^{\text{ВЫХ}}$ . С учётом этого граничное условие (10.11) примет вид:

$$\frac{dc}{d\ell} = 0. \quad (10.12)$$

Условия (10.10) – (10.12) называются граничными условиями по Данквертсу.

Наряду с рассмотренной выше однопараметрической диффузионной моделью используется двухпараметрическая диффузионная модель. Отличие её состоит в том, что перемешивание потока учитывается как в продольном, так и в радиальном направлениях. Параметрами модели являются коэффициенты продольного  $D_\ell$  и радиального  $D_r$  перемешивания. Будем считать, что коэффициенты  $D_\ell$  и  $D_r$  не изменяются по длине и сечению аппарата, а скорость потока постоянна. В этом случае уравнение двухпараметрической диффузионной модели при движении потока в аппарате цилиндрической формы имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\vartheta \cdot \frac{\partial c}{\partial \ell} + D_\ell \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial \ell^2} + \frac{D_r}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left( r \cdot \frac{\partial c}{\partial r} \right) \quad (10.13)$$

с начальным и граничным условиями, например:

$$c(0, \ell, r) = 0 \quad \text{при } t = 0, \quad (10.14)$$

$$c(t, 0, 0) = c_0 \delta(0) \quad \text{при } \ell = 0, r = 0, \quad (10.15)$$

$$\frac{\partial c(t, \ell, R)}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = R, \quad (10.16)$$

$$\vartheta \cdot c(t, 0, r) - D_\ell \frac{\partial c(t, 0, r)}{\partial \ell} = 0 \quad \text{при } \ell = 0, \quad (10.17)$$

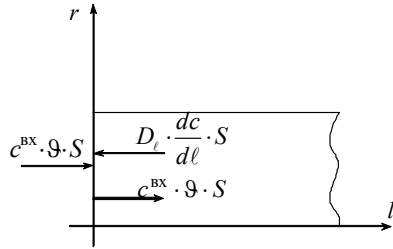


Рис. 16. Схема потоков у левого конца аппарата

$$\frac{\partial c(t, L, r)}{\partial \ell} = 0 \text{ при } \ell = L. \quad (10.18)$$

**Ячеечная модель** впервые предложена для описания гидродинамики каскада реакторов с мешалками. При её построении поток условно разбивают на ряд последовательно соединённых между собой зон (ячеек) (рис. 17).

Сделаем следующие допущения: 1) в каждой ячейке осуществляется идеальное перемешивание; 2) между ячейками отсутствует обратное перемешивание.

В этом случае параметром ячейечной модели служит число ячеек  $N$  идеального перемешивания: с увеличением  $N$  структура потока в аппарате приближается к гидродинамической модели идеального вытеснения, а с уменьшением  $N$  – к модели идеального смешения.

Запишем уравнения материального баланса для каждой из ячеек:

$$V_i \frac{dc_i}{dt} = G(c_{i-1} - c_i), \quad i = 1, 2, 3, \dots, \quad c_0 = c^{\text{BX}}. \quad (10.19)$$

Соответствующие начальные условия для системы уравнений (10.19) имеют вид:

$$c_1 = c_{1\text{H}}; c_2 = c_{2\text{H}}, \dots, c_N = c_{N\text{H}} \text{ при } t = 0. \quad (10.20)$$

Рассмотрим отклики ячейечной модели гидродинамики аппарата на импульсное возмущение.

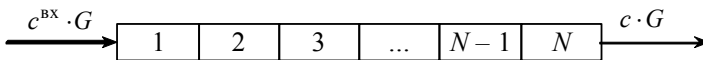
**Первая ячейка.** Концентрация индикатора  $c^{\text{BX}}$  на входе в аппарат при импульсном возмущении равна нулю. В этом случае уравнение модели примет вид

$$V_1 \frac{dc_1}{dt} = -Gc_1$$

$$\text{или } t_1 \frac{dc_1}{dt} = -c_1, \text{ где } t_1 = \frac{V_1}{G}, \quad c_1(0) = c_{1\text{H}}.$$

Его решение можно записать в виде

$$c_1 = c_{1\text{H}} e^{-t/t_1}.$$



**Рис. 17. Схема ячейечной модели гидродинамики аппарата:**

$c^{\text{BX}}$ ,  $c$  – концентрации на входе и выходе из аппарата;  
 $G$  – объёмный расход вещества через аппарат

**Вторая ячейка.** Входом во вторую ячейку является выход из первой ячейки, т.е.  $c_2^{\text{вх}} = c_{1\text{н}} e^{-t/\bar{t}_1} - c_2$ . Тогда для второй ячейки модель гидродинамики записывается в виде

$$\bar{t}_2 \frac{dc_2}{dt} = c_{1\text{н}} e^{-t/\bar{t}_1} - c_2; \quad c_2(0) = 0.$$

Получим решение этого дифференциального уравнения. Вначале решаем соответствующее однородное уравнение

$$\bar{t}_2 \frac{dc_2}{dt} = -c_2,$$

которое после разделения переменных примет вид

$$c_2(t) = A(t) e^{-t/\bar{t}_2}.$$

Для нахождения неизвестного множителя  $A(t)$  подставим полученное решение однородного уравнения в исходное уравнение модели.

$$\bar{t}_2 \left[ A(t) e^{-t/\bar{t}_2} - \frac{A(t)}{\bar{t}} e^{-t/\bar{t}_2} \right] = c_{1\text{н}} e^{-t/\bar{t}_1} - A(t) e^{-t/\bar{t}_2}.$$

После приведения подобных членов приходим к дифференциальному уравнению относительно  $A(t)$ :

$$\bar{t}_2 \frac{dA(t)}{dt} = c_{1\text{н}}.$$

Его решение можно записать в виде

$$A(t) = \frac{c_{1\text{н}}}{\bar{t}_2} t + k.$$

Учитывая начальное условие:

$$c_2(0) = A(0) \cdot e^{-0/\bar{t}_2} = A(0) = \frac{c_{1\text{н}}}{\bar{t}_2} \cdot 0 + k = 0.$$

Получаем  $k = 0$ , и решение исходной задачи примет вид

$$c_2(t) = c_{1\text{н}} \frac{t}{\bar{t}_2} e^{-t/\bar{t}_2}.$$

Аналогичные решения можно получить для третьей, четвертой, ...,  $N$ -й ячейки. Функция отклика  $N$ -й ячейки, представляющая общую функцию отклика ячеечной модели, описывается выражением вида:

$$c_N(t) = c_{1н} \left( \frac{t}{\bar{t}_N} \right)^{N-1} \frac{1}{(N-1)!} e^{-t/\bar{t}_N}.$$

Вводя безразмерные концентрацию  $c = \frac{c_N}{c_{1Н}}$  и время  $\tau = \frac{t}{\bar{t}}$ , функцию отклика можно представить в безразмерном виде:

$$c(\tau) = \frac{N^N \tau^{N-1}}{(N-1)!} e^{-N\tau}.$$

**Ячеечная модель с обратными потоками (рециркуляционная модель).** Более адекватное воспроизведение структуры потоков в реальном аппарате обеспечивает рециркуляционная модель. Физическая сущность понятия рециркуляционной модели заключается в том, что поток разбивается на ряд последовательно соединённых ячеек идеального перемешивания с обратными потоками (рис. 18).

Величина  $g/G$  называется долей обратного потока и обозначается через  $f$ .

С учётом введённых обозначений система дифференциальных уравнений рециркуляционной модели можно записать в следующем виде:

$$\bar{t}_1 \frac{dc_1}{dt} = c^{БХ} + fc_2 - (1+f)c_1;$$

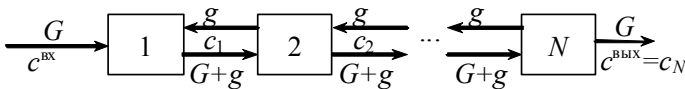
...

$$\bar{t}_i \frac{dc_i}{dt} = (1+f)c_{i-1} + fc_{i+1} - (1-2f)c_i; \quad (10.21)$$

$$\bar{t}_N \frac{dc_N}{dt} = (1+f)c_{N-1} + (1+f)c_N;$$

$$c_1 = c_{1н}, \dots, c_j = c_{jн}, \dots, c_N = c_{Nн} \text{ при } t=0. \quad (10.22)$$

Система дифференциальных уравнений (10.21), (10.22) при  $f \rightarrow 0$  переходит в ячейечную модель, а при  $f, N \rightarrow \infty$  – в диффузионную модель.



**Рис. 18.** Схема потоков в соответствии с рециркуляционной моделью:

$G$  – объёмный расход вещества через аппарат;

$g$  – обратный поток индикатора в аппарате

**Комбинированные модели.** При описании движения потоков в промышленных технологических аппаратах может случиться, что ни одна из вышеперечисленных гидродинамических моделей не позволит адекватно воспроизвести свойства потока. В таких случаях используются сложные гидродинамические комбинированные модели. В основу комбинированных моделей положены идеальные модели с добавлением застойных зон, байпасирования и рециркуляции отдельных частей потоков. Естественно, что математическое описание процесса существенно усложняется, однако за счёт этого удаётся получить необходимую точность воспроизведения свойств объекта моделирования.

Выражение «застойная зона» – условное понятие. Обычно к этим зонам относятся объёмы аппарата, в которых среднее время пребывания индикатора в 3 – 10 и более раз превышает среднее время пребывания элементов основного потока. Например, в насадочных массообменных аппаратах такие области представляют собой мёртвые зоны, т.е. практически нерабочие объёмы аппарата.

С другой стороны, если среднее время пребывания некоторой части элементов потока составляет 0,1 – 0,3 от времени пребывания основного потока, то считается, что в аппарате имеется байпасный поток. В основе обоих типов неравномерности (неоднородности) времени пребывания элементов потока лежит, по существу, одно и то же физическое явление – движение отдельных частей потока, обособленных друг от друга различными объёмными скоростями.

Рассмотрим явление рециркуляции потока с выхода на вход аппарата (рис. 19).

Составим уравнение материального баланса для узла  $S$ :

$$c^{BX}G + cG_r = c'(G + G_r).$$

Применим к последнему уравнению преобразование Лапласа:

$$G + L\{c\}G_r = L\{c'\}(G + G_r).$$

Обозначим отношение расхода рециркуляционного потока  $G_r$  к основному  $G$  через  $R$ . Тогда разделив последнее уравнение на  $L\{c\}G$ , получим

$$\frac{1}{L\{c\}} + R = (1 + R) \frac{L\{c'\}}{L\{c\}}. \quad (10.23)$$

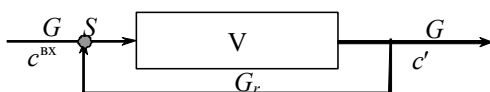


Рис. 19. Структура потока в аппаратуре с рециркуляцией

Отношение  $\frac{L\{c'\}}{L\{c\}}$  при нулевых начальных условиях представляет собой передаточную функцию  $W(p)$  аппарата без учёта рецикла. Предположим, что эта передаточная функция соответствует модели идеального смешения.

$$W(p) = \frac{1}{1 + \bar{t}p},$$

где  $\bar{t}$  – среднее время пребывания элементов потока без учёта рециклов.

Тогда уравнение (10.23) переписется в виде

$$\frac{1}{L\{c\}} + R = (1 + R)(1 + \bar{t}p), \quad \text{откуда}$$

$$L\{c\} = \frac{1}{(1 + R)(1 + \bar{t}p) - R} = \frac{1}{1 + (1 + R)\bar{t}p}.$$

Для импульсного возмущения на входе передаточная функция аппарата с рециклом  $W_r(p)$  равна  $L\{c\}$ , следовательно:

$$W_r(p) = \frac{1}{1 + (1 + R)\bar{t}p}.$$

Определим среднее время пребывания  $\bar{t}_r$  и дисперсию  $\sigma^2$  функции отклика аппарата с рециклом, используя передаточную функцию  $W_r(p)$ . Запишем выражение для первого начального момента нормированной  $S$ -кривой:

$$M_1^t = \bar{t}_r = -W_r'(p=0) = (1 + R)\bar{t}.$$

Таким образом, среднее время пребывания в аппарате с рециклом в  $(1 + R)$  раз больше среднего времени пребывания при отсутствии рецикла.

**Комбинированные модели, составленные из последовательно соединённых моделей идеального смешения и идеального вытеснения.** В такой комбинированной системе можно выделить два варианта соединения моделей (рис. 20)

Оценим, как влияет порядок соединения моделей на отклик системы на ступенчатое возмущение? Рассмотрим следующий пример. Пусть в аппарате протекает химическая реакция  $A \xrightarrow{k} B$  первого порядка со скоростью:

$$\frac{dc}{dt} = -kc,$$

где  $c$  – концентрация вещества  $A$ .

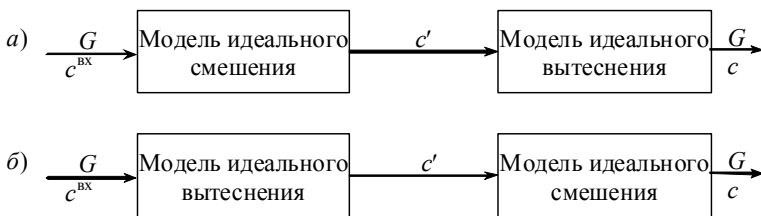


Рис. 20. Комбинированные модели

Сравним концентрации вещества  $A$  на выходе аппарата, модель гидродинамики которого представлена на рис. 20 а, б.

Рассмотрим комбинированную систему на рис. 20, а. Для зоны идеального смешения имеем

$$V_{\text{см}} \frac{dc'}{dt} = G(c' - c^{\text{BX}}),$$

где  $V_{\text{см}}$  – объём зоны идеального смешения, и

$$-V_{\text{см}} kc' = G(c' - c^{\text{BX}}).$$

Следовательно, концентрация вещества  $A$  на выходе из зоны идеального смешения составит

$$c' = \frac{c^{\text{BX}}}{1 + \frac{kV_{\text{см}}}{G}} = \frac{c^{\text{BX}}}{1 + k\bar{t}_{\text{см}}}.$$

В зоне идеального вытеснения изменение концентрации описывается уравнением вида

$$\vartheta \frac{dc}{dl} = -kc,$$

где  $\vartheta$  – линейная скорость движения потока в аппарате.

Интегрируя левую часть уравнения в пределах от  $c'$  до  $c$  по концентрации и от 0 до  $L$  по координате  $l$  ( $L$  – длина зоны вытеснения), получим

$$c = c' e^{-k\bar{t}_{\text{выт}}}, \text{ где } \bar{t}_{\text{выт}} = \frac{L}{\vartheta}.$$

Таким образом, концентрация  $c$  на выходе комбинированной системы «идеальное смешение – идеальное вытеснение» выражается формулой:

$$c = \frac{c^{\text{BX}} e^{-k\bar{t}_{\text{выт}}}}{1 + k\bar{t}_{\text{см}}}.$$

Рассмотрим теперь комбинированную систему на рис. 20, б. Здесь концентрация  $c'$  в зоне идеального вытеснения определяется уравнением



$$\vartheta \frac{dc'}{dl} = -kc',$$

решение которого имеет вид

$$c' = c^{\text{BX}} e^{-k\bar{t}_{\text{ВЫТ}}}.$$

В зоне идеального смешения изменение концентрации составляет

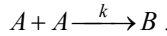
$$V_{\text{CM}}kc = G(c' - c),$$

откуда следует

$$c = \frac{c^{\text{BX}} e^{-k\bar{t}_{\text{ВЫТ}}}}{1 + k\bar{t}_{\text{CM}}}.$$

Таким образом, для химических реакций первого порядка (с линейной кинетикой) концентрация веществ на выходе комбинированных систем (рис. 20, *a*, *б*) одна и та же и, следовательно, порядок следования моделей (зон идеального смешения и вытеснения) не оказывает влияния на протекание процесса.

Рассмотрим осуществление химической реакции с нелинейной кинетикой:



Скорость протекания химической реакции определяется выражением

$$\frac{dc}{dt} = -kc^2.$$

В этом случае для зоны идеального смешения имеем

$$V_{\text{CM}}k(c')^2 = G(c^{\text{BX}} - c'),$$

откуда

$$c' = \frac{\sqrt{1 + 4\bar{t}_{\text{CM}}kc^{\text{BX}}} - 1}{2\bar{t}_{\text{CM}}k}.$$

Изменение концентрации в зоне идеального вытеснения определяется уравнением

$$\vartheta \frac{dc}{dl} = -kc^2,$$

интегрирование которого даёт

$$\frac{1}{c} = \frac{1}{c'} + k\bar{t}_{\text{ВЫТ}}.$$

Таким образом, концентрация вещества *A* на выходе комбинированной системы (рис. 20, *a*) составит:

$$c = \frac{2\bar{t}_{\text{CM}}k}{\sqrt{1 + 4\bar{t}_{\text{CM}}kc^{\text{BX}} + 2k^2\bar{t}_{\text{CM}}\bar{t}_{\text{ВЫТ}}} - 1}. \quad (10.24)$$

Для системы, изображённой на рис. 20, б, концентрация вещества на выходе из зоны идеального вытеснения определяется уравнением

$$9 \frac{dc}{dl} = -kc^2,$$

или после интегрирования

$$c' = \frac{c^{\text{BX}}}{1 + k\bar{t}_{\text{ВЫТ}} c^{\text{BX}}}.$$

В зоне идеального смешения изменение концентрации определяется следующим уравнением

$$V_{\text{CM}} kc^2 = G(c' - c),$$

откуда получаем

$$c = \frac{\sqrt{1 + 4\bar{t}_{\text{CM}} kc^{\text{BX}} / (1 + k\bar{t}_{\text{ВЫТ}} c^{\text{BX}})} - 1}{2k\bar{t}_{\text{CM}} c^{\text{BX}}}. \quad (10.25)$$

Нетрудно убедиться, что выражения (10.24), (10.25) для выходных концентраций комбинированных систем (рис. 20, а, б) дают различные значения. Следовательно, для осуществления химических реакций с нелинейной кинетикой порядок комбинирования моделей идеального смешения и вытеснения оказывает влияние на протекание процесса взаимодействия.

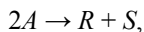
## 11. ПРИМЕРЫ РЕАЛИЗАЦИИ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ В MATLAB

### 11.1. Модели идеального смешения и идеального вытеснения

Модель идеального смешения соответствует гидродинамике аппарата, в котором поступающий в него индикатор мгновенно распределяется по всему его объёму, т.е. в каждой точке аппарата и на выходе из него концентрации индикатора будут равны.

Пример 1. Рассчитать время реакционного цикла, необходимое для достижения степени превращения исходного реагента  $x_{A,f} = 0,8$ , в периодическом реакторе идеального смешения.

В реакторе протекает реакция второго порядка



скорость  $w_{rA}$  [кмоль/(м<sup>3</sup>·с)] которой описывается кинетическим уравнением  $w_{rA} = 2,5 c_A^2$  при постоянной температуре. Начальная концентрация реагента  $A$  на входе в реактор  $c_{A,0} = 4$  кмоль/м<sup>3</sup>.

*Решение.* Степень превращения вещества  $A$  (исходный реагент) можно выразить через его концентрацию:

$$x_{A,f} = \frac{c_{A,0} - c_{A,f}}{c_{A,0}},$$

откуда конечная концентрация

$$c_{A,f} = c_{A,0} (1 - x_{A,f}). \quad (11.1)$$

Из уравнения материального баланса для периодического реактора идеального смешения

$$-w_{rA} = \frac{dc_A}{d\tau}$$

получим выражение для скорости реакции:

$$-2,5c_A^2 = \frac{dc_A}{d\tau}. \quad (11.2)$$

Тогда время реакционного цикла, необходимое для достижения заданной конечной концентрации  $c_{A,f}$ , можно получить решением дифференциального уравнения (11.2):

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2,5} \cdot \frac{dc_A}{c_A^2} &= d\tau, \\ -\frac{1}{2,5} \int c_A^{-2} dc_A &= \int d\tau, \\ -\frac{1}{2,5} \left( -\frac{1}{c_A} + \text{const} \right) &= \tau, \\ \frac{1}{c_A} - \text{const} &= 2,5\tau, \\ c_A &= \frac{1}{2,5\tau + \text{const}}. \end{aligned}$$

Значение постоянной интегрирования определим, решая задачу Коши:

$$c_A(\tau_0 = 0) = c_{A,0} = 4,$$

тогда

$$4 = \frac{1}{2,5 \cdot 0 + \text{const}},$$

откуда

$$\text{const} = 0,25.$$

Получим аналитическое решение уравнения (11.2):

$$c_A = \frac{1}{2,5\tau + 0,25} . \quad (11.3)$$

Подставляя выражение для конечной концентрации (11.1) в выражение (11.3), получим формулу для определения времени реакционного цикла:

$$c_{A,0}(1 - x_{A,f}) = \frac{1}{2,5\tau + 0,25} ,$$

$$\tau = \frac{1}{2,5} \cdot \left( \frac{1}{(c_{A,0}(1 - x_{A,f}))} - 0,25 \right) = \frac{1}{2,5} \cdot \left( \frac{1}{(4(1 - 0,8))} - 0,25 \right) = 0,4 .$$

Листинг программы, реализованной в Matlab:

**Файл react\_mixp\_fun.m**

```
function f = react_mixp_fun(tau,c_A)
```

```
% функция расчёта левой части уравнения (11.2)
```

```
f = -2.5*c_A^2;
```

**Файл react\_mixp.m**

```
% файл-программа расчёта
```

```
% периодического реактора идеального смешения
```

```
% задание НУ (концентрация реагента на входе в реактор)
```

```
c_A0 = 4;
```

```
% решение ДУ на отрезке tau = 0...1 секунд
```

```
% с использованием солвера ode23
```

```
[tau,c_A] = ode23('react_mixp_fun',[0 1], c_A0);
```

```
% вычисление ст. превр-я на отрезке tau = 0...1 секунд
```

```
x_A = (c_A0 - c_A)/c_A0;
```

```
% Оформление графиков:
```

```
% 1) изменение концентрации исх. реагента во времени
```

```
figure(1)
```

```
hold on
```

```
grid on
```

```
plot(tau,c_A)
```

```
xlabel('Time, s')
```

```
ylabel('Concentration A, kmol/m3')
```

```
% 2) изменение ст. превр-я исх. реагента во времени
```

```
figure(2)
```

```
hold on
```

```
grid on
```

```
plot(tau,x_A)
```

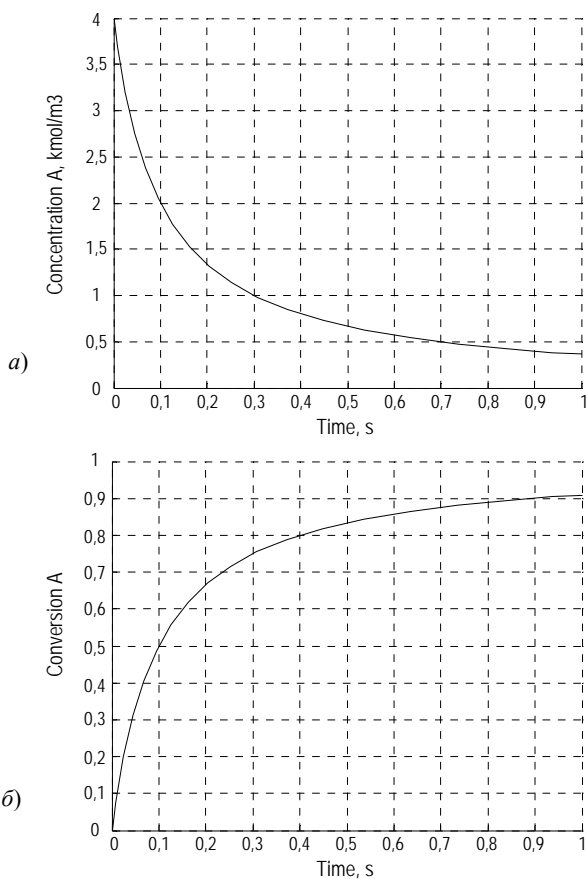
```
xlabel('Time, s')
```

```
ylabel('Conversion A')
```

Результаты выполнения программы (значения переменных tau, c\_A) и график функции c\_A(τ) приведены в табл. 1 и на рис. 21.

## 1. Изменение концентрации и степени превращения исходного реагента $A$ во времени

Наименование переменной	Время $\tau$ , с	Концентрация $c_A(\tau)$ , кмоль/м <sup>3</sup>	Степень превращения $x_A(\tau)$
Обозначение в программе	$\tau$	$c\_A$	
Значение	0	4	0
	0,2	1,333	0,667
	0,4	0,800	0,800
	0,6	0,571	0,857
	0,8	0,444	0,889
	1	0,363	0,909



**Рис. 21. Графики изменения:**

$a$  – концентрации исходного реагента  $A$ ;  $b$  – степени превращения исходного реагента  $A$

Пример 2. Определить среднее время пребывания реагентов в проточном реакторе идеального вытеснения для условий примера 1 (реакция второго порядка  $2A \rightarrow R + S$ , кинетическое уравнение  $w_{rA} = 2,5 c_A^2$ ,  $c_{A,0} = 4$  кмоль/м<sup>3</sup>,  $x_{A,f} = 0,8$ ). Режим работы реактора стационарный, площадь поперечного сечения канала реактора постоянна.

*Решение.* Из уравнения материального баланса для стационарного режима работы реактора идеального вытеснения

$$-u_z \frac{dc_A}{dz} - w_{rA} = 0. \quad (11.4)$$

Запишем уравнение (11.4), выразив  $u_z \frac{dc_A}{dz}$  через среднее время пребывания  $\bar{\tau}$ . В реакторе с постоянной площадью поперечного сечения канала линейная скорость потока  $u_z$  будет величиной постоянной, равной отношению объёмного расхода  $v$  к площади сечения  $F$  ( $u_z = v/F$ ). Тогда, с учётом того, что  $Fz/v = V/v = \bar{\tau}$ , уравнение (11.4) можно записать в таком виде:

$$-\frac{dc_A}{d\bar{\tau}} - w_{rA} = 0. \quad (11.5)$$

Получим выражение для скорости реакции:

$$-2,5c_A^2 = \frac{dc_A}{d\bar{\tau}}. \quad (11.6)$$

Следует отметить, что уравнение (11.6) отличается от уравнения (11.2) лишь тем, что вместо  $\tau$  в правой части уравнения (11.2) стоит  $\bar{\tau}$ . Величина  $\bar{\tau}$  (среднее время пребывания реагентов в проточном реакторе, характеризующее для реактора вытеснения продолжительность прохождения потоком расстояния от входа в реактор до некоторой точки  $z$  на оси реактора) по физическому смыслу отличается от величины  $\tau$  в правой части уравнения (11.2) – времени, в течение которого в некоторой фиксированной точке внутри реактора происходит изменение параметров процесса.

Условно можно рассматривать  $\bar{\tau}$  как некоторую «внутреннюю» характеристику реактора, непосредственно связанную с его размерами, а  $\tau$  – как «внешнюю» характеристику, никак не зависящую от конструктивных особенностей реактора.

Таким образом, аналитическое решение уравнения (11.6):

$$c_A = \frac{1}{2,5\bar{\tau} + 0,25}. \quad (11.7)$$

Среднее время пребывания реагентов в реакторе вытеснения  $\bar{\tau} = 0,4$  с (см. пример 1).

## 11.2. Модели массообменных процессов

Математическое описание процесса ректификации построено с учётом следующих допущений:

- 1) давление на контактном устройстве (тарелке) постоянно;
- 2) жидкость находится при температуре кипения, а пар – при температуре точки росы;
- 3) разделяемые смеси близки к идеальным;
- 4) физико-химические свойства компонентов постоянны на данном контактном устройстве и усреднены в возможном диапазоне изменения концентраций;
- 5) потоки жидкости и пара постоянны;
- 6) жидкая фаза идеально перемешана;
- 7) паровая фаза идеально перемешана;
- 8) режим работы контактного устройства – адиабатический;
- 9) унос жидкости постоянен.

Математическое описание ректификационной колонны включает следующие уравнения:

- 1) общий материальный баланс на тарелках колонны

$$V_i = V_{i-1}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad i \neq f;$$

$$L_i = \begin{cases} V_{i-1} + U + W, & i < f; \\ V_{i-1} + U - F_{n+1}, & i > f; \end{cases}$$

- 2) покомпонентный материальный баланс

$$x_i = \begin{cases} \frac{1}{V_{i-1} + U + W} (V_{i-1}y_{i-1} + Ux_{i-1} + Wx_0), & i < f; \\ \frac{1}{V_{i-1} + U - F_{n+1}} (V_{i-1}y_{i-1} + Ux_{i-1} - F_{n+1}x_{n+1}), & i > f; \end{cases}$$

- 3) тепловой баланс

$$L_F h(x_F) + V_F h(y_F) + Q_w = F_{n+1} h(x_D) + W h(x_0) + Q_k + Q_{\text{пот}};$$

- 4) уравнение фазового равновесия

$$y_i^* = y^*(x_i, P);$$

- 5) уравнение расчёта состава пара, покидающего тарелку:

$$y_i = y_{i-1} + (y_i^* - y_{i-1})\eta_i, \quad i \neq f,$$

где  $V$  – расход пара;  $L$  – расход жидкости;  $U$  – унос жидкости;  $W$  – расход кубовой жидкости;  $F$  – расход флегмы;  $x$  – концентрация легколетучего компонента в жидкости;  $y$  – концентрация легколетучего компонента в паре;  $P$  – давление;  $\eta$  – эффективность контактного устройства;  $h$  – энтальпия;  $Q$  – расход тепла;  $i$  – номер тарелки;  $f$  – номер тарелки питания.

Для построения математической модели дефлегматора колонны примем допущение, что дефлегматор является полным конденсатором (эффективность равна нулю), тогда

$$x_D = y_n.$$

Для построения математической модели кипятивильника колонны примем допущение, что кипятивильник представляет собой полный испаритель (эффективность равна нулю), тогда

$$y_0 = x_0.$$

Для построения математической модели всей установки необходимо описание отдельных частей установки дополнить уравнениями связи. В качестве таких уравнений обычно используют общие уравнения материального и теплового баланса для всей установки:

$$F_p = W + F_{n+1};$$

$$F_p x_p = W x_0 + F_{n+1} x_D;$$

$$x_D = x_{n+1};$$

$$L_{n+1} = V_n - F_{n+1}.$$

Для принятого математического описания процесс моделирования заключается в решении системы уравнений при заданной совокупности начальных условий.

При моделировании режимов работы ректификационной колонны для разделения бинарной смеси метиловый спирт–вода использовали следующие начальные условия: число тарелок колонны  $N = 7$ ; номер тарелки питания  $NF = 4$ ; флегмовое число  $R = 0,35$ ; количество питания  $F = 0,89$ ; состав исходной смеси  $XF$ : метиловый спирт : вода =  $0,4 : 0,6$ ; ректификация проводится при атмосферном давлении ( $P = 100\,000$  Па); температуры кипения чистых жидкостей:  $TKIP_{MC} = 64,5$  °С,  $TKIP_B = 100$  °С.

Для решения построенной математической модели будем использовать метод расчёта «от тарелки к тарелке». Здесь в качестве независимых переменных выбирают составы продуктов разделения.

Входными переменными модели являются:

- $x_{1,2}$  – состав питания (жидкой фазы);
- $d$  – диаметр колонны;
- $n$  – число ступеней колонны;
- $F$  – расход питания;
- $D$  – количество дистиллята;
- $R$  – флегмовое число;
- $x, y(t)$  – равновесная зависимость между паром и жидкостью при постоянном давлении.

Выходными переменными модели являются:

- $x_D, y_D$  – состав дистиллята;
- $x_W, y_W$  – состав куба;



W – расход куба;  
Q – тепловая нагрузка.

Суть данного метода заключается в следующем:

1. Задают состав куба  $x_{i1}$ . Из системы уравнений материального баланса и равновесия на первой ступени определяют  $x_{i2}$ , затем  $x_{i3}$  и т.д.
2. Рассчитывают  $x_{in}$  и  $y_{in}$ .
3. По уравнениям покомпонентного баланса для всей колонны рассчитывают потоки жидкости L и пара V.
4. Корректируют заданные составы продуктов. Если расхождение не превышает заданного – расчёт окончен.

С использованием приведённого алгоритма составим программу и проведём проверочный расчёт колонны.

```
function [] = colona
```

```
%математическая модель процесса ректификации смеси метиловый спирт – вода
```

```
%в тарельчатой колонне
```

```
%Допущения:
```

```
% 1) идеальные пар и жидкость;
```

```
% 2) паровая фаза подчиняется законам идеальных систем;
```

```
% 3) предполагается постоянная эффективность тарелок;
```

```
% 4) постоянство потоков пара и жидкости по колонне.
```

```
% Обозначения:
```

```
% N – число тарелок
```

```
% K – число компонентов (бинарная смесь)
```

```
% NF – номер тарелки питания
```

```
% F – количество питания
```

```
% DIST – количество дистиллята
```

```
% LO – орошение
```

```
% EPS – точность вычисления суммы концентраций на каждой тарелке
```

```
% W – количество кубового продукта
```

```
% V – нагрузка по пару
```

```
% X – распределение концентраций по тарелкам
```

```
% EM – средняя эффективность тарелки по Мерфи
```

```
% P – давление (атм)
```

```
% T – температура (°C)
```

```
% Xj – состав жидкой фазы
```

```
% Y – состав паровой фазы
```

```
% TKIP – температуры кипения компонентов
```

```
% R – флегмовое число
```

```
Решение систем уравнений, а также расчёт парожидкостного равновесия
```

```
% производится встроенными методами
```

```
% Ввод количества тарелок, количества компонентов и номера тарелки питания
```

```

N = 7;
K = 2;
NF = 4;
NF = NF+1; %Учёт куба как теоретической тарелки
% Ввод количества питания, дистиллята, орошения и точности вычисления
концентраций
R = 0.35;F = 0.89;DIST = 0.13;LO = R*DIST;EPS = 0.01;EM = 0.49;
% Ввод состава питания
XF = [0.4, 0.6]; P = 100000; %Па
TKIP = [64.5 100];% град.Цельс.
% Вычисление количества кубового продукта и нагрузки по пару
W = F-DIST; V = LO+DIST; N2 = N+2;
% Задание начального приближения
for i = 1:N2
    for j = 1:K
        X(i, :) = XF;
    end
end

iter = 0;
Z = 100;
% Начало итерационного цикла
while (Z>0)
    iter = iter+1;
    for j = 1:K
        for i = 1:N2
            SUM = 0;
            for z = 1:K
                XJ(z) = X(i,z);
            end

            for z = 1:K
                if (z==1)
                    [YJ(z), T] = equi(XJ(z)); %вычисление парожидкостного равновесия
                else
                    YJ(z) = 100-YJ(1);
                end
            end
            YJ = YJ/100;

            for z = 1:K
                if (i == 1) Y(i, z) = YJ(z);
                else Y(i, z) = Y(i-1, z)+EM*(YJ(z)-Y(i-1, z));
            end
        end
    end
    Z = Z-1;
end

```

```

    end
    KR(i, z) = Y(i,z)/X(i, z);
end
    TR(i) = T;
    A(i) = V*KR(i, j);
    B(i) = -KR(i, j)*V-LO;
    if (i<=NF) B(i) = B(i)-F; end
    if (i == 1) B(i) = -KR(i, j)*V-W; end
    if (i == N2) B(i) = -V; end
    C(i) = LO;
    if (i<NF) C(i) = LO+F; end
    D(i) = 0;
    if(i==NF) D(i) = -F*XF(j); end
end
    %Решение системы уравнений
    X1(:, j) = cody(N2, A, B, C, D);
end

Z = 0;
for i = 1:N2
    SUM = -1;
    %проверка на сходимость
    for j = 1:K
        SUM = SUM+X1(i, j);
    end
    Z = Z+1;
    if (abs(SUM)<EPS) Z = Z-1;end
end

for i = 1:N2
    SUM = 0;
    for j = 1:K
        SUM = SUM+X1(i, j);
    end
    % Нормировка концентраций по тарелкам
    for j = 1:K
        X(i, j) = X1(i, j)/SUM;
    end
end
end

end
xD = X(length(X), 1);
xF = XF(1);
xW = X(1, 1);
[YJ, TD] = equi(xD);

```

```
[YJ, TF] = equi(xF);
[YJ, TW] = equi(xW);
```

```
clc
disp(' Материальный баланс колонны ')
disp('Количество питания, кг/с')
F
disp('Количество дистиллята, кг/с')
DIST
disp('Количество кубового остатка, кг/с')
W
disp('Состав жидкой фазы по тарелкам:')
disp(' № тар. Температура Мет.спирт Вода ')
for i = 1:N2
    ITOG(i,:) = [(i-1), TR(i), X(i, :)];
end
disp(ITOG)
% Тепловой баланс колонны
Mv = 18;
Mn = 32;
rn = 1110e3;
rv = 2300e3;
cn = 0.65*4190;
cv = 4190;
rD = xD*rn*Mn+(1-xD)*rv*Mv;%удельная теплота конденсации паров в
дефлегматоре, Дж/кг
cD = xD*cn*Mn+(1-xD)*cv*Mv;%удельная теплоёмкость дистиллята,
Дж/(кг*К)
cF = xF*cn*Mn+(1-xF)*cv*Mv;%удельная теплоёмкость исходной смеси,
Дж/(кг*К)
cW = xW*cn*Mn+(1-xW)*cv*Mv;%удельная теплоёмкость кубового остатка,
Дж/(кг*К)
QK = DIST*(1+R)*rD+DIST*cD*TD+W*cW*TW-
F*cF*TF+0.05*DIST*(1+R)*rD;
disp('Расход теплоты в кубе ректификационной колонны:')
QK
```

\* \* \*

```
function [YJ, T] = equi(XJ)
%Вычисление парожидкостного равновесия смеси метиловый спирт –
вода
% Экспериментальные данные кривой равновесия:
x = [0 2 4 6 10 20 30 40 50 60 70 80 90 100];% жидкость
y = [0 13.4 23.0 30.4 41.8 57.9 66.5 72.9 77.9 82.5 87.0 91.5 95.8 100];% пар
t = [100.0 96.4 93.5 91.2 87.7 81.7 78.0 75.3 73.1 71.2 69.3 67.5 66.0 64.5];%
температура
```

```

%Вычисление коэффициентов полиномов приближающих функцию
conts = polyfit(x, y, 7);% концентрации
temp = polyfit(x, t, 7);% температуры
%Определение соответствующих концентраций и температур
YJ = polyval(conts, XJ);
T = polyval(temp, XJ);

```

\* \* \*

```

function D = cody(N2, A, B, C, D)
% подпрограмма расчёта системы уравнений

```

```

P = B(1);
D(1) = D(1)/P;
for i = 2:N2
    B(i-1) = C(i-1)/P;
    P = B(i)-A(i-1)*B(i-1);
    D(i) = (D(i)-A(i-1)*D(i-1))/P;
end
j = N2;
for i = 1:(N2-1)
    j = j-1;
    D(j) = D(j)-B(j)*D(j+1);
end

```

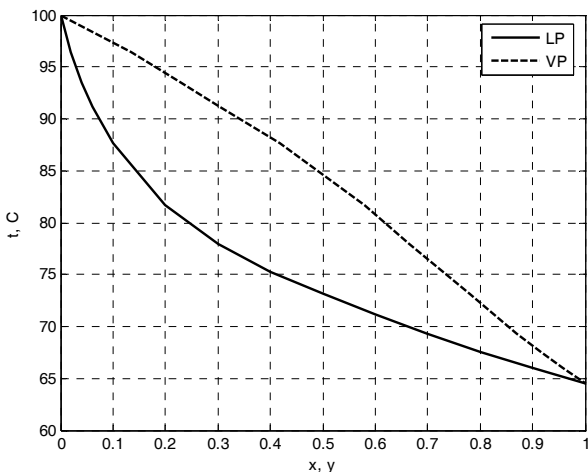
В результате расчёта, проведённого с помощью построенной математической модели, получены следующие результаты.

#### Материальный баланс колонны

Количество питания, кг/с  
 $F = 0,89.$   
 Количество дистиллята, кг/с  
 $DIST = 0,13.$   
 Количество кубового остатка, кг/с  
 $W = 0,76.$

Состав жидкой фазы по тарелкам

№ тар.	Температура	Мет. спирт	Вода
0	77,184	0,32838	0,67162
1	75,373	0,39525	0,60475
2	75,275	0,39924	0,60076
3	75,221	0,40147	0,59853
4	75,189	0,4027	0,5973
5	73,875	0,46994	0,53006
6	72,085	0,56353	0,43647
7	69,722	0,6798	0,3202
8	67,139	0,817	0,183



**Рис. 22. Диаграмма равновесия между паром и жидкостью в координатах температура – состав пара (VP) и жидкости (LP)**

Расход теплоты в кубе ректификационной колонны:

$$QK = 6.7702e+006.$$

Диаграмма равновесия между паром и жидкостью для смеси метиловый спирт – вода приведена на рис. 22 (реализация функции `equi`).

Изменение состава жидкой фазы по высоте колонны приведено на рис. 23, *a*. Тарелка с номером 1 соответствует дефлегматору, тарелка с номером 9 соответствует кубу.

С использованием созданной модели ректификационной колонны были проведены следующие исследования:

1. Влияние числа теоретических тарелок на состав кубовой жидкости и дистиллята.

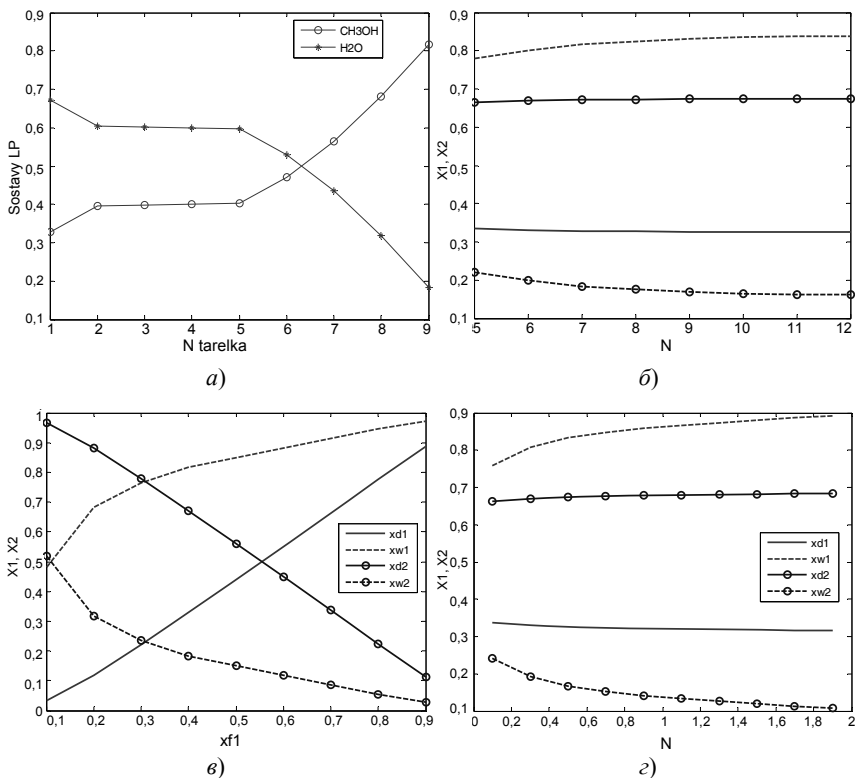
2. Влияние входной концентрации исходной смеси на состав кубовой жидкости и дистиллята.

3. Влияние флегмового числа на состав кубовой жидкости и дистиллята.

Результаты проведённых исследований представлены на рис. 23.

На рис. 23, *б* пунктиром показан состав жидкости в кубе, тяжёлый компонент – линией с кружочком. Из графика видно, что при увеличении высоты колонны увеличивается концентрация лёгкого компонента в дистилляте и уменьшается его концентрация в кубовой жидкости.

На рис. 23, *в* приведены графики изменения состава дистиллята и кубовой жидкости в зависимости от содержания легколетучего компонента  $x_{f1}$  в питании колонны. Из графиков видно, что при малой концентрации легколетучего компонента в данной колонне происходит унос всей жидкости в дистиллят, при высокой концентрации разделение происходит лучше по составу фаз.



**Рис. 23. Результаты вычислительных экспериментов с использованием модели ректификационной колонны:**

*а* – изменение состава жидкой фазы по высоте колонны; *б* – зависимость состава жидкой фазы от числа тарелок; *в* – изменение состава дистиллята и кубовой жидкости в зависимости от состава питания (содержания легколетучего компонента  $x_{f1}$ ); *г* – изменение состава дистиллята и кубовой жидкости в зависимости от значения флегмового числа

На рис. 23, г приведены графики изменения состава дистиллята и кубовой жидкости в зависимости от значения флегмового числа  $R$ .

### 11.3. Модели биотехнологических процессов

При разработке математической модели кинетики роста биомассы микроводоросли хлорелла были приняты следующие допущения:

1. Процесс осуществляется периодическим способом, при интенсивной аэрации газовой смеси. Подвод пузырьков газовой смеси к клетке не затруднён.

2. Концентрация кислорода достаточна для осуществления клетками энергетического обмена.

3. Основными лимитирующими субстратами являются: концентрация углекислого газа в питательной среде, концентрация соединений азота, доступных для ассимиляции клетками, в питательной среде.

4. Процесс не зависит от температуры (осуществляется в интервале температур, оптимальных для накопления биомассы, тепло, выделяемое в процессе биосинтеза, отводится с отработанной газовой воздушной смесью).

5. Процесс культивирования осуществляется в интервале значений рН, оптимальных для накопления биомассы.

6. Процесс фотосинтеза идёт с максимальной для данных концентраций  $\text{CO}_2$  скоростью, поскольку инсоляция (длина волны, глубина проникновения света, оптические свойства среды и т.п.) производится в оптимальном режиме.

7. Процессы питания, фотосинтеза, размножения и др. идут одновременно.

С учётом принятых допущений, в период накопительного культивирования биомассы хлореллы происходит увеличение концентрации биомассы клеток, а также утилизация субстратов.

Кинетика роста биомассы клеток хлореллы описывается моделью:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X,$$

где  $X$  – концентрация биомассы клеток, г/л;  $t$  – время, ч;  $\mu$  – удельная скорость роста,  $\text{ч}^{-1}$ .

Для вычисления удельной скорости роста в многофакторном процессе целесообразно использовать универсальную мультипликативную зависимость [13], в которой каждый фактор автономен.

$$\mu = \mu(S_1)\mu(S_2)\dots$$

где  $S$  – концентрация субстратных компонентов в биореакторе, г/л; индексы 1 – источники азотного питания; 2 – источники углеродного питания.

Зависимость по источнику азота описывается уравнением Моно:

$$\mu_1 = \mu_{\max} \frac{S_1}{K_{sx1} + S_1},$$

где  $\mu_{\max}$  – максимальная удельная скорость роста,  $\text{ч}^{-1}$ ;  $K_s$  – субстратная константа насыщения, г/л.

Зависимость по источнику углерода описывается уравнением Андрюса, поскольку по углекислому газу наблюдается субстратное ингибирование, т.е. замедление скорости роста при концентрации субстрата выше 2 г/л.

$$\mu_2 = \mu_{\max} \frac{S_2}{K_{sx2} + S_2 + S_2^2 / K_{ix2}},$$

где  $K_i$  – константа ингибирования продуктом, г/л.



Удельная скорость роста биомассы микроводоросли:

$$\mu_x = \mu_{\max} \left( \frac{S_1}{K_{sx1} + S_1} \right) \left( \frac{S_2}{K_{sx2} + S_2 + S_2^2/K_{ix2}} \right).$$

Уравнение, характеризующее удельную скорость потребления азот-содержащего субстрата, выглядит так:

$$\mu_s = q_{s\max} \left( \frac{S_1}{K_{ss1} + S_1} \right),$$

где  $q_{s\max}$  – максимальная удельная скорость потребления субстрата, г/(г·ч).

Поскольку углекислый газ как источник углерода подаётся непрерывно в реакционное пространство, то скорость притока равна скорости его расходования на рост микроорганизмов.

Математическая модель кинетики процесса накопительного культивирования биомассы микроводоросли хлорелла выглядит так:

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{\max} \left( \frac{S_1}{K_{sx1} + S_1} \right) \left( \frac{S_2}{K_{sx2} + S_2 + S_2^2/K_{ix2}} \right) X;$$

$$\frac{dS^{(N)}}{dt} = -q_{s\max}^{(N)} \left( \frac{S_1}{K_{ss1} + S_1} \right) X;$$

$$\frac{dS^{(\text{CO}_2)}}{dt} = D(S_0 - S),$$

где  $D = F/V$  – скорость разбавления, ч<sup>-1</sup>;  $F$  – объёмный расход потока газа, м<sup>3</sup>/ч;  $V$  – объём реакционного пространства, м<sup>3</sup>.

Для принятого математического описания процесс моделирования заключается в решении системы уравнений при заданной совокупности начальных условий.

Для решения построенной математической модели будем использовать метод Рунге–Кутта 4 – 5 порядка. Здесь в качестве независимых переменных выбирают концентрацию клеток хлореллы, концентрацию азот-содержащих соединений и концентрацию углекислого газа.

Начальные условия:

начальная концентрация биомассы клеток  $X_0 = 1 \cdot 10^6$  кл./мл;

входная концентрация азота в питательной среде  $[C_N] = 200$  мг/л;

концентрация углекислого газа в питательной среде  $[C_{\text{CO}_2}] = 2$  мг/л.

Переменными модели являются:

$X$  – концентрация биомассы клеток, г/л;

$t$  – время, ч;

$\mu$  – удельная скорость роста, ч<sup>-1</sup>;

$\mu_{\max}$  – максимальная удельная скорость роста, ч<sup>-1</sup>;  
 $S$  – концентрация субстратных компонентов в биореакторе, г/л;  
 $K_s$  – субстратная константа насыщения, г/л;  
 $K_i$  – константа ингибирования продуктом, г/л;  
 $D$  – скорость разбавления, ч<sup>-1</sup>;

Индексы:

1 – источники азотного питания;  
 2 – источники углеродного питания;  
 $s$  – субстрат;  
 $x$  – биомасса;  
 $i$  – ингибирующий компонент;  
 \* – критический уровень субстрата.

Листинг программы в файлах Matlab, реализующий данную модель, приведён ниже.

```

% файл-программа решения системы дифференциальных уравнений,
% описывающих периодический процесс накопления биомассы хлореллы
% при наличии в питании азотсодержащих соединений и углекислого
% газа как источника углерода.
% переменные:
% T – время процесса, ч
% X1 – изменение концентрации клеток биомассы хлореллы, кл./мл
% X2 – изменение концентрации азотсодержащих соединений, кл./мл
% X3 – изменение концентрации углекислого газа, кл./мл
% D – скорость разбавления, характеризующая расход углекислого
% газа, ч-1,

% формирование вектора начальных условий
X0 = [1.0e6 200 2.0];
D = 0.25;
% Вызов программы-солвера для решения системы дифференциальных
% уравнений методом Рунге-Кутты 4-5 порядка
[T, X] = ode45('BioMass', [0 400], X0, [], X0(3), D);
% вывод графиков решения исходных дифференциальных уравнений
figure(1)
plot (T, X(:, 1), 'k');
xlabel ('\itt,c')
ylabel ('\itBiomass,cell/ml')
grid on

figure(2)
plot (T, X(:, 2), 'k-o');
xlabel ('\itt,c')
ylabel ('\itNH4,g/l')
grid on
figure(3)
plot (T, X(:, 3), 'k-x');
xlabel ('\itt')
ylabel ('\itCO2,g/l')
grid on
  
```

```

% график изменения удельной скорости роста биомассы хлореллы
при изменении концентрации субстрата
figure(4)
[X, Y] = meshgrid (0.1:10:200, 0.1:0.1:2);
Z = mu(X, Y);
surf(X, Y, Z)
xlabel ('\itNH4,g/l')
ylabel ('\itCO2,g/l')
zlabel ('\itmu,h^-1')

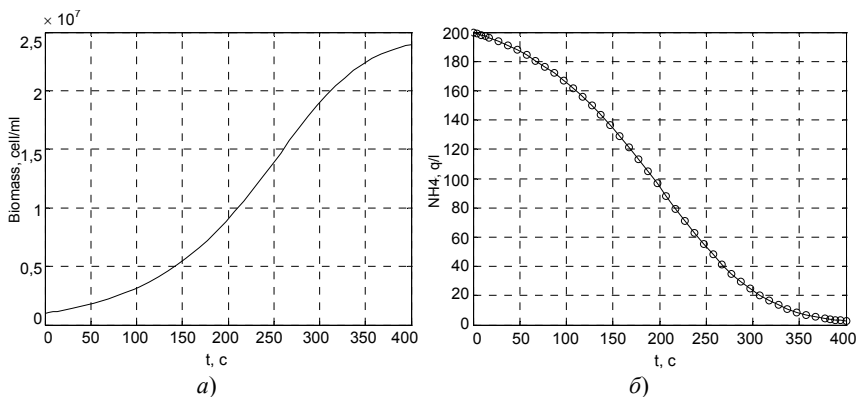
* * *
function F = BioMass(t, x, flag, S0, D)
F = [mu(x(2), x(3))*x(1); quN(x(2))*x(1); D*(S0-x(3))];
* * *

function F = mu(S1, S2)
% константы
mumax = 2.9;
Ks1 = 48;
Ks2 = 0.05;
Ki2 = 0.01;
F = mumax*(S1./(Ks1+S1)).*(S2./(Ks2+S2+S2.^2./Ki2));
* * *

function F = quN(x)
% константы
qumax = 0.001;
Ks1 = 1000000;
F = -qumax*(x/(Ks1+x));

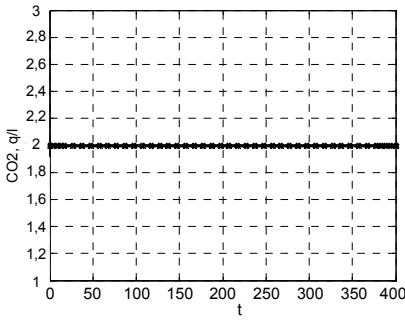
```

Результаты реализации приведённой модели представлены на рис. 24.

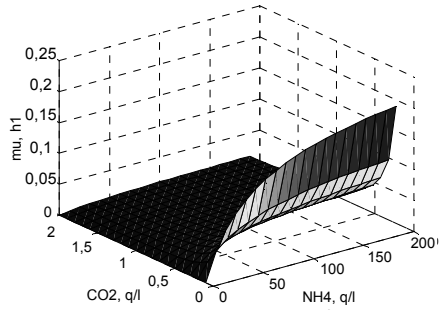


**Рис. 24. Результаты расчёта модели биореактора накопления биомассы хлореллы:**

- a* – накопление биомассы клеток микроводоросли хлореллы;
- б* – изменение концентрации азотсодержащих веществ в питательной среде при культивировании хлореллы; *в* – содержание углекислого газа в реакторе накопления биомассы хлореллы; *г* – изменение удельной скорости роста биомассы хлореллы при изменении концентрации субстратов



б)



в)

Рис. 24. Продолжение

### 11.4. Проектирование рецептуры многокомпонентных пищевых продуктов

При разработке рецептур новых продуктов одним из подходов является формализованный поиск соотношения рецептурных компонентов, обеспечивающего минимум себестоимости готового продукта при определённых требованиях к физико-химическим свойствам, показателям безопасности и/или пищевой, физиологической, энергетической, биологической ценности.

При проектировании рецептуры ржано-пшеничного хлеба повышенной биологической ценности решалась следующая задача.

Найти такое соотношение рецептурных компонентов, при котором себестоимость готового продукта примет минимальное значение:

$$C^* = \min_x C,$$

где  $x_{1...n}$  – массовая доля рецептурных компонентов;  $C$  – себестоимость готового продукта, при ограничениях:

критерий аминокислотного состава белка  $I_6 \geq 0,51$ ,

$$\text{где } I_6 = \begin{cases} \frac{8}{\sum_{i=1} AK_i}, & AK_i = 1, \\ 1 - (1 - AK_{\min}) \frac{8AK_{\min}}{\sum_{i=1} AK_i}, & 0 \leq AK_{\min} < 1, \quad AK_{\min} > 1, \end{cases}$$

влажность теста  $W_T = 47\%$ ; доля рецептурных компонентов –  $\sum_i x_i = 100, \%$ .

Исходные данные и результаты решения поставленной задачи приведены в таблице:

Рецептурные компоненты	Влажность, %	Стоимость, р./100 кг	lb, %	ub, %	x*, кг
Мука пшеничная, x1	14	20	18	25	18
Мука ржаная, x2	14	22	24	45	35,7
Мука гороховая, x3	14	40	0,5	13	4,1
Сыворотка молочная сухая, x3	3,5	50	1,0	2,0	2
Дрожжи прессованные, x4	75	3,7	1,9	1,9	0,9
Соль, x5	0,2	4	0,9	0,9	1,9
Вода, x6	100	0,5	10	54	37,4
Себестоимость C, р./кг	14,38				

Листинг программы в файлах Matlab для решения поставленной задачи, приведён ниже.

```
lb = [18 24 0.5 1.0 1.9 0.9 10]; % нижний уровень ограничений по компонентам LB
```

```
ub = [25 45 13 2.0 1.9 0.9 54]; % верхний уровень ограничений по компонентам – UB
```

```
x0 = [22 35 7 1.5 1.9 0.9 10]; % начальное приближение
```

```
options = optimset('LargeScale', 'off');
```

```
[x, fun] = fmincon('bread1', x0, [], [], [], [], lb, ub, 'breadcon', options)
```

```
* * *
```

```
function f = bread1 (x)
```

```
%расчёт целевой функции – себестоимости хлеба
```

```
f1 = [20 22 40 50 3.7 4 0.5];%стоимость компонентов хлеба, руб
```

```
f = sum(f1.*x);
```

```
* * *
```

```
function [c, seq] = breadcon (x)
```

```
% задание ограничений
```

```
c(1) = 0.51-IB(x);
```

```
W = [14 14 14 3.5 75 0.2 100];%влажность компонентов, %
```

```
seq (1)=(sum(W.*x)/100)-47;
```

```
seq (2) = sum(x)-100;
```

```
* * *
```

```
function f = IB(x)
```

```
% расчёт критерия аминокислотного состава белка
```

```
% состав незаменимых аминокислот отдельных компонентов
```

```
A = [150.35 49.2 139.45 200 111.11 161.73 150.94 176.64
```

```

179.07 66.09 118.49 170.79 108.2 176.57 121.35 181.69
153.96 148.25 146.34 212.68 151.76 181.18 88.78 176.44
154.25 168.5 172.98 198.12 186.29 293.51 147.31 124.43];
A = A./100;
[M, N] = size(A);
for j = 1:N
    for i=1:M
        I(i) = 1-(1-min(A(i, :)))*8*min(A(i, :))/sum(A(i, :));
    end
end
I = [I 0 0 0];
x1 = x./100;
f = sum(I.*x1);

```

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В учебном пособии представлены современные подходы к математическому моделированию технологических процессов и оборудования в био-, химической и пищевой технологиях. Рассмотрена методология компьютерного моделирования, основанная на работе с триадой "*модель – алгоритм – программа*". Продемонстрирована целесообразность использования компьютерных моделей для исследования, оптимизации и проектирования технологических объектов.

Приведены сведения о методах построения математических моделей. Рассмотрены экспериментальные методы построения математических моделей, включающие в себя методику планирования эксперимента, методы математической обработки экспериментальных данных, такие как регрессионный анализ, нейронные сети, а также подходы к определению отдельных параметров моделей с помощью метода экспертных оценок. Проанализированы методика и примеры построения аналитического описания статистики технологических объектов.

Представлены практические примеры реализации математических моделей гидродинамических, массообменных и биотехнологических процессов и аппаратов, включающие в себя постановку задачи моделирования, уравнения модели, допущения, принятые при построении модели, листинг программы компьютерной реализации модели в среде MatLab, а также результаты исследований, проведённых с помощью представленных компьютерных моделей.

Учебное пособие предназначено для студентов очного и заочного отделений и магистрантов направлений: 240700 – Биотехнология, 260100 – Продукты питания из растительного сырья.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в базовой части задания.*

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Моисеев, Н. Н.** Математика ставит эксперимент / Н. Н. Моисеев. – Москва : Наука, 1979. – 224 с.
2. **Кафаров, В. В.** Системный анализ процессов химической технологии / В. В. Кафаров, И. Н. Дорохов. – Москва : Наука, 1976. – 500 с.
3. **Дудников, Е. Г.** Построение математических моделей химико-технологических объектов / Е. Г. Дудников, В. С. Балакирев и др. – Москва : Химия, 1970. – 312 с.
4. **Дрейпер, Н.** Прикладной регрессионный анализ / Н. Дрейпер, Г. Смит ; пер. с англ. – Москва : Финансы и статистика, 1986. – 366 с.
5. **Самарский, А. А.** Численные методы : учеб. пособие для вузов / А. А. Самарский, А. В. Гулин. – Москва : Наука, 1989. – 432 с.
6. **Бахвалов, Н. С.** Численные методы : учеб. пособие для вузов / Н. С. Бахвалов. – Москва : Наука, 1975. – 632 с.
7. **Джонс, Дж. К.** Методы проектирования / Дж. К. Джонс ; пер. с англ. – Москва : Мир, 1986. – 326 с.
8. **Тихонов, А. Н.** Уравнения математической физики / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. – Москва : Наука, 1972. – 736 с.
9. **Ахназарова, С.Л.** Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии : учеб. пособие для вузов / С. Л. Ахназарова, В. В. Кафаров. – Москва : Высш. шк., 1978. – 319 с.
10. **Кафаров, В. В.** Математическое моделирование основных процессов химических производств : учеб. пособие для вузов / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. – Москва : Высш. шк., 1991. – 400 с.
11. **Джонс, Дж. К.** Методы проектирования / Дж. К. Джонс ; пер. с англ. – Москва : Мир, 1986. – 326 с.
12. C.L. Dym. Principles of Mathematical Modeling // Elsevier. – 2004. – 303 с.
13. **Бирюков, В. В.** Основы промышленной биотехнологии / В. В. Бирюков. – Москва : КолосС, 2004. – 296 с.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	3
1. ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О МОДЕЛЯХ И КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ .....	3
2. МЕТОДОЛОГИЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ .....	7
3. КЛАССИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ.....	12
4. ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О МЕТОДАХ ПОСТРОЕНИЯ МАТЕМАТИ- ЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ .....	16
5. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ .....	20
6. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТАТИКИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ .....	23
7. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТАТИКИ ОБЪЕКТОВ $O^Z$ .....	28
8. ЭКСПЕРТНЫЕ ОЦЕНКИ.....	38
9. АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ .....	40
10. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОТОКОВ В ТЕХНОЛОГИЧЕСКОМ АППАРАТЕ .....	42
11. ПРИМЕРЫ РЕАЛИЗАЦИИ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ В MATLAB .....	57
11.1. Модели идеального смешения и идеального вытеснения .....	57
11.2. Модели массообменных процессов.....	62
11.3. Модели биотехнологических процессов.....	70
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	77
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ .....	78



Учебное издание

ДВОРЕЦКИЙ Дмитрий Станиславович,  
ДВОРЕЦКИЙ Станислав Иванович,  
ПЕШКОВА Евгения Владимировна,  
ТЕМНОВ Михаил Сергеевич

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ  
ХИМИЧЕСКИХ, ПИЩЕВЫХ И  
БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ  
ПРОИЗВОДСТВ**

Учебное пособие

Редактор Т. М. Глинкина  
Инженер по компьютерному макетированию И. В. Евсева

ISBN 978-5-8265-1283-8



Подписано в печать 20.06.2014  
Формат 60 × 84 / 16. 4,65 усл. печ. л.  
Тираж 100 экз. Заказ № 311

Издательско-полиграфический центр  
ФГБОУ ВПО «ТГТУ»  
392000, г. Тамбов, ул. Советская, д. 106, к. 14  
Тел. 8(4752) 63-81-08  
E-mail: izdatelstvo@admin.tstu.ru