**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

ФГБОУ ВПО «РОССИЙСКИЙ
ХИМИКО–ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА»

НОВОМОСКОВСКИЙ ИНСТИТУТ (ФИЛИАЛ)

А.Г. ЛОПАТИН, П.А.КИРЕЕВ, С.В. ЛОПАТИНА

МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ И ПРОЦЕССОВ

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ, ПРОГРАММА И КОНТРОЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ

**Новомосковск
2015**

УДК 66.011
ББК 35
Л 771

Рецензент:
кандидат технических наук, доцент Маслова Н.В.
(НИ (филиал) ФГБОУ ВПО РХТУ им. Д. И. Менделеева)

Лопатин А. Г., Киреев П.А., Лопатина С.В.
Моделирование систем и процессов. Методические указания, программа и контрольные задания. /ФГБОУ ВПО РХТУ им. Д. И. Менделеева, Новомосковский ин-т (филиал). Новомосковск, 2015.–28 с.

Методические указания предназначены для студентов, заочной формы обучения по направлению подготовки 220700 Автоматизация технологических процессов и производств

Табл. 13. Ил. 4. Библиогр.: 4 назв.

УДК 66.011
ББК 35

© Новомосковский институт (филиал)
ФГБОУ ВПО Российского химико–
технологического университета им.
Д.И. Менделеева, 2015

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ 4
1 ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ 4
2 СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ ДИСЦИПЛИНЫ 5
3 ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ 7
4 РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА 7
5 МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ 7
6 ПРИМЕР ВЫПОЛНЕНИЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ 8
6.1 ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ АКТИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА 8
6.2 ОСНОВНЫЕ СТАДИИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ 14
6.3 ОСНОВНЫЕ ГРУППЫ УРАВНЕНИЙ, ВХОДЯЩИХ В МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА 14
6.4 МАТЕРИАЛЬНЫЙ И ТЕПЛОВОЙ БАЛАНСЫ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА 15
6.5 МОДЕЛЬ ТИПА «ВЫТЕСНЕНИЕ – ВЫТЕСНЕНИЕ» 17
6.6 МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ 20
6.7 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ 20
7 ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЙ ДЛЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ 22
7.1 ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ АКТИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА 22
7.2 МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛООБМЕНА 26
7.3 МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ 27

ВВЕДЕНИЕ

Целью курса «Моделирование систем и процессов» является формирование у студентов знаний основ современных методов функционального, имитационного и математического моделирования производственных процессов и систем различного назначения, методов построения моделей различных классов и их реализации на компьютерной технике посредством современных прикладных программных средств.

Задачи преподавания дисциплины:

освоение современных методов моделирования процессов и систем, этапов математического моделирования, принципов построения и основных требований к математическим моделям;

схемы их разработки и методов исследования, формализация процессов функционирования системы, имитационного моделирования, методов упрощения математических моделей, технических и программных средств моделирования;

освоение основ подтверждения соответствия продукции, процессов производства, услуг требованиям технических регламентов, положениям стандартов, сводов правил или условиям договоров.

Методические указания составлены в соответствии с требованиями ФГОС ВПО по направлению подготовки 220700 «Автоматизация технологических процессов и производств», утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 25 октября 2011 г. N 2520.

1 ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

1. способности использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования (ОК-10);
2. способности участвовать в разработке математических и физических моделей процессов и производственных объектов (ПК-17);
3. способности к участию в работах по моделированию продукции, технологических процессов, производств, средств и систем автоматизации, контроля, диагностики, испытаний и управления процессами, жизненным циклом продукции и ее качеством с использованием современных средств автоматизированного проектирования (ПК-40);

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать:

1. классификацию моделей систем и процессов, их виды и виды моделирования (ОК-10; ПК-17; ПК-40);
2. принципы и методологию функционального, имитационного и математического моделирования систем и процессов методы построения моделирующих алгоритмов (ОК-10; ПК-17; ПК-40);
3. методы построения математических моделей, их упрощения; технические и программные средства моделирования (ОК-10; ПК-17; ПК-40);
4. технологию планирования эксперимента (ОК-10; ПК-17; ПК-40);

Уметь:

1. реализовывать простые алгоритмы имитационного моделирования (ОК-10; ПК-17; ПК-40);
2. использовать основные методы построения математических моделей процессов, систем, их элементов и систем управления (ОК-10; ПК-17; ПК-40);
3. работать с каким-либо из основных типов программных систем, предназначенных для математического и имитационного моделирования (ОК-10; ПК-17; ПК-40);
4. планировать модельный эксперимент и обрабатывать его результаты на персональном компьютере (ОК-10; ПК-17; ПК-40);
5. оценивать точность и достоверность результатов моделирования (ОК-10; ПК-17; ПК-40);

Владеть:

1. навыками работы с программной системой для математического и имитационного моделирования (ОК-10; ПК-17; ПК-40);

2 СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ ДИСЦИПЛИНЫ

Курс «Моделирование систем и процессов» для удобства изучения разбит на ряд тем, подлежащих изучению в порядке их расположения

Наименование раздела дисциплины	**Содержание раздела**	**Рекомендуемая литература**
Общие сведения о математическом моделировании	Моделирование как метод познания объектов, процессов, явлений. Понятие системы.	1, 2, 3
Физическое и математическое моделирование	Основные положения теории подобия. Этапы и методы математического моделирования. Цели и задачи исследования моделей систем. Структура математического описания систем.	1, 2, 3

Классификация моделей	По свойствам объектов и режимам их функционирования	1, 2, 3
Виды моделей	Иконографические, символьные, нечеткие, семиотические, семантические. Примеры моделей систем.	1, 2, 3
Техническое и программное обеспечение математического моделирования	Моделирующие программы, пакеты прикладных программ, базы данных, библиотеки моделей.	5
Построение математических моделей систем экспериментальным методом	Регрессионный и корреляционный анализ.	4
Нахождение уравнений регрессии по данным пассивного и активного эксперимента	Идентификация параметров уравнений методом наименьших квадратов, установление адекватности. Полный факторный эксперимент	4
Нечеткие математические модели	Понятие лингвистических переменных и нечетких множеств, основные операции над лингвистическими переменными, нечеткие отношения (модели). Сферы применения нечетких моделей.	4
Построение математических моделей систем аналитическим методом	Типовые модели структуры потоков в аппаратах. Понятие системы допущений.	3
Математическое моделирование тепловых процессов	Модели <смешение-смешение>, <вытеснение-вытеснение>, <вытеснение-смешение>.	3
Математическое моделирование массообменных процессов	Модели насадочного абсорбера и ректификационных колонн.	3
Математическое моделирование	Модели изотермического, адиабатического и политропического	3

реакционных процессов	реакторов с различными гидродинамическими структурами потоков в реакторах.	
Математическое моделирование систем на ЭВМ	Получение структурной схемы объекта моделирования. Методика получения передаточных функций из дифференциальных уравнений.	3

3 ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ

№ п/п	Наименование лабораторных работ	Код формируемой компетенции
1.	Определение функциональной зависимости и ее исследование методом регрессионного анализа (в среде MathCAD). ЛР1	ОК-10; ПК-17; ПК-40
2.	Построение математической модели и ее исследование при помощи планирования эксперимента (в среде MathCAD). ЛР2	ОК-10; ПК-17; ПК-40
3.	Построение и исследование нечеткой математической модели (в среде MATLAB). ЛР3	ОК-10; ПК-17; ПК-40
4.	Расчет и исследование нестационарных и стационарных режимов проточного реактора полного перемешивания. ЛР4	ОК-10; ПК-17; ПК-40

4 РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Дворецкий С. И.Моделирование систем М.:ИЦ "Академия", 2009. - 316 с.
2. Математическое моделирование химико-технологических объектов с распределенными параметрами: учеб. пособ. для вузов / Т. Б. Чистякова, А. Н. Полосин, Л. В. Гольцева. - СПб. : Профессия, 2010. - 239 с.
3. Математическое моделирование химико-технологических систем: Учебное пособие Д.П. Вент, А.Г. Лопатин, С.И. Сидельников / РХТУ им. Д. И. Менделеева, Новомосковский ин-т. Новомосковск, 2013.–96 с.
4. Сидельников С.И., Лопатин А.Г. Моделирование систем. Методическое пособие. – Новомосковск, 2004 – 100 с.

Информационно-справочные и поисковые системы

5. http://matlab.exponenta.ru/index.php

5 МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ ВЫПОЛНЕНИЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ

Программой предусмотрено выполнение одной домашней контрольной работы, состоящей из 3-х задач.

Номер варианта в контрольной работе соответствует последней цифре шифра зачетной книжки студента. Контрольная работа, выполненная не по своему варианту и не в полном объеме, преподавателем не проверяется и возвращается обратно студенту.

Прежде чем приступить к выполнению контрольной работы, следует тщательно изучить темы, включенные в содержание вопросов и задания по рекомендуемой литературе. Перед решением каждой задачи следует написать условие задачи. В заданиях выполняются подробно расчеты, аргументированные пояснениями.

В конце контрольной работы следует указать литературу (автор, наименование, издательство, год издания, страницы), которой воспользовались при выполнении работы.

Контрольная работа должна быть подписана студентом с указанием даты ее выполнения и выслана на рецензию не позднее, чем за 30 дней до начала экзаменационной сессии.

После получения проверенной контрольной работы студент обязан просмотреть все замечания и внести в работу соответствующие исправления. Работа, оцененная неудовлетворительно, должна быть представлена на проверку вторично.

К экзамену, завершающему изучение дисциплины «Моделирование систем и процессов», допускаются студенты, получившие удовлетворительную оценку за контрольную работу.

6 ПРИМЕР ВЫПОЛНЕНИЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ

Контрольная работа включает в себя задачи по следующим темам: построение математических моделей по результатам активного эксперимента; моделирование теплообменных аппаратов; моделирование кинетики химических реакций.

6.1 ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ АКТИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Активные эксперименты обладают следующими преимуществами:

1. Многомерный регрессионный анализ чувствителен к соблюдению исходных предпосылок, а именно:

1.1. результаты наблюдений y_1, y_2,…,y_n представляют собой независимые, нормально распределенные случайные величины;

1.2 независимые переменные x_1, x_2,…,x_p изменяются с пренебрежимо малой погрешностью по сравнению с погрешностью в определении y.

Ясно, что эти требования могут быть выполнены только при активном эксперименте, кроме того, активный эксперимент просто лучше организован.

2. Поскольку план экспериментов составляется заранее, перед началом опытов, то ничто не мешает так составить этот план, чтобы максимально

упростить последующую обработку экспериментов для построения регрессионных моделей.

3. Оптимальное использование факторного пространства при активном экспериментировании позволяет при минимальных затратах (минимальном количестве экспериментов) получить максимум информации об изучаемых явлениях протекающих в объекте управления.

4. При планировании экстремальных экспериментов кроме аппроксимации функций отклика (построение эмпирической зависимости) попутно можно решить порой более важные для исследователя задачи–поиск экстремума (максимума или минимума) в факторном пространстве и задачу оптимального управления процессом.

5. Методы планирования экспериментов позволяют опытным путем проранжировать факторы по степени их влияния на функцию отклика.

6. Планируемые эксперименты позволяют получить математическое описание таких процессов, которое ранее было затруднительным, и формализовать методами дисперсионного анализа изучения явлений, зависящих от качественных факторов.

7. Планирование эксперимента позволяет изучать и математически описывать процессы и явления при неполном знании их механизма.

Под планированием эксперимента будем понимать разработку оптимальной стратегии исследования исходя из задач, поставленных экспериментатором.

В области химии и химической технологии наиболее распространенными являются следующие задачи:

1. Определение оптимальных режимов.
2. Изучение механизма процесса.
3. Математическое описание физико–химических свойств веществ и систем.
4. Построение математических моделей для использования их в автоматизированных системах управления технологическими процессами.

Необходимая для планирования эксперимента информация зависит от целей исследования. Так, для решения первой задачи необходимо знать число факторов, подлежащих изучению, и целесообразные интервалы их изменения; число и характер параметров оптимизации; экономические и временные ограничения и ряд других более второстепенных сведений. Для решения второй задачи необходимо дополнительно выдвинуть одну или несколько гипотез о механизме процесса. Аналогичным образом можно сформулировать исходную необходимую информацию и в остальных случаях.

Для построения линейных и неполных степенных математических моделей применяют полный факторный эксперимент (ПФЭ). При планировании по схеме ПФЭ реализуются все возможные комбинации факторов на всех выбранных для исследования уровнях. Необходимое количество опытов N при ПФЭ определяется по формуле:

$$N = n^k \qquad (1)$$

где n – количество уровней; k – число факторов.

Если эксперимент проводят только на двух уровнях, при двух значениях факторов и при этом в процессе эксперимента осуществляются все возможные комбинации из k факторов, то постановка опытов по такому плану называется ПФЭ типа 2^k (или планом первого порядка). Уровни факторов представляют собой границу изучаемой области по данному фактору.

Все расчеты коэффициентов уравнения регрессии производят в безразмерной системе координат. Переход от натуральной системы, т.е. системы координат в которой ставят опыты, к кодированной осуществляют посредством переноса начала координат в центр изучаемой области, т.е. в точку с координатами Z_S^0 и Z_{S+1}^0 и последующим изменением масштаба. Формула перехода от натуральной системы к кодированной имеет следующий вид:

$$X_j = \frac{Z_j - Z_j^0}{\Delta Z_j} \qquad (2)$$

где: X_j – значение фактора в кодированной системе координат; Z_j – значение фактора в натуральной системе координат; Z_j^0 – координата центра плана; ΔZ_j – интервал варьирования изучаемой переменной.

Значения Z_j^0 и ΔZ_j вычисляют по формулам:

$$Z_j^0 = \frac{Z_j^{\max} + Z_j^{\min}}{2} \qquad (3)$$

$$\Delta Z_j = \frac{Z_j^{\max} - Z_j^{\min}}{2} \qquad (4)$$

где: $Z_j^{\max}$ и $Z_j^{\min}$ граница изучаемой области факторного пространства соответственно максимальное и минимальное значение изучаемого фактора.

Например, изучается влияние на выход продукта (Y, %) трех факторов: температуры (Z_1) в диапазоне 100–200°C, давления (Z_2) $(2–6)\times10^5$ Па и время пребывания (Z_3) 10–20 мин. Верхний уровень по температуре $Z_1^{\max}$ равен 200°C, нижний $Z_1^{\min}$ равен 100°C, тогда для Z_1 имеем:

$$Z_1^0 = \frac{Z_1^{\max} + Z_1^{\min}}{2} = \frac{200+100}{2} = 150$$

$$\Delta Z_1 = \frac{Z_1^{\max} - Z_1^{\min}}{2} = \frac{200-100}{2} = 50$$

Аналогично получаем для Z_2 и Z_3:

$$Z_2^0 = \frac{Z_2^{\max} + Z_2^{\min}}{2} = \frac{(6+2)\times10^5}{2} = 4\times10^5$$

$$\Delta Z_2 = \frac{Z_2^{\max} - Z_2^{\min}}{2} = \frac{(6-2)\times10^5}{2} = 2\times10^5$$

$$Z_3^0 = \frac{Z_3^{\max} + Z_3^{\min}}{2} = \frac{20+10}{2} = 15$$

$$\Delta Z_3 = \frac{Z_3^{\max} - Z_3^{\min}}{2} = \frac{20-10}{2} = 5$$

В безразмерной системе координат максимальное значение переменной Z_i будет соответствовать +1 минимальное -1. Пересчитаем исследуемые факторы в безразмерный вид:

$$X_1 = \frac{Z_1^{\max} - Z_1^0}{\Delta Z_1} = \frac{200-150}{50} = +1$$

$$X_1 = \frac{Z_1^{\min} - Z_1^0}{\Delta Z_1} = \frac{100-150}{50} = -1$$

$$X_2 = \frac{Z_2^{\max} - Z_2^0}{\Delta Z_2} = \frac{(6-4)\times 10^5}{2\times 10^5} = +1$$

$$X_2 = \frac{Z_2^{\min} - Z_2^0}{\Delta Z_2} = \frac{(2-4)\times 10^5}{2\times 10^5} = -1$$

$$X_3 = \frac{Z_3^{\max} - Z_3^0}{\Delta Z_3} = \frac{20-15}{5} = +1$$

$$X_3 = \frac{Z_3^{\min} - Z_3^0}{\Delta Z_3} = \frac{10-15}{5} = -1$$

Как видно из табл. 1 составление плана ПФЭ не вызывает трудностей. Первая колонка состоит из последовательного чередования по одному +1 и –1, во второй колонке чередование по два, в третьей – четыре и т.д.

Таблица 1 – План и результаты полного трехфакторного эксперимента

N	X1	X2	X3	Y
1	+1	+1	+1	2
2	–1	+1	+1	6
3	+1	–1	+1	4
4	–1	–1	+1	8
5	+1	+1	–1	10
6	–1	+1	–1	18
7	+1	–1	–1	8
8	–1	–1	–1	12

Благодаря ортогональности матрицы планирования коэффициенты уравнения регрессии рассчитываются по формулам:

$$b_0 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} Y_i \qquad b_j = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} X_{ij} Y_i \ (j = 1,2...k)$$

$$b_{js} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} X_{ij} X_{is} Y_i \ (j; s = 1,2...k, j \neq s) \qquad (5)$$

$$b_{jsf} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} X_{ij} X_{is} X_{if} Y_i \ (j; s; f = 1,2...k, j \neq s \neq f)$$

В результате расчета получены следующие коэффициенты уравнения регрессии

$$b_0 = \frac{1}{8}\sum_{i=1}^{8} Y_i = 8{,}5 \qquad b_{12} = \frac{1}{8}\sum_{i=1}^{8} X_{i1} X_{i2} Y_i = -0{,}5$$

$$b_1 = \frac{1}{8}\sum_{i=1}^{8} X_{i1} Y_i = 2{,}5 \qquad b_{13} = \frac{1}{8}\sum_{i=1}^{8} X_{i1} X_{i3} Y_i = 0{,}5$$

$$b_2 = \frac{1}{8}\sum_{i=1}^{8} X_{i2}Y_i = -0{,}5 \qquad b_{23} = \frac{1}{8}\sum_{i=1}^{8} X_{i2}X_{i3}Y_i = -1{,}5$$

$$b_3 = \frac{1}{8}\sum_{i=1}^{8} X_{i3}Y_i = 3{,}5 \qquad b_{123} = \frac{1}{8}\sum_{i=1}^{8} X_{i1}X_{i2}X_{i3}Y_i = 0{,}11$$

тогда уравнение регрессии примет вид:

$$\hat{Y} = 8.5 + 2.5x_1 - 0.5x_2 + 3.5x_3 - 0.5x_1x_2 + 0.5x_1x_3 - 1.5x_2x_3 + 0.11x_1x_2x_3$$

Если поставить дополнительно параллельные опыты в центре плана, можно определить оценку дисперсии воспроизводимости $S_{воспр}$, проверить значимость коэффициентов регрессии и при наличии степеней свободы – адекватность уравнения.

Оценка дисперсии воспроизводимости рассчитывается по формуле:

$$S^2_{воспр} = \frac{\sum_{u=1}^{m}\left(Y_u - \overline{Y}\right)^2}{m-1}; \tag{6}$$

$$\overline{Y} = \frac{\sum_{u=1}^{m} Y_u}{m} \tag{7}$$

где m – количество дополнительных опытов; $\overline{Y}$ – среднее значение дополнительных опытов.

Например, в центре плана поставлено дополнительно три параллельных опыта и получены следующие значения Y^0:

$$Y_1^0 = 8 \qquad Y_2^0 = 9 \qquad Y_3^0 = 8.8,$$

тогда получим:

$$\overline{Y^0} = \frac{\sum_{u=1}^{3} Y_u^0}{3} = 8.6$$

$$S^2_{воспр} = \frac{\sum_{u=1}^{3}\left(Y_u^0 - \overline{Y^0}\right)^2}{3-1} = 0.28$$

При переходе к безразмерной системе координат ковариационная матрица получается диагональной, т.е. ковариационные моменты равны нулю и, следовательно, коэффициенты уравнения регрессии взаимно не связаны и рассчитаны с одинаковой точностью. В этом случае значимость коэффициентов уравнения регрессии проверяют в отдельности по критерию Стьюдента

$$t_j = \frac{|b_j|}{S_{bj}} \tag{8}$$

$$S_{bj} = \sqrt{\frac{S^2_{воспр}}{N}} \tag{9}$$

где S_{bj} – оценка дисперсии коэффициента уравнения регрессии; t_j – значение критерия Стьюдента для коэффициента уравнения регрессии.

Табличное значение критерия Стьюдента для заданного уровня значимости p и числа степеней свободы f=m–1 выбирают из таблицы значение

$t_p(f)$ и если $t_j > t_p(f)$, то коэффициент значим, а если $t_j < t_p(f)$, то коэффициент вычеркивается из уравнения регрессии.

Оценим значимость коэффициентов уравнения регрессии по критерию Стьюдента

$$S_{bj} = \sqrt{\frac{S^2_{воспр}}{N}} = \sqrt{\frac{0.28}{8}} = 0.2$$

$$t_0 = \frac{|b_0|}{S_{bj}} = \frac{|8.5|}{0.2} = 42.5 \qquad t_{12} = \frac{|b_{12}|}{S_{bj}} = \frac{|-0.5|}{0.2} = 2.5$$

$$t_1 = \frac{|b_1|}{S_{bj}} = \frac{|2.5|}{0.2} = 12.5 \qquad t_{13} = \frac{|b_{13}|}{S_{bj}} = \frac{|0.5|}{0.2} = 2.5$$

$$t_2 = \frac{|b_2|}{S_{bj}} = \frac{|-0.5|}{0.2} = 2.5 \qquad t_{23} = \frac{|b_{23}|}{S_{bj}} = \frac{|-1.5|}{0.2} = 7.5$$

$$t_3 = \frac{|b_3|}{S_{bj}} = \frac{|3.5|}{0.2} = 17.5 \qquad t_{123} = \frac{|b_{123}|}{S_{bj}} = \frac{|0.11|}{0.2} = 1.25$$

Зададимся уровнем значимости p=0,05. Табличное значение критерия Стьюдента для уровня значимости p=0,05 и числа степеней свободы f=3-1=2 $t_p(f)$=4,3. Таким образом, коэффициенты b_2, b_{12}, b_{13} и b_{123} незначимы и их следует исключить из уравнения регрессии. После исключения незначимых коэффициентов уравнение регрессии будет иметь вид:

$$\hat{Y} = 8.5 + 2.5x_1 + 3.5x_3 - 1.5x_2x_3$$

После исключения из уравнения регрессии незначимых коэффициентов проверяют адекватность по критерию Фишера:

$$F = \frac{S^2_{ост}}{S^2_{воспр}} \tag{10}$$

$$S^2_{ост} = \frac{\sum_{i=1}^{N}\left(Y_i - \hat{Y}_i\right)^2}{N-q} \tag{11}$$

где: $S^2_{ост}$ – оценка остаточной дисперсии уравнения регрессии; $\hat{Y}_i$ – значение i отклика уравнения регрессии после вычеркивания незначимых коэффициентов; q – количество коэффициентов в уравнении регрессии после вычеркивание незначимых. Уравнение регрессии адекватно, если табулированные значения критерия Фишера $F_{1-p}(f_1,f_2)$ где f_1=N–q, f_2=m–1 больше рассчитанного, т.е. $F < F_{1-p}(f_1, f_2)$.

Проверим адекватность полученного уравнения регрессии:

$$S^2_{ост} = \frac{\sum_{i=1}^{N}\left(Y_i - \hat{Y}_i\right)^2}{8-4} = 2$$

$$F = \frac{S^2_{ост}}{S^2_{воспр}} = \frac{2}{0,28} = 7,1$$

Табулированное значение критерия Фишера для p=0,05, f_1=8-4=4, f_2=3-1=2, $F_{1-p}(f_1,f_2)$=19,3, расчетное значение критерия Фишера меньше табличного, следовательно, полученное уравнение регрессии адекватно описывает экспериментальные данные.

6.2 ОСНОВНЫЕ СТАДИИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Математическое моделирование включает в себя три основных этапа:

1. формализацию изучаемого процесса–составление математического описания;
2. построение алгоритма расчета;
3. установление адекватности модели изучаемому процессу.

При построении математической модели используется блочный принцип математического описания. Согласно этому принципу выделяется ряд типовых элементарных процессов и каждый из этих процессов исследуется отдельно (по блокам). В начале исследуется гидродинамика процесса – основа структуры будущей модели. Гидродинамика отражает поведение так называемого «холодного» объекта, т. е. объекта без физико-химических превращений, но с реальными нагрузками. Гидродинамика изучает распределение масс в потоках, связанное с перемещением жидкости или газа. Далее изучают кинетику химических реакций, скорости процессов массы переноса и теплопереноса, кинетику фазовых переходов и т. д., с учетом гидродинамических условий найденной модели и составляют математическое описание каждого из процессов. Заключительным этапом в данном случае является объединение описаний всех исследованных «элементарных» процессов (блоков) в единую систему уравнений математического описания объекта моделирования.

Второй этап заключается в разработке и реализации на ЭВМ моделирующего алгоритма. Моделирующий алгоритм определяется как последовательность операций, которые необходимо выполнить над уравнениями математического описания для того, чтобы найти значения интересующих нас параметров процесса.

Необходимо также, чтобы модель достаточно верно описывала качественно и количественно свойства исследуемого процесса, т.е. она должна быть адекватна моделируемому процессу. Для проверки адекватности математической модели реальному процессу нужно сравнить результаты измерения в ходе процесса с результатами предсказания модели в идентичных условиях (при определенных значениях параметров). При этом используют статистические методы.

6.3 ОСНОВНЫЕ ГРУППЫ УРАВНЕНИЙ, ВХОДЯЩИХ В МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА

В составе математического описания, разработанного на основе физической природы исследуемого объекта, можно выделить следующие группы уравнений:

1. Уравнения баланса масс и энергии, записанные с учетом гидродинамической структуры движения потоков. Данная группа уравнений

характеризует распределение в потоках температур, составов и связанных с ними свойств: плотности, теплоемкости и т.д.

2. Уравнения кинетики процессов. Сюда относятся описания элементарных процессов протекания химической реакции, теплопереноса, массопереноса. Для записи уравнений используются гипотезы дополнительных связей между основными переменными процесса.

3. Теоретические, эмпирические или полуэмпирические соотношения между различными параметрами процесса – уравнения для физических или гидродинамических параметров: теплоемкости, вязкости, коэффициентов теплоотдачи и т.д.

4. Ограничения на параметры процесса, например, температура в зоне катализатора не может быть выше некоторой заданной, иначе катализатор потеряет свои свойства и т. д.

Данные группы уравнений входят в состав математической модели любого химико-технологического процесса. Они представляют аналитическую теорию исследования физико-химических процессов. Кроме того, модель строится так, чтобы она наиболее полно отражала характер поведения потоков вещества и энергии при одновременно достаточно простом математическом описании. Простота математического описания определяется возможностью решения модели на ЭВМ.

6.4 МАТЕРИАЛЬНЫЙ И ТЕПЛОВОЙ БАЛАНСЫ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Исходным соотношением математического описания процессов в аппарате является общий материальный баланс, составленный для отдельных компонентов потока.

Если концентрации веществ неодинаковы в различных точках аппарата, то уравнение материального баланса составляют для элементарного объема. Для элемента объема аппарата материальный баланс записывается в соответствии с законом сохранения массы:

Количество вещества, поступающего в элементарный объем за данный промежуток времени	=	Количество вещества, выходящего из элементарного объема за промежуток времени	+	Количество вещества, накапливаемого в рассматриваемом элементарном объеме за данный промежуток времени

Математически закон сохранения массы можно представить в виде следующего соотношения

$$\Delta M = M_{вх}\Delta t - M_{вых}\Delta t \qquad (12)$$

где Мвх, Мвых – массовые потоки (кг/с) на входе и выходе рассматриваемого элементарного объема, Δt – элементарный промежуток времени (время наблюдения), ΔM – элементарное накопление массы (кг) в рассматриваемом объеме за время Δt.

Если можно принять, что концентрации веществ в каждой точке объема аппарата одинаковы (хорошее перемешивание), уравнение (12) относят ко всему объему аппарата. В этом случае уравнение закона сохранения массы можно представить в дифференциальном виде. Для этого разделим уравнение на Δt и перейдем к приделу при Δt→0

Учитывая, что $\lim\limits_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta M}{\Delta t} = \frac{dM}{dt}$

$$\frac{dM}{dt} = M_{вх} - M_{вых} \qquad (13)$$

т.е. скорость накопления массы вещества в некотором объеме равна разности массовых потоков (кг/с) на входе и выходе этого объема.

При составлении уравнений материального баланса исследуемого химико-технологического процесса используют или уравнение (12) – при этом получают математическое описание в виде дифференциальных уравнений в частных производных, или уравнение (13) – получают обыкновенные дифференциальные уравнения. Необходимо также заметить, что уравнение (13) – частный случай уравнения (12).

Аналогично составляется тепловой баланс, используя закон сохранения энергии. Для элементарного объема закон сохранения записывают в приращениях, т.е.

$$\Delta Q = Q_{вх} \cdot \Delta t - Q_{вых} \cdot \Delta t \qquad (14)$$

Если можно принять, что температура и связанные с ней свойства потока в каждой точке всего объема аппарата одинаковы, то закон сохранения записывают для всего рассматриваемого объема в дифференциальной форме

$$\frac{dQ}{dt} = Q_{вх} - Q_{вых} \qquad (15)$$

Здесь ΔQ (Дж) – элементарное накопление энергии в элементарном объеме; Qвх, Qвых (Дж/с) – тепловые потоки на входе и выходе рассматриваемого объема, $\frac{dQ}{dt}$ – скорость накопления энергии в исследуемом объеме.

Уравнения (14,15) используются при составлении тепловых балансов химико-технологических процессов. Также, как и уравнение (12), соотношение (14) приводит к математическому описанию в виде дифференциальных уравнений в частных производных, а уравнение (15) – к обыкновенным дифференциальным уравнениям. Тип используемого математического аппарата определяет структуру будущей математической модели. Для установления структуры модели необходимо выявить особенности гидродинамической структуры потоков, которая проявляется в характере распределения времени пребывания частиц потока в аппарате, так как движение частиц определяет условия переноса энергии и массы.

В реальной непрерывной системе в силу стохастической природы движения ее частиц на микроуровне всегда имеет место неравномерность распределения частиц по времени пребывания в аппарате. К наиболее существенным источникам неравномерности распределения элементов потока по времени пребывания в промышленных аппаратах можно отнести:

неравномерность профиля скоростей, турбулизацию потоков, молекулярную диффузию, наличие застойных областей в потоках, байпасные и перекрестные токи, температурные градиенты движущихся сред и т.д. Перечисленные причины, существующие в технологических аппаратах и действующие в различных комбинациях, обусловливают специфический характер неравномерности в каждом конкретном случае.

Для оценки неравномерности потоков вводится ряд статистических функций распределения, так как характер распределения частиц подвержен статистическим законам. Функции распределения находятся по виду сигнала, проходящего через систему. В качестве такого сигнала используется подача вещества – индикатора на вход аппарата в виде возмущения. На основе статистической обработки экспериментальных данных распределения индикатора по аппарату устанавливают функции распределения.

Исследуя статистические функции распределения для различных по конструкции аппаратов получают различные модели гидродинамической структуры распределения частиц, которые и используются для составления материальных и тепловых балансов процесса, т.е. построения математической модели.

6.5 МОДЕЛЬ ТИПА «ВЫТЕСНЕНИЕ – ВЫТЕСНЕНИЕ»

В прямоточном теплообменнике типа «труба в трубе» происходит охлаждение жидкости с T_2=200ºС до T_1=100ºС водой с начальной температурой T_0=20ºС. Горячий поток движения по внутренней трубе диаметром D_1=0,01м, а охлаждающий поток – по внешней трубе D_2=0,03м. Толщина стенки трубы δ =2мм. Режим течения потоков стационарный. Объемный расход жидкости $G_T=0{,}2\times10^{-4}$м^3/сек, а воды – $G_X=2G_T$, коэффициент теплопередачи K=10000 вт/м^2·К, плотность жидкости ρ_T=1500 кг/м^3, теплоемкость жидкости C_{PT}=2500 Дж/кг·К, плотность воды ρ_X=1000 кг/м^3, теплоемкость воды C_{PX}=4200 Дж/кг·К. Необходимо построить график изменения температур теплоносителя и хладагента по длине аппарата.

Примем, что тепловая емкость стенки мала. В соответствии с моделью вытеснения нельзя принять, что во всех точках объема аппарата температура одинакова, поэтому выделим элементарный объем (рис. 1) и запишем тепловые балансы для теплоносителя и хладагента.

Моделью вытеснение – вытеснение описываются, например, теплообменные аппараты типа труба в трубе

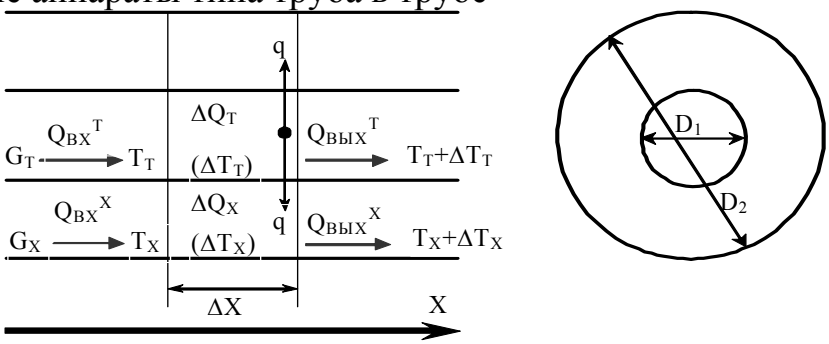


Рисунок 1 – Схема потока в случае прямотока

Примем, что имеет место прямоток тогда:
$\Delta V_T = F_T \Delta X$ – элементарный объем, занимаемый теплоносителем; $\Delta V_X = F_X \Delta X$ – элементарный объем, занимаемый хладагентом.

Примем, что теплоемкости и плотности в процессе изменяются незначительно, и запишем тепловые балансы.

Тепловой баланс теплоносителя (14)

$$\Delta Q_T = F_T \Delta X \rho_T C_{PT} \Delta T_T$$
$$Q_{BX}^T = G_T \rho_T C_{PT} T_T \qquad (16)$$
$$Q_{BЫX}^T = G_T \rho_T C_{PT} (T_T + \Delta T_T) + q \qquad (17)$$

где $q = K\Pi\Delta X(T_T - T_X)$ - основное уравнение теплопередачи, $\Pi\Delta X$ – элемент поверхности теплопередачи, Π - периметр поверхности теплопередачи, F_T – площадь сечения, в котором движется теплоноситель.

$$F_T \Delta X \rho_T C_{PT} \Delta T_T = G_T \rho_T C_{PT} (T_T - T_T - \Delta T_T)\Delta t - K\Pi\Delta X(T_T - T_X)\Delta t \qquad (18)$$

Разделив правую и левую часть этого уравнения на $\Delta t \Delta X$ и переходя к пределу при $\Delta t \to 0$ и $\Delta X \to 0$, $\lim\limits_{\Delta t \to 0} = \frac{\Delta T_T}{\Delta t} = \frac{\partial T_T}{\partial t}$ и $\lim\limits_{\Delta x \to 0} = \frac{\Delta T_T}{\Delta x} = \frac{\partial T_T}{\partial x}$ получим:

$$F_T \rho_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial t} = -G_T \rho_T C_{PT} \frac{\partial T_T}{\partial x} - K\Pi(T_T - T_X) \qquad (19)$$

Тепловой баланс хладагента

$$\Delta Q_X = F_X \Delta X \rho_X C_{PX} \Delta T_X$$
$$Q_{BX}^X = G_X \rho_X C_{PX} T_X + K\Pi\Delta X(T_T - T_X) \qquad (20)$$
$$Q_{BЫX}^X = G_X \rho_X C_{PX} (T_X - \Delta T_X)$$

где F_X - площадь сечения, в котором движется хладагент.

Преобразуя соотношение (20), получим второе уравнение математической модели

$$F_X \rho_X C_{PX} \frac{\partial T_X}{\partial t} = -G_X \rho_X C_{PX} \frac{\partial T_X}{\partial x} + K\Pi(T_T - T_X) \qquad (21)$$

Система уравнений (19, 21) описывает не стационарный режим теплообмена в случае прямотока. При противотоке необходимо учесть, что направление движения одного из теплоносителей не совпадает с направлением оси абсцисс (рис. 2).

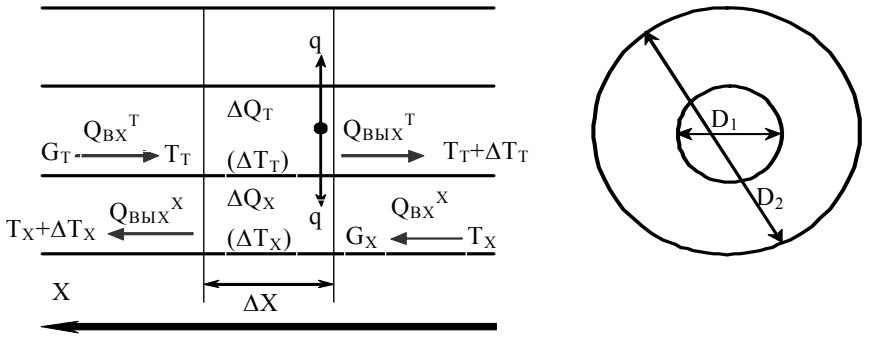


Рисунок 2 – Схема потока в случае противотока

Расчет противоточного теплообменника осуществляется в том же порядке, но в качестве начальных температур принимаются: для теплоносителя – температура, до которой охлаждается жидкость, а для хладагента – начальная температура воды.

Уравнения (19, 21) представляют собой изменение температуры среды по длине теплообменника и по времени. Приравняв $\frac{\partial T}{\partial t}$ к нулю получаем уравнения статического режима теплообменника.

Уравнения теплового баланса потоков для случая прямотока в стационарном режиме имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{dT_T}{dX} &= \frac{-K\pi(D_1+\delta)}{G_T \cdot \rho_T \cdot C_{PT}}(T_T - T_x) \\ \frac{dT_x}{dX} &= \frac{K\pi(D_2+\delta)}{G_x \cdot \rho_x \cdot C_{PX}}(T_T - T_X) \end{aligned} \qquad (22)$$

Для получения графиков изменения температур потоков по длине необходимо решить систему линейных дифференциальных уравнений (22).

Решение системы проще всего получить при помощи пакета прикладных программ MathCAD, используя встроенный метод Рунге – Кутта.

Для этого введем несколько обозначений: $at = \frac{K\pi(D_1+\delta)}{G_T \cdot \rho_T \cdot C_{PT}}$, $ax = \frac{K\pi(D_2+\delta)}{G_x \cdot \rho_x \cdot C_{PX}}$

Зададим матрицу начальных значений интегрирования системы уравнений:

$$X := \begin{bmatrix} T_2 \\ T_0 \end{bmatrix}$$

Составим матрицу для решения системы уравнений:

$$D(t, X) := \begin{bmatrix} -at \cdot (X_0 - X_1) \\ ax \cdot (X_0 - X_1) \end{bmatrix},$$

где X_0 соответствует изменению температуры теплоносителя T_T

X_1 – изменению температуры хладагента T_X.

Получим численное решение системы уравнений

$Z := rkfixed(X, 0, 20, 1000, D)$, n:=0..50,

где 0,20 интервал интегрирования, 1000 количество точек интегрирования на заданном интервале, n количество точек отображаемых на графике.

После этого построим график изменения температуры хладагента и теплоносителя по длине аппарата (рис 3).

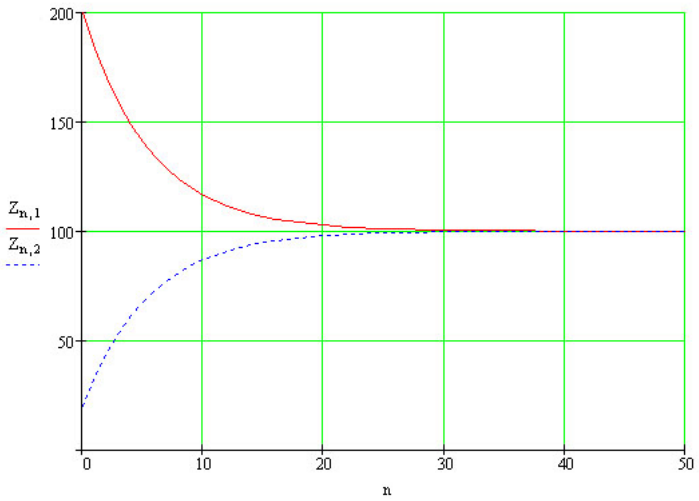


Рисунок 3 – Изменение температуры теплоносителя ($Z_{n,1}$) и хладагента ($Z_{n,2}$) по длине аппарата.

6.6 МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

При построении математического описания химических реакторов используют самые разнообразные гидродинамические модели. Основная трудность построения математической модели заключается в отсутствии достаточно надежной кинетики. Известно, что скорость химического превращения описывается законом действующих масс, труднее установить действительный механизм реакции.

При математическом моделировании химических реакторов примем, что скорость химической реакции w_i измеряется в моль/(м^{3}с) – гомогенные реакции – и определяется в соответствии с законом действующих масс. Построить математическую модель – это значит – написать соотношения для определения концентраций всех компонентов и температуры реакционной смеси на выходе реактора. Рассмотрим математическую модель на примере следующей химической реакции $A + B \xrightarrow{K} C + Д$

Скорости химического превращения по каждому компоненту имеют вид (23):

$$\begin{aligned} w_A &= -KC_AC_B \\ w_B &= w_A \\ w_C &= w_Д = -w_A = KC_AC_B \end{aligned} \qquad (23)$$

где К – константа скорости химической реакции, которая зависит от типа молекул и температуры в соответствии с уравнением Аррениуса (24)

$$K = K_0 \exp(-\frac{E}{RT}) \qquad (24)$$

где K_0 – частотный фактор, Е – энергия активации.

Математическая модель химического реактора представляет собой уравнения материального баланса по компонентам выражающих закон сохранения массы и уравнение теплового баланса, составляемого в соответствии с законом сохранения энергии.

Для гомогенных процессов с известным механизмом физико-химического превращения веществ кинетические уравнения можно составить путем непосредственного применения закона действующих масс к каждой элементарной стадии реакции. Для гетерогенных и гетерогенно-каталических реакций, как правило, невозможно установить достоверный механизм процесса, поэтому для них ограничиваются получением эмпирических уравнений скорости.

6.7 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ

Определить кинетические зависимости компонентов двухстадийной гомогенной последовательности химической реакции,

$$A + B \xrightarrow{K} C + Д ,$$

протекающей при постоянной температуре Т и при постоянном объеме реагентов. Известны значения константы скорости *k* при температуре *T* и начальные значения концентрации компонентов $C_i(0)$.

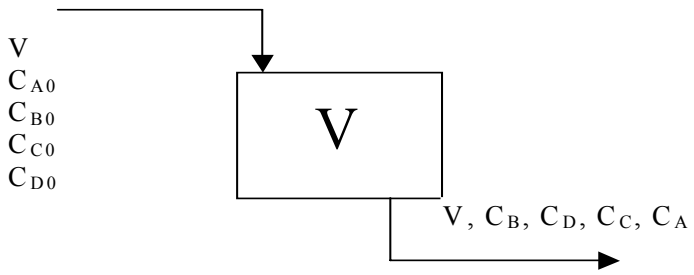


Рисунок 4 – Химический реактор

V – массовый расход, кг/с; C_i – концентрация i – го компонента на входе и выходе реактора, моль/моль.

По условию температура в зоне реакции поддерживается постоянной, поэтому записываем только материальные балансы.

$$\frac{dM}{dt} = M_{вх}^{к} - M_{вых}^{к} + (\pm M_{XP}) \qquad (25)$$

где M_{XP} – массовый поток, характеризующий химическое превращение, знак плюс или минус учитывается при определении скорости химической реакции, например, для компонента А.

$$-M_{XP} = -KC_A C_B V m_A = -w_A V m_B \qquad (26)$$

где m_A –молекулярный вес компонента А (M_{KP} имеет размерность кг/с).

В соответствии с уравнением (25) математическое описание данного реактора имеет вид (27):

$$\begin{aligned}
V\rho\frac{m_A}{m}\frac{dC_A}{dt} &= V\frac{m_A}{m}(C_{A0} - C_A) - w_A V m_A \\
V\rho\frac{m_B}{m}\frac{dC_B}{dt} &= V\frac{m_B}{m}(C_{B0} - C_B) - w_B V m_B \\
V\rho\frac{m_C}{m}\frac{dC_C}{dt} &= V\frac{m_C}{m}(C_{C0} - C_C) + w_C V m_C \\
V\rho\frac{m_D}{m}\frac{dC_D}{dt} &= V\frac{m_D}{m}(C_{D0} - C_D) + w_D V m_D
\end{aligned} \qquad (27)$$

Или систему уравнений (27) можно записать, используя закон сохранения масс, т.е. любое дифференциальное уравнение можно заменить выражением $C_A + C_B + C_C + C_Д = 1$ заменив последние, получим:

$$\begin{aligned}
V\rho\frac{m_A}{m}\frac{dC_A}{dt} &= V\frac{m_A}{m}(C_{A0} - C_A) - w_A V m_A \\
V\rho\frac{m_B}{m}\frac{dC_B}{dt} &= V\frac{m_B}{m}(C_{B0} - C_B) - w_B V m_B \\
V\rho\frac{m_C}{m}\frac{dC_C}{dt} &= V\frac{m_C}{m}(C_{C0} - C_C) + w_C V m_C \\
C_A + C_B + C_C + C_Д &= 1
\end{aligned} \qquad (28)$$

7 ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЙ ДЛЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ

7.1 ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ АКТИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Задание 0

В лабораторных условиях исследуется синтез полимера. Синтез проводят в растворе. Изучается влияние трех факторов: Z_1 – концентрация мономера (20–28 %); Z_2 – концентрация инициатора полимеризации (0,15–0,25 %); Z_3 – температура (343–363 К) на выход полимера Y(%). Результаты эксперимента представлены в табл. 2.

Таблица 2 – Результаты полного трехфакторного эксперимента

	X_1	X_2	X_3	Y
1	+1	+1	+1	42,5
2	–1	+1	+1	52
3	+1	–1	+1	44
4	–1	–1	+1	54
5	+1	+1	–1	46
6	–1	+1	–1	54,5
7	+1	–1	–1	46
8	–1	–1	–1	62

В центре плана были поставлены дополнительные параллельные опыты и получены следующие результаты: $Y_1 = 43$, $Y_2 = 47$, $Y_3 = 48$

Задание 1

При исследовании показателя степени усвояемости аммиака в Y в фосфорных соединениях изучалось влияние температуры аммонизации Z_1 (20÷70°С), продолжительность аммонизации Z_2 (15÷20 мин), норма аммиака Z_3(100%÷150%). Результаты эксперимента представлены в табл. 3.

Таблица 3 – Результаты полного трехфакторного эксперимента

	X_1	X_2	X_3	Y
1	+1	+1	+1	28
2	–1	+1	+1	27
3	+1	–1	+1	36
4	–1	–1	+1	12
5	+1	+1	–1	21
6	–1	+1	–1	18
7	+1	–1	–1	40
8	–1	–1	–1	26

В центре плана были поставлены дополнительные параллельные опыты и получены следующие результаты: $Y_1 = 27$, $Y_2 = 31$, $Y_3 = 28,5$

Задание 2

В лабораторных условиях исследовалась прочность Y (кгс/см^2) пастизолей. Изучалось влияние весового отношения пластификатора к ПВХ Z_1 (0,81÷0,83), температуры преджелатинизации Z_2 (80,8÷81,6 °С), температуры желатинизации Z_3 (184÷188°С). Результаты эксперимента представлены в табл. 4.

Таблица 4 – Результаты полного трехфакторного эксперимента

	X_1	X_2	X_3	Y
1	+1	+1	+1	93,4
2	–1	+1	+1	89,4
3	+1	–1	+1	88,2
4	–1	–1	+1	95,7
5	+1	+1	–1	92,7
6	–1	+1	–1	72,2
7	+1	–1	–1	82,1
8	–1	–1	–1	75,9

В центре плана были поставлены дополнительные параллельные опыты и получены следующие результаты: Y_1 = 83,8, Y_2 = 84,5, Y_3 = 83,1

Задание 3

В лабораторных условиях исследовалась разнотолщенность Y (%) пастизолей. Изучалось влияние весового отношения пластификатора к ПВХ Z_1 (0,81÷0,83), температуры преджелатинизации Z_2 (80,8÷81,6 °С), температуры желатинизации Z_3 (184÷188°С). Результаты эксперимента представлены в табл. 5.

Таблица 5 – Результаты полного трехфакторного эксперимента

	X_1	X_2	X_3	Y
1	+1	+1	+1	13
2	–1	+1	+1	15
3	+1	–1	+1	19
4	–1	–1	+1	18,6
5	+1	+1	–1	14
6	–1	+1	–1	18
7	+1	–1	–1	13
8	–1	–1	–1	27

В центре плана были поставлены дополнительные параллельные опыты и получены следующие результаты: Y_1 = 17,3, Y_2 = 18, Y_3 = 17,7

Задание 4

В лабораторных условиях исследовалась толщина Y (мм) пастизолей. Изучалось влияние весового отношения пластификатора к ПВХ Z_1 (0,81÷0,83), температуры преджелатинизации Z_2 (80,8÷81,6 °С), температуры желатинизации Z_3 (184÷188°С). Результаты эксперимента представлены в табл. 6.

Таблица 6 – Результаты полного трехфакторного эксперимента

	X_1	X_2	X_3	Y
1	+1	+1	+1	1,82
2	–1	+1	+1	1,58
3	+1	–1	+1	1,17
4	–1	–1	+1	1,77
5	+1	+1	–1	1,47
6	–1	+1	–1	1,56
7	+1	–1	–1	2,22
8	–1	–1	–1	0,91

В центре плана были поставлены дополнительные параллельные опыты и получены следующие результаты: $Y_1 = 1,05$, $Y_2 = 1,11$, $Y_3 = 1,07$

Задание 5

В лабораторных условиях исследовалась относительное удлинение Y (%) пастизолей. Изучалось влияние весового отношения пластификатора к ПВХ Z_1 (0,81÷0,83), температуры преджелатинизации Z_2 (80,8÷81,6 °С), температуры желатинизации Z_3 (184÷188°С). Результаты эксперимента представлены в табл. 7.

Таблица 7 – Результаты полного трехфакторного эксперимента

	X_1	X_2	X_3	Y
1	+1	+1	+1	408
2	–1	+1	+1	375
3	+1	–1	+1	395
4	–1	–1	+1	412
5	+1	+1	–1	350
6	–1	+1	–1	334
7	+1	–1	–1	372
8	–1	–1	–1	339

В центре плана были поставлены дополнительные параллельные опыты и получены следующие результаты: $Y_1 = 380$, $Y_2 = 395$, $Y_3 = 378$

Задание 6

В лабораторных условиях исследовался процесс образования корок Y(г) на стенках реактора полимеризатора во время полимеризации винилхлорида. Изучалось влияние количества инициатора Z_1 (0,08÷1,2 г), количество стабилизатора Z_2 (0,6÷0,8 г), pH среды полимеризации Z_3 (6÷13). Результаты эксперимента представлены в табл. 8.

Таблица 8 – Результаты полного трехфакторного эксперимента

	X_1	X_2	X_3	Y
1	+1	+1	+1	0,63
2	–1	+1	+1	0,52
3	+1	–1	+1	0,42
4	–1	–1	+1	0,53
5	+1	+1	–1	0,59

6	–1	+1	–1	0,15
7	+1	–1	–1	0,40
8	–1	–1	–1	0,10

В центре плана были поставлены дополнительные параллельные опыты и получены следующие результаты: $Y_1 = 0,41$, $Y_2 = 0,45$, $Y_3 = 0,46$

Задание 7

Параметром оптимизации в лабораторных опытах была степень превращения Y изопропил бензола в двуокись углерода. Факторов было три: Z_1 – температура (100÷430 °С); Z_2 – объемная скорость потока (100÷400 $г^{-1}$); Z_3 – концентрация изопропилбензола в газовой фазе (1,0÷2,0 мг/л). Результаты эксперимента представлены в табл. 9.

Таблица 9 – Результаты полного трехфакторного эксперимента

	X_1	X_2	X_3	Y
1	+1	+1	+1	12
2	–1	+1	+1	10,2
3	+1	–1	+1	14,3
4	–1	–1	+1	15
5	+1	+1	–1	10,4
6	–1	+1	–1	16,2
7	+1	–1	–1	19,5
8	–1	–1	–1	22,5

В центре плана были поставлены дополнительные параллельные опыты и получены следующие результаты: $Y_1 = 15,4$, $Y_2 = 15,9$, $Y_3 = 15,2$

Задание 8

Изучалось влияние температуры Z_1 (60÷80°С), продолжительности Z_2 (2÷6 часов), степени титрования Z_3 (30÷75 %) на объемное электрическое сопротивление Y Ом·м анионовых мембран. Результаты эксперимента представлены в табл. 10.

Таблица 10 – Результаты полного трехфакторного эксперимента

	X_1	X_2	X_3	Y
1	+1	+1	+1	8,4
2	–1	+1	+1	5,6
3	+1	–1	+1	12,6
4	–1	–1	+1	7
5	+1	+1	–1	5,6
6	–1	+1	–1	2,8
7	+1	–1	–1	4,2
8	–1	–1	–1	1,4

В центре плана были поставлены дополнительные параллельные опыты и получены следующие результаты:$Y_1 = 7,1$, $Y_2 = 6,4$, $Y_3 = 8,0$

Задание 9

Изучалось влияние температуры Z_1 (60÷80°С), продолжительности Z_2 (2÷6 часов), степени титрования Z_3 (30÷75 %) на предел прочности при растяжении Y мПа анионовых мембран. Результаты эксперимента представлены в табл. 11.

Таблица 11 – Результаты полного трехфакторного эксперимента

	X_1	X_2	X_3	Y
1	+1	+1	+1	9
2	–1	+1	+1	12,1
3	+1	–1	+1	10,3
4	–1	–1	+1	5
5	+1	+1	–1	2,4
6	–1	+1	–1	3,7
7	+1	–1	–1	4
8	–1	–1	–1	3

В центре плана были поставлены дополнительные параллельные опыты и получены следующие результаты: Y_1 = 3,1, Y_2 = 2,0, Y_3 = 2,5

7.2 МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛООБМЕНА

Жидкость охлаждается в теплообменнике типа «труба в трубе» с температуры T_2 до T_1, хладоагентом с начальной температурой T_0. Жидкость движется по внутренней трубе диаметром D_1=0,015м, хладоагент вода – по внешней трубе D_2=0,045м. Толщина стенки внутренней трубы δ =2мм. Режим стационарный. Объемный расход жидкости G_T, воды – G_X=2G_T, коэффициент теплопередачи K=10000 вт/м^2·К, плотность жидкости ρ_1=1200кг/м^3, теплоемкость C_{p1}=3000 Дж/кг·К. Значения параметров ρ_2 и C_{p2} для H_2O найти из справочных данных.

Построить графики изменения температур потоков по длине для прямоточного и противоточного теплообменников. Сравнить эффективность прямоточного и противоточного теплообменников с точки зрения диапазона температур и размеров теплообменников.

Варианты заданий приведены в табл. 12.

Таблица 12 – Варианты заданий

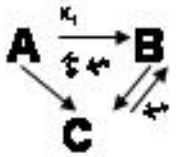
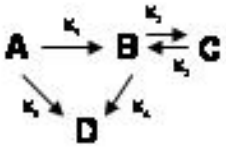
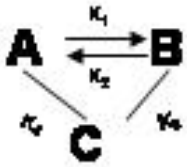
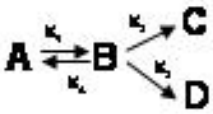
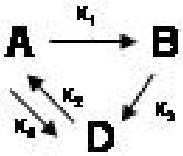
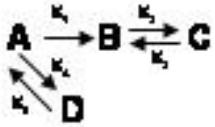
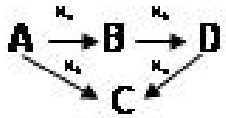
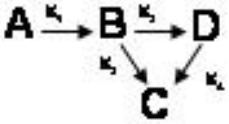
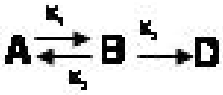
№ п/п	V×10^{-4}, м^3/сек	T_0, °С	T_2,
0.	0,40	10	250
1.	0,45	20	240
2.	0,35	25	235
3.	0,50	30	230
4.	0,55	35	220
5.	0,50	40	200
6.	0,50	45	240
7.	0,30	5	240
8.	0,30	5	220
9.	0,35	15	200

7.3 МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Определить кинетические зависимости компонентов гомогенной последовательности химической реакции, протекающей при постоянной температуре T и при постоянном объеме реагентов. Известны значения констант скорости k_i каждой стадии при температуре и начальные значения концентрации компонентов $C_i(0)$.

Варианты заданий приведены в табл. 13.

Таблица 13 – Варианты заданий

№ варианта	Кинетика	№ варианта	Кинетика
0.		1.	
2.		3.	
4.		5.	
6.		7.	
8.		9.	

Учебное издание

МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ И ПРОЦЕССОВ

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ, ПРОГРАММА И КОНТРОЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ

ЛОПАТИН Александр Геннадиевич
КИРЕЕВ Павел Анатольевич
ЛОПАТИНА Светлана Викторовна

Редактор Туманова Е.М.
Лицензия ЛР № 020714 от 02.02.98
Подписано в печать . . . Формат 60x84 1/16
Бумага Снегурочка. Отпечатано на ризографе
Усл. печ. л. 1,75. Уч.- изд. л. 1,7.
Тираж 50 экз. Заказ № .

ФГБОУ ВПО Российский химико-технологический университет
им. Д. И. Менделеева
Новомосковский институт (филиал). Издательский центр
Адрес университета:125047, Москва, Миусская пл., 9
Адрес института: 301670, Новомосковск, Тульской обл., Дружбы 8