

**С.В. Натареев, И.В. Постникова, В.П. Миронов**

## **ОСНОВЫ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

**Учебное пособие**



**Иваново**

**2016**

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Ивановский государственный химико-технологический университет

**С.В. Натареев, И.В. Постникова, В.П. Миронов**

## **ОСНОВЫ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

**Учебное пособие**

Иваново 2016



УДК 691.002:620.179.1

Натареев, С.В. Основы научных исследований: учеб. пособие / С.В. Натареев, И.В. Постникова, В.П. Миронов; Иван. гос. хим.-технол. ун-т. – Иваново, 2016. – 154 с.

В учебном пособии рассматриваются вопросы по организации, постановке и проведению теоретических и экспериментальных исследований, приводятся методы обработки результатов эксперимента и рекомендации по их внедрению в производство, а также правила оформления научно-исследовательских работ и магистерских диссертаций.

Предназначено для магистров, обучающихся по направлению «Технологические машины и оборудование».

Табл. 15. Ил. 52. Библиогр.: 14 назв.

Печатается по решению редакционно-издательского совета Ивановского государственного химико-технологического университета.

Рецензенты:

кафедра естественно-научных дисциплин

Ивановской пожарно-спасательной академии ГПС МЧС России;

доктор технических наук, профессор Е.Н. Калинин

(Ивановский государственный политехнический университет).

© Натареев С.В., Постникова И.В., Миронов В.П.

© ФГБОУ ВО «Ивановский государственный  
химико-технологический университет», 2016

## Оглавление

Введение	5
Глава 1. Общие представления о науке	6
1.1. Основные понятия и определения науки	6
1.2. Научное исследование	8
1.3. Этапы научного исследования	12
1.4. Информационное обеспечение научного исследования	14
Глава 2. Методологические основы научных исследований	17
2.1. Методы, методика и методология научных исследований	17
2.2. Системный анализ как метод научного познания химико-технологических систем	20
2.2.1. Химико-технологические системы	20
2.2.2. Исследование химико-технологических систем	32
Глава 3. Теоретические исследования	43
3.1. Цели, задачи и этапы теоретических исследований	43
3.2. Математическое моделирование в научных исследованиях	44
3.3. Аналитические методы исследования химико- технологических систем	52
3.5. Численные методы исследования химико-технологических систем	71
Глава 4. Экспериментальные методы исследования	97
4.1. Общие сведения. Классификация экспериментов	97
4.2. Планирование эксперимента	100
Глава 5. Обработка и оформление результатов исследований	109
5.1. Типы измеряемых величин и погрешностей	109
5.2. Некоторые сведения из теории вероятностей	110
5.3. Нахождение распределения случайных величин на основе экспериментальных данных	115
5.4. Виды статистического оценивания параметров	117

5.5. Статистическая проверка гипотез	121
5.6. Метод наименьших квадратов	127
Глава 6. Оформление результатов научных исследований и их внедрение в производство	133
6.1. Общие требования к оформлению результатов научных исследований	133
6.2. Требования к оформлению магистерской диссертации	133
6.3. Внедрение результатов научно-исследовательской работы и оценка её эффективности	143
Список литературы	146
Приложение	148

## **Введение**

Наука оказывает огромное влияние на развитие человеческого общества. Она является основной формой человеческого познания. На современном этапе развития общества все больше проявляется взаимосвязь науки, техники, технологии и производства. Наука призвана получать новые знания и рождать новые идеи, а техника и технология являются практическим применением науки в различных производствах.

Ключевым элементом потенциала страны является вузовская наука. Она отличается от академической науки тем, что исследовательская работа осуществляется преподавателями высших учебных заведений параллельно с реализацией учебного процесса. Небольшая часть научно-исследовательских работ проводится в вузах различными научно-исследовательскими центрами, лабораториями, конструкторскими организациями и другими подразделениями, подведомственными вузу или Минобрнауки России. Активное участие в научной работе принимают студенты. В настоящее время в вузовской науке многое меняется. В Концепции долгосрочного социально-экономического развития Российской Федерации на период до 2020 г. подчеркивается необходимость активизации участия студентов и преподавателей вузов в исследовательской деятельности [1]. Поэтому одной из основных задач высшей школы является подготовка будущих специалистов, способных выполнять научные исследования.

Дисциплину «Основы научных исследований, организация и планирование эксперимента» магистранты, обучающиеся по направлению «Технологические машины и оборудование», изучают на первом курсе в первом семестре. Целью курса является развитие у студентов способностей к творческому научному мышлению и формирование у них умений и навыков организации на научной основе своего труда.

# Глава 1. Общие представления о науке

## 1.1. Основные понятия и определения науки

*Наука* представляет собой определенную человеческую деятельность, направленную на получение новых знаний о природе, обществе и мышлении, применение полученных знаний для нужд человеческого общества, а также это одна из форм общественного сознания, социальный институт. Наука является следствием общественного разделения труда на физический и умственный. Появился специфический род занятий определенной группы людей – научных работников, направленный на познавательную деятельность.

*Целью науки* является получение знаний об объективном и о субъективном мире, а также постижение объективной истины.

К основным *задачам науки* можно отнести:

- 1) сбор, анализ и объяснение фактов;
- 2) качественное и количественное описание явлений;
- 3) обнаружение законов движения природы, общества, мышления и познания;
- 4) систематизация и обобщение полученных знаний;
- 5) прогнозирование событий, явлений и процессов;
- 6) установление направлений и форм практического использования полученных знаний.

*Знание* – достоверное, истинное представление о чем-либо. В противоположность истинному знанию может существовать ложное знание, которое отражает неверное, иллюзорное представление о действительности.

*Познание* – это процесс достижения знания. Различают познание чувствительное (эмпирическое) и рациональное (теоретическое). К чувствительному познанию относятся ощущения, восприятие, воображение. Рациональное познание связано с мышлением, суждением, умозаключением.

Наука с точки зрения взаимодействия субъекта и объекта познания включает:

1) *объект (предмет) познания* – совокупность связей, отношений и свойств, которая существует объективно, и на изучение которых направлена деятельность человека;

2) *субъект познания* – научный работник, специалист, исследователь, научное учреждение (организация);

3) *научная деятельность субъекта* – направлена на получение новых знаний.

По предмету, сфере и методам познания современные науки можно классифицировать:

1) науки о природе – естественные (механика, астрономия, физика, биология, химия, география, геология, экология и др.);

2) науки об обществе – гуманитарные и социальные (экономика, юриспруденция, история, философия, филология, теология, журналистика и др.);

3) науки о мышлении и познании – логика, гносеология, эпистемология и др.

В Классификаторе направлений и специальностей высшего образования выделены следующие науки:

1) естественные науки и математика (механика, физика, химия, биология и др.);

2) гуманитарные и социально-экономические науки (культурология, теология, философия, лингвистика, политология, психология, социология, физическая культура, статистика, юриспруденция и др.);

3) технические науки (строительство, металлургия, микроэлектроника, геодезия, радиотехника, архитектура и др.);

4) сельскохозяйственные науки (агрономия, зоология, ветеринария, лесное дело, рыболовство и др.).

Наука с точки зрения системы состоит из следующих частей:

1) научные понятия, постулаты, аксиомы, законы, теории, гипотезы и т.п.;

2) методология, методика и техника исследования;

3) практика внедрения полученных результатов.

*Научное понятие* – это мысль, отражающая существенные и необходимые признаки предмета или явления.

*Аксиома (постулат)* – положение, являющееся исходным в теории, и принятое без доказательств, из которого выводятся все остальные предположения по заранее известным правилам.

*Гипотеза* – предположение, выдвинутое для объяснения какого-либо явления.

*Закон* – это объективная, существенная, внутренняя, необходимая и устойчивая связь между явлениями, процессами. Различают законы природы, мышления и познания. Законы бывают всеобщие, общие и частные.

*Теория* – учение, система научных принципов, идей, обобщающих практический опыт и отражающих закономерности природы, общества и мышления. Теория классифицируется по предмету исследования. Различают социальные, физические, химические, математические и прочие теории.

*Учение* – это совокупность теоретических положений о какой-либо области явлений действительности. Учением также может быть система воззрений какого-либо ученого или мыслителя, например, учение Дарвина.

*Идея* – это основное положение в теории, мысль, замысел, интуитивное объяснение события или явления.

*Концепция* – это система взглядов об объекте исследования. Она обозначает основную точку зрения, основной замысел, руководящую идею, конструктивный принцип в научной, художественной, технической, политической и других видах научной деятельности. Концепция определяет стратегию действий.

Общественное разделение труда привело к созданию различных взаимосвязанных областей науки:

1) академическая и вузовская наука – научная деятельность направлена на фундаментальные исследования по важнейшим направлениям естественных, технических и общественных наук, создание теоретических основ для

разработки новых технологий и оборудования. Она объединяет научные учреждения Российской академии наук, высшие учебные заведения и т.п.;

2) отраслевая наука – научная деятельность направлена на разработку и внедрение передовых технологий и оборудования в определенной отрасли промышленности, создание новых материалов, получение новых сортов растений, пород животных и т.п. К отраслевым научным учреждениям относятся головные научно-исследовательские институты, конструкторские организации, селективные центры, зональные сельскохозяйственные станции и т.д.;

3) производственная наука – направлена на повышение технического уровня и совершенствование организации производства. Производственная наука развивается в заводских лабораториях, конструкторских бюро, опытных цехах и т.п.;

4) вневедомственная наука – направлена на поиск решений отдельных вопросов в сферах промышленного производства и общественной жизни. Она реализуется в научно-технических организациях, консультативных центрах, небольших научных и инженерных обществах и т.п.

В условиях научно-технической революции наука не просто способствует развитию техники и технологий, а становится ведущей производственной силой общества.

## **1.2. Научное исследование**

Научные исследования являются формой существования и развития науки. Целью научного исследования является всестороннее и достоверное изучение объекта исследования, анализ и объяснение закономерностей развития на основе разработанных в науке принципов и методов познания с последующим внедрением полученных результатов в производство (практику).

При научном исследовании можно выделить объект и средство научного исследования.



*Объектом (предметом) научного исследования* являются материальная или идеальная системы, имеющие определенную структуру, свойства, связи между составными частями этой системы, на изучение которых направлена научная деятельность человека.

*К средствам научного исследования* относится совокупность технических устройств для проведения исследования. Это может быть различная измерительная техника, приборы, приспособления и т.п.

По целевому назначению различают три вида научных исследований:

1) *фундаментальные исследования* - направлены на получение новых экспериментальных и теоретических знаний о закономерностях строения, функционирования и развития человека, общества, окружающей природной среды;

2) *прикладные исследования* – направлены на внедрение результатов фундаментальных исследований в практической деятельности человека. Из прикладных исследований выделяют:

а) *поисковые исследования* – направлены на определение перспективности работы над научной темой, отыскание путей решения поставленной задачи;

б) *научно-исследовательские работы* – направлены на создание новых технологий, опытных установок, приборов и т.п.;

в) *опытно-конструкторские работы* – разработка конструкций лабораторных и опытно-промышленных установок, а также отдельных конструктивных элементов этих установок;

3) *разработки* – направлены на подготовку результатов, полученных при проведении прикладных исследований, к практическому внедрению.

По степени важности для общества научные исследования подразделяются:

1) *работы, выполняемые по государственному плану, по заданию государственных министерств и ведомств*;

2) исследования, выполняемые по заданию местных органов самоуправления;

3) исследования, выполняемые по инициативе научно-исследовательских организаций;

4) исследования, выполняемые по договорным отношениям с различными организациями, предприятиями и фирмами.

В зависимости от источников финансирования научные исследования подразделяются на госбюджетные, финансируемые из средств госбюджета, хоздоговорные, финансируемые в соответствии с договорами, заключенными между организацией - заказчиком и исполнителем.

По длительности проведения научное исследование может быть долгосрочным (срок выполнения более 5 лет), среднесрочным (срок выполнения от 5 лет до 1 года) и краткосрочным (срок выполнения до 1 года).

Поэтому диапазон научных исследований весьма широк. Среди них отметим *научное направление, научную проблему, научную тему и научный вопрос.*

*Под научным направлением* понимают научные исследования научного коллектива, посвященные решению какой-либо крупной, фундаментальной теоретической и экспериментальной задачи в определенной отрасли науки.

*Под научной проблемой* понимают сложную научную задачу, охватывающую значительную область исследований и имеющую перспективное значение. Проблема состоит из ряда тем.

*Под научной темой* понимают научную задачу, охватывающую определенную область научного исследования и базирующуюся на определенных научных вопросах.

*Под научным вопросом* понимают более мелкие научные задачи, относящиеся к конкретной области научного исследования.

При разработке темы или вопроса ставятся, как правило, конкретные задачи по разработке новых технологий, аппаратов и машин, а также методики исследования.

По виду связей с общественным производством научные исследования классифицируются:

- 1) исследования направлены на создание новых средств производства и технологий;
- 2) исследования используются для совершенствования производственных отношений;
- 3) исследования направлены на совершенствование общественных отношений, повышение уровня духовной жизни человека и т.д.

### **1.3. Этапы научного исследования**

Проведение научного исследования предполагает последовательное выполнение определенных взаимосвязанных работ, которые определяются видом, объектом и целью исследования. Эти работы условно можно разбить на ряд этапов. При выполнении научного исследования выделяют следующие этапы.

*Первый этап* - формирование темы. При выполнении этого этапа предполагается общее знакомство с темой, по которой предстоит выполнить работу и предварительное ознакомление с литературой, после чего формулируют тему исследований. На этом этапе составляется план научного исследования, разрабатывается техническое задание и определяется ожидаемый экономический эффект. Особое внимание следует уделить актуальности исследования, т.е. ценности её для науки и техники на данный момент времени.

*Второй этап* – формулирование цели и задач исследования. Этот этап включает подбор и составление библиографического списка литературы по разрабатываемой теме, составление аннотаций источников, анализ проработанной информации и выбор методов научного исследования. В заключении ставятся цель и задача исследования.

Тема должна иметь научную новизну, которая состоит в отсутствии исследований при данной постановке, т.е. в недопустимости дублирования темы. Следует отличать научное исследование от инженерного исследования. Научное исследование является принципиально новым, а инженерное исследование основывается на уже открытых закономерностях. Тема также должна иметь практическую значимость, которая определяется экономическим эффектом от использования результатов научного исследования в промышленном производстве.

*Третий этап* посвящен теоретическим исследованиям. При выполнении этого этапа предполагается изучение физической сущности явления, формирование научной гипотезы, создание физической и математической моделей, а также выполнение вычислений и анализ результатов по предложенным моделям.

*Четвертый этап* состоит в проведении экспериментальных исследований. На этом этапе формулируют цели и задачи эксперимента, осуществляют планирование эксперимента, разрабатывают методики эксперимента, выбирают средства измерения, создают экспериментальные установки, на которых проводят эксперименты, и обрабатывают полученные данные.

*На пятом этапе* проводят анализ результатов научного исследования, сопоставление эксперимента с теорией, проверяют адекватность математических моделей реальным процессам и в случае их расхождения уточняют теоретические модели, проводят дополнительные экспериментальные исследования. На основании полученных теоретических и экспериментальных результатов формулируют научные и производственные выводы. Этап заканчивается составлением научно-технического отчета.

Последний *шестой этап* состоит из внедрения результатов научного исследования в производство, авторского сопровождения внедренных разработок и определения реального экономического эффекта.

## 1.4. Информационное обеспечение научного исследования

Научные исследования обычно начинаются с анализа известных данных в исследуемой области. По данным ряда ученых, затраты на поиск и анализ литературных источников составляют около 50 % времени от всего времени научного исследования. В соответствии с федеральным законом Российской Федерации «Об информации, информационных технологиях и о защите информации» от 27 июля 2006 г. N 149-ФЗ информация в зависимости от категории доступа к ней подразделяется на общедоступную, а также на информацию, доступ к которой ограничен федеральными законами (информация ограниченного доступа). Общедоступная информация может использоваться любыми лицами по их усмотрению. Граждане (физические лица) и организации (юридические лица) вправе осуществлять поиск и получение любой информации в любых формах и из любых источников при условии соблюдения требований, установленных законодательством Российской Федерации.

Носителями информации могут быть различные документы, которые бывают *первичными* и *вторичными*.

К *первичным научным документам* относятся: книги (монографии, учебники, учебные пособия, учебно-методические указания), периодические издания (журналы, бюллетени, научные сборники), нормативные документы (технические регламенты, стандарты, правила, инструкции, методики), диссертации и авторефераты диссертаций, патентная документация (авторские свидетельства, патенты), отчеты о научно-исследовательской работе.

К *вторичным научным документам* относятся: справочные издания (справочники), обзорные издания (рефераты, библиографические и аналитические обзоры, реферативные журналы).

Среди известных справочников по химии и химической технологии отметим следующие: Справочник химика (в 7 томах), Краткая химическая энциклопедия (в 5 томах), Химическая энциклопедия Брокгауза (в 2 томах),

Новый справочник химика и технолога (в 12 томах). Неоценимую помощь в поиске научной информации оказывают реферативные журналы, в которых содержатся рефераты статей, патентов и т.п., расположенные в определенном порядке по тематическим разделам (рубликам). Реферативные журналы издаются в виде книг (сводных томов) в печатном и электронном видах. Для студентов химико-технологических образовательных учреждений могут быть полезны: реферативный журнал «Химия», издаваемый в нашей стране с 1952 года, реферативный журнал Американского химического общества «Chemical Abstracts», издаваемый с 1907 года и другие издания.

Для систематизации произведений науки, литературы и искусства, периодической печати, других видов документов широко используется система универсальной десятичной классификации (УДК). Универсальная десятичная классификация построена по систематическому принципу. В индексах основной таблицы УДК отражены различные области знаний. Таблицы УДК делятся на основные и вспомогательные. Основные ряды:

- 0 – библиотечное дело;
- 1 – философия;
- 2 – религия, атеизм;
- 3 – общественно-политическая литература;
- 4 – резерв для будущего применения;
- 5 – математика, естественные науки;
- 6 – прикладные науки, медицина, техника;
- 7 – искусство;
- 8 – языкознание, филология, художественная литература;
- 9 – география, история, биографии.

Иерархический принцип подразделения от общего к частному является основным методом детализации. Кроме иерархии, при детализации ряда подразделов применяются методы фасетного анализа. В качестве примера может служить построение раздела 54 - Химия. Кристаллография. Минералогия. Основные деления этого раздела:

541 - теоретическая химия;

542 - практическая лабораторная химия, препаративная и экспериментальная химия;

543 - аналитическая химия;

544 - физическая химия;

546 - неорганическая химия;

547 - органическая химия;

548 - кристаллография;

549 - описательная минералогия. Специальное минераловедение.

Раздел 54 охватывает химию как науку. Специальные определители с дефисом применимы по всему разделу 54:

54-1 - состояние вещества;

54-3 - химические соединения. Виды;

54-4 - химические вещества. Реагенты

и т.д.

Вопросы химической технологии и производства химических продуктов относятся к разделу 66 Химическая промышленность.

УДК относительно проста, легко усваивается работниками издательств и библиотек и позволяет относительно быстро найти информацию для узкоспециализированных тем.

## **Глава 2. Методологические основы научных исследований**

### **2.1. Методы, методика и методология научных исследований**

*Метод* исследования – это способ достижения цели при проведении теоретического исследования или практического осуществления.

В зависимости от содержания изучаемых объектов различают методы естествознания и методы социально-гуманитарного исследования.

Методы исследования классифицируют по отраслям науки: математические, биологические, медицинские, социально-экономические, правовые и т.д.

Методы научного познания условно разделяют на ряд уровней *эмпирический, теоретический и метатеоретический*.

*Методы эмпирического уровня* характеризуются преобладанием чувственного познания. В этих методах единственным источником познания является опыт, и значение теоретического обобщения при изучении объекта исследования недооценивается. К этим методам относят: наблюдение, счет, измерение, сравнение, тестирование, эксперимент, моделирование и т. д.

*Наблюдение* – познание объекта материального мира через различные органы чувств без вмешательства со стороны исследователя.

*Измерение* – нахождение значения физической величины опытным путем с помощью специальных технических средств.

*Сравнение* – установление различия между объектами материального мира как при помощи органов чувств, так и при помощи технических средств измерения.

*Тестирование* – исследования объекта посредством помещения его в разные условия и отслеживание происходящих в объекте изменений.

*Эксперимент (опыт)* – метод исследования некоторого явления в управляемых наблюдателем условиях.

*Моделирование* – исследование объекта, явления или процесса путем построения и изучения их моделей, например физической, математической.



*Методы теоретического уровня* исследования характеризуются преобладанием логических подходов познания. К этим методам причисляют идеализацию, формализацию, абстрагирование, общелогические методы (анализ, синтез, индукцию, дедукцию, аналогию) и др.

*Идеализация* – это мысленное создание объектов и условий, которые не существуют в действительности и не могут быть созданы практически. Исследуемый объект наделяется гипотетическими свойствами (абсолютно черное тело, бесконечное тело, идеальный газ и т.п.), что позволяет значительно упростить постановку задачи и получить ее решение в конечном виде. Любая идеализация правомерна лишь в определенных пределах.

*Абстрагирование* – метод познания, основанный на отвлечении от второстепенных или частных явлений и сосредоточении на основных и важнейших особенностях исследуемого объекта.

*Анализ* – метод познания через расчленение или разложение объекта исследования на составные части.

*Синтез* – метод познания объекта в его единстве и взаимной связи его составных частей.

*Индукция* – метод познания путем рассуждения, при котором новое положение находится чисто логическим путем от частных фактов к общим выводам.

*Дедукция* - метод познания путем рассуждения, при котором новое положение находится чисто логическим путем от общих положений к частным выводам.

*Аналогия* – метод познания объекта исследования на основании того, что этот объект имеет сходство с другими объектами.

*Методами метатеоретического уровня* являются: диалектический, метафизический, герменевтический и др.

*Диалектический метод* – это метод познания вечно двигающихся и изменяющихся явлений природы и общества путем вскрытия внутренних противоречий и борьбы противоположностей.

*Метафизический метод* – это метод познания явлений вне их взаимных связей, изменения и развития.

*Герменевтический метод* предполагает познание объекта путем понимания не только его явных сторон, но и специфических и индивидуальных характеристик.

В зависимости от сферы применения и степени общности различают методы:

1) *всеобщие (философские)*, действующие во всех науках и на всех этапах познания;

2) *общенаучные*, которые могут применяться в гуманитарных, естественных и технических науках;

3) *частные* – для родственных наук;

4) *специальные* – для конкретной науки, области научного познания.

*Методика исследования* – совокупность методов обучения и практического выполнения исследования. Например, известны методики теоретических и экспериментальных исследований, обработки результатов, методики анализа и синтеза, методики определения экономической эффективности научного исследования и др.

Основой разработки научного исследования является *методология* – совокупность методов, способов, приемов и их определенная последовательность, принятая при проведении научного исследования. *Методология* – это учение о научном методе познания. Каждая наука имеет свою методологию. Известны следующие уровни методологии:

1) *всеобщая методология* – универсальная по отношению ко всем наукам, в содержание которой входят философские и общенаучные методы познания;

2) *частная методология* охватывает группу родственных наук и включает философские, общенаучные и частные методы познания;

3) *методология научных исследований* конкретной науки объединяет философские, общенаучные, частные и специальные методы познания.

Методология исследования обычно представляется в виде схемы или плана решения поставленной научной задачи.

## **2.2. Системный анализ как метод научного познания**

### **химико-технологических систем**

#### **2.2.1. Химико-технологические системы**

Метод системного анализа применяется для изучения сложных объектов, составные части которого взаимодействуют друг с другом, а также с внешней средой. Этот метод получил широкое применение во всех сферах научной деятельности человека: математике, естественных, гуманитарных, социально-экономических и технических науках. Метод системного анализа относят к методам метатеоретического уровня [2]. Некоторые ученые относят его к общелогическим методам [3].

Метод системного анализа направлен на изучение различных систем. В химической технологии изучают химико-технологические системы (ХТС). ХТС – это совокупность взаимосвязанных процессов и аппаратов химической технологии, функционирование которых осуществляется с целью химической переработки природных материалов в продукты потребления и промежуточные продукты.

Любая ХТС имеет определенную технологическую структуру с заданными параметрами, функционирование которой оценивается с помощью входных и выходных переменных (рис. 2.2.1).

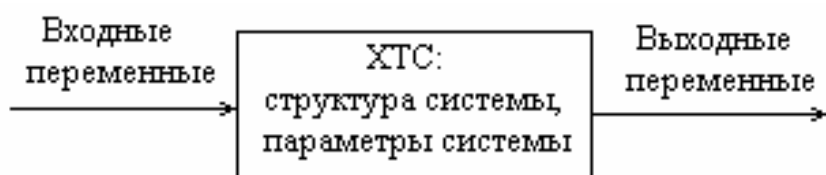


Рис. 2.2.1. Схема ХТС

Основными частями любой ХТС являются элемент и подсистема.

При анализе любого химического производства в качестве элемента могут рассматриваться отдельные аппараты: реактор, адсорбер, теплообменник и т.д.

Подсистемой называется самостоятельно функционирующая часть системы, образованная из элементов, имеющих аналогичные свойства.

Понятия “система”, “подсистема” и “элемент” – относительны, т.к. одна система может быть элементом другой системы более крупного масштаба, а отдельный элемент какой-либо системы может быть разделен на составные части.

Связь между элементами системы осуществляется с помощью потоков, характеризующих перенос вещества, теплоты и энергии от элемента к элементу. В каждом элементе ХТС осуществляется качественное и количественное преобразование входящих потоков в результате протекания в них определенного химико-технологического процесса.

*Параметры ХТС* – это физико-химические величины, характеризующие какое-либо свойство процесса, явления, системы.

Различают конструктивные и технологические параметры ХТС. К конструктивным параметрам ХТС относятся геометрические характеристики элементов системы: диаметр, объем и т.п. Технологические параметры ХТС – это физико-химические величины, характеризующие технологический процесс.

*Входные переменные ХТС* – это параметры физико-химического воздействия внешней среды на ХТС.

*Выходные переменные ХТС* – это параметры выходных технологических потоков из системы.

Разработка, проектирование и управление ХТС базируется на стратегии системного анализа.

*Системный анализ ХТС* – это метод научного исследования процессов химической технологии путем представления данного процесса как сложной иерархической системы с последующим проведением качественного анализа её структуры, создания на этой основе математической модели и изучения ХТС с

помощью разработанной модели с целью нахождения оптимальных параметров и характеристик функционирования системы.

Стратегия системного исследования ХТС состоит из четырех основных этапов:

- 1) качественный анализ структуры ХТС;
- 2) формализация сформулированных качественных представлений об элементах и связях между ними;
- 3) идентификация параметров математической модели и установление степени соответствия результатов наблюдений, полученных на реальном объекте, с теоретическими следствиями модели;
- 4) реализация математического описания на ЭВМ в виде комплекса прикладных программ.

По внутреннему строению различают ХТС *однородные* и *неоднородные*.

*Однородные ХТС* состоят из одного вида элементов, в которых протекают одинаковые химико–технологические процессы. Например, к таким системам может быть отнесена система химических реакторов, система теплообменных аппаратов и др.

*Неоднородные ХТС* состоят из разного вида элементов, в которых протекают различные химико–технологические процессы. К неоднородным ХТС может быть отнесена совокупность машин и аппаратов для подготовки сырья, технологическая установка для получения определенного продукта и др.

По способу функционирования ХТС различают следующие основные классы систем: *непрерывные, непрерывно-циклические, непрерывно-периодические, периодические* и *индивидуальные*.

*Непрерывные ХТС* характеризуются стационарным неизменным во времени функционированием.

*Непрерывно-циклические ХТС* характеризуются стационарным неизменным во времени функционированием с циклическим изменением во времени входных переменных.

*Непрерывно-периодические ХТС* характеризуются стационарным неизменным во времени функционированием с периодически изменяющимися во времени входными переменными.

*Периодические ХТС* характеризуются периодическим законом изменения во времени входных переменных и переменных состояния ХТС.

*Индивидуальные ХТС* – это способ функционирования системы, зависящий от периода времени, вида используемого сырья и других факторов.

К основным свойствам ХТС относятся: *надежность, чувствительность, управляемость, помехозащищенность, устойчивость, эмерджентность* и др.

*Надежность* – это свойство системы сохранять заданные функции и выпускать требуемую продукцию в определенный период времени. Надежность ХТС характеризуется частотой отказов отдельных элементов системы.

*Чувствительность* – это свойство системы изменять технологические режимы функционирования под влиянием изменения собственных параметров системы и внешних возмущающих воздействий.

*Управляемость* – это свойство системы достигать желаемой цели при тех ограниченных ресурсах управления, которые имеются в реальных условиях эксплуатации.

*Помехозащищенность* – свойство системы эффективно функционировать в условиях действия внутренних и внешних помех.

*Устойчивость* – это способность системы возвращаться в первоначальное состояние после прекращения возмущающего воздействия.

*Эмерджентность* – это способность системы приобретать новые свойства, которые отличаются от свойств отдельных элементов, образующих эту систему.

Анализ структуры ХТС удобно проводить на основе иерархического принципа. Его суть состоит в том, что сложная система рассматривается как совокупность элементов, которые взаимосвязаны, взаимодействуют между собой и внешней средой. Элементы, находящиеся на более высокой ступени

иерархии, выполняют все функции элементов системы, принадлежащих более низкой ступени иерархии.

Рассмотрим химическое производство как сложную ХТС, имеющую три уровня иерархии.

Первую, низшую ступень иерархической структуры составляют типовые процессы химической технологии (химические, тепловые, диффузионные, гидромеханические, механические) в определенном аппаратном оформлении.

Вторую ступень иерархии образуют производственные цеха, выполняющие определенные технологические процессы либо изготавливающие определенную продукцию, а также системы управления цехами.

Третью, высшую ступень, образуют системы управления совокупностью цехов, организации производства, планирования запасов сырья и реализации готовых продуктов.

В качестве примера рассмотрим также один из возможных вариантов иерархической структуры химического процесса, протекающего в реакторе.

На низшем уровне иерархии, так называемом молекулярном уровне, рассматриваются межмолекулярные взаимодействия, законы химического и межфазовых равновесий, закономерности химических реакций и т.д.

Следующим является уровень одного элемента дисперсной фазы. Таким элементом может быть одно зерно адсорбента, катализатора, пузырек газа и т.д. На этом уровне рассматриваются закономерности тепло– и массопереноса между дисперсной и сплошной фазами.

На третьем уровне изучаются физико-химические процессы в малом слое или объеме аппарата, например, в слое адсорбента, катализатора, насадки и т.д. При этом учитываются эффекты, связанные с характером движения подвижных фаз в малом слое аппарата.

Высшим уровнем является уровень аппарата в целом. Здесь рассматривается взаимодействие между различными рабочими зонами в

аппарате, например зонами сорбции и десорбции, зонами нагревания и охлаждения.

Очевидно, что количество и качественный анализ уровней иерархической структуры химико–технологической системы может быть различным в зависимости от цели создаваемого объекта и исходной информации об этом объекте.

Каждый элемент ХТС, характеризующий сущность физико-химического процесса, протекающего в элементе, изображается в виде типового технологического оператора. Технологические операторы различаются на *основные* и *вспомогательные* (рис. 2.2.2).

*Основные технологические операторы* отражают химические и физические превращения, происходящие в элементе ХТС.

*Вспомогательные технологические операторы* отражают энергетические и фазовые явления, сопровождающие разнообразные преобразования вещества и энергии в элементе ХТС.

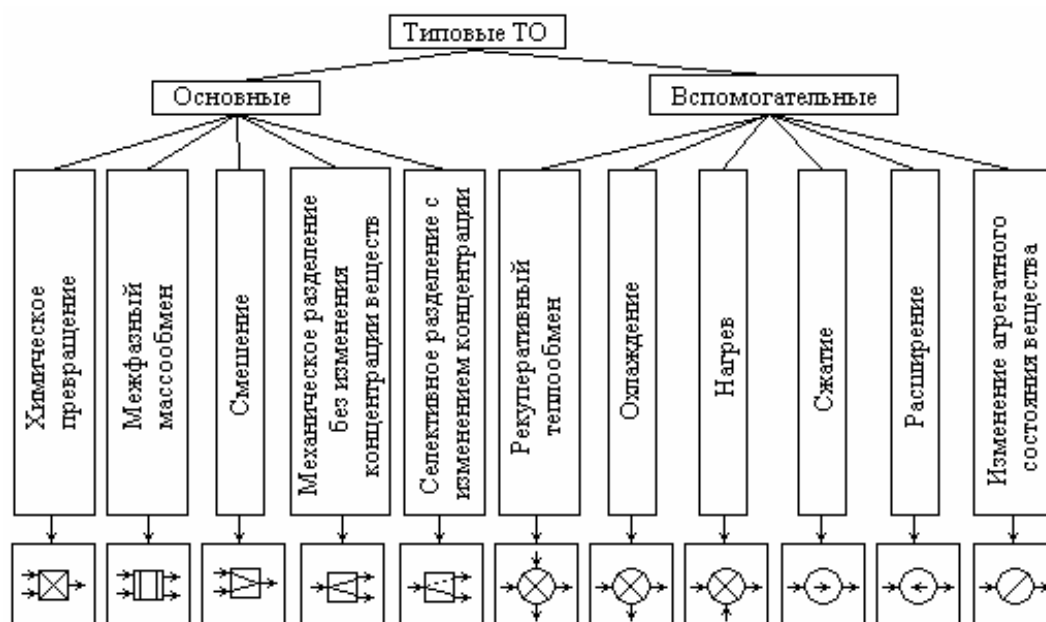


Рис. 2.2.2. Обозначения типовых технологических операторов

Элементы ХТС и соответствующие им технологические операторы соединяются направленными линиями. Выбор той или иной технологической связи между элементами определяется требуемыми свойствами ХТС,



технологическими и технико-экономическими показателями функционирования ХТС. Различают следующие типовые технологические связи между элементами (рис. 2.2.3): *последовательная, параллельная, обводная (байпасная), обратная (рециркуляционная)*.

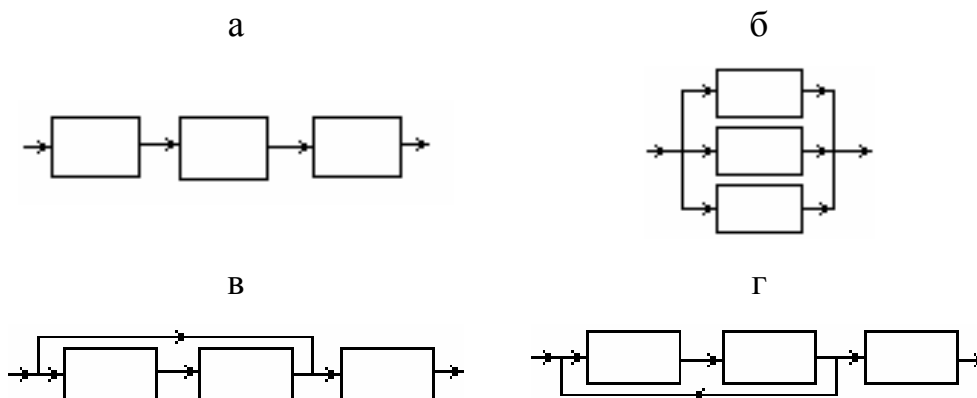


Рис. 2.2.3. Типы технологических связей:

а – последовательная; б – параллельная; в – обводная (байпасная); г – обратная (рециркуляционная)

*При последовательном соединении элементов* выход технологического потока из предыдущего элемента является входом последующего элемента.

Между последовательно соединенными элементами существует следующая зависимость:

$$x_1 = x_0; y_i = y_{i-1}; y_n = y_0; i = 1, 2, 3, \dots, n, \quad (2.2.1)$$

где  $x_0$  и  $y_0$  – общие входные и выходные потоки.

В химической технологии последовательное соединение элементов применяется, например, при последовательной переработке сырья, получении готового продукта при последовательном прохождении операций и др.

*При параллельном соединении элементов* общий технологический поток разделяется на несколько отдельных потоков, поступающих в различные элементы, после которых выходящие потоки могут объединяться в один поток. В этом случае общий входной поток равен сумме входных потоков в отдельные элементы; сумма выходных потоков равна общему выходному потоку;

$$x_0 = \sum_{i=1}^n x_i; \quad y_0 = \sum_{i=1}^n y_i. \quad (2.2.2)$$

Параллельная связь элементов применяется для повышения производительности, мощности, надежности, гибкости ХТС, а также при получении двух и более продуктов из одного исходного сырья.

*При обводном соединении элементов* общий поток разделяется на два отдельных потока. Первый из них проходит через элементы, а другой – обходит эти элементы, соединяясь затем с первым потоком.

Обводная технологическая связь может применяться, например, для регулирования качества получаемого продукта.

*При соединении элементов с обратной связью* происходит возврат части уходящего из элемента технологического потока во входящий поток данного элемента или предыдущих последовательно соединенных элементов.

Уравнение соединения элементов с обратной связью имеет вид:

$$\sum_{i=1}^n x_i = x_0 + R \sum_{i=1}^n y_i; \quad y_0 = \sum_{i=1}^n y_i (1 - R), \quad (2.2.3)$$

где  $R$ - коэффициент рециркуляции.

Коэффициент рециркуляции, входящий в уравнение (2.2.3), показывает, какая доля выходного потока после его разветвления возвращается на вход предыдущего элемента:

$$R = \frac{V_1}{V_2}, \quad (2.2.4)$$

где  $V_1$  – поток, возвращаемый на вход предыдущего элемента;  $V_2$  – поток, проходящий через параллельные элементы.

Применение рециркуляции, как правило, позволяет достигнуть наибольшего выхода готового продукта с минимальными затратами сырья, утилизировать отработанные материальные и тепловые потоки.

Исходя из характера технологической структуры, ХТС подразделяются на *разомкнутые* и *замкнутые*.

*Разомкнутой ХТС* называется такая система, в которой технологические потоки проходят через каждый элемент системы один раз.

К разомкнутым ХТС относят системы с последовательным, параллельным и байпасным соединением элементов.

*Замкнутой* называется такая система, в которой имеется обратная технологическая связь между элементом или группой элементов.

К замкнутой относят соединения элементов с рециркуляцией.

Для анализа отдельных элементов и подсистем ХТС целесообразно применять различные модели. В зависимости от поставленных целей анализа все модели ХТС можно разделить на два вида (рис. 2.2.4): обобщенные (качественные) и математические модели.

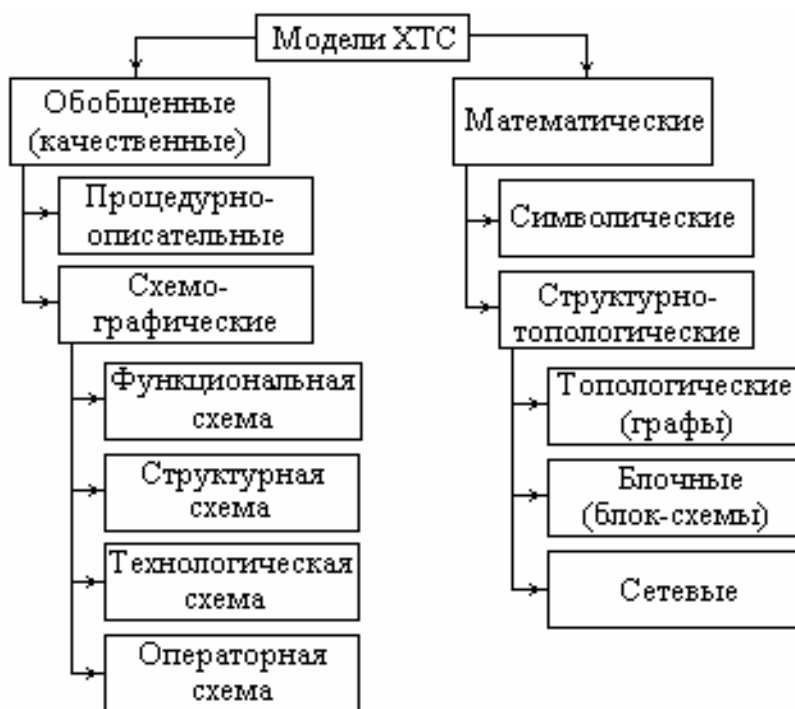


Рис. 2.2.4. Классификация моделей ХТС

Обобщенные модели ХТС дают общее качественное представление о составе элементов, входящих в технологическую структуру ХТС и особенностях взаимосвязи между элементами.

Математические модели ХТС дают количественное описание процесса, протекающего в ХТС, выраженное с помощью математической символики и в пространственной форме.

Обобщенные модели могут быть двух видов: *процедурно-описательные* и *схемо-графические*.

*Процедурно-описательные модели* представляют собой словесное описание процесса функционирования ХТС. В этих моделях могут приводиться основные химические реакции, протекающие в системе, описание процессов, происходящих в аппаратах, спецификация основного оборудования, сведения о составе сырья, значениях параметров технологического режима и объеме выпуска готовой продукции.

Примером процедурно-описательных моделей являются различные виды проектно-конструкторской документации, технологические регламенты и другая текстовая документация.

*Схемо–графические модели* дают качественное представление о функционировании системы с помощью наглядных графических изображений (схем или чертежей).

Различают следующие виды схемо–графических моделей: *функциональные, структурные, технологические и операторные.*

*Функциональная схема* – это чертеж, дающий общее представление о производстве какого-либо продукта с помощью блоков, отражающих основные технологические операции или стадии производства.

*Структурная схема* – это чертеж, на котором ХТС представлена в виде совокупности блоков, разделенных по определенным признакам, и связей между блоками с указанием направления движения материальных и тепловых потоков.

*Технологическая схема* – это чертеж, на котором элементы системы показаны в виде условных графических изображений, технологические связи между элементами изображены направленными линиями, а также отображены принципы, обеспечивающие химико-технологический процесс.

*Операторная схема* – это чертеж, дающий наглядное представление о физико-химической сущности химико-технологического процесса, на котором элементы системы изображены в виде типовых технологических операторов, осуществляющих качественное или количественное преобразование входящих материальных или энергетических потоков.

Все математические модели ХТС можно разделить на *символические (аналитические)* и *структурно-графические*.

*Символические (аналитические) модели ХТС* записываются в математических соотношениях – формулах, уравнениях, неравенствах и др.

*Структурно-графические модели* представляют собой наглядное графическое отображение количественного изменения какого-либо свойства системы.

Математические структурно-графические модели разделяют на три группы: *топологические (графы)*, *блочные (блок-схемы)* и *сетевые*.

*Топологическая модель* ХТС представляет собой граф в виде фигуры, состоящей из совокупности точек (вершин) и набора направленных или ненаправленных линий, соединяющих некоторые из этих точек.

*Блочная модель (блок-схема)* отображает состояние системы в виде набора входных и выходных переменных, характеризующих функционирование ХТС в любой момент времени.

*Сетевая математическая модель* отображает порядок выполнения работ по проектированию, эксплуатации и управлению ХТС.

Метод системного анализа успешно применяется для оптимизации ХТС.

Синтез оптимальной ХТС состоит в разработке структуры ХТС, исследовании системы в её единстве и взаимной связи элементов, входящих в систему, с целью определения заданных параметров и характеристик функционирования системы. Поиск окончательного варианта ХТС связан с созданием и расчетом большого числа альтернативных вариантов, для каждого из которых разрабатывается математическая модель. Определение наилучших, или оптимальных, условий функционирования системы является заключительным этапом создания ХТС. Определение этих условий связано с выбором критерия оптимизации. Наиболее универсальны экономические критерии – прибыль, приведенные затраты, себестоимость и другие. К технологическим критериям относятся максимальный выход готового продукта, содержание примесей в нем и другие. Требуемое значение критерия

оптимизации достигается обычно варьированием различных параметров, например, температурой, давлением, степенью превращения и другими. Между указанными параметрами обычно существует сложная взаимосвязь, что сильно затрудняет выбор единого критерия эффективного функционирования системы. Поэтому оптимизационная задача обычно сводится к нахождению экстремального значения (наибольшего или наименьшего) целевой функции. Её решение осуществляется с учетом различных ограничений, связанных с экономическими, технологическими и конструктивными условиями, возможностями аппаратуры, требованиями надежности, взрывобезопасности и т.п.

Для успешного решения задач оптимизации важно выбрать наилучший алгоритм синтеза ХТС, позволяющий значительно сократить объем работы при создании ХТС, быстрее найти из множества вариантов ХТС наиболее эффективный.

Теория синтеза ХТС основывается на следующих принципах: *декомпозиционном, эвристическом, интегрально-гипотетическом и эволюционном.*

*Декомпозиционный принцип* заключается в создании оптимальной технологической схемы ХТС путем последовательной декомпозиции исходной задачи синтеза ХТС на совокупность более простых задач для отдельных частей системы (подсистемы), из которых выбираются такие, которые обеспечивают оптимальное значение соответствующих критериев.

*Эвристический принцип* состоит в разработке оптимальных технологических схем ХТС без предварительных логически обоснованных доказательств, а только путем интуитивного выбора наиболее эффективного решения задачи синтеза ХТС.

*Интегрально–гипотетический принцип* состоит в создании оптимальной технологической схемы ХТС путем её выделения из некоторой гипотетической обобщенной структуры ХТС, образованной из альтернативных вариантов технологических схем рассматриваемой ХТС.

*Эволюционный принцип* состоит в создании оптимальной технологической схемы ХТС на основе её простейшего исходного варианта с последующим качественным и количественным совершенствованием технологической схемы рассматриваемой ХТС.

Отметим, что синтез оптимальной структуры химико-технологической схемы при создании нового и реконструкции существующего производства основывается, как правило, на комплексном использовании нескольких принципов синтеза ХТС.

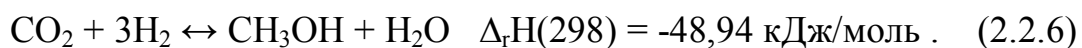
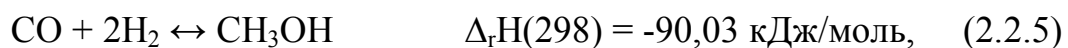
### 2.2.2. Исследование химико-технологических систем

Предметом технологической топологии ХТС является структура и свойства ХТС.

Структура и свойства ХТС зависят от сложности протекающих в них процессов, числа входящих в её состав элементов, количества и вида связей между элементами.

Топологические исследования ХТС целесообразно проводить с использованием различных графических схем: *функциональной, структурной, технологической, операторной* и других. Рассмотрим применение данных моделей на примере получения метанола.

Сначала приведем химическую схему процесса. Синтез метанола основан на обратных экзотермических реакциях:



Содержание метанола в газовой смеси растет с повышением давления и снижением температуры (рис. 2.2.5).

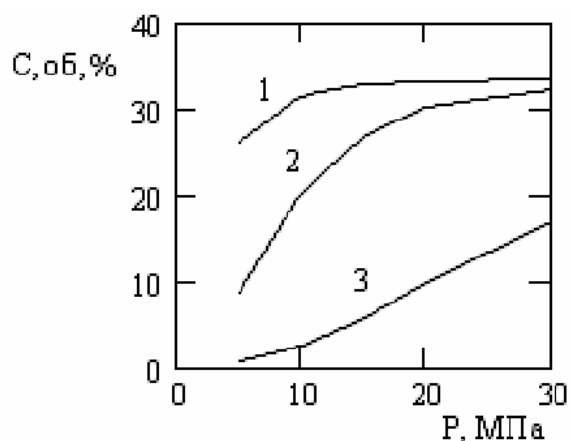


Рис. 2.2.5. Зависимость содержания метанола в паровой фазе от давления при разной температуре: температура,  $^{\circ}\text{C}$ : 1 – 240; 2 – 300; 3 – 400

Равновесный выход метанола, получаемого по реакции (2.2.5), можно рассчитать по уравнению:

$$\frac{\gamma_{\text{CH}_3\text{OH}}}{\gamma_{\text{CO}} \gamma_{\text{H}_2}^2} = K_p P^2 \frac{f_{\text{CO}} f_{\text{H}_2}^2}{f_{\text{CH}_3\text{OH}}}, \quad (2.2.7)$$

где  $\gamma$  - мольная концентрация компонентов;  $P$  - общее давление;  $f$  - коэффициент активности.

Константу равновесия реакции (2.6) можно рассчитать по формуле:

$$K_2 = \frac{K_1}{K_3}, \quad (2.2.8)$$

где  $K_1$  - константа равновесия реакции (2.2.5);  $K_3$  - константа равновесия конверсии CO.

В качестве катализатора процесса для синтеза метанола применяются цинкхромовые катализаторы, которые работают при давлении 20 - 30 МПа и температуре 340 - 400  $^{\circ}\text{C}$ . В настоящее время широкое распространение получили медьцинкхромовые и медьцинкалюминиевые катализаторы. Медьцинковые катализаторы активны при давлении 5 - 10 МПа и температуре 220 - 270  $^{\circ}\text{C}$ .

Скорость реакции на цинкхромовом катализаторе может быть рассчитана по уравнению:



$$w = k_1 \frac{p_H p_{CO}^{0,5}}{p_{CH_3OH}^{0,25}} - k_2 \frac{p_{CH_3OH}^{0,25}}{p_{CO}^{0,5}}, \quad (2.2.9)$$

где  $k_1$  и  $k_2$  – константы скорости прямой и обратной реакций;  $p$  – парциальное давление.

Для расчета скорости процесса на медьцинкалюминиевом катализаторе может быть использовано уравнение:

$$w = k_1 \left( \frac{p_H p_{CO}^{0,5}}{p_{CH_3OH}^{0,66}} - \frac{p_{CH_3OH}^{0,34}}{p_{H_2} p_{CO}^{0,5} K} \right), \quad (2.2.10)$$

где  $K$  – константа равновесия.

Исходя из равновесия и кинетики процесса, выбирают условия его проведения на соответствующих катализаторах. Степень превращения синтез-газа за один его проход через колонну синтеза ограничена положением равновесия реакции образования метанола, допустимым перепадом температуры по слою катализатора при адиабатическом режиме процесса и составляет 15 - 20 %. Для определения коэффициента рециркуляции может быть использована формула:

$$F_{CO} = F_{CO}^I \frac{1-R}{1+R(1-C_A/C_0)}, \quad (2.2.11)$$

где  $F_{CO}$  – общая степень превращения CO;  $F_{CO}^I$  – степень превращения CO за один проход;  $R$  – коэффициент рециркуляции;  $C_A$  – концентрация CO в газе, выходящем после конденсации;  $C_0$  – концентрация CO во входящем газе.

При циркуляции в синтез-газе накапливаются метан, азот, аргон и другие инертные примеси, снижающие производительность катализатора. Поэтому их концентрацию регулируют частичной отдувкой газа.

На степень конверсии CO существенное влияние оказывает соотношение  $H_2:CO$ . В промышленных условиях поддерживается молярное отношение  $H_2:CO$  от 2,15 до 2,25. С повышением данного соотношения конверсия CO возрастает, а равновесная концентрация метанола снижается.

В промышленности метанол получают различными способами, отличающимися исходным сырьем, способами его переработки в технологический газ, а также условиями проведения синтеза. Основным источником сырья является природный газ. В качестве сырья также применяют твердое топливо. Разработаны процессы газификации угля с целью получения синтез-газа, содержащего  $H_2$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ .

Технологический процесс получения метанола из оксида углерода и водорода включает ряд операций: конверсию природного газа, очистку газа от примесей, синтез, конденсацию и сепарацию метанола сырца. Функциональная схема производства метанола приведена на рис. 2.2.6.

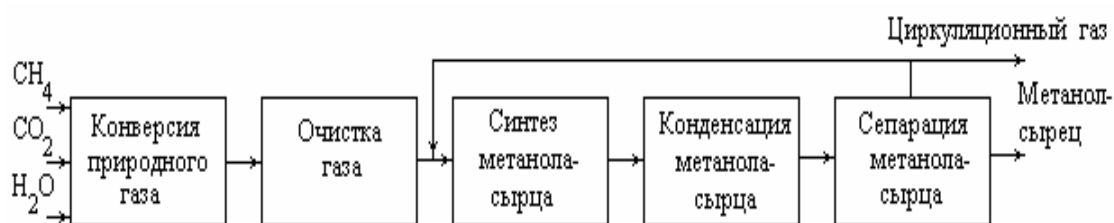


Рис. 2.2.6. Функциональная схема синтеза метанола

На рис. 2.2.7 приведена структурная схема синтеза метанола, которая включает масляный 1 и угольный 2 фильтры, колонну синтеза метанола 3, воздушный холодильник-конденсатор 4, сепаратор 5 и компрессор 6.

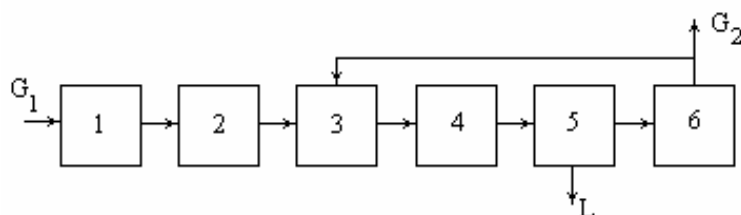


Рис. 2.2.7. Структурная схема синтеза метанола:

$G_1$  – исходная газовая смесь;  $G_2$  – циркуляционный газ;  $L$  – метанол-сырец

Схема производства метанола с применением колонны синтеза высокого давления показана на рис. 2.2.8.

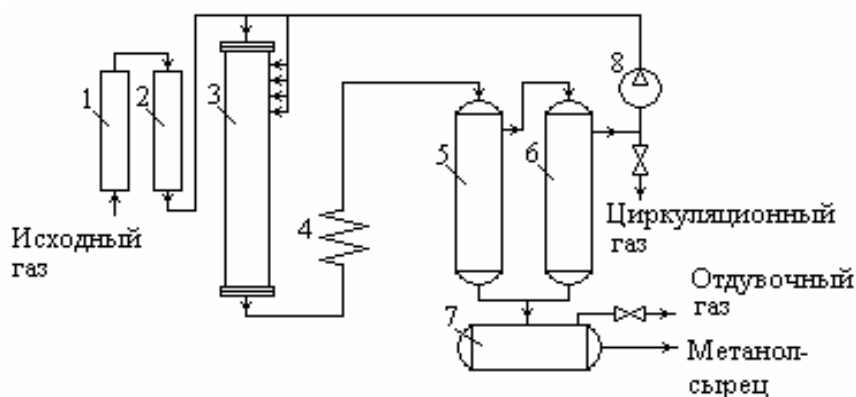


Рис. 2.2.8. Технологическая схема производства метанола в колонне синтеза высокого давления: 1 – фильтр масляный; 2 – фильтр угольный; 3 – колонна синтеза; 4 – воздушный холодильник-конденсатор; 5, 6 – сепараторы; 7 – сборник; 8 – компрессор

Исходный газ, сжатый до 32 МПа, проходит очистку от карбонила железа, масла и сернистых соединений в масляном 1 и угольном 2 фильтрах, после чего он смешивается с циркуляционным газом. Смешанный газ поступает в колонну синтеза метанола 3, в которой совмещены процессы нагрева газа до температуры 330 – 340 °С, гетерогенно-каталитическая реакция образования  $\text{CH}_3\text{OH}$  из  $\text{CO}$  и  $\text{H}_2$  и охлаждение газа до температуры 130 °С. Для поддержания заданной температуры реакции в колонну вводится определенное количество холодного циркуляционного газа. Затем парогазовая смесь поступает в холодильник-конденсатор 4, где она охлаждается до температуры 30 – 35 °С, и продукты синтеза конденсируются. Газожидкостная смесь далее поступает в сепараторы 5 и 6, где основная часть жидкости отделяется от газа. Метанол-сырец из сепараторов 5 и 6 собирается в сборнике 7, из которого также отводятся растворенные газы. Несконденсированные газы из сепаратора 6 компримируются до давления синтеза турбоциркуляционным компрессором 8 и возвращаются на синтез в колонну 3. Часть газов выводится перед компрессором, чтобы в нем не накапливались инертные газы.

Операторная схема синтеза метанола представлена на рис. 2.2.9.

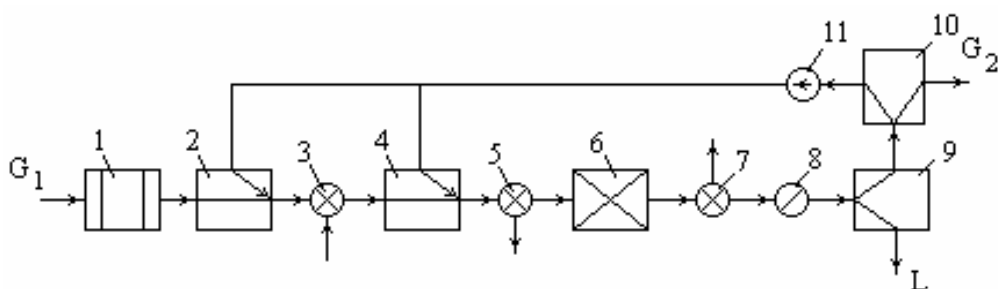


Рис. 2.2.9. Операторная схема синтеза метанола

В операторе 1 происходит массообменный процесс очистки исходной газовой смеси, в операторе 2 – смешение газовой смеси с циркуляционным газом, в операторе 3 – нагрев газа, в операторе 4 – смешение нагретого газа с циркуляционным газом, в операторе 5 – охлаждение газа до температуры реакции, в операторе 6 – химические превращения, в операторе 7 – охлаждение продуктов реакции, в операторе 8 – конденсация метанола, в операторе 9 – отделение метанола от смеси газов, в операторе 10 – отдувка инертных газов, в операторе 11 – сжатие газов.

ХТС можно представить в виде топологической структуры – графа, представляющего собой фигуру, содержащую вершины (точки) и направленные или ненаправленные линии, соединяющие вершины.

Неупорядоченная пара вершин называется ребром, а упорядоченная пара – дугой.

Обозначается граф через

$$G(V, \bar{U}, U), \quad (2.2.12)$$

где  $V = (v_1, v_2, \dots, v_n)$  – вершины,  $\bar{U} = (\bar{u}_1, \bar{u}_2, \dots, \bar{u}_m)$  – дуги,  $U = (u_{m+1}, u_{m+2}, \dots, u_k)$  – ребра.

Любой граф можно представить в 3–мерном пространстве. В этом случае линии, соответствующие ребрам и дугам, не будут пересекаться во внутренних вершинах. Допускается представление графа также в 2–мерном пространстве.

Различают неориентированные, ориентированные и смешанные графы.

Граф, содержащий только ребра, называется неориентированным (рис. 2.2.10,а); граф, содержащий только дуги, - ориентированным (рис. 2.2.10,б); смешанный граф (рис. 2.2.10,в) содержит ребра и дуги.

Нуль-граф – это граф, состоящий из изолированных вершин, не соединенных ребрами или дугами (рис. 2.2.10,г).

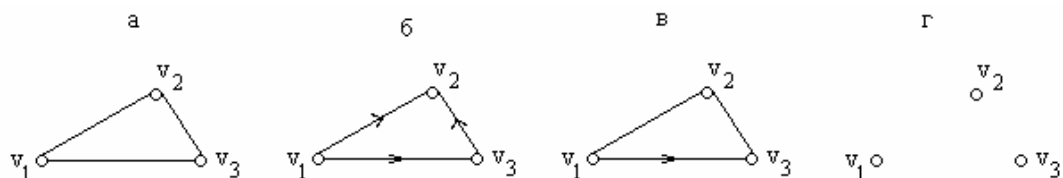


Рис. 2.2.10. Виды графов

Пара вершин может соединяться двумя или более ребрами (дугами одного направления). Такие ребра (дуги) называются кратными (рис. 2.2.11).

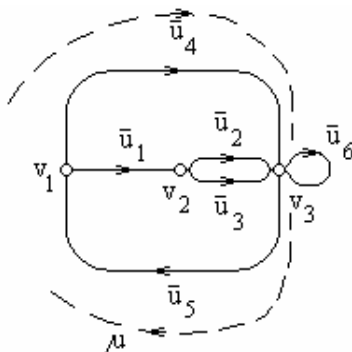


Рис. 2.2.11. Граф  $G(V, \bar{U})$ :

$v_1, v_2$  – смежные вершины;  $\bar{u}_2, \bar{u}_3$  – кратные дуги;  $\bar{u}_6$  – петля;  $\mu$  – контур

Дуга или ребро, начало и конец которых находятся в одной и той же вершине, называется петлей (рис. 2.2.11).

Две вершины, соединенные ребром или дугой, называются смежными (рис. 2.2.11).

Две дуги (ребра), имеющие общую вершину, называются смежными.

Ребро (дуга) и любая из его двух вершин называются инцидентными. Например, вершине  $v_1$  графа  $G(V, \bar{U})$ , изображенного на рис. 2.2.11, инцидентны дуги  $\bar{u}_1, \bar{u}_4$  и  $\bar{u}_5$ .

В направленных графах последовательность сцепления дуг, позволяющих пройти из одной вершины в другую, называется путем. Длина пути равна количеству дуг в порядке их прохождения. Если путь замкнутый, то он называется контуром.

В неориентированном графе последовательная совокупность ребер называется цепью. Если цепь замкнутая, то она называется циклом.

Для исследования ХТС применяются следующие виды графов: *потокосые*, *сигнальные* и *структурные*.

*Потоковый граф* отражает количественные особенности химико-технологического процесса при определенных входных параметрах.

Различают материальные, тепловые и эксергетические потоковые графы.

В материальном потоковом графе вершины соответствуют аппаратам, а дуги – материальным потокам.

Материальный потоковый граф может быть составлен по общим массовым расходам ХТС или по массовому расходу отдельных компонентов.

На рис. 2.2.12 изображен граф по общим массовым расходам, соответствующий технологической схеме синтеза метанола (рис. 2.2.8).

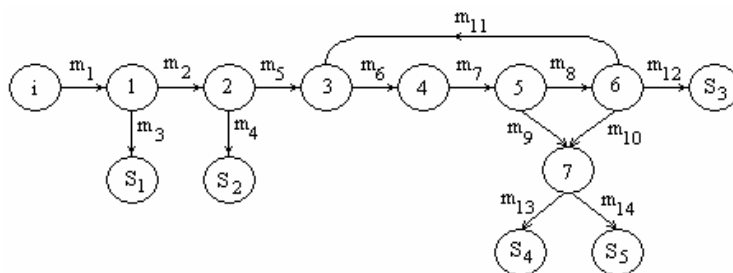


Рис. 2.2.12. Потокосый граф по общим материальным расходам:

1, 2, ..., 7 – номера вершин, соответствующие номерам аппаратов из технологической схемы, изображенной на рис. 2.2.8;  $i$  – источник вещества;

$S_1, S_2, \dots, S_5$  – стоки веществ;  $m_1, m_2, \dots, m_{14}$  – массовые потоки

В потоковом графе, изображенном на рис. 2.2.12, исток  $i$  соответствует общему количеству исходного газа, подаваемого в систему с потоком  $m_1$ . Из

потока  $m_1$  с помощью фильтров 1 и 2 удаляются примеси в количестве, соответствующем стокам  $S_1$  и  $S_2$ . Очищенный газ с массовым потоком  $m_4$  поступает в колонну синтеза 3, из которой продукты синтеза с массовым потоком  $m_6$  проходят последовательно холодильник-конденсатор 4, сепараторы 5 и 6. Из сепараторов 5 и 6 выводится метанол–сырец с массовыми потоками соответственно  $m_9$  и  $m_{10}$ , которые собираются в сборнике 7. Из сборника 7 выходят массовые потоки  $m_{13}$  и  $m_{14}$  в стоки  $S_4$  и  $S_5$ , соответствующие отдувке газа и выводу готового метанола–сырца. Из сепаратора 6 также выводятся несконденсированные газы, одна часть из которых с массовым потоком  $m_{11}$  возвращается в колонну синтеза 3, а другая часть с массовым потоком  $m_{12}$  выводится в сток  $S_3$ .

В тепловом потоковом графе вершины соответствуют преобразователям, источникам и стокам теплоты, а дуги – потокам теплоты.

В эксергетическом потоковом графе вершины соответствуют преобразователям, источникам и стокам эксергии, а дуги – потокам эксергии.

Потоковые графы применяются для автоматизированного составления систем уравнений материального, теплового и эксергетического балансов.

*Сигнальный граф* представляет собой топологическую модель в виде линейной системы уравнений и отображает причинно–следственные связи между переменными ХТС. Вершины сигнального графа соответствуют информационным переменным (сигналам), которые подразделяются на независимые (вершины–источники) и зависимые (вершины–стоки). Дуги графа соответствуют коэффициентам передачи или передаточным функциям.

Нахождение передаточной функции связано с использованием метода интегрального преобразования Лапласа [4]. Отметим, что некоторая искомая функция преобразуется в передаточную по формуле:

$$F(s) \equiv L[f(\tau)] = \int_0^{\infty} f(\tau) e^{-s\tau} d\tau, \quad (2.2.12)$$

где  $F(s)$  передаточная функция;  $f(\tau)$  – оригинал функции;  $L[f(\tau)]$  – изображение функции.

Интегрирование в формуле (2.2.12) происходит в комплексной плоскости  $s=\alpha+\beta i$ .

Сигнальные графы применяются для разработки быстродействующих алгоритмов и решения систем уравнений математических моделей ХТС.

*Структурный граф* представляет собой топологическую модель, вершины которой отображают физические или химические явления, а дуги – причинно–следственные отношения между этими явлениями.

Структурные графы применяются при анализе и математическом моделировании химических, массообменных, тепловых, гидравлических и других процессов.

Информация, содержащаяся в графе, может быть представлена в виде различных матриц: матрицы ветвей, матрицы смежностей, матрицы инцидентности и других.

Матрица ветвей некоторого графа представляет собой таблицу, образованную из элементов. Первая строка таблицы соответствует номеру вершины, из которой выходит определенная дуга, а вторая строка – номеру вершины, в которую эта дуга входит.

В качестве примера на рис. 2.2.13 представлен ориентированный граф.

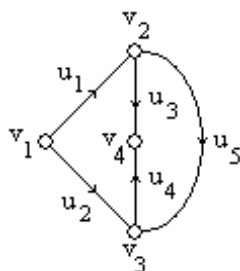


Рис. 2.2.13. Ориентированный граф

Матрица ветвей  $[A]$ , соответствующая орграфу, изображенному на рис. 2.2.13, имеет вид:

$$[A] = \begin{matrix} & \begin{matrix} u_1 & u_2 & u_3 & u_4 & u_5 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} & \begin{bmatrix} v_1 & v_1 & v_2 & v_4 & v_2 \\ v_2 & v_4 & v_3 & v_3 & v_4 \end{bmatrix} \end{matrix}. \quad (2.2.13)$$



Матрица смежностей некоторого ориентированного графа представляет собой таблицу, строки и столбцы которой соответствуют вершинам с элементами, характеризующими взаимосвязь между вершинами. При этом отсутствие связей между вершинами обозначается нулём, а их наличие – единицей.

Матрица смежностей  $[B]$ , соответствующая орграфу, изображенному на рис. 2.2.13, имеет вид:

$$[B] = \begin{matrix} & \begin{matrix} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}. \quad (2.2.14)$$

Матрица инцидентностей некоторого ориентированного графа представляет собой таблицу, строки которой соответствуют вершинам, столбцы – ребрам, а элементы соответствуют обозначениям:  $-1$ , если  $j$  – я дуга выходит из  $i$ –й вершины;  $+1$ , если  $j$  – я дуга входит в  $i$  – ю вершину;  $0$ , если  $j$  – я дуга не инцидентна  $i$  – й вершине.

Матрица инцидентности  $[C]$  для графа, изображенного на рис. 2.13, имеет вид:

$$[C] = \begin{matrix} & \begin{matrix} u_1 & u_2 & u_3 & u_4 & u_5 \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{matrix} & \begin{bmatrix} -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix}. \quad (2.2.15)$$

Матричное представление моделей позволяет перевести структурные особенности ХТС на язык чисел и проводит топологические исследования системы методами матричных вычислений.

## Глава 3. Теоретические исследования

### 3.1. Цель, задачи и этапы теоретических исследований

Цель теоретических исследований состоит в установлении связей между составными частями (элементами) объекта исследования, выявлении взаимосвязей между этим объектом и внешней средой, объяснении и обобщении полученных результатов и их формализации.

Можно выделить следующие задачи теоретических исследований:

- 1) анализ и обобщение ранее полученных результатов теоретических и экспериментальных исследований, а также установление возможности распространения этих результатов на подобные объекты;
- 2) изучение объекта, недоступного для исследования;
- 3) повышение надежности экспериментального исследования объекта.

Теоретические исследования могут проходить в несколько этапов:

- 1) разработка рабочей гипотезы на основе анализа известных данных;
- 2) разработка физической и математической моделей;
- 3) реализация математической модели на ЭВМ;
- 4) анализ полученных результатов и формулирование выводов.

При проведении теоретических исследований ставятся и решаются разнообразные задачи. Структурно задача включает обычно *условия* и *требования*. *Условия* – это определенная информация об объекте исследования, из которой следует исходить при решении задачи. *Требования* – это цель, к которой нужно стремиться в результате решения поставленной задачи. Условия и требования задачи находятся обычно в противоречии. В процессе теоретического исследования они постепенно сближаются до тех пор, пока не будет решена сама задача.

Решение теоретических задач должно носить творческий характер. Творческие решения часто не укладываются в заранее намеченный план

исследований. Оригинальные решения могут появиться «внезапно» или в результате постоянного обдумывания путей решения.

Теоретические исследования играют большую роль в процессе познания объективной действительности, поскольку они позволяют глубоко проникнуть в сущность природных явлений, создавать постоянно развивающуюся научную картину мира.

### **3.2. Математическое моделирование в научных исследованиях**

*Математическое моделирование* – это метод научного исследования объекта с помощью математической модели, представляющей собой приближенное описание поведения объекта, выраженное с помощью математической символики.

Математическое моделирование можно подразделить на *четыре этапа*.

*Первый этап* начинается с физического описания объекта моделирования. Этот этап требует глубокого проникновения в самую сущность изучаемых явлений, детального изучения факторов, оказывающих влияние на протекающие процессы. Этап завершается составлением математического описания объекта моделирования.

*Второй этап* предполагает выбор метода решения системы уравнений математического описания, разработку алгоритма и его реализацию в форме моделирующей программы на ЭВМ.

*Третий этап* заключается в установлении адекватности разработанной модели исследуемому явлению путем сопоставления результатов теоретических исследований с данными экспериментов.

*Четвертый этап* состоит в проведении анализа результатов расчета, полученных с помощью разработанной математической модели, и её модернизации.

Математические модели могут быть классифицированы на классы, различающиеся исходной информацией об объекте моделирования и условиями его функционирования.

В зависимости от информационного состояния объекта моделирования различают *детерминированные* и *стохастические* модели.

*Детерминированные модели* отражают единственное информационное состояние объекта моделирования и строятся на основе математически выраженных закономерностей, описывающих физико–химические процессы. Модели данного типа позволяют однозначно определить значение выходных параметров для любой заданной совокупности значений входных параметров объекта.

*Стохастические модели* отражают множество информационных состояний объекта моделирования и строятся на основе вероятностных представлений о процессах. Данные модели позволяют по вероятности входных параметров находить вероятности выходных параметров объекта.

В зависимости от изменения информационного состояния объекта моделирования во времени различают *статические* и *динамические* модели.

*Статические модели* описывают объект моделирования, функционирующий с не изменяющимися во времени параметрами процесса.

*Динамические модели* описывают объект моделирования, функционирующий с изменяющимися во времени параметрами процесса. Данные модели обязательно включают производную во времени.

В зависимости от изменения информационного состояния объекта моделирования в пространстве различают *модели с сосредоточенными параметрами* и *модели с распределительными параметрами*.

*Модели с сосредоточенными параметрами* отражают объект моделирования с равномерным распределением параметров процесса в пространстве.

*Модели с распределительными параметрами* отражают объект моделирования с неравномерным распределением параметров процесса в пространстве.

Начальным этапом при составлении математической модели является анализ равновесных закономерностей ХТС. На основе данного анализа определяют возможность осуществления процесса, предельные значения его параметров и записывают уравнение равновесного состояния ХТС.

Затем, исходя из законов сохранения массы, энергии и импульса, составляют материальный и энергетический балансы. На основе материального баланса находят количество вещества, получаемого при функционировании ХТС. В химической технологии часто ограничиваются составлением теплового баланса, который является составной частью энергетического баланса. Из теплового баланса находят тепловые нагрузки и расходы теплоносителей.

Последующим этапом при разработке математической модели является формулировка уравнения кинетики, которое устанавливает зависимость скорости протекания процесса от концентрации реагентов и продуктов. На интенсивность протекания процесса существенное влияние может оказывать перемешивание компонентов, скорость их движения и другие факторы. Изучение закономерностей движения газов, жидкостей и сыпучих материалов составляет основную задачу гидродинамики и является следующим этапом анализа ХТС, который заканчивается составлением уравнения гидродинамики (структуры потоков).

На основании данных материального и теплового балансов, равновесных и кинетических параметров процесса, гидродинамических характеристик движущихся потоков выбирают конструкцию аппарата, а затем, задаваясь линейной скоростью движения потоков, определяют основные размеры аппарата.

Представление химико–технологического процесса как сложной иерархической структуры позволяет разделить данный процесс на отдельные составные части, отражающие какую–либо сторону процесса. В соответствии с

этим общая математическая постановка задачи также разбивается на ряд отдельных систем уравнений, а именно: 1) равновесия; 2) материального баланса; 3) теплового баланса; 4) кинетики; 5) гидродинамической структуры потоков.

Указанные выше уравнения должны быть дополнены начальными и граничными условиями.

Начальные условия задают состояние процесса в некоторый фиксированный момент времени, принятый за начальный.

Граничные условия задают концентрационные и температурные режимы на границе той среды, где протекает рассматриваемый процесс.

После составления системы уравнений математического описания необходимо выбрать метод их решения, позволяющий рассчитать с заданной степенью точности ход реального процесса. В теории процессов и аппаратов химической технологии для построения и изучения математических моделей используются различные аналитические и численные методы.

Используемые при изучении химико–технологических процессов математические модели содержат неизвестные постоянные или переменные величины (параметры), например, константы равновесной зависимости и скорости химической реакции, коэффициенты температуропроводности, молекулярной диффузии, массо- и теплоотдачи, продольной и радиальной диффузии и другие. Параметрическая идентификация математического описания предполагает отыскание по экспериментальным данным численных значений параметров, входящих в уравнения этого описания.

Входящий в исследуемую математическую модель неизвестный параметр может быть найден из расчетов по известной, хорошо отработанной математической модели. Например, константа скорости химической реакции для реакции первого порядка находится по уравнению:

$$k = \frac{1}{\tau} \ln \frac{C_0}{C_0 - C_n}. \quad (3.2.1)$$

В случае реакции второго порядка имеем:

$$k = \frac{1}{\tau(C_{10} - C_{20})} \ln \frac{C_2(C_{10} - C_n)}{C_1(C_{10} - C_n)}, \quad (3.2.2)$$

где  $C_0, C_{10}, C_{20}$  – начальные концентрации реагирующих веществ, кмоль/м<sup>3</sup>;  $C_n$  – концентрация образующегося продукта, кмоль/м<sup>3</sup>.

Для определения коэффициента температуропроводности в частице твердой фазы может быть использован *метод нестационарного режима* [5]. Полагают, что частица имеет правильную геометрическую форму. Значение коэффициента температуропроводности в течение всего процесса нагрева частицы является величиной постоянной. На основе использования известных аналитических решений задач о поглощении теплоты частицей подбирается наилучшее значение коэффициента температуропроводности из условия минимума среднеквадратичного отклонения, рассчитываемого по формуле:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (a_{\text{рас}i} - a_{\text{экс}i})^2}{n}}, \quad (3.2.3)$$

где  $a_{\text{рас}i}$  и  $a_{\text{экс}i}$  – расчетные и экспериментальные данные средней температуры частицы;  $n$  – число точек на кривых изменения температуры частицы в зависимости от времени.

Данный метод может быть также применен для определения коэффициента молекулярной диффузии в кинетических моделях адсорбции.

При изучении динамики концентрационных полей внутри частицы твердой фазы с помощью моделей с переменным коэффициентом диффузии может быть применен *зональный метод* [6]. В соответствии с этим методом величина коэффициента диффузии для  $i$ -го участка кинетической кривой находится по формуле:

$$\bar{D}_i = \frac{L^2}{\mu\tau_i} \ln \frac{B}{F_i}, \quad (3.2.4)$$

где  $L$  – определяющий размер (половина толщины пластины, радиус цилиндра или шара);  $F_i = \frac{\bar{C}_p - \bar{C}_{oi}}{\bar{C}_p - \bar{C}_{\kappa i}}$  – средняя относительная концентрация,  $\bar{C}_p$  – расчетные

значения средней концентрации компонента в частице,  $\bar{C}_{oi}$  – начальная средняя концентрация компонента в частице,  $\mu$  и  $B$  – коэффициенты, зависящие от формы частицы: для неограниченной пластины:  $\mu=\pi/2$ ,  $B=2/\mu^2$ ; для неограниченного цилиндра:  $\mu=2,4048$ ,  $B=4/\mu^2$ ; для шара:  $\mu = \pi$ ,  $B=6/\mu^2$ .

На рис. 3.2.1 приведен пример определения коэффициента молекулярной диффузии на небольшом временном интервале в кинетической модели десорбции в системе Mathcad с помощью функции *genfit*.

Скорость протекания теплообменных процессов в неравновесных бинарных или многокомпонентных системах характеризуется коэффициентом теплопередачи  $K$ . Например, значение  $K$  для теплообмена между двумя средами, разделенными стенкой, рассчитывается по уравнению:

$$K = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_1} + \frac{\delta}{\lambda} + \frac{1}{\alpha_2}}, \quad (3.2.5)$$

где  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  – коэффициенты теплоотдачи со стороны “горячего” и “холодного” теплоносителей;  $\delta$  – толщина стенки;  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности стенки.

Коэффициенты теплоотдачи находятся из критериальных соотношений вида:

$$Nu=f(Re, Pr, Gr, \Gamma), \quad (3.2.6)$$

где  $Nu = \frac{\alpha l}{\lambda}$  – критерий Нуссельта;  $Re = \frac{wl}{\nu}$  – критерий Рейнольдса;  $Pr = \frac{\nu}{a}$  –

критерий Прандтля;  $Gr = \frac{gl^3}{\nu^2} \beta \Delta t$  – критерий Грасгофа;  $\Gamma$  – симплекс геометрического подобия;  $a$  – коэффициент температуропроводности;  $g$  – ускорение свободного падения;  $w$  – средняя скорость движения среды;  $\beta$  – коэффициент термического расширения.

В случае естественной циркуляции кинетика теплопередачи описывается уравнением:

$$Nu=f(Pr, Gr, \Gamma). \quad (3.2.7)$$



Исходные данные:

Радиус частицы, м  $R := 3 \cdot 10^{-4}$

Уравнение для расчета средней концентрации вещества в частице

$$F(\tau, D) := \frac{6}{\pi^2} \cdot \exp\left(\frac{-\pi^2 \cdot D}{R^2} \cdot \tau\right)$$

Производная по искомому параметру D

$$\frac{d}{dD} F(\tau, D) \rightarrow \frac{-200000000}{3} \cdot \tau \cdot \exp\left(\frac{-100000000}{9} \cdot \pi^2 \cdot D \cdot \tau\right)$$

ORIGIN := 1 VS := 0

$$F1(\tau, k) := \begin{pmatrix} \frac{6}{\pi^2} \cdot \exp\left(\frac{-\pi^2 \cdot k}{R^2} \cdot \tau\right) \\ \frac{-200000000}{3} \cdot \tau \cdot \exp\left(\frac{-100000000}{9} \cdot \pi^2 \cdot k \cdot \tau\right) \end{pmatrix}$$

i := 1..6  $\tau := 50..55$

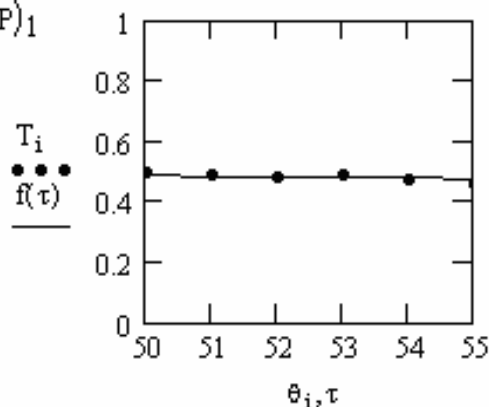
Экспериментальные данные кинетики процесса десорбции

$$\theta := \begin{pmatrix} 50 \\ 51 \\ 52 \\ 53 \\ 54 \\ 55 \end{pmatrix} \text{ - время процесса, с} \quad T := \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.492 \\ 0.48 \\ 0.485 \\ 0.47 \\ 0.46 \end{pmatrix} \text{ - степень завершенности процесса}$$

$P := \text{genfit}(\theta, T, VS, F1)$

$P = 4.07 \times 10^{-11}$  - коэффициент диффузии, м<sup>2</sup>/с

$f(\tau) := F1(\tau, P)_1$



Кинетические данные процесса десорбции  
 точки - экспериментальные данные  
 линия - кривая наилучшего приближения

Рис. 3.2.1. Пример расчета коэффициента диффузии

Для конкретных условий проведения процесса критериальные уравнения (3.2.6) и (3.2.7) в явном виде можно найти в литературе [7, 8].

Одним из основных кинетических параметров массообменного процесса является коэффициент массопередачи. При его расчете учитывают перенос вещества от границы раздела фаз внутрь фазы и перенос вещества через поверхность раздела фаз. Например, в системе газ–жидкость коэффициент массопередачи, отнесенный к газовой фазе, рассчитывается по уравнению:

$$\frac{1}{K_z} = \frac{1}{\beta_z} + \frac{m}{\beta_{ж}}, \quad (3.2.8)$$

где  $\beta_z$  и  $\beta_{ж}$  – коэффициенты массоотдачи в газовой и жидкой фазе, соответственно;  $m$  – константа фазового равновесия.

Коэффициент массоотдачи определяется обычно из критериальной зависимости, которая в общем виде может быть записана так:

$$Nu = f(Pr, Re, Fr, \Gamma), \quad (3.2.9)$$

где  $Nu = \frac{\beta l}{D}$  – диффузионный критерий Нуссельта,  $Pe = \frac{wl}{D}$  – диффузионный критерий Пекле.

Если определение истинной поверхности контакта фаз затруднительно, то в расчетах используют объемные коэффициенты массопередачи

$$K_{zv} = K_z a, \quad K_{жv} = K_{ж} a \quad (3.2.10)$$

и массоотдачи

$$\beta_{zv} = \beta_z a, \quad \beta_{жv} = \beta_{ж} a, \quad (3.2.11)$$

где  $a$  – поверхность контакта фаз, приходящаяся на 1 м<sup>3</sup> объема газожидкостной системы.

Для расчета коэффициентов массоотдачи, как правило, используют критериальные уравнения, полученные методом теории подобия или на основе аналогии между процессами переноса массы и теплоты. Данные уравнения можно найти в литературе [8, 9].

Опытные критериальные зависимости также обычно используются для нахождения коэффициентов продольного и поперечного перемешивания фаз в диффузионных моделях структуры потоков в аппарате.

Поскольку параметры процесса, используемые для расчетов, а в общем случае и само математическое описание лишь с определенной точностью отражают реальные закономерности химико–технологического процесса, то используемые математические модели необходимо проверять на адекватность путем сравнения теоретических и экспериментальных результатов с привлечением методов статистической проверки гипотез.

### **3.3. Аналитические методы исследования химико-технологических систем**

Аналитические методы успешно применяются для исследования математических моделей химико-технологических систем. Данный подход в отличие от численных методов не связан с разработкой специального моделирующего алгоритма и сложных программ. Обычно аналитические методы несут достаточно полную информацию о входных и выходных параметрах процесса. При этом входящие в уравнения константы находятся, как правило, хорошо отработанными экспериментальными методами, описанными в литературе.

В простейших случаях, когда химико–технологический процесс описывается системой линейных дифференциальных уравнений с частными производными, для её решения могут быть использованы различные методы: разделения переменных Фурье, интегральных преобразований Лапласа, функции влияния (функции Грина), метод Гринберга интегральных преобразований в конечных пределах. Все перечисленные методы относятся к аналитическим методам решения краевых задач.

В соответствии с классическим методом разделения переменных Фурье решение дифференциального уравнения теплопроводности с заданными

краевыми условиями ищется в виде произведения двух функций, одна из которых зависит только от времени, а другая – от координаты. Нахождение решения связано с отысканием собственных функций и собственных значений некоторых дифференциальных операторов и последующим разложением функций начальных условий по найденным собственным функциям.

Для решения ряда задач, например, нагревания тела с внутренним источником теплоты, нагревания тела для малых и больших времен и других, применение метода разделения весьма затруднительно. В этом случае может быть эффективен метод интегральных преобразований Лапласа.

Сущность метода интегральных преобразований Лапласа состоит в замене изучаемой функции  $f(\tau)$  действительного переменного  $\tau$  ( $0 < \tau < \infty$ ), называемой оригиналом, в функцию

$$F(s) = L[f(\tau)] = \int_0^{\infty} f(\tau) e^{-s\tau} d\tau \quad (3.3.1)$$

комплексного переменного  $s = \alpha + \beta i$  [4]. В результате интегрирования получаем функцию  $F(s)$ , которая называется Лапласовым изображением или просто изображением. При такой замене вместо дифференциального уравнения для оригинала функции получаем алгебраическое уравнение относительно изображения. Далее из алгебраического уравнения находят изображение решения данного уравнения, после чего с помощью известных соотношений по изображению восстанавливают само решение для оригинала функции. В простейших случаях используют формулу обращения:

$$f(\tau) = L^{-1}[F(s)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma - i\infty}^{\gamma + i\infty} F(s) e^{s\tau} ds. \quad (3.3.2)$$

Операции нахождения изображения по оригиналу (и наоборот) облегчаются наличием таблиц «оригинал – изображение».

Метод функции Грина состоит в предварительном отыскании для заданной краевой задачи вспомогательной функции  $G$ . Функция Грина  $G$  (рис. 3.2.1) для заданной поверхности представляет собой распределение потенциала в объеме  $V$ , ограниченном поверхностью  $S$  нулевого потенциала. При этом

внутри объема существует точка  $P$  с единичным зарядом. Определение функции Грина связано с решением дополнительной краевой задачи, которая для некоторых форм границ решена. Если функция Грина определена, то решение более сложной задачи сводится к расчету известных интегралов.

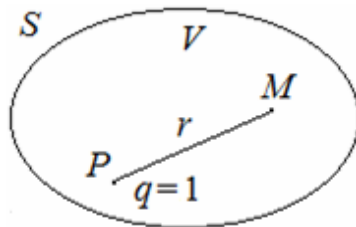


Рис. 3.2.1. К методу функции Грина

Метод функции Грина используется при решении задач переноса вещества и теплоты в безграничных телах с внутренними источниками (стоками).

Ниже приведены примеры решения типовых задач математического моделирования химико-технологических процессов, которые иллюстрированы вычислениями в системе Mathcad.

*Пример 1. Кинетика последовательных химических реакций.* Рассмотрим случай последовательной мономолекулярной реакции вида:



Скорость указанной реакции описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} -\frac{dC_1}{d\tau} = k_1 C_1, \\ \frac{dC_2}{d\tau} = k_1 C_1 - k_2 C_2, \\ \frac{dC_3}{d\tau} = k_2 C_2. \end{cases} \quad (3.3.4)$$

Начальные условия таковы:

$$C_1 = C_{0A}; \quad C_2 = C_3 = 0 \quad \text{при } \tau = 0. \quad (3.3.5)$$

Решение рассматриваемой задачи имеет вид:

$$C_1 = C_{0A} e^{-k_1 \tau}; \quad (3.3.6)$$

$$C_2 = \frac{k_1 C_{0A}}{k_1 - k_2} (e^{-k_1 \tau} - e^{-k_2 \tau}); \quad (3.3.7)$$

$$C_3 = C_{0A} (1 - e^{-k_1 \tau}) - \frac{k_1 C_{0A}}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 \tau} - e^{-k_2 \tau}). \quad (3.3.8)$$

На рис. 3.3.2 представлен расчет кинетики последовательных химических реакций.

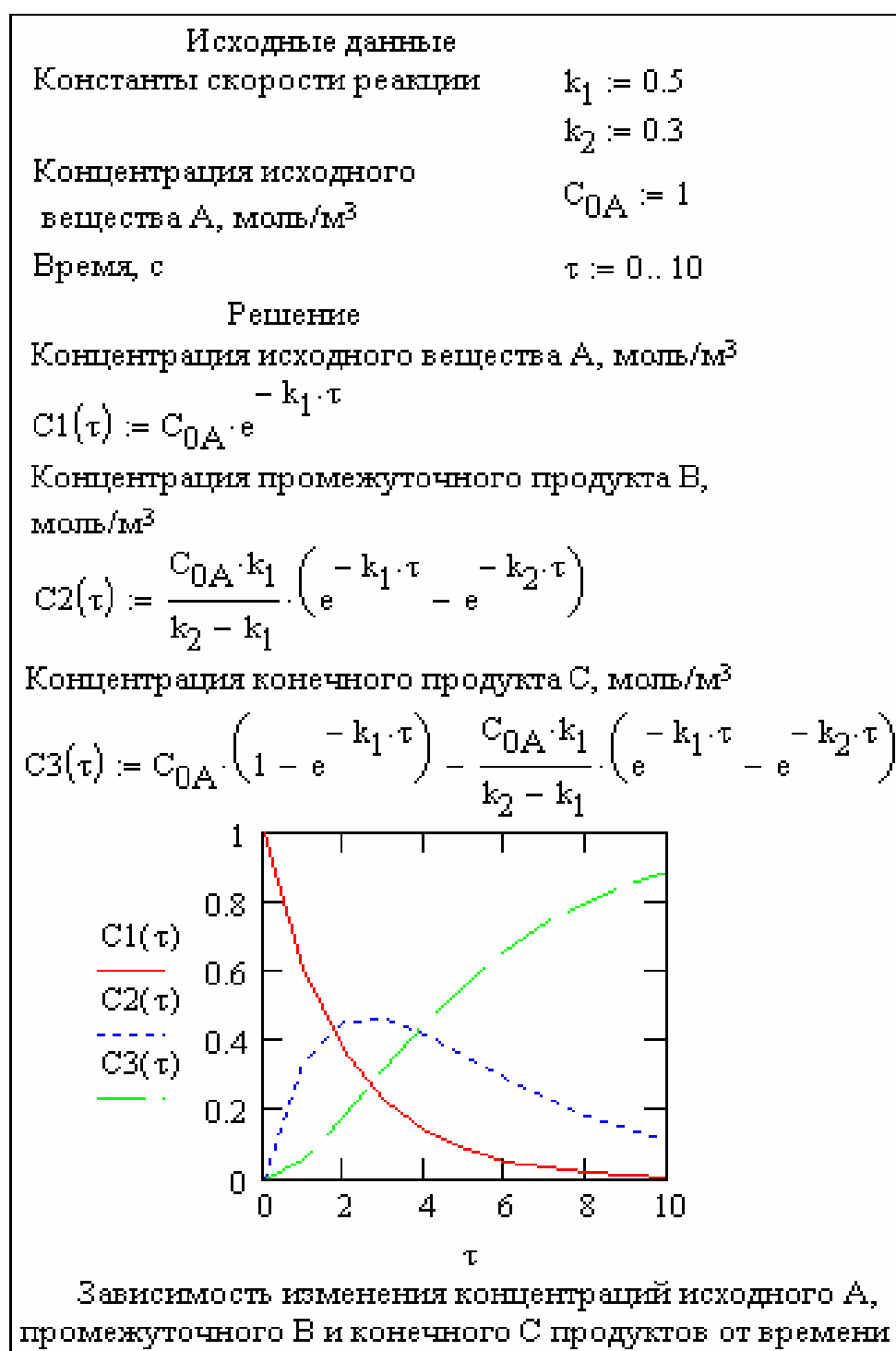


Рис. 3.3.2. Пример расчета последовательной реакции

*Пример 2. Ячеечная модель гидродинамической структуры потока.* В данной модели представляется поток как ряд последовательно соединенных ячеек идеального смешения с одинаковым объемом. Число ячеек  $N$  подбирается так, чтобы отразить влияние продольного перемешивания. Уравнение материального баланса для каждой из  $N$  ячеек записывается в виде:

$$\begin{aligned} V \frac{dC_1}{d\tau} &= Q(C_0 - C_1), \\ V \frac{dC_2}{d\tau} &= Q(C_1 - C_2), \\ &\dots\dots\dots \\ V \frac{dC_N}{d\tau} &= Q(C_{N-1} - C_N), \end{aligned} \quad (3.3.9)$$

где  $w$  – поток через ячейки;  $V$  – объем ячейки;  $Q$  – объемный расход потока через ячейки.

Функция распределения времени пребывания для ячеечной модели, включающей  $N$  ячеек, имеет вид:

$$C_N = C_0 \left( \frac{\tau}{\tau_0} \right)^{N-1} \frac{N^N}{(N-1)!} e^{-N \frac{\tau}{\tau_0}}, \quad (3.3.10)$$

где  $\tau_0$  – среднее время пребывания.

Ячеечная модель удовлетворительно описывает потоки в каскаде ёмкостных аппаратов с мешалками и секционированных аппаратах.

На рис. 3.3.3 приведен пример решения уравнения (3.3.10), выполненный в системе Mathcad.

*Пример 3. Однопараметрическая диффузионная модель.* Данная модель в отличие от модели идеального смешения учитывает продольное перемешивание потока, причем перенос формально описывается уравнением диффузии в движущейся гомогенной среде:

$$\frac{\partial C(x, \tau)}{\partial \tau} = D_x \frac{\partial^2 C(x, \tau)}{\partial x^2} - w \frac{\partial C(x, \tau)}{\partial x}, \quad (3.3.11)$$

где  $D_x$  – коэффициент продольного перемешивания.

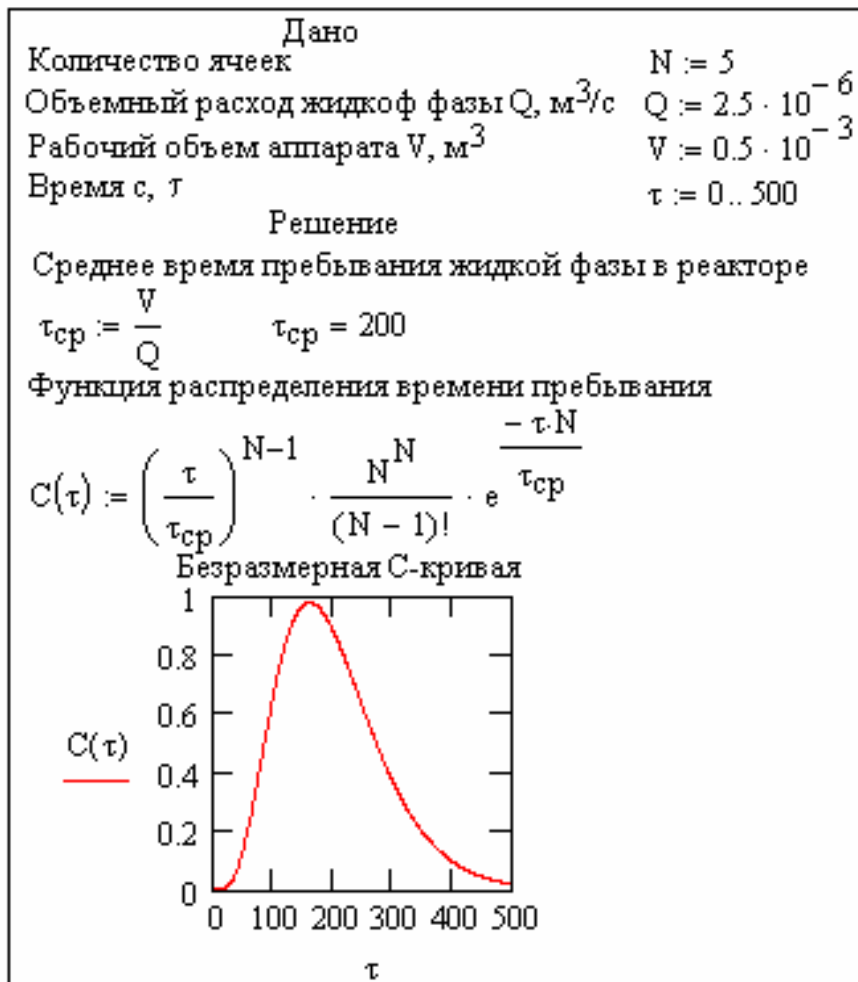


Рис. 3.3.3. Пример расчета ячеечной модели

В качестве начального условия примем:

$$C(x, \tau)|_{\tau=0} = 0. \quad (3.3.12)$$

Граничные условия таковы (условия по Данквертсу):

$$wC_{\text{вх}}(\tau) = \left[ wC(x, \tau) - D_x \frac{\partial C(x, \tau)}{\partial x} \right]_{x=0}, \quad (3.3.13)$$

$$\frac{\partial C(x, \tau)}{\partial x} \bigg|_{x=H} = 0, \quad (3.3.14)$$

где  $H$  – высота или длина аппарата.

Введем следующие безразмерные переменные:

$$N = \frac{C}{C_{\text{вх}}}; \quad z = \frac{x}{H}; \quad \Theta = \frac{\tau}{\tau_0}; \quad Pe = \frac{wH}{D_x}. \quad (3.3.15)$$

Искомое решение задачи имеет вид:



$$N(\Theta) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{2 \frac{k_i^2}{\Theta} e^{\frac{Pe}{2} - \frac{Pe}{4} \Theta - k_i^2 \frac{4\Theta}{Pe}}}{\left(1 + \frac{Pe}{2}\right) k_i \sin(2k_i) - \left(\frac{Pe}{4} + \frac{Pe^2}{16} - k_i^2\right) \cos(2k_i)}, \quad (3.3.16)$$

где  $k_i$  – корни трансцендентного уравнения:

$$\operatorname{tg} 2k = \frac{kPe}{2\left(k^2 - Pe^2/16\right)} \quad (3.3.17)$$

Уравнение (3.3.16) позволяет рассчитать функцию отклика на импульсное возмущение. Иллюстрация решения уравнения (3.3.16) представлена на рис. 3.3.4.

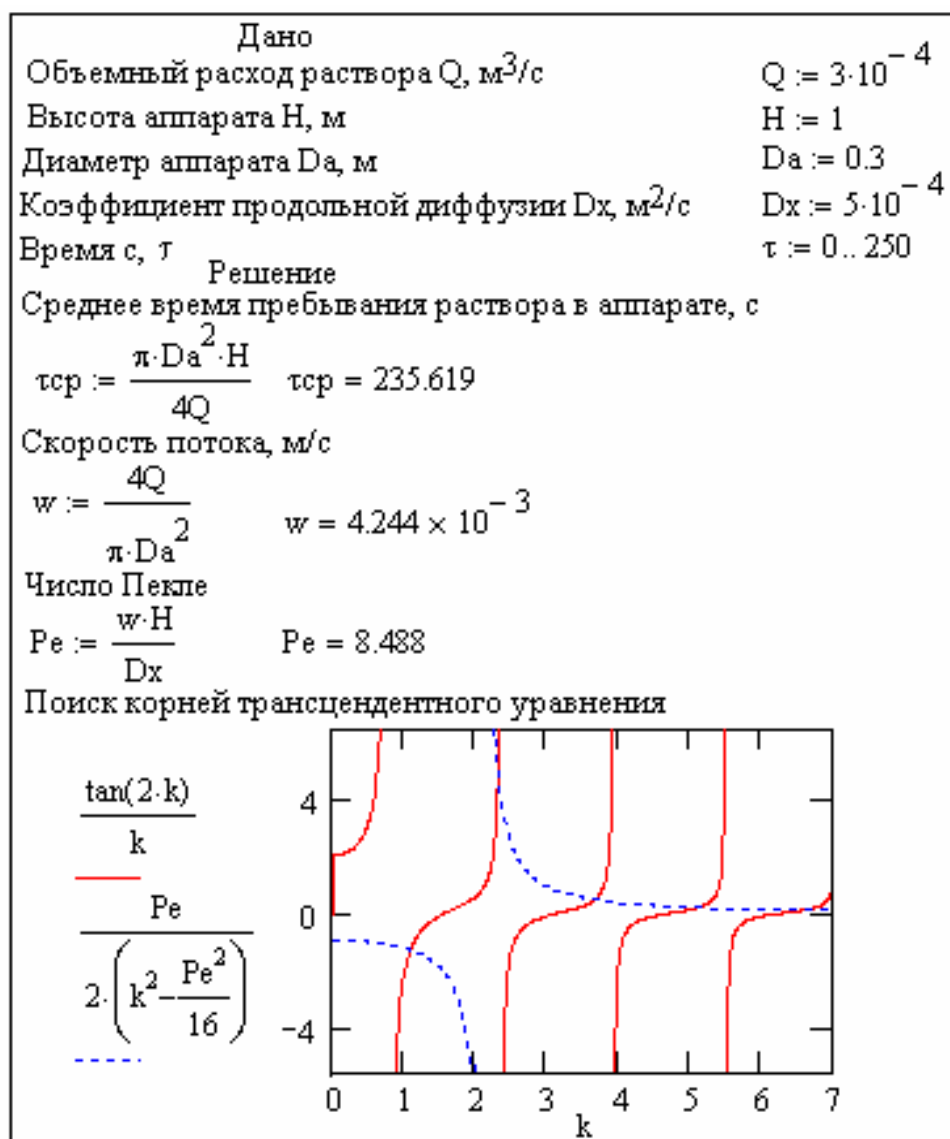
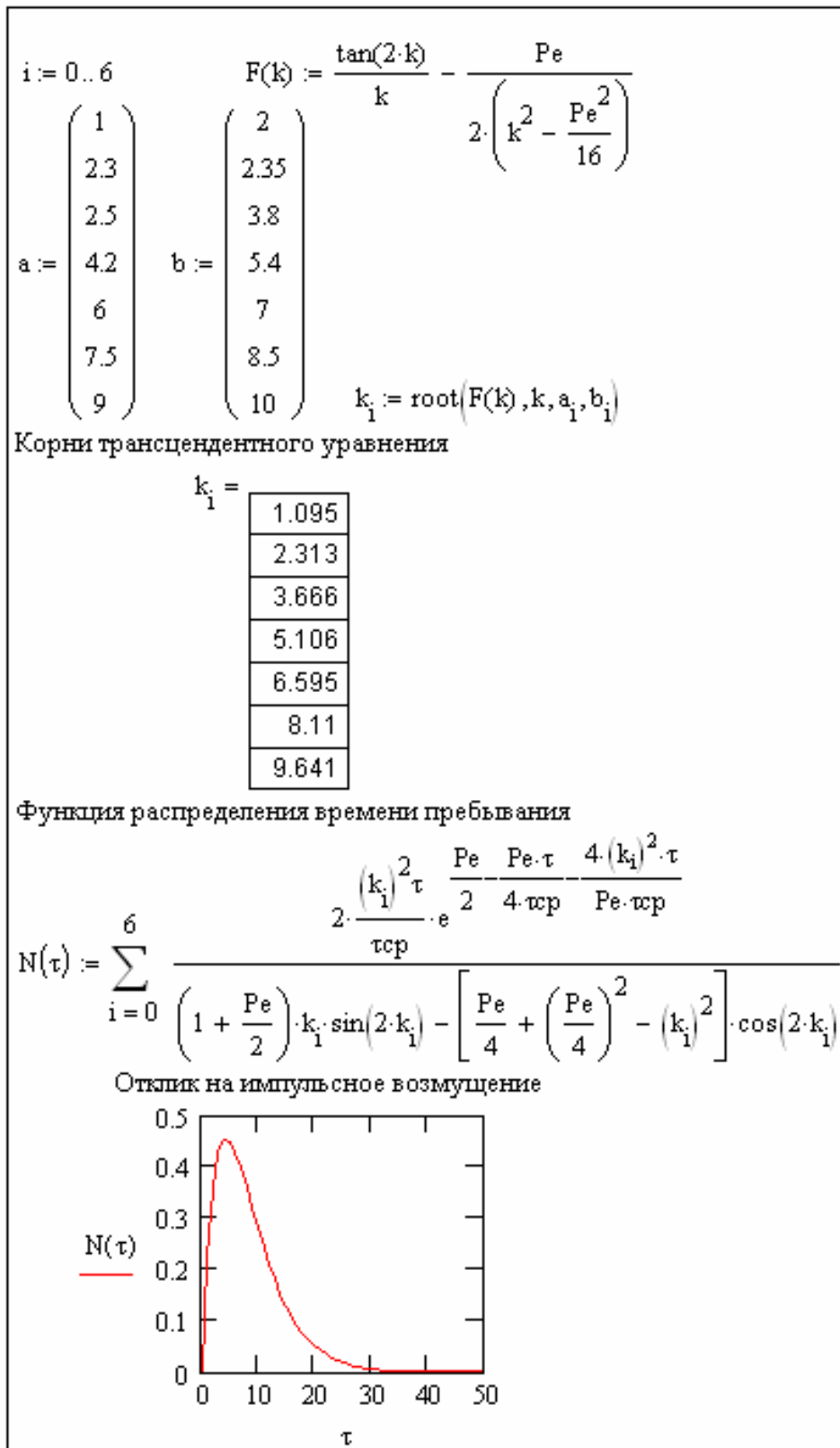


Рис. 3.3.4. Пример расчета диффузионной модели



*Пример 4. Охлаждение пластины.* Дана пластина толщиной  $2R$  и бесконечно протяженная в двух других направлениях. Начальное

распределение температуры по толщине пластины  $f(x)$ , зависит только от координаты  $x$ . В начальный момент времени поверхности пластины мгновенно охлаждаются до некоторой температуры  $t_c$ , которая поддерживается постоянной на протяжении процесса охлаждения. Требуется определить распределение температуры по толщине пластины в любой момент времени. Поместим начало координат в середину пластины.

Процесс охлаждения пластины описывается уравнением теплопроводности:

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} = a \frac{\partial^2 t}{\partial x^2}. \quad (3.3.18)$$

Начальные и граничные условия:

$$t|_{\tau=0} = f(x), \quad (3.3.19)$$

$$t|_{x=R} = t_c = const, \quad (3.3.20)$$

$$\left. \frac{\partial t}{\partial x} \right|_{x=0} = 0. \quad (3.3.21)$$

Для решения задачи используем метод Фурье. Допустим, что частное решение ищется в виде произведения двух функций:

$$t = Q(\tau)U(x). \quad (3.3.22)$$

Тогда получим

$$\frac{Q'(\tau)}{Q(\tau)} = a \frac{U''(x)}{U(x)}. \quad (3.3.23)$$

Приравнявая каждую часть полученного равенства постоянной  $-k^2$ , получим два обыкновенных дифференциальных уравнения:

$$Q'(\tau) + k^2 a Q(\tau) = 0, \quad (3.3.24)$$

$$U''(x) + k^2 U(x) = 0. \quad (3.3.25)$$

Первое из этих уравнений имеет следующий общий интеграл:

$$Q(\tau) = C e^{-k^2 a \tau}, \quad (3.3.26)$$

где  $C$  – произвольная постоянная.

Если  $k > 0$ , то общее решение уравнения (3.3.25) будет суммой частных решений:

$$U(x) = A \sin kx + B \cos kx. \quad (3.3.27)$$

где  $A$  и  $B$  – произвольные постоянные.

Частное решение дифференциального уравнения теплопроводности будет иметь вид:

$$t(x, \tau) = (A \sin kx + B \cos kx) C e^{-k^2 a \tau}. \quad (3.3.28)$$

Из условия симметрии следует, что  $A = 0$ . Тогда имеем

$$t(x, \tau) = D \cos kx e^{-k^2 a \tau}, \quad (3.3.29)$$

где  $D = B \cdot C$ .

Уравнение (3.3.29) удовлетворим граничному условию (3.3.20). Для упрощения расчетов временно примем  $t_c = 0$ . Имеем

$$t(R, \tau) = D \cos kR e^{-k^2 a \tau} = 0. \quad (3.3.30)$$

Отсюда следует

$$\begin{aligned} \cos kR = 0, \quad kR = \frac{1}{2}\pi; \frac{3}{2}\pi; \frac{5}{2}\pi; \\ k_n R = (2n-1)\frac{\pi}{2}, \end{aligned} \quad (3.3.31)$$

т.е.  $k$  имеет бесчисленное множество значений.

Решение задачи запишется в виде:

$$t(x, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} D_n \cos k_n x e^{-k_n^2 a \tau}. \quad (3.3.32)$$

Удовлетворим решение (3.3.32) условию (3.3.19). Подставляя в (3.3.22)  $\tau = 0$ , получим

$$f(x) = D_1 \cos k_1 x + D_2 \cos k_2 x + D_3 \cos k_3 x + \dots + D_n \cos k_n x. \quad (3.3.33)$$

Основываясь на теории рядов Фурье и допуская, что функция  $f(x)$  разлагается в ряд Фурье, можно записать

$$D_n = \frac{2}{R} \int_0^R f(x) \cos k_n x dx. \quad (3.3.34)$$

При этом сходится ряд

$$\sum_{n=1}^{\infty} |D_n|. \quad (3.3.35)$$

Формально задача решена при некоторых допущениях. Эти допущения требуют, чтобы функция  $f(x)$  удовлетворяла условиям Дирихле. Опуская эти доказательства, запишем окончательное решение задачи:

$$t(x, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} \cos \mu_n \frac{x}{R} e^{-\mu_n^2 \frac{a\tau}{R^2}} \frac{2}{R} \int_0^R f(x) \cos \mu_n \frac{x}{R} dx, \quad (3.3.36)$$

где  $\mu_n = k_n R = (2n-1) \frac{\pi}{2}$ .

Если начальное распределение температуры внутри пластины равномерное, т.е.  $t(x, 0) = t_0 = \text{const}$ , то интеграл в правой части решения (3.3.36) может быть вычислен

$$\frac{2}{R} \int_0^R t_0 \cos \mu_n \frac{x}{R} dx = \frac{2t_0 \sin \mu_n}{\mu_n} = \frac{2t_0}{\mu_n} (-1)^{n+1}. \quad (3.3.37)$$

Если температура поверхностей пластины не равна нулю, а равна  $t_0$ , как это принято в условиях задачи, то решение задачи имеет вид:

$$\theta(x, \tau) = \frac{t(x, \tau) - t_0}{t_c - t_0} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{\mu_n} (-1)^{n+1} \cos \mu_n \frac{x}{R} e^{-\mu_n^2 \frac{a\tau}{R^2}}. \quad (3.3.38)$$

Для определения средней температуры пластины используем уравнение:

$$\bar{t}(\tau) = \frac{1}{R} \int_0^R t(x, \tau) dx. \quad (3.3.39)$$

Из решения (3.3.38) получим:

$$\bar{\theta}(\tau) = \frac{\bar{t}(\tau) - t_c}{t_0 - t_c} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{\mu_n^2} e^{-\mu_n^2 \frac{a\tau}{R^2}}. \quad (3.3.40)$$

Иллюстрация решений (3.3.38) и (3.3.40) приведена на рис. 3.3.5.

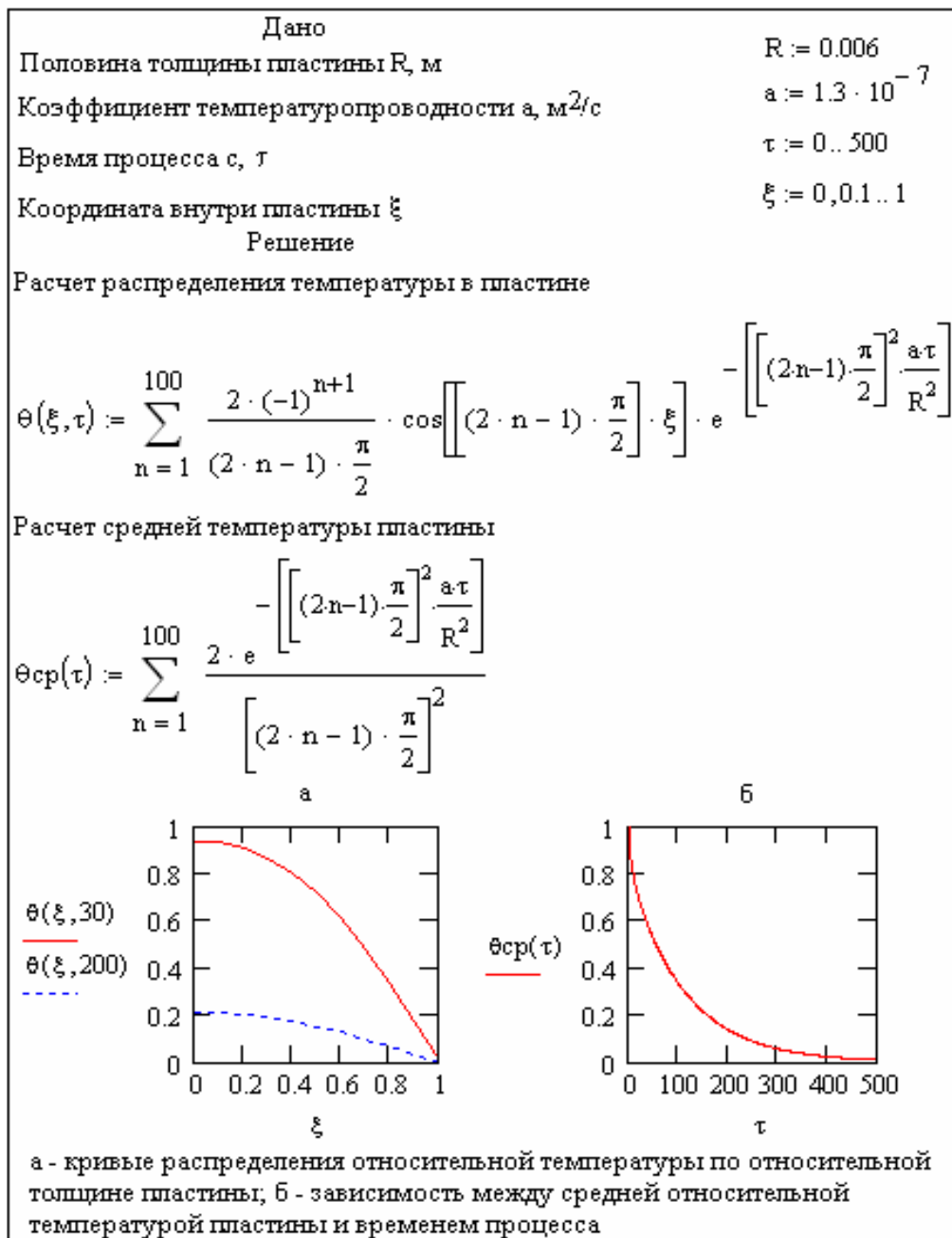


Рис. 3.3.5. Пример расчета процесса охлаждения пластины

*Пример 5. Реактор колонного типа.* В стационарно работающем реакторе колонного типа (рис. 3.3.6) высотой  $H$  протекает химическая реакция первого порядка. Полагаем также, что структура потока в реакторе описывается однопараметрической диффузионной моделью.

Примем, что направление движения потока в реакторе совпадает с направлением продольной координаты  $0x$ , и запишем уравнение, описывающее процесс изменения концентрации реагента по высоте аппарата:

$$-w \frac{dC}{dx} + D_x \frac{d^2C}{dx^2} - kC = 0, \quad (3.3.41)$$

где  $w$  – скорость потока,  $D_x$  – коэффициент продольного перемешивания.

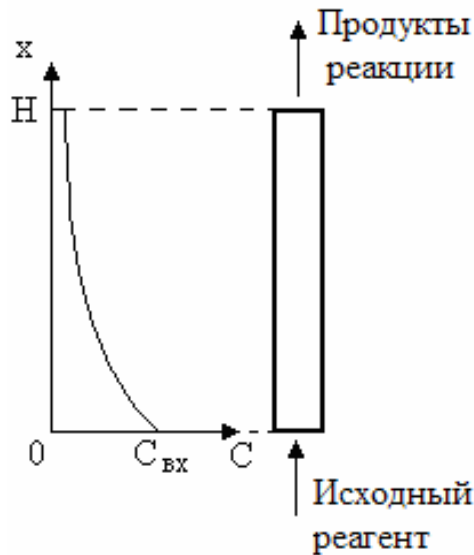


Рис. 3.3.6. Схема движения потока и профиль изменения концентрации реагента в реакторе колонного типа

Для решения дифференциального уравнения (3.3.41) используем граничные условия:

$$C|_{x=0} = C_{\text{вх}}; \quad (3.3.42)$$

$$\left. \frac{dC}{dx} \right|_{x=H} = 0. \quad (3.3.43)$$

Введем безразмерные переменные:

$$N = \frac{C}{C_{\text{вх}}}; \quad z = \frac{x}{H}; \quad E = \frac{kHPe}{w}; \quad Pe = \frac{wH}{D_x}. \quad (3.3.44)$$

В новых переменных система уравнений (3.3.41) - (3.3.43) запишется так:

$$\frac{d^2N}{dz^2} - Pe \frac{dN}{dz} - EN = 0; \quad (3.3.45)$$

$$N|_{z=0} = 1; \quad (3.3.46)$$

$$\left. \frac{dN}{dz} \right|_{z=1} = 0. \quad (3.3.47)$$

Характеристическое уравнение для (3.3.45) имеет вид:

$$r^2 - Pe r - E = 0. \quad (3.3.48)$$

Его решение есть:

$$r_{1,2} = \frac{Pe}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{Pe}{2}\right)^2 + E}. \quad (3.3.49)$$

Общее решение уравнения (3.3.45) имеет вид:

$$N = A_1 e^{r_1 z} + A_2 e^{r_2 z}. \quad (3.3.50)$$

Константы  $A_1$  и  $A_2$  найдем, используя граничные условия.

Подстановка  $z = 0$  и  $N = 1$  в (3.3.50) дает:

$$1 = A_1 + A_2. \quad (3.3.51)$$

Дифференцируем уравнение (3.3.50):

$$\frac{dN}{dz} = r_1 A_1 e^{r_1 z} + r_2 A_2 e^{r_2 z}. \quad (3.3.52)$$

Так как  $\frac{dN}{dz} = 0$  при  $z = 1$ , то:

$$r_1 A_1 e^{r_1} + r_2 A_2 e^{r_2} = 0. \quad (3.3.53)$$

Из (3.3.51) и (3.3.53) находим:

$$A_1 = -\frac{r_2 e^{r_2}}{r_1 e^{r_1} - r_2 e^{r_2}}; \quad (3.3.54)$$

$$A_2 = \frac{r_1 e^{r_1}}{r_1 e^{r_1} - r_2 e^{r_2}}. \quad (3.3.55)$$

Подставляя значения  $A_1$  и  $A_2$  в уравнение (3.3.50), получаем искомое решение задачи, которое запишем в прежних переменных:

$$\frac{C(x)}{C_{\text{вх}}} = \frac{1}{r_1 e^{r_1} - r_2 e^{r_2}} \left( r_1 e^{r_1 + r_2 \frac{x}{H}} - r_2 e^{r_2 + r_1 \frac{x}{H}} \right). \quad (3.3.56)$$

На рис. 3.3.7 представлен пример расчета искомой кривой изменения безразмерной концентрации вещества по высоте аппарата, выполненный в системе Mathcad.



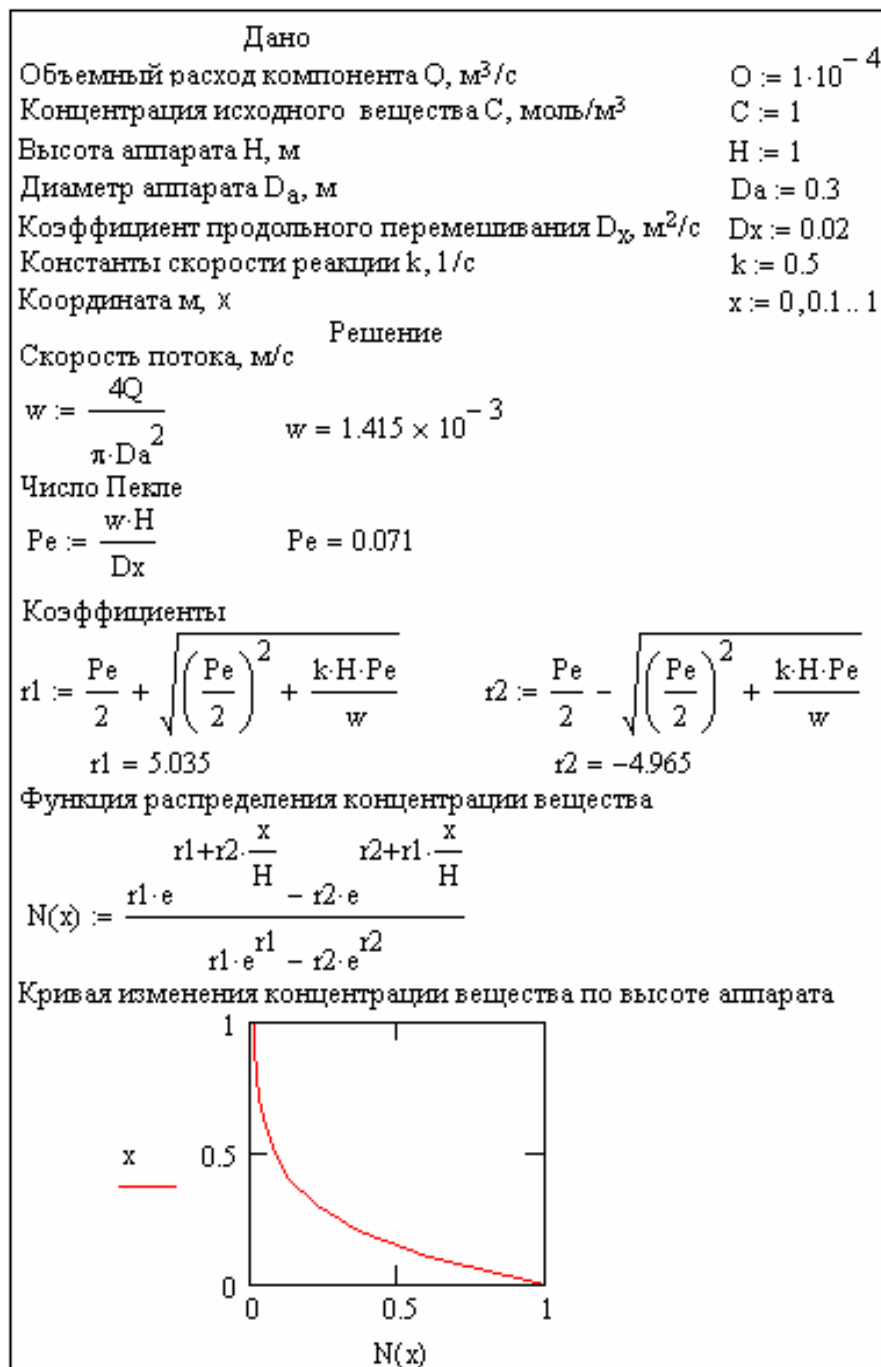


Рис. 3.3.7. Пример расчета реактора колонного типа

*Пример 6. Насадочный абсорбер.* В насадочной колонне (рис. 3.3.8) проходит непрерывный процесс абсорбции. Газ, содержащий целевой компонент, движется снизу вверх, а в противоположном ему направлении движется жидкость - поглотитель.

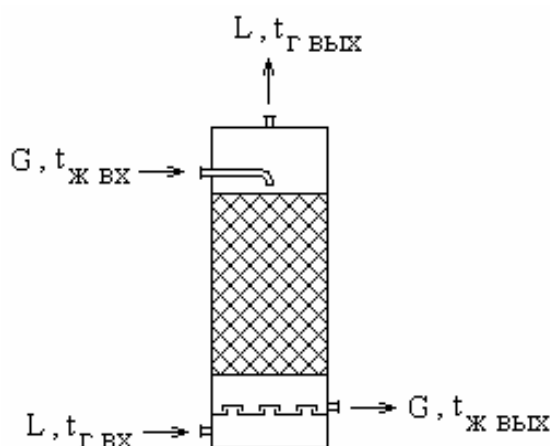


Рис. 3.3.8. Схема движения фаз в насадочном абсорбере

Полагаем, что аппарат работает в стационарном режиме. Равновесие процесса описывается линейным уравнением изотермы Генри. Структура потоков газовой и жидкой фаз описывается диффузионной моделью. Примем также, что движение жидкости совпадает с направлением аксиальной координаты  $0x$ . Тогда с учетом сделанных допущений математическое описание процесса может быть записано следующей системой уравнений.

Уравнение материального баланса по газовой фазе:

$$-v \frac{d\theta_G}{dx} - K_G(\theta_{G \text{ вх}} - \theta_{G p}) + D_G \frac{d^2 \theta_G}{dx^2} = 0. \quad (3.3.57)$$

Уравнение материального баланса по жидкой фазе:

$$-w \frac{d\theta_L}{dx} + K_G(\theta_{G \text{ вх}} - \theta_{G p}) + D_L \frac{d^2 \theta_L}{dx^2} = 0. \quad (3.3.58)$$

Уравнение равновесия:

$$\theta_G = \Gamma \theta_L. \quad (3.3.59)$$

Граничные условия (по Данквертсу):

$$v\theta_{G \text{ вх}} = v\theta_G|_{x=H} + D_G \left. \frac{d\theta_G}{dx} \right|_{x=H}; \quad (3.3.60)$$

$$\left. \frac{d\theta_G}{dx} \right|_{x=0} = 0; \quad (3.3.61)$$

$$w\theta_{L \text{ вх}} = w\theta_L|_{x=0} - D_L \left. \frac{d\theta_L}{dx} \right|_{x=0}; \quad (3.3.62)$$

$$\left. \frac{d\theta_L}{dx} \right|_{x=H} = 0. \quad (3.3.63)$$

Здесь  $\theta_G$  и  $\theta_L$  - концентрация целевого компонента в газе и жидкости,  $\theta_{Gp}$  - равновесная концентрация целевого компонента в газе,  $v$  и  $w$  - скорость потока газа и жидкости,  $K_G$  - коэффициент массопередачи,  $\Gamma$  - постоянная Генри,  $x$  - продольная координата,  $H$  - высота насадки, индексы:  $вх$  - входящий,  $вых$  - выходящий.

Для нахождения функций  $\theta_G(x)$  и  $\theta_L(x)$  достаточно решить одно уравнение (3.3.58). Функцию  $\theta_G(x)$ , после того как найдена функция  $\theta_L(x)$ , можно найти из уравнения материального баланса:

$$G(\theta_{G_{вх}} - \theta_G) = L(\theta_{L_{вых}} - \theta_L), \quad (3.3.64)$$

где  $G$  и  $L$  - массовые расходы газа и жидкости.

Используем в уравнении материального баланса (3.3.58) уравнение равновесия (3.3.59) и введем следующие переменные:

$$N = \theta_{L_{вх}} - \theta_L; \quad Pe = \frac{wH}{D_L}; \quad E = \frac{K_G H \Gamma}{D_L}; \quad z = \frac{x}{H}. \quad (3.3.65)$$

Уравнение материального баланса по жидкой фазе и соответствующие граничные условия примут вид:

$$\frac{d^2 N}{dz^2} - Pe \frac{dN}{dz} - EN = 0; \quad (3.3.66)$$

$$N_{вх} = N|_{z=0} - \frac{1}{Pe} \frac{dN}{dz} \Big|_{z=0}; \quad (3.3.67)$$

$$\frac{dN}{dz} \Big|_{z=1} = 0. \quad (3.3.68)$$

Общее решение дифференциального уравнения (3.2.66) имеет вид:

$$N = A_1 e^{r_1 z} + A_2 e^{r_2 z}, \quad (3.3.69)$$

где  $r_1, r_2$  - корни характеристического уравнения:

$$r^2 - Pe r - E = 0, \quad (3.3.70)$$

т.е.

$$r_{1,2} = \frac{Pe}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{Pe}{2}\right)^2 + E}. \quad (3.3.71)$$

Константы  $A_1$  и  $A_2$  найдем, используя граничные условия.

Подстановка  $z = 0$  и  $N = 1$  в (3.3.69) дает:

$$A_1 + A_2 - \frac{1}{Pe}(r_1 A_1 + r_2 A_2) = N_{ex}. \quad (3.3.72)$$

Удовлетворим решение (3.3.69) условию (3.3.68):

$$r_1 A_1 e^{r_1} + r_2 A_2 e^{r_2} = 0. \quad (3.3.73)$$

Решая совместно уравнения (3.3.72) и (3.3.73), находим:

$$A_1 = - \frac{N_{ex} r_2 e^{r_2}}{r_1 e^{r_1} \left( 1 - \frac{r_2 e^{r_2}}{r_1 e^{r_1}} + \frac{1}{Pe} \frac{r_2 e^{r_2}}{e^{r_1}} - \frac{1}{Pe} r_2 \right)}; \quad (3.3.74)$$

$$A_2 = \frac{N_{ex}}{1 - \frac{r_2 e^{r_2}}{r_1 e^{r_1}} + \frac{1}{Pe} \frac{r_2 e^{r_2}}{e^{r_1}} - \frac{1}{Pe} r_2}. \quad (3.3.75)$$

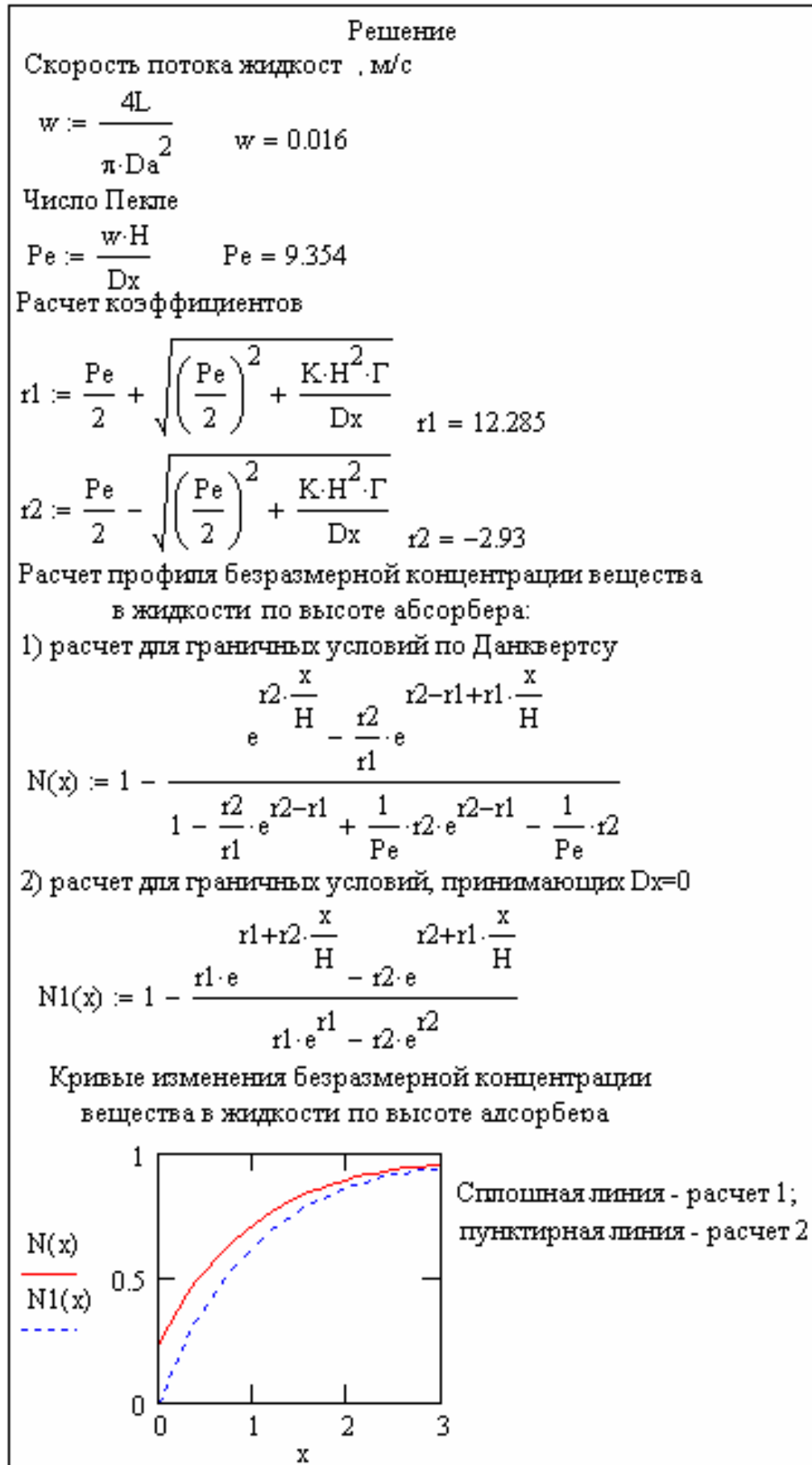
Подставим значения  $A_1$  и  $A_2$  в уравнение (3.3.69) и запишем решение задачи в прежних переменных:

$$\frac{\theta_{Lmax} - \theta_L}{\theta_{Lmax} - \theta_{Lex}} = \frac{e^{r_2 \frac{x}{H}} - \frac{e_2}{r_1} e^{r_2 - r_1 + r_1 \frac{x}{H}}}{1 - \frac{r_2 e^{r_2}}{r_1 e^{r_1}} + \frac{1}{Pe} \frac{r_2 e^{r_2}}{e^{r_1}} - \frac{1}{Pe} r_2}. \quad (3.3.76)$$

На рис. 3.3.9 представлен пример расчета кривых изменения концентрации целевого компонента в жидкой и газовой фазах по высоте насадочного абсорбера, выполненный в системе Mathcad.

Дано	
Объемный расход жидкости $L$ , м <sup>3</sup> /с	$L := 6 \cdot 10^{-3}$
Объемный расход газа $G$ , м <sup>3</sup> /с	$G := 1.6$
Высота насадки $H$ , м	$H := 3$
Диаметр аппарата $D_a$ , м	$D_a := 0.7$
Коэффициент продольной диффузии жидкости $D_x$ , м <sup>2</sup> /с	$D_x := 0.005$
Коэффициент массопередачи $K$ , 1/с	$K := 0.01$
Постоянная Генри $\Gamma$	$\Gamma := 2$
Координата $m$ , $x$	$x := 0, 0.1 \dots 3$

Рис. 3.3.9. Пример расчета насадочного абсорбера



### 3.4. Численные методы исследования химико-технологических систем

Математическое моделирование многих физических явлений приводит к численному исследованию краевых задач для дифференциальных уравнений как обыкновенных, так и с частными производными. Математические модели реальных физических процессов являются, как правило, нелинейными, т.е. описываются нелинейными уравнениями. Для численного решения не слишком важно: линейное уравнение или нелинейное, какого оно порядка, есть ли симметрия или её нет. Важное значение имеет размерность задачи. Если, например, для решения с необходимой точностью на компьютере нам нужно  $10^4$  точек вдоль каждой оси, то двумерная задача требует  $10^8$  точек, трехмерная -  $10^{12}$ , а четырехмерную невозможно решить даже на самом современном компьютере.

При реализации численных методов решения задач компьютерного моделирования химико-технологических процессов возможно появление ошибок вычислений. Ошибки вычислений могут быть вызваны приближенным характером математического описания процесса, ошибками в исходных данных, ошибками методов вычисления и ошибками округления чисел при расчете на ЭВМ.

*Погрешность математического описания* процесса возникает вследствие не принятия во внимание или неверного учета факторов, относящихся к изучаемым явлениям, и их взаимосвязей.

*Погрешность исходных данных* зависит от ошибок наблюдения, измерения и т.п., а также может быть обусловлена округлением входной информации.

Погрешности математического описания и исходных данных обычно объединяют под общим названием – неустраняемая погрешность.

*Погрешность метода вычисления* обусловлена выбором способа решения уравнений математического описания процесса и правильностью составления

моделирующей программы. Из всего разнообразия способов решения задач компьютерного моделирования необходимо выбрать наиболее надежный и быстрый способ решения, обеспечивающий заданную точность вычислений.

Погрешности метода вычисления относятся к устранимой или условной погрешности.

*Погрешность округления* связана с приближенным представлением числа в некоторой системе исчисления с помощью конечного количества разрядов.

На практике обычно полагают, что ошибка выбранного метода вычислений должна быть, по крайней мере, на порядок меньше ошибки исходных данных, а ошибка округления – на порядок меньше ошибки выбранного метода вычислений.

Результирующая погрешность определяется как сумма величин всех перечисленных выше погрешностей.

Решение задач процессов и аппаратов химической технологии состоит в том, что по исходным данным  $u$  необходимо найти решение  $z$ . При этом предполагается, что  $u$  и  $z$  связаны функциональной зависимостью  $z = f(u)$ . Задача называется корректно поставленной, если выполнены следующие условия: 1) задача имеет решение при любых допустимых исходных данных, что возможно, если среди исходных данных нет противоречащих друг другу условий (условие существования решения); 2) каждым исходным данным  $u$  соответствует только одно решение (условие однозначности). Первые два условия обычно называют условиями математической определённости задачи; 3) решение устойчиво. Смысл последнего условия заключается в том, что если для двух различных наборов данных  $u_1$  и  $u_2$  имеет место достаточно малая мера отклонения друг от друга, то мера отклонения решений  $z_1 = f(u_1)$  и  $z_2 = f(u_2)$  меньше любой наперёд заданной меры точности. При этом предполагается, что в многообразии  $U = \{u\}$  допустимых исходных данных и в многообразии возможных решений  $Z = \{z\}$  установлено понятие меры отклонения (или меры близости)  $r(u_1, u_2)$  и  $r^*(z_1, z_2)$ . Третье условие обычно трактуется как физическая детерминированность задачи.

Задачи, не удовлетворяющие хотя бы одному условию корректности, называются некорректными или некорректно поставленными.

Устойчивость означает относительно слабое влияние погрешности исходных данных на точность результатов при реализации вычислительного алгоритма. Следует отметить, что некоторые задачи весьма чувствительны к неточностям в исходных данных.

Иногда при решении корректно поставленной задачи может оказаться неустойчивым метод ее решения. Например, решение явной разностной схемы для дифференциального уравнения теплопроводности является устойчивым, если выполняется условие  $\lambda = \tau/h^2 \leq 0,5$ , где  $\tau$  – шаг сетки по времени,  $h$  – шаг по пространственной переменной,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности.

Сходимость в математическом анализе означает, что некоторые математические объекты (бесконечная последовательность, сумма бесконечного ряда, несобственный интеграл и т.п.) имеют предел. Сходимость численного метода означает близость получаемого численного решения задачи к истинному решению. Для завершения вычислительного процесса необходимо выбрать конечное число шагов итерации. Судить о погрешности метода на  $n$ -й итерации от числа  $n$  шагов возможно по скорости сходимости. Например, метод может сходиться со скоростью геометрической прогрессии и др.

На сходимость и точность вычислительного процесса значительное влияние может оказывать выбор метода дискретизации исходной задачи, в котором строится разностный или сеточный аналог. При этом под сходимостью метода понимается стремление значений решения дискретной модели к соответствующим значениям исходной задачи при стремлении к нулю параметра дискретизации (например, шага интегрирования).

Таким образом, для получения решения задачи с необходимой точностью ее постановка должна быть корректной, а используемый численный метод должен обладать устойчивостью и сходимостью.

Численные методы разнообразны и хорошо развиты. Большинство численных методов решения типовых задач реализовано в виде библиотечных



программ на ЭВМ. Для решения задач исследования химико-технологических процессов будем использовать пакет Mathcad. Ниже приведены примеры решения некоторых задач.

*Пример 1. Истечение жидкости из сосуда.* Из отверстия диаметром  $d_o$  в днище сосуда истекает жидкость, в результате чего уровень жидкости в сосуде уменьшается (рис. 3.4.1). Необходимо найти уровень жидкости в сосуде в любой момент времени.

Уравнение, описывающее убыль жидкости в сосуде, имеет вид:

$$-dV = Qd\tau, \quad (3.4.1)$$

где  $dV$  – бесконечно малый объем жидкости, уходящий из сосуда,  $\text{м}^3$ ;  $Q$  – объемный расход жидкости,  $\text{м}^3/\text{с}$ ;  $d\tau$  – бесконечно малый промежуток времени.

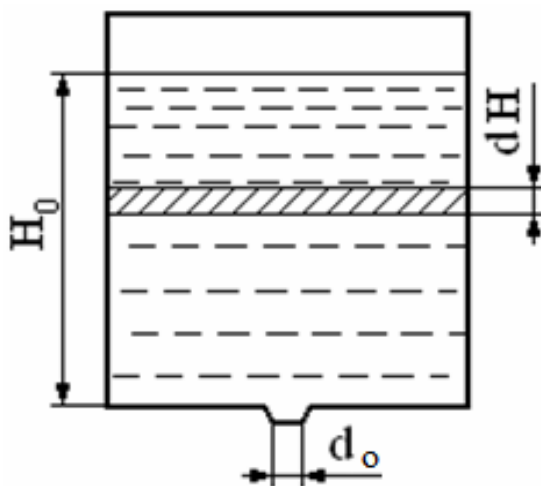


Рис. 3.4.1. Истечение жидкости из сосуда

Знак минус в левой части уравнения (3.4.1) указывает на уменьшение объема жидкости в сосуде.

Бесконечно малый объем жидкости, уходящий из сосуда, в случае постоянной площади поперечного сечения сосуда может быть найден по формуле:

$$dV = S_c dH, \quad (3.4.2)$$

где  $S_c$  – площадь поперечного сечения сосуда,  $\text{м}^2$ ;  $dH$  – бесконечно малая высота жидкости в сосуде, на которую понижается уровень жидкости при её истечении из сосуда,  $\text{м}$ .

Объемный расход жидкости, удаляемый через отверстие в днище сосуда, равен:

$$Q = \alpha S_0 \sqrt{2gH}, \quad (3.4.3)$$

где  $S_0$  – площадь поперечного сечения отверстия в днище сосуда,  $\text{м}^2$ ;  $\alpha$  – коэффициент расхода жидкости.

При истечении воды через короткий цилиндрический патрубок (насадок) можно принять  $\alpha \approx 0,82$ .

Перепишем уравнение (3.4.1) с учетом выражений (3.4.2) и (3.4.3). Получаем

$$-\frac{dH}{d\tau} = \alpha \sqrt{2gH} \frac{S_0}{S_c}. \quad (3.4.4)$$

Уравнение (3.4.4) дополним начальным условием:

$$H|_{\tau=0} = H_0, \quad (3.4.5)$$

где  $H_0$  – начальная высота уровня жидкости в сосуде.

Для решения данной краевой задачи используем встроенную в Mathcad функцию **Rkadapt**. На рис. 3.4.2 приведен пример расчета искомой кривой изменения высоты уровня жидкости в сосуде, выполненный в системе Mathcad с применением функции

$$\text{Rkadapt}(v, x1, x2, n, D), \quad (3.4.6)$$

где  $v$  – вектор начальных условий,  $x1$  – начало интервала интегрирования,  $x2$  – конец интервала интегрирования,  $n$  – число точек для вычисления,  $D$  – вектор правых производных в явном виде.

Функция **Rkadapt** реализует вычисления методом Рунге-Кутты с переменным шагом.

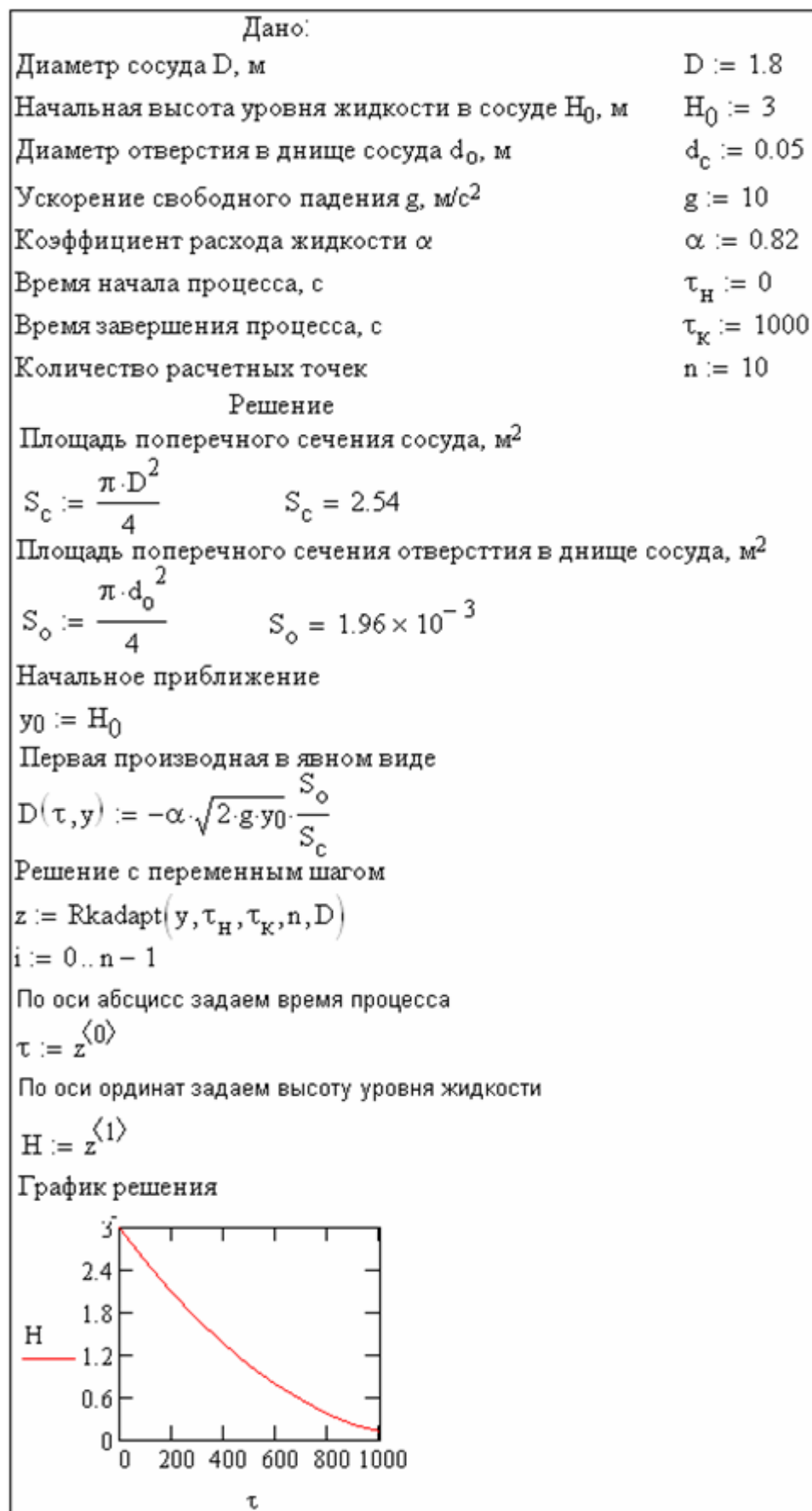


Рис. 3.4.2. Пример расчета истечения жидкости из сосуда

*Пример 2. Растворение соли в аппарате проточного типа.* В аппарате проточного типа происходит процесс растворения твердой соли (рис. 3.4.3).

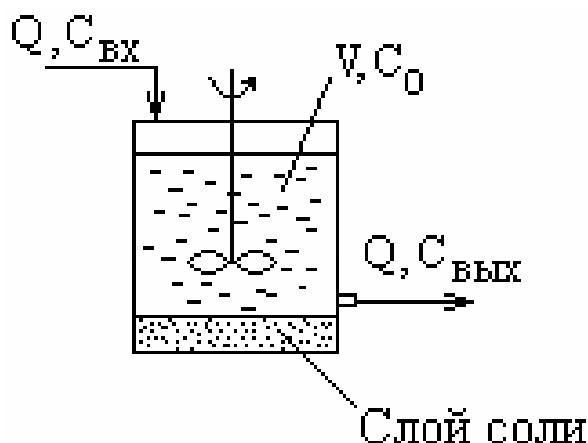


Рис. 3.4.3. Схема работы аппарата для растворения соли

Известно, что на скорость процесса растворения оказывает значительное влияние размер и форма твердой частицы, режим её обтекания, а также диффузионные свойства растворителя и растворяемого вещества. Полагаем, концентрация раствора, входящего в аппарат, равна  $C_{вх}$ . Растворяемое вещество находится на дне аппарата, образуя неподвижный плотный слой. По мере протекания процесса растворения слой вещества уменьшается, что, однако, не приводит к изменению поверхности слоя соли и изменению скорости растворения. Лимитирующей стадией процесса является диффузионный отвод растворяемого вещества от поверхности растворения. В этом случае можно принять, что концентрация вещества на поверхности частицы твердой фазы будет практически равна концентрации насыщения  $C_{нас}$ . Необходимо определить изменение концентрации растворенного вещества в растворе на выходе из аппарата.

В соответствии с принятыми допущениями составим уравнение материального баланса по растворенному веществу.

В результате растворения вещества изменяется концентрация раствора в объеме растворителя

$$G = V dC, \quad (3.4.7)$$

где  $V$  – объем растворителя в аппарате,  $\text{м}^3$ ;  $C$  – концентрация раствора,  $\text{кг}/\text{м}^3$ .

Поступление в аппарат растворителя с объемной скоростью  $Q$ , концентрацией  $C_{\text{вх}}$  приводит к изменению концентрации раствора в аппарате

$$G_1 = C Q d\tau. \quad (3.4.8)$$

Так как растворитель выходит из аппарата с той же скоростью, с какой поступает, то концентрация вещества в потоке на выходе из аппарата  $C_{\text{вых}}$  равна:

$$G_2 = - C_{\text{вых}} Q d\tau. \quad (3.4.9)$$

Количество вещества, растворенного в аппарате, определяется формулой:

$$G_3 = F \beta (C_{\text{нас}} - C) d\tau, \quad (3.4.10)$$

где  $C_{\text{нас}}$  – концентрация насыщенного раствора,  $\text{кг/м}^3$ ;  $F$  – поверхность растворяемого вещества,  $\text{м}^2$ ;  $\beta$  – коэффициент массоотдачи,  $\text{м/с}$ .

Уравнение материального баланса имеет вид:

$$G = G_1 - G_2 + G_3. \quad (3.4.11)$$

Подставляя выражения (3.4.7) – (3.4.10) в уравнение (3.4.11), получаем

$$\frac{dC}{d\tau} = \frac{1}{\tau_0} (C_{\text{вх}} - C) + F\beta(C_{\text{нас}} - C). \quad (3.4.12)$$

Уравнение (3.4.12) надо проинтегрировать при начальных условиях:

$$C|_{\tau=0} = C_0. \quad (3.4.13)$$

Для решения дифференциального уравнения (3.4.12) с условием (3.4.13) используем встроенную функцию `rkfixed(v, x1, x2, n, D)`. Иллюстрация решения приведена на рис. 3.4.4.

Дано:	
Объем растворителя в аппарате $V$ , $\text{м}^3$	$V := 0.1$
Объемный расход жидкой фазы $Q$ , $\text{м}^3/\text{с}$	$Q := 4.5 \cdot 10^{-4}$
Начальная концентрация раствора в аппарате $C_0$ , $\text{кг/м}^3$	$C_0 := 0$
Концентрация раствора на входе в аппарат $C_{\text{вх}}$ , $\text{кг/м}^3$	$C_{\text{вх}} := 0$
Концентрация насыщенного раствора $C_{\text{нас}}$ , $\text{кг/м}^3$	$C_{\text{нас}} := 300$

Рис. 3.4.4. Пример расчета растворения соли в аппарате проточного типа

Диаметр аппарата $D_a$ , м	$D_a := 0.5$
Время начала процесса, с	$\tau_H := 0$
Время завершения процесса, с	$\tau_K := 800$
Коэффициент массоотдачи $\beta$ , м/с	$\beta := 1 \cdot 10^{-5}$
Количество расчетных точек	$n := 10$

## Решение

Площадь поверхности растворения,  $m^2$ 

$$F := \frac{\pi \cdot D_a^2}{4} \quad F = 0.196$$

Среднее время пребывания, с

$$\tau_0 := \frac{V}{Q} \quad \tau_0 = 222$$

Начальное приближение

$$y_0 := C_0$$

Первая производная в явном виде

$$D(\tau, y) := \frac{-y_0}{\tau_0} + F \cdot \beta \cdot (C_{\text{нас}} - y_0)$$

Решение с постоянным шагом

$$z := \text{rkfixed}(y, \tau_H, \tau_K, n, D)$$

$$i := 0 \dots n - 1$$

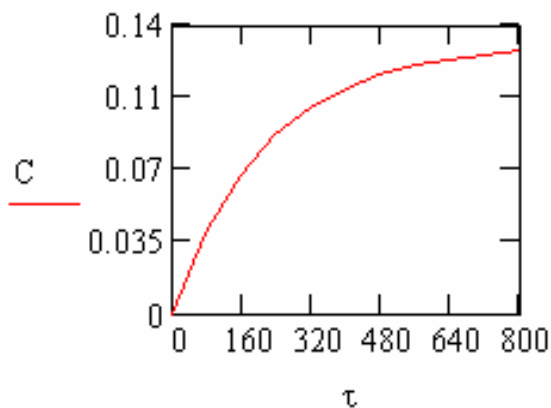
По оси абсцисс задаем время процесса

$$\tau := z^{(0)}$$

По оси ординат задаем концентрацию раствора

$$C := z^{(1)}$$

График решения



*Пример 3. Кинетика простой односторонней химической реакции.*

Рассмотрим простую мономолекулярную одностороннюю химическую реакцию вида:



протекающую в закрытой системе.

Уравнение скорости протекания химической реакции может быть записано в виде дифференциального уравнения первого порядка:

$$r_i = -\frac{dC_A}{d\tau} = kC_A, \quad (3.4.14)$$

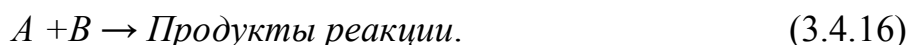
где  $k$  – константа скорости химической реакции,  $C_A$  – концентрация реагента  $A$ ,  $\tau$  – время.

Зададим начальное условие:

$$C_A|_{\tau=0} = C_0. \quad (3.4.15)$$

Иллюстрация решения дифференциального уравнения (3.4.14) с начальным условием (3.4.15) с использованием функции `rkfixed(v, x1, x2, n, D)` приведена на рис. 3.4.5.

*Пример 4. Кинетика химической реакции второго порядка.* Рассмотрим химическую реакцию вида:



Дифференциальное уравнение скорости реакции может быть записано в следующем виде:

$$-\frac{dC_A}{d\tau} = -\frac{dC_B}{d\tau} = kC_AC_B, \quad (3.4.17)$$

где  $k$  – константа скорости химической реакции,  $C_A$ ,  $C_B$  – концентрации реагентов  $A$  и  $B$ .

Начальным условие является:

$$C_A|_{\tau=0} = C_{0A}. \quad (3.4.18)$$

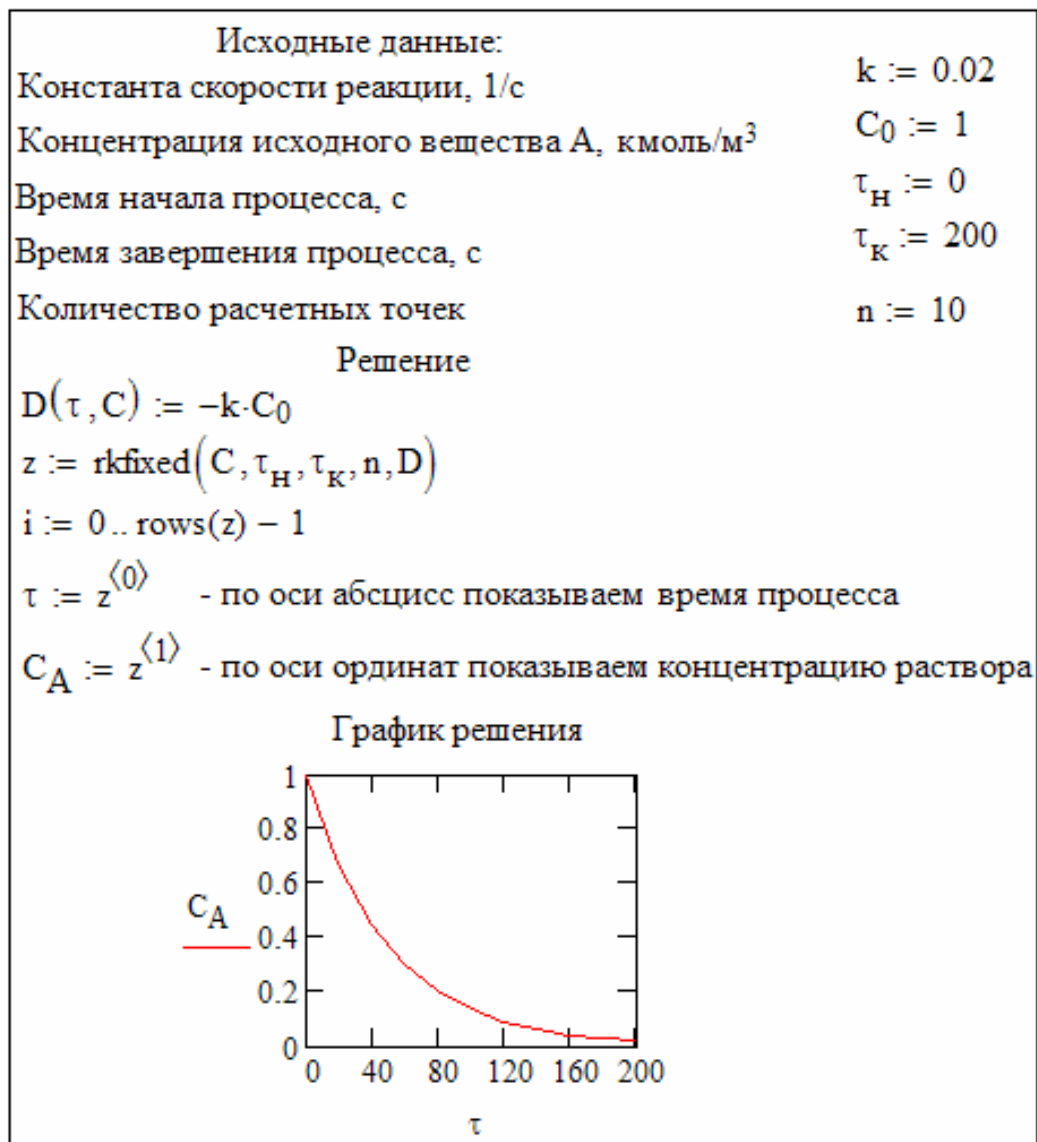


Рис. 3.4.5. Пример расчета кинетики односторонней химической реакции первого порядка

Уравнение (3.4.17) содержит три переменных. Для исключения одной из них введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} C_A &= C_{0A} - x, \\ C_B &= C_{0B} - x, \quad C_{0A} \neq C_{0B}, \end{aligned} \quad (3.4.19)$$

где  $C_{0A}$  и  $C_{0B}$  – начальные концентрации веществ  $A$  и  $B$ , соответственно,  $x$  – убыль концентрации реагирующих веществ  $A$  и  $B$  к моменту времени  $\tau$ .

С учетом замены переменных по формулам (3.4.19) уравнение скорости реакции (3.4.17) получит вид:



$$\frac{dx}{d\tau} = k(C_{0A} - x)(C_{0B} - x). \quad (3.4.20)$$

Начальное условие будет таковым:

$$x|_{\tau=0} = 0. \quad (3.4.21)$$

Для решения дифференциального уравнения (3.4.20) с условием (3.4.21) используем встроенную в Mathcad функцию  $\text{rkfixed}(v, x1, x2, n, D)$ . На рис. 3.4.6 показан пример решения данной краевой задачи.

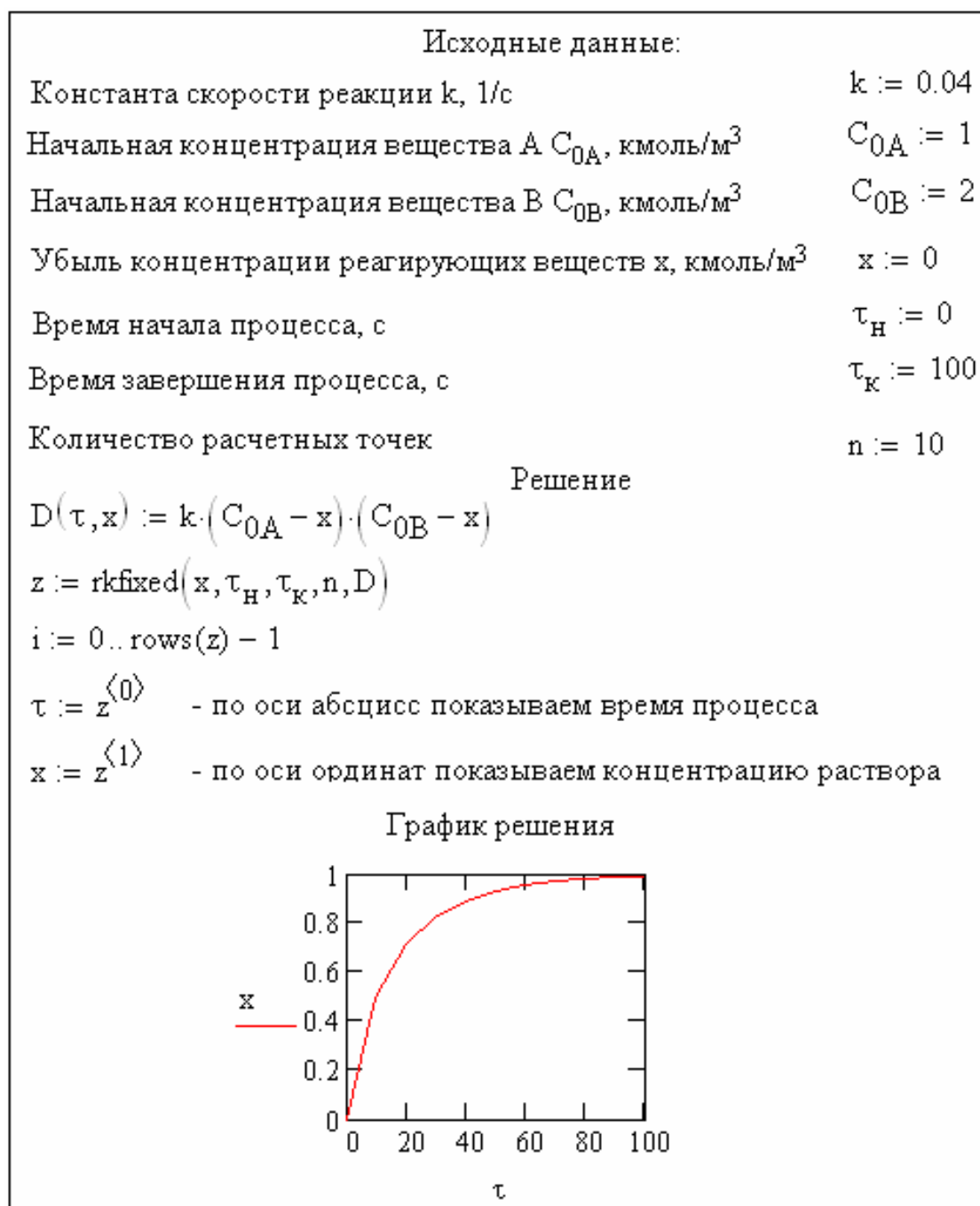


Рис. 3.4.6. Пример расчета кинетики химической реакции второго порядка

*Пример 5. Модель идеального смешения.* Модель идеального смешения предполагает, что вещество, поступающее в аппарат, мгновенно распределяется по всему объему. К аппаратам данного типа стремится емкостной аппарат со сферическим днищем и пропеллерной мешалкой (рис. 3.4.7).

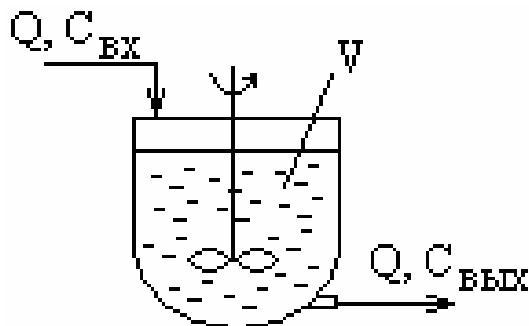


Рис. 3.4.7. Схема модели идеального смешения

Полагаем, что в аппарат поступает жидкость с объемным расходом  $Q$ . В аппарат вводится определенное количество  $M$  индикатора, который мгновенно распределяется по всему объему и вымывается из аппарата. Начальная концентрация индикатора в аппарате равна

$$C_0 = \frac{M}{V}, \quad (3.4.22)$$

где  $V$  – объем аппарата.

Составим уравнение материального баланса по индикатору.

В результате вымывания индикатора изменяется его концентрация в объеме аппарата

$$V(-dC). \quad (3.4.23)$$

Знак минус указывает на убывание концентрации.

Концентрация вещества в потоке на выходе из аппарат равна:

$$CQd\tau, \quad (3.4.24)$$

где  $\tau$  – время.

Уравнение материального баланса по индикатору может быть записано так:

$$\frac{dC}{d\tau} = -\frac{1}{\tau_0} C, \quad (3.4.25)$$

где  $\tau_0 = V/Q$  – среднее время пребывания индикатора в аппарате.

Зададим начальное условие

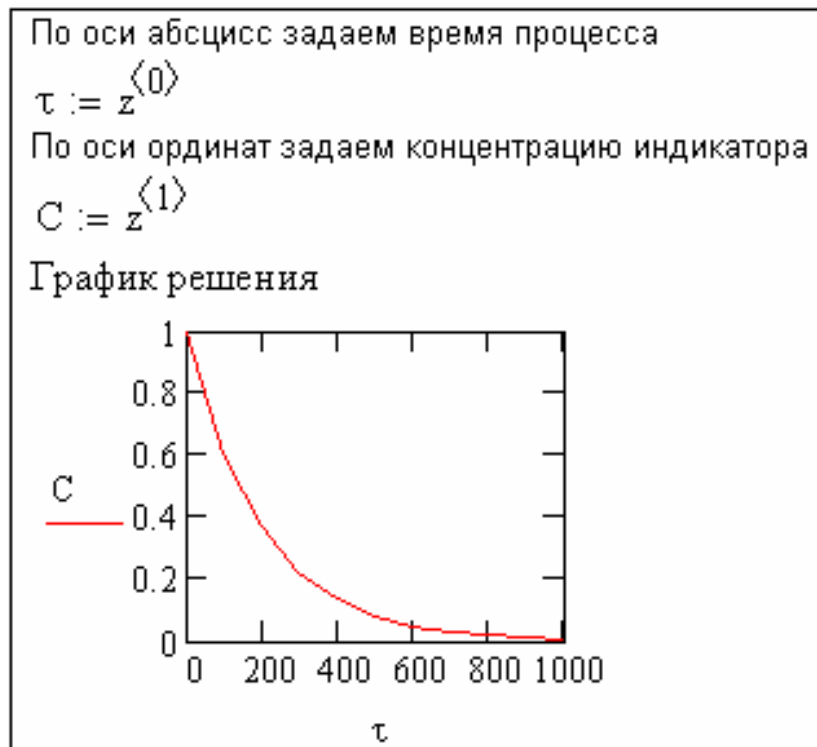
$$C|_{\tau=0} = C_0, \quad (3.4.26)$$

где  $C_0$  – концентрация индикатора в начальный момент времени.

На рис. 3.4.8 приведен пример расчета изменения концентрации индикатора в аппарате при его импульсном вводе в аппарат, выполненный в системе Mathcad с применением функции `rkfixed(v, x1, x2, n, D)`. Функция `rkfixed` возвращает матрицу решений методом Рунге-Кутты с постоянным шагом для обыкновенных дифференциальных уравнений с начальными условиями в векторе  $v$ , правые части которых записаны в символьном векторе  $D$  на интервале от  $x1$  до  $x2$ .

Дано:	
Рабочий объем аппарата $V$ , м <sup>3</sup>	$V := 0.5 \cdot 10^{-3}$
Объемный расход жидкой фазы $Q$ , м <sup>3</sup> /с	$Q := 2.5 \cdot 10^{-6}$
Начальная концентрация раствора в аппарате, моль/л	$C_0 := 1$
Время начала процесса, с	$\tau_H := 0$
Время завершения процесса, с	$\tau_K := 1000$
Количество расчетных точек	$n := 10$
Решение	
Среднее время пребывания индикатора,	
$\tau_0 := \frac{V}{Q}$	$\tau_0 = 200$
Начальное приближение	
$y_0 := C_0$	
Первая производная в явном виде	
$D(\tau, y) := \frac{-y_0}{\tau_0}$	
Решение с постоянным шагом	
$z := \text{rkfixed}(y, \tau_H, \tau_K, n, D)$	
$i := 0..n-1$	

Рис. 3.4.8. Пример расчета модели идеального смешения



*Пример 6. Перенос теплоты через плоскую стенку.* Рассмотрим процесс передачи теплоты через плоскую стенку, длина и ширина которой несравненно больше ее толщины, равной  $\delta$  (рис. 3.4.9). Температуры наружных поверхностей стенок равны  $t_{cm1}$  и  $t_{cm2}$ , причем  $t_{cm1} > t_{cm2}$ . Примем, что ось  $x$  расположена по нормали к поверхности стенки.

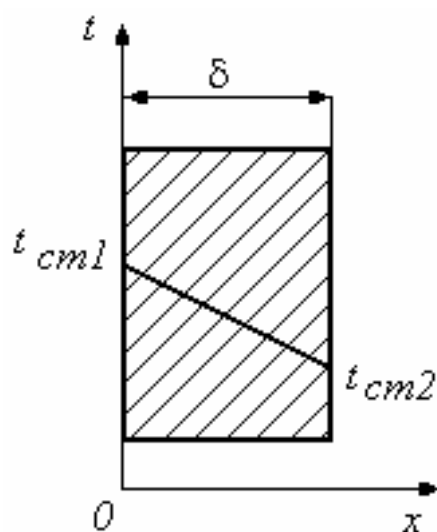


Рис. 3.4.9. Теплопередача через плоскую стенку

При установившемся процессе передачи теплоты через плоскую стенку уравнение теплопроводности имеет вид:

$$\frac{d^2 t}{dx^2} = 0. \quad (3.4.27)$$

Уравнение (3.4.27) является частным случаем дифференциального уравнения теплопроводности.

Граничные условия к уравнению (3.4.27) запишем так:

$$t|_{x=0} = t_{cm1}, \quad (3.4.28)$$

$$t|_{x=\delta} = t_{cm2}. \quad (3.4.29)$$

На рис. 3.4.10 приведен пример расчета стационарного процесса передачи теплоты через плоскую стенку в системе Mathcad с помощью функции `odesolve` (`x`, `b` [, `steps`]), которая возвращает решение дифференциального уравнения, описываемого в вычислительном блоке `Given` при заданных начальных условиях и конце интегрирования `b`. Вычисления выполняются совместно с булевым равно, находящимся на панели булевых операторов `Boolean`.

*Пример 7. Распространение теплоты на плоскости от источника.*

Рассмотрим стационарный процесс распространения теплоты на плоскости вокруг источника. Для описания данного процесса может быть использовано уравнение Пуассона, которое запишем в следующем виде:

$$\lambda \frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial x^2} + \lambda \frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial y^2} = -q^T(x,y), \quad (3.4.30)$$

где  $T$  – температура,  $x$  и  $y$  – координаты,  $q^T(x,y)$  – источник теплоты,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности.

Перепишем уравнение (3.4.30) в виде:

$$\frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial y^2} = -\rho(x,y), \quad (3.4.31)$$

где  $\rho(x,y) = q^T(x,y)/\lambda$ .

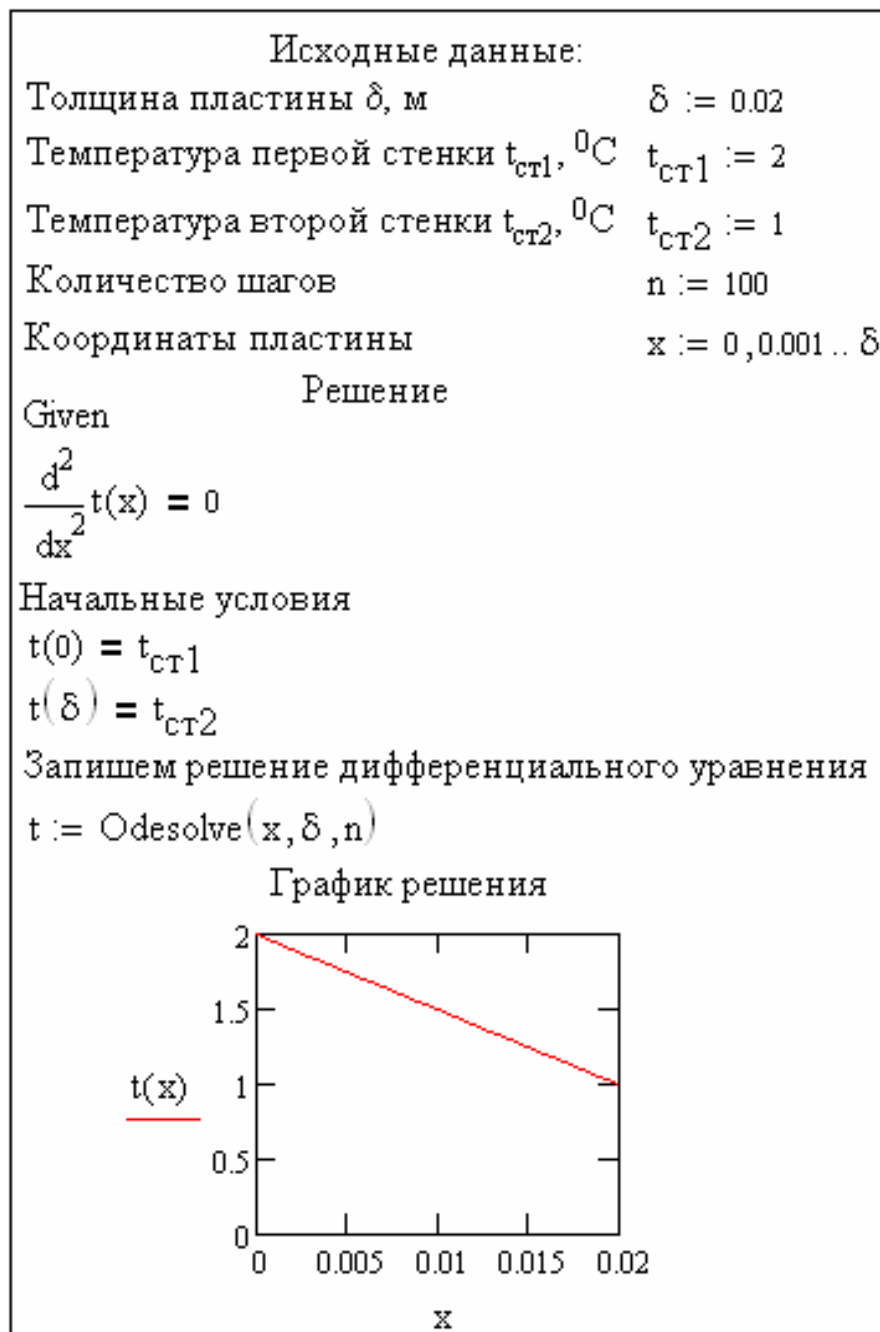


Рис. 3.4.10. Пример расчета процесса передачи теплоты через плоскую стенку

Решение уравнения (3.4.31) будем осуществлять при нулевых граничных условиях, определенных для всех четырех сторон квадрата:

$$T(0, y) = T(x, 0) = T(L, y) = T(x, H) = 0, \quad (3.4.32)$$

где  $L$  и  $H$  – длина сторон квадрата.

Предполагаем, что источник теплоты на поверхности  $\rho(x, y)$  является постоянным.

В Mathcad для численного решения уравнения Пуассона используется метод конечных разностей. Решение ищется в узлах сетки, состоящей из  $(M+1) \times (M+1)$  точек. Здесь  $M=2^n$ . Для решения уравнения Пуассона будем использовать встроенную в Mathcad функцию  $\text{multigrid}(M, \text{ncycle})$ , где  $M$  – матрица правой части уравнения Пуассона,  $\text{ncycle}$  – параметр, определяющий количество циклов, используемых численным алгоритмом на каждую итерацию. Хорошую аппроксимацию решения обычно даёт значение  $\text{ncycle}$ , равное 2. Пример решения уравнения Пуассона (3.4.31) при граничных условиях (3.4.32) приведен на рис. 3.4.11.

Дано:

Размерность аппроксимирующей сетки

$n := 2^5$

$F_{n,n} := 0$

$\rho := 100000$

$x := 15$

$y := 15$

Краевые условия

Решение

$F_{x,y} := \rho$

$T := \text{multigrid}(-F, 2)$

Мощность источника теплоты

Координаты источника теплоты

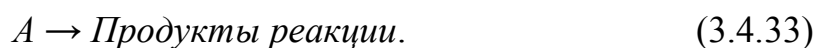
Результат расчета

	0	1	2	3	4	5	6	7	8
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0.124	0.247	0.37	0.493	0.615	0.736	0.854	0.967
2	0	0.247	0.494	0.74	0.986	1.232	1.475	1.712	1.941
3	0	0.37	0.74	1.11	1.481	1.851	2.219	2.579	2.926
4	0	0.493	0.986	1.481	1.977	2.475	2.969	3.457	3.931
5	0	0.615	1.232	1.851	2.475	3.101	3.727	4.349	4.955
6	0	0.736	1.475	2.219	2.969	3.727	4.49	5.252	6.004
7	0	0.854	1.712	2.579	3.457	4.349	5.252	6.163	7.071
8	0	0.967	1.941	2.926	3.931	4.955	6.004	7.071	8.154
9	0	1.073	2.156	3.256	4.381	5.538	6.731	7.963	9.227
10	0	1.171	2.353	3.558	4.798	6.082	7.419	8.817	10.278
11	0	1.256	2.527	3.827	5.169	6.571	8.045	9.608	11.269
12	0	1.327	2.672	4.05	5.481	6.984	8.582	10.293	12.152
13	0	1.381	2.781	4.22	5.717	7.3	8.993	10.829	12.849
14	0	1.416	2.852	4.328	5.869	7.503	9.261	11.178	13.311
15	0	1.43	2.88	4.371	5.93	7.583	9.364	11.31	13.488

Рис. 3.4.11. Пример расчета распределения температуры на поверхности



*Пример 8. Химическая реакция первого порядка в емкостном аппарате непрерывного действия.* В емкостном аппарате непрерывного действия с перемешивающим устройством и рубашкой (рис. 3.4.12) протекает экзотермическая химическая реакция первого порядка вида



Для отвода теплоты из реакционного объема в рубашку подается охлаждающий агент.

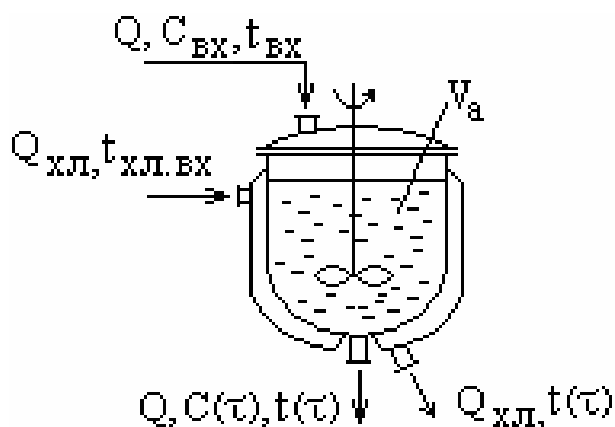


Рис. 3.4.12. Схема реактора непрерывного действия с перемешивающим устройством и рубашкой



Уравнение скорости протекания химической реакции может быть записано в виде дифференциального уравнения первого порядка:

$$r_i = -\frac{dC_A}{d\tau} = kC_A, \quad (3.4.34)$$

где  $C_A$  – концентрация реагента  $A$ , моль/м<sup>3</sup>;  $k$  – константа скорости химической реакции, 1/с;  $\tau$  – время, с.

Зададим начальное условие к уравнению (3.4.34):

$$C_A|_{\tau=0} = C_0, \quad (3.4.35)$$

где  $C_0$  – концентрация реагента  $A$  в аппарате в начальный момент времени, моль/м<sup>3</sup>.

Зависимость константы скорости реакции от абсолютной температуры описывается уравнением Аррениуса:

$$k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}, \quad (3.4.36)$$

где  $E$  – энергия активации, Дж/моль;  $k_0$  – предэкспотенциальный множитель, 1/с;  $R$  – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К);  $T$  – абсолютная температура, К.

Требуется определить концентрацию реагента и температуру охлаждающего агента в любой момент времени.

Составим уравнение материального баланса для реактора:

$$V_a \frac{dC_A}{d\tau} = Q[C_{ex} - C_A(\tau)] + V_a[-kC_A(\tau)], \quad (3.4.37)$$

где  $C_{ex}$  – концентрация реагента  $A$  на входе в аппарат, моль/м<sup>3</sup>;  $V_a$  – реакционный объем аппарата, м<sup>3</sup>;  $Q$  – объемный расход раствора, м<sup>3</sup>/с.

Составим уравнение теплового баланса для реактора:

$$V_a \rho c_p \frac{dt}{d\tau} = Q \rho c_p [t_{ex} - t(\tau)] + V_a q_p k C_A(\tau) - KF[t(\tau) - t_{xl.ex}]. \quad (3.4.38)$$

Начальное условие:

$$t|_{\tau=0} = t_0. \quad (3.4.39)$$

Здесь  $F$  – площадь поверхности теплообмена аппарата,  $\text{м}^2$ ;  $K$  – коэффициент теплопередачи,  $\text{Вт}/(\text{м}^2\text{К})$ ;  $q_p$  – тепловой эффект реакции,  $\text{Дж}/\text{моль}$ ;  $Q$  – объемный расход раствора,  $\text{м}^3/\text{с}$ ;  $Q_{\text{хл}}$  – объемный расход охлаждающего агента,  $\text{м}^3/\text{с}$ ;  $t$  – температура раствора,  $^{\circ}\text{C}$ ;  $t_{\text{ex}}$  – температура раствора на входе в аппарат,  $^{\circ}\text{C}$ ;  $t_0$  – температура раствора в аппарате в начальный момент времени,  $^{\circ}\text{C}$ ;  $t_{\text{хл.вх}}$  – температура охлаждающего агента на входе в рубашку,  $^{\circ}\text{C}$ ;  $\rho$  – плотность раствора,  $\text{кг}/\text{м}^3$ .

Преобразуем уравнения (3.4.37) и (3.4.38) с учетом уравнения (3.4.36):

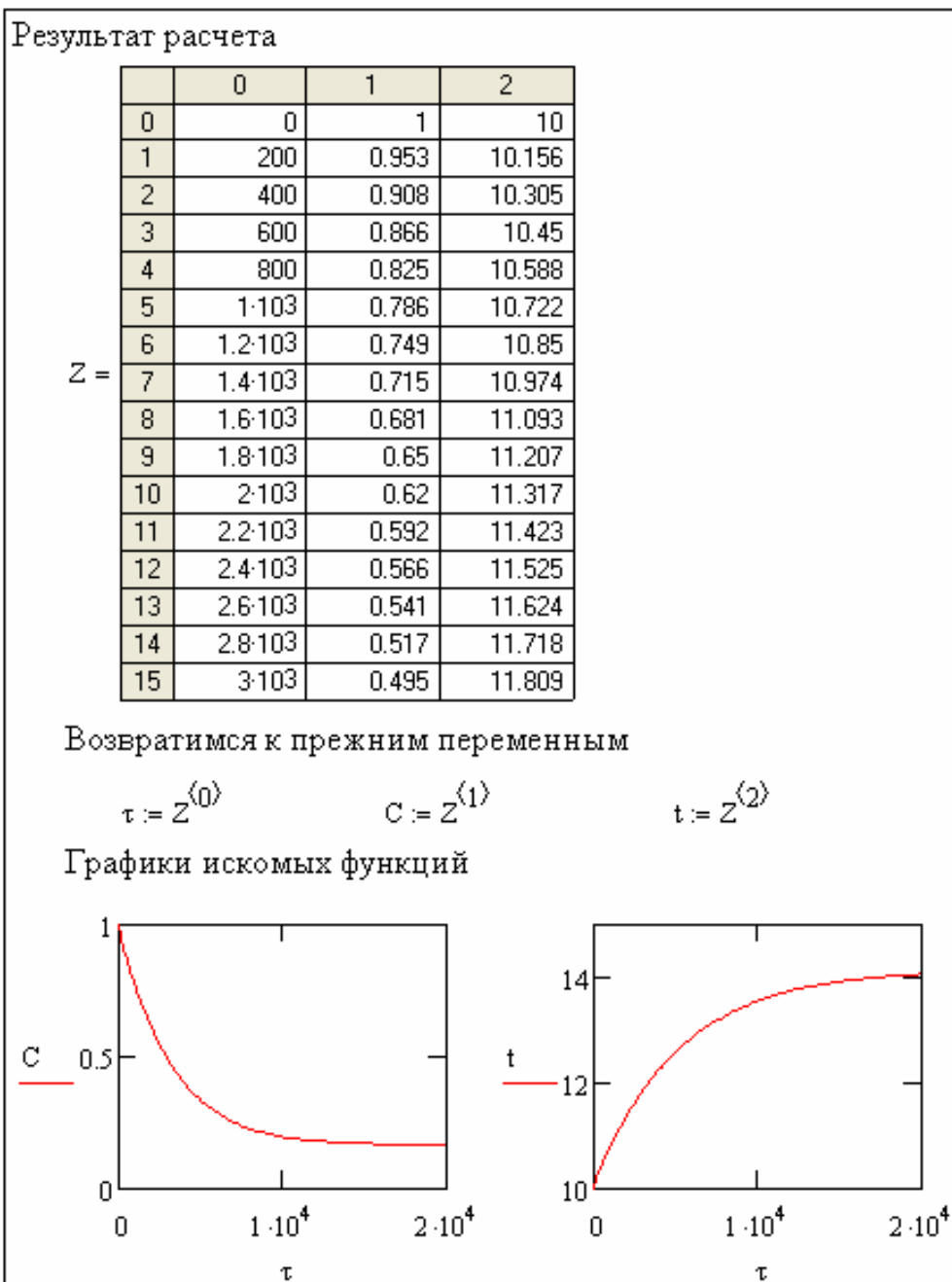
$$\begin{cases} \frac{dC_A}{d\tau} = \frac{Q[C_{\text{ex}} - C_A(\tau)] - V_a k_0 e^{-\frac{E}{R(273+t)}} C_A(\tau)}{V_a} \\ \frac{dt}{d\tau} = \frac{Q\rho c_p[t_{\text{ex}} - t(\tau)] + V_a q_p k_0 e^{-\frac{E}{R(273+t)}} C_A(\tau) - KF[t(\tau) - t_{\text{хл.вх}}]}{V_a \rho c_p} \end{cases} \quad (3.4.40)$$

Решение системы дифференциальных уравнений (3.4.40) с условиями (3.4.35) и (3.4.39) проводим методом Рунге-Кутты, реализуемым с функции  $\text{Rkadapt}(y0, x1, x2, n, G)$ , встроенной в Mathcad. Здесь  $y0$  – начальные условия,  $x1, x2$  – интервал интегрирования,  $n$  – количество шагов,  $G$  – правые части дифференциальных уравнений, записанные в символьном векторе. Пример расчета емкостного аппарата непрерывного действия приведен на рис. 3.4.13.

Дано:	
Объем аппарата $V_a$ , $\text{м}^3$	$V_a := 0.5$
Концентрация вещества А в растворе на входе в аппарат $C_A$ , $\text{моль}/\text{л}$	$C_{\text{вх}} := 1$
Концентрация вещества А в растворе в аппарате в начальный момент времени $C_0$ , $\text{моль}/\text{л}$	$C_0 := 1$
Температура раствора в аппарате в начальный момент времени $t_0$ , $^{\circ}\text{C}$	$t_0 := 10$
Объемный расход раствора в аппарат $Q$ , $\text{м}^3/\text{с}$	$Q := 3.5 \cdot 10^{-5}$
Площадь поверхности теплообмена аппарата, $\text{м}^2$	$F := 1.8$

Рис. 3.4.13. Пример расчета емкостного реактора непрерывного действия

Температура раствора на входе в аппарат, $t_{\text{вх}}, ^\circ\text{C}$	$t_{\text{вх}} := 30$
Температура охлаждающего агента на входе в рубашку, $t_{\text{хл.вх}}, ^\circ\text{C}$	$t_{\text{хл.вх}} := 5$
Предэкспотенциальный множитель в уравнении Аррениуса $k_0$ , 1/с	$k_0 := 2 \cdot 10^9$
Энергия активации $E$ , Дж/моль	$E := 70000$
Универсальная газовая постоянная $R$ , Дж/(моль К)	$R := 8.314$
Коэффициент теплопередачи $K$ , Вт/(м <sup>2</sup> К)	$K := 120$
Тепловой эффект реакции $q_p$ , Дж/моль	$q_p := 100000$
Плотность раствора $\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$\rho := 1100$
Удельная теплоемкость раствора $c_p$ , Дж/(кг·К)	$c_p := 3200$
Временной интервал интегрирования, с:	
$\tau_1$	$\tau_1 := 0$
$\tau_2$	$\tau_2 := 2 \cdot 10^4$
Количество шагов	$n := 100$
Расчет	
Вектор-функция правых частей дифференциальных уравнений математического описания процесса	
$G(\tau, y) :=$	$\begin{bmatrix} \frac{Q \cdot (C_{\text{вх}} - y_0) - V_a \cdot k_0 \cdot e^{\frac{-E}{R \cdot (273 + y_1)}} \cdot y_0}{V_a} \\ \frac{Q \cdot \rho \cdot c_p \cdot (t_{\text{вх}} - y_1) + V_a \cdot q_p \cdot k_0 \cdot e^{\frac{-E}{R \cdot (273 + y_1)}} - K \cdot F \cdot (y_1 - t_{\text{хл.вх}})}{V_a \cdot \rho \cdot c_p} \end{bmatrix}$
Начальные условия	
$y0 := \begin{pmatrix} C_0 \\ t_0 \end{pmatrix}$	
Решение дифференциального уравнения	
$Z := \text{Rkadapt}(y0, \tau_1, \tau_2, n, G)$	



*Пример 9. Нагревание органической жидкости в кожухотрубчатом теплообменнике.* В горизонтальном одноходовом кожухотрубчатом теплообменнике (рис. 3.4.14) проходит непрерывный процесс нагревания органической жидкости водяным паром.

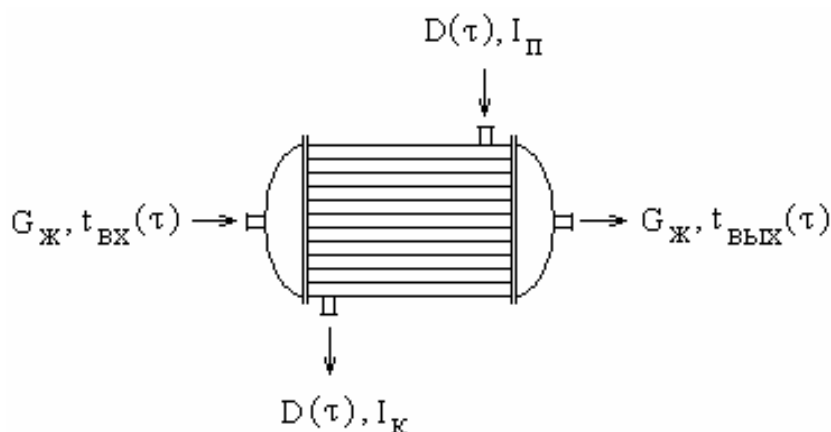


Рис. 3.4.14. Схема движения фаз в подогревателе

Обозначим через  $D(\tau)$  – массовый расход водяного пара на входе в подогреватель,  $G_{ж}$  – массовый расход жидкости в подогреватель,  $c_{ж}$  – средняя удельная теплоемкость жидкости,  $I_n$  и  $I_k$  – энтальпии пара и конденсата,  $t_{вх}(\tau)$  и  $t_{вых}(\tau)$  – температуры жидкости на входе в подогреватель и на выходе из него.

При постановке математической модели процесса теплообмена в теплообменнике используем следующие допущения: жидкость в трубном пространстве движется в режиме идеального вытеснения; температура жидкости на входе в теплообменник изменяется во времени; высота уровня конденсата в теплообменнике является незначительной; давление пара изменяется незначительно, что позволяет считать температуру пара в любой точке аппарата одинаковой.

Уравнение теплового баланса подогревателя без учета потерь теплоты в окружающую среду имеет вид:

$$D(\tau)(I_n - I_k) = G_{ж}c_{ж}[t_{вых}(\tau) - t_{вх}(\tau)]. \quad (3.4.41)$$

Учитывая принятые допущения, можно из математической модели исключить уравнение для профиля температур водяного пара, т.к. его температура является величиной известной. Уравнение для профиля температур жидкости в трубах теплообменника имеет следующий вид:

$$\frac{\partial t(x, \tau)}{\partial \tau} = -w \frac{\partial t(x, \tau)}{\partial x} + R[t_n - t(x, \tau)]. \quad (3.4.42)$$

К уравнению (3.4.42) необходимо добавить начальные и граничные условия:

$$t(x, \tau)|_{\tau=0} = t_n; \quad (3.4.43)$$

$$t(x, \tau)|_{x=0} = t_{ex}. \quad (3.4.44)$$

Здесь  $R = K\Pi/(Sc_{ж}\rho_{ж})$ ,  $t_n$  – температура пара;  $w$  – скорость движения жидкости в трубе теплообменника;  $K$  – коэффициент теплопередачи;  $\Pi$  – периметр трубы теплообменника, вычисленный по среднему диаметру;  $S$  – площадь поперечного сечения трубы.

Введем новые переменные:

$$T = t_n - t, \quad T_{ex} = t_n - t_{ex}. \quad (3.4.45)$$

В новых переменных система уравнений (3.4.49) – (3.4.51) примет вид:

$$\frac{\partial T(x, \tau)}{\partial \tau} + w \frac{\partial T(x, \tau)}{\partial x} + RT(x, \tau) = 0; \quad (3.4.46)$$

$$T(x, \tau)|_{\tau=0} = 0; \quad (3.4.47)$$

$$T(x, \tau)|_{x=0} = T_{ex}. \quad (3.4.48)$$

Для решения системы дифференциальных уравнений (3.4.46) – (3.4.48) в системе Mathcad будем использовать встроенную функцию Pdsolve(u, x, xrange, t, trange, [xpts], [tpts]). Пример расчета приведен на рис. 3.4.15.

Дано:	
Расход органической жидкости $V$ , кг/с	$V := 7$
Температура органической жидкости на входе в аппарат $t_{вх}$ , °C	$t_{вх} := 20$
Температура пара $t_{п}$ , °C	$t_{п} := 120$
Плотность органической жидкости $\rho$ , кг/м³	$\rho := 820$
Удельная теплоемкость органической жидкости $c$ , Дж/(кг K)	$c := 1700$
Коэффициент теплопередачи $K$ , Вт/(м²K)	$K := 160$
Диаметр кожуха $D_a$ , м	$D_a := 0.8$
Длина труб $L$ , м	$L := 3$
Количество труб в трубной решетке $n$	$n := 465$
Наружный диаметр трубы $d_n$ , м	$d_n := 0.025$
Толщина стенки трубы $s$ , м	$s := 0.002$
Время окончания расчета	$\tau_{max} := 100$

Рис. 3.4.15. Пример расчета кожухотрубчатого теплообменника

Решение

Площадь поперечного сечения трубы  $S_{\text{тр}}$ ,  $\text{м}^2$ 

$$S_{\text{тр}} := \frac{\pi \cdot (d_{\text{н}} - 2 \cdot s)^2}{4} \quad S_{\text{тр}} = 3.46 \times 10^{-4}$$

Скорость движения органической жидкости в трубе,  $\text{м/с}$ 

$$w := \frac{V}{\rho \cdot S_{\text{тр}} \cdot n} \quad w = 0.053$$

Новая переменная

$$T_{\text{вх}} := t_{\text{п}} - t_{\text{вх}} \quad T_{\text{вх}} = 100$$

Коэффициент

$$R := \frac{K \cdot [\pi \cdot (d_{\text{н}} - 2 \cdot s)]}{S_{\text{тр}} \cdot c \cdot \rho} \quad R = 0.022$$

Given

Задание дифференциального уравнения

$$(T_{\theta}(z, \theta) + w \cdot T_z(z, \theta)) + R \cdot T(z, \theta) = 0$$

Задание начального условия

$$T(z, 0) = 0$$

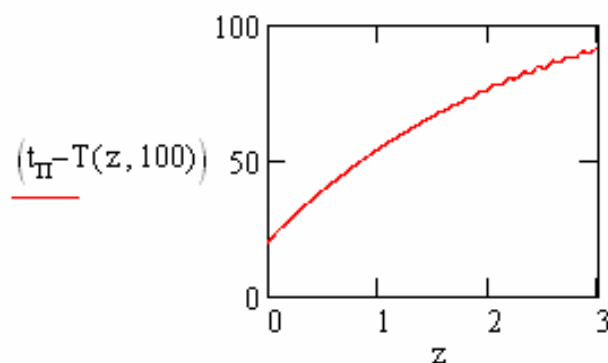
Задание граничных условий

$$T(0, \theta) = T_{\text{вх}}$$

Решение дифференциального уравнения

$$T := \text{Pdesolve} \left[ T, z, \begin{pmatrix} 0 \\ L \end{pmatrix}, \theta, \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{\text{max}} \end{pmatrix}, 100, 100 \right]$$

Кривая распределения температуры органической жидкости по длине теплообменных труб



## **Глава 4. Экспериментальные методы исследования**

### **4.1. Общие сведения. Классификация экспериментов**

Экспериментальные исследования проводят обычно после теоретических исследований. Слово эксперимент происходит от лат. *experimentum* – проба, опыт. В отличие от наблюдения при проведении эксперимента исследователь активно воздействует на изучаемый объект.

*Основной целью эксперимента* являются: определение свойств исследуемого объекта, выявление влияния различных факторов на свойства этого объекта, проверка справедливости гипотез и на этой основе глубокое изучение темы научного исследования.

Различают следующие виды экспериментов [10]:

- по отраслям науки – технические, физические, биологические, химические, социальные и др.;
- по способу формирования условий – естественные и искусственные;
- по целям исследований – констатирующие, преобразовывающие, контролирующие, поисковые, решающие;
- по организации проведения – лабораторные, натурные, полевые, производственные;
- по структуре изучаемых объектов и явлений – простые и сложные;
- по характеру внешних воздействий на объект исследований – вещественные, энергетические, информационные;
- по виду средства взаимодействия с объектом исследования – обычные и модельные;
- по типу моделей, исследуемых в эксперименте – материальные и мыслимые;
- по контролируемым величинам – пассивные и активные;
- по числу варьируемых факторов – однофакторные и многофакторные;
- по характеру изучаемых объектов или явлений – технологические, социометрические и т.п.



*Естественный эксперимент* предполагает проведение опытов в естественных условиях существования объекта исследования.

*Искусственный эксперимент* предполагает формирование искусственных условий.

*Преобразующий (созидательный) эксперимент* предполагает активное изменение структуры и функций объекта исследования с целью создания условия для формирования новых свойств и качеств объекта.

*Констатирующий эксперимент* используется для проверки определенных предположений.

*Поисковый эксперимент* проводится в случае отсутствия достаточных предварительных данных о факторах, влияющих на исследуемый объект. По результатам поискового эксперимента устанавливается значимость факторов, из которых незначимые факторы отсеиваются.

*Решающий эксперимент* позволяет установить справедливость одной из двух или нескольких гипотез, которые могут одновременно не противоречить некоторым экспериментальным данным.

*Лабораторный эксперимент* проводится в лабораторных условиях с применением измерительных приборов, специальных моделирующих установок, стендов, оборудования и т.д.

*Натурный эксперимент* проводится в естественных условиях и на реальных объектах. В зависимости от места проведения испытаний натурные эксперименты подразделяются на *производственные* и *полевые*.

*Открытый эксперимент* проводят, например, с одним человеком или группой людей, которые перед проведением эксперимента получили информацию о цели и задачах эксперимента.

*Закрытый эксперимент* проводят, например, с одним человеком или группой людей, не знающих, что являются объектом эксперимента.

*Простой эксперимент* используется для изучения объектов, не имеющих разветвленной структуры, с небольшим количеством взаимосвязанных и взаимодействующих элементов, выполняющих простейшие функции.

*В сложном эксперименте* изучаются явления или объекты с разветвленной структурой и большим количеством взаимосвязанных и взаимодействующих элементов, выполняющих сложные функции.

*В информационном эксперименте* изучают влияние определенной информации на объект исследования.

*В вещественном эксперименте* изучают влияние различных вещественных факторов на исследуемый объект.

*В энергетическом эксперименте* изучают влияние различных видов энергии на исследуемый объект.

*Обычный (классический) эксперимент* проводится экспериментатором (познающим субъектом), который исследует определенный объект или предмет с помощью различных средств (инструментов, приборов и т.п.).

*Модельный эксперимент* проводится не на реальном объекте, а на его модели, которая может быть физической или воображаемой.

*Материальный эксперимент* предполагает проведение исследований на материальных объектах.

*Мысленный эксперимент* является одной из форм умственной деятельности человека, воспроизводящего в воображении реальный эксперимент.

*Пассивный эксперимент* проводится при отсутствии вмешательства со стороны исследователя на объект исследования.

*В активном эксперименте* на исследуемый объект воздействуют различными входными сигналами и контролируют выходящие из системы данные.

*В однофакторном эксперименте* варьируется при проведении эксперимента один фактор.

*В многофакторном эксперименте* одновременно варьируются несколько факторов.

*Технологический эксперимент* направлен на изучение технологического процесса производства готовой продукции или промежуточного продукта.

*Социометрический эксперимент* используется для исследования существующих межличностных, социально-психологических отношений в малых группах с целью их последующего изменения.

Особое значение имеет разработка методики эксперимента. Перед каждым экспериментом составляется план (программа), который включает:

- 1) цель и задачи эксперимента;
- 2) выбор варьирующих факторов;
- 3) обоснование объема эксперимента и числа опытов;
- 4) определение порядка проведения опытов и последовательности изменения факторов;
- 5) выбор шага изменения факторов, задание интервалов между будущими экспериментальными точками;
- 6) выбор средств измерений;
- 7) описание проведения эксперимента;
- 8) обоснование способов обработки и анализа результатов эксперимента.

## **4.2. Планирование эксперимента**

Планирование эксперимента относится к разделу математической статистики и используется в научных исследованиях для рациональной организации активного эксперимента с минимальными затратами средств и времени, а также определения оптимального значения искомой функции. При планировании эксперимента исследуемый объект представляется «черным ящиком» (рис. 4.2.1), на который воздействуют независимые переменные  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , получившие название входные параметры или факторы, а величины  $y_1, y_2, \dots, y_n$  называются выходными параметрами или откликами.

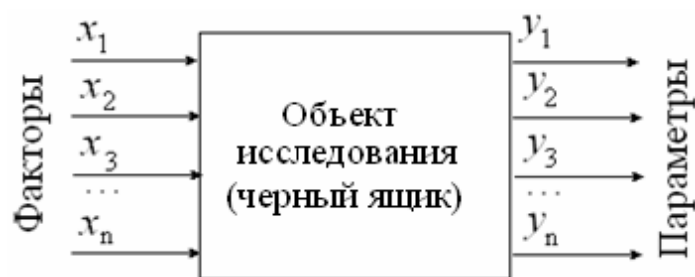


Рис. 4.2.1. Схема модели «черного ящика»

Каждый фактор  $x_i$  может принимать определенное количество значений, называемых *уровнями факторов*. Координатное пространство с координатами  $x_1, x_2, \dots, x_n$  называется *факторным пространством*, а геометрическое изображение функции отклика в факторном пространстве – *поверхностью отклика*. В общем случае математической моделью является функция отклика, которая в наиболее простом случае имеет вид:

$$y = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n). \quad (4.2.1)$$

Для получения количественной зависимости (4.2.1), называемой *уравнением регрессии*, используют *метод регрессионного анализа*.

Если считать, что каждый фактор нужно исследовать на  $p$  уровнях, то число опытов  $N$  определяется уравнением:

$$N = p^k, \quad (4.2.2)$$

где  $k$  – число независимых факторов,  $p$  – число уровней.

Несложно подсчитать число опытов, когда  $N = 3^{15} = 14348907$ . Если эксперименты 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 носит название *полного факторного эксперимента (ПФЭ)* или *план  $2^k$* . В этом случае число опытов определяется уравнением:

$$N = 2^k. \quad (4.2.3)$$

Входные параметры  $z_i$  должны находиться в диапазоне от  $z_i^{max}$  до  $z_i^{min}$ .

Вводятся понятия центр плана

$$z_i^0 = \frac{z_i^{max} + z_i^{min}}{2} \quad (4.2.4)$$

и интервал варьирования

$$\Delta z_i = \frac{z_i^{max} - z_i^{min}}{2}, \quad (4.2.5)$$

где  $z_i^{max}$  и  $z_i^{min}$  - наибольшее и наименьшее значения (верхний и нижний уровни) факторов  $z_i$ .

Для упрощения расчетов выполняют переход от натуральных значений факторов к кодированным переменным по следующей формуле:

$$x_i = \frac{z_i - z_i^0}{\Delta z_i}. \quad (4.2.6)$$

В новых кодированных переменных верхний уровень равен +1, а нижний уровень равен -1.

В качестве примера рассмотрим задачу исследования явления в зависимости от двух факторов  $z_1$  и  $z_2$ , т.е. задачу  $2^k$ , где  $k = 2$ . Предполагаем, что уравнение регрессии имеет вид:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2. \quad (4.2.7)$$

Количество необходимых опытов  $N = 2^2 = 4$ . Для удобства планирования эксперимента составим план (рис. 4.2.2) и матрицу (табл. 4.2.1) двухфакторного эксперимента.

Из матрицы видно, что первый опыт проводят при минимальных значениях факторов  $z_1$  и  $z_2$ , второй – при максимальном значении  $z_1$  и минимальном значении  $z_2$ , третий - при минимальном значении  $z_1$  и максимальном значении  $z_2$  и четвертый – при максимальных значениях  $z_1$  и  $z_2$ .

Для трехфакторного эксперимента (задача  $2^3$ ) уравнение регрессии имеет вид:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3. \quad (4.2.8)$$

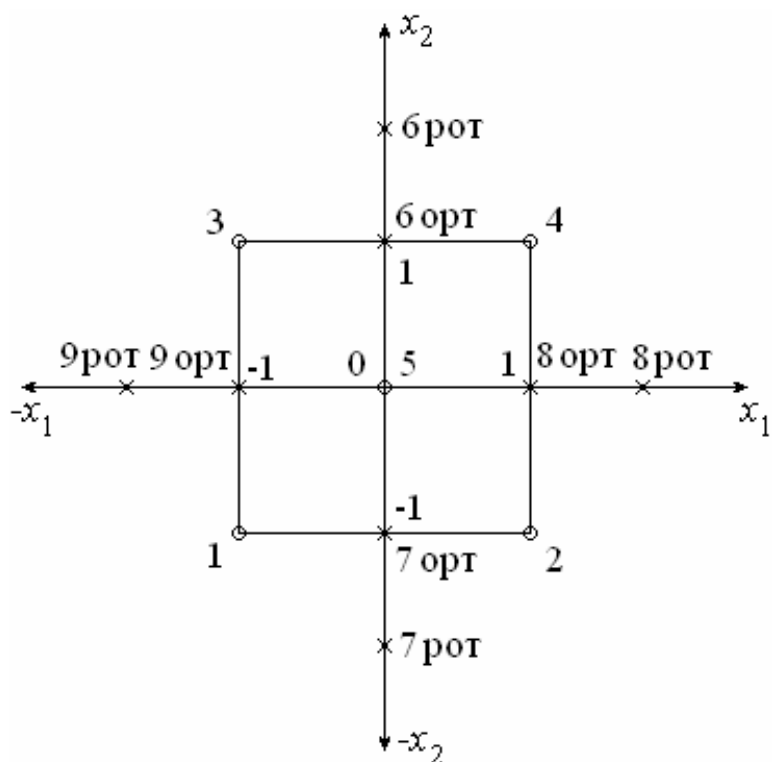


Рис. 4.2.2. План для функции  $\hat{y} = f(x_1, x_2)$

Таблица 4.2.1

Матрица планирования эксперимента  $2^2$

Номер опыта	Кодированные факторы		Функция отклика
	$x_1$	$x_2$	$y_i$
1	-1	-1	$y_1$
2	+1	-1	$y_2$
3	-1	+1	$y_3$
4	+1	+1	$y_4$

Кодированный план трехфакторного эксперимента может быть интерпретирован в виде куба (рис. 4.2.3), восемь вершин которого представляют собой восемь экспериментальных точек. Матрица трехфакторного эксперимента представлена в табл. 4.2.2.

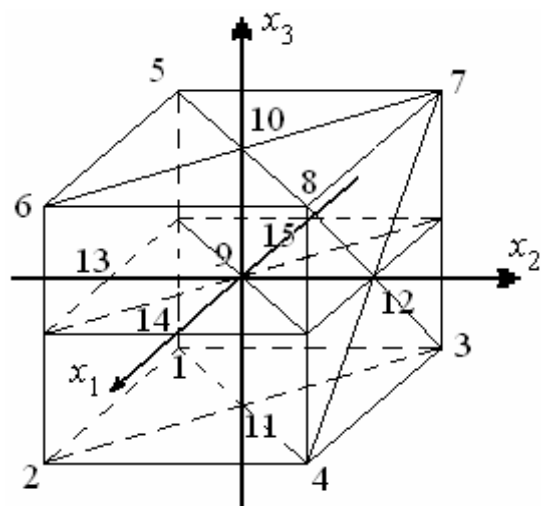


Рис. 4.2.3. План для функции  $\hat{y} = f(x_1, x_2, x_3)$

Таблица 4.2.2

Матрица планирования эксперимента  $2^3$

Номер опыта	Кодированные факторы			Функция отклика $y_i$
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	
1	-1	-1	-1	$y_1$
2	+1	-1	-1	$y_2$
3	-1	+1	-1	$y_3$
4	+1	+1	-1	$y_4$
5	-1	-1	+1	$y_5$
6	+1	-1	+1	$y_6$
7	-1	+1	+1	$y_7$
8	+1	+1	+1	$y_8$

Если в рассмотрение ввести более полное уравнение регрессии с коэффициентами взаимодействия

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{123}x_1x_2x_3, (4.2.9)$$

то для определения коэффициентов эффектов двойного взаимодействия  $b_{12}$ ,  $b_{13}$ ,  $b_{23}$  и коэффициента тройного взаимодействия  $b_{123}$  необходимо расширить матрицу (табл. 4.2.2). В этом случае используют матрицу, приведенную в табл. 4.2.3.

Таблица 4.2.3

Матрица планирования эксперимента  $2^3$  с учетом взаимодействия факторов

Номер опыта	Кодированные факторы							Функция отклика $y_i$
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_1x_2$	$x_1x_3$	$x_2x_3$	$x_1x_2x_3$	
1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	$y_1$
2	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	$y_2$
3	-1	+1	-1	+1	+1	+1	+1	$y_3$
4	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	$y_4$
5	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	$y_5$
6	+1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	$y_6$
7	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	$y_7$
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	$y_8$

Аналогично составляют полином, план и матрицу планирования для 4-х и большего количества факторов.

Матрица планирования полного факторного эксперимента в этом случае обладает следующими свойствами:

$$\sum_{j=1}^N x_{ji} = 0; \quad \sum_{j=1}^N x_{ji}^2 = N; \quad \sum_{j=1}^N x_{ji}x_{ju} = 0, \quad (4.2.10)$$

где  $N$  - число опытов в матрице планирования,  $j$  – номер опыта;  $i, u$  – номер фактора.

Свойство, выраженное уравнениями (4.2.10), называется ортогональностью, а матрица – ортогональной (прямоугольной). Это свойство обеспечивает простоту вычисления коэффициентов регрессии, которые определяют по формулам:

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j; \quad b_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_{ji}y_j; \quad b_{iu} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_{ji}x_{ju}y_j. \quad (4.2.11)$$

В качестве примера рассмотрим задачу получения  $y$  кг готового продукта, на выход которого оказывают влияние три фактора ( $k = 3$ ): температура  $t$  в диапазоне 100 – 200 °С, давление  $p$ , равное 0,2 – 0,6 МПа, и время пребывания материала в аппарате  $\tau$  в интервале 500 – 1500 с.



Число опытов из трех факторов на двух уровнях равно  $N = 2^3 = 8$ . Из условия задачи имеем по температуре верхний уровень  $z_1^{max} = 200\text{ }^{\circ}\text{C}$  и нижний уровень  $z_1^{min} = 100\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Тогда имеем  $z_1^0 = 150\text{ }^{\circ}\text{C}$  и  $\Delta z_1 = 50\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Матрица планирования представлена в табл. 4.2.4. Число строк в табл. 4.2.4 соответствует числу опытов. В столбцах приведены натуральные и кодированные значения факторов, а также значения выхода готового продукта в каждом опыте.

Таблица 4.2.4

Матрица планирования трехфакторного эксперимента

Натуральные значения факторов				Кодированные значения факторов			Функция отклика
N опыта	$z_1$	$z_2$	$z_3$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$y_i$
1	100	0,2	500	-1	-1	-1	2
2	200	0,6	500	+1	-1	-1	6
3	100	0,2	500	-1	+1	-1	4
4	200	0,6	500	+1	+1	-1	8
5	100	0,2	1500	-1	-1	+1	10
6	200	0,6	1500	+1	-1	+1	18
7	100	0,2	1500	-1	+1	+1	8
8	200	0,6	1500	+1	+1	+1	12

Пользуясь планом, приведенным в табл. 4.2.4, вычислим коэффициенты регрессии линейного уравнения (4.2.9) с помощью формул (4.2.11). Иллюстрация этих вычислений приведена на рис. 4.2.4.

Полученное таким образом уравнение линейной регрессии проверяют по условию адекватности, например, по критерию Фишера.

Число опытов  $N := 8$

Данные матрицы планирования с фиктивной переменной

$$x_1 := \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad x_2 := \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad x_3 := \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad y := \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 2 \\ 6 \\ 8 \\ 15 \\ 6 \\ 10 \end{pmatrix}$$

Вычисление коэффициентов регрессии линейного уравнения

$$M_0 := \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \\ y_7 \end{pmatrix} \quad M_1 := \begin{pmatrix} x_{10} \cdot y_0 \\ x_{11} \cdot y_1 \\ x_{12} \cdot y_2 \\ x_{13} \cdot y_3 \\ x_{14} \cdot y_4 \\ x_{15} \cdot y_5 \\ x_{16} \cdot y_6 \\ x_{17} \cdot y_7 \end{pmatrix} \quad M_2 := \begin{pmatrix} x_{20} \cdot y_0 \\ x_{21} \cdot y_1 \\ x_{22} \cdot y_2 \\ x_{23} \cdot y_3 \\ x_{24} \cdot y_4 \\ x_{25} \cdot y_5 \\ x_{26} \cdot y_6 \\ x_{27} \cdot y_7 \end{pmatrix} \quad M_3 := \begin{pmatrix} x_{30} \cdot y_0 \\ x_{31} \cdot y_1 \\ x_{32} \cdot y_2 \\ x_{33} \cdot y_3 \\ x_{34} \cdot y_4 \\ x_{35} \cdot y_5 \\ x_{36} \cdot y_6 \\ x_{37} \cdot y_7 \end{pmatrix}$$

$$b_0 := \frac{\sum_{i=0}^{N-1} M_{0,i}}{N} \quad b_1 := \frac{\sum_{i=0}^{N-1} M_{1,i}}{N} \quad b_2 := \frac{\sum_{i=0}^{N-1} M_{2,i}}{N} \quad b_3 := \frac{\sum_{i=0}^{N-1} M_{3,i}}{N}$$

$$b_0 = 6.5 \quad b_1 = 2.25 \quad b_2 = -0.5 \quad b_3 = 3.25$$

$$M_4 := \begin{pmatrix} x_{10} \cdot x_{20} \cdot y_0 \\ x_{11} \cdot x_{21} \cdot y_1 \\ x_{12} \cdot x_{22} \cdot y_2 \\ x_{13} \cdot x_{23} \cdot y_3 \\ x_{14} \cdot x_{24} \cdot y_4 \\ x_{15} \cdot x_{25} \cdot y_5 \\ x_{16} \cdot x_{26} \cdot y_6 \\ x_{17} \cdot x_{27} \cdot y_7 \end{pmatrix} \quad M_5 := \begin{pmatrix} x_{10} \cdot x_{30} \cdot y_0 \\ x_{11} \cdot x_{31} \cdot y_1 \\ x_{12} \cdot x_{32} \cdot y_2 \\ x_{13} \cdot x_{33} \cdot y_3 \\ x_{14} \cdot x_{34} \cdot y_4 \\ x_{15} \cdot x_{35} \cdot y_5 \\ x_{16} \cdot x_{36} \cdot y_6 \\ x_{17} \cdot x_{37} \cdot y_7 \end{pmatrix} \quad M_6 := \begin{pmatrix} x_{20} \cdot x_{30} \cdot y_0 \\ x_{21} \cdot x_{31} \cdot y_1 \\ x_{22} \cdot x_{32} \cdot y_2 \\ x_{23} \cdot x_{33} \cdot y_3 \\ x_{24} \cdot x_{34} \cdot y_4 \\ x_{25} \cdot x_{35} \cdot y_5 \\ x_{26} \cdot x_{36} \cdot y_6 \\ x_{27} \cdot x_{37} \cdot y_7 \end{pmatrix} \quad M_7 := \begin{pmatrix} x_{10} \cdot x_{20} \cdot x_{30} \cdot y_0 \\ x_{11} \cdot x_{21} \cdot x_{31} \cdot y_1 \\ x_{12} \cdot x_{22} \cdot x_{32} \cdot y_2 \\ x_{13} \cdot x_{23} \cdot x_{33} \cdot y_3 \\ x_{14} \cdot x_{24} \cdot x_{34} \cdot y_4 \\ x_{15} \cdot x_{25} \cdot x_{35} \cdot y_5 \\ x_{16} \cdot x_{26} \cdot x_{36} \cdot y_6 \\ x_{17} \cdot x_{27} \cdot x_{37} \cdot y_7 \end{pmatrix}$$

$$b_{12} := \frac{\sum_{i=0}^{N-1} M_{4,i}}{N} \quad b_{13} := \frac{\sum_{i=0}^{N-1} M_{5,i}}{N} \quad b_{23} := \frac{\sum_{i=0}^{N-1} M_{6,i}}{N} \quad b_{123} := \frac{\sum_{i=0}^{N-1} M_{7,i}}{N}$$

$$b_{12} = -0.25 \quad b_{13} = 0.5 \quad b_{23} = -1.25 \quad b_{123} = -0.5$$

Рис. 4.2.4. Пример вычисления коэффициентов регрессии

Если при получении уравнения регрессии можно ограничиться линейным приближением, то число опытов может быть сокращено при использовании так называемых *дробных реплик* от полного факторного эксперимента или *дробного факторного эксперимента* (ДФЭ). Описание поверхности отклика полиномами первого порядка часто оказывается недостаточным. Для достижения удовлетворительной аппроксимации часто используются полиномы второго порядка. В этом случае требуется, чтобы каждый фактор варьировался не менее чем на трех уровнях. Методы планирования эксперимента разработаны также для поиска оптимальных условий. Подробное описание данных методов можно найти в литературе [11, 12].

## Глава 5. Обработка и оформление результатов исследований

### 5.1. Типы измеряемых величин и погрешностей

При проведении экспериментальных исследований проводят обычно различные измерения. Различают *прямые и косвенные измерения*. При *прямом измерении* измеряемая величина сравнивается непосредственно со своей единицей измерения. Например, измерение линейкой линейного размера, промежутка времени при помощи секундомера и т.п. При *косвенном измерении* измеряемая величина вычисляется по результатам измерений других величин, которые связаны с измеряемой величиной определенной функциональной зависимостью. Например, определение объема тела на основании линейных размеров, определение плотности тела по измерениям его массы и объема и т.п.

Измерения могут выполняться *однократные и многократные*.

*Однократное измерение* дает единственное значение, которое принимают за окончательный результат искомой величины.

*Многократные измерения* проводят путем повторения однократных измерений одной и той же физической величины. В результате измерений получают набор данных, выборку из  $n$  значений  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , на основании которых находят среднее арифметическое значение:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i. \quad (5.1.1)$$

Измерения различных физических величин проводят с помощью различных приборов. В зависимости от закономерности появления ошибок измерения различают *случайные, систематические и грубые ошибки*.

Причины появления *случайных ошибок*, как правило, неизвестны. Предсказать и учесть их нельзя.

Источником *систематических ошибок* может быть неточность калибровки, субъективное влияние наблюдателя при снятии измерений и т.п. Эти ошибки трудно выявить, поскольку ничего не известно об их наличии.

*Грубые ошибки (промахи)* связаны с ошибками наблюдателя, неисправностями измерительной техники или неучтенными внешними воздействиями.

Количественно погрешности разделяются на *абсолютные и относительные*.

*Абсолютная погрешность*  $\Delta x$  определяется как разность между измеренным значением физической величины и истинным ее значением  $X$ :

$$\Delta x = |x - X|. \quad (5.1.2)$$

Она выражается в единицах измеряемой величины.

*Относительная погрешность*  $\delta$  определяется отношением абсолютной погрешности  $\Delta x$  к истинному значению  $X$  измеряемой величины и выражается в процентах или долях единицы:

$$\delta = \pm \frac{\Delta x}{X} 100\%. \quad (5.1.3)$$

## 5.2. Некоторые сведения из теории вероятностей

*Случайное событие* – это такое событие, которое может произойти или не произойти при проведении некоторого испытания (эксперимента).

Количественной мерой возможности возникновения случайного события является *вероятность*  $P$  этого события. За вероятность события  $A$  принимается отношение числа наступлений данного случайного события  $m$  в данной серии испытаний к общему числу испытаний  $n$  этой серии, т.е.  $P(A) = m/n$ .

Достоверному событию приписывается вероятность  $P(A) = 1$ , а недостоверному -  $P(A) = 0$ .

*Случайная величина* – это некоторая переменная величина, принимающая какие-либо значения с определенной вероятностью. Случайную величину принято обозначать большими буквами  $X, Y, \dots$ , а принимаемые ими значения – соответствующими строчными буквами  $x, y, \dots$ .

Различают *дискретную* и *непрерывную* случайные величины.

*Дискретная случайная величина* – случайная величина, которая может принимать какое-либо значение из конечного или счетного множества действительных чисел.

*Непрерывная случайная величина* – случайная величина, которая может принимать любые значения из конечного или бесконечного интервала.

Зависимость между значением случайной величины и её вероятностью называется *распределением случайной величины*.

Для описания распределений случайных величин используют два способа: *интегральный* (функция распределения  $F(x)$ ) и *дифференциальный* (плотность распределения  $f(x)$ ).

*Функция распределения вероятностей*  $F(x)$  непрерывной случайной величины определяет вероятность того, что случайная величина  $X$  принимает значение не более, чем  $x$ :

$$F(x) = P\{X < x\}. \quad (5.2.1)$$

*Плотность распределения вероятностей*  $f(x)$  – первая производная (если она существует) функции распределения:

$$f(x) = \frac{dF(x)}{dx}. \quad (5.2.2)$$

Вероятность того, что  $X$  принимает значения из некоторого интервала  $[a, b]$  равна

$$P\{a \leq X \leq b\} = F(b) - F(a) = \int_a^b f(x) dx. \quad (5.2.3)$$

Важнейшими параметрами распределения, задающими случайную величину  $X$ , являются: её *математическое ожидание*  $M_x$ , *дисперсия*  $\sigma_x^2$ , *мода*  $M_0$ , и *медиана*  $M_e$ .

*Математическим ожиданием дискретной случайной величины* называется сумма произведений значений случайной величины на вероятность этих значений:

$$M_x = \sum_{i=1}^n x_i p_i . \quad (5.2.4)$$

Для непрерывной случайной величины математическое ожидание определяется равенством

$$M_x = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx , \quad (5.2.5)$$

где  $f(x)$  – плотность распределения непрерывной случайной величины.

Геометрически математическое ожидание как непрерывной, так и дискретной случайной величины равно абсциссе центра тяжести площади, ограниченной кривой распределения и осью абсцисс (рис. 5.2.1).

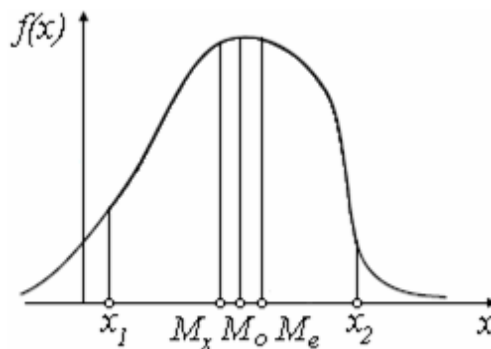


Рис. 5.2.1. Дифференциальная функция распределения вероятности  $f(x)$

Дисперсия случайной величины  $\sigma_x^2$  определяется как математическое ожидание квадрата отклонения случайной величины от её математического ожидания:

$$\sigma_x^2 = (X - M_x)^2 . \quad (5.2.6)$$

Дисперсия случайной величины характеризует меру рассеивания её значений около её математического ожидания.

Для дискретной случайной величины дисперсия определяется следующей формулой:

$$\sigma_x^2 = \sum_{i=1}^n (x_i - M_x)^2 p(x_i) . \quad (5.2.7)$$

Для непрерывной случайной величины дисперсия вычисляется по формуле:

$$\sigma_x^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - M_x)^2 p(x) dx, \quad (5.2.8)$$

если этот интеграл сходится.

Наряду с дисперсией в качестве меры рассеяния используется *среднее квадратичное отклонение случайной величины*:

$$\sigma_x = \sqrt{\sigma_x^2}. \quad (5.2.9)$$

*Модой дискретной случайной величины* называется её наиболее вероятностное значение.

*Модой непрерывной случайной величины  $M_o$*  называется такое значение этой величины, плотность вероятности которого максимальна.

Геометрически мода является абсциссой той точки кривой распределения, ордината которой максимальна (рис. 5.2.1).

*Медиана  $M_e$*  – значение случайной величины, для которой функция распределения принимает значение  $1/2$ , или имеет место скачек со значения меньшего чем  $1/2$ , до значения, больше чем  $1/2$ .

При измерении физических величин наиболее часто встречается нормальный закон распределения непрерывного типа (закон распределения Гаусса) с плотностью

$$f(x) = \frac{1}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-M_x)^2}{2\sigma_x^2}}. \quad (5.2.10)$$

Иллюстрация плотности вероятности нормального распределения в системе Mathcad приведена на рис. 5.2.2. Нормальные функции распределения показаны на рис. 5.2.3. В Mathcad встроены следующие функции для описания нормального распределения вероятностей:

- $\text{dnorm}(x, \mu, \sigma)$  – плотность вероятности нормального распределения;
- $\text{pnorm}(x, \mu, \sigma)$  – функция нормального распределения;
- $\text{snorm}(x)$  – функция нормального распределения для  $\mu = 0, \sigma = 1$ ;
- $\text{qnorm}(x, \mu, \sigma)$  – обратная функция нормального распределения;



○  $\text{rnorm}(M, \mu, \sigma)$  – вектор  $M$  независимых случайных чисел, каждое из которых имеет нормальное распределение.

Здесь  $x$  – значение случайной величины,  $P$  – значение вероятности,  $\mu$  – математическое ожидание,  $\sigma$  – среднеквадратичное отклонение.

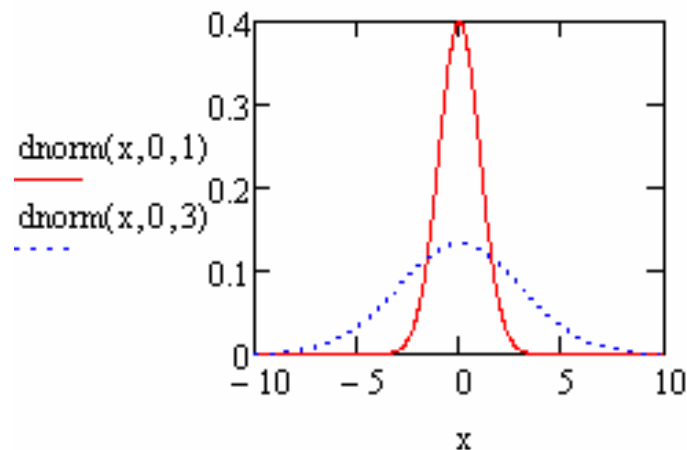


Рис. 5.2.2. Плотность вероятности нормальных распределений

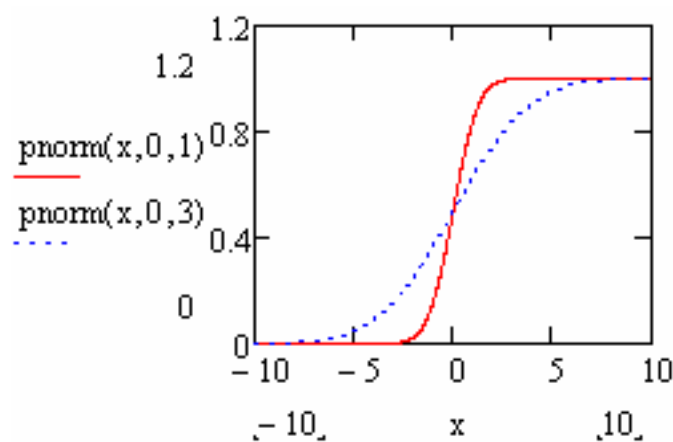


Рис. 5.2.3. Нормальные функции распределения

Известны и другие теоретические законы распределения, например, биномиальный и экспоненциальный законы, распределение Пирсона, Стьюдента и др. Выбор того или иного закона распределения производится исходя из свойств этих теоретических распределений. Найденные из опытных данных моменты изучаемого процесса подставляются в выбранный закон

распределения, и оценивается совпадение опытного и теоретического распределений.

### 5.3. Нахождение распределения случайных величин на основе экспериментальных данных

Рассмотрим сначала важнейшие понятия математической статистики. Математическая статистика относится к одному из разделов математики и позволяет по результатам конечного числа экспериментов делать более-менее точные выводы о распределениях случайных величин, наблюдаемых в этих экспериментах.

*Генеральная совокупность* - это совокупность всех мыслимых значений, которые может принять случайная величина при данных условиях наблюдения.

*Выборочная совокупность* или *выборка* - это совокупность ограниченного числа значений случайной величины, отобранных из генеральной совокупности.

Выборка является *репрезентативной*, если она достаточно точно представляет количественные соотношения генеральной совокупности.

*Математическое ожидание* случайной величины – это наиболее вероятное её значение.

Все оценки, полученные путем обработки выборочной совокупности, называют выборочными оценками.

Различают *генеральные и выборочные характеристики* случайной величины.

*Среднее значение* для генеральной совокупности определяется по формуле:

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_N}{N}, \quad (5.3.1)$$

где  $N$  – объем генеральной совокупности.

Выборочной оценкой математического ожидания случайной величины является её среднее значение. *Выборочное среднее* определяется по формуле:

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_i}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i. \quad (5.3.2)$$

Оценка среднего значения занимает центральное место при выборе из конечной совокупности, поскольку она служит основой количественного описания изменчивости признака внутри совокупности.

*Генеральной дисперсией* случайной величины  $\sigma^2$  называется математическое ожидание квадратов отклонений случайной величины от своего математического ожидания.

*Выборочная дисперсия* равна:

$$S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2. \quad (5.3.3)$$

Экспериментально полученные значения случайных величин удобно представить в виде таблиц и гистограмм распределения.

Графической формой представления эмпирического распределения случайных величин является гистограмма. Построим гистограмму многократных прямых измерений случайной величины в диапазоне от наименьшего значения  $x_{min}$  до наибольшего значения  $x_{max}$  с интервалом  $\Delta x$ , одинаковым для всего диапазона (рис. 5.3.1). Эти значения откладываем по оси абсцисс. По оси ординат откладываем отношение  $\Delta m / (n \cdot \Delta x)$ , где  $n$  – общее число всех опытных данных,  $\Delta m$  – количество результатов, попавших в интервал  $[x, x + \Delta x]$ . Она имеет смысл плотности вероятности. Отношение  $\Delta m / n$  – относительная частота. Она имеет смысл вероятности появления случайной величины в интервал  $\Delta x$ .

Если число всех измерений стремится к бесконечности ( $n \rightarrow \infty$ ), то весь диапазон измерения величины  $x$  можно разбить на бесконечно малые интервалы ( $\Delta x \rightarrow 0$ ). В этом случае гистограмма превращается в плавную линию – график функции

$$f(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta m}{n \cdot \Delta x} = \frac{dm}{m \cdot dx}. \quad (5.3.4)$$

Такую функцию называют *плотностью вероятности, распределением вероятностей* или просто *распределением* (рис. 5.3.2).

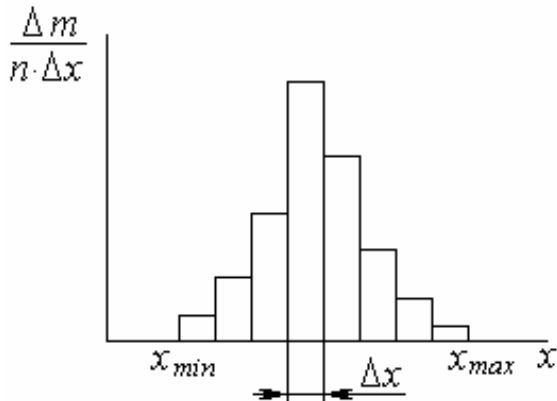


Рис. 5.3.1. Гистограмма распределения

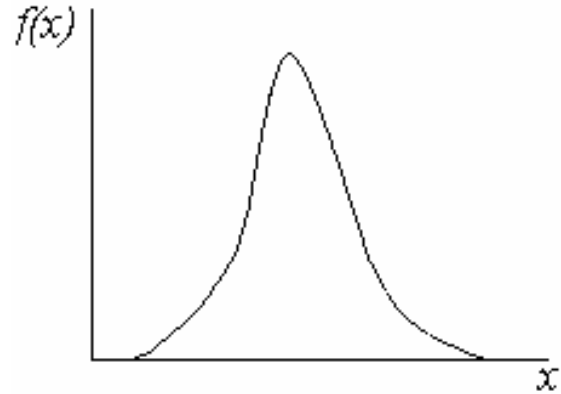


Рис. 5.3.2. Кривая распределения

Распределение выступает в роли исчерпывающей характеристики случайной величины. Из интегрального исчисления известно, что площадь  $S$  под кривой распределения  $f(x)$  выражается интегралом

$$S = \int_{x_{min}}^{x_{max}} f(x) dx. \quad (5.3.5)$$

С другой стороны, эта площадь равна единице, т.е.

$$\int_{x_{min}}^{x_{max}} f(x) dx = 1. \quad (5.3.5)$$

Равенство (5.3.5) является основным условием, которому должна удовлетворять кривая распределения.

Достоверность математической модели изучаемого процесса проверяется сравнением теоретического распределения с экспериментальными данными.

## 5.4. Виды статистического оценивания параметров

Статистическое оценивание состоит в определении неизвестных распределений вероятностей или их характеристик по результатам наблюдений. Очень часто предполагают, что функция распределения  $F(x)$  принадлежит к

нормальному распределению, у которого параметры неизвестны. Наилучшая оценка должна обладать наименьшей возможной дисперсией.

Теория статистического оценивания рассматривает два основных вида оценок: *точечные* и *интервальные*.

*Точечной оценкой* называют какую-либо функцию от результатов наблюдений, которая в данных условиях наиболее близка к истинному значению параметра  $\theta$  генеральной совокупности.

Сравнивая различные оценки, необходимо выбрать такую, которая отвечала требованиям *несмещенности*, *состоятельности* и *эффективности*.

Точечная оценка  $\theta_n^*$  будет удовлетворять условию *несмещенности*, если её математическое ожидание равнялось оценочному параметру

$$M\theta_n^* = \theta. \quad (5.4.1)$$

Точечная оценка обладает свойством *состоятельности*, если вероятность отклонений  $\theta_n^*$  от истинного значения параметра  $\theta$  будет стремиться к нулю при бесконечно большом увеличении числа опытов ( $n \rightarrow \infty$ ). Также справедливо:

- 1) смещение оценки  $B_n = M\theta_n^* - \theta$  равно нулю, если  $n \rightarrow \infty$ ;
- 2) дисперсия оценки  $D\theta_n^*$  стремится к нулю  $D\theta_n^* \rightarrow 0$  при  $n \rightarrow \infty$ .

Оценка будет *эффективной* среди возможных вариантов, если при заданном количестве опытов она обладает наименьшей дисперсией.

Существует ряд стандартных методов получения точечных оценок. Пирсоном К. предложен *метод моментов*, который предполагает для нахождения оценки неизвестного параметра использовать выборочные моменты вместо истинных. При этом выбирается столько эмпирических моментов, сколько требуется оценить неизвестных параметров распределения. В результате получается система уравнений, выражающая зависимость параметров от моментов. Решения этой системы уравнений дают оценки параметров распределения генеральной совокупности. Метод моментов целесообразно применять для оценки не более чем четырех параметров,

используя моменты младших порядков, поскольку с увеличением порядка момента резко возрастает погрешность.

Фишером Р. предложен *метод максимального правдоподобия*. Пусть имеем некоторые результаты наблюдений  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , которые являются непрерывными случайными величинами с одним и тем же распределением вероятностей  $f(x_n; \theta)$ , зависящим от одного неизвестного параметра  $\theta$ . Суть метода максимального правдоподобия состоит в том, что в качестве оценок параметров выбираются те значения параметров, при которых данные результаты наблюдения “наиболее вероятны”. Для придания точного смысла принципу “наибольшей вероятности” вводят функцию правдоподобия:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n; \theta) = p(x_1; \theta) \cdot p(x_2; \theta) \dots p(x_n; \theta), \quad (5.4.2)$$

где  $x_1, x_2, \dots, x_n$  – значения случайной величины;  $\theta$  – значения параметра;  $f(x; \theta)$  – плотность вероятности случайной величины  $x_n$ .

Оценкой максимального правдоподобия параметра  $\theta$  будет такое значение  $\theta = \hat{\theta}(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , при котором функция правдоподобия достигает наибольшего возможного значения. Так как точка максимума для  $\ln f$  та же, что и для  $f$ , то для нахождения оценок максимального правдоподобия следует решать уравнение правдоподобия:

$$\frac{d \ln f(x_1, x_2, \dots, x_n; \theta)}{d\theta} = 0. \quad (5.4.3)$$

Оценка параметров по вероятности стремится к истинному значению, когда объем данных результатов наблюдений возрастает. Условия самостоятельности и регулярности обеспечивают асимптотическая нормальность и асимптотическая эффективность оценок параметров.

Описание других методов решения задачи точечной оценки параметров можно найти [13].

При выборках малого объема, когда точечная оценка может существенно отличаться от оцениваемого параметра, могут быть допущены серьезные ошибки. В этом случае статистическое оценивание проводят с помощью *интервального оценивания*.

*Интервальное оценивание* основано на применении доверительного интервала, границами которого служат числовые значения  $\theta_1^*$  и  $\theta_n^*$ , определяемые по результатам выборки, и который с высокой вероятностью «накрывает» значение оценочного параметра.

Предположим, что для оценки параметра  $\theta$  удалось найти две функции  $\theta_1^*(x_1, x_2, \dots, x_n)$  и  $\theta_2^*(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , такие, что при всех  $x_1, x_2, \dots, x_n$  и при любых значениях  $\theta$  выполняется условие:

$$\theta_1^* < \theta_2^* ;$$

$$P\{\theta_1^*(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq \theta \leq \theta_2^*(x_1, x_2, \dots, x_n)\} = 1 - \alpha . \quad (5.4.4)$$

Выражение (5.4.4) означает, что действительное значение параметра  $\theta$  находится в интервале значений  $\{\theta_1^*, \theta_2^*\}$  с вероятностью  $P$ . Интервал  $\{\theta_1^*, \theta_2^*\}$  называется доверительным интервалом для неизвестного параметра  $\theta$  с достоверным уровнем (коэффициент доверия)  $\alpha$ -1.

Рассмотрим построение доверительного интервала с использованием статистики

$$t = \frac{\bar{x} - \mu}{S} \sqrt{n} , \quad (5.4.5)$$

где  $S = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$  - среднеквадратичное отклонение или стандартное отклонение,  $\mu$  – математическое ожидание случайной величины.

Данная статистика имеет распределение Стьюдента или  $t$ -распределение с параметрами  $k = n - 1$  (число степеней свободы). Распределение Стьюдента довольно близко к нормальному и практически совпадает с ним при  $n > 30$ . Если среднее арифметическое значение  $\bar{x}$  и выборочное среднеквадратичное отклонение  $S$  определены по результатам выборки объемом  $n$  из генеральной совокупности  $X$ , то по таблицам  $t$ -распределения для  $n - 1$  степеней свободы находим значение  $t_\alpha$ , для которого справедливо равенство:

$$P\left\{-t_\alpha \leq \frac{\bar{x} - \mu}{S} \sqrt{n} \leq t_\alpha\right\} = 1 - \alpha . \quad (5.4.6)$$

После преобразования неравенства (5.4.6) получим:

$$P\left\{\bar{x} - \frac{t_{\alpha}S}{\sqrt{n}} \leq \mu \leq \bar{x} + \frac{t_{\alpha}S}{\sqrt{n}}\right\} = 1 - \alpha. \quad (5.4.7)$$

Интервал между  $\bar{x} - \frac{t_{\alpha}S}{\sqrt{n}}$  и  $\bar{x} + \frac{t_{\alpha}S}{\sqrt{n}}$  является искомым доверительным интервалом для параметра  $\mu$ .

## 5.5. Статистическая проверка гипотез

На основании известной выборки можно выдвинуть несколько взаимоисключающих гипотез о теоретическом распределении, одну из которых следует предпочесть остальным. Проверка статистических гипотез является одной из важных задач математической статистики.

*Статистическая гипотеза* – это предположительное суждение о вероятностных закономерностях, которым подчиняется изучаемое случайное явление. Как правило, речь идет о виде статистического распределения или о величине параметров распределения, вид которого известен.

Обычно рассматривают две гипотезы: 1) нулевую (основную) гипотезу  $H_0$  – гипотеза об отсутствии различия между параметрами; 2) конкурирующую (альтернативную) гипотезу  $H_1$  – гипотеза о значимости различий.

Гипотезы бывают *простые* и *сложные*. *Простая гипотеза* содержит только одно предположение. *Сложная гипотеза* содержит несколько простых гипотез.

При проверке статистических гипотез возможны ошибки двух родов. *Ошибка первого рода* состоит в том, что будет отвергнута правильная гипотеза. *Ошибка второго рода* состоит в том, что будет принята неправильная гипотеза.

Процедура принятия или отклонения статистической гипотезы в общем случае сводится к следующему:

1) вычисление различных статистик и построение доверительных интервалов на основании результатов наблюдений;



2) проверка выдвигаемых статистических гипотез. Если альтернативную гипотезу удалось отвергнуть, то имеются все основания для принятия основной гипотезы. Если не удалось отклонить ни основную, ни альтернативную гипотезы, делается вывод о необходимости проведения дополнительных статистических исследований.

Задача выбора какой-либо гипотезы (нулевой или альтернативной) решается посредством вычисления определенного статистического критерия. Затем находят вероятность, соответствующую найденному значению и числу степеней свободы. Для этого используют готовые программы на ЭВМ, например, в среде Mathcad, или таблицы, приведенные в специальной литературе [13, 14]. В последнем случае обычно найденное значение критерия сравнивают с табличным, соответствующим выбранному уровню значимости. Если расчетный критерий больше табличного, то гипотезу отвергают.

Рассмотрим ряд критериев, используемых при выполнении научных исследований.

*Критерий Стьюдента* – статистический критерий, основанный на статистике (5.4.5). Плотность распределения случайной величины (или  $t$  – распределение) с  $k$  степенями свободы описывается функцией (рис. 5.5.1):

$$f_t(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi k}} \frac{\Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{k}{2}\right)} \left(1 + \frac{x^2}{k}\right)^{-\frac{k+1}{2}}, \quad (-\infty < x < +\infty). \quad (5.5.1)$$

где  $\Gamma$  – гамма-функция Эйлера.

На рис. 5.5.1 приведена для сравнения кривая плотности стандартного нормального распределения. Кривая  $t$ -распределения, как и стандартная нормальная кривая, симметрична относительно оси ординат, но по сравнению с нормальной более пологая. Следует отметить, что график *плотности стандартного нормального распределения* мало отличается от графика плотности распределения Стьюдента с большим числом степеней свободы, например, при  $k = 50$ . Требование о том, чтобы исходные данные имели нормальное распределение, является необходимым.

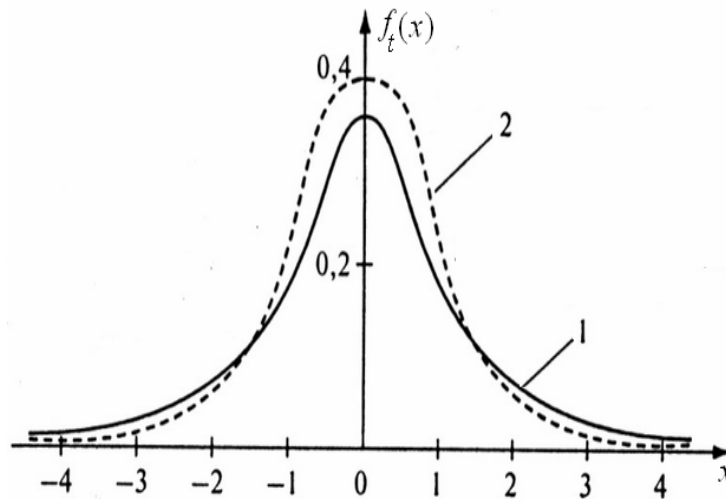


Рис. 5.5.1. Плотность распределения Стьюдента при  $k = 3$  (1) по сравнению с плотностью стандартного нормального распределения (2)

Рассмотрим  $t$ -критерий для одной выборки, который позволяет проверить гипотезу о равенстве выборочного среднего некоторому заданному числу. Наблюдаемое среднее  $\bar{x}$  (5.3.2) сравниваем с ожидаемым средним выборки  $\mu$ , например, с теоретическим средним. Для нулевой гипотезы  $H_0$  имеем  $\bar{x} = \mu$ , а для альтернативной гипотезы  $H_1$  примем  $\bar{x} \neq \mu$ . В статистике (5.4.5) находим выборочное стандартное отклонение  $S$ . Затем вычисляют значение  $t$ , которое затем проверяют на предмет попадания в критическую область. При заданном уровне значимости  $\alpha$  гипотеза принимается, если

$$\left| \frac{\bar{x} - \mu}{S} \sqrt{n} \right| \leq t_{\alpha}, \quad (5.5.2)$$

где  $t_{\alpha}$  – критическое значение, которое находится с помощью таблиц распределения Стьюдента [13, 14] по уровню значимости  $\alpha$  и числу степеней свободы  $k$ .

Для проверки гипотез применяются также двухвыборочные  $t$ -критерии для независимых и зависимых выборок [13, 14].

Оценку соответствия теоретических выводов экспериментальным данным проводят с помощью *критерия Фишера*:

$$F = \frac{S_{ad}^2}{S_{воспр}^2}, \quad (5.5.3)$$

где  $S_{ad}^2, S_{воспр}^2$  – соответственно дисперсия адекватности и дисперсия воспроизводимости, определяемые по формулам:

$$S_{ad}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_i)^2}{n-p}, \quad (5.5.4)$$

$$S_{воспр}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (x_{i,j} - \bar{x}_{icp})^2}{n(m-p)}, \quad (5.5.5)$$

где  $n$  – объем выборки;  $m$  – количество параллельных опытов;  $x_i, \bar{x}_i$  – экспериментальные и расчетные данные, соответственно;  $x_{icp}$  – среднее значение из результатов параллельных опытов,  $x_{icp} = \sum_{j=1}^m x_{i,j} / m$ ;  $(n - p)$  – число степеней свободы для дисперсии  $S_{ad}^2$ ;  $n(m - p)$  – число степеней свободы для дисперсии  $S_{воспр}^2$ ;  $p$  – число значимых коэффициентов.

В случае проведения отдельной серии из  $m$  повторных экспериментов число степеней свободы дисперсии воспроизводимости равно  $m - 1$ .

Отношение выборочных дисперсий  $S_{ad}^2$  (5.5.4) и  $S_{воспр}^2$  (5.5.5) сравнивается с табличным значением критерия Фишера  $F^{табл}$  для заданного уровня значимости. Если  $F < F^{табл}$ , то принимается, что рассматриваемая модель адекватно описывает реальный процесс. В противном случае модель отвергается.

На рис. 5.5.2 приведен пример установления адекватности расчетной кривой распределения средних размеров частиц экспериментальным данным по критерию Фишера. В табл. 5.5.1 приведены экспериментальные данные ситового анализа.

Для каждой фракции находили средний размер частиц материала по формуле:

$$d_{cp} = \frac{d_{max} + d_{min}}{2}. \quad (5.5.6)$$

Соответствующее табличное значение критерия Фишера для степеней свободы 9 и 3 и уровня значимости  $\alpha = 0,01$  составляет  $F_{0,01}^{табл}(9,3) = 6,99$ . Так как  $F < F_{0,01}^{табл}(9,3)$ , то расчетная кривая распределения адекватна эксперименту.

Таблица 5.5.1

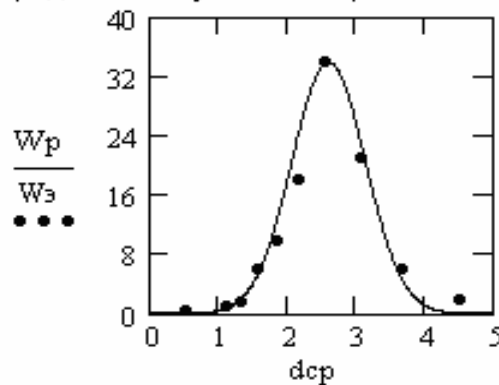
Гранулометрический состав сыпучего материала

Фракция	0-1	1-1,2	1,2-1,4	1,4-1,7	1,7-2	2-2,3	2,3-2,8	2,8-3,3	3,4-4	4-5
$W, \%$	0,5	1	1,5	6	10	18	34	21	6	2

Объем выборки				$i := 10$			
Число значимых коэффициентов				$p := 1$			
Объем выборки дополнительного эксперимента				$m := 4$			
Экспериментальные $W_{\Sigma}$ и расчетные $W_p$ данные, данные дополнительного эксперимента $W_{\Sigma d}$ , %							
$d_{cp} :=$	$\begin{pmatrix} 0.5 \\ 1.1 \\ 1.3 \\ 1.55 \\ 1.85 \\ 2.15 \\ 2.55 \\ 3.05 \\ 3.65 \\ 4.5 \end{pmatrix}$	$W_{\Sigma} :=$	$\begin{pmatrix} 0.5 \\ 1 \\ 1.5 \\ 6 \\ 10 \\ 18 \\ 34 \\ 21 \\ 6 \\ 2 \end{pmatrix}$	$W_p :=$	$\begin{pmatrix} 0.02 \\ 0.7 \\ 1.9 \\ 5.1 \\ 13 \\ 24 \\ 34 \\ 23 \\ 4.8 \\ 0.06 \end{pmatrix}$	$W_{\Sigma d} :=$	$\begin{pmatrix} 10 \\ 14 \\ 13 \\ 12 \end{pmatrix}$

Рис. 5.5.2. Пример установления адекватности математической модели эксперименту по критерию Фишера

Кривая распределения кусков материала по среднему размеру



— - расчетная кривая; ••• - экспериментальные данные

Дисперсия адекватности

$$SS_{ад} := \frac{\sum_{i=0}^{i-1} (W_{э_i} - W_{p_i})^2}{i - p} \quad SS_{ад} = 6.166$$

Среднее значение размера кусков материала

$$W_{ср} := \frac{\sum_{m=0}^{m-1} W_{эд_m}}{m} \quad W_{ср} = 12.25$$

Дисперсия воспроизводимости

$$SS_{воспр} := \frac{\sum_{m=0}^{m-1} (W_{эд_m} - W_{ср})^2}{m - 1} \quad SS_{воспр} = 2.917$$

Критерий Фишера

$$F_{\text{критерий}} := \frac{SS_{ад}}{SS_{воспр}} \quad F_{\text{критерий}} = 2.114$$

Среднее значение размера кусков материала

$$W1_{ср} := \frac{\sum_{i=0}^{i-1} W_{э_i}}{i} \quad W1_{ср} = 10$$

Дисперсии относительно среднего

$$SS_{ср} := \frac{\sum_{i=0}^{i-1} (W_{э_i} - W1_{ср})^2}{i - 1} \quad SS_{ср} = 122.278$$

Критерий Фишера

$$F_{\text{критерий}} := \frac{SS_{ср}}{SS_{ад}} \quad F_{\text{критерий}} = 19.831$$

Проверка гипотезы о принадлежности нескольких дисперсий к одной генеральной совокупности осуществляется с помощью *критерия Кохрена* ( $G$  – критерия). Рассматриваемые выборки должны быть одинакового объема. Одна из дисперсий имеет неожиданно большое значение и требуется проверить однородность этой дисперсии со всеми остальными. Расчетное значение критерия Кохрена рассчитывается по формуле:

$$G^{расч} = \frac{S_{max}^2}{\sum_{i=1}^n S_i^2}, \quad (5.5.7)$$

где  $S_{max}^2$  - максимальная из сравниваемых выборочных дисперсий.

Расчетное значение критерия  $G^{расч}$  сравнивается со значением  $G$ -критерия ( $G^{табл}$ ), взятого из таблицы в зависимости от уровня значимости, степеней свободы и числа опытов. Если  $G^{расч} > G^{табл}$ , то ряд дисперсий неоднороден. Такая ситуация может возникнуть при наличии в экспериментальных данных грубых ошибок или промахов. В таком случае экспериментальные данные следует тщательно проанализировать или повторить эксперимент.

## 5.6. Метод наименьших квадратов

Пусть в результате наблюдений при нескольких значениях  $x_1, x_2, \dots, x_n$  измерены средние значения величин  $y_1, y_2, \dots, y_n$  с незначительной погрешностью. Например, это может быть изменение количества вещества в зависимости от температуры среды. Обычно эти данные заносят в таблицу (табл. 5.6.1) или представляют точками на графике (рис. 5.6.1).

Таблица 5.6.1

Изменение параметра  $y$  в зависимости от  $x$

$x$	$x_1$	$x_2$	...	$x_n$
$y$	$y_1$	$y_2$	...	$y_n$

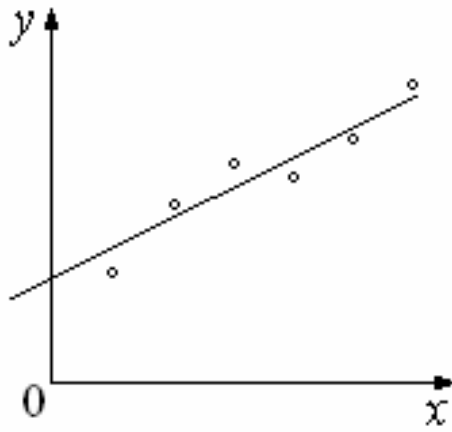


Рис. 5.6.1. Зависимость  $y = f(x)$

Известно, что между величинами  $y$  и  $x$  существует линейная зависимость вида:

$$y = ax + b, \quad (5.6.1)$$

где  $a$  и  $b$  – постоянные.

Необходимо определить параметры  $a$  и  $b$  уравнения прямой (5.6.1), которая наилучшим образом проходила бы через экспериментальные точки.

Каждая экспериментальная точка будет иметь определенное отклонение  $\varepsilon$  от искомой прямой, т.е.

$$b + ax_1 - y_1 = \varepsilon_1, \quad (5.6.2)$$

$$b + ax_2 - y_2 = \varepsilon_2, \quad (5.6.3)$$

.....

$$b + ax_n - y_n = \varepsilon_n, \quad (5.6.4)$$

где  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$  – отклонения экспериментальных точек от искомой прямой.

В соответствии с методом наименьших квадратов подбираются значения параметров  $a$  и  $b$  таким образом, чтобы сумма квадратов отклонения  $\varepsilon_i$  была наименьшей:

$$\begin{aligned} S = \varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \dots + \varepsilon_n^2 &= (b + ax_1 - y_1)^2 + (b + ax_2 - y_2)^2 + \dots + (b + ax_n - y_n)^2 = \\ &= \sum_{i=1}^n (b + ax_i - y_i)^2 \rightarrow \min. \end{aligned} \quad (5.6.5)$$

Отсюда произошло и название метода – *метод наименьших квадратов*.

Чтобы найти значения параметров  $a$  и  $b$ , при которых правая часть минимизируется, используем необходимое условие экстремума функции нескольких переменных. Возьмем частные производные по  $a$  и  $b$ , приравняем их к нулю, составим систему уравнений и решим ее:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial a} &= 0, \\ \frac{\partial S}{\partial b} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (5.6.6)$$

Вычислим эти частные производные

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial a} &= 2(b + ax_1 - y_1)x_1 + 2(b + ax_2 - y_2)x_2 + \dots + 2(b + ax_n - y_n)x_n, \\ \frac{\partial S}{\partial b} &= 2(b + ax_1 - y_1) + 2(b + ax_2 - y_2) + \dots + 2(b + ax_n - y_n). \end{aligned} \quad (5.6.7)$$

Сокращая на 2, запишем систему двух линейных уравнений с двумя неизвестными

$$\left. \begin{aligned} (b + ax_1 - y_1)x_1 + (b + ax_2 - y_2)x_2 + \dots + (b + ax_n - y_n)x_n &= 0, \\ (b + ax_1 - y_1) + (b + ax_2 - y_2) + \dots + (b + ax_n - y_n) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (5.6.8)$$

Раскроем скобки и после соответствующих преобразований получаем:

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^n y_i &= na + b \sum_{i=1}^n x_i, \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i &= a \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n x_i^2. \end{aligned} \right\} \quad (5.6.9)$$

В результате решения системы уравнений (5.6.9) находим искомые значения  $a$  и  $b$ .

Для параболы второй степени  $y = a + bx + cx^2$  система уравнений имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^n y_i &= na + b \sum_{i=1}^n x_i + c \sum_{i=1}^n x_i^2, \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i &= a \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n x_i^2 + c \sum_{i=1}^n x_i^3, \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i &= a \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i^3 + c \sum_{i=1}^n x_i^4. \end{aligned} \right\} \quad (5.6.10)$$



Для параболы третьей степени  $y = a + bx + cx^2 + dx^3$  система уравнений имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^n y_i &= na + b \sum_{i=1}^n x_i + c \sum_{i=1}^n x_i^2 + d \sum_{i=1}^n x_i^3, \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i &= a \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n x_i^2 + c \sum_{i=1}^n x_i^3 + d \sum_{i=1}^n x_i^4, \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i &= a \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i^3 + c \sum_{i=1}^n x_i^4 + d \sum_{i=1}^n x_i^5, \\ \sum_{i=1}^n x_i^3 y_i &= a \sum_{i=1}^n x_i^3 + b \sum_{i=1}^n x_i^4 + c \sum_{i=1}^n x_i^5 + d \sum_{i=1}^n x_i^6. \end{aligned} \right\} \quad (5.6.11)$$

Рассмотрим несколько примеров нахождения параметров математических моделей. Ряд примеров проиллюстрируем с помощью системы Mathcad.

По известным экспериментальным данным найдем константу изотермы Генри в уравнении линейной равновесной зависимости:

$$\bar{C} = EC, \quad (5.6.12)$$

где  $C$  – равновесная концентрация раствора,  $\bar{C}$  – количество поглощенного вещества адсорбентом,  $E$  – константа Генри.

На рис. 5.6.2 показан пример проведения линейной регрессии с помощью встроенной в систему Mathcad функции  $\text{slope}(VX, VY)$ .

В случае, когда функционально связанные величины описываются нелинейным уравнением, равновесная зависимость предварительно преобразовывается заменой переменных к линейной. В качестве примера рассмотрим уравнение нелинейной изотермы Фрейндлиха:

$$\bar{C} = kC^\alpha, \quad (5.5.13)$$

где  $k$  и  $\alpha$  – константы изотермы Фрейндлиха.

Логарифмируя последнее равенство, получаем

$$\lg \bar{C} = \lg k + \alpha \lg C. \quad (5.6.14)$$

Полагая  $\lg \bar{C} = \bar{C}', \lg C = C', \lg k = m, \alpha = b$ ,

имеем

$$\bar{C}' = m + bC'. \quad (5.6.15)$$

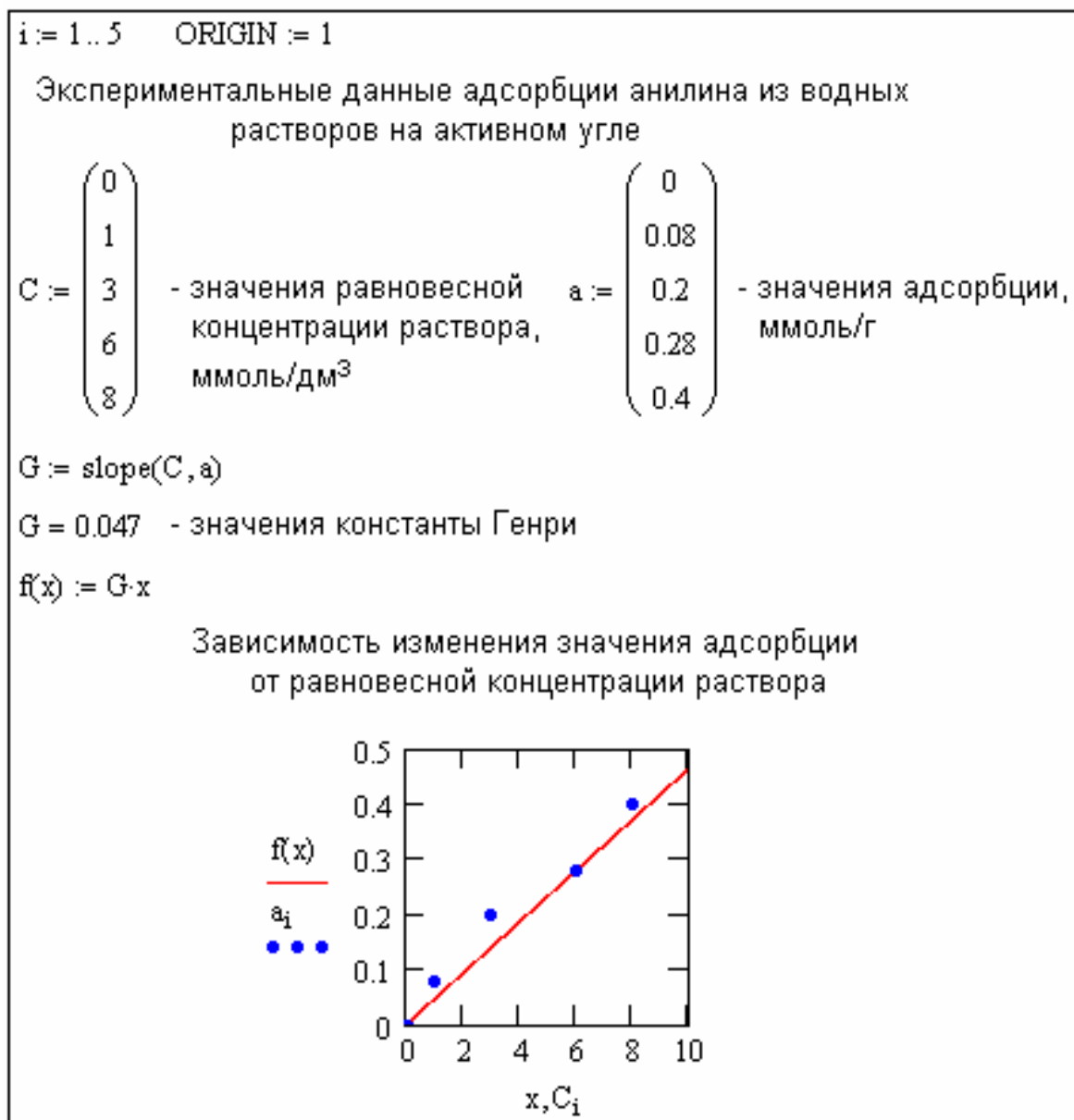


Рис. 5.6.2. Пример вычисления константы Генри

Графиком линейного уравнения (5.6.15) служит прямая, тангенс угла наклона которой будет равен  $b$ , а точка пересечения прямой с осью ординат будет соответствовать параметру  $m$ .

На рис. 5.6.3 показан пример проведения линейной регрессии для данных равновесия в ионообменной системе раствор сульфата меди – катионит КУ-2-8(Н).

ORIGIN := 1

$$C := \begin{pmatrix} 0 \\ 0.02 \\ 0.04 \\ 0.06 \\ 0.08 \\ 0.1 \end{pmatrix} \quad C_T := \begin{pmatrix} 2 \\ 2.4 \\ 2.7 \\ 2.9 \\ 3.3 \\ 3.9 \end{pmatrix}$$

$$b := \text{slope}(C, C_T) \quad m := \text{intercept}(C, C_T)$$

$$i := 1..6$$

$$f(x) := m + b \cdot x$$

$$b = 17.714 \quad m = 1.981$$

График функции регрессии и исходных точек

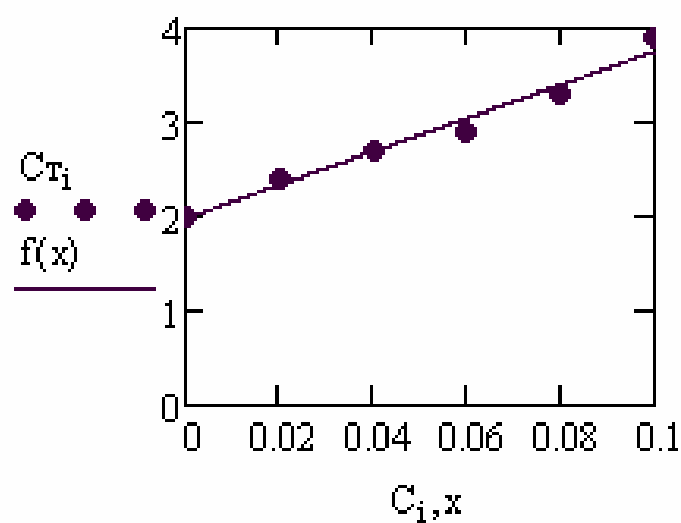


Рис. 5.6.3. Пример линейной регрессии

## **Глава 6. Оформление результатов научных исследований и их внедрение в производство**

### **6.1. Общие требования к оформлению результатов научных исследований**

Результаты научных исследований представляются в виде отчетов, статей, тезисов, докладов, изобретений, монографий, диссертаций и других материалов. Требования к отчетам научно-исследовательской работы изложены в ГОСТ 7.32-2001 «Отчет о научно-исследовательской работе». При написании статей и тезисов авторы руководствуются правилами, приведенными в журналах и материалах конференций. Подача заявок на изобретение проводится в соответствии с нормативным документом «Административный регламент исполнения Федеральной службой по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам государственной функции по организации приема заявок на изобретение и их рассмотрения, экспертизы и выдачи в установленном порядке патентов Российской Федерации на изобретение», утвержденным приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 29 октября 2008 г. № 327. Общие требования к кандидатским и докторским диссертациям и авторефератам установлены ГОСТ Р 7.0.11-2011 «Диссертация и автореферат диссертации. Структура и правила оформления». Библиографические ссылки оформляют в соответствии с требованиями ГОСТ Р 7.05-08 «Библиографическая ссылка. Общие требования и правила составления».

### **6.2. Требования к оформлению магистерской диссертации**

Магистерская диссертация представляет собой самостоятельную и логически завершенную выпускную квалификационную работу. Магистр по

направлению подготовки 15.04.02 «Технологические машины и оборудование» готовится к следующим видам профессиональной деятельности:

- производственно-технологическая;
- организационно-управленческая;
- научно-исследовательская и педагогическая;
- проектно-конструкторская.

Научно-исследовательская магистерская диссертация имеет следующую структуру:

- введение с постановкой цели и задач исследования;
- литературный обзор, отражающий современное состояние проблемы;
- теоретическая часть;
- экспериментальная часть;
- обсуждение результатов исследования и проверка теоретических выводов;
- выводы;
- список использованной литературы.

Производственно-технологическая магистерская диссертация имеет следующую структуру:

- введение с постановкой цели и задач исследования;
- технико-экономическое обоснование проекта;
- обоснование места строительства;
- технологическая часть, включающая технологическую схему производства, материальный и тепловой баланс производства, технологические расчеты оборудования; расчеты на прочность, жесткость и устойчивость;
- контроль и автоматизация технологического процесса;
- строительно-монтажная часть;
- охрана труда и техника безопасности;
- охрана природы;
- расчет технико-экономических показателей производства;

- выводы;
- список использованной литературы.

Магистерская диссертация выполняется на белой бумаге формата А4 (297x210) с использованием компьютера и принтера через один интервал и размером шрифта 14 пунктов.

Объем диссертации не должен превышать 75 страниц текста, исключая таблицы, рисунки, список использованной литературы и оглавление.

Страницы диссертации должны иметь следующие поля: левое - 25 мм, правое - 10 мм, верхнее - 20 мм, нижнее - 20 мм. Абзацный отступ должен быть одинаковым по всему тексту и равен пяти знакам.

Все страницы диссертации, включая иллюстрации и приложения, нумеруются по порядку без пропусков и повторений. Первой страницей считается титульный лист, который оформляется в соответствии с приложением 1. На титульный лист нумерация страницы не ставится, на следующей странице ставится цифра "2" и т.д. Порядковый номер страницы печатают на середине верхнего поля страницы.

Особое внимание следует уделить логичности и стройности изложения материала. Следует стремиться выражать мысли грамотным, инженерно-техническим языком. Употреблять нужно только общепринятые технические и товарные термины, биологические и химические названия продуктов или сырья.

В ходе изложения материала в тексте необходимо давать ссылки на рисунки и таблицы, которые следует снабдить порядковыми номерами.

При оформлении диссертации и графической её части размерности величин представлять в системе СИ.

После выполнения всех разделов диссертация компоуется в требуемом порядке. Затем она переплетается в переплетной мастерской. До этого, конечно, диссертация должна быть подписана всеми консультантами и руководителем проекта.

Графическая часть диссертации включает чертежи, графики, схемы, диаграммы, таблицы, рисунки и другой иллюстративный материал.

Все чертежи должны выполняться в соответствии с правилами единой системы конструкторской документации (ЕСКД) – системы ГОСТов по разработке конструкторской документации.

Графическая часть диссертации (чертежи общего вида, сборочные чертежи) должна быть выполнена на стадии технического или эскизного проекта. Сущность изображенных объектов должна быть настолько понятной, чтобы по данному чертежу можно было разработать рабочие чертежи объекта.

Все чертежи должны иметь в правом нижнем углу соответствующий штамп. По контуру, как обычно, отступя по 5 мм от краев, проводят рамку, причем с левой стороны нужно отступить от края 20 мм (для подшивки).

Чертеж общего вида установки (или реактора, машины) может располагаться на нескольких листах формата А1. При этом листы могут располагаться один над другим (по вертикали), так и в горизонтальном направлении. Склеивать их не следует, т.к. это затрудняет хранение, при защите же они располагаются на деревянных щитах в нужном порядке.

Каждый чертеж общего вида (сборочный чертеж) должен иметь техническую характеристику, технические требования, примечания (если это необходимо) и таблицу штуцеров.

В технической характеристике приводятся следующие данные:

- назначение, среды;
- производительность;
- рабочие технологические параметры аппарата или машины (температура, давление и т.п.);
- емкость, объем;
- характеристика привода с указанием типа электродвигателя, передачи;
- число оборотов;
- поверхность теплообмена, фильтрации;
- габариты и вес;

- прочие данные.

В технических требованиях приводятся следующие сведения:

- условия гидравлических, пневматических испытаний;
- требования к герметичности;
- требования к изготовлению и контролю неразъемных соединений;
- требования к контролю, монтажу (выдерживанию нужных размеров и т.д.).

В примечаниях указываются другие сведения об особенностях выполнения графической части. Например, привод (поз. 5) на виде сверху «вид А» условно не показан.

Таблица штуцеров составляется по форме, приведенной в табл. 6.1.

Таблица 6.1

Таблица штуцеров

Обозначение	Назначение	Кол-во	Прход условный, мм	Давление условное, МПа	20
А	Вход циркулирующего газа	2	150	1,0	8
Б	Вход аммиака	1	25	1,6	
12	90	10	18		
148					

Обозначение штуцеров (А, Б, В и т.д.) должны быть указаны и на чертеже: от штуцера проводится тонкая линия, оканчивающаяся горизонтальной чертой, над которой пишется заглавная буква русского алфавита.

При выполнении сборочных чертежей необходимо учитывать требования ГОСТ 2.109-73 как в части содержания, так и в части оформления. Число сборочных чертежей должно быть минимальным для организации производства (сборки и контроля).

Если на узел, входящий в общий вид машины или аппарата выполнен отдельный чертеж, на общем виде этот узел можно не показывать в разрезе.



Типовые, покупные и другие широко применяемые изделия можно изобразить внешними очертаниями без подробностей.

Спецификации к чертежам выполняют на отдельных листах на каждую сборочную единицу, комплекс, комплект и технологическую схему по формам 1 и 1а ГОСТ 2.108-68. Спецификация необходима для изготовления, комплектования конструкторской документации и планирования запуска в производство указанных изделий.

В спецификацию входят составные части, входящие в это данное специфицируемое изделие, а также конструкторская документация, относящаяся к данному изделию и к его неспецифицируемым составным частям.

Приведем порядок расположения разделов спецификации:

документация (перечень конструкторских документов данного изделия);

- комплексы;
- сборочные единицы;
- детали;
- стандартные изделия;
- материалы;
- комплекты.

К материалам относят все материалы, непосредственно входящие в специфицируемое изделие (покрытия из резины и эбонита, набивки сальниковые). Между разделами в спецификации оставляют несколько строк незаполненными.

Выполняя общий вид и сборочные чертежи изделий, студент должен ясно представить технологию изготовления любой детали, сборки и контроля и даже упаковку и поставку изделий с завода-изготовителя. Необходимо представлять и условия межцеховой кооперации данного завода-изготовителя (если он известен).

В соответствии с ГОСТ 2.101-68 ЕСКД различают следующие виды изделий, которые представляются в спецификациях: сборочные единицы,

комплексы и комплекты, детали, причем детали и комплекты входят в состав первых.

*Сборочная единица* – изделия, составные части которого подлежат соединению между собой на предприятии изготовителя любыми сборочными операциями (технологические машина и аппарат, автомобиль, станок, редуктор, маховичок с ручкой из пластмассы).

*Комплекс* – два или более специфицированных изделия, не соединенных между собой на предприятии-изготовителе сборочными операциями, но предназначенных для выполнения взаимосвязанных эксплуатационных функций. Каждое специфицированное изделие, входящее в комплекс, служит для выполнения одной или нескольких основных функций, установленных для всего комплекса, например, цех-автомат для производства жестяной баночной тары, роторная линия для розлива прохладительных напитков. Очевидно, сюда можно отнести и установку для экстракции растительного масла, цех или завод по производству пищевой продукции.

*Комплект* – два или более изделия, не соединенных на предприятии-изготовителе сборочными операциями и представляющие набор изделий, имеющих общее эксплуатационное назначение вспомогательного характера. Например, комплект запасных частей, инструмента, комплект измерительной аппаратуры и т.п. Комплекты обычно включают ведомости эксплуатационных документов, комплекты монтажных частей, сменных частей, инструменты, тару и прочее. К покупным относят изделия, не изготавливаемые на данном предприятии-изготовителе, а получаемые им в готовом виде, кроме получаемых в порядке кооперирования.

В качестве примера в приложениях 2 и 3 приведены спецификация и технологическая схема производства азотной кислоты, соответственно. В приложениях 4 и 5 показаны соответственно спецификация и сборочный чертеж абсорбционной колонны.

В графе «Обозначение» спецификации приводится обозначение (шифр) документа по ГОСТ 2.201-68. Например, обозначение документа УОП

расшифровывается так: установка опытно-промышленная, ВО – общий вид. Можно использовать и другие обозначения: РЛ – роторная линия (РЛ.00.00.00.ВО).

Вместо общего вида установки, агрегата в соответствии с заданием при проектировании допускается выполнять только чертеж строительно-монтажный, например, для цеха розлива прохладительных напитков роторная линия: РЛ.01.00.00.МИ. Тогда в спецификации к этому чертежу имеем оборудование со следующими обозначениями:

РЛ.01.01.00.00 СЧ – технологический ротор;

РЛ.01.02.00.00 СЧ – транспортный ротор;

РЛ.01.03.00.00 СЧ – инструментальный блок;

РЛ.01.04.00.00 СЧ – привод роторной линии.

В свою очередь, в спецификации к роторной линии имеем обозначения:

РЛ.01.03.00.00 СЧ – инструментальный блок, сборочный чертеж;

РЛ.01.03.01.00 – корпус блока;

РЛ.01.03.02.00 – инструмент;

РЛ.01.03.03.00 – заготовка (деталь);

РЛ.01.03.04.00 – матрица.

Пояснение к шифру документа:

СБ – сборочный чертеж;

РД – ремонтный документ;

ВО – чертеж общего вида;

ТБ – таблица;

ГЧ – габаритный чертеж;

МЧ – монтажный чертеж;

ПЗ – пояснительная записка;

ТО – техническое описание.

При подготовке графической части проекта следует пользоваться литературой по ЕСКД, указанной в табл. 6.2.1 – 6.2.8.

Таблица 6.2.1

## Классификационные группы стандартов ЕСКД

Группа	Содержание стандартов	Номера ГОСТ
0	Общие положения	2.001-93 и последующие
1	Основные положения	2.101-68 и последующие
2	Классификация и обозначение изделий	2.101-80
3	Общие правила выполнения чертежей	2.301-1-68 и последующие
4	Правила выполнения чертежей изделий машино- и приборостроения	2.401-68 и последующие
5	Правила обращения КД, учет, хранение, дублирование, внесение изменений	2.501-88 и последующие
6	Правила выполнения эксплуатационной и ремонтной документации	2.604-68 и последующие
7	Правила выполнения схем	2.704-84 и последующие
8	Правила выполнения документов строительных и судостроительных	2.801-74 и последующие
9	Прочие стандарты	

Таблица 6.2.2

## Основные положения Единой системы конструкторской документации (ЕСКД)

Номера ГОСТ	Содержание
ГОСТ 2.001-93	Общие положения
ГОСТ 2.003-83	
ГОСТ 2.004-88	Общие требования к выполнению конструкторской и технологической документации на печатающих и графических устройствах вывода электронных вычислительных машин
ГОСТ 2.101-68	Виды изделий
ГОСТ 2.102-68	Виды и комплектность конструкторских документов
ГОСТ 2.103-68	Стадии разработки
ГОСТ 2.105-79	Общие требования к текстовым документам
ГОСТ 2.106-95	Текстовые документы
ГОСТ 2.110-68	Патентный формуляр
ГОСТ 2.111-68	Нормоконтроль
ГОСТ 2.114-70	Технические условия. Правила построения, изложения и оформления
ГОСТ 2.116-71	Карта технического уровня и качество продукции
ГОСТ 2.117-71	Согласования применения покупки изделий
ГОСТ 2.118-73	Техническое предложение
ГОСТ 2.119-73	Эскизный проект
ГОСТ 2.120-73	Технический проект
ГОСТ 2.121-73	Технический контроль конструкторской документации
ГОСТ 2.201-80	Классификация и обозначения изделий и конструкторских документов

Таблица 6.2.3

## Общие правила выполнения чертежей (ЕСКД)

Номера ГОСТ	Содержание
ГОСТ 2.104-68	Основные надписи
ГОСТ 2.301-68 - 2.306-68	Форматы, масштабы, линии, шрифты чертежные, обозначения графические, материалы и правила их нанесения на чертежах.

Таблица 6.2.4

## Изображения (ЕСКД)

Номера ГОСТ	Содержание
ГОСТ 2.109-73	Основные требования к чертежам
ГОСТ 2.305-68	Изображения, виды, разрезы, сечения
ГОСТ 2.317-69	АксонOMETрические проекции

Таблица 6.2.5

## Правила нанесения размеров, обозначений и надписей

Номера ГОСТ	Содержание
ГОСТ 2.307-68	ЕСКД. Нанесение размеров и предельных отклонений
ГОСТ 2.309-73	ЕСКД. Обозначение шероховатости поверхности
ГОСТ 2.310-68	ЕСКД. Нанесение на чертежах обозначений покрытий, термической и других видов обработки
ГОСТ 2.314-68	ЕСКД. Указание на чертежах о маркировании и клеймении изделий
ГОСТ 2.316-68	ЕСКД. Правила нанесения на чертежах надписей, технических требований и таблиц
ГОСТ 2.321-84	ЕСКД. Обозначения буквенные
ГОСТ 2.789-73	Шероховатость поверхности. Параметры и характеристики

Таблица 6.2.6

## Валы, оси, опоры

Номера ГОСТ	Содержание
ГОСТ 2.420-69	ЕСКД. Упрощенные изображения подшипников качения на сборочных чертежах
ГОСТ 1978-81	Втулки подшипников скольжения биметаллические. Типы и основные размеры
ГОСТ 11521-82	Корпуса подшипников скольжения на лапках с двумя крепежными отверстиями. Конструкции и размеры
ГОСТ 25105-82	Втулки и вкладыши металлические для неразъемных и разъемных корпусов подшипников скольжения

Таблица 6.2.7

## Эксплуатационная и ремонтная документация

Номера ГОСТ	Содержание
ГОСТ 2.601-68	Эксплуатационные документы
ГОСТ 2.602-68	Ремонтные документы
ГОСТ 2.604-68	Чертежи ремонтные
ГОСТ 2.605-68	Плакаты учебно-технические. Общие технические данные

Таблица 6.2.8

## Изображение соединений

Номера ГОСТ	Содержание
ГОСТ 2.312-72	ЕСКД. Условные изображения и обозначения швов сварочных соединений
ГОСТ 2.313-82	ЕСКД. Условные изображения и обозначения неразъемных соединений
ГОСТ 2.315-68	ЕСКД. Изображения упрощенные и условные крепежных деталей
ГОСТ 5264-80	Ручная дуговая сварка. Соединения сварные. Основные типы, конструктивные элементы и размеры.
ГОСТ 11533-75	Автоматическая и полуавтоматическая дуговая сварка под флюсом. Соединения сварные под острым и тупым углами. Основные типы, конструктивные элементы и размеры
ГОСТ 15164-78	Электрошлаковая сварка. Соединения сварные. Конструктивные элементы и размеры.
ГОСТ 16098-80	Швы сварных соединений из двухслойной коррозионно-стойкой стали. Основные типы и конструктивные элементы
ГОСТ 16310-80	Соединения сварные из полиэтилена, полипропилена и винипласта. Основные типы, конструктивные элементы и размеры
ГОСТ 19249-73	Соединения паяные. Основные типы и параметры
ГОСТ 23518-79	Дуговая сварка в защитных газах. Соединения сварные под острыми и тупыми углами. Основные типы, конструктивные элементы и размеры

### 6.3. Внедрение результатов научно-исследовательской работы и оценка её эффективности

Внедрение результатов научно-исследовательской работы (НИР) в производство является заключительным этапом научной деятельности. На этом

этапе научный работник или коллектив научных работников передает научную продукцию предприятию в удобной для реализации форме. Процесс внедрения может состоять из нескольких этапов. Вначале могут проводиться полупромышленные, а затем промышленные испытания внедряемых объектов. Как бы тщательно не проводилась НИР в научно-исследовательских организациях, в данной работе невозможно учесть различные факторы, появляющиеся в условиях промышленного производства. На этапе промышленных испытаний обычно требуются большие финансовые затраты. После промышленных испытаний, как правило, проводится сопровождение внедренных в производство объектов работниками научных организаций, выполнивших НИР, с целью сбора и анализа данных. При необходимости проводится доработка и модернизация объекта. После окончания работ составляют акты внедрения, рассчитывают экономическую эффективность НИР и другие документы.

Эффективность НИР устанавливается с учетом различных видов полезного эффекта, который может быть получен от реализации результатов НИР. Выделяют *социальный, экономический и научно-технический эффекты*.

*Социальный эффект* выражается в улучшении условий труда, ликвидации тяжелого и ручного труда, улучшении техники безопасности и т.п.

*Экономический эффект* выражается в экономии материальных, трудовых, финансовых и энергетических ресурсов.

*Научно-технический эффект* выражается в расширении знаний об объекте исследования, которые могут быть использованы на практике.

За основу оценки эффективности НИР принимается обычно экономический эффект. Определение годового экономического эффекта НИР основывается на сопоставлении приведенных затрат по заменяемой (базовой) и новой технике. Приведенные затраты определяются по формуле:

$$Z_{np} = C + E_n K, \quad (6.3.1)$$

где  $Z_{np}$  – приведенные затраты на единицу продукции (работы), руб.;  $C$  – себестоимость единицы продукции (работы), руб.;  $E_n$  – нормативный

коэффициент капитальных вложений;  $K_n$  - удельные капитальные вложения в производственные фонды, руб.

Годовой экономический эффект рассчитывается по формуле:

$$\mathcal{E} = (Z_1 - Z_2)A_2, \quad (6.3.2)$$

где  $Z_1$  и  $Z_2$  – приведенные затраты на единицу продукции (работ) соответственно до и после внедрения НИР, руб.;  $A_2$  – годовой объем производства продукции (работ) после внедрения НИР в расчетном году.

При расчете экономического эффекта от внедрения НИР в составе капитальных вложений учитываются так называемые предпроизводственные расходы на научные исследования. Экономические расчеты должны входить в отчет о научно-исследовательской работе.



## Список литературы

1. Распоряжение Правительства России от 17 ноября 2008 г. N 1662-р «О Концепции долгосрочного социально-экономического развития Российской Федерации на период до 2020 года» // Собрание законодательства Российской Федерации. 24.11.2008. N 47. ст. 5489.
2. Основы научных исследований: учебник для вузов / под ред. В.И. Крутова и В. В. Попова. - М.: Высш. шк., 1989. - 400 с.
3. Кохановский, В.П. Философия и методология науки: учеб. для вузов / В.П. Кохановский. - Ростов н/Д.: Феникс, 1999. – 576 с.
4. Диткин, В.А. Справочник по операционному исчислению / В. А. Диткин, А. П. Прудников. - М.: Высш. шк., 1965. – 468 с.
5. Массообменные процессы химической технологии (системы с дисперсной твердой фазой) / П.Г. Романков, В.Ф. Фролов. – Л.: Химия, 1990. – 384 с.
6. Рудобашта, С.П. Массоперенос в системе с твердой фазой / С.П. Рудобашта. – М.: Химия, 1980. – 248 с.
7. Касаткин, А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии / А.Г. Касаткин. – М.: ООО ТИД “Альянс”, 2004. – 753 с.
8. Павлов, К.Ф. Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии / К.Ф. Павлов, П.Г. Романков, А.А. Носков; под ред. П.Г. Романкова. – Л.: Химия, 1987. – 576 с.
9. Аэров, М.Э. Гидравлическое и тепловые основы работы аппаратов со стационарным и кипящим зернистым слоем / М.Э. Аэров, О.М. Тодес. - Л.: Химия, 1968. – 510 с.
10. Основы научных исследований: учеб. для техн. вузов / [В.И. Крутов и др.]; под ред. В.И. Крутова, В.В. Попова. – М.: Высш. шк., 1989 – 400 с.
11. Ермаков, С.М. Математическая теория планирования эксперимента / С.М. Ермаков. - М: Наука, 1983. - 392 с.

12. Кафаров, В.В. Математическое моделирование основных процессов химических производств: учебное пособие / В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. - М.: Высш. шк., 1991. – 400 с.
13. Айвазян, С.А. Прикладная статистика. Основы моделирования и первичная обработка данных. Справочное изд. / С.А. Айвазян, И.С. Енюков, Л.Д. Мешалкин. – М.: Финансы и статистика, 1983. – 471 с.
14. Кремер, Н.Ш. Теория вероятностей и математическая статистика / Н.Ш. Кремер. - М.: ЮНИТИ, 2000. - 543с.

Министерство образования и науки РФ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**Ивановский государственный химико-технологический университет**

Кафедра \_\_\_\_\_

## **ДИССЕРТАЦИЯ МАГИСТРА**

Тема: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Автор: \_\_\_\_\_

Руководитель: \_\_\_\_\_

Консультант: \_\_\_\_\_

Консультант: \_\_\_\_\_

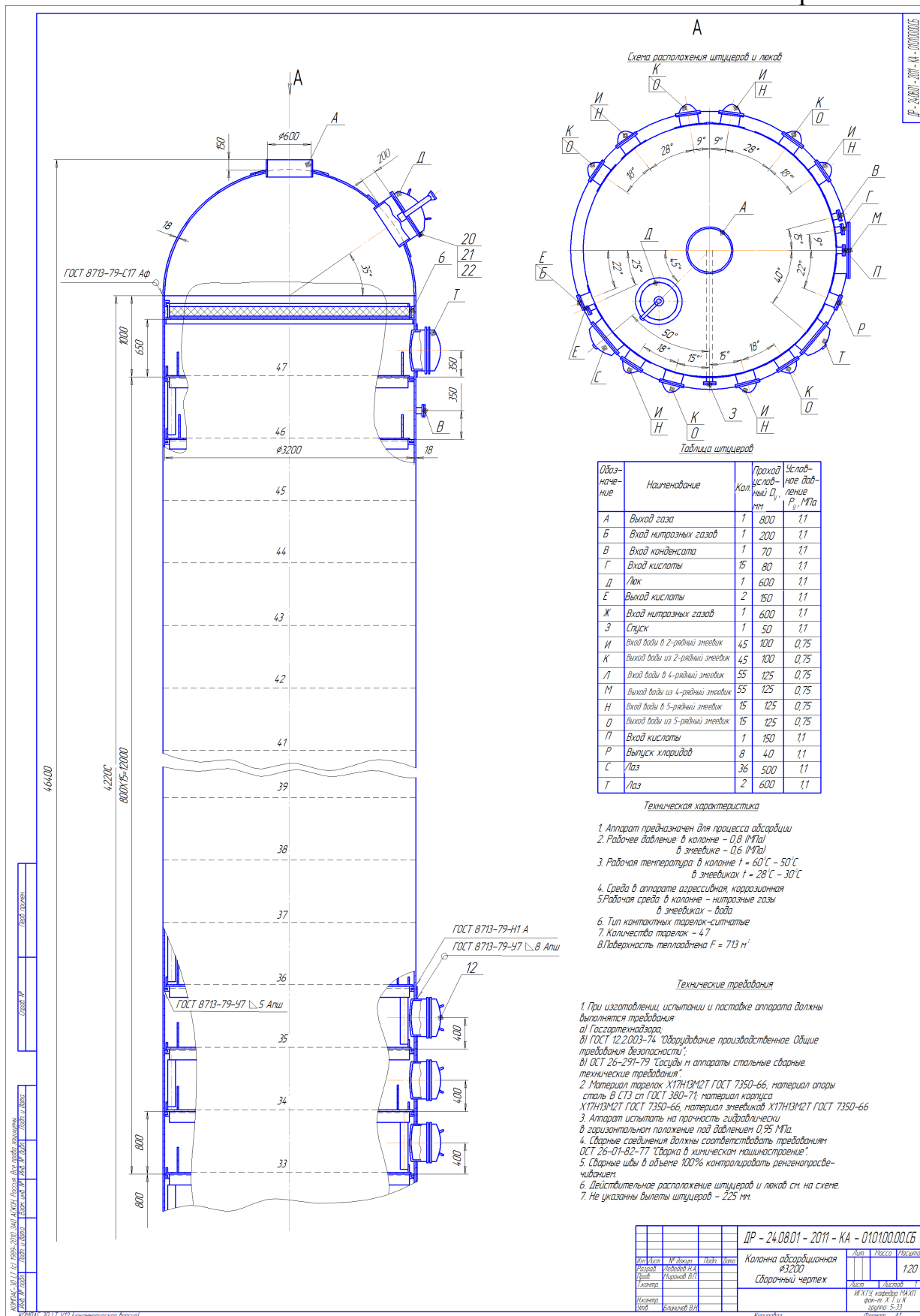
Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

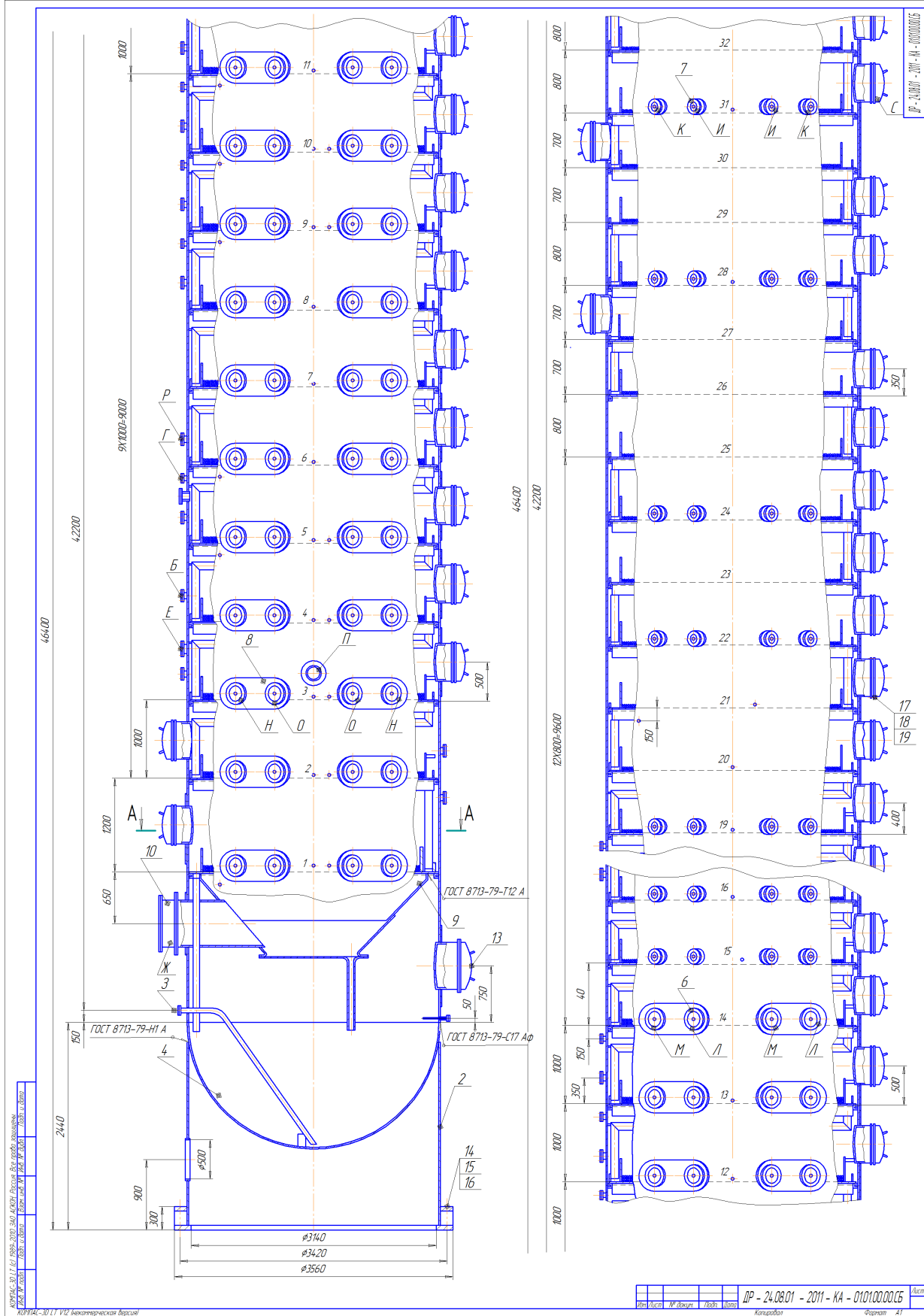
Иваново 20 г.

Перв. проект.		Формат	Дата	Поз.	Обозначение	Наименование	Кол.	Примечание
						Документация		
					ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0100.00.00.00	Технологическая схема		
						Перечень оборудования		
Сред. №				1	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0101.00.00.00	Колонна абсорбционная	1	
				2	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0102.00.00.00	Колонна продувочная	1	
				3	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0103.00.00.00	Сепаратор центробежный	1	
				4	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0104.00.00.00	Паровой конденсатор	1	
				5	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0105.00.00.00	Воронка	1	
				6	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0106.00.00.00	Холодильник-конденсатор	2	
				7	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0107.00.00.00	Подогреватель хвостовых газов	1	
				8	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0108.00.00.00	Котел утилизатор	1	
				9	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0109.00.00.00	Контактный аппарат	1	
				10	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0110.00.00.00	Совмещенный аппарат		
Подп. и дата						смеситель с фильтром	1	
				11	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0111.00.00.00	Окислитель с подогревателем		
						воздуха	1	
Инв. № докум.				12	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0112.00.00.00	Камера сгорания реактора	1	
				13	ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0113.00.00.00	Реактор каталитической очистки	1	
Взам. инв. №								
Подп. и дата								
Инв. № подл.					ДР - 24.08.01 - 2011 - КА - 0100.00.00.00СП			
	Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата			
	Разраб.	Левинский Н.А.						
	Проб.	Гирянов В.П.						
Инв. № подл.					Производство азотной кислоты			
					Технологическая схема			
	Исполн.					Лит. Лист Листов		
	Утв.	Блиничев В.Н.				1	1	1
					ИГХТУ, кафедра ПАХП факультет ХТ и К группа 5-33			
					Копировал Формат А4			



[illegible]







Учебное издание

Натареев Сергей Валентинович  
Постникова Ирина Викторовна  
Миронов Виктор Павлович

Основы научных исследований  
Учебное пособие

Редактор В.Л. Родичева

Подписано в печать 4.04.2016. Формат 60×84 1/16. Бумага писчая.  
Усл. печ. л. 9,07. Тираж 50 экз. Заказ

ФГБОУ ВО «Ивановский государственный  
химико-технологический университет»

Отпечатано на полиграфическом оборудовании  
кафедры экономики и финансов ФГБОУ ВО «ИГХТУ»  
153000, г. Иваново, Шереметевский пр., 7