

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

А.А. Липин, А.Г. Липин

**ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ
ПО КУРСУ
«СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ
И МЕТОДЫ ХИМИЧЕСКОЙ КИБЕРНЕТИКИ»**

Иваново 2015

УДК 66.011:004.942

Липин, А.А.

Лабораторный практикум по курсу «Системный анализ и методы химической кибернетики» / А.А. Липин, А.Г. Липин; Иван. гос. хим.-технол. ун-т. – Иваново, 2015. – 96 с.

В учебном пособии изложены теоретические аспекты выполнения лабораторного практикума по дисциплине «Системный анализ и методы химической кибернетики». Приведены методики выполнения лабораторных работ, примеры выполнения заданий. Учебное пособие направлено на формирование у обучающихся умений и навыков проводить обработку информации с использованием прикладных программ и баз данных для расчета технологических параметров оборудования; применять современные методы исследования технологических процессов, использовать компьютерные средства в научно-исследовательской работе; планировать экспериментальные исследования, получать, обрабатывать и анализировать полученные результаты.

Предназначено студентам направлений подготовки «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии», «Технологические машины и оборудование», изучающим дисциплины «Системный анализ и методы химической кибернетики», «Системный анализ технологических процессов».

Табл. 21. Ил. 31. Библиогр.: 8 назв.

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

Рецензенты:

кафедра прикладной математики Ивановского государственного энергетического университета; доктор физико-математических наук Г.А. Зуева (Ивановский государственный химико-технологический университет)

© Липин А.А., Липин А.Г., 2015

© ФГБОУ ВПО «Ивановский государственный химико-технологический университет», 2015

Оглавление

Введение.....	4
Лабораторная работа №1. Методы и принципы системного исследования.....	6
Лабораторная работа №2. Построение математических моделей в пакете визуального моделирования Simulink	15
Лабораторная работа №3. Математическое моделирование сложной химической реакции.....	35
Лабораторная работа №4. Обработка экспериментальных данных.....	49
Лабораторная работа №5. Математическое планирование эксперимента: полный факторный эксперимент.....	63
Лабораторная работа №6. Оптимизация с использованием встроенных функций MathCad.....	85
Список литературы.....	95

Введение

Дисциплина «Системный анализ и методы химической кибернетики» относится к дисциплинам профессионального цикла. Она призвана сформировать у студентов базовые представления об общих принципах системного анализа, иерархии явлений в химико-технологических процессах и производствах, о стратегии системного подхода к построению математических моделей процессов химической технологии, о методах и средствах химической кибернетики.

Курс «Системный анализ и методы химической кибернетики» включает в себя пять основных разделов: общие принципы системного анализа, стратегию системного анализа химико-технологических процессов, основные понятия кибернетики, статистические методы параметрической идентификации математических моделей, оптимизацию ХТП. Лабораторный практикум по курсу включает шесть работ, выполнение которых студентами позволяет закрепить теоретические знания на практике.

Работа «Методы и принципы системного исследования» относится к первому разделу курса. Работа может выполняться студентами как индивидуально, так и небольшими группами с применением метода «мозгового штурма».

Поскольку одним из методов кибернетики является математическое моделирование, выполнение остальных пяти работ подразумевает применение ЭВМ. В рамках данного практикума предлагается использование двух математических пакетов: MathCAD и MATLAB.

Выполняя вторую и третью лабораторные работы, студенты получают навыки работы в математическом пакете MATLAB, применяют принципы системного анализа при решении конкретной прикладной задачи – моделирование сложной химической реакции в реакторах разных типов.

Выполнение четвертой и пятой работ знакомит студентов с понятиями пассивного и активного эксперимента, методами обработки экспериментальных данных. Студенты изучают и практически применяют встроенные функции ма-

тематического пакета MathCAD для интерполяции, аппроксимации, регрессии и сглаживания опытных данных.

Встроенные оптимизационные функции математического пакета MathCAD используются при выполнении шестой работы. Студенты овладевают навыками решения основных оптимизационных задач: одномерной и многомерной, условной и безусловной.

Полученные в рамках курса «Системный анализ и методы химической кибернетики» знания необходимы для дальнейшего успешного освоения таких учебных дисциплин как: моделирование энерго- и ресурсосберегающих процессов в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии; процессы и аппараты защиты окружающей среды; принципы математического моделирования химико-технологических систем. Успешно освоив данный лабораторный практикум, студенты овладевают профессиональными компетенциями ПК-9, ПК-23, ПК-24.

Лабораторная работа №1

Методы и принципы системного исследования

Цель работы: научиться осуществлять классификацию систем по различным признакам. На основе использования системных методов овладеть навыками выявления функций различных систем. На основе применения системных принципов научиться моделировать поведение и функционирование реальных объектов.

Основные понятия системного анализа

Системный анализ – система методов исследования и создания сложных систем, используемых для подготовки и обоснования решений по проблемам различной сложности. **Система** – конечное множество функциональных элементов и отношений между ними, выделенное из среды с определенной целью в рамках определенного временного интервала.

Элемент – неделимая часть системы, обладающая самостоятельностью по отношению к данной системе. Неделимость элемента рассматривается как нецелесообразность учёта в пределах модели данной системы его внутреннего строения.

Сам элемент характеризуется только его внешними проявлениями в виде связей и взаимосвязей с остальными элементами.

Каждый элемент характеризуется конкретными свойствами (вес, температура и т.д.), которые определяют его в данной системе однозначно.

Связь – совокупность зависимостей свойств одного элемента от свойств других элементов системы. Установить связь между двумя элементами – это значит выявить наличие зависимостей их свойств.

Классификация систем

В настоящее время существует много различных классификаций систем. Рассмотрим некоторые из них.

1. Системы в природе и обществе могут классифицироваться *по взаимодействию с внешней средой или с другими системами* на открытые и закрытые (замкнутые, изолированные).

Система называется открытой, если в нее и из нее постоянно происходит соответственно ввод и вывод не только энергии, но и вещества. Система замкнута, если нет ни притока, ни оттока информации, тепла и физических веществ, а значит, нет изменения компонентов, т.е. в нее не поступает и из нее не выделяется вещество.

В качестве примера можно рассматривать персональный компьютер (ПК) как открытую систему. Она снабжается электрической энергией, запасными частями, человеческой энергией для ремонта и т.д., из них удаляются тепло и вышедшие из строя элементы. В этих условиях ПК выполняет полезную работу, принимая на входе информацию в виде данных, программ и инструкций, преобразуя их, согласно этой программе, и выдавая на выходе результаты.

2. *По способу описания* системы делятся на детерминированные (поведение которых описывается однозначной функцией), статистические (поведение которых описывается в терминах распределения вероятностей) и нечеткие (поведение которых описывается нечеткими словесными высказываниями типа "достаточно высокий", "большой", "значительный" и т.п.).

3. *По природе* системы можно разделить на физические и абстрактные и на естественные (природные) и искусственные (созданные человеком).

4. *По степени сложности (числу элементов)* их можно разделить на простые системы ($10 - 10^3$ элементов), сложные ($10^4 - 10^7$), ультрасложные ($10^7 - 10^{20}$) и суперсистемы ($10^{20} - 10^{100}$).

5. *По естественному разделению* системы делятся на технические, биологические и социальные.

К техническим системам относятся станки, оборудование, компьютеры и другие работоспособные изделия, имеющие инструкции для пользователя. Биологические системы включают флору и фауну планеты, в том числе относительно замкнутые биологические подсистемы, например муравейник, человеческий организм и др. Социальные (общественные) системы характеризуются наличием человека в совокупности взаимосвязанных элементов. В качестве характерных примеров социальных систем можно привести семью, производст-

венный коллектив, неформальную организацию, водителя, управляющего автомобилем, и даже одного отдельного человека (самого по себе).

6. По степени организованности выделяют хорошо организованные, плохо организованные и самоорганизующиеся системы.

Хорошо организованные системы – это такие, для которых можно определить отдельные элементы, связи между ними, правила объединения в подсистемы и оценить связи между компонентами системы и ее целями. В этом случае проблемная ситуация может описываться в виде математических зависимостей, которые связывают цель и средства ее достижения, так называемых критериев эффективности или оценок функционирования. Решение задач анализа и синтеза в хорошо организованных системах осуществляется аналитическими методами.

Примеры: описание работы электронного устройства с помощью системы уравнений, которые учитывают особенности работы; аналитические модели объектов управления и др.

Для отображения исследуемого объекта в виде хорошо организованной системы выделяют наиболее существенные факторы и отбрасывают второстепенные. В хорошо организованных системах используется в основном количественная информация.

Плохо организованные системы. Для таких систем характерным является отображение и исследование не всех компонентов, а лишь некоторых наборов макропараметров и закономерностей с помощью определенных правил выборки. Например, при получении статистических закономерностей их переносят на поведение систем с некоторыми показателями вероятности. Характерным для этих систем является использование многокритериальных задач с многочисленными предположениями и ограничениями. Примеры: системы массового обслуживания, экономические и организационные системы.

В плохо организованных системах используется в основном качественная информация, в частности нечеткие множества.

Системы с самоорганизацией. Такие системы имеют признаки плохо организованных систем: стохастичность поведения и нестационарность параметров. В то же время они имеют четко определенную возможность адаптации к смене условий работы.

Примеры: биологические организации, коллективное поведение людей, организация управления на уровне предприятия, отрасли, государства в целом, т. е. в тех системах, где обязательно имеется человеческий фактор.

Модели систем

Модель «черного ящика»

«Черный ящик» — система, в которой внешнему наблюдателю доступны лишь входные и выходные параметры, а внутреннее устройство и протекающие в ней процессы, по «причине недоступности для изучения или в связи с абстрагированием, не являются предметом исследований» (см. рис. 1.1). Введение принципа «черного ящика» — это возможность изучать сложные системы, используя зависимость между входными ресурсами и выходными результатами ее деятельности, не рассматривая механизм преобразования ресурсов. Подход, основанный на принципе «черного ящика», получил распространение при экспериментальных исследованиях систем, когда больший интерес представляет поведение системы, а не ее строение.

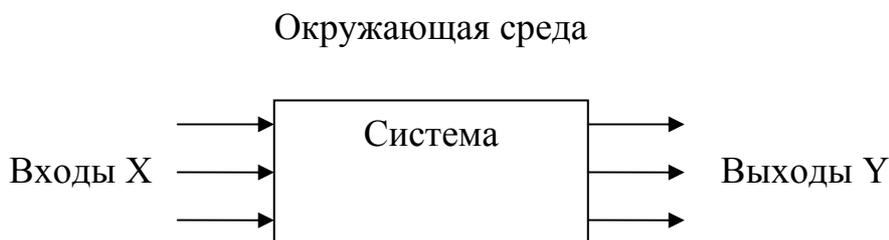


Рис. 1.1. Модель «черного ящика»

Модель состава системы

При рассмотрении любой системы обнаруживается, что ее целостность и обособленность, отображенные в модели черного ящика, выступают как внешние свойства. Внутренность же «ящика» оказывается неоднородной, что позво-

ляет различать составные части самой системы. При более детальном рассмотрении некоторые части системы могут быть, в свою очередь, разбиты на составные части и т.д. Те части системы, которые мы рассматриваем как неделимые, называются элементами. Части системы, состоящие более чем из одного элемента, называют подсистемами. При необходимости можно ввести обозначения или термины, указывающие на иерархию частей. В результате получается модель состава системы, описывающая, из каких подсистем и элементов она состоит (см. рис. 1.2).

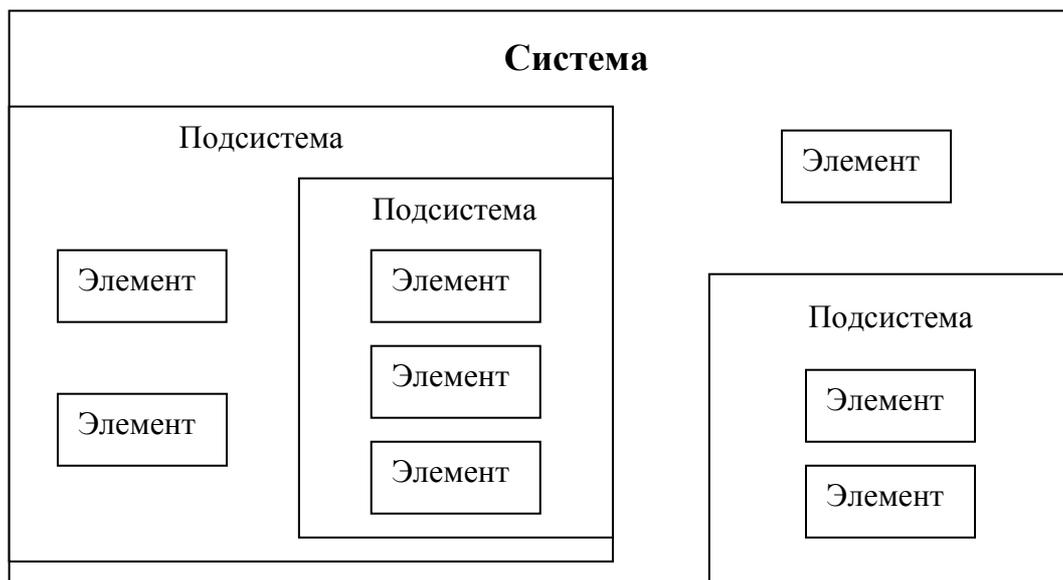


Рис. 1.2. Модель состава системы

Модель структуры системы

Несмотря на полезность рассмотренных выше моделей систем, существуют проблемы, решить которые с помощью таких моделей нельзя. Например, чтобы получить велосипед, недостаточно иметь отдельные его детали (хотя состав системы налицо). Необходимо еще правильно соединить все детали между собой, т.е. установить между элементами определенные связи — отношения. Совокупность необходимых и достаточных для достижения цели отношений между элементами называется структурой системы. Когда мы рассматриваем некую совокупность объектов как систему, то из всех отношений мы выбираем важные, т.е. существенные для достижения цели. Точнее, в модель структуры

мы включаем только конечное число связей, которые существенны по отношению к рассматриваемой цели. Например, при расчете механизмов не учитываются силы взаимного притяжения его деталей, хотя, согласно закону всемирного тяготения, такие силы объективно существуют. Зато вес деталей учитывается обязательно.

Порядок выполнения работы

1. Для системы, заданной преподавателем, провести классификацию по различным признакам, результат занести в табл. 1.1:

Таблица 1.1

Классификация системы

№ п/п	Признак классификации	Тип системы по признаку	Обоснование принадлежности
1	По природе		
2	По способу описания		
3	По степени организованности		
4	По взаимодействию с окружающей средой		
5	По степени сложности		
6	По естественному разделению		

2. Исследовать заданную систему с помощью применения принципа «черного ящика», а именно – определить по 6-7 входов и выходов системы и выделить по 3 наиболее существенных. Сформулировать цель системы и её основную функцию.

3. Для заданной системы построить модели состава и структуры. В модели структуры объяснить основные связи между элементами (или подсистемами) и определить цель, достигнутую в ходе структурного моделирования.

Пример выполнения работы

В качестве примера системы рассмотрим микрофон. Проведем её классификацию, представленную в табл. 1.2.

Классификация системы микрофон

№ п/п	Признак классификации	Тип системы по признаку	Обоснование принадлежности
1	По природе	Физическая, искусственная	
2	По способу описания	Детерминированная	Взаимодействия элементов четко определено
3	По степени организованности	Хорошо организованная	
4	По взаимодействию с окружающей средой	Открытая	Взаимодействует с окружающей средой
5	По степени сложности	Простая	Небольшое число элементов
6	По естественному разделению	Техническая	Искусственная система, создана человеком

Исследуем систему с помощью применения принципа «черного ящика», модель которого показана на рис. 1.3.



Рис. 1.3. Модель «черного ящика» для системы микрофон

Основная функция данной системы: удовлетворять потребность человека в записи звука на носитель.

Цель системы: преобразование звуковых волн в электрические импульсы с учетом конструктивных особенностей микрофона.

Построим для системы микрофон модели состава и структуры, изображенные на рис. 1.3 и 1.4.

Таблица 1.3

Модель состава для системы микрофон

Система	Подсистема	Элементы
Микрофон	Корпус	Фильтрующая сетка
		Капсюль
		Схема усиления
		Источник питания
		Кнопка включения
	-	Соединяющий шнур
	-	Разъем

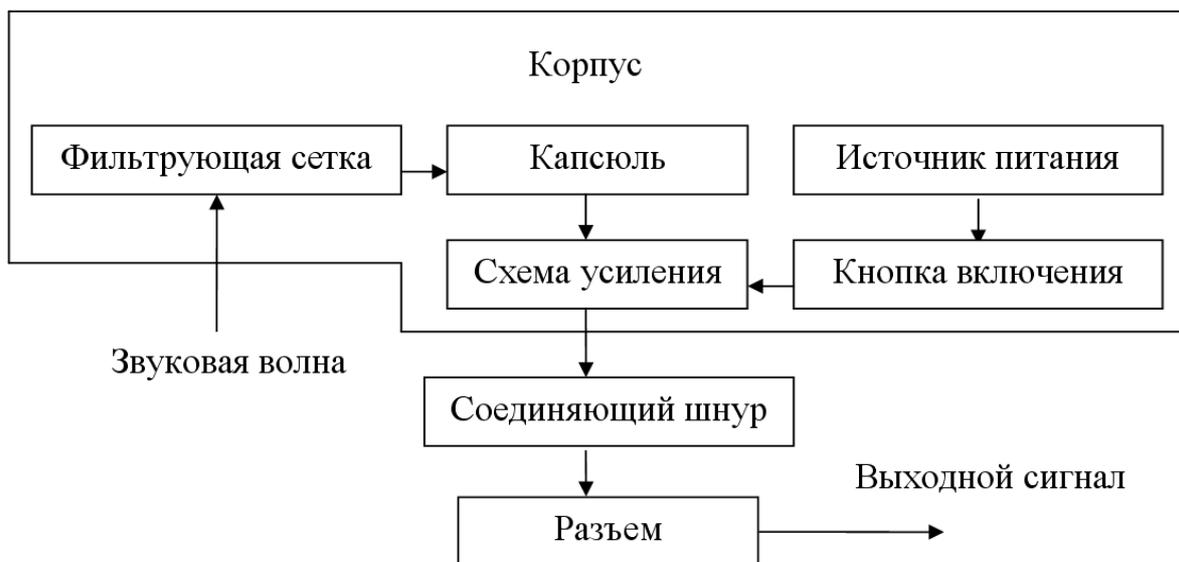


Рис. 1.4. Модель структуры для системы микрофон

Входная звуковая волна поступает через фильтрующую сетку на капсюль микрофона, где происходит преобразование в электрический сигнал. Сигнал усиливается схемой усиления и через соединяющий шнур направляется в записывающее устройство. Основная цель, достигнутая в ходе структурного моделирования, – создание упорядоченных моделей систем и отображение взаимодействия их подсистем и элементов между собой.

Индивидуальные варианты задания

1. Персональный компьютер.
2. Велосипед.
3. Автомобиль.
4. Химический реактор.
5. Аудиоколонка.
6. Утюг.
7. Электронагреватель.
8. Центробежный насос.
9. Электродрель.
10. Телевизор.
11. Мобильный телефон.
12. Двигатель внутреннего сгорания.
13. Принтер.
14. Сканер.
15. Химический завод.
16. Электродвигатель.
17. Емкостной смеситель.
18. Поршневой насос.
19. Фотоаппарат.
20. Нутч-фильтр.

Контрольные вопросы

1. Дайте определение понятия «система».
2. Приведите классификацию систем.
3. Дайте определение понятия «системный анализ».
4. Дайте определение понятия «элемент».
5. Дайте определение понятия «связь».
6. В чём заключается сущность метода «чёрного ящика»?
7. Что собой представляет модель состава системы?
8. Что собой представляет модель структуры системы?

Лабораторная работа №2

Построение математических моделей в пакете визуального моделирования Simulink

Цель работы: знакомство с пакетом визуального моделирования Simulink, освоение технологии решения задач моделирования систем с помощью этого пакета.

Общие сведения о пакете Simulink

Simulink – это графическая среда имитационного моделирования, позволяющая при помощи блок-диаграмм в виде направленных графов строить динамические модели, включая дискретные, непрерывные и гибридные, нелинейные и разрывные системы.

Интерактивная среда Simulink позволяет использовать уже готовые библиотеки блоков для моделирования электросиловых, механических и гидравлических систем, а также применять развитый модельно-ориентированный подход при разработке систем управления, средств цифровой связи и устройств реального времени.

Дополнительные пакеты расширения Simulink позволяют решать весь спектр задач от разработки концепции модели до тестирования, проверки, генерации кода и аппаратной реализации. Simulink интегрирован в среду MATLAB, что позволяет использовать встроенные математические алгоритмы, мощные средства обработки данных и научную графику.

В MATLAB используется несколько типов файлов, для каждого из которых определен свой допустимый набор операций и реализующие их средства. При работе с Simulink в основном используются файлы трех типов:

- М-файлы (имеющие расширение .m) — файлы, содержащие текст программы на языке MATLAB; в виде М-файлов реализованы все библиотечные функции MATLAB; по умолчанию М-файлы открываются с помощью собственного редактора/отладчика MATLAB;

- Mdl-файлы (файлы с расширением .mdl) — файлы моделей Simulink; могут быть открыты либо с помощью Simulink (в виде графического окна с блок-диаграммой), либо с помощью редактора/отладчика MATLAB;

- MAT-файлы (с расширением .mat) — файлы, содержащие данные в дво-ичном коде; доступ к ним возможен либо из командного окна MATLAB, либо с помощью специальных средств Simulink.

Разработка моделей средствами Simulink (в дальнейшем S-моделей) основана на использовании технологии drag-and-drop («перетаски и оставь»). В качестве «кирпичиков» для построения S-модели используются модули (или блоки), хранящиеся в библиотеке Simulink.

Simulink хорош тем, что, с одной стороны, обеспечивает пользователю доступ ко всем основным возможностям пакета MATLAB, а с другой — является достаточно самостоятельной его компонентой в том смысле, что при работе с ним не обязательно иметь навыки в использовании других инструментов, входящих в состав пакета.

Блоки, включаемые в создаваемую модель, могут быть связаны друг с другом как по информации, так и по управлению. Тип связи зависит от типа блока и логики работы модели. Данные, которыми обмениваются блоки, могут быть скалярными величинами, векторами или матрицами произвольной размерности.

Любая S-модель может иметь иерархическую структуру, то есть состоять из моделей более низкого уровня, причем число уровней иерархии практически не ограничено.

Наряду с другими параметрами моделирования, пользователь может задавать способ изменения модельного времени (с постоянным или переменным шагом), а также условия окончания моделирования.

В ходе моделирования имеется возможность наблюдать за процессами, происходящими в системе. Для этого используются специальные «смотровые окна», входящие в состав библиотеки Simulink. Интересующие пользователя характеристики системы могут быть представлены как в числовой, так и в

графической форме. Кроме того, существует возможность включения в состав модели средств анимации.

Еще одно важное достоинство Simulink заключается в том, что он является открытой системой: состав библиотеки может быть пополнен пользователем за счет разработки собственных блоков.

Все примеры и задания, представленные в практикуме, реализованы на базе MATLAB версии 7.12.0 (R2011a).

Начало работы в пакете Simulink

Запуск Simulink можно произвести одним из трех способов:

- нажав соответствующую кнопку на панели инструментов командного окна MATLAB;
- введя команду Simulink в активной строке командного окна;
- выбрав команду New/Model в меню File.

Использование первого и второго способов приводит к открытию окна браузера разделов библиотеки Simulink (рис. 2.1), а по команде New/Model кроме него открывается еще и пустое окно для создания S-модели (рис. 2.2).

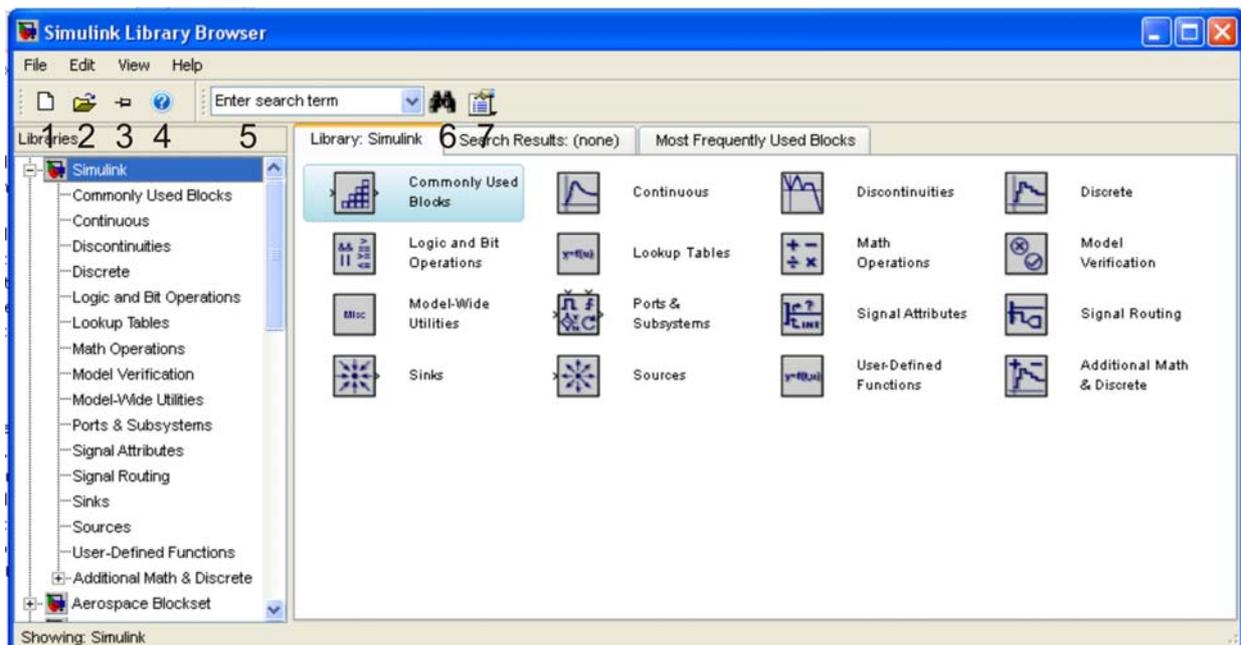


Рис. 2.1. Окно браузера библиотеки Simulink

Окно браузера разделов содержит панель инструментов, собственно список разделов, реализованный в виде дерева и расположенный в левой части окна и вспомогательного подокна, расположенного справа от списка разделов. Оно используется для вывода комментария к выбранному в списке элементу и для представления пиктограммы этого элемента (рис. 2.1).

Кнопки панели инструментов браузера имеют следующее предназначение:

- 1 — создать новую S-модель (точнее, открыть новое окно модели);
- 2 — открыть одну из существующих S-моделей;
- 3 — изменить свойство окна браузера «Всегда сверху»; данная кнопка работает как переключатель: при ее «нажатии» связанное с ней значение изменяется на противоположное, при этом изменяется и изображение кнопки; если данное свойство установлено, то окно браузера отображается всегда поверх других открытых окон (в исходном состоянии окно браузера этим свойством не обладает);
- 4 – вызов справки по Simulink;
- 5 – окно поиска по разделам библиотеки Simulink;
- 6 — найти блок, название которого (или первые несколько символов названия) указано в расположенном справа от кнопки текстовом поле; если требуемый блок найден, в окне браузера открывается соответствующий раздел библиотеки, а блок отображается как выбранный, в противном случае в подокне комментария выводится сообщение *Not found <имя блока>* (не найден).

Список разделов библиотеки Simulink представлен в основном окне браузера в виде дерева, и правила взаимодействия с ним являются стандартными для списков такого типа:

- пиктограмма свернутого узла дерева содержит символ "+", а пиктограмма развернутого — символ "-";

- чтобы развернуть или свернуть, узел дерева, достаточно щелкнуть на его пиктограмме левой кнопкой мыши (ЛКМ) (или дважды щелкнуть на текстовой метке узла).

Библиотека Simulink имеет структуру, представленную на рис. 2.1. На верхнем уровне иерархии расположена основная библиотека, которая носит соответствующее название — Simulink, а также внушительный список других библиотек, содержащих наборы блоков, ориентированных на решение специализированных задач в разных областях моделирования.

Ко второму уровню относятся разделы основной библиотеки и дополнительных библиотек. И наконец, нижний уровень иерархии образуют собственно блоки Simulink, которые и играют роль «кирпичиков» при построении S-модели. Чтобы вставить блок в S-модель, необходимо выбрать его в списке (щелкнув ЛКМ на графической или текстовой метке блока) и, не отпуская кнопку мыши, перетащить его контур в поле блок-диаграммы. Что из этого должно получиться, вы узнаете немного позже. А пока вернемся к упомянутому окну блок-диаграммы, общий вид которого был показан на рис.2.2.

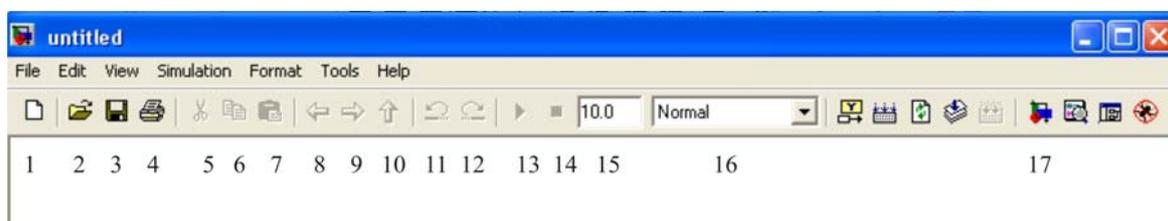


Рис. 2.2. Панель инструментов окна блок-диаграммы

С точки зрения пользовательского интерфейса оно представляет собой обычное окно со всеми вытекающими из этого последствиями (его можно сворачивать, изменять размеры окна, перемещать по экрану и т.д.). В отличие от окна браузера библиотеки, закрытие окна блок-диаграммы не приводит к выходу из Simulink. Меню окна блок-диаграммы содержит следующие разделы:

- *File* — команды работы с mdl-файлами;

• *Edit* — команды редактирования блок-диаграммы и опции для работы с библиотекой;

• *View* — команды изменения формата окна и управления выводом дополнительной информации;

• *Simulation* — команды управления моделированием;

• *Format* — команды редактирования формата (т. е. внешнего облика) блоков диаграммы и блок-диаграммы в целом;

• *Tools* – набор инструментов, используемых при организации и выполнении экспериментов с моделями.

На панель инструментов выведены следующие команды меню (рис.2.2):

1 — *New Model* — открыть новое (пустое) окно блок-диаграммы;

2 — *Open Model* — открыть существующий mdl-файл;

3 — *Save Model* — сохранить mdl-файл на диске;

4 — *Print Model* — вывод на печать блок-диаграммы;

5...7 — команды редактирования блок-диаграммы (вырезать, копировать, вставить);

8...10 – навигация по модели;

11 — *Undo* — отменить предыдущую операцию редактирования;

12 — *Redo* — восстановить результат отмененной операции редактирования;

13 – *Start Simulation* – кнопка запуска модели на исполнение;

14 – *Stop simulation* – кнопка остановки исполнения модели;

15 – *Simulation Stop Time* – время завершения исполнения модели;

16 – режим выполнения модели;

17 — *Library Browser* — активизировать окно браузера библиотеки.

Краткие комментарии к кнопкам панели инструментов, а также к пунктам меню окна блок-диаграммы отображаются в левой части строки состояния, когда указатель мыши находится над соответствующим элементом интерфейса. Это же текстовое поле используется и для индикации состояния

Simulink: *Ready* (Готов) или *Running* (Выполнение). Наряду с указанной информацией в строке состояния отображаются:

- установленный масштаб просмотра блок-диаграммы (в процентах, исходное значение равно 100%);
- индикатор степени завершенности сеанса моделирования («включается» только при запуске модели);
- текущее значение модельного времени (выводится также только после запуска модели);
- используемый алгоритм расчета состояний модели.

Применение команд меню, не выведенных на панель инструментов, будет рассмотрено немного позже. Сейчас остановимся на описании основных возможностей Simulink.

Основная библиотека блоков разбита на 16 разделов, содержимое которых не может изменяться пользователем (количество разделов, их наименование и состав могут меняться от версии к версии):

- Commonly Used Blocks (наиболее часто используемые блоки. Раздел динамически изменяется);
- Continuous (блоки для моделирования непрерывных систем);
- Discontinuities (блоки для дискретизации непрерывных сигналов);
- Discrete (блоки для моделирования дискретных систем);
- Logic and Bit Operations (блоки логических и битовых операций);
- Lookup Tables (таблицы выбора);
- Math Operations (математические блоки);
- Model Verification (блоки верификации модели);
- Model-Wide Utilities (утилиты расширения модели);
- Ports and Subsystems (блоки для создания подсистем);
- Signal attributes (атрибуты сигнала);
- Signal Routing (блоки для управления потоками сигналов);
- Sinks (блоки-«получатели»);

- Sources (блоки-«источники»);
- User-Defined Functions (функции, определяемые пользователем);
- Additional Math and Discrete (дополнительные математические и дискретные блоки).

Функции и работу блоков, входящих в эти разделы, будем рассматривать по мере выполнения конкретных заданий.

Обучающие примеры

Задание 1. Формирование типовых сигналов: ступенчатого, импульсного и синусоидального.

Технология выполнения задания:

1. «Перетащите» с помощью мыши блок **Step** из раздела **Sources** и блок **Scope** из раздела **Sinks** в окно S-модели.

2. Соедините, используя мышь, выход блока **Step** с входом блока **Scope**;

3. Формирование единичной ступеньки:

▪ двойным щелчком по блоку ЛКМ откройте окно *Block Parameters: Step*. Блок имеет 4 параметра настройки:

- *Step time* (шаг времени) – определяет длительность сигнала;

- *Initial value* (начальное значение) – задает значение амплитуды сигнала в начальный момент времени;

- *Final value* (конечное значение) – задает значение амплитуды сигнала по истечении шага моделирования;

- *Sample time* (образец времени);

▪ задайте параметры блока **Step**: *Step time* – 1; *Initial value* – 0; *Final value* – 1; *Sample time* – 0;

▪ закройте окно *Block Parameters: Step*;

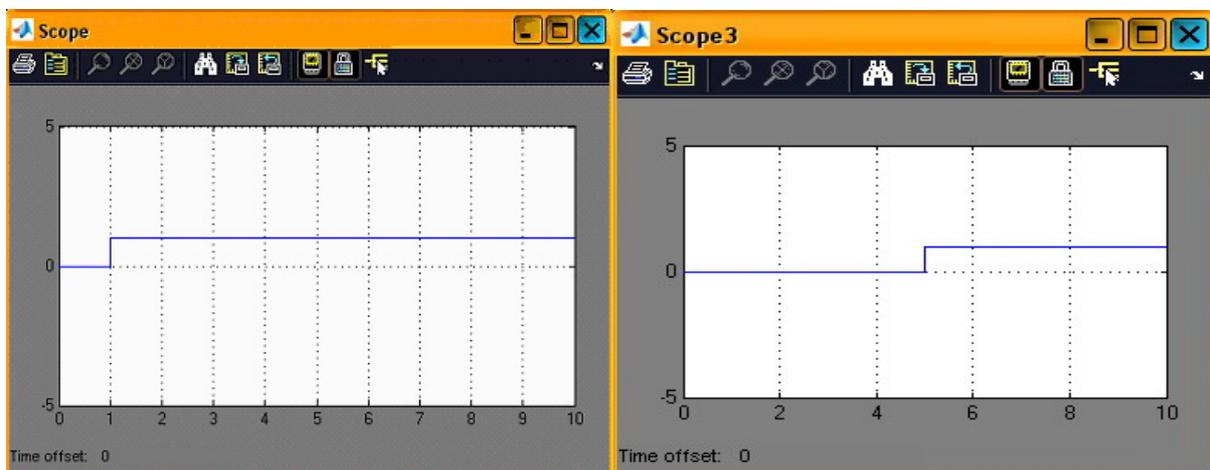
▪ двойным щелчком по блоку **Scope** ЛКМ откройте окно *Scope*;

▪ запустите выполнение модели, нажав на кнопку 13 панели инструментов окна блок-диаграммы (рис.2.1). Результат представлен на рис. 2.3, а.

4. Формирование единичной ступеньки в момент времени 5 с:

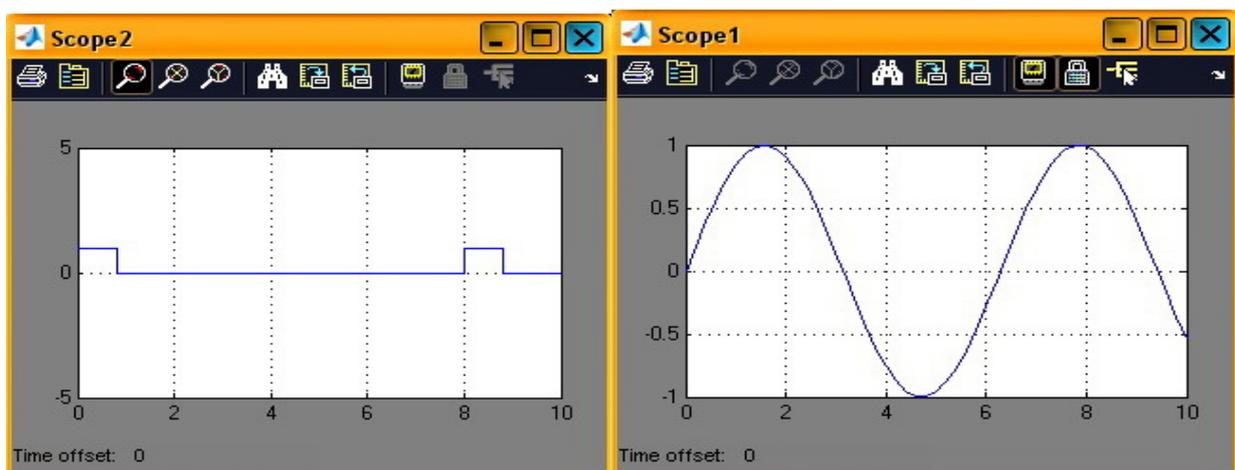
▪ повторите действия пункта 3, задав параметры блока **Step**: Step time – 5; Initial value – 0; Final value – 1; Sample time – 0. Результат представлен на рис. 2.3, б.

5. Формирование единичного импульса. «Перетащите» с помощью мыши блок **Pulse Generator** из раздела **Sources** и блок **Scope** из раздела **Sinks** в окно S-модели, соедините их. Задайте параметры блока **Pulse Generator**: Amplitude – 1; Period – 8; Pulse width (% of period) – 10; Phase delay – 0. Задание настроек таким образом позволяет получить импульсы с амплитудой 1, периодом 8 с и площадью импульса 0,8 с (см. рис. 2.3, в).



а

б



в

г

Рис. 2.3. Типовые сигналы системы: а – единичная ступенька в момент времени 1 с; б – единичная ступенька в момент времени 5 с; в – импульс площадью 1 с и с периодом 8 с; г – синусоидальный сигнал

6. Формирование синусоидального сигнала. «Перетащите» с помощью мыши блок **Sine Wave** из раздела **Sources** и блок **Scope** из раздела **Sinks** в окно S-модели, соедините их. Задайте параметры блока **Sine Wave**: Amplitude – 1; Bias – 0; Frequency (rad/sec) – 1; Phase – 0; Sample time – 0. Задание настроек таким образом позволяет получить синусоидальный сигнал с амплитудой 1 и частотой 1 рад/с (см. рис. 2.3, г).

Задание 2. Формирование постоянных значений: скаляр, вектор, матрица.

Технология выполнения задания.

1. «Перетащите» с помощью мыши блок **Constant** из раздела **Sources** и блок **Display** из раздела **Sinks** в окно S-модели.

2. Соедините, используя мышью, выход блока **Constant** с входом блока **Display**.

3. Формирование скаляра:

- двойным щелчком по блоку **Constant** ЛКМ откройте окно Block Parameters: Constant;
- задайте любое числовое значение, например 5;
- закройте окно Block Parameters: Constant;
- запустите выполнение модели, нажав на кнопку 13 панели инструментов окна блок-диаграммы (рис.2.1).

4. Формирование вектора:

- задайте вектор, например [5 6 7 8 9];
- после запуска выполнения модели на блоке **Display** в правом нижнем углу появится стрелка ▼, указывающая на необходимость увеличения окна. Щелкните ЛКМ по блоку и увеличьте размеры окна, потянув нажатой ЛКМ за один из углов блока (■).

5. Формирование матрицы:

- задайте матрицу 3×3 , например [5 6 7; 8 9 3; 3 4 5];
- после запуска выполнения модели на блоке **Display** в правом нижнем углу появится стрелка ►, указывающая на необходимость увеличения

окна. Щелкните ЛКМ по блоку и увеличьте размеры окна, потянув нажатой ЛКМ за один из углов блока (■).

Пример выполнения этого задания представлен на рис. 2.4.

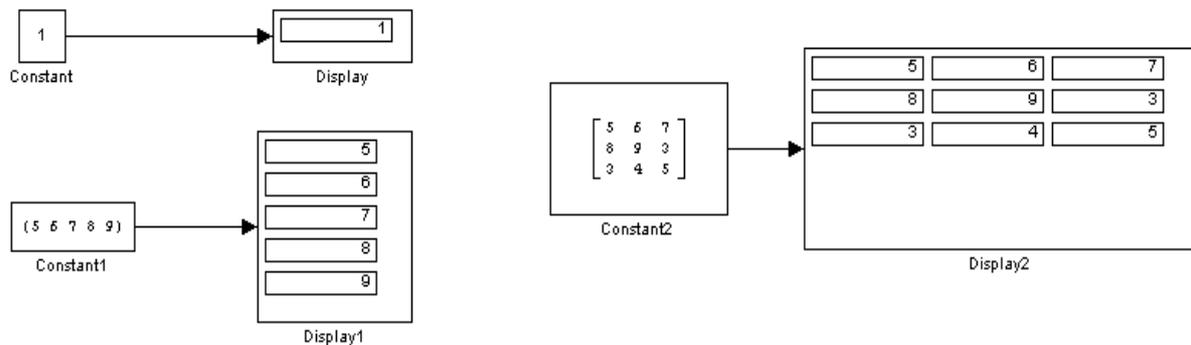


Рис. 2.4. Пример формирования скаляра, вектора и матрицы

Задание 3. Работа с блоком **Scope**. Представление данных в графическом виде.

Технология выполнения задания.

1. Вывод в различных экранах блока **Scope** нескольких графиков:

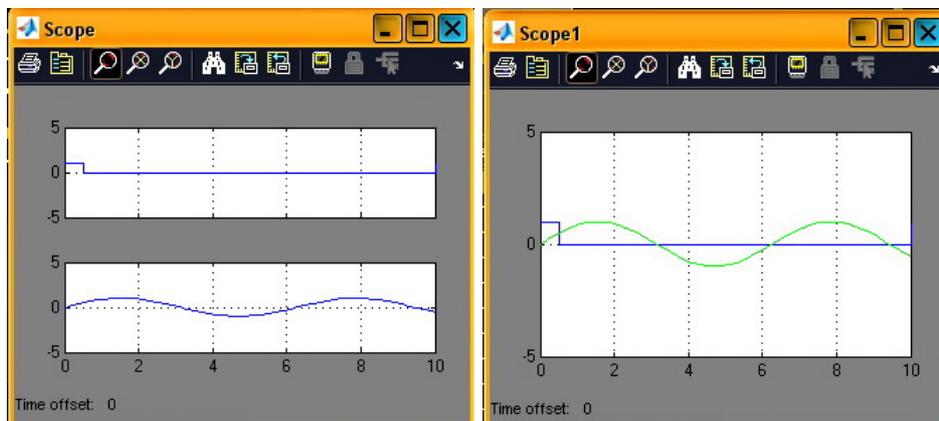
- «перетащите» блоки **Pulse Generator** и **Sine Wave** из раздела **Sources** и блок **Scope** из раздела **Sinks** в окно S-модели;
- двойным щелчком ЛКМ откройте окно блока **Scope**, нажмите иконку **Properties**, в появившемся окне установите количество отображаемых графиков **Number of axes – 2**, нажмите **Apply** и закройте окно;
- на блоке **Scope** появятся два входа, которые необходимо соединить с соответствующими источниками сигналов;

▪ запустите выполнение модели, результат представлен на рис. 2.5, а.

2. Вывод нескольких графиков на одном экране блока **Scope**:

- двойным щелчком ЛКМ откройте окно блока **Scope**, нажмите иконку **Properties**, в появившемся окне установите количество отображаемых графиков (**Number of axes**) равным 1, нажмите **Apply** и закройте окно;
- «перетащите» блок **Mux** из раздела **Signal Routing**;
- двойным щелчком ЛКМ откройте окно блока **Mux** и установите число входов (**Number of input**) равным 2, нажмите **Apply** и закройте окно;

- соедините выходы блоков-источников сигналов с входами блока **Mux**, а выход блока **Mux** с входом блока **Scope**;
- запустите модель, результат представлен на рис. 2.5, б.



а

б

Рис. 2.5. Вывод нескольких графиков в блоке Scope: а – в разных экранах; б – в одном экране

Задание 4. Решение простейших математических задач (раздел Math)

Технология выполнения задания.

1. Работа с блоком **Sign**: проверяет знак входного сигнала и формирует одно из 3-х значений: -1 – если входной сигнал < 0 ; 0 – если входной сигнал = 0; 1 – если входной сигнал > 0 :

- «перетащите» блок **Sign** из раздела **Math operations**, блок **Sine wave** из раздела **Source**, блок **Scope** из раздела **Sinks**;

- соедините блоки **Sine wave** – **Sign** – **Scope**;

- откройте окно блока **Scope** и запустите модель, сделайте выводы.

2. Выполнение арифметических действий. Найдите значение данного выражения $3+2-2+5$:

- «перетащите» 4 блока **Constant** из раздела **Sources**, блок **Sum** из раздела **Math operations** и блок **Display** из раздела **Sinks**;

- двойным щелчком ЛКМ откройте окно параметров каждого из блоков **Constant** и установите соответствующие значения констант;

- двойным щелчком ЛКМ откройте окно параметров блока **Sum**, измените свойство Icon shape (форма иконки) на rectangular (прямоугольник), введите в поле List of signs (список знаков) последовательность + + - +, отражающую последовательность арифметических операций в выражении, нажмите кнопку Apply и закройте окно параметров;

- измените размеры блока **Sum**, если необходимо;
- соедините выход блока **Constant** с входом блока **Sum**, отмеченным соответствующим знаком;
- соедините выход блока **Sum** с входом блока **Display**;
- запустите модель, на экране блока **Display** появится результат выражения = 8.

3. Выполнение операции умножения и деления. Для выполнения этого задания Вам понадобятся блоки **Product** и **Gain** из раздела **Math operations**.

Блок **Product** имеет два параметра: число входов (Number of inputs) и умножение (Multiplication). Параметр Number of inputs может иметь числовое значение (только для операции умножения), либо последовательность знаков умножения и деления (например * * / *). Параметр Multiplication может принимать только два значения: Element-wise (операции со скалярными значениями) или Matrix (операции с матрицами).

Блок **Gain** имеет два параметра: множитель (Gain) и умножение (Multiplication). Параметр Gain задает постоянный множитель, на который будет умножаться входной сигнал. Параметр Multiplication может принимать только три значения: Element-wise ($K \cdot u$) (умножение на скалярную величину), Matrix ($K \cdot u$) (умножение постоянного множителя на матрицу) и Matrix ($u \cdot K$) (умножение матрицы на постоянный множитель).

4. Отыскание корней алгебраических уравнений. Пусть необходимо решить уравнение вида $5x - 6 = 0$:

- «перетащите» в окно S-модели следующие блоки: **Constant**, **Sum**, **Display**, **Gain** и **Algebraic constraint** из раздела **Math operations**;

- установите на блоке **Constant** значение: 6; на блоке **Gain** значение: 5; на блоке **Sum** параметры: rectangular и + -;
- соедините выход блока **Constant** с входом **Sum**, отмеченным знаком «-»;
- соедините выход блока **Sum** с входом **Algebraic constraint**;
- соедините выход блока **Algebraic constraint** с входом блока **Sum**, отмеченным знаком «+»;
- поместите блок **Gain** на линию соединения выхода блока **Algebraic constraint** с входом блока **Sum** (блок автоматически встроится в линию связи);
- соедините выход блока **Algebraic constraint** с входом блока **Display**;
- запустите модель.

Пример выполнения этого задания представлен на рис. 2.6.

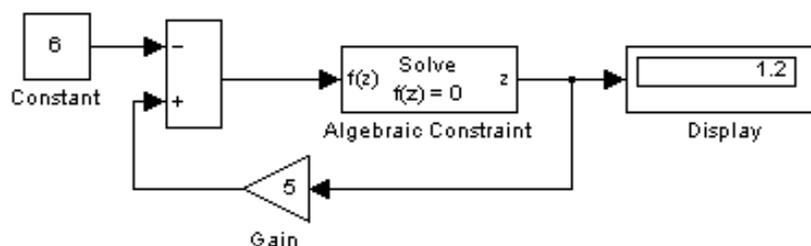


Рис. 2.6. Пример S-модели решения алгебраического уравнения

5. Решение систем алгебраических уравнений производится аналогично, необходимо только сформировать столько конструктивных линий, как это сделано в пункте 4, сколько уравнений содержится в системе (см. рис. 2.7). Если количество уравнений, входящих в систему, больше двух, то S-модель, построенная таким образом, становится громоздкой и ненаглядной. В этом случае лучше использовать блок **Fcn** из раздела User-Defined Functions. В этот блок вводятся левые части уравнений (см. рис. 2.8, а). В качестве переменной используйте переменную *u*, если таких переменных несколько, то они различаются индексами: *u*[1], *u*[2], и т.п. Можно записать любое математическое

выражение в виде, допустимом для процедурных языков программирования, например: $\sin(u)$; $\exp(-u[1])*u[2]^2-3.5*u[3]$.

Поскольку MATLAB отлично справляется с векторной алгеброй, самым простым и очевидным решением будет матричный способ, реализующий аналитическое решение (см. рис. 2.8, б).

На рис. 2.7, 2.8 представлено решение системы уравнений:

$$\begin{cases} x - y + 5 = 0, \\ x + y + 7 = 0 \end{cases}$$

тремя различными способами.

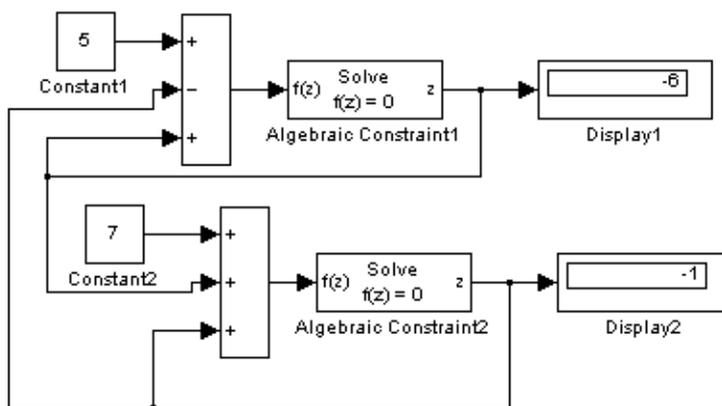


Рис. 2.7. Пример S-модели решения системы алгебраических уравнений

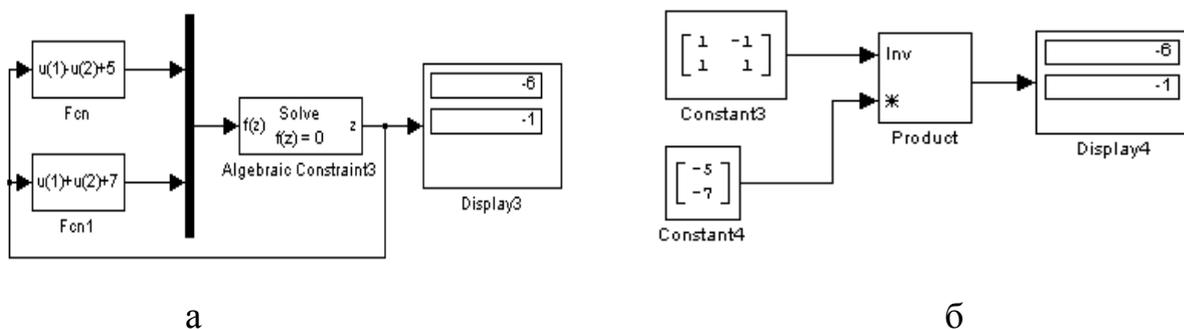


Рис. 2.8. Пример решения системы алгебраических уравнений:

а – с использованием блока Fcn; б – матричным способом

6. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). В качестве примера решим уравнение $\frac{dy}{dt} = 1,1 \sin(y) + 1$, с начальным условием $y(0)=0$. Для решения дифференциальных уравнений используется блок **Inte**

grator из раздела Continuous. В нём нас интересует пока только один параметр: Initial condition (начальное условие). Если таких условий несколько (в случае системы ОДУ), они записываются через пробел в квадратных скобках, например: [1.5 0 0]. Пример S-модели, реализующей решение ОДУ, представлен на рис. 2.9. Результатом решения будет график функции, изображенный на рис. 2.9.

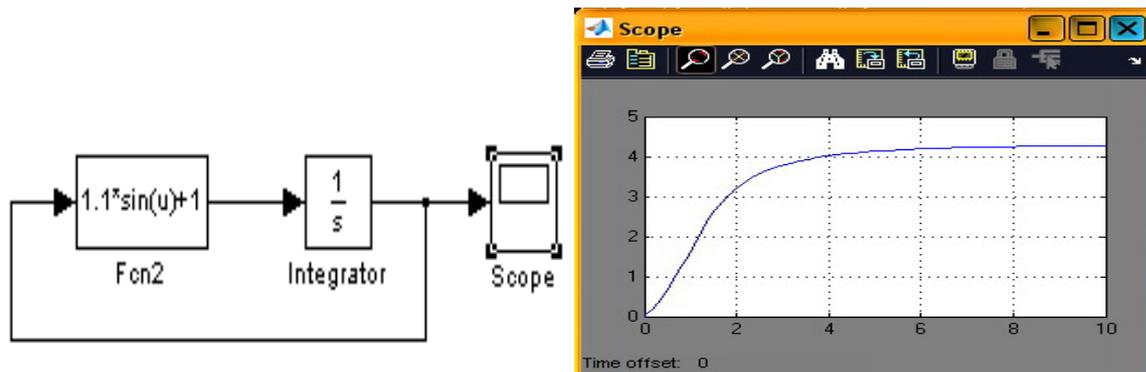
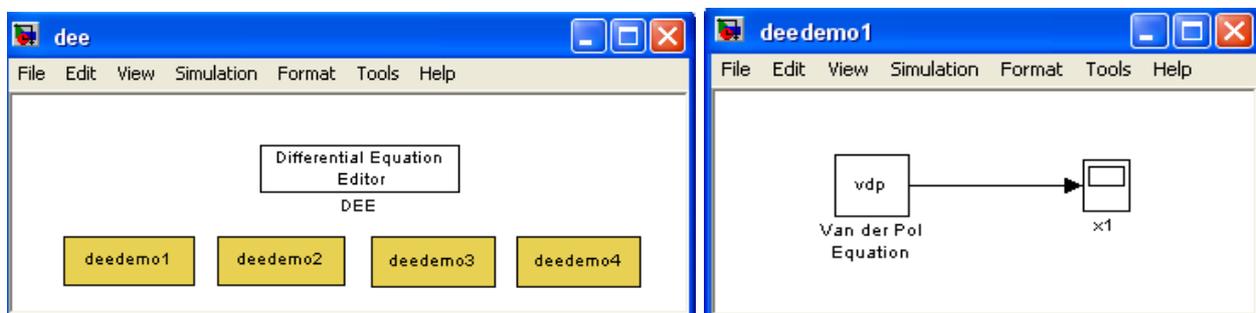


Рис. 2.9. S-модель решения ОДУ и результат решения в виде графика функции

Для решения обыкновенных дифференциальных уравнений и их систем в MATLAB имеется специальный редактор дифференциальных уравнений. Редактор отсутствует среди библиотеки блоков Simulink. Для вызова редактора необходимо в командной строке MATLAB набрать команду: `dee`. В результате появится окно, содержащее четыре примера (см. рис. 2.10, а). Необходимо выбрать любой из примеров и открыть его. Откроется обычная S-модель, как показано на рис. 2.10, б.



а

б

Рис. 2.10. Редактор дифференциальных уравнений: а – главное меню; б – S-модель

Перетащите левый блок (это и есть редактор) на свою модель и откройте редактор для изменения параметров в соответствии с вашими потребностями.

Поля редактора имеют следующие значения:

Name – наименования блока;

of inputs – количество входов (по умолчанию 0);

dx/dt – собственно дифференциальные уравнения первого порядка;

x_0 – начальные значения переменных уравнения;

y – выходные значения (результат).

Задания к лабораторной работе

1. Решить систему линейных уравнений (см. табл. 2.1) двумя способами:
а) аналитическим методом $AX = B$ (где A и B – соответственно матрица коэффициентов при неизвестных и вектор свободных членов системы);

б) методом последовательных приближений $AX - B = 0$ (с использованием блоков **Fcn** и с использованием блоков **Constant**, **Sum**, **Product** или **Gain** и одного блока **Algebraic constraint**).

2. Решить систему ОДУ (см. табл. 2.2) для начальных условий:
 $y_1(0) = 2$; $y_2(0) = 4$; $y_3(0) = 0$. Решение осуществить двумя способами:

а) построением S-модели с помощью блоков **Fcn** и **Integrator**;
б) с использованием специального редактора дифференциальных уравнений MATLAB.

Отчет по выполненной работе должен содержать:

1. Постановку задачи и цель работы.
2. Схему S-модели решения системы алгебраических уравнений аналитическим методом.
3. Схему S-модели решения системы алгебраических уравнений методом последовательных приближений.
4. Схему S-модели решения системы ОДУ методом последовательных приближений.

5. Схему S-модели решения системы ОДУ с использованием встроенного редактора решения дифференциальных уравнений MATLAB.

6. Выводы.

Таблица 2.1

Вариант	Система линейных уравнений	Вариант	Система линейных уравнений
1	$\begin{cases} 2,7x_1 + 14,9x_2 + 1,3x_3 = 2,1 \\ 1,3x_1 + 2,8x_2 - 9,3x_3 = 1,7 \\ 15,8x_1 + 4,1x_2 - 1,7x_3 = 0,8 \end{cases}$	11	$\begin{cases} 0,49x_1 + 0,67x_2 + 12,3x_3 = -7,1 \\ 0,3x_1 + 10,5x_2 - 1,4x_3 = 3,12 \\ 10,8x_1 + 1,89x_2 - 1,3x_3 = 1,39 \end{cases}$
2	$\begin{cases} 0,34x_1 - 7,9x_2 + 0,3x_3 = -4,1 \\ 11,3x_1 + 2,8x_2 - 1,3x_3 = 0,7 \\ 1,8x_1 + 2,4x_2 + 7,7x_3 = 0,48 \end{cases}$	12	$\begin{cases} 2,06x_1 + 14,9x_2 - 1,3x_3 = 2,11 \\ 17,3x_1 - 6,8x_2 + 2,3x_3 = 3,5 \\ 0,8x_1 - 4,1x_2 - 22,4x_3 = 7,8 \end{cases}$
3	$\begin{cases} -1,56x_1 + 1,9x_2 + 12,3x_3 = 4,1 \\ 6,3x_1 + 0,8x_2 - 0,3x_3 = -21,2 \\ 0,28x_1 + 8,1x_2 - 1,2x_3 = 3,8 \end{cases}$	13	$\begin{cases} 5,6x_1 - 0,9x_2 - 15,3x_3 = 1,1 \\ 12,3x_1 - 2,8x_2 - 5,22x_3 = 3,1 \\ -3,8x_1 + 21,2x_2 - 1,24x_3 = 5,8 \end{cases}$
4	$\begin{cases} 2,66x_1 + 0,9x_2 + 15,3x_3 = 7,1 \\ 1,3x_1 + 22,8x_2 + 3,3x_3 = 6,89 \\ 15,8x_1 - 4,1x_2 - 1,7x_3 = 2,8 \end{cases}$	14	$\begin{cases} 10,56x_1 - 1,4x_2 + 1,13x_3 = 2,167 \\ -1,3x_1 + 0,8x_2 + 9,9x_3 = -3,89 \\ 0,128x_1 - 3,1x_2 - 0,2x_3 = 0,8 \end{cases}$
5	$\begin{cases} 0,454x_1 + 9,67x_2 + 2,3x_3 = 2,167 \\ 1,3x_1 + 0,8x_2 - 9,4x_3 = 3,789 \\ 13,8x_1 + 2,1x_2 - 1,7x_3 = 1,845 \end{cases}$	15	$\begin{cases} 21,6x_1 - 4,9x_2 + 1,3x_3 = 25,1 \\ 1,3x_1 + 2,5x_2 + 19,4x_3 = 1,55 \\ 5,8x_1 + 24,1x_2 - 1,9x_3 = 2,56 \end{cases}$
6	$\begin{cases} 2,56x_1 - 4,9x_2 - 18,3x_3 = 21,1 \\ 21,3x_1 - 2,8x_2 - 5,3x_3 = 31,8 \\ 4,8x_1 + 41,1x_2 - 2,24x_3 = 9,8 \end{cases}$	16	$\begin{cases} 2,22x_1 - 12,6x_2 + 4,2x_3 = 5,1 \\ 9,3x_1 - 2,8x_2 - x_3 = 3,11 \\ 5,8x_1 + 4,12x_2 - 9,7x_3 = -0,8 \end{cases}$
7	$\begin{cases} 2,23x_1 + 14,8x_2 + 1,3x_3 = 7,1 \\ 1,35x_1 - 2,82x_2 - 19,3x_3 = 7 \\ 17,5x_1 + 4,1x_2 - 1,7x_3 = 6,8 \end{cases}$	17	$\begin{cases} 4,43x_1 + 7,8x_2 - 2,5x_3 = 15 \\ 6,3x_1 + 2,7x_2 - 5,5x_3 = 11,1 \\ 1,35x_1 - 3,7x_2 + 5,85x_3 = 6 \end{cases}$
8	$\begin{cases} 5,4x_1 - 11,8x_2 + 1,3x_3 = -12,1 \\ 1,3x_1 + 0,8x_2 - 9,3x_3 = 13,8 \\ 11,3x_1 - 4,1x_2 - 1,7x_3 = 10,85 \end{cases}$	18	$\begin{cases} 1,8x_1 + 3,8x_2 - 7,75x_3 = 10,34 \\ 2,3x_1 + 4,2x_2 - 5,6x_3 = 17,3 \\ 13x_1 - 7,5x_2 - x_3 = 8 \end{cases}$
9	$\begin{cases} 0,34x_1 - 0,9x_2 + 9,3x_3 = -13,1 \\ 13,2x_1 + 2,8x_2 - 1,3x_3 = 0,999 \\ 1,2x_1 + 7,4x_2 + 0,7x_3 = 0,482 \end{cases}$	19	$\begin{cases} 7,3x_1 - x_2 + 3,7x_3 = -5,5 \\ x_1 - x_2 - 15,3\delta_3 = 6 \\ 18,5x_1 - 5x_2 - 3,8x_3 = 2,2 \end{cases}$
10	$\begin{cases} 3,6x_1 + 1,9x_2 - 13,3x_3 = 6,1 \\ 1,3x_1 - 12,8x_2 + 2,3x_3 = 4,89 \\ 10,8x_1 - 4,1x_2 + 1,7x_3 = 2,34 \end{cases}$	20	$\begin{cases} 1,8x_1 + 8,4x_2 - 0,75x_3 = 5,3 \\ 2,5x_1 + x_2 - 3,83\delta_3 = 14,1 \\ 0,58x_1 + 4,76x_2 + 0,1x_3 = 7,7 \end{cases}$

Таблица 2.2

Вариант	Система ОДУ	Вариант	Система ОДУ
1	$\begin{cases} dy_1/dt = -0,8y_1y_2 + 0,4y_3 \\ dy_2/dt = -0,8y_1y_2^2 + 0,8y_3 \\ dy_3/dt = 0,6y_1y_2 - 0,4y_3 \end{cases}$	11	$\begin{cases} dy_1/dt = 3y_1 - 2y_2 - y_3 \\ dy_2/dt = 3y_1 - 4y_2 - 3y_3 \\ dy_3/dt = 2y_1 - 4y_2 \end{cases}$
2	$\begin{cases} dy_1/dt = 3y_1 - y_2 + y_3 \\ dy_2/dt = y_1 + y_2 + y_3 \\ dy_3/dt = 4y_1 - y_2 + 4y_3 \end{cases}$	12	$\begin{cases} dy_1/dt = -4y_1^2 + y_2^2 \\ dy_2/dt = 4y_2 - 8 \end{cases}$
3	$\begin{cases} dy_1/dt = y_1 - 2y_2 - 2y_3 \\ dy_2/dt = y_1 - 2y_2 + 2y_3 \\ dy_3/dt = 3y_1 - 3y_2 + 5y_3 \end{cases}$	13	$\begin{cases} dy_1/dt = 2 - y_1^2 + y_2 \\ dy_2/dt = 2y_1(y_1 - y_2) \end{cases}$
4	$\begin{cases} dy_1/dt = 2y_1 + y_2^2 - 1 \\ dy_2/dt = 6y_1 - y_2^2 + 1 \end{cases}$	14	$\begin{cases} dy_1/dt = \ln(2 - y_2) \\ dy_2/dt = e^{y_1} - e^{y_2} \end{cases}$
5	$\begin{cases} dy_1/dt = 4 - 4y_1 - 2y_2 \\ dy_2/dt = y_1y_2 \end{cases}$	15	$\begin{cases} dy_1/dt = 2y_1 - y_2 - y_3 \\ dy_2/dt = 2y_1 - y_2 - 2y_3 \\ dy_3/dt = -y_1 + y_2 + 2y_3 \end{cases}$
6	$\begin{cases} dy_1/dt = y_1^2 + y_2^2 - 6y_1 - 8y_2 \\ dy_2/dt = 9 - (y_1 - 2y_2)^2 \end{cases}$	16	$\begin{cases} dy_1/dt = y_1^3 - y_2 \\ dy_2/dt = y_1 + y_2^3 \end{cases}$
7	$\begin{cases} \frac{dy_1}{dt} = \ln\left(\frac{y_2^2 - y_2 + 1}{3}\right) \\ dy_2/dt = y_1^2 - y_2^2 \end{cases}$	17	$\begin{cases} dy_1/dt = 4y_1 - 3y_2 - y_3 \\ dy_2/dt = 6y_1 - y_2 - 3y_3 \\ dy_3/dt = -2y_1 + 5y_2 + 2y_3 \end{cases}$
8	$\begin{cases} dy_1/dt = -y_1 + y_2 + y_1y_2 \\ dy_2/dt = -y_1^2 - y_2^3 + y_1 - y_2 \end{cases}$	18	$\begin{cases} dy_1/dt = 2y_1 - y_2 - y_3 \\ dy_2/dt = y_1 + 2y_3 \\ dy_3/dt = y_1 - 2y_2 - y_3 \end{cases}$
9	$\begin{cases} dy_1/dt = 2y_1 - y_2 + y_3 \\ dy_2/dt = y_1 + 2y_2 - y_3 \\ dy_3/dt = y_1 - y_2 + 2y_3 \end{cases}$	19	$\begin{cases} dy_1/dt = y_1^2 + 2y_2^2 - 3y_1 + y_2 \\ dy_2/dt = 8 - (y_1 + y_2)^2 \end{cases}$
10	$\begin{cases} dy_1/dt = 2y_1 - y_2 - y_3 \\ dy_2/dt = y_1 + 2y_3 \\ dy_3/dt = y_1 - 2y_2 - y_3 \end{cases}$	20	$\begin{cases} dy_1/dt = y_1 - 3y_2 + 2y_3 \\ dy_2/dt = -y_1 + y_2 - 4y_3 \\ dy_3/dt = y_1 - 0,5y_2 + 2y_3 \end{cases}$

Контрольные вопросы

1. От какого словосочетания происходит название пакета MATLAB?
2. Что такое toolboxes MATLAB?
3. Назначение Simulink.
4. Какая информация содержится в файлах с расширением .mdl?
5. Какая информация содержится в файлах с расширением .m?
6. Какая информация содержится в файлах с расширением .mat?
7. Опишите технологию создания S-модели.
8. По какому принципу формируется библиотека Simulink?
9. Как осуществляется навигация по разделам библиотеки?
10. Каково правило соединения блоков информационными потоками?
11. Каким образом выполняется настройка параметров блоков?
12. Каково назначение блока Mux?
13. Назовите назначение и параметры блока Puls Generator.
14. Каково назначение блока Gain?
15. Каково назначение блока Algebraic Constraint?
16. Как осуществить вывод нескольких графиков на один экран Scope?
17. С помощью каких блоков можно получить аналитическое решение системы линейных алгебраических уравнений?
18. С помощью каких блоков можно получить решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ)?
19. Как задаются начальные условия для решения ОДУ в модели?
20. Каким образом устанавливается время моделирования в Simulink?

Лабораторная работа №3

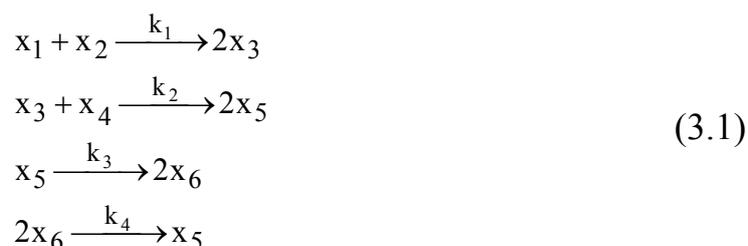
Математическое моделирование сложной химической реакции

Цель работы: 1) составить математическое описание сложной химической реакции и выполнить моделирование её с помощью программы MATLAB; 2) на основе принципов системного анализа построить математическое описание гомогенных реакторов: идеального вытеснения, идеального смешения и каскада реакторов идеального смешения, в которых протекает сложная химическая реакция с заданным механизмом. Выполнить программную реализацию в виде S-моделей и по результатам моделирования рекомендовать наиболее эффективный реактор.

Математическое описание и моделирование химической реакции

Изменение концентраций реагентов в ходе реакции определяется кинетикой химической реакции. Если механизм химической реакции известен, то математическое описание кинетики можно представить в матричной форме. Процедура составления математического описания в матричной форме достаточно хорошо формализована. Рассмотрим ее на конкретном примере.

Пусть дана химическая реакция, протекающая по следующей схеме:



Мы видим, что реакция протекает в четыре стадии, в ней участвуют шесть компонентов. Представим схему реакций в матричной форме:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1m} \\ \vdots & a_{ij} & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nm} \end{bmatrix},\tag{3.2}$$

где a_{ij} – стехиометрический коэффициент перед компонентом реакции; i – номер вещества; j – номер стадии реакции.

Стехиометрический коэффициент входит в матрицу со знаком «-», если он стоит перед реагентом, и со знаком «+», если он стоит перед продуктом реакции. Для нашей реакции получим следующую матрицу стехиометрических коэффициентов:

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & -2 \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

Матрицу следует заполнять построчно. Первая строка характеризует первый компонент реакции. В нашем случае он участвует только на первой стадии реакции, причем как реагент, поэтому стехиометрический коэффициент при нем берется со знаком минус. На второй, третьей и четвертой стадиях первого компонента нет, поэтому стехиометрические коэффициенты при нем на этих стадиях принимаем равными нулю. Аналогично заполняем строку матрицы для второго компонента реакции. Третий компонент реакции является продуктом на первой стадии (коэффициент +2) и реагентом на второй стадии (коэффициент -1), на третьей и четвертой стадиях он не участвует (ставим нули).

Далее составляем вектор скоростей отдельных стадий химической реакции \bar{r} . Элементы вектора r_j находятся по формуле:

$$r_j = k_j \prod_{i=1}^n C_i^{|a_{ij}|}, \quad (3.4)$$

где k_j – константа скорости j -й стадии; C_i – концентрация i -го исходного вещества.

Для нашей реакции получим следующий вектор скоростей стадий реакции:

$$\bar{r} = \begin{bmatrix} k_1 C_1 C_2 \\ k_2 C_3 C_4 \\ k_3 C_5 \\ k_4 C_6^2 \end{bmatrix}. \quad (3.5)$$

Вектор скоростей по компонентам находится путем перемножения матрицы стехиометрических коэффициентов и вектора скоростей отдельных стадий реакции:

$$\bar{w} = \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_j \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1m} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nm} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_j \\ \vdots \\ r_m \end{bmatrix}. \quad (3.6)$$

Для нашего примера получим:

$$\bar{w} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & -2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} k_1 C_1 C_2 \\ k_2 C_3 C_4 \\ k_3 C_5 \\ k_4 C_6^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k_1 C_1 C_2 \\ -k_1 C_1 C_2 \\ 2k_1 C_1 C_2 - k_2 C_3 C_4 \\ -k_2 C_3 C_4 \\ 2k_2 C_3 C_4 - k_3 C_5 + k_4 C_6^2 \\ 2k_3 C_5 - 2k_4 C_6^2 \end{bmatrix}. \quad (3.7)$$

Материальный баланс по веществу в единичном объёме для бесконечно малого промежутка времени запишется:

$$dC_i = w_i dt, \Rightarrow \frac{dC_i}{dt} = w_i. \quad (3.8)$$

Таким образом, математическое описание реакции представляет собой систему ОДУ:

$$\begin{cases} \frac{dC_1}{dt} = -k_1 C_1 C_2, \\ \frac{dC_2}{dt} = -k_1 C_1 C_2, \\ \frac{dC_3}{dt} = 2k_1 C_1 C_2 - k_2 C_3 C_4, \\ \frac{dC_4}{dt} = -k_2 C_3 C_4, \\ \frac{dC_5}{dt} = k_2 C_3 C_4 - k_3 C_5 + k_4 C_6^2, \\ \frac{dC_6}{dt} = k_3 C_5 - k_4 C_6^2. \end{cases} \quad (3.9)$$

Для решения этой системы уравнений необходимо задать начальные условия: $C_1^0, C_2^0, C_3^0, C_4^0, C_5^0, C_6^0$.

Моделирование сложной химической реакции удобно реализовать в системе визуального моделирования Simulink, которая входит в состав математического пакета MATLAB. Решение поставленной задачи в Simulink осуществляется в соответствии с технологией, рассмотренной в лабораторной работе №2. За основу может быть принята S-модель решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Элементы вектора можно вычислить с помощью блоков **Fcn** (например, для решения системы (3.9) таких блоков будет 4), а объединить их в вектор - с помощью мультиплексора (см. рис. 3.1). Для ввода матрицы стехиометрических коэффициентов и вектора скоростей стадий химической реакции следует использовать блоки **Constant**. Для перемножения матриц и векторов используют блок **Product**, параметру Multiplication которого задается значение «Element-wise» для перемножения вектора и матрицы и «Matrix» для перемножения двух матриц.

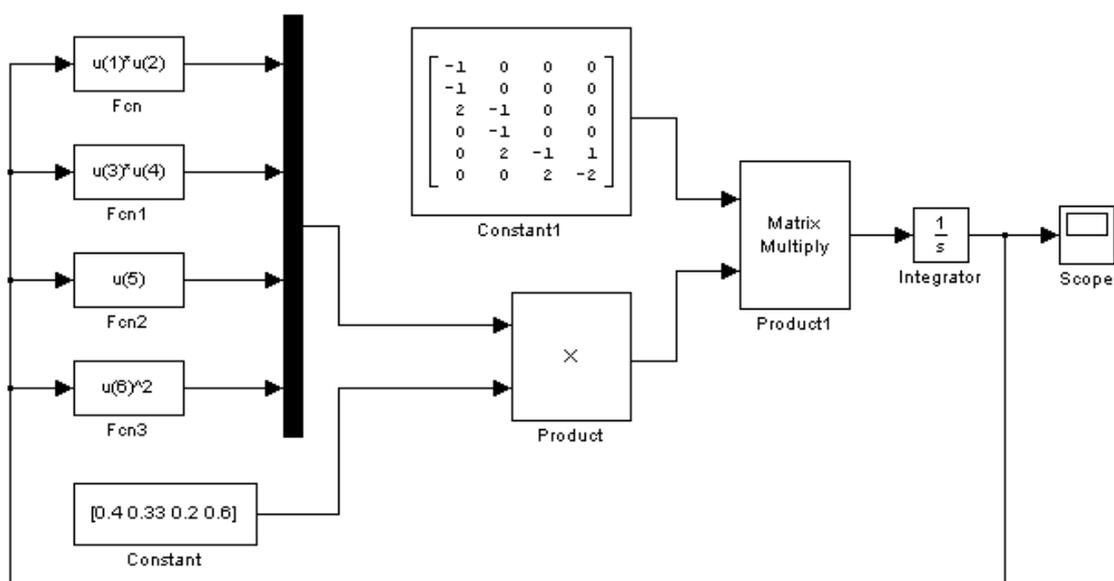


Рис. 3.1. S-модель химической реакции

Математическое описание и моделирование химического реактора и каскада реакторов

Реактор осуществляет преобразование исходных реагентов на входе в продукты химической реакции на выходе. В гомогенном реакторе все компоненты находятся в одной фазе (жидкость, газ).

Математическое описание гомогенного химического реактора строится на основе принципов системного анализа. Реактор можно представить как систему, элементами которой являются отдельные физико-химические процессы, т.е. как физико-химическую систему (ФХС). Системный анализ как метод исследования сложных систем предполагает последовательный переход от общего к частному, исследование частного и объединение в целое. Таким образом, системный анализ представляет собой сочетание двух процедур: декомпозиции и агрегирования. Выполним декомпозицию (анализ) ФХС (см. рис. 3.2). Каждую из подсистем рассмотрим как систему более низкого уровня по отношению к системе «Реактор».



Рис. 3.2. Декомпозиция ФХС «Реактор»

Подсистему «химическая реакция» можно рассмотреть как систему, в которой происходят взаимодействия между компонентами на уровне молекул. Элементы системы – компоненты, участвующие в реакции, а связь между компонентами определяется механизмом химической реакции. Количественной характеристикой элементов системы или параметрами системы являются концентрации компонентов, а параметрами, характеризующими связи – константы скорости реакций. Изменение концентраций реагентов в ходе реакции определяется кинетикой химической реакции. Математическое описание подсистемы «Химическая реакция» было рассмотрено выше.

Подсистему «движение потока» или «гидродинамика» можно рассмотреть как систему, в которой происходит движение частиц потока жидкости или газа, причем частицы имеют различную скорость и траекторию движе-

ния, изменяющиеся случайным образом. Частицы потока – это элементы системы. Для разработки математического описания этой системы принимают допущение о структуре потоков в реакторе и выбирают типовую модель гидродинамики.

Типовые модели гидродинамики представляют собой некоторую идеализацию реального процесса. Модель идеального вытеснения предполагает, что все элементы потока движутся с одинаковой скоростью и имеют одинаковое время пребывания. Математическое описание движения такого потока, полученное из материального баланса по компоненту реакции для элементарного участка аппарата длиной dx , имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -U \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (3.10)$$

где C – концентрация компонента реакции; τ – текущее время; x – координата по длине реактора; U – линейная скорость потока.

Модель идеального смешения предполагает, что поток, поступающий в аппарат, мгновенно перемешивается, вследствие чего концентрация компонента реакции во всём объёме аппарата одинакова и равна концентрации на выходе. Математическое описание движения такого потока, полученное из материального баланса для аппарата в целом, имеет следующий вид:

$$\frac{dC}{d\tau} = \frac{1}{\tau_{\text{преб}}} (C_{\text{вх}} - C), \quad (3.11)$$

где $\tau_{\text{преб}}$ – среднее время пребывания потока в аппарате, определяемое как отношение объёма аппарата к объёмной скорости потока; $C_{\text{вх}}$ – концентрация компонента реакции на входе в аппарат.

Следует отметить, что модели гидродинамики (3.10) и (3.11) являются динамическими, т.к. описывают нестационарный процесс изменения концентрации компонента реакции при нанесении возмущения.

Математическое описание реактора в целом строится на основе агрегирования (синтеза) математических описаний подсистем. Для разработки математического описания реактора идеального вытеснения (РИВ) необходимо

на основе модели гидродинамики (3.10) составить материальный баланс по всем компонентам, участвующим в химической реакции с учётом кинетических закономерностей (3.6).

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = -U \frac{\partial C_i}{\partial x} + W_i, \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (3.12)$$

В стационарных условиях работы реактора $\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = 0$. С учётом того, что $dx/U = \tau$ (τ - текущее время пребывания в реакторе), систему уравнений (3.12) можно представить в виде:

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = W_i, \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (3.13)$$

Таким образом, математическое описание РИВ полностью совпадает с математическим описанием химической реакции, рассмотренным выше.

Результатом решения системы уравнений математического описания РИВ являются профили концентраций по времени пребывания (по длине реактора).

Для разработки математического описания реактора идеального смешения (РИС) необходимо также составить материальный баланс по всем компонентам, участвующим в химической реакции с учётом кинетических закономерностей (3.6), но на основе модели гидродинамики (3.11).

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{1}{\tau_{\text{преб}}} (C_{\text{вх},i} - C_i) + W_i, \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (3.14)$$

Если заменить W_i в правой части системы (3.14) выражением (3.6), то математическое описание РИС в нестационарных условиях в матричной форме примет вид:

$$\left[\frac{dC_i}{d\tau} \right] = \frac{1}{\tau_{\text{преб}}} [C_{\text{вх},i} - C_i] + [a_{ij}] [r_j], \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (3.15)$$

Начальными условиями для решения системы (3.15) будут концентрации всех компонентов в реакторе в начальный момент времени (C_i^0):

$$\tau=0, C_i = C_i^0, \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (3.16)$$

Если принять, что в РИС протекает реакция (3.1), то математическое описание РИС примет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_1}{dt} = \frac{1}{\tau_{\text{преб}}} (C_{\text{вх},1} - C_1) - k_1 C_1 C_2 \\ \frac{dC_2}{dt} = \frac{1}{\tau_{\text{преб}}} (C_{\text{вх},2} - C_2) - k_1 C_1 C_2 \\ \frac{dC_3}{dt} = \frac{1}{\tau_{\text{преб}}} (C_{\text{вх},3} - C_3) + 2k_1 C_1 C_2 - k_2 C_3 C_4 \\ \frac{dC_4}{dt} = \frac{1}{\tau_{\text{преб}}} (C_{\text{вх},4} - C_4) - k_2 C_3 C_4 \\ \frac{dC_5}{dt} = \frac{1}{\tau_{\text{преб}}} (C_{\text{вх},5} - C_5) + k_2 C_3 C_4 - k_3 C_5 + k_4 C_6^2 \\ \frac{dC_6}{dt} = \frac{1}{\tau_{\text{преб}}} (C_{\text{вх},6} - C_6) + k_3 C_5 - k_4 C_6^2 \end{array} \right. \quad (3.17)$$

с начальными условиями (3.16).

Решением математического описания РИС является изменение концентраций компонентов в реакторе с течением времени. Моделирование процесса пуска реактора позволяет определить время выхода реактора на стационарный режим (время переходного процесса) и концентрации на выходе из реактора в стационарном режиме. В стационарном режиме концентрации всех реагентов постоянны, т.е. не зависят от времени.

Каскад реакторов представляет собой последовательно соединённые реакторы одного типа. Вход в каскад является входом в первый реактор, выход из последнего реактора является выходом из каскада. Выход из любого предыдущего (k-1)-го реактора является входом для последующего k-го реактора. Математическое описание каскада химических реакторов идеального смешения (КРИС) в нестационарных условиях представляет собой совокупность моделей РИС. Для любого k-го реактора КРИС математическое описание имеет вид:

$$\left[\frac{dC_i^k}{d\tau} \right] = \frac{1}{\tau_k} [C_i^{k-1} - C_i^k] + [a_{ij}][r_j], \quad i=1, 2, \dots, n, \quad k=1, 2, \dots, m, \quad (3.18)$$

где k – текущий номер реактора; τ_k – время пребывания в k -ом реакторе; m – число реакторов в каскаде.

При $k=1$ $C_i^{k-1} = C_{\text{вх},i}$. Начальными условиями для решения системы (3.18) будут концентрации всех компонентов во всех реакторах каскада в начальный момент времени (C_{0i}^k):

$$\tau=0, C_i^k = C_{0i}^k, i=1, 2, \dots, n, \quad k=1, 2, \dots, m. \quad (3.19)$$

Решением математического описания КРИС является изменение концентраций компонентов в реакторах каскада с течением времени. Моделирование процесса пуска позволяет определить время выхода КРИС на стационарный режим (время переходного процесса) и концентрации в реакторах и на выходе из каскада в стационарном режиме.

S-модель реактора идеального смешения строится на базе модели химической реакции (рис. 3.3). Блоки, моделирующие химическую реакцию, целесообразно объединить в подсистему. Для выделения части S-модели в подсистему необходимо с помощью мыши обрисовать общим контуром выделяемые блоки, затем в меню команды Edit выбрать Create subsystem.

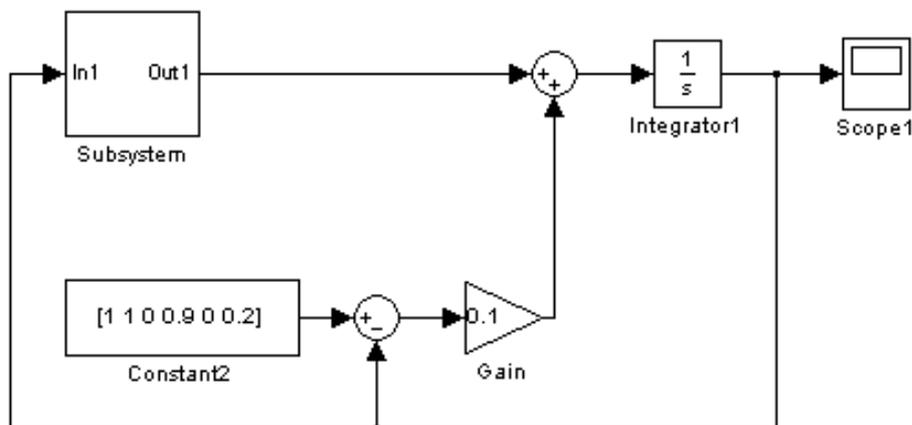


Рис. 3.3. S-модель реактора идеального смешения

Входные значения концентраций компонентов реакции вводятся в блоке **Constant**. Для суммирования или вычитания векторов используются блоки **Sum**. Умножение разности концентраций на величину $1/\tau_{\text{преб}}$ осуществляется в блоке **Gain**. В нашем примере $\tau_{\text{преб}} = 10$ мин.

При составлении S-модели КРИС можно оформить S-модель РИС в виде подсистемы: вход подсистемы (блок In) устанавливается на информационном потоке входной концентрации, выход (блок Out) – на информационном потоке выходной концентрации. Тогда S-модель КРИС можно представить как последовательное соединение подсистем (рис. 3.4). Очевидно, что число подсистем равно числу реакторов в каскаде. На вход первой подсистемы подаются входные концентрации, на выходе последней подсистемы снимаются концентрации на выходе из каскада.

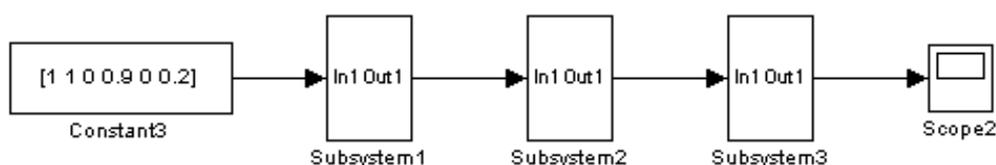


Рис. 3.4. S-модель каскада трёх реакторов идеального смешения

Порядок выполнения работы

В ходе лабораторной работы строятся математические описания сложной химической реакции, реактора идеального смешения (РИС) и каскада реакторов идеального смешения (КРИС), состоящего из трёх реакторов. Исходные данные в виде механизма многостадийной химической реакции берутся из табл. 3.1. Входные значения концентраций компонентов и значения констант скоростей стадий реакции находятся из табл. 3.2.

В системе визуального моделирования Simulink полученные математические описания строятся в виде S-моделей. При моделировании время пребывания в реакторах РИВ, РИС и КРИС следует принять равным 10 мин.

Для определения времени завершения переходного процесса в РИС и КРИС следует увеличивать модельное время до достижения условия постоянства концентраций во времени. По результатам моделирования, сравнивая концентрации продукта реакции на выходе из РИВ, РИС и КРИС в стационарных условиях (при одинаковом времени пребывания), делаются выводы о наиболее эффективном реакторе для проведения рассматриваемой реакции.

Отчет по выполненной работе должен содержать:

1. Постановку задачи и цель работы.
2. Математическое описание сложной химической реакции.
3. Схему S-модели сложной химической реакции с описанием настроек всех входящих в неё блоков.
4. Результаты моделирования в графическом виде и в виде таблицы.
5. Математическое описание РИС.
6. Схему S-модели РИС с описанием настроек всех входящих в неё блоков.
7. Результаты моделирования РИС в графическом виде и в виде таблицы.
8. Математическое описание КРИС, состоящего из трёх реакторов.
9. Схему S-модели КРИС с описанием настроек всех входящих в неё блоков.
10. Результаты моделирования КРИС в графическом виде и в виде таблицы.
11. Выводы.

Задания к лабораторной работе

Таблица 3.1

Вариант	Механизм химической реакции
1	2
1	$2X_1 \xrightarrow{k_1} X_2, \quad 2X_2 + X_4 \xrightarrow{k_2} X_5, \quad X_1 \xrightarrow{k_3} X_3 + X_4, \quad X_5 + X_3 \xrightarrow{k_4} 2X_6,$ $2X_6 \xrightarrow{k_5} X_5 + X_3$
2	$X_1 \xrightarrow{k_1} 2X_2, \quad 2X_2 \xrightarrow{k_2} X_1, \quad X_2 \xrightarrow{k_3} X_3, \quad X_3 + 2X_4 \xrightarrow{k_4} X_5,$ $X_5 \xrightarrow{k_5} X_1 + X_6$
3	$X_1 \xrightarrow{k_1} 2X_2 + X_3, \quad 2X_3 + X_4 \xrightarrow{k_2} X_5, \quad X_5 \xrightarrow{k_3} 2X_3 + X_4, \quad 2X_5 \xrightarrow{k_4} X_6,$ $X_6 \xrightarrow{k_5} 2X_5$
4	$X_1 \xrightarrow{k_1} 3X_2, \quad X_2 + X_3 + X_4 \xrightarrow{k_2} X_5, \quad 2X_2 \xrightarrow{k_3} X_6, \quad X_6 \xrightarrow{k_4} 2X_2$
5	$3X_1 \xrightarrow{k_1} 2X_2 + X_3, \quad 2X_3 + X_4 \xrightarrow{k_2} X_5, \quad X_5 \xrightarrow{k_3} 2X_3 + X_4, \quad 2X_5 \xrightarrow{k_4} 2X_6,$ $2X_6 \xrightarrow{k_5} 2X_5$
6	$X_1 \xrightarrow{k_1} 2X_2, \quad 2X_2 \xrightarrow{k_2} X_1, \quad X_2 \xrightarrow{k_3} X_3, \quad X_3 + 2X_4 \xrightarrow{k_4} X_5,$ $X_5 \xrightarrow{k_5} X_1 + X_6$

Окончание таблицы 3.1

1	2
7	$2X_1 \xrightarrow{k_1} X_2, 2X_2 + X_4 \xrightarrow{k_2} X_5, X_1 \xrightarrow{k_3} X_3 + X_4, X_5 + X_3 \xrightarrow{k_4} 2X_6,$ $2X_6 \xrightarrow{k_5} X_5 + X_3$
8	$3X_1 \xrightarrow{k_1} X_2, X_2 \xrightarrow{k_2} 2X_3 + X_4, X_4 + X_2 \xrightarrow{k_3} X_5, X_2 + X_1 \xrightarrow{k_4} X_6$
9	$X_1 + 2X_2 \xrightarrow{k_1} X_3, X_3 \xrightarrow{k_2} X_5 + X_4, X_5 \xrightarrow{k_3} X_6$
10	$X_1 + X_2 + X_3 \xrightarrow{k_1} X_4, X_2 + X_4 \xrightarrow{k_2} X_5, X_3 + X_5 \xrightarrow{k_3} X_6$
11	$2X_1 + X_2 \xrightarrow{k_1} X_3, 2X_3 \xrightarrow{k_2} X_4, X_1 + X_4 \xrightarrow{k_3} X_5, X_5 + X_3 \xrightarrow{k_4} X_6$
12	$X_1 + X_2 \xrightarrow{k_1} 2X_3, X_3 + X_4 \xrightarrow{k_2} 2X_5, X_5 \xrightarrow{k_3} 2X_6, 2X_6 \xrightarrow{k_4} X_5$
13	$X_1 \xrightarrow{k_1} 2X_2, 2X_2 \xrightarrow{k_2} X_1, X_2 + X_3 \xrightarrow{k_3} X_4, X_3 + X_4 \xrightarrow{k_4} X_5,$ $X_1 + X_5 \xrightarrow{k_5} X_6$
14	$X_1 \xrightarrow{k_1} 2X_2, X_2 \xrightarrow{k_2} X_3 + 2X_4, X_4 \xrightarrow{k_3} X_5, X_1 + X_3 \xrightarrow{k_4} X_6$
15	$X_1 + 3X_2 \xrightarrow{k_1} X_3, X_3 \xrightarrow{k_2} X_4 + 2X_5, X_5 \xrightarrow{k_3} X_6$
16	$X_1 \xrightarrow{k_1} 2X_2, 2X_2 \xrightarrow{k_2} X_1, X_2 + X_3 \xrightarrow{k_3} X_4, X_4 + X_3 \xrightarrow{k_4} X_5,$ $X_1 + X_5 \xrightarrow{k_5} X_6$
17	$2X_1 \xrightarrow{k_1} X_2, X_2 \xrightarrow{k_2} 2X_1, X_2 + X_3 \xrightarrow{k_3} X_4, X_4 + X_3 \xrightarrow{k_4} X_5 + X_6$
18	$3X_1 \xrightarrow{k_1} X_2 + 2X_3, X_2 + X_4 \xrightarrow{k_2} 2X_5, X_3 + X_4 \xrightarrow{k_3} X_6,$ $X_6 \xrightarrow{k_4} X_3 + X_4$
19	$X_1 + X_2 \xrightarrow{k_1} 3X_3, X_3 + 2X_4 \xrightarrow{k_2} 3X_5, X_5 \xrightarrow{k_3} 2X_6, 2X_6 \xrightarrow{k_4} X_5$
20	$X_1 \xrightarrow{k_1} 2X_2 + X_3, X_3 + X_4 \xrightarrow{k_2} X_5, X_3 + X_5 \xrightarrow{k_3} 3X_6$

Таблица 3.2

Вариант	Концентрации на входе в реактор						Константы скорости стадий				
	C_1^0	C_2^0	C_3^0	C_4^0	C_5^0	C_6^0	k_1	k_2	k_3	k_4	k_5
1	2	0	0,2	0,5	0	0	0,5	0,8	0,2	0,45	0,1
2	0	0,5	0,8	1,6	0,1	0,1	0,45	0,2	0,25	0,4	0,3
3	1,5	0	0,2	1,2	0	0	0,1	0,36	0,25	0,3	0,5
4	1	1,6	0,8	1,2	0	0	0,35	0,5	0,7	0,3	-
5	1,5	0	0,2	1,2	0	0	0,1	0,36	0,25	0,3	0,5
6	0	0,5	0,8	1,6	0,1	0,1	0,45	0,2	0,25	0,4	0,3
7	2	0	0,2	0,5	0	0	0,5	0,8	0,2	0,45	0,1
8	2	1	0	0,5	0,2	0,1	0,4	0,25	0,5	0,34	-
9	0,8	2	0,5	0	0	0	0,1	0,5	0,35	-	-
10	2	1	1,2	0,4	0,1	0	0,15	0,4	0,24	-	-
11	1,8	0,9	0,5	0,2	0,5	0,4	0,15	0,4	0,3	0,25	-
12	1	1	0	0,9	0	0,2	0,4	0,33	0,2	0,6	-
13	1,6	0	1,2	0	0,3	0,5	0,1	0,5	0,35	0,4	0,2
14	2	1	0	0,5	0,2	0,1	0,4	0,25	0,5	0,34	-
15	0,8	2	0,5	0	0	0	0,1	0,5	0,35	-	-
16	1,6	0	1,2	0	0,3	0,5	0,1	0,5	0,35	0,4	0,2
17	1	0	0,5	0	0	0	0,2	0,4	0,3	0,3	-
18	1,5	0	0	1	0	0	0,1	0,5	0,3	0,4	-
19	1	1	0	0,9	0	0,2	0,4	0,33	0,2	0,6	-
20	2	1	1,2	0,4	0,1	0	0,15	0,5	0,22	-	-

Контрольные вопросы

1. Цель системного анализа (СА) гомогенного химического реактора.
2. Основные принципы СА.
3. Назовите основные признаки системы.
4. Элементы и связи в подсистеме «химическая реакция».

5. Каким образом разрабатывается математическое описание подсистемы «химическая реакция»?
7. Как составляется стехиометрическая матрица?
8. Элементы и связи в подсистеме «движение потока».
9. Назовите типовые модели гидродинамики.
10. Перечислите допущения, принятые в типовых моделях гидродинамики.
11. Как осуществляется синтез математического описания гомогенного химического реактора?
12. Системой уравнений какого типа описывается нестационарный режим работы РИВ?
13. Системой уравнений какого типа описывается стационарный режим работы РИВ?
14. Системой уравнений какого типа описывается нестационарный режим работы РИС?
15. Какой ситуацией в работе реактора обусловлен нестационарный режим?
16. Начальные условия при моделировании РИВ, РИС и каскада РИС.
17. Каким образом разрабатывается s-модель КРИС?

Лабораторная работа №4

Обработка экспериментальных данных

Цель работы: практическое ознакомление со способами обработки экспериментальных данных. Изучение встроенных функций MathCAD для интерполяции, аппроксимации, регрессии, сглаживания.

Основные понятия

При обработке экспериментальных данных, как правило, возникает задача аппроксимации результатов эксперимента аналитической зависимостью $y = f(x)$, которую можно использовать в последующих расчетах.

Существует три возможности аппроксимации опытных данных:

- 1) аппроксимирующая функция $y = f(x)$ должна проходить через все опытные точки. Такой способ аппроксимации называется интерполяцией;
- 2) выбрать аппроксимирующую функцию таким образом, чтобы она сглаживала, усредняла опытные данные. Такой способ аппроксимации называется регрессией или сглаживанием;
- 3) подобрать аппроксимирующую функцию, отбрасывая систематическую погрешность, так называемые шумы, наложившиеся на экспериментальные данные. Такой способ называется сглаживанием с фильтрацией данных.

В MathCAD имеется много встроенных функций для обработки массивов данных.

Линейная интерполяция

Встроенные функции MathCAD позволяют при интерполяции проводить через экспериментальные точки кривые разной степени гладкости.

При линейной интерполяции аппроксимирующая функция соединяет опытные точки отрезками прямых линий. Для линейной интерполяции используется встроенная функция `linterp`.

Обращение к функции: `linterp(x, y, t)`,

где x – вектор опытных значений аргумента; y – вектор опытных значений функции; t – значение аргумента, при котором вычисляется интерполирующая

щее значение функции, но чаще определяется ряд значений функции, тогда t – вектор значений, а результат – массив интерполирующих значений. Еще чаще t – просто переменная (аргумент интерполирующей функции), тогда результат расчета – функция, которую можно далее интегрировать, дифференцировать и т. д. Пример линейной интерполяции показан на рис. 4.1

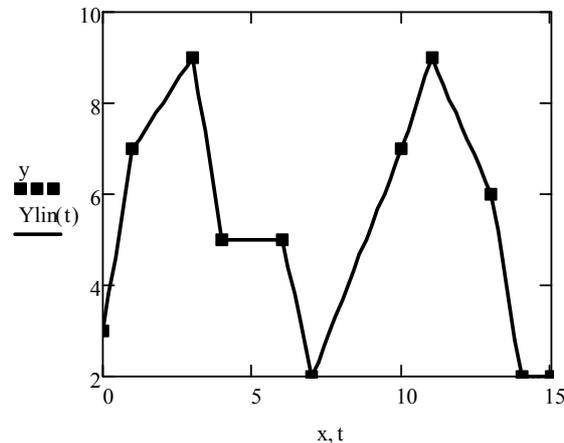


Рис. 4.1 Линейная интерполяция экспериментальных данных

Кубическая сплайн-интерполяция

В большинстве случаев желательно соединять экспериментальные точки не ломаной линией, а гладкой кривой. Для этих целей используется сплайн-интерполяция. Кубическая сплайн-интерполяция позволяет провести кривую через набор точек таким образом, чтобы первые и вторые производные кривой были непрерывны в каждой точке. Эта кривая образуется путем создания ряда кубических полиномов, проходящих через наборы из трех соседних точек. Кубические полиномы затем состыковываются друг с другом так, чтобы образовать единую кривую.

Для кубической сплайн – интерполяции используется встроенная функция `interp`.

Обращение к функции: `interp(vs, X, Y, t)`,

где vs – вектор вторых производных, созданный одной из трех функций: `lspline(X,Y)`, `pspline(X,Y)`, `cspline(X,Y)`; X – вектор опытных значений аргумента, расположенных в порядке возрастания; Y – вектор опытных значений

функции; t – значение аргумента, при котором вычисляется интерполирующее значение функции.

Сплайн-интерполяция организована в MathCAD несколько сложнее, чем линейная. Перед применением функции `interp` необходимо определить первый из ее аргументов – вектор `vs`. Делается это при помощи одной из трех встроенных функций тех же аргументов (x,y) :

- `lspline(X,Y)` – создает вектор коэффициентов кривой, которая приближается к прямой линии в граничных точках;
- `pspline (X,Y)` – создает вектор коэффициентов кривой, которая приближается к квадратной параболе в граничных точках;
- `cspline(X,Y)` – создает вектор коэффициентов кривой, которая приближается к кубической параболе в граничных точках.

Выбор конкретной функции сплайн-коэффициентов влияет на интерполяцию вблизи конечных точек интервала. Использование двух функций для интерполяции можно совместить, записав, например:

`interp(cspline(X,Y), X, Y, t)`.

Примеры кубической сплайн-интерполяции показаны на рис. 4.2.

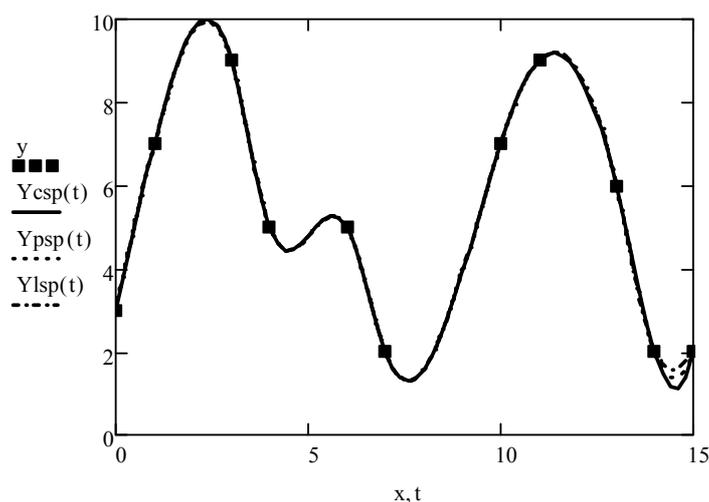


Рис. 4.2. Кубическая сплайн-интерполяция экспериментальных данных

Линейное предсказание

Кроме интерполяции в промежуточных точках иногда нужно оценить значения функции за пределами области заданных точек. Все рассмотренные

ранее функции интерполяции выполняют экстраполяцию данных за пределами интервала заданных точек с помощью соответствующей зависимости, основанной на анализе расположения нескольких исходных точек на границе интервала данных. Но в MathCAD имеется и специальная функция предсказания `predict`.

Обращение к функции: `predict (Y, m, n)`,

где Y – вектор заданных значений функции, обязательно взятых через равные интервалы аргумента; m – число последовательных значений Y , на основании которых функция `predict` возвращает n предсказанных значений Y .

Значений аргумента для данных не требуется, поскольку, по определению, функция действует на данные, следующие друг за другом с одинаковым шагом. Обратите внимание на то, что результат функции `predict` надо вставлять «в хвост» исходных данных.

Функция `predict` использует линейный алгоритм предсказания, который является полезным, когда экстраполируется функция гладкая и осциллирующая, хотя необязательно периодическая. Эта функция использует последние m исходных значений данных, чтобы вычислить коэффициенты предсказания. Как только это сделано, она использует последние m точек, чтобы предсказать координаты $(m+1)$ -й точки, фактически, создавая скользящее окно шириной m точек.

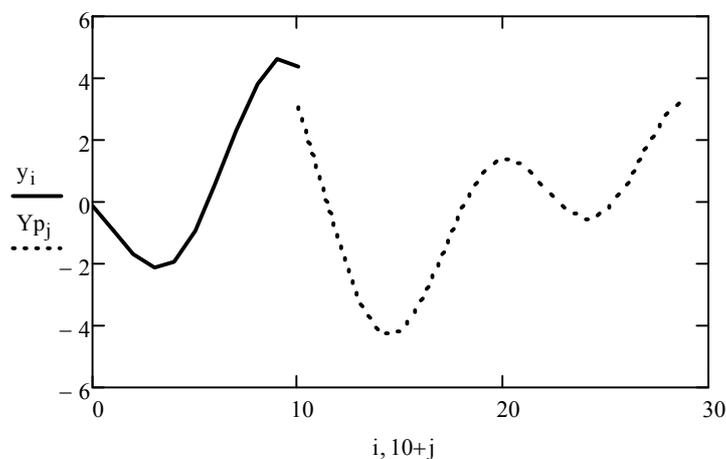


Рис. 4.3. Функция предсказания в MathCAD

Как видно из рис. 4.3, функция предсказания может быть полезной при экстраполяции данных на небольшие расстояния. Вдали от исходных данных результат чаще всего оказывается неудовлетворительным. Если исходных данных мало, то результат также окажется бесполезным.

Одномерная регрессия

MathCAD включает ряд функций для вычисления регрессии. Эти функции создают кривые или поверхности определенного типа с минимальным отклонением от набора данных. Функции различаются прежде всего типом кривой или поверхности, которую они используют, чтобы аппроксимировать данные.

В отличие от функции интерполяции, эти функции не требуют, чтобы аппроксимирующая кривая или поверхность проходила через точки данных.

Ряд функций регрессии возвращает коэффициенты аналитической функции и позволяет записать аппроксимирующую функцию в явном виде.

Ряд функций регрессии не позволяют получить аппроксимирующую функцию в явном виде. Они возвращают лишь численные результаты в виде таблиц или графиков. Две из них – `regress` и `loess` – не выводят коэффициентов и аппроксимируют массив данных одним степенным полиномом (`regress`) или отрезками нескольких полиномов (`loess`).

В MathCAD регрессия с использованием одного полинома реализуется комбинацией встроенных функций регрессии `regress` и интерполяции `interp`.

Обращение к функциям: `interp(s, x, y, t)`; `s:=regress(x, y, n)`, где x – вектор значений аргумента, элементы которого расположены в порядке возрастания; y – вектор значений функции того же размера; s – вектор коэффициентов для построения аппроксимирующего полинома, создаваемый функцией `regress`; t – значение аргумента, при котором вычисляется интерполирующая функция; n – степень аппроксимирующего полинома. Степень аппроксимирующего полинома может быть любой.

Регрессия с использованием нескольких отрезков полинома также реализуется комбинацией встроенных функций регрессии и интерполяции:

$\text{interp}(s, x, y, t); s:=\text{loess}(x, y, \text{span}),$

где s – вектор коэффициентов для построения аппроксимирующего полинома второй степени, требуемый функцией interp ; $\text{span}>0$ – параметр, определяющий размер отрезков полиномов.

Параметр span задает степень сглаженности данных. Аргумент span определяет размер отрезков полиномов, из которых «сшивается» аппроксимирующая кривая. На практике $0,2 < \text{span} < 2$. При $\text{span} = 2$ аппроксимация осуществляется одной параболой. При $\text{span}=0,2$ аппроксимирующая кривая почти точно описывает любой набор данных.

Примеры использования функций regress и loess приведены на рис. 4.4.

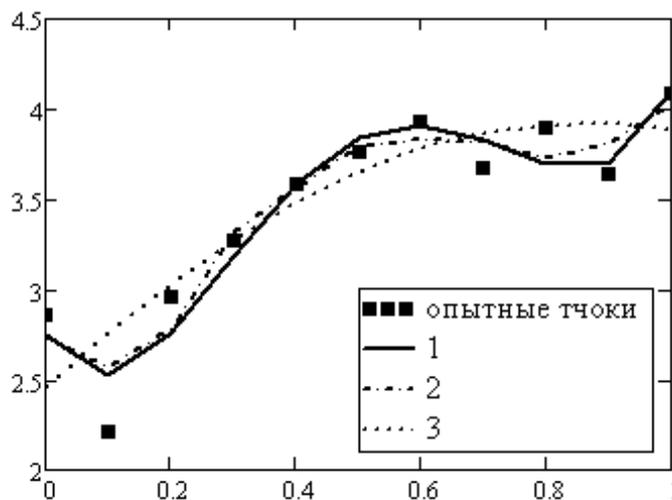


Рис. 4.4. Линии регрессии, построенные с помощью различных функций: 1 – regress ; 2 – loess , $\text{span}=0,6$; 3 – loess , $\text{span}=2,5$

Обобщенная регрессия

Бывают случаи, когда закон изменения функции известен и требуется подобрать лишь ее коэффициенты, однако сама аппроксимирующая функция такова, что использовать две функции специальной регрессии невозможно. В этом случае MathCAD предлагает использовать функции регрессии общего вида: linfit и genfit .

Если предполагаемая зависимость представляет собой линейную комбинацию некоторых функций: $y=a_0f_0(x) + a_1f_1(x) + \dots + a_nf_n(x)$, и надо лишь по-

добрать коэффициенты этих функций, то используется функция `linfit`, которая возвращает вектор, содержащий набор коэффициентов при функциях $f_i(x)$.

Обращение к функции: `linfit(x, y, F)`,

где y – вектор заданных значений функции при значениях аргумента, содержащихся в векторе x ; F – вектор функций, входящих в линейную комбинацию $y(x)$.

Пример нахождения коэффициентов регрессии для функции:

$$f(x) = a_1 e^x + a_2 \frac{1}{\sqrt{1 + 2\cos(x)^2}} + a_3 \sin(x) \text{ приведен на рис. 4.5.}$$

`x := (0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1)ᵀ` массив значений аргумента в возрастающем порядке

`y := (2.86 2.21 2.96 3.27 3.58 3.76 3.93 3.67 3.90 3.64 4.09)ᵀ` массив значений функции

$$F(x) := \begin{pmatrix} e^x \\ \frac{1}{\sqrt{1 + 2 \cdot \cos(x)^2}} \\ \sin(x) \end{pmatrix} \text{ набор функций, входящих в линейную комбинацию}$$

`a := linfit(x, y, F)` обращение к функции $a = \begin{pmatrix} -3.172 \\ 9.861 \\ 5.528 \end{pmatrix}$ найденные коэффициенты при функциях

`g(x) := F(x) · a` линейная комбинация функций

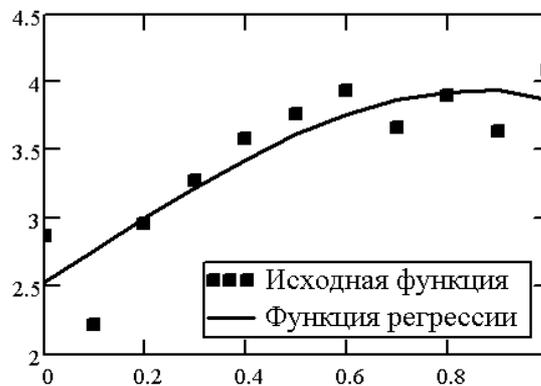


Рис. 4.5. Регрессия данных функцией `linfit`

Для произвольной функции с неизвестными коэффициентами (например: $f(x)=2\sin(a_1x)+3 \cos(a_2x)$) надо использовать функцию `genfit`, которая возвращает вектор, содержащий n параметров, наилучшим образом аппроксимирующих данные из векторов x и y заданной функцией $f(x)$.

Обращение к функции: `genfit(x,y,C,F)`,

где F – функция, которая возвращает $(n+1)$ -мерный вектор, содержащий функцию $f(x)$ и ее частные производные относительно неизвестных параметров; C – n -мерный вектор начальных значений для n неизвестных параметров.

Например, требуется найти коэффициенты регрессии для функции вида: $f(x) = e^{u_0 + u_1 x + u_2 x^2}$. Для этого воспользуемся функцией `genfit`. Пример применения этой функции приведен на рис. 4.6.

$x := (0 \ 0.1 \ 0.2 \ 0.3 \ 0.4 \ 0.5 \ 0.6 \ 0.7 \ 0.8 \ 0.9 \ 1)^T$ массив значений аргумента в возрастающем порядке
 $y := (2.86 \ 2.21 \ 2.96 \ 3.27 \ 3.58 \ 3.76 \ 3.93 \ 3.67 \ 3.90 \ 3.64 \ 4.09)^T$ массив значений функции

$f(x, u) := \begin{pmatrix} e^{u_0 + u_1 x + u_2 x^2} \\ e^{u_0 + u_1 x + u_2 x^2} \\ x \cdot e^{u_0 + u_1 x + u_2 x^2} \\ \frac{2}{x} \cdot e^{u_0 + u_1 x + u_2 x^2} \end{pmatrix}$ вектор, включающий функцию и её частные производные по каждому коэффициенту регрессии

$u := \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$ вектор начальных приближений для коэффициентов регрессии

$K := \text{genfit}(x, y, u, f)$ обращение к функции $K = \begin{pmatrix} 0.913 \\ 1.055 \\ -0.615 \end{pmatrix}$ найденные коэффициенты регрессии

$G(t) := f(t, K)_0$ искомая функция, с найденными параметрами

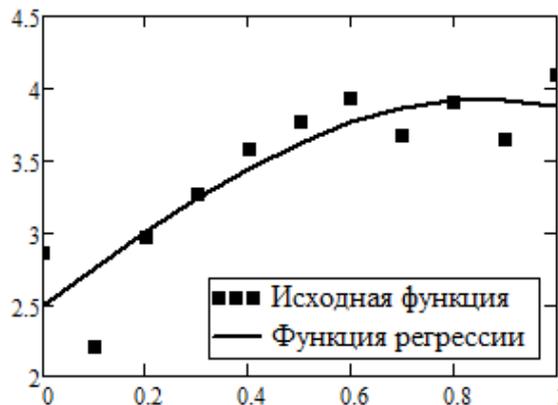


Рис. 4.6. Регрессия данных функцией `genfit`

Функции сглаживания

В процессе сглаживания из исходного набора данных получается новый набор данных, более гладкий, чем исходной. MathCAD предлагает три встроенные функции сглаживания:

- $\text{medsmooth}(y,n)$ – возвращает m -мерный вектор, созданный сглаживанием с помощью скользящей медианы. Здесь y – m -мерный вектор вещественных чисел; n – ширина окна, по которому происходит сглаживание. n должно быть нечетным числом, меньшим или равным числу элементов вектора y ;

- $\text{ksmooth}(x,y,b)$ – возвращает n -мерный вектор. Здесь x и y – n -мерные векторы. Вектор y создан сглаживанием при помощи Гауссова ядра данных из y ; b – параметр, управляющий окном сглаживания. Он должен быть в несколько раз больше величины интервала между точками x . Чем больше b , тем больше окно, используемое при сглаживании;

- $\text{supsmooth}(x,y)$ возвращает n -мерный вектор, созданный локальным использованием симметричной линейной процедуры сглаживания методом наименьших квадратов по правилу k ближайших соседей, в которой k выбирается адаптивно. Здесь x и y – n -мерные векторы исходных данных, элементы x должны быть расположены в порядке возрастания.

Функция medsmooth наиболее устойчивая из всех трех встроенных функций, так как в меньшей степени подвержена влиянию зашумленных данных. Функция ksmooth использует Гауссово ядро, чтобы вычислить локально взвешенные средние значения исходного вектора y . Такое сглаживание полезно, когда интервалы между точками данных примерно одинаковой величины. Функция supsmooth полезна, если длина интервалов существенно изменяется. Эта функция адаптивно выбирает различную ширину полосы сглаживания для различных частей вектора данных.

В отличие от регрессии и интерполяции, функции сглаживания возвращают массив, а не функцию. Для получения функции после сглаживания необходимо использовать интерполяцию или регрессию.

Пример применения функций сглаживания приведен на рис. 4.7.

$x := (0 \ 0.1 \ 0.2 \ 0.3 \ 0.4 \ 0.5 \ 0.6 \ 0.7 \ 0.8 \ 0.9 \ 1)^T$ массив значений аргумента в возрастающем порядке
 $y := (2.86 \ 2.21 \ 2.96 \ 3.27 \ 3.58 \ 3.76 \ 3.93 \ 3.67 \ 3.90 \ 3.64 \ 4.09)^T$ массив значений функции

Массивы сглаженных функций y

$\underline{sup} := \text{supsmooth}(x, y)$ $\underline{med} := \text{medsmooth}(y, 5)$ $\underline{ksm} := \text{ksmooth}(x, y, 0.5)$

Интерполяция со сглаживанием

$\underline{Yinterpsup}(t) := \text{interp}(\text{cspline}(x, \underline{sup}), x, \underline{sup}, t)$

$\underline{Yinterpmed}(t) := \text{interp}(\text{cspline}(x, \underline{med}), x, \underline{med}, t)$

$\underline{Yinterpksm}(t) := \text{interp}(\text{cspline}(x, \underline{ksm}), x, \underline{ksm}, t)$

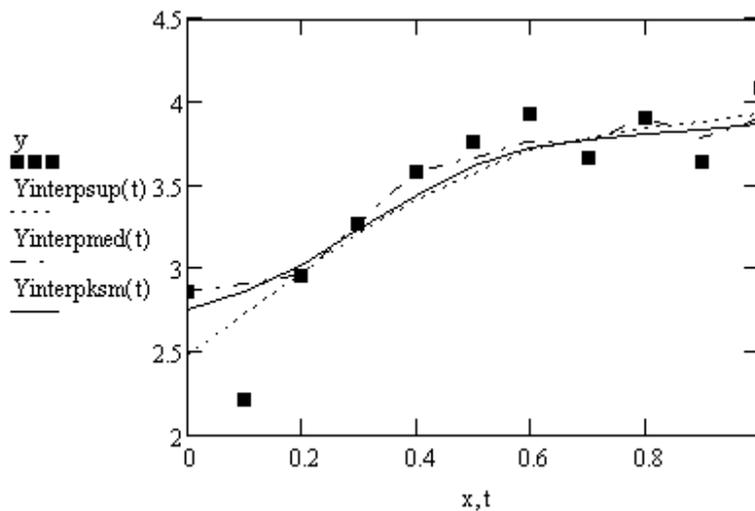


Рис. 4.7. Сглаживание данных с созданием функции

Задания к лабораторной работе

С помощью встроенных функций MathCAD выполнить следующие упражнения.

Упражнение 1. Создайте таблицу экспериментальных данных. Значения аргумента следует найти по формуле: $x_i = a + h \cdot i$, где $i = 0, 1, \dots, 10$; $h = (b - a) / 10$; a и b – границы интервала. Значение функции необходимо взять из табл. 4.1.

Упражнение 2. Провести линейную интерполяцию заданной функции (см. табл. 4.1) с помощью встроенной интерполяционной функции linterp . Построить график функции linterp и отметить на нем узловые точки (x_i, y_i) .

Упражнение 3. Провести сплайн-интерполяцию заданной функции (см. табл. 4.1) с помощью функций lspline, pspline, cspline и interp. Построить график функции interp и отметить на нем узловые точки (x_i, y_i) .

Таблица 4.1

Исходные данные для упражнений 1 – 4

Ва- риант	y_i	[a, b]
1	0,023; 0,062; 0,206; 0,324; 0,567; 0,718; 0,958; 0,986; 1,092; 0,953; 0,86	[0, 2]
2	1,072; 0,962; 0,919; 0,703; 0,502; 0,326; 0,168; 0,109; 0,054; 0,131; 0,188	[0, 2]
3	1,019; 1,673; 2,383; 2,716; 2,509; 1,909; 1,224; 0,743; 0,56; 0,415; 0,419	[0, 5]
4	2,078; 1,872; 1,595; 1,248; 0,94; 0,728; 0,541; 0,485; 0,398; 0,276; 0,308	[0, 2]
5	0,392; 0,256; 0,224; 0,13; 0,056; 0,055; 0,077; 0,05; 0,073; 0,053; 0,083	[2, 5]
6	0,584; 0,603; 0,708; 0,813; 0,921; 0,935; 0,969; 1,043; 1,048; 0,988; 1,01	[0, 4]
7	0,876; 1,046; 0,789; 0,107; -0,506; -0,813; -0,889; -0,955; -0,862; -0,844; -0,796	[0, 3]
8	0,137; 0,15; 0,13; 0,112; 0,104; 0,087; 0,076; 0,076; 0,063; 0,043; 0,041	[1, 3]
9	-0,122; -0,907; -1,713; -2,146; -1,921; -0,961; 0,573; 2,319; 3,81; 4,596; 4,367	[1, 5]
10	3,466; 4,29; 4,575; 4,63; 4,58; 4,479; 4,357; 4,225; 4,093; 3,963; 3,838	[1, 5]
11	0,827; 0,456; 0,112; 0,0034; 0,196; 0,573; 0,906; 0,992; 0,78; 0,398; 0,078	[1, 3]
12	1; 0,77; 0,292; 0,005; 0,173; 0,642; 0,98; 0,877; 0,427; 0,044; 0,08	[0, 5]
13	0,841; 0,502; -0,924; -0,541; 0,198; 0,511; 0,763; 0,989; 0,817; 0,049; -0,818	[0, 5]
14	10,0; 16,151; 23,198; 27,115; 24,826; 18,193; 11,516; 7,041; 4,692; 3,762; 3,833	[0, 5]
15	0,333; 0,32; 0,25; 0,157; 0,091; 0,054; 0,033; 0,022; 0,015; 0,011; 0,0078	[0, 5]
16	5,00; 7,109; 8,581; 9,37; 9,734; 9,89; 9,955; 9,982; 9,993; 9,997; 10,00	[0, 3]
17	0,097; 0,069; 0,048; 0,033; 0,023; 0,016; 0,011; 0,007; 0,005; 0,003; 0,002	[1, 3]
18	-0,889; -0,932; -0,72; -0,281; -0,026; 0,266; 0,369; 0,468; 0,559; 0,72; 0,855	[1, 3]
19	-0,927; -0,340; 1,096; 1,931; 1,090; -1,098; -2,693; -2,134; 0,710; 3,426; 3,522	[1, 4]
20	3,517; 4,333; 4,67; 4,685; 4,627; 4,564; 4,402; 4,324; 4,167; 3,982; 3,922	[1, 5]

Упражнение 4. Вычислить значения заданной функции $y_i = f(x_i)$ (см. табл. 4.1) в точках $x_i = a + i/10$, где $i = 0, 1, \dots, 10(b - a)$, на отрезке $[a, b]$. С использованием функции predict выполнить предсказание (экстраполяцию) по

лученного вектора данных y_i в последующих 10 точках по последним 7 значениям функции. Отобразить графически имеющиеся данные, предсказанные данные и истинный вид функции $f(x)$.

Упражнение 5. Создайте таблицу экспериментальных данных. Значения аргумента следует найти по формуле: $x_i = a + h \cdot i$, где $i = 0, 1, \dots, 10$; $h = (b - a)/10$; a и b – границы интервала. Значение функции необходимо взять из табл. 4.2.

Таблица 4.2

Варианты заданий для упражнений 5 – 9

Вариант	y_i	[a, b]
1	2,86; 2,21; 2,96; 3,27; 3,58; 3,76; 3,93; 3,67; 3,90; 3,64; 4,09	[0, 1]
2	1,14; 1,02; 1,64; 1,64; 1,96; 2,17; 2,64; 3,25; 3,47; 3,89; 3,36	[-1, 1]
3	4,70; 4,64; 4,57; 4,45; 4,40; 4,34; 4,27; 4,37; 4,42; 4,50; 4,62	[2, 4]
4	0,43; 0,99; 2,07; 2,54; 1,67; 1,29; 1,24; 0,66; 0,43; 0,35; 0,70	[2, 4]
5	1,55; 1,97; 1,29; 0,94; 0,88; 0,09; 0,02; 0,84; 0,81; 0,09; 0,15	[1, 4]
6	3,24; 1,72; 1,95; 2,77; 2,47; 0,97; 1,75; 1,55; 0,12; 0,70; 1,19	[0, 4]
7	2,56; 1,92; 2,85; 2,94; 2,39; 2,16; 2,51; 2,10; 1,77; 2,28; 1,70	[-1, 2]
8	1,77; 0,92; 2,21; 1,50; 3,21; 3,46; 3,70; 4,02; 4,36; 4,82; 4,03	[-1, 3]
9	1,53; 0,45; 1,68; 0,12; 0,68; 2,36; 2,58; 2,53; 3,45; 2,70; 2,82	[4, 8]
10	2,50; 3,90; 3,54; 4,63; 3,87; 5,25; 4,83; 3,24; 3,08; 3,00; 4,70	[0, 5]
11	3,46; 4,29; 4,57; 4,63; 4,58; 4,48; 4,35; 4,22; 4,09; 3,96; 3,83	[1, 5]
12	3,51; 4,33; 4,67; 4,68; 4,62; 4,56; 4,40; 4,32; 4,16; 3,98; 3,92	[2, 6]
13	5,00; 7,11; 8,58; 9,37; 9,73; 9,89; 9,95; 9,98; 9,99; 9,99; 10,00	[0, 3]
14	10,05; 16,15; 23,19; 27,11; 24,82; 18,19; 11,51; 7,04; 4,69; 3,76; 3,83	[0, 5]
15	1,37; 1,52; 1,30; 1,12; 1,04; 0,87; 0,76; 0,76; 0,63; 0,43; 0,41	[0, 4]
16	3,92; 2,56; 2,24; 1,30; 0,56; 0,55; 0,77; 0,50; 0,73; 0,53; 0,83	[2, 5]
17	1,02; 1,67; 2,38; 2,72; 2,51; 1,91; 1,22; 0,74; 0,56; 0,41; 0,42	[0, 2]
18	9,73; 6,90; 4,81; 3,35; 2,32; 1,67; 1,11; 0,71; 0,54; 0,30; 0,29	[1, 3]
19	3,35; 3,21; 2,54; 1,57; 0,91; 0,54; 0,33; 0,22; 0,15; 0,11; 0,08	[0, 5]
20	4,32; 9,91; 20,70; 25,44; 16,75; 12,95; 12,47; 6,68; 4,36; 3,50; 7,02	[1, 3]

Упражнение 6. Аппроксимировать данные из векторов x_i и y_i (см. табл. 4.2):

- a) полиномом 4-й степени при помощи функций regress и interp;
 b) наборами полиномов второго порядка с помощью функций loess и interp при span равном 0,6 и 2,5.

Отобразите графически результаты аппроксимации.

Упражнение 7. Аппроксимировать экспериментальные данные значений x_i и y_i (см. табл. 4.2) линейной комбинацией функций:

$$f(x) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + a_3 f_3(x).$$

Коэффициенты вектора a найти с помощью функции linfit. Отобразить графически совокупность точек векторов x_i и y_i и результаты проведенной линейной регрессии общего вида. Комбинация функций выбирается согласно номеру варианта из табл. 4.3.

Таблица 4.3

Комбинации функций для упражнения 7

Номер варианта	$f_1(x)$	$f_2(x)$	$f_3(x)$
1, 11	e^x	$1/\sqrt{1+2\cos^2 x}$	$\sin x$
2, 12	$1/(1+x^2)$	e^x	$\sin(3x)$
3, 13	$1/(1+x^2)$	$e^{\sin x}$	x
4, 14	$\text{arctg } x$	$\ln x$	$\sin x$
5, 15	$e^{-x^2/2}$	$1/x$	e^{-x}
6, 16	$(1+x)(2+x)$	$\text{Cos}(x/10)$	$\cos x$
7, 17	$1/(1+e^{x^2})$	$\sqrt{1+x^2}$	$\cos x$
8, 18	$\cos(x/2)$	$2 - \cos x$	$\sin(x/2)$
9, 19	$1/(1+e^x)$	$\text{arctg}\sqrt{x}$	$\sin(3x)$
10, 20	$\ln(x+5)$	$\sqrt{1+x}$	$\text{Sin}(x)$

Упражнение 8. Аппроксимировать экспериментальные данные значений x_i и y_i (см. табл. 4.2) функцией вида: $f(x) = e^{u_0 + u_1 x + u_2 x^2}$. Параметры вектора u найти с помощью функции genfit. Отобразить графически совокуп-

ность точек векторов x_i и y_i и результаты проведенной нелинейной регрессии общего вида.

Упражнение 9. Выполнить сглаживание экспериментальной функции, заданной таблицей значений x_i и y_i (см. табл. 4.2) с помощью встроенных функций MathCAD: medsmooth, ksmooth и supsmooth. Результаты сглаживания отобразить графически.

Контрольные вопросы

1. Какие существуют способы аппроксимации опытных данных?
2. Какая функция используется для линейной интерполяции?
3. Для чего используется сплайн-интерполяция?
4. Какая функция используется для сплайн-интерполяции?
5. Что такое линейное предсказание?
6. Какими функциями реализуется одномерная регрессия в MathCAD?
7. В каких случаях применяют обобщенную регрессию и какие функции используют при этом?
8. Какие в MathCAD применяются функции сглаживания?

Лабораторная работа №5

Математическое планирование эксперимента: полный факторный эксперимент

Цель работы: изучение основных понятий, определений, принципов теории планирования экспериментов, приобретение навыков проведения экспериментов по построению математических моделей, ознакомление с методикой построения регрессионных моделей.

Основные понятия теории планирования эксперимента

Эксперимент – совокупность операций, совершаемых над объектом исследования с целью получения информации о его свойствах.

Пассивный эксперимент является традиционным методом, в соответствии с которым ставится большая серия опытов с поочередным варьированием каждой из переменных. К пассивному эксперименту относится также сбор исходного статистического материала в режиме нормальной эксплуатации на промышленном объекте. В этом случае обработка опытных данных для получения математической модели проводится методами классического регрессионного и корреляционного анализа.

Активный эксперимент ставится по заранее составленному плану (планирование эксперимента), при этом предусматривается одновременное изменение всех параметров, влияющих на процесс, что позволяет сразу установить силу взаимодействия параметров и на этом основании сократить общее число опытов.

Опыт – это отдельная экспериментальная часть.

План эксперимента – совокупность данных определяющих число, условия и порядок проведения опытов.

Планирование эксперимента – выбор плана эксперимента, удовлетворяющего заданным требованиям, совокупность действий направленных на разработку стратегии экспериментирования (от получения априорной информации до получения работоспособной математической модели или определе-

ния оптимальных условий). Это целенаправленное управление экспериментом, реализуемое в условиях неполного знания механизма изучаемого явления.

Цель планирования эксперимента – нахождение таких условий и правил проведения опытов, при которых удастся получить надежную и достоверную информацию об объекте с наименьшей затратой труда, а также представить эту информацию в компактной и удобной форме с количественной оценкой точности.

Пусть интересующее нас свойство Y объекта зависит от n независимых переменных (X_1, X_2, \dots, X_n) , и мы хотим выяснить характер этой зависимости $Y=F(X_1, X_2, \dots, X_n)$, о которой мы имеем лишь общее представление. Величина Y – называется “отклик”, а сама зависимость $Y=F(X_1, X_2, \dots, X_n)$ – “функция отклика”.

Диапазоны изменения факторов задают область определения Y . Если принять, что каждому фактору соответствует координатная ось, то полученное пространство называется факторным пространством. При $n=2$ область определения Y представляет собой прямоугольник, при $n=3$ – куб, при $n > 3$ – гиперкуб.

При выборе диапазонов изменения факторов нужно учитывать их совместимость, т.е. контролировать, чтобы в этих диапазонах любые сочетания факторов были бы реализуемы в опытах и не приводили бы к абсурду. Для каждого из факторов указывают граничные значения $X_{i\min} \leq X_i \leq X_{i\max}$, $i=1, \dots, n$.

Регрессионный анализ функции отклика предназначен для получения ее математической модели в виде уравнения регрессии $Y = F(X_1, X_2, \dots, X_n; B_1, B_2, \dots, B_m) + e$, где B_1, \dots, B_m – некоторые коэффициенты; e – погрешность.

При планировании экспериментов на химико-технологическом объекте, под факторами следует понимать режимно-технологические параметры объекта, которые можно менять в ходе эксперимента (температура, давление, расход, уровень, время пребывания и т.п.).

Полный факторный эксперимент

В полном факторном эксперименте (ПФЭ) исследуется один параметр и реализуются все возможные сочетания уровней факторов. Для каждого фактора выбираются два уровня – верхний (максимальное значение фактора) и нижний (минимальное значение фактора), на которых фактор варьируется. Половина разности между верхним и нижним уровнями называется интервалом варьирования. Интервал варьирования должен быть больше погрешности измерения уровня фактора (ограничение снизу), а верхний и нижний уровни фактора не должны выходить за область его определения (ограничение сверху). На практике интервал варьирования составляет обычно 3–10% от области определения.

При двух уровнях для каждого из n факторов общее число опытов составляет 2^n . ПФЭ – это эксперимент типа 2^n .

ПФЭ позволяет получить математическую модель исследуемого объекта в виде уравнения множественной регрессии

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i x_i + \sum_{i=1}^n \sum_{k=i+1}^n b_{ik} x_i x_k + \sum_{i=1}^n \sum_{k=i+1}^n \sum_{g=k+1}^n b_{ikg} x_i x_k x_g + \dots, \quad (5.1)$$

где b_0 – свободный член; b_i , b_{ik} , b_{ikg} – коэффициенты уравнения множественной регрессии.

Так, например, при $n = 2$ уравнение регрессии имеет вид:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2, \quad \text{при } n = 3:$$

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{123} x_1 x_2 x_3.$$

В зависимости от объема априорной информации в математическую модель включают не все, а лишь некоторые взаимодействия первого порядка, иногда – взаимодействия второго порядка и очень редко – взаимодействия выше третьего порядка. Связано это с тем, что учет всех взаимодействий приводит к громоздким расчетам. Зависимость количества взаимодействий различного порядка от числа факторов приведена в табл. 5.1.

Таблица 5.1

Количество взаимодействий для числа факторов от 2 до 7

Число факторов, n	Число опытов, N=2 ⁿ	Число линейных эффектов	Порядок взаимодействия					
			1	2	3	4	5	6
2	4	2	1	-	-	-	-	-
3	8	3	3	1	-	-	-	-
4	16	4	6	4	1	-	-	-
5	32	5	10	10	5	1	-	-
6	64	6	15	20	15	6	1	-
7	128	7	21	35	35	21	7	1

Порядок постановки ПФЭ и обработки его результатов

1. Стандартизация масштаба факторов

Для удобства расчетов масштаб факторов выбирают так, чтобы значение верхнего уровня было равно +1, а нижнего –1. С этой целью делают преобразование начала координат факторов и переходят к нормированному (стандартному) масштабу. Формула перехода или кодирования, имеет вид:

$$x_j = \frac{z_j - z_j^0}{\Delta z_j}, j=1,2,\dots,k, \quad (5.2)$$

где x_j – нормированное значение; z_j – натуральное значение; z_j^0 – основной уровень фактора (центр плана); Δz_j – интервал варьирования.

$$z_j^0 = \frac{z_j^{\max} + z_j^{\min}}{2}, \Delta z_j = \frac{z_j^{\max} - z_j^{\min}}{2}, j=1,2,\dots,k. \quad (5.3)$$

При составлении плана и обработки его результатов от размерных факторов z_1, z_2, \dots, z_k переходят к безразмерным (кодированным) факторам x_1, x_2, \dots, x_k .

2. Составление матрицы планирования ПФЭ

План ПФЭ изображают в виде таблицы, столбцы которой отражают уровни факторов, а строки – номера опытов. Эти таблицы называют матрицами планирования (МП) эксперимента. Поскольку значения уровней факторов по модулю всегда равны единице, то обычно в МП записывают только знак уровня (т. е. «+» вместо «1» и «-» вместо «-1»). В табл. 5.2 для примера

приведена МП для ПФЭ типа 2^2 , которую называют базовой, так как с ее помощью легко построить матрицы любого порядка. Так, для построения матрицы 2^3 сочетаем базовую матрицу с нижним и верхним уровнями x_3 (табл. 5.3). Легко заметить, что в первом столбце знаки меняются поочередно, во втором через 2, в третьем через 4 и так далее. То есть $2^0, 2^1, 2^2, 2^3, \dots$

Таблица 5.2

Матрица планирования ПФЭ типа 2^2

Номер опыта	x_1	x_2	y
1	-	-	y_1
2	+	-	y_2
3	-	+	y_3
4	+	+	y_4

Таблица 5.3

Матрица планирования ПФЭ типа 2^3

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	y
1	-	-	-	y_1
2	+	-	-	y_2
3	-	+	-	y_3
4	+	+	-	y_4
5	-	-	+	y_5
6	+	-	+	y_6
7	-	+	+	y_7
8	+	+	+	y_8

Влияние факторов на выходной параметр может зависеть от уровня, на котором находится другой фактор, или от сочетания уровней нескольких факторов. Если априорно не известно, что такой зависимости между факторами нет, то строят развернутую МП, учитывающую не только факторы, но и их взаимодействия. При этом знаки в столбцах для взаимодействий получают перемножением знаков взаимодействующих факторов. Пример развернутой МП для ПФЭ дан в табл. 5.4.

Фиктивный фактор x_0 вводят для удобства машинного расчета свободного члена b_0 (для идентичности формул).

Развернутая матрица планирования для ПФЭ типа 2^3

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	+	-	-	-	+	+	+	-	y_1
2	+	+	-	-	-	-	+	+	y_2
3	+	-	+	-	-	+	-	+	y_3
4	+	+	+	-	+	-	-	-	y_4
5	+	-	-	+	+	-	-	+	y_5
6	+	+	-	+	-	+	-	-	y_6
7	+	-	+	+	-	-	+	-	y_7
8	+	+	+	+	+	+	+	+	y_8

Приведенная в табл. 5.4 матрица планирования обладает следующими свойствами:

1) ортогональность:

$$\sum_{i=1}^N x_{ui} x_{ji} = 0, \quad u \neq j, \quad u, j = 0, 1, \dots, k;$$

2) симметричность относительно центра эксперимента:

$$\sum_{i=1}^N x_{ji} = 0, \quad j \neq 0, \quad j = 1, 2, \dots, k;$$

3) условие нормировки:

$$\sum_{i=1}^N x_{ji}^2 = N, \quad j = 0, 1, \dots, k,$$

где k — число независимых факторов; N — число опытов в матрице планирования;

4) рототабельность — свойство равноточного предсказания исследуемого параметра на равных расстояниях от центра эксперимента вне зависимости от направления.

Свойство ортогональности позволяет упростить вычисления и получить независимые оценки коэффициентов регрессии. Это означает, в частности, что замена нулем любого коэффициента в уравнении ММ не изменит оценок остальных коэффициентов. Это свойство может быть полезным, когда точный вид модели не известен и требуется по экспериментальным данным ото-

брать факторы, существенно влияющие на исследуемый параметр. Если условие ортогональности не выполняется, после исключения каждого незначимого коэффициента необходимо пересчитывать оценки оставшихся коэффициентов и их дисперсии. При этом могут измениться как доверительные интервалы, так и выводы относительно коэффициентов значимости. Матрица, удовлетворяющая условиям симметричности, нормировки и ортогональности, называется оптимальной. МП ПФЭ является оптимальной для линейных ММ. Если же ММ содержит взаимодействия, то свойство ротатабельности не выполняется.

3. Постановка опытов

Для оценки точности эксперимента для каждой i -й точки факторного пространства (для каждого сочетания уровней факторов МП) проводят K опытов. В результате получают значения $y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{iK}$ исследуемого параметра, для которых находят среднее значение

$$\bar{y} = \frac{1}{K} \sum_{t=1}^K y_{it} \quad (5.4)$$

При этом опыты в одной точке проводят не подряд, а обходят все точки в первой серии опытов, затем во второй и так далее до K -й. Для уменьшения влияния внешней среды и неконтролируемых факторов внутри каждой серии точки факторного пространства обходят случайным образом – рандомизируют последовательность опытов. Например, в случае постановки двух серий опытов для экспериментов 2^3 получим такие последовательности:

1 серия: 4, 2, 3, 7, 8, 1, 5, 6;

2 серия: 2, 4, 6, 8, 5, 7, 3, 1.

Это означает, что в первой серии опытов первым выполняется опыт в точке факторного пространства № 4, вторым – в точке № 2 и т. д. Во второй серии первым выполняется опыт в точке № 2, вторым – в точке № 4 и т. д.

4. Проверка воспроизводимости опытов (однородности дисперсий)

Опыт считается воспроизводимым, если дисперсия D_{y_i} выходного параметра y_i однородна в каждой точке факторного пространства. Оценка S_{y_i} дис-

персии D_{y_i} определяется для каждой точки факторного пространства по формуле:

$$S_{y_i}^2 = \frac{1}{K-1} \sum_{t=1}^K (y_{it} - \bar{y}_i)^2, \quad (5.5)$$

где K – число параллельных опытов.

Гипотезу однородности (равенства) дисперсий проверяют с помощью критерия Кохрена. Расчетное значение этого критерия определяют по формуле:

$$G_p = \frac{\max(S_{y_i}^2)}{\sum_{i=1}^N S_{y_i}^2}, \quad (5.6)$$

а его критическое значение $G_{кр}$ находят из таблицы распределения Кохрена по числу степеней свободы числителя $f_1 = K - 1$, знаменателя $f_2 = N$ и уровню значимости p (см. табл. 5.5).

Таблица 5.5

Значения критерия Кохрена ($p=0,05$)

$f_2=N$	$f_1=K-1$							
	1	2	3	4	5	6	7	8
2	0,999	0,975	0,939	0,906	0,877	0,853	0,833	0,816
3	0,967	0,871	0,798	0,746	0,707	0,677	0,653	0,633
4	0,907	0,768	0,684	0,629	0,590	0,560	0,637	0,518
5	0,841	0,684	0,598	0,544	0,507	0,478	0,456	0,439
6	0,781	0,616	0,532	0,480	0,445	0,418	0,398	0,382
7	0,727	0,561	0,480	0,431	0,397	0,373	0,354	0,338
8	0,680	0,516	0,438	0,391	0,360	0,336	0,319	0,304
9	0,639	0,478	0,403	0,358	0,329	0,307	0,290	0,277
10	0,602	0,445	0,373	0,331	0,303	0,282	0,267	0,254
12	0,541	0,392	0,326	0,288	0,262	0,244	0,230	0,219
15	0,471	0,335	0,276	0,242	0,220	0,203	0,191	0,182
20	0,389	0,271	0,221	0,192	0,174	0,160	0,150	0,142

Если $G_p < G_{кр}$, гипотеза об однородности дисперсий принимается, в противном случае – отвергается, и тогда эксперимент необходимо повторить, из-

менив условия его проведения (набор факторов, интервал их варьирования, точность измерительных приборов и пр.). Например, если при варьировании какого-то фактора изменение исследуемого параметра сравнимо с погрешностью эксперимента, то интервал варьирования необходимо увеличивать примерно на порядок.

На рис. 5.1 представлен пример реализации алгоритма проверки воспроизводимости опытов в программе MathCAD.

Проверка воспроизводимости опытов

Вводим результаты эксперимента, находим среднее из трех параллельных опытов значение исследуемого параметра:

$$Y := \begin{pmatrix} 3.63 & 3.64 & 3.61 \\ 3.46 & 3.44 & 3.45 \\ 3.31 & 3.29 & 3.34 \\ 3.09 & 3.09 & 3.09 \\ 4.39 & 4.38 & 4.38 \\ 4.28 & 4.28 & 4.29 \\ 4.10 & 4.11 & 4.08 \\ 3.94 & 3.94 & 3.95 \end{pmatrix} \quad MY_i := \text{mean}(Y_{i,1}, Y_{i,2}, Y_{i,3}) \quad MY = \begin{pmatrix} 3.627 \\ 3.45 \\ 3.313 \\ 3.09 \\ 4.383 \\ 4.283 \\ 4.097 \\ 3.943 \end{pmatrix}$$

Оцениваем дисперсию для каждой точки факторного пространства:

$$S2y_i := \frac{\sum_{j=1}^3 (Y_{i,j} - MY_i)^2}{3 - 1} \quad S2y = \begin{pmatrix} 2.333 \times 10^{-4} \\ 1 \times 10^{-4} \\ 6.333 \times 10^{-4} \\ 0 \\ 3.333 \times 10^{-5} \\ 3.333 \times 10^{-5} \\ 2.333 \times 10^{-4} \\ 3.333 \times 10^{-5} \end{pmatrix}$$

Вычисляем критерий Кохрена:

$$G_p := \frac{\max(S2y)}{\sum_{i=1}^8 S2y_i} \quad G_p = 0.487$$

Находим табличное значение критерия Кохрена по числу степеней свободы числителя $n_1=3-1=2$, знаменателя $n_2=8$ и уровню значимости $p=0,05$:
 $G_{p_tabl} := 0.516$
 Поскольку $G_p < G_{p_tabl}$, то дисперсии однородны, опыты воспроизводимы.

Рис. 5.1. Реализация алгоритма проверки воспроизводимости опытов в программе MathCAD

5. Расчет оценок коэффициентов регрессионного уравнения

Расчет оценок коэффициентов уравнения регрессии производится по методу наименьших квадратов, при этом минимизируется сумма квадратов отклонений между экспериментальными значениями исследуемого параметра и значениями, вычисленными для тех же точек факторного пространства по уравнению регрессии. Благодаря предварительной стандартизации масштаба факторов и ортогональности МП, расчет оценок коэффициентов регрессии в ПФЭ превращается в простую арифметическую процедуру:

$$b_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_i y_j. \quad (5.7)$$

6. Проверка значимости коэффициентов регрессии

Гипотезу о статистической значимости (отличии от нуля) коэффициентов регрессии проверяют по критерию Стьюдента. Расчетное значение t_p этого критерия определяют как частное от деления модуля коэффициента b_i на оценку его среднеквадратического отклонения S_b :

$$t_p = \frac{|b_i|}{S_b}. \quad (5.8)$$

В ПФЭ, благодаря одинаковой удаленности всех экспериментальных точек факторного пространства от центра эксперимента, оценки всех коэффициентов уравнения регрессии независимо от их величины вычисляются с одинаковой погрешностью (при выполнении условия воспроизводимости опытов):

$$S_b = \sqrt{S_b^2} = \sqrt{\frac{S_y^2}{N}} = \frac{S_y}{\sqrt{N}}, \quad (5.9)$$

где S_b^2 – дисперсия коэффициента; S_y^2 – дисперсия воспроизводимости эксперимента; S_y – оценка дисперсии воспроизводимости эксперимента.

Дисперсию воспроизводимости эксперимента можно найти как среднее от дисперсий каждого опыта:

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^N S_{y_i}^2}{N}. \quad (5.10)$$

Критическое значение критерия $t_{кр}$ находят из таблицы распределения Стьюдента по числу степеней свободы $f=N(K-1)$ и уровню значимости q (см. табл. 5.6). Если $t_p > t_{кр}$, гипотеза о значимости коэффициента b_i принимается, в противном случае коэффициент считается незначимым и приравнивается нулю.

Таблица 5.6

Значения критерия Стьюдента ($p=0,95$)

f	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
t	12,71	4,30	3,18	2,78	2,57	2,45	2,36	2,31	2,26	2,23
f	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
t	2,20	2,18	2,16	2,14	2,13	2,12	2,11	2,10	2,09	2,09

Необходимо помнить, что незначимость коэффициента может быть обусловлена и неверным выбором интервала варьирования фактора. Поэтому иногда бывает полезным расширить интервал варьирования и провести новый эксперимент.

Пример расчета коэффициентов уравнения регрессии и проверки их на значимость, реализованного в программе MathCAD, приведен на рис. 5.2.

7. Проверка адекватности полученной математической модели

Для проверки гипотезы об адекватности математической модели необходимо сравнить две дисперсии:

а) дисперсию остатков, зависящую от разности между значениями y_{ip} , рассчитанными по ММ, и экспериментальными результатами y_{it} :

$$S_{ост}^2 = \frac{1}{K(N-L-1)} \sum_{j=1}^N \sum_{t=1}^K (y_{jp} - y_{it})^2 \quad (5.11)$$

или

$$S_{ост}^2 = \frac{1}{(N-L-1)} \sum_{j=1}^N (y_{jp} - \bar{y}_j)^2, \quad (5.12)$$

где L – число значимых коэффициентов исследуемого уравнения регрессии, не считая b_0 ;

б) дисперсию воспроизводимости, характеризующую погрешности наблюдений и рассчитываемую по формуле (5.10).

Находим коэффициенты линейной регрессии (для трех факторов и трех эффектов двойного взаимодействия) и запишем их в вектор B .

$$B := \left| \begin{array}{l} \text{for } k \in 1..7 \\ b_k \leftarrow \frac{1}{8} \cdot \sum_{i=1}^8 (X_{i,k} \cdot MY_i) \\ b \end{array} \right. \quad B = \begin{pmatrix} 3.773 \\ 0.082 \\ 0.162 \\ -0.403 \\ -0.013 \\ 5.833 \times 10^{-3} \\ 0.018 \end{pmatrix}$$

Проверка значимости коэффициентов регрессии:

- Находим оценку коэффициентов уравнения регрессии:

$$S_b := \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^8 S2y_i}{8 \cdot 8}} \quad S_b = 4.507 \times 10^{-3}$$
- Определяем критерий Стьюдента:

$$t := \left| \begin{array}{l} \text{for } k \in 1..7 \\ t_k \leftarrow \frac{|B_k|}{S_b} \\ t \end{array} \right.$$

$t^T = (837.227 \quad 18.12 \quad 36.056 \quad 89.492 \quad 2.774 \quad 1.294 \quad 4.068)$

- Находим табличное значение критерия Стьюдента для уровня значимости $p=0,05$ и числа степеней свободы $f=8(3-1)=16$: $tp(f)=2,12$.
Коэффициент B_6 уравнения регрессии незначим, т.к. $t_6 < tp$.

Рис. 5.2. Регрессионный анализ опытных данных

Адекватность ММ проверяется по критерию Фишера F . Его расчетное значение находят как частное от деления оценки дисперсии остатков на оценку дисперсии воспроизводимости:

$$F_p = \frac{S_{\text{ост}}^2}{S_y^2}, \quad (5.13)$$

причем $S_{\text{ост}}^2 > S_y^2$. Если это условие не выполняется, их нужно поменять местами.

Критическое значение $F_{\text{кр}}$ находят из таблицы распределения Фишера по числу степеней свободы числителя $f_1=N-L-1$, знаменателя $f_2=N(K-1)$ и уровню значимости q (см. табл. 5.7). Если $F_p > F_{\text{кр}}$, то гипотеза об адекватности отклоняется.

На рис. 5.3 представлен пример проверки адекватности уравнения регрессии в программе MathCAD.

Запишем уравнение регрессии, включив в него только значимые коэффициенты:

$$Q1_i := B_1 + B_2 \cdot X_{i,2} + B_3 \cdot X_{i,3} + B_4 \cdot X_{i,4} + B_5 \cdot X_{i,5} + B_7 \cdot X_{i,7}$$

Вычисляем остаточную дисперсию:

$$S_{\text{ост}} := \frac{\sum_{i=1}^8 (|Q1_i - MY_i|)^2}{8 - 5 - 1} \quad S_{\text{ост}} = 1.389 \times 10^{-4}$$

Вычисляем дисперсию воспроизводимости:

$$D := \frac{\sum_{i=1}^8 S2y_i}{8} \quad D = 1.625 \times 10^{-4}$$

Вычисляем критерий Фишера:

$$F := \frac{S_{\text{ост}}}{D} \quad F = 0.855$$

Находим критическое значение критерия Фишера:

$$F_{\text{кр}} := qF(0.95, 4, 16) \quad F_{\text{кр}} = 3.007$$

Поскольку $F < F_{\text{кр}}$ полученное уравнение регрессии адекватно опытным данным

Рис. 5.3. Проверка адекватности уравнения регрессии

Как правило, вначале проверяют адекватность линейной ММ. Если предположение об адекватности подтверждается, то в качестве окончатель-

ной ММ выбирают линейную; если отклоняется – добавляют эффект взаимодействия с наибольшим коэффициентом и вновь проверяют гипотезу, и так до тех пор, пока существуют степени свободы.

Если в результате модель все же оказалась неадекватной, это говорит о том, что тип математической модели выбран неудачно и при данном шумовом уровне и классе точности измерительных приборов ММ должна быть уточнена.

Для этого следует использовать более сложные модели, например, квадратичные (ортогональное и рототабельное композиционное планирование).

Таблица 5.7

Значения критерия Фишера ($p=0,95$)

f_2	f_1							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	161,45	199,50	215,71	224,58	230,16	233,99	236,77	238,88
2	18,51	19,00	19,16	19,25	19,30	19,33	19,35	19,37
3	10,13	9,55	9,28	9,12	9,01	8,94	8,89	8,85
4	7,71	6,94	6,59	6,39	6,26	6,16	6,09	6,04
5	6,61	5,79	5,41	5,19	5,05	4,95	4,88	4,82
6	5,99	5,14	4,76	4,53	4,39	4,28	4,21	4,15
7	5,59	4,74	4,35	4,12	3,97	3,87	3,79	3,73
8	5,32	4,46	4,07	3,84	3,69	3,58	3,50	3,44
9	5,12	4,26	3,86	3,63	3,48	3,37	3,29	3,24
10	4,97	4,10	3,71	3,48	3,33	3,22	3,14	3,07
11	4,84	3,98	3,59	3,36	3,20	3,10	3,01	2,95
12	4,75	3,89	3,49	3,26	3,11	3,00	2,91	2,85
13	4,67	3,81	3,41	3,18	3,03	2,92	2,83	2,77
14	4,60	3,74	3,34	3,11	2,96	2,85	2,76	2,70
15	4,54	3,68	3,29	3,06	2,90	2,79	2,71	2,64
16	4,49	3,63	3,24	3,01	2,85	2,74	2,66	2,59
17	4,45	3,59	3,20	2,97	2,81	2,70	2,71	2,55
18	4,41	3,56	3,16	2,93	2,77	2,66	2,58	2,51
19	4,38	3,52	3,13	2,90	2,74	2,63	2,54	2,48
20	4,35	3,49	3,10	2,87	2,71	2,60	2,51	2,45

8. Переход к физическим переменным

Для записи ММ в реальных физических величинах производят обратный переход от стандартизированного масштаба к натуральному:

$$z_j = z_j^0 + \Delta z_j x_j. \quad (5.14)$$

После чего записывают окончательный вид модели.

Порядок выполнения работы

1. В соответствии с индивидуальным заданием необходимо перейти к стандартизированному масштабу факторов, составить матрицу планирования ПФЭ и проверить ее свойства.
2. Проверить воспроизводимость опытов (однородность дисперсий). Опытные значения необходимо взять из табл. 5.8 в соответствии с номером варианта.
3. Провести ПФЭ (найти коэффициенты уравнения регрессии).
4. Рассчитать оценки коэффициентов регрессионного уравнения.
5. Проверить статистическую значимость коэффициентов регрессии.
6. Проверить адекватность полученной математической модели.
7. Перейти к исходным физическим переменным.
8. Записать полученную математическую модель и сделать выводы.

Отчет по выполненной работе должен содержать:

1. Постановку задачи и цель работы.
2. Матрицу планирования эксперимента.
3. Результаты проверки воспроизводимости опытов.
4. Результаты расчетов коэффициентов регрессии и проверки их статистической значимости.
5. Результаты проверки адекватности полученной математической модели исходным экспериментальным данным.
5. Математическую модель исследуемого объекта в нормированных и физических переменных.
6. Выводы и предложения о ходе дальнейших исследований, составленные на основании анализа математической модели.

Варианты заданий

1. Исследуется влияние на плотность образцов фторопласта-4 ρ трех факторов: температуры $t=40-60$ °C, давления $P=200-300$ МПа и частоты ультразвука $\nu=22,36-21,92$ кГц. В каждом опыте выполняются три параллельных измерения. Опытные значения плотности образцов фторопласта-4 ρ кг/м³ см. в табл. 5.8.

2. Требуется исследовать влияние на качество производства магнитных дисков К трех производственных факторов: опорного напряжения $U=28-32$ В, тока потребления $I=17-19$ А, конечной температуры нагрева $T = 200-240$ °C. В каждом опыте выполняется по три замера показателя качества (табл. 5.8).

3. Исследуется влияние на степень конверсии полимера В трех факторов: температуры воды $t=40-45$ °C, концентрации исходных компонентов $C=42-43$ % и степени нейтрализации метакриловой кислоты $n=0,34-0,38$. Экспериментальные значения конверсии полимера В % см. в табл. 5.8.

4. Исследуется влияние на вязкость водного раствора сополимера μ трех факторов: температуры воды $t=40-45$ °C, концентрации исходных компонентов $C=42-43$ % и степени нейтрализации метакриловой кислоты $n=0,34-0,38$. Экспериментальные значения вязкости водного раствора сополимера μ Па·с см. в табл. 5.8.

5. Исследуется влияние на влажность сополимера ω трех факторов: температуры воды $t_1=40-45$ °C, количества воздуха, поступающего в установку $G=70-90$ кг/ч, температуры воздуха, поступающего в аппарат $t_2=55-60$ °C. Экспериментальные значения влажности сополимера ω кг/кг см. в табл. 5.8.

6. Исследуется влияние на конечную концентрацию НМС в полимере C_k трех факторов: температуры реакции $t=160-200$ °C, давления в аппарате $P=2-3$ ат, начального влагосодержания $\omega=10-12$ %. Экспериментальные значения конечной концентрации НМС в полимере C_k % см. в табл. 5.8.

7. Исследуется влияние на температуру в аппарате t трех факторов: температуры теплоносителя $t_{тн}=60-110$ °C, расхода теплоносителя $G_{тн}=0,2-0,4$

кг/с, расхода реакционной массы $G_{\text{рм}}=0,1-0,3$ кг/с. Экспериментальные значения температуры в аппарате t °C см. в табл. 5.8.

8. Исследуется влияние на напряжение, потребляемое лопастной мешалкой при числе оборотов $n=600$ об/мин, трёх факторов: температуры перемешиваемой среды $t=20-40$ °C, диаметра мешалки $d=0,1-0,15$ м и массовой доли дисперсной фазы $x=0-0,4$. Экспериментальные значения напряжения U В см. в табл. 5.8.

9. Исследуется влияние на силу тока, потребляемую лопастной мешалкой при числе оборотов $n=600$ об/мин, трёх факторов: температуры перемешиваемой среды $t=20-40$ °C, диаметра мешалки $d=0,1-0,15$ м и массовой доли дисперсной фазы $x=0-0,4$. Экспериментальные значения силы тока I А см. в табл. 5.8.

10. Исследуется влияние на мощность, потребляемую якорной мешалкой при числе оборотов $n=500$ об/мин, трёх факторов: температуры перемешиваемой среды $t=20-40$ °C, диаметра мешалки $d=0,3-0,35$ м и массовой доли дисперсной фазы $x=0-0,2$. Экспериментальные значения мощности N Вт см. в табл. 5.8.

11. Исследуется влияние на силу тока, потребляемого приводом якорной мешалки при числе оборотов $n=500$ об/мин, трёх факторов: температуры перемешиваемой среды $t=20-40$ °C, диаметра мешалки $d=0,3-0,35$ м и массовой доли дисперсной фазы $x=0-0,2$. Экспериментальные значения силы тока I А см. в табл. 5.8.

12. Исследуется влияние на толщину слоя осадка ($h_{\text{ос}}$ мм), образующуюся при фильтровании на вакуум-филт্রে, трёх факторов: температуры суспензии в диапазоне $t=10-30$ °C, вакуума $P=300-600$ мм рт.ст., содержания дисперсной фазы $x=0,01-0,03$. Экспериментальные значения толщины слоя осадка $h_{\text{ос}}$ мм см. в табл. 5.8.

13. В конвективной сушилке исследуется влияние на конечное влагосодержание материала ω трёх факторов: скорости сушильного агента в диапазоне $w=1-3$ м/с, толщины высушиваемого образца $\delta=0,001-0,004$ м и температу-

ры сушки $t=90-100$ °C. Экспериментальные значения конечного влагосодержания материала ω кг/кг см. в табл. 5.8.

14. В конвективной сушилке исследуется влияние на время выхода на равновесное влагосодержание материала τ трёх факторов: скорости сушильного агента $w=1-3$ м/с, толщины высушиваемого образца $\delta=0,001-0,004$ м и температуры сушки $t=90-100$ °C. Экспериментальные значения времени выхода на равновесное влагосодержание материала τ с см. в табл. 5.8.

15. В насадочном абсорбере осуществляется поглощение аммиака из смеси с воздухом водой. Исследуется влияние на конечное содержание аммиака в воздухе u_k расходов: воздуха $G_B=0,0005-0,001$ кг/с, воды $L=0,001-0,005$ кг/с и аммиака $G_A=0,00005-0,0001$ кг/с. Экспериментальные значения конечного содержания аммиака в воздухе u_k мольные доли см. в табл. 5.8.

16. В насадочном абсорбере осуществляется поглощение аммиака водой из смеси с воздухом. Исследуется влияние на избыточное давление в абсорбере $P_{изб}$ расходов: воздуха $G_B=0,0005-0,001$ кг/с, воды $L=0,001-0,005$ кг/с и аммиака $G_A=0,00005-0,0001$ кг/с. Экспериментальные значения избыточного давления в абсорбере $P_{изб}$ Па см. в табл. 5.8.

17. Аналитически определяется концентрация абсорбтива в воздухе на выходе из абсорбера. Исследуется влияние на объем поглощаемой щелочи $V_{щ}$ следующих параметров процесса абсорбции: расхода воздуха $G_B=0,0005-0,001$ кг/с, расхода воды $L=0,001-0,005$ кг/с и расхода аммиака $G_A=0,00005-0,0001$ кг/с. Экспериментальные значения объема поглощаемой щелочи $V_{щ}$ мл см. в табл. 5.8.

18. Исследуется зависимость выхода продукта Y от следующих параметров: температуры реакции $t=340-360$ K, времени пребывания $\tau=10-12$ мин, концентрации реагента $C=0,8-1,2$ моль/л. Экспериментальные значения выхода продукта Y % см. в табл. 5.8.

19. Изучается влияние на конечную концентрацию мономера в гранулах полимера $C_{кон}$ следующих параметров процесса сушки: расхода сушильного газа $G=16-20$ л/ч, температуры сушильного газа $t=145-155$ °C и диаметра гра-

нул полимера $d=0,002-0,003$ м. Экспериментальные значения конечной концентрации мономера в гранулах полимера после сушки $C_{\text{кон}} \%$ см. в табл. 5.8.

20. Ведется экспериментальное исследование процесса сушки гранул полимера в токе азота. Исследуется влияние расхода азота $G=16-20$ л/ч, температуры азота $t=145-155$ °С и диаметра гранул полимера $d=0,002-0,003$ м на конечное влагосодержание азота w . Экспериментальные значения конечного влагосодержания азота $w \%$ см. в табл. 5.8.

Таблица 5.8

Опытные данные для индивидуальных заданий

1 вариант				2 вариант			
Номер опыта	Номер замера			Номер опыта	Номер замера		
	1	2	3		1	2	3
1	0,9484	0,9465	0,9488	1	8,65	7,95	9,02
2	0,9484	0,9481	0,9472	2	15,15	14,42	14,98
3	0,9677	0,9635	0,9697	3	6,85	6,94	6,37
4	0,9426	0,9420	0,9446	4	9,15	9,63	8,76
5	0,9251	0,9205	0,9257	5	8,65	8,22	9,03
6	0,9929	0,9896	0,9979	6	31,35	31,30	31,65
7	0,9307	0,9257	0,9317	7	10,25	10,69	9,85
8	0,9402	0,9392	0,9412	8	21,55	21,16	21,91
3 вариант				4 вариант			
Номер опыта	Номер замера			Номер опыта	Номер замера		
	1	2	3		1	2	3
1	61	60	61	1	9,67	10,23	9,78
2	53	54	52,5	2	11,24	11,02	11,23
3	60,82	61,5	60	3	9,8	9,45	9,70
4	53	51	52,8	4	11,24	11,56	11,12
5	64,09	65	68,8	5	12,6	12,12	12,55
6	57	59	56,5	6	17,59	16,98	17,48
7	64	61	65	7	12,55	13,35	12,56
8	56,59	58,5	57	8	17,64	17,21	17,98
5 вариант				6 вариант			
Номер опыта	Номер замера			Номер опыта	Номер замера		
	1	2	3		1	2	3
1	55,40	56,20	55,70	1	6.059	6.102	6.078
2	57,20	57,10	57,25	2	5.118	5.098	5.105
3	55,60	55,80	55,50	3	5.135	5.111	5.120
4	57,09	57,31	57,15	4	4.983	5.020	4.994
5	53,13	52,88	53,20	5	6.025	6.090	6.048
6	54,37	54,30	54,27	6	5.067	5.102	5.097
7	53,12	53,40	52,98	7	5.101	5.100	5.100
8	54,20	54,45	54,05	8	4.998	5.008	5.003

Продолжение табл. 5.8

7 вариант				8 вариант			
Номер опыта	Номер замера			Номер опыта	Номер замера		
	1	2	3		1	2	3
1	73	69	68	1	8,1	7,9	8,2
2	58	58	64	2	7,75	7,92	7,78
3	54	59	52	3	20,59	20,41	20,78
4	84	94	92	4	19,72	20,01	19,65
5	100	106	109	5	9,16	9,25	9,14
6	98	90	97	6	8,73	8,74	8,73
7	77	85	78	7	23,16	23,16	23,08
8	105	95	100	8	22,18	21,85	22,14
9 вариант				10 вариант			
Номер опыта	Номер замера			Номер опыта	Номер замера		
	1	2	3		1	2	3
1	0,8	0,77	0,85	1	532,7	530,8	534,1
2	0,76	0,71	0,75	2	504,9	500,6	504,7
3	2,06	1,99	2,06	3	753,6	753,8	756,1
4	1,97	1,98	1,98	4	714,2	714,2	714,1
5	0,91	0,92	0,91	5	578,5	578,4	578,5
6	0,873	0,86	0,90	6	548,2	548,3	548,4
7	2,32	2,30	2,38	7	818,3	818,0	819,0
8	2,22	2,20	2,23	8	775,5	775,6	775,5
11 вариант				12 вариант			
Номер опыта	Номер замера			Номер опыта	Номер замера		
	1	2	3		1	2	3
1	5,33	5,32	5,31	1	1,20	1,19	1,22
2	5,05	5,06	5,03	2	1,64	1,63	1,64
3	7,54	7,54	7,54	3	1,71	1,71	1,71
4	7,14	7,10	7,17	4	2,29	2,29	2,31
5	5,78	5,75	5,79	5	2,45	2,43	2,46
6	5,48	5,48	5,47	6	3,26	3,25	3,25
7	8,18	8,19	8,18	7	3,29	3,27	3,25
8	7,75	7,71	7,74	8	4,30	4,31	4,29
13 вариант				14 вариант			
Номер опыта	Номер замера			Номер опыта	Номер замера		
	1	2	3		1	2	3
1	1,945	1,945	1,945	1	2880	2878	2882
2	1,945	1,946	1,945	2	1680	1679	1685
3	1,992	1,991	1,992	3	3480	3480	3481
4	1,947	1,947	1,945	4	3240	3238	3241
5	1,915	1,913	1,913	5	2640	2643	2644
6	1,915	1,915	1,916	6	1560	1560	1559
7	1,938	1,937	1,940	7	3480	3481	3480
8	1,918	1,918	1,917	8	3000	3000	3001

15 вариант				16 вариант			
Номер опыта	Номер замера			Номер опыта	Номер замера		
	1	2	3		1	2	3
1	0,089	0,089	0,088	1	98,99	98,85	98,79
2	0,061	0,063	0,062	2	239,47	239,06	239,98
3	0,025	0,026	0,025	3	163,62	163,38	163,95
4	0,033	0,030	0,031	4	382,39	382,30	382,88
5	0,049	0,048	0,048	5	98,99	98,52	99,10
6	0,095	0,096	0,092	6	239,47	239,02	239,63
7	0,045	0,042	0,044	7	163,62	164,01	163,63
8	0,062	0,061	0,064	8	382,39	382,37	382,45
17 вариант				18 вариант			
Номер опыта	Номер замера			Номер опыта	Номер замера		
	1	2	3		1	2	3
1	8,70	8,75	8,78	1	78	78	77
2	22,67	22,60	22,70	2	75	74	77
3	39,89	39,80	39,88	3	58	56	60
4	36,31	36,25	36,36	4	49	48	49
5	28,96	29,00	28,98	5	62	61	61
6	5,02	5,00	5,03	6	67	68	67
7	30,90	30,88	30,93	7	81	81	79
8	22,57	22,55	22,56	8	80	82	83
19 вариант				20 вариант			
Номер опыта	Номер замера			Номер опыта	Номер замера		
	1	2	3		1	2	3
1	3,63	3,64	3,61	1	0,86	0,86	0,85
2	3,46	3,46	3,45	2	0,70	0,70	0,70
3	3,31	3,30	3,31	3	0,91	0,92	0,91
4	3,09	3,09	3,09	4	0,73	0,71	0,73
5	4,39	4,38	4,38	5	0,77	0,76	0,78
6	4,28	4,28	4,29	6	0,62	0,62	0,63
7	4,10	4,11	4,08	7	0,82	0,80	0,82
8	3,94	3,94	3,95	8	0,67	0,67	0,65

Контрольные вопросы

1. В чем сущность планирования эксперимента? Поясните разницу между активным и пассивным экспериментом.
2. Какие задачи решает теория планирования эксперимента?
3. Что такое факторы оптимизации, и какие требования к ним предъявляются?
Как выбрать уровни варьирования факторов?
4. Какие требования предъявляются к параметрам оптимизации?
5. В чем сущность ПФЭ, и какие ММ он позволяет исследовать?

6. Какую область описывает уравнение регрессии, полученное с помощью ПФЭ, и в каких границах его можно использовать?
7. Что такое взаимодействие факторов и сколько их в ПФЭ?
8. В чем сущность и цели стандартизации масштаба факторов?
9. Как составляется и какими свойствами обладает МП ПФЭ?
10. Каков порядок постановки опытов при ПФЭ?
11. Как проверить воспроизводимость опытов?
12. Как рассчитать оценки коэффициентов регрессионного уравнения?
13. Как проверить статистическую значимость оценок коэффициентов регрессии?
14. Как проверить адекватность полученной ММ?
15. Как перейти к исходным физическим переменным?

Лабораторная работа №6

Оптимизация с использованием встроенных функций MathCAD

Цель работы: знакомство с основными видами задач оптимизации. Овладение навыками решения оптимизационных задач с помощью встроенных функций пакета MathCAD.

Основные понятия теории оптимизации

Важнейшей задачей применения расчетных методов при компьютерном моделировании химико-технологических процессов (ХТП) является определение оптимальных, т.е. наилучших условий их функционирования.

Решение экстремальной задачи заключается в нахождении совокупности значений независимых (оптимизирующих или управляющих) переменных, при которой заданная целевая функция этих переменных имеет максимальное или минимальное значение. Для решения таких задач разработано достаточно много математических методов, отличающихся стратегией поиска экстремума.

В дальнейшем будем полагать, что всегда ищется экстремум, являющийся минимумом заданной целевой функции многих переменных. Задача на поиск максимума сводится к задаче на поиск минимума простым изменением знака функции.

Существуют два типа задач оптимизации: безусловные и условные.

Безусловная задача оптимизации состоит в отыскании минимума или максимума действительной функции от n действительных переменных и определении соответствующих значений аргументов:

$$\min_{\bar{x}^{\min} \leq \bar{x} \leq \bar{x}^{\max}} R(\bar{x}). \quad (6.1)$$

Условные задачи оптимизации, или задачи с ограничениями, заключаются в отыскании экстремума целевой функции при заданных ограничениях в виде равенств и (или) неравенств. Ограничения могут быть линейными и (или) нелинейными. Математически задача условной оптимизации формулируется следующим образом:

найти $f(x) \rightarrow \min$ при ограничениях:

$$\varphi_i(x) = 0, i \in 1 \dots I, \quad (6.2)$$

$$g_j(x) \leq 0, j \in 1 \dots J. \quad (6.3)$$

Решение задач оптимизации, в которых критерий оптимальности является линейной функцией независимых переменных с линейными ограничениями на них, составляет предмет линейного программирования. Предметом нелинейного программирования является решение задач оптимизации, в которых критерий оптимальности является нелинейной функцией независимых переменных с нелинейными ограничениями на неё.

Геометрическая интерпретация задачи оптимизации

Предположим, что через точку x^{opt} в n -мерном пространстве, соответствующую оптимальному решению задачи, например, минимуму целевой функции, проведена двухмерная плоскость P . Тогда при удалении от точки x^{opt} по этой плоскости в любом направлении значение $R(x)$ увеличивается. Если $R(x)$ является непрерывной функцией в области X , то вокруг точки x^{opt} в данной плоскости всегда можно провести замкнутую линию, вдоль которой значение $R(x)$ постоянно (рис. 6.1). Таких замкнутых линий, называемых линиями постоянного уровня функции $R(x)$ и отвечающих различным значениям $R(x) = c_k$, можно провести в плоскости P вокруг точки x^{opt} сколько угодно, причем каждая из этих линий для точки минимума будет целиком охватывать любую линию, для которой значение функции $R(x)$ меньше. Форма линий постоянного уровня, соответствующих разным значениям c_k при этом может существенно различаться. При наличии ограничений типа равенств рассмотренный прием изображения целевой функции также можно использовать, если принять во внимание, что каждое из уравнений (6.2) определяет в n -мерном пространстве $(n-1)$ -мерную поверхность, пересечение которой с двухмерной плоскостью P имеет вид некоторой линии (см. рис. 6.1, б), вдоль которой и ищется оптимальное решение. Ограничения типа неравенств (6.3) независимо от их числа наглядно представляются описанным способом на рис. 6.1, в.

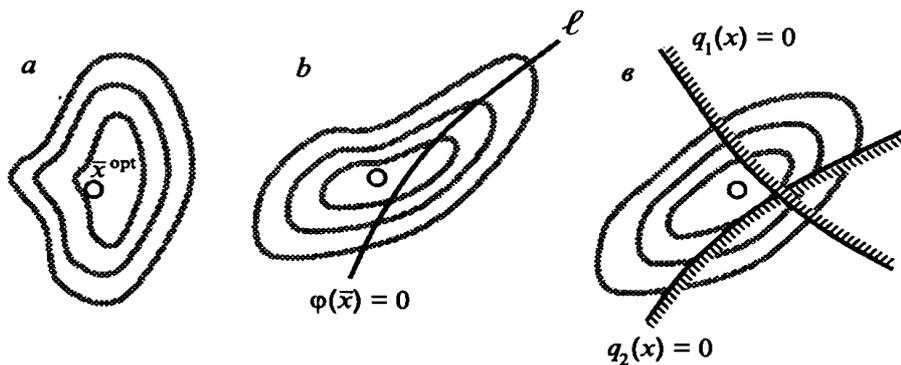


Рис.6.1. Геометрическая интерпретация задачи оптимизации:
 а – без ограничений; б – с одним ограничением в виде равенства;
 в – с двумя ограничениями в виде неравенств

Встроенные функции MathCAD для решения оптимизационных задач

Для решения задач оптимизации в MathCAD имеются две встроенные функции: Minimize и Maximize. Они относятся к категории функций Solving и реализуют процедуру поиска экстремума функции многих переменных как при наличии, так и при отсутствии ограничений на комбинации последних. Функции в задачах оптимизации могут быть как линейными, так и нелинейными (например, квадратичными). Поэтому при использовании встроенных функций Minimize и Maximize предусмотрен выбор метода оптимизации (например, метод сопряженных градиентов, метод Ньютона, метода Левенберга-Марквардта для нелинейных функций), для чего необходимо нажать правую кнопку мыши при наведении курсора на логин Minimize или Maximize.

Синтаксис функции Minimize:

$$\text{Minimize}(f, x_1, x_2, \dots, x_n),$$

где f – критерий оптимизации, оформленный как целевая функция пользователя; x_1, \dots, x_n – влияющие факторы.

Функция Maximize записывается аналогично. Технология использования функций Minimize и Maximize выглядит следующим образом:

1) задается критерий оптимизации (целевая функция, которую нужно минимизировать или максимизировать);

2) задается начальное приближение для влияющего фактора (для функции одной переменной) или начальные приближения (для функции многих переменных);

3) если решается оптимизационная задача с ограничениями на управляющие переменные, то для ввода ограничений используется блок Given;

4) вызывается встроенная функция MathCAD Minimize или Maximize.

На рис. 6.2 представлен пример решения задачи поиска минимума функции одной переменной без ограничений на неё. Аналогично решается задача безусловной оптимизации для функции многих переменных.

$f1(x) := 0.5 \cdot e^x + \frac{x^3}{3} - 2x - 4$	задание минимизируемой функции;
$x := 1$	задание начального приближения;
$\text{Minimize}(f1, x) = 0.887$	вызов встроенной функции Minimize.

Рис. 6.2. Пример решения задачи одномерной безусловной оптимизации

На рис. 6.3 представлен пример решения задачи поиска минимума функции многих переменных с ограничениями в виде неравенств. Следует заметить, что при вводе ограничений в виде равенств или неравенств нужно использовать символы равенства / неравенства из панели инструментов Boolean.

$g1(x1, x2) := x1^2 - 5x1 + x2^2$	задание минимизируемой функции;
$x1 := -0.5 \quad x2 := 2$	задание начальных приближений;
Given	формирование блока ограничений;
$x1 \leq 1.5$	
$x2 > 1$	
$p := \text{Minimize}(g1, x1, x2) \quad p = \begin{pmatrix} 1.5 \\ 1 \end{pmatrix}$	вызов встроенной функции Minimize.

Рис. 6.3. Пример решения задачи многомерной условной оптимизации

Задания к лабораторной работе

С помощью встроенных функций пакета MathCAD решить три типа оптимизационных задач.

Задание 1. Одномерная оптимизация.

Найти положение точки экстремума и экстремальное значение функции $f(x)$ на интервале (a, b) . Исходные данные взять в табл. 6.1.

Таблица 6.1

Номер варианта	Вид функции $f(x)$	a	b	Экстремум
1	2	3	4	5
1	$x(\ln(x)-1) - \frac{1}{\pi} \sin \pi x$	0,5	1,5	min
	$x^3/3 + 2(e^{-x} - x^2 + 2x)$	1	2	max
2	$\frac{1}{2}e^x + \frac{x^3}{3} - 2x - 4$	0	1	min
	$-e^{-x} + 4\cos \frac{x}{2} + 1$	0	1	max
3	$x^4 - 14x^3 + 60x^2 - 70x$	0	1	min
	$\frac{1}{8}(\sin 2x - 2x) - e^{-x}$	0,5	1,5	max
4	$\frac{x^3}{3} - x^2 + x - 2\sin x$	1	2	min
	$\frac{3}{\pi} \sin \pi x + \frac{x^2}{2} - x$	0	1	max
5	$x^4 + 4x^2 - 32x + 5$	1	2	min
	$1 + 2x^2 - \frac{x^4}{4}$	-2,8	-1,8	max
6	$\frac{2}{3}\sqrt{(x+1)^3} - \frac{4}{\pi} \sin \frac{\pi x}{2}$	0	1	min
	$\ln x - \frac{3}{\pi} \sin \pi x$	1	2	max
7	$2x^2 + 3e^{-x} + 1$	0	1	min
	$\frac{x^3}{3} - 2x^2 + 4x - e^x$	0	1	max
8	$3x^4 - 16x^3 + 6x^2 + 72x - 1$	-1,4	-0,4	min
	$x + \cos 2x - 3$	0	1	max
9	$\frac{e^{1,2x}}{1,2} + \frac{2x^3}{3} - \frac{3}{2}x$	0	1	min
	$4x - \operatorname{tg} x + 1$	0,2	1,2	max

1	2	3	4	5
10	$0.4x^3 - \frac{1}{\pi} \sin \pi x$	0	1	min
	$2 \ln x - \sin \pi x$	1	2	max
11	$x^4 + 2x^2 - 128x + 87$	2,5	3,5	min
	$\frac{10}{4x^3 - 9x^2 + 6x}$	0,2	1,2	max
12	$x \ln 2x - x + \frac{1}{\pi} \cos \pi x$	0,5	1,5	min
	$\frac{x^3}{3} - 2x^2 + 4x - 2e^x$	0	1	max
13	$e^{-x} + \frac{1}{3}(4\sqrt{x^3} - 1)$	0	1	min
	$2x - x^2 - x \ln x$	0,1	1,1	max
14	$3x^4 - 16x^3 - 24x^2 - 60x + 25$	4,8	5,0	min
	$x^2 e^{-x} - 1$	1,4	2,4	max
15	$\frac{x^4}{4} - x^3 + 10$	2,3	3,3	min
	$\frac{4x}{x^2 + 4}$	1,6	2,6	max
16	$\sqrt[3]{2x^3 + 3x^2 - 36x}$	1,7	2,7	min
	$\sin 2x - x + 3$	0	1	max
17	$x - \ln x + 5$	0,3	1,3	min
	$-20x^2 + 3e^{-x} + 1$	-0,5	0,5	max
18	$\frac{x^4}{x^3 - 1}$	1,1	2,1	min
	$-\frac{x^3}{3} - x^2 + x - \sin x$	-1	1	max
19	$\frac{4}{x} + \frac{1}{x^4}$	-1,4	-0,4	min
	$x \ln x - 0,5x - \cos \pi x$	0,5	1,5	max
20	$e^{-x} + e^{2x} + 3$	-1	0	min
	$x - \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right)$	0,5	3,5	max

Задание 2. Многомерная безусловная оптимизация.

Найти экстремальное значение функции двух переменных $f(x_1, x_2)$ в окрестности точки (x_1^0, x_2^0) . Исходные данные взять в табл. 6.2.

Таблица 6.2

Номер варианта	Вид функции $f(x_1, x_2)$	Координаты исходной точки		Экстремум
		x_1^0	x_2^0	
1	2	3	4	5
1	$x_1^2+x_2^2-0.5x_1-1.6x_2+2$	1	1	min
	$4-(x_1^2+x_2-18)^2-(x_1+x_2^2)^2$	-2	1	max
2	$x_1^4+x_2^4+2x_1^2x_2^2-4x_1+3$	0	2	min
	$x_1 \cdot \sqrt{x_2} - x_1^2 - x_2 + 6x_1 + 3$	0	5	max
3	$1-2x_1-2x_2-4x_1x_2+10x_1^2+2x_2^2$	1	1	min
	$6-(x_1^2+x_2-11)^2-(x_1+x_2^2-7)^2$	1	1	max
4	$(x_1^2+x_2-8)^2+(x_1+x_2^2-18)^2+3$	3	3	min
	$x_1^3+x_1x_2^2+6x_1x_2-2$	-1	-1	max
5	$-7x_1x_2+10x_1^4+2x_2^2$	2	2	min
	$x_2\sqrt{x_1}-x_2^2-x_1+6x_2$	3	5	max
6	$(x_1-2.4)^2+x_2^2-3$	1	-2	min
	$x_1x_2^2+x_2^3+6x_1x_2+1$	0	-1	max
7	$x_1^3+8x_2^3-6x_1x_2+1$	2	1	min
	$6x_1x_2-8x_1^3-x_2^3-3$	1	2	max
8	$(x_1^2+x_2) \cdot \sqrt{e^{x_2}}$	-1	-2	min
	$2(x_1+x_2-x_1^2)+4x_1x_2-10x_2^2-5$	-1	1	max
9	$x_1^2+x_1x_2+x_2^2-6x_1-9x_2$	2	2	min
	$6x_1-x_2-x_1^2+x_1\sqrt{x_2}$	6	1	max
10	$(x_1-1)^2+(x_2-3)^2+4$	-3	5	min
	$2x_1+3x_2-x_1^2-x_2^2-2$	3	4	max
11	$2x_1^3+x_1x_2+x_2+2$	-1	3	min
	$3,2-(x_1-1)^2-(x_2-3)^2-4$	4	-1	max
12	$x_1^2+x_2^3-2x_1-3x_2+2$	0	3	min
	$4-4(x_1-0,9)^2-1,5x_2^4$	-1	-2	max

1	2	3	4	5
13	$x_1^3+x_2^3-15x_1x_2$	3	6	min
	$4-2(x_1-3)^2-(x_2-2)^2$	1	-3	max
14	$13x_1^2+12x_2^2+x_2-8x_1+8$	3	3	min
	$2-3(2-x_1)^2-0,5(x_2-1)^2$	1	1	max
15	$x_1^3+x_1x_2^2+6x_1x_2$	1	-1	min
	$7-3(x_1+4)^2-2(x_2-3)^2$	-2	2	max
16	$2x_1x_2+\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}$	4	4	min
	$x_2\sqrt{x_1}-x_2^2-x_1+3x_2$	3	3	max
17	$2x_1^2+5x_2^2-x_1-3x_2+4$	1	1	min
	$2-(x_1^2+2x_2-10)^2-(x_1+x_2^2)^2$	4	0	max
18	$x_1^3+2x_2^3-x_1x_2+5$	1	1	min
	$2x_1x_2-4x_1^3-0,5x_2^3+7$	1	2	max
19	$(2x_1-1)^2+2x_2^2-4$	1	-2	min
	$x_1x_2^2+x_2^3+x_1x_2+4$	0	-1	max
20	$3x_1^2+0,5x_2^3-x_1-4x_2+5$	1	1	min
	$5-(x_1-0,5)^2-2x_2^4$	0	0	max

Задание 3. Многомерная условная оптимизация.

Минимизировать при заданных ограничениях функцию $f(x_1, x_2)$. Исходные данные взять в табл. 6.3.

Таблица 6.3

Номер варианта	Вид функции $f(x)$	Вид ограничения	Координаты исходной точки	
			x_1^0	x_2^0
1	2	3	4	5
1	$x_1^2+x_2^2$	$x_2 \geq 0; x_1+x_2 \leq 2$	1	2
2	$x_1^2-5x_1+x_2^2$	$x_1 \leq 1,5; x_2 > 1$	-0,5	2
3	$x_1^2+x_2^2+4x_2-1$	$x_1^2+x_2 \leq 0; x_1-2x_2 \leq 8$	0,5	-1,5

1	2	3	4	5
4	$e^{x_1} + e^{x_2}$	$x_1^2 + x_2^2 - 9 = 0;$ $x_1 + x_2 - 1 \geq 0;$ $x_1 \geq 0; x_2 \geq 0$	2	1,5
5	$x_1^2 - 2x_1 + x_2^2 + x_2$	$x_1^2 - x_2 \leq 0; x_2 \leq 5$	1	3
6	$x_1^2 + 25x_2^2$	$x_1 + x_2 \leq 3$	2	1
7	$16x_1^2 + x_2^2$	$x_1 \leq 3; x_2 > 0,5$	-1	2
8	$x_1^2 + 6x_1 + x_2^2 + 9$	$x_1 \geq 0;$ $x_2 \geq 1$	1	3
9	$(x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2$	$x_1 - 2x_2 + 1 = 0;$ $0,25x_1^2 + x_2^2 \leq 1$	2	2
10	$100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$	$x_2 \geq 0$	-1	1
11	$1000 - x_1^2 - 2x_2^2 - x_1x_2$	$x_1^2 + x_2^2 - 25 = 0;$ $4x_1 + 7x_2 - 28 = 0$	-1	2
12	$(x_1 - 3)^2 + (x_2 - 3)^2$	$x_1 + x_2 - 4 = 0$	0	0
13	$(x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2$	$x_2 - x_1^2 \geq 0;$ $x_1 + x_2 - 2 \leq 0$	2	2
14	$x_1^2 + x_2^2$	$x_1^2 + x_2^2 - 9x_2 + 4,25$	0,8	6
15	$x_1^2 + 6x_1 + x_2^2 - 4x_2$	$x_1 \geq 0; x_2 \geq 0$	2	3
16	$4x_1 - x_2^2 - 12$	$x_1 \geq 0; x_2 \geq 0;$ $10x_1 - x_1^2 + 10x_2 - x_2^2 \geq 34$	2	4
17	$x_1^2 + x_2^2 - 3x_1 + 15x_2$	$(x_1 + x_2)^2 = 4(x_1 - x_2)$	1	1
18	$5x_1^2 - 3x_2^2$	$x_1 \geq 0; x_2 \geq 0$	1	1
19	$x_1 - x_2^2 - 5$	$25 - x_1^2 - x_2^2 \geq 0;$ $x_1 > 0; x_2 \geq 0$	2	4
20	$x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2$	$2x_1 + x_2 = 6;$ $x_1 - x_2 - 8 < 0$	1	1

Контрольные вопросы

1. Что такое оптимизация?
2. В чем заключается задача условной оптимизации?
3. В чем заключается задача безусловной оптимизации?
4. Назовите необходимое условие существования экстремума функции одной переменной.
5. Перечислите достаточные условия существования экстремума функции одной переменной.
6. Какие встроенные функции имеются в системе MathCAD для решения оптимизационных задач?
7. Запишите синтаксис функции Minimize.
8. Как реализован ввод ограничений при решении задач условной оптимизации?

Список литературы

1. Кафаров, В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии / В.В. Кафаров. – М.: Химия, 1985. – 448 с.
2. Гартман, Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учеб. пособие для вузов / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 416 с.
3. Черников, Ю.Г. Системный анализ и исследование операций: учеб. пособие для вузов / Ю.Г. Черников. – М.: Издательство Московского государственного горного университета, 2006. – 370 с.
4. Галиаскаров, Э.Г. Моделирование систем: лабораторный практикум / Э.Г. Галиаскаров, Т.В. Лабутина; Иван. гос. хим.-технол. ун-т. – Иваново, 2010. – 128 с.
5. Методология планирования эксперимента: методические указания к лабораторным работам / сост. Т.П. Абомелик. – Ульяновск: УлГТУ, 2011.–38 с.
6. Рузинов, Л. П. Планирование эксперимента в химии и химической технологии / Л.П. Рузинов. – М. : Химия, 1980. – 280 с.
7. Кирьянов, Д. В. Mathcad 13 / Д.В. Кирьянов. – СПб. : БХВ-Петербург, 2006. – 590 с.
8. Дьяконов, В. MATLAB 6 : учеб. курс / В. Дьяконов. – СПб. : Питер, 2001. – 592 с.

Учебное издание

Липин Андрей Александрович

Липин Александр Геннадьевич

**ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ
ПО КУРСУ
«СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ
И МЕТОДЫ ХИМИЧЕСКОЙ КИБЕРНЕТИКИ»**

Редактор О.А. Соловьева

Подписано в печать 16.03.2015. Формат 60x84 1/16. Бумага писчая.

Усл. печ. л. 5,58. Тираж 50 экз. Заказ

ФГБОУ ВПО «Ивановский государственный химико-технологический
университет»

Отпечатано на полиграфическом оборудовании кафедры экономики
и финансов ФГБОУ ВПО «ИГХТУ»

153000, г. Иваново Шереметевский пр., 7