

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ**  
**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение**  
**высшего образования**  
**«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**



**Методические указания**  
к практическим занятиям по дисциплине  
**«Моделирование химико-технологических процессов»**  
для направления подготовки 18.03.01 Химическая технология  
направленность (профиль) Химическая технология синтетических  
биологически активных веществ, химико-фармацевтических  
препаратов и косметических средств

**Невинномысск 2024**

Методические указания составлены в соответствии с программой по дисциплине «Моделирование химико-технологических процессов». В методических указаниях приводятся теоретическое обоснование практических работ, указаны методики их выполнения, требования к оформлению отчета, приведены вопросы для защиты работы и примеры выполнения работ.

В приложении приведены статистические таблицы, необходимые для обработки данных и варианты заданий для выполнения работ.

Настоящие указания разработаны для направления подготовки 18.03.01 Химическая технология

Методические указания рассмотрены на заседании кафедры ХТМиАХП и рекомендованы к внутривузовскому изданию.

*Составил* *старший*

*преподаватель Е.В.Вернигорова*

*Рецензент* *доцент* *Т.С.*

*Чередниченко*

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
Практическое занятие 1	5
ТЕМА: «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ТИПОВЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ»	5
Вопросы для контроля	12
Практическое занятие 2	13
Тема «ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ СОСТАВЛЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ»	13
Вопросы для контроля	16
Практическое занятие 3	17
Тема «АДЕКВАТНОСТЬ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ»	17
Практическое занятие 4	23
Тема «МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОПИСАНИЯ ТИПОВЫХ МОДЕЛЕЙ ГИДРОДИНАМИКИ»	23
РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА	35

## Введение

Целью освоения дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов

» является формирование набора профессиональных компетенций будущего бакалавра по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология.

Основные задачи изучения состоят в усвоении студентами:

- методов системного подхода к исследованию и анализу технологических процессов;
- принципов создания математических моделей физико-химических процессов с использованием стандартных пакетов и средств автоматизированного проектирования;
- методам реализации математических моделей физико-химических процессов на ЭВМ и установления их адекватности.
- методов проведения экспериментов с использованием математических моделей и установления границ их применения.

## Практическое занятие 1

### ТЕМА: «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ТИПОВЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ»

#### 1.1 Классификация основных процессов и аппаратов

Наиболее целесообразно классифицировать все многообразие применяемых в химической промышленности типовых процессов по способу создания движущей силы процесса. По этому признаку все процессы можно разделить на шесть типов:

##### *Гидравлические процессы*

**Связаны** с перемещением жидких и газообразных материалов. К ним относятся: перекачивание, транспортирование, хранение, дозирование.

**Осуществляются** с помощью насосов, компрессоров, вентиляторов, воздуходувок, емкостей.

**Движущей силой** гидравлических процессов является разность давлений. Скорость протекания определяется законами гидродинамики.

##### *Тепловые процессы*

**Связаны** с передачей тепла от одного тела (потока) к другому.

К ним **относятся**: нагревание и охлаждение, испарение и конденсация, плавление и затверждение.

**Осуществляются** с помощью нагревательных и плавильных печей, теплообменников, конденсаторов-холодильников, испарителей.

**Движущей силой** тепловых процессов является разность температур. Скорость протекания процесса определяется законами теплопередачи.

### *Массообменные (диффузионные) процессы*

**Связаны** с переходом веществ из одной фазы в другую в результате диффузии.

К ним **относятся:** перегонка, ректификация, абсорбция, адсорбция и десорбция, экстракция, сушка, кристаллизация и др.

**Осуществляются** в ректификационных колоннах, абсорберах, адсорберах и десорберах, экстракторах, сушильных аппаратах, кристаллизаторах и др.

**Движущей силой** массообменных процессов является разность концентрации. Скорость процесса определяется законами массопередачи.

### *Гидромеханические процессы*

**Связаны** с обработкой неоднородных систем – жидкостей и газов со взвешенными в них твердыми или жидкими веществами.

К ним **относятся:** отстаивание в поле силы тяжести, центробежном поле, электрическом и магнитном полях, центрифугирование, фильтрование, течение газа или жидкости через слой сыпучих материалов.

**Осуществляются** в отстойниках, центрифугах, электродегидраторах, циклонах, фильтр-прессах, аппаратах с мешалкой, в барботажных аппаратах и др.

**Движущей силой** является разность давлений.

Скорость процесса определяется законами гидродинамики неоднородных систем.

### *Химические процессы*

**Связаны** с превращением обрабатываемых материалов для получения новых соединений.

К ним **относятся:** паровая конверсия природного газа, синтез аммиака, окисление аммиака, получение аммиачной селитры и др.

**Осуществляются** в химических реакторах, конструкция которых определяется условиями ( $T$ ,  $P$ ), скоростью химической реакции, наличием катализатора и др.

**Движущей силой** химических процессов является разность концентраций реагирующих веществ. Скорость процесса определяется законами химической кинетики.

### *Механические процессы*

**Связаны** с обработкой твердых материалов.

К ним **относится**: измельчение, рассев, транспортирование, дозирование, смешивание.

**Осуществляется** в дробилках, классификаторах, дозаторах, смесителях.

**Движущей силой** является приложенное к телу усилие или напряжение (сжатия, сдвига).

Скорость процесса определяется законами механики.

Основные процессы могут быть периодическими и непрерывными.

**Периодические процессы** характеризуются единством места проведения различных стадий изменяющимися во времени массами и составами потоков. То есть такие процессы являются **Нестационарными**, что затрудняет их автоматизацию, создание крупнотоннажных производств, усложняет конструкцию аппаратов и т. д.

Например, на рис. 1 изображен реактор, представляющий собой аппарат с мешалкой, оборудованный рубашкой, в которую подается теплоноситель.

Работа такого реактора в периодическом режиме характеризуется следующими стадиями:

- а) загрузка исходных веществ в реактор;
- б) нагрев с помощью подачи теплоносителя в рубашку до необходимой температуры;

- в) создание с помощью инертного газа ( $N_2$ ) необходимого давления;
- г) проведение реакции до заданной концентрации продуктов реакции;
- д) охлаждение продуктов и снижение давления;
- е) выгрузка продуктов реакции;
- ж) продувка аппарата.

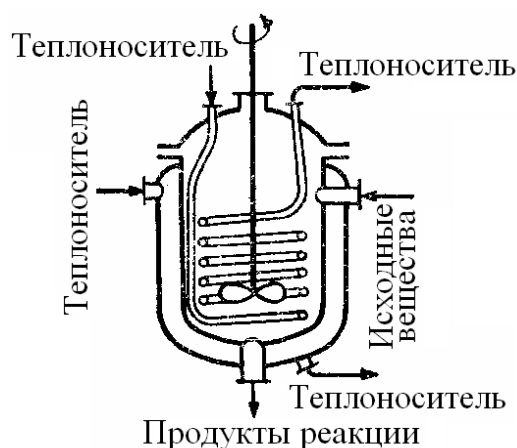


Рисунок. 1 – Реактор смешения, работающий в периодическом режиме

**Непрерывные процессы** характеризуются единством времени проведения всех стадий процесса, каждая из которых осуществляется в специальном аппарате.

Потоки, их составы и другие параметры на всех стадиях являются **установившимися**. Это облегчает их автоматизацию, позволяет упростить конструкцию.

На рис. 2 представлен реактор смешения, работающий в непрерывном режиме. Для осуществления непрерывного режима требуется большее число аппаратов.



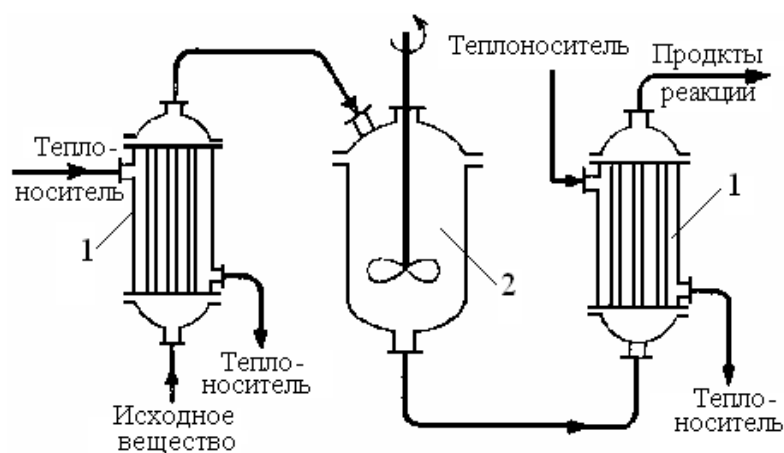


Рисунок. 2 – Реактор смещения, работающий в непрерывном режиме:

1 – теплообменные аппараты; 2 – реактор смешения.

### **Основные законы**

Проведение любого процесса связано с использованием различных материалов и энергии (главным образом тепловой).

**Материальные** балансы основаны на законе сохранения материи, а **тепловые** балансы – на законе сохранения энергии [1].

$$\sum_{i=1}^n G_i c_{ij} + \sum_{k=1}^m G_k^* = 0 \quad ; \quad (1.1)$$

$$\sum_{i=1}^n G_i C p_i t_i + \sum_{k=1}^m Q_k^* = 0 \quad (1.2)$$

**Плотность.** Масса жидкости, содержащаяся в единице ее объема, называется плотностью ( $\rho$ ):

$$\rho = \frac{m}{V}, \quad (1.3)$$

где  $m$  – масса жидкости, кг;  $V$  – объем жидкости, м<sup>3</sup>.

Плотность жидкости мало зависит от давления и температуры.

Плотность газов в значительной степени зависит от температуры и давления. Зависимость между температурой, давлением и объемом

газа определяется уравнением состояния (управлением Менделеева – Клайперона):

$$pV = \frac{mRT}{M}, \quad (1.4)$$

где  $p$  – давление, Па;  $V$  – объем газа, м<sup>3</sup>;  $m$  – масса газа, кг;  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $R = 8314$  Дж/(кмоль·К);  $T$  – температура, К;  $M$  – молекулярная масса газа, кг/моль.

Из уравнения получим:

$$P = \frac{m}{V} \cdot \frac{RT}{M} = \rho \cdot \frac{RT}{M}. \quad (1.5)$$

Учитывая, что

$$\frac{pV}{T} = const, \quad (1.6)$$

можно получить следующие соотношения, позволяющие рассчитывать объем и плотность при изменении температуры:

$$V = V_0 \frac{P_0 \cdot T}{P \cdot T_0}, \quad (1.7)$$

$$\rho = \rho_0 \frac{T_0 \cdot P}{T \cdot P_0}, \quad (1.8)$$

где  $T_0 = 273\text{K}$  ( $0^\circ\text{C}$ );  $P_0 = 101325$  Па (нормальные условия).

**Расходом** называется количество жидкости, протекающей через живое сечение потока в единицу времени. Расход может быть выражен в массовых ( $m$ , кг/ч) или объемных ( $v$ , м<sup>3</sup>/ч) единицах.

Массовый и объемный расходы связаны соотношением:

$$m = \rho \cdot v, \quad (1.9)$$

где  $\rho$  – плотность жидкости.

**Скоростью потока ( $\omega$ )** называется отношение объемного расхода ( $v$ ) к площади поперечного сечения потока ( $F$ ):

$$\omega = \frac{v}{F} \quad (1.10)$$

**Плотность смеси** жидкостей ( $\rho_{см}$ ) приближенно можно рассчитать по формуле:

$$\frac{1}{\rho_{см}} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\rho_i}, \quad (1.11)$$

где  $x_i$  – массовая доля  $i$ -го компонента в смеси,  $\rho_i$  – плотность  $i$ -го компонента, кг/м<sup>3</sup>;

**Плотность** любого газа  $\rho$  при температуре  $T$  и давлении  $P$  может быть рассчитана по формуле:

$$\rho = \rho_0 \frac{T_0 \cdot P}{T \cdot P_0} = \frac{M}{22,4} \cdot \frac{273,15 \cdot P}{T \cdot P_0} \quad (1.12)$$

$$(T_0 = 273,15 \text{ К}, P_0 = 1,013 \cdot 10^5 \text{ Па}),$$

где  $\rho_0 = M/22,4$  кг/м<sup>3</sup> – плотность газа при н. у.,  $M$  – мольная масса газа, кг/кмоль;  $T$  – температура, К;  $P$  и  $P_0$  должны быть выражены в одинаковых единицах.

**Плотность смеси газов:**

$$\rho_{см} = \sum_{i=1}^n y_i \rho_i, \quad (1.13)$$

где  $y_i$  – объем доли компонентов газовой смеси;  $\rho_i$  – плотность  $i$ -го компонента, кг/м<sup>3</sup>.

**Давление**  $P$  столба жидкости высотой  $h$  при плотности жидкости  $\rho$  равняется:

$$P = \rho \cdot g \cdot h, \quad (1.14)$$

здесь  $P$  выражено в Па;  $\rho$ -в кг/м<sup>3</sup>;  $g = 9,81$  м/с<sup>2</sup>;  $h$  – высота, в м.

**Основное уравнение гидростатики:**

$$P = P_0 + \rho \cdot g \cdot h, \quad (1.15)$$

где  $P$  – гидростатическое давление на глубине  $h$  (в, м) от поверхности жидкости, Па;  $P_0$  – давление на поверхность жидкости, Па.

Основные законы:

Закон сохранения массы вещества.

Закон сохранения энергии.

Законы гидродинамики.

Законы теплопередачи.

Законы массопередачи.

## Вопросы для контроля

1. По какому признаку классифицируются основные процессы химической технологии?

2. Приведите классификацию основных процессов химической технологии.

3. С помощью каких аппаратов осуществляются гидравлические процессы?

4. Что является движущей силой тепловых процессов? В каких аппаратах они осуществляются?

5. В каких аппаратах проводятся массообменные процессы?

6. Перечислите процессы, относящиеся к массообменным процессам.

7. Что является движущей силой массообменных процессов?

8. Какие системы являются неоднородными? Приведите примеры.

9. В каких аппаратах происходит разделение неоднородных систем?

10. Что является движущей силой химических процессов? В каких аппаратах они проводятся?

11. Что является движущей силой механических процессов?

12. Какими стадиями характеризуется работа реактора в периодическом режиме?

13. Перечислите преимущества непрерывных процессов.

14. Перечислите основные законы, используемые в химической технологии.

## Практическое занятие № 2

### Тема «ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ СОСТАВЛЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ»

Моделирование как метод исследования технологических процессов включает в себя следующие основные этапы:

- постановка цели моделирования;
- построение модели процесса;
- проверка адекватности модели и внесение корректив;
- проведение расчетных исследований и оптимизация процесса с использованием модели.

Каждый этап включает стадии. Общая схема процесса математического моделирования приведена на рис. 3.1.

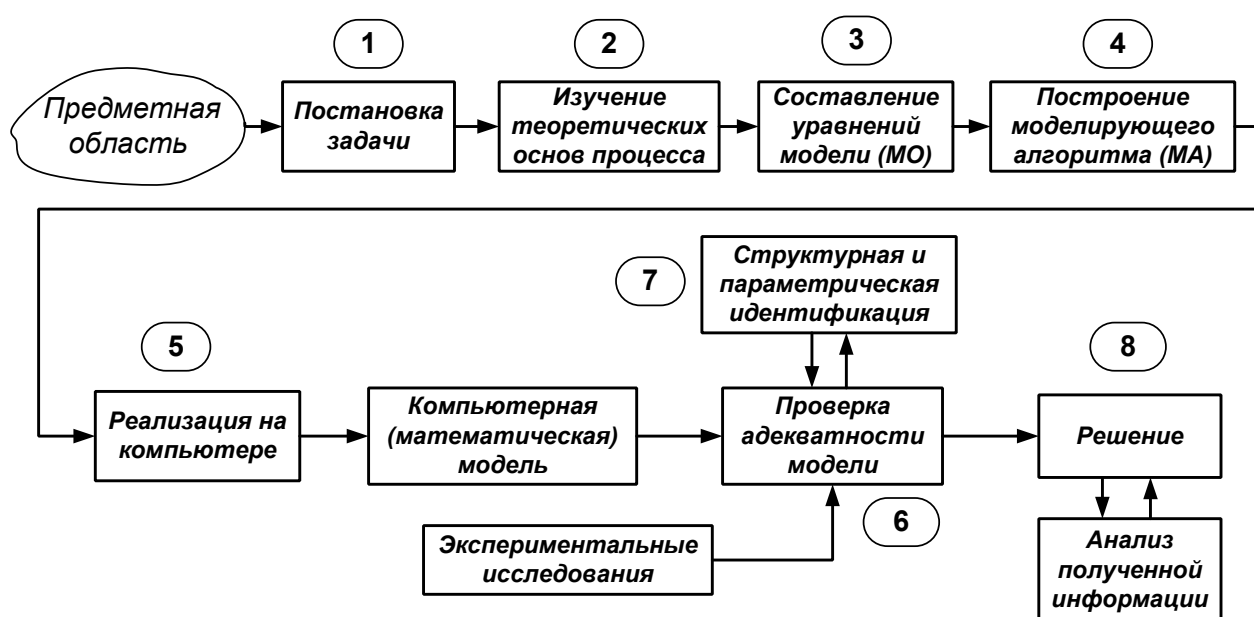


Рисунок 1 – Общая схема процесса математического моделирования

*Первая стадия* – это постановка задачи. Одному и тому же объекту-оригиналу в зависимости от целей моделирования может соответствовать большое число моделей, отражающих разные его

стороны. Эта стадия определяет не только цель анализа, но и пути решения задачи.

*Вторая стадия* – это определение фундаментальных законов, которым подчиняется механизм явлений, лежащих в основе рассматриваемой проблемы.

*Третья стадия.* На основе выбранной физической модели записывается система уравнений **математического описания** (МО).

Типами систем МО являются:

1. Конечные (системы линейных алгебраических и нелинейных уравнений).
2. Системы обыкновенных дифференциальных уравнений.
3. Системы дифференциальных уравнений в частных производных.

*Четвертая стадия.* Определяется **моделирующий алгоритм** решения системы уравнений (МА). В [1] для определения последовательности решения системы уравнений предлагается располагать их в логической последовательности с помощью построения блочной поточно-информационной диаграммы (схемы связей отдельных стадий технологического процесса). В [2] предлагается построить и проанализировать информационную матрицу системы уравнений.

*Пятая стадия.* Создается программа для реализации разработанного моделирующего алгоритма на ЭВМ (создание компьютерной модели).

**Математическая Модель** – это реализованный на компьютере алгоритм (МА) решения системы уравнений математического описания (МО).

*Шестая стадия* – это проверка адекватности модели.

**Адекватность** – соответствие математической модели реальному объекту и качественное (тенденции изменения переменных в модели и в объекте одинаковы) и количественное (экспериментальные данные).

$$\|\bar{y}^{раст} - \bar{y}^{эксн}\| = \sqrt{\sum (\bar{y}^{раст} - \bar{y}^{эксн})^2} = \varepsilon$$

где  $\varepsilon$  – не меньше погрешности экспериментальных измерений.

*Седьмая стадия* – идентификация. Если адекватность не достигнута, то нужно решить задачу идентификации:

$$\min \|\bar{y}^{раст} - \bar{y}^{эксн}\|.$$

На этом этапе для обеспечения качественного и количественного соответствия поведения модели и объекта (адекватности модели) параметры модели корректируют на основании экспериментальных данных. При этом корректируются как коэффициенты (параметры) уравнений математического описания, т.н. параметрическая идентификация, так и сам вид уравнений, учитывающий механизмы протекающих процессов, т.н. структурная идентификация.

*Восьмая стадия* – изучение и подтверждение результатов, полученных при решении математической модели.

Проводятся расчетные исследования модели, адекватной реальному процессу, ставятся различного рода **вычислительные эксперименты на компьютере**, позволяющие более глубоко понять закономерности протекания исследуемого процесса. Результатами исследований являются статические и динамические характеристики процессов, часто представляемые в виде графиков, анализ которых позволяет принимать решения по усовершенствованию и модернизации работы реальных производств.

Для построения модели необходимо соблюдать следующие простые правила:

- уравнений должно быть столько (не больше и не меньше), сколько имеется неизвестных величин, определяющих поведение физической системы;
- любое уравнение может быть решено относительно какой-то неизвестной величины в том случае, когда остальные входящие в него неизвестные величины получены из других уравнений;

- каждое уравнение решается относительно наиболее значимой из входящих в него переменных; при ее выборе надо руководствоваться физическими аспектами задачи.

### **Вопросы для контроля**

1. Какие этапы включает в себя моделирование как метод исследования технологических процессов?

2. Какие типы систем уравнений входят в математическое описание технологического объекта?

3. Как определяется моделирующий алгоритм решения системы уравнений?

4. Дайте определение математической модели технологического объекта.

5. Что такое адекватность математической модели?



## Практическое занятие 3

### Тема «АДЕКВАТНОСТЬ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ»

#### 3.1 Критерии адекватности моделей

Математическая модель объекта является лишь его аналогом. Поэтому значения переменных, получаемых на модели и объекте, различаются. Здесь возникает задача установления близости модели реальному объекту (установления адекватности модели). Критерии адекватности модели (**R**) базируется в основном на методах дисперсионного анализа и анализа остатков.

Разность между экспериментальными данными ( $y_i^э$ ) и рассчитанными по модели ( $y_i^м$ ) называются остатками:

$$e_i^м = y_i^э - y_i^м \quad (3.1)$$

Очевидно, что если испытывается модель истина, то остатки сравнимы с величинами  $e_i^э$ , характеризующими ошибку изменений. Поэтому общая мера несоответствия модели результатам эксперимента  $SS_м$  представляется в виде:

$$SS_м = \sum_{i=1}^n (y_i^э - y_i^м)^2 \quad (3.2)$$

В статистике эта величина называется **остаточной суммой квадратов**.

Если при проведении экспериментальных исследований проводятся параллельные опыты (т.е. повторные измерения в одинаковых условиях), то информацию об ошибках измерения содержится в:

$$SS_э = \sum_{j=1}^N (y_j^э - \bar{y})^2 \quad , \text{ где } \bar{y} = \frac{1}{N} \cdot \sum_{j=1}^N y_j \quad (3.3)$$

Тогда величина  $SS$ , определяет меру способности модели отражать результаты эксперимента.

$$SS_{ad} = \sum_{i=1}^n (y_i^j - y_i^m)^2 - \sum_{j=1}^N (y_j^j - \bar{y})^2 \quad (3.4)$$

Сумма квадратов  $SS_{ad}$  характеризует **степень адекватности модели**, так как чем меньше  $SS_{ad}$ , тем лучше модель воспроизводит эксперимент.

Суммы квадратов, будучи поделенными на соответствующие числа степеней свободы, определяют соответствующие **дисперсии**. Очевидно, что адекватность модели может определяться отношением *дисперсии адекватности* к *дисперсии воспроизводимости*. Если это отношение велико ( $\gg 1$ ), то испытываемая модель не отражает результаты эксперимента.

### 3.2 Оценка адекватности моделей с помощью критерия Фишера (F)

Для этого находят отношение:

$$F = \frac{S_{ad}^2}{S_{воспр}^2} \quad (3.5)$$

где  $S_{ad}^2$ ,  $S_{воспр}^2$  – соответственно дисперсия адекватности и дисперсия воспроизводимости, определяемые как

$$S_{ad}^2 = \frac{SS_m}{f_{ad}}, \quad S_{воспр}^2 = \frac{SS_j}{f_{воспр}} \quad (3.6)$$

Число степеней свободы зависит от того, каким образом определялась воспроизводимость опытов.

Если дисперсия воспроизводимости определялась в отдельной серии опытов, то

$$f_{ad} = n - p_j, \quad \text{а} \quad f_{воспр} = \tilde{n} - 1, \quad (3.7)$$

где  $p_i$  – число устанавливаемых параметров  $i$ -ой модели;  
 $\tilde{n}$  – число повторных опытов;

$n$  – общее число опытов.

Если дисперсия воспроизводимости определялась в каждом из  $q$  различных условий, при которых проводилось  $\tilde{n}$  повторных опытов, то

$$f_{ад} = n - p_j - q(\tilde{n} - 1), \quad \text{а} \quad f_{воспр} = q(\tilde{n} - 1). \quad (3.8)$$

Основная гипотеза, которая при этом проверяется, состоит в следующем: можно ли считать сравниваемые выборочные дисперсии оценками одной и той же генеральной дисперсии.

Если да, то дисперсии незначительно отличаются друг от друга и модель **адекватна объекту** в пределах точности эксперимента. В противном случае модель **неадекватна объекту**.

В качестве критерия отличия дисперсий используется критерий Фишера ( $F$ -критерий). Значения  $F$ -распределения для различных степеней свободы  $f_{ад}$  и  $f_{воспр}$  приведены в литературе по статистике.

Если рассчитанное по (5) значение  $F < F_{табл}(f_{ад}, f_{воспр})$  для уровня значимости  $p$ , то гипотеза верна, т.е. **модель адекватна объекту**.

### 3.3 Оценка модели относительно среднего значения

При отсутствии параллельных опытов и дисперсии воспроизводимости ( $SS$ , неизвестно) качество модели можно оценить, сравнив  $S_{ад}^2$  и дисперсию относительно среднего  $S_{ср}^2$ .

$$S_{ср}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n - 1}, \quad \text{где} \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i. \quad (3.9)$$

Для этого используют критерий Фишера и составляют отношение

$$F_p = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2}. \quad (3.10)$$

Затем его сравнивают с табличным значением  $F_{1-p}^{табл}(f_{cp}, f_{ad})$  для заданного уровня значимости  $p$ .

Если  $F_p < F_{1-p}^{табл}(f_{cp}, f_{ad})$ ,

то гипотеза о том, что дисперсии  $S_{cp}^2$  и  $S_{ad}^2$  принадлежат одной и той же генеральной совокупности, **верна**. Тогда использовать модель **нецелесообразно**, так как она обладает одинаковой прогнозирующей способностью со средним значением.

Если  $F_p > F_{1-p}^{табл}(f_{cp}, f_{ad})$ ,

то дисперсии  $S_{cp}^2$  и  $S_{ad}^2$  значительно отличаются друг от друга, причем  $S_{cp}^2 > S_{ad}^2$ . Использование проверяемой модели **является целесообразным**.

Рассмотренная проверка часто называется проверкой целесообразности использования модели.

**Пример.** Исследовалась гидродинамика потока жидкости на тарелке ректификационной колонны. Вводили трассер и измеряли отклик на выходе из тарелки. Для описания движения потока жидкости была принята ячеечная модель, содержащая один параметр – число ячеек. Из экспериментальных данных было установлено, что число ячеек равно 6. Требуется установить адекватность ячеечной модели эксперименту.

Результаты эксперимента и расчета по модели приведены в табл. 3.1.

Таблица 3.1 – Результаты эксперимента и расчета по модели

$\tau$ , мин	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$C^o$ , г/л	3	30	135	253	266	210	135	77	43	26
$C^m$ , г/л	4,9	54	143	210	223	194	145	99	62	36
$\tau$ , мин	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
$C^o$ , г/л	17	12	9	7	5	3	2	1,5	1	0

$C^m$ , г/л	20	11	6	3	1,4	0,7	0,3	0,2	0,1	0,03
-------------	----	----	---	---	-----	-----	-----	-----	-----	------

Для оценки дисперсии воспроизводимости была поставлена отдельная серия опытов (табл. 3.2).

Таблица 3.2 – Серия опытов при постоянных условиях

Номер опыта	1	2	3	4	5	6
$C_3$ , г/л	25	18	22	29	35	23

Решение

Будем устанавливать адекватность, используя критерий Фишера. Составим  $F$ -отношение

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2} \quad (3.11)$$

Найдем значение  $S_{ад}^2$  и  $S_{воспр}^2$ :

$$S_{ад}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{20} (c_i^3 - \bar{c})^2}{n - p} = \frac{5701,3}{20 - 1} = 300,1 \quad (3.12)$$

$$S_{воспр}^2 = \frac{\sum_{i=1}^6 (c_i^3 - \bar{c})^2}{N - 1} = 35,6 \quad (3.13)$$

$$\bar{c} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^6 c_j^3 = 25,3$$

где ;  $(n - p)$  и  $(N - 1)$  – число степеней свободы соответственно дисперсии адекватности и дисперсии воспроизводимости.

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2} = \frac{300,1}{35,6} = 8,4 \quad (3.14)$$

$F$ -отношение равно

Соответствующее табличное значение критерия Фишера для чисел степеней свободы 19 и 5 и уровня значимости  $\alpha = 0,01$  составляем  $F_{0,01}^{табл}(19, 5) = 9,5$ .

Таким образом,  $F < F^{табл}$

и ячеечная модель адекватна эксперименту.

Оценим целесообразность использования ячеечной модели для описания движения потока жидкости на ректификационной тарелке, сравнив дисперсию относительно среднего  $S_{cp}^2$  и дисперсию адекватности  $S_{ад}^2$ .

Для этого составим  $F$ -отношение в виде

$$F = \frac{S_{cp}^2}{S_{ад}^2}, \text{ где } S_{cp}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{20} (c_i^j - \bar{c})^2}{n-1} = 7837,5 \quad (3.15)$$

а  $\bar{c}$  определяется как средняя концентрация по всем 20 опытам, т.е.

$$\bar{c} = \frac{1}{20} \sum_{j=1}^{20} c_j^j = 60,8 \quad (3.16)$$

Найдем величину  $F$ -отношения

$$F = \frac{7837,5}{300,1} = 26,1 \quad (3.17)$$

Соответствующее табличное значение критерия Фишера для чисел степеней свободы 19 и 19 составляем  $F_{0,01}^{табл}(19, 19) = 3,0$ .

Так как  $F > F^{табл}$ , (3.18)

то ячеечную модель использовать целесообразно.

### Вопросы для контроля

1. Дайте понятие адекватности математической модели
2. Как представляется общая мера несоответствия модели результатам эксперимента?

3. Каким образом рассчитывается дисперсия воспроизводимости?

4. Как оценивается адекватность моделей с помощью критерия Фишера?

5. Как оценивается целесообразность использования модели при отсутствии параллельных опытов?

## Практическое занятие 4

### Тема «МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОПИСАНИЯ ТИПОВЫХ МОДЕЛЕЙ ГИДРОДИНАМИКИ»

#### 4.1 Математическая модель аппарата идеального смешения (ИС)

Аппарат ИС представляется как аппарат с мешалкой, через который непрерывно проходит поток жидкости. Мощность мешалки такова, что поступающая жидкость мгновенно перемешивается с массой в аппарате, чем обеспечивается равенство параметров процесса (концентраций, температуры и т. д.) по всему объему аппарата и на выходе из него (рисунок 4.1).

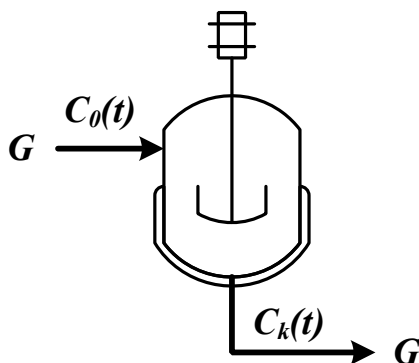


Рисунок 4.1 – Схема аппарата идеального смешения

Здесь  $G$  – объемный расход реакционной массы,  $\text{м}^3/\text{ч}$ ;  $C_0(t)$ ,  $C_k(t)$  – входная и выходная концентрации,  $\text{моль}/\text{м}^3$  или  $\text{г}/\text{м}^3$ ;  $V$  – объем реактора,  $\text{м}^3$ .

Время пребывания частиц в аппарате ИС неодинаково, так как мешалка может направить сразу к выходу некоторые частицы, другие же могут циркулировать в аппарате.

Уравнение материального баланса:

$$\frac{d(C_k(t)V)}{dt} = GC_0(t) - GC_k(t) \quad (4.1)$$

Начальные условия:  $t=0$ ;  $C_k(t) = C_0(t)$ .

Для постоянного объема реактора ( $V=\text{const}$ ) имеем:

$$V \frac{dC_k(t)}{dt} = G(C_0(t) - C_k(t)) \quad (4.2)$$

или

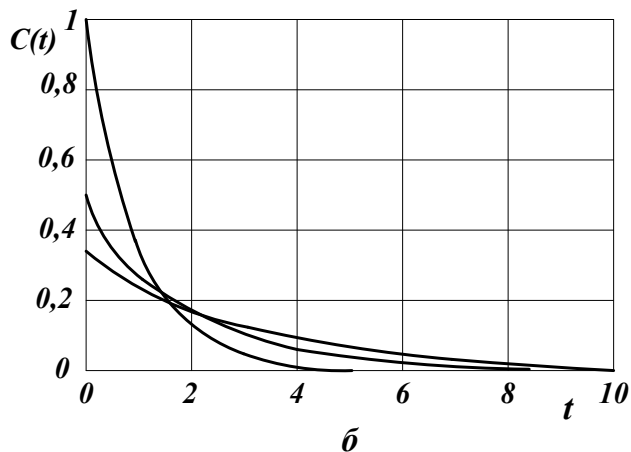
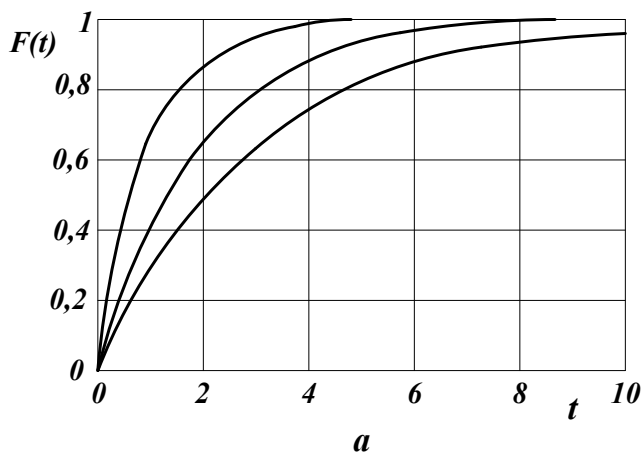
$$\frac{dC_k(t)}{dt} = \frac{1}{\bar{\tau}} (C_0(t) - C_k(t)) \quad (4.3)$$

Здесь  $\bar{\tau} = \frac{V}{G}$  – среднее время пребывания частиц в аппарате идеального смешения.  $t$  – текущее время.

Кривая разгона реактора ИС или F-кривая (рисунок 4.2):

$$F(t) = C_k(t) = C_0(t) \left( 1 - \exp\left(\frac{-t}{\bar{\tau}}\right) \right) \quad (4.4)$$

Здесь  $C_0(t)$  – ступенчатое воздействие на входе в реактор;  $C_k(t)$ ,  $F(t)$  – концентрация на выходе из реактора.





$a$  – F-кривые;  $b$  – С-кривые.

Рисунок 4.2 – Характеристики модели аппарата ИС

Более удобно для анализа и сравнения кривую разгона представлять в нормированном виде:

$$F_H(t) = \frac{C_k(t)}{C_0(t)} = 1 - \exp(-\theta) \quad (4.5)$$

где  $\theta = \frac{t}{\bar{\tau}}$  – нормированное время.

Импульсная характеристика реактора ИС (С-кривая):

$$C(t) = C_k(t) = \frac{C_0(t)}{\bar{\tau}} \exp\left(-\frac{t}{\bar{\tau}}\right); \quad C_H(t) = \frac{C_k(t)}{C_0(t)} = \exp(-\theta) \quad (4.6)$$

## 4.2 Математическая модель аппарата идеального вытеснения (ИВ)

В аппарате ИВ принимается поршневое течение жидкости вдоль потока при равномерном распределении вещества в направлении перпендикулярном движению.

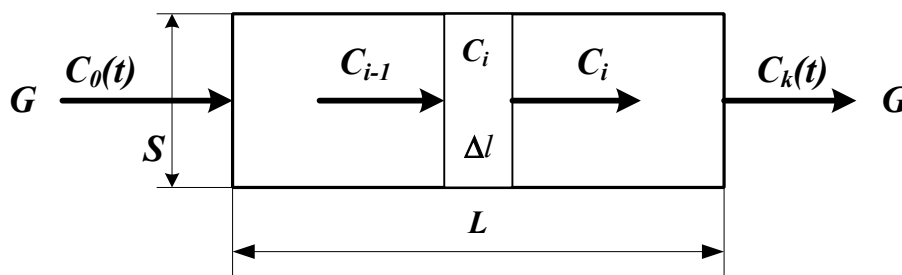


Рисунок 4.3 – Схема аппарата идеального вытеснения

Исходя из этого, все частицы в аппарате ИВ имеют одинаковую скорость, одинаковое время пребывания; концентрация вещества изменяется вдоль потока (рисунок 4.3).

Здесь:

$L$  – предельное значение координаты, м;

$V$  – объем аппарата, м<sup>3</sup>;

$G$  – объемный расход жидкости через аппарат, м<sup>3</sup>/ч;

$S$  – сечение аппарата, м<sup>2</sup>;

$C_{i-1}$ ,  $C_i$ ,  $C_{i+1}$  – концентрация трассера в  $i-1$ ,  $i$ ,  $i+1$  сечениях аппарата.

Уравнение материального баланса аппарата ИВ:

$$\frac{\partial C(t,l)}{\partial t} = -u \frac{\partial C(t,l)}{\partial l} \quad (4.7)$$

где  $C(t,l)$  – концентрация вещества, изменяющаяся по координате аппарата вдоль потока  $l$  и времени  $t$ ;

$u$  – линейная скорость потока  $u = \frac{G}{S}$ .

Начальные условия:  $t = 0; l \geq 0; C(l,0) = C_s(l)$ .

Граничные условия:  $l = 0; t \geq 0; C(0,t) = C_0(t)$ .

Уравнения материального баланса аппарата ИВ могут быть записаны через время пребывания частиц в аппарате –  $\tau_e$  (основной параметр модели):

$$\frac{\partial C(t,x)}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_e} \frac{\partial C(t,x)}{\partial x} \quad (4.8)$$

где  $\tau_e$  – время пребывания частиц в аппарате  $\tau_e = \frac{V}{G} = \frac{SL}{G}$ ;

$x$  – величина безразмерной координаты вдоль потока  $x = \frac{l}{L}$ ;

$C_s(l)$  – значение концентрации по длине аппарата в начальный момент времени.

Для удобства математического описания используют безразмерное время,  $\theta = t / \tau$ .

Уравнение материального баланса имеет вид:

$$\frac{\partial C(\theta, x)}{\partial \theta} = - \frac{\partial C(\theta, x)}{\partial x} \quad (4.9)$$

Начальные и граничные условия:

$$x = 0; \theta \geq 0; C(x, 0) = C_0(\theta);$$

$$\theta = 0; x \geq 0; C(0, \theta) = C_0(x).$$

Для получения решений уравнений материального баланса задаются начальные и граничные условия, т.е. изменения концентраций по координате и времени.

2. Кривая разгона реактора ИВ (F-кривая) (рисунок 4.4):

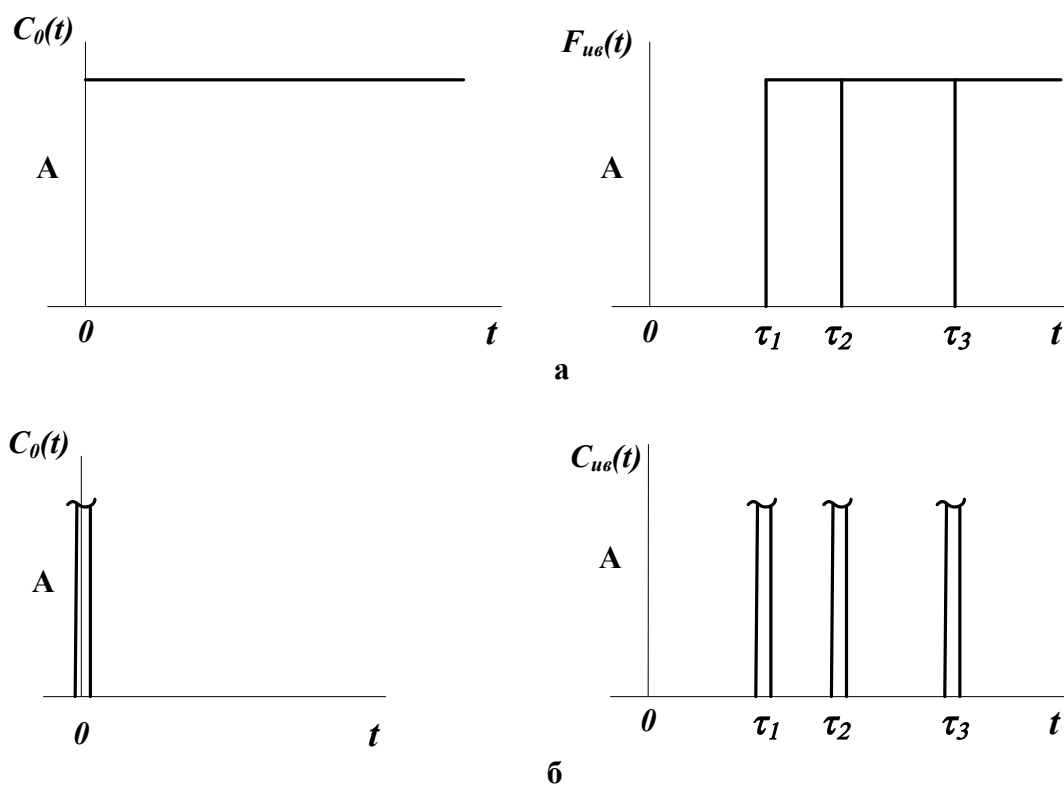
$$F_{ув}(t) = C_k(t) = C_0(t - \tau_v) \quad (4.10)$$

Уравнение кривой разгона представляет ступенчатую функцию с запаздывающим аргументом.

Импульсная характеристика (С-кривая) (рисунок 4.4):

$$C_{ув}(t) = \delta(t - \tau_v) \quad (4.11)$$

Уравнение импульсной характеристики представляет собой дельта-функцию с запаздывающим аргументом.



а – F-кривые; б – C-кривые, где  $\tau_1, \tau_2, \tau_3$  – время запаздывания

Рисунок 4.4 – Характеристики модели аппарата ИВ

### 4.3 Ячеечная модель (ЯМ)

Ячеечная модель описывает промежуточные состояния структуры гидродинамики потоков в реальных аппаратах между моделями аппаратов ИС и ИВ. ЯМ схематически представляет реальный аппарат, как некоторую последовательность  $n$  одинаковых ячеек ИС (рисунок 4.5). Гидродинамическая ячейечная модель содержит два параметра  $n$  – число ячеек;  $\bar{\tau}$  – среднее время пребывания. Подбор этих параметров позволяет решать задачи параметрического синтеза (подстройки) гидродинамических моделей реальных аппаратов. Изменением  $n$  от 0 до  $\infty$  можно описать все промежуточные состояния гидродинамики потоков между моделью ИС и ИВ.

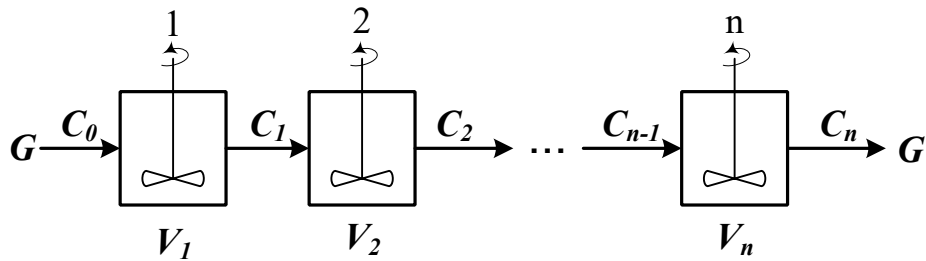


Рисунок 4.5 – Схема аппарата, описываемого ячеечной моделью  
Уравнение материального баланса ЯМ:

$$\frac{dV_i C_i(t)}{dt} = GC_{i-1}(t) - GC_i(t), i = 1, 2, \dots, n. \quad (4.12)$$

Начальные условия:  $t = 0, C_i(0) = C_0(t),$

где  $i$  – номер ячейки ЯМ;

$V_i$  – объем  $i$ -й ячейки,  $\text{м}^3$ ;

$V$  – рабочий объем аппарата,  $\text{м}^3$ ;

$G$  – объемный расход жидкости,  $\text{м}^3/\text{ч}$ .

Уравнения материального баланса ЯМ могут быть записаны через время пребывания

$$\bar{\tau}_i \frac{dC_i(t)}{dt} = C_{i-1}(t) - C_i(t), i = 1, 2, \dots, n \quad (4.13)$$

где  $\bar{\tau}_i$  – среднее время пребывания в  $i$ -й ячейке;  $\bar{\tau}_A$  – среднее время

пребывания в аппарате  $\bar{\tau}_A = \frac{V}{G}.$

2. Кривая разгона ЯМ (F-кривая). Кривые разгона ЯМ могут быть получены решением системы уравнений (4.12) при задании начальных условий по концентрации в виде ступенчатой функции.

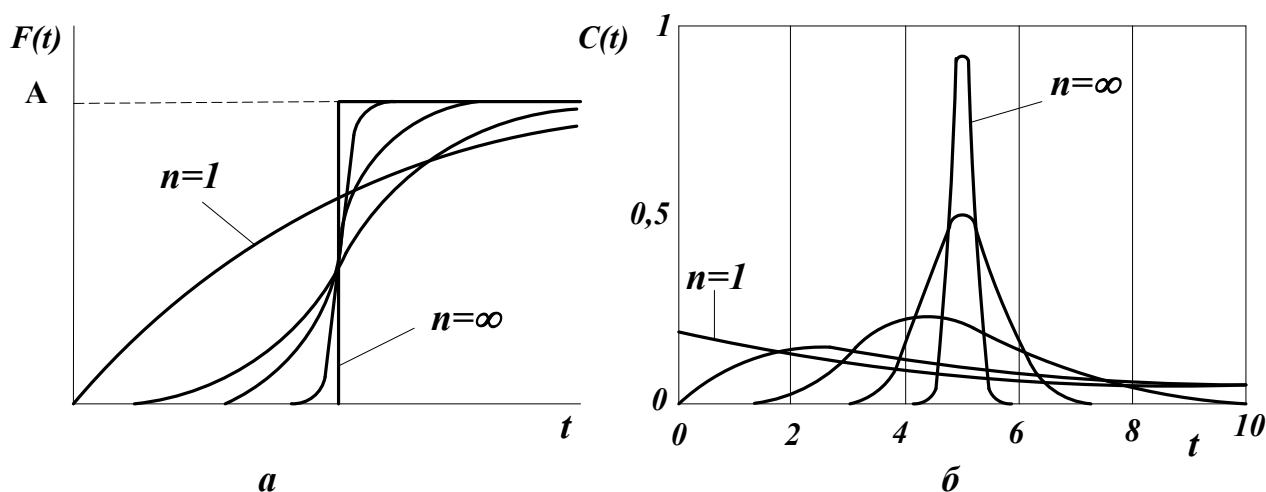
Примеры F-кривых для заданного  $\bar{\tau}_A$  при различных  $n$  показаны на рисунке 4.6а.

3. Импульсная характеристика ЯМ (С-кривая). Для импульсной характеристики ЯМ имеется аналитическое решение уравнения:

$$C_{\text{ям}}(\theta) = C_H(\theta) = \frac{C_k(\theta)}{C_0(\theta)} = \frac{n^{\theta n - 1}}{(n-1)!} \exp(-n\theta), \quad (4.14)$$

$$C_{\text{ям}}(t) = C_{\text{ям}}(\theta) C_0(t) / \bar{\tau}_A.$$

Примеры С-кривых ЯМ для различных значениях  $n$  представлены на рисунке 4.6б.



а – F-кривые; б – С-кривые.

Рисунок 4.6 – Характеристики ЯМ

#### 4.4 Однопараметрическая диффузионная модель (ОДМ)

ОДМ относится к типовым моделям гидродинамики потоков реальных аппаратов. ОДМ также описывает промежуточные состояния структуры гидродинамики между моделями ИС и ИВ.

Основой ОДМ является модель ИВ, осложненная обратным перемешиванием, следующим формальному закону диффузии (рисунок 3.13). Обратное перемешивание в реальных аппаратах может быть вызвано молекулярной диффузией, турбулентными пульсациями, пристеночными эффектами в ламинарном потоке, конвективным перемешиванием.

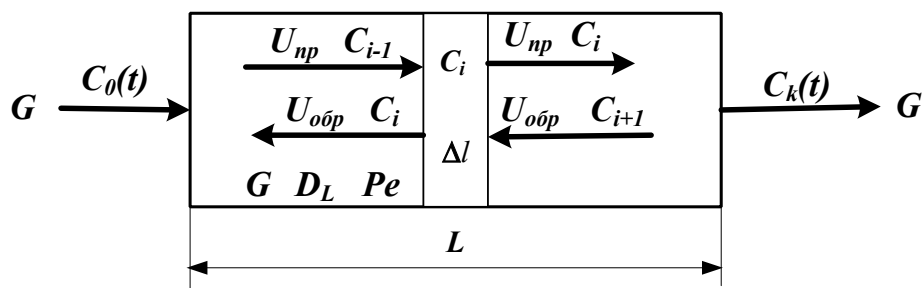


Рисунок 4.7 – Схема аппарата, имеющего однопараметрическую диффузионную модель

Здесь:

$L$  – предельное значение координаты, м;

$V$  – объем аппарата, м<sup>3</sup>;

$G$  – объемный расход жидкости через аппарат, м<sup>3</sup>/ч;

$S$  – сечение аппарата, м<sup>2</sup>;

$C_{i-1}$ ,  $C_i$ ,  $C_{i+1}$  – концентрация трассера в  $i-1$ ,  $i$ ,  $i+1$  сечениях аппарата.

$U_{np}$ ,  $U_{обр}$ ,  $U$  – прямая, обратная и средняя скорость потока, м/ч;

$$U = U_{np} - U_{обр}.$$

Для описания совокупного влияния этих факторов, выражающееся в отставании одних частиц от других, в ОДМ используется коэффициент продольной диффузии  $D_L$  или критерий Пекле  $Pe$ . При получении ОДМ принимается, что концентрация вещества непрерывно изменяется вдоль координаты и постоянна в сечении аппарата.

$$Pe = \frac{LU}{D_L} \quad D_L = \lim_{\Delta l \rightarrow 0} U_{обр} \Delta l \quad (4.15)$$

### 1. Уравнение материального баланса ОДМ.

Уравнение ОДМ с учетом коэффициента продольной диффузии имеет вид:

$$\frac{\partial C(t,l)}{\partial t} = -U \frac{\partial C(t,l)}{\partial l} + D_L \frac{\partial^2 C(t,l)}{\partial l^2}. \quad (4.16)$$

Граничные условия:

$$l = 0; t \geq 0; \frac{D_L}{U} \frac{\partial C(t,l)}{\partial l} = C(t,l) - C_0(t),$$

$$l = L; t \geq 0; \frac{dC(t,l)}{dl} = 0.$$

Начальные условия:

$$t = 0; l \geq 0,$$

$$C(t,l) = C_S(l).$$

Уравнения ОДМ с учетом критерия Пекле и среднего времени пребывания:

$$\bar{\tau} \frac{\partial C(t,l)}{\partial t} = -L \frac{\partial C(t,l)}{\partial l} + \frac{D_L L}{U} \frac{\partial^2 C(t,l)}{\partial l^2}, \quad (4.17)$$

$$Pe = \frac{UL}{D_L}$$

или с учетом того, что

$$\bar{\tau} \frac{\partial C(t,l)}{\partial t} = -L \frac{\partial C(t,l)}{\partial l} + \frac{L^2}{Pe} \frac{\partial^2 C}{\partial l^2}. \quad (4.18)$$

Уравнение ОДМ может быть записано в безразмерных координатах

$$\frac{\partial C(\theta, x)}{\partial \theta} = - \frac{\partial C(\theta, x)}{\partial x} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C(\theta, x)}{\partial x^2}. \quad (4.19)$$

Граничные условия:

$$x = 0; \theta \geq 0; \frac{1}{Pe} \frac{dC(\theta, x)}{dx} = C(\theta, x) - C_0(\theta),$$

$$x = 1; \theta \geq 0; \frac{dC(\theta, x)}{dx} = 0.$$

Начальные условия:

$$\theta = 0; C(0, x) = C_S(x).$$



ОДМ является также как и ЯМ промежуточной моделью между моделями ИС и ИВ: при  $Pe \rightarrow \infty$  или  $D_L \rightarrow 0$  ОДМ переходит в модель ИВ; при  $Pe \rightarrow 0$  или  $D_L \rightarrow \infty$  – модель ИС. Для реальных аппаратов зачастую можно принять модель ИВ при  $Pe \geq 100$ .

Критерий  $Pe$  для практических расчетов изменяется в диапазоне  $0,01 \div 10^2$ .

2. Пример кривых разгона ОДМ для различных значений  $Pe$  приведен на рисунке 4.8. F-кривые подтверждают, что ОДМ является промежуточной моделью.

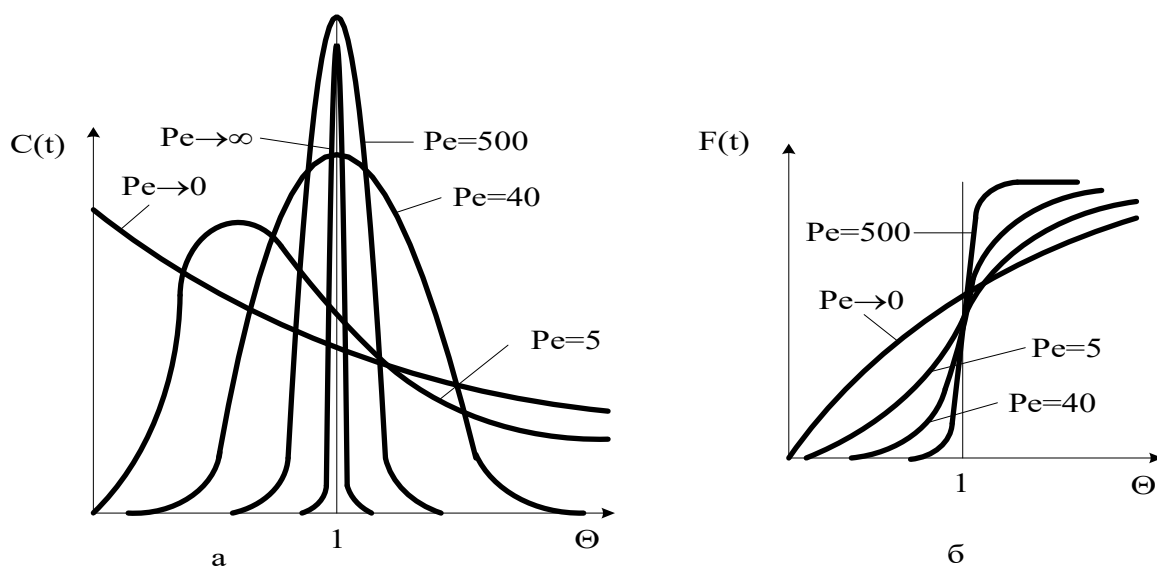
Пример импульсных характеристик ОДМ приведен на рис. 4.8. С-кривые также подтверждают промежуточный характер модели.

Для  $Pe \geq 100$ , т. е. для режимов близких к ИВ, получено аналитическое выражение импульсной характеристики

$$C_{одм}(\theta) = \frac{C_K(\theta)}{C_0(\theta)} = \frac{1}{2\sqrt{\pi\left(\frac{D_L}{UL}\right)}} \exp\left[-\frac{(1-\theta^2)^2}{4\frac{D_L}{UL}}\right], \quad (4.20)$$

или через  $Pe$

$$C_{одм}(\theta) = \frac{C_K(\theta)}{C_0(\theta)} = \frac{1}{2\sqrt{\pi/Pe}} \exp\left[-\frac{(1-\theta)^2}{4/Pe}\right]. \quad (4.21)$$



а – С-кривые; б – F-кривые.

Рисунок 3.14 – Характеристики однопараметрической диффузионной модели

#### 4.5 Вопросы для контроля

1. Приведите уравнение материального баланса реактора идеального смешения.
2. Как меняется время пребывания частиц в аппарате идеального смешения.
3. Приведите кривую разгона реактора ИС или F-кривую при ступенчатом воздействии на входе в реактор.
4. Приведите уравнение материального баланса реактора идеального вытеснения.
5. Приведите кривую разгона реактора ИВ или F-кривую при ступенчатом воздействии на входе в реактор.
6. Какое состояние структуры гидродинамики потоков описывает ячеечная модель?
7. Приведите кривую разгона реального реактора, описываемую ячеечной моделью, или F-кривую при ступенчатом воздействии на входе в реактор.

8. Что является основой однопараметрической диффузионной модели?

9. Приведите кривую разгона реального реактора, описываемую однопараметрической диффузионной моделью, или F-кривую при ступенчатом воздействии на входе в реактор.

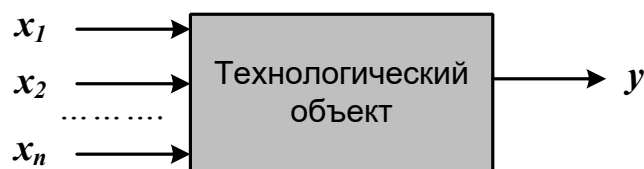
## Практическое занятие 5

### Тема «СОСТАВЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО- СТАТИСТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ»

#### 8.1 Основные понятия и определения

В тех случаях, когда информации о рассматриваемом процессе недостаточно или процесс настолько сложен, что невозможно составить его детерминированную модель, прибегают к экспериментально-статистическим методам.

При этом процесс рассматривают как «черный ящик» (рис. 8.1).



$x_1, x_2, \dots, x_n$  – факторы (независимые переменные);

$y$  – функция отклика.

*Рисунок 8.1 – Представление процесса, как «черного ящика»*

Математической моделью является функция отклика, которую определяют по результатам экспериментов, в ходе которых меняют значения  $x_i$  и определяют  $y$ :

$$y = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (5.1)$$

Различают пассивный и активный эксперимент.

**Пассивный** эксперимент – это поочередное варьирование каждой из переменных, а также сбор исходного статистического материала в режиме нормальной эксплуатации на промышленном объекте. Используются методы классического регрессионного и корреляционного анализа.

**Активный** эксперимент ставится по заранее составленному плану (планирование эксперимента) и предусматривает изменение всех параметров одновременно.

Для описания процесса наиболее часто используют уравнение регрессии второго порядка, которое для трех факторов запишется следующим образом:

$$y = \nu_0 + \nu_1 x_1 + \nu_2 x_2 + \nu_3 x_3 + \nu_{12} x_1 x_2 + \nu_{13} x_1 x_3 + \nu_{23} x_2 x_3 + \nu_{11} x_1^2 + \nu_{22} x_2^2 + \nu_{33} x_3^2. \quad (5.2)$$

Коэффициент  $\nu_0$  называют свободным членом уравнения регрессии; коэффициенты  $\nu_j$  – линейными эффектами; коэффициенты  $\nu_{jj}$  – квадратичными эффектами; коэффициенты  $\nu_{ij}$  – эффектами взаимодействия.

Коэффициенты уравнения (8.2) определяются методом наименьших квадратов из условия:

$$\Phi = \sum_{i=1}^N (y_i^y - y_i)^2 = \min \quad (5.3)$$

Здесь  $N$  – объем выборки. Разность между объемом выборки  $N$  и числом связей  $l$ , наложенных на эту выборку, называется числом степеней свободы выборки  $f$ :

$$f = N - 1.$$

При отыскании уравнения регрессии  $l$  равно числу определяемых коэффициентов.

Вид уравнения регрессии выбирается путем экспериментального подбора.

### **Пример**

Определить зависимость растворимости тиосульфата натрия ( $y$ ) от температуры ( $x$ ). Объем выборки  $N = 9$ . Экспериментальные данные приведены в табл. 1.

**Таблица 1 – Растворимость тиосульфата натрия при различных температурах**

$x, ^\circ\text{C}$	0	10	20	30	40	50	60	70	80
$y, \%$	33,5	37,0	41,2	46,1	50,0	52,0	56,3	64,3	69,9

## **Решение**

Растворимость тиосульфата натрия опишем линейным уравнением  $y = b_0 + b_1 x_1$ . Коэффициенты  $b_0$  и  $b_1$  определим соответственно по формулам (8.2) и (8.3):

$$b_1 = 0,44; \quad b_0 = 32,6.$$

Выборочный коэффициент корреляции:

$$r^* = 0,99.$$

Величина коэффициента корреляции очень близка к единице; следовательно, зависимость между  $x$  и  $y$  является практически линейной и имеет вид:

$$y = 32,6 + 0,44x.$$

После того, как уравнение регрессии найдено, необходимо провести статистический анализ результатов. Этот анализ состоит в следующем: проверяется значимость всех коэффициентов регрессии в сравнении с ошибкой воспроизводимости и устанавливается адекватность уравнения. Такое исследование называется регрессионным анализом.

При проведении регрессионного анализа примем следующие допущения:

Входной параметр  $x$  изменяется с пренебрежимо малой ошибкой.

Результаты наблюдений  $y_1, y_2, \dots, y_N$  над выходной величиной представляют собой независимые нормально распределенные случайные величины.

При проведении эксперимента с объемом выборки  $N$  при условии, что каждый опыт повторен  $m$  раз, выборочные дисперсии  $S_1^2, S_2^2, \dots, S_N^2$  должны быть однородны.

При одинаковом числе параллельных опытов, проверка однородности дисперсий сводится к следующему:

Определяется среднее из результатов параллельных опытов

$$\bar{y}_i = \frac{\sum_{u=1}^m y_{iu}}{m}, \quad i=1, 2, \dots, N. \quad (5.4)$$

Определяются выборочные дисперсии

$$S_i^2 = \frac{\sum_{u=1}^m (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{m-1}, \quad i=1, 2, \dots, N. \quad (5.5)$$

Определяется сумма дисперсий

$$\sum_{i=1}^N S_i^2. \quad (5.6)$$

Составляется отношение

$$G_{max} = \frac{S_{max}^2}{\sum_{i=1}^N S_i^2}, \quad (5.7)$$

где  $S_{max}^2$  – максимальное значение выборочной дисперсии.

Если дисперсии однородны, то

$$G_{max} < G_p(N, m-1), \quad (5.8)$$

где  $G_p(N, m-1)$  – табулированное значение критерия Кохрена при уровне значимости  $p$ .

Если выборочные дисперсии однородны, рассчитывается дисперсия воспроизводимости

$$S_{воспр}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N S_i^2}{N_f}. \quad (5.9)$$

Число степеней свободы  $f$  этой дисперсии равно

$$f = N(m-1).$$

**Дисперсия воспроизводимости необходима для оценки значимости коэффициентов уравнения регрессии. Оценка значимости коэффициентов проводится по критерию Стьюдента**

$$t_j = \frac{|b_i|}{S_{bj}},$$

где  $b_i$  –  $i$ -й коэффициент уравнения регрессии;

$S_{bj}$  – среднее квадратичное отклонение  $i$ -го коэффициента.

Если  $t_j$  больше  $t_p(f)$  для выбранного уровня значимости  $p$  и числа степеней свободы  $f$ , то коэффициент  $b_i$  значимо отличается от нуля и учитывается в уравнении регрессии.

Незначимые коэффициенты приравниваются к нулю и из уравнения регрессии исключаются.

Оставшиеся коэффициенты пересчитываются заново.

**Адекватность** уравнения проверяется по критерию Фишера

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2}, \quad (5.10)$$

где  $S_{воспр}^2$  – дисперсия воспроизводится;  $S_{ад}^2$  – дисперсия адекватности

$$S_{ад}^2 = \frac{m \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2}{N - e}. \quad (5.11)$$

Если

$$F < F_{таб}(f_1, f_2),$$

то уравнение адекватно.

При отсутствии параллельных опытов и дисперсии воспроизводимости качество аппроксимации можно оценить принятым уравнением, сравним  $S_{осм}^2$  и дисперсию относительно среднего  $S_y^2$

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i^2 - \bar{y})^2}{N - 1}; \quad S_{осм}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i^2 - \bar{y}_i)^2}{N - e}. \quad (5.12)$$

По критерию Фишера



$$F = \frac{S_y^2}{S_{ост}^2} \quad (5.13)$$

В этом случае критерий Фишера показывает, во сколько раз уменьшается рассеяние относительно полученного уравнения регрессии по сравнению с рассеянием относительно среднего. Чем больше значение  $F$  превышает табличное  $F_{таб}(f_1, f_2)$  для выбранного уровня значимости  $p$  и чисел степеней свободы  $f_1 = N-1$  и  $f_2 = N-e$ , тем эффективнее уравнение регрессии.

### Вопросы для контроля

- В каких случаях используют экспериментально-статистический метод составления математической модели?
- Чем отличается активный эксперимент от пассивного?
- Каким образом определяют вид уравнения регрессии?
- Как определяют коэффициенты уравнения регрессии?
- Какие коэффициенты уравнения считаются значимыми?
- Как проверяется адекватность уравнения регрессии с использованием дисперсии воспроизводимости и дисперсии адекватности?
- Каким образом можно оценить качество аппроксимации принятым уравнением при отсутствии параллельных опытов?

## РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Белов, П. С. Математическое моделирование технологических процессов Электронный ресурс : Учебное пособие (конспект лекций) / П. С. Белов. - Егорьевск : Егорьевский технологический институт (филиал) Московского государственного технологического университета «СТАНКИН», 2016. - 121 с. - Книга находится в премиум-версии ЭБС IPR BOOKS. - ISBN 978-5-904330-02-6.

2. Бочкарев, В. В. Оптимизация химико-технологических процессов Электронный ресурс : Учебное пособие / В. В. Бочкарев. - Томск : Томский политехнический университет, 2014. - 264 с. - Книга находится в премиум-версии ЭБС IPR BOOKS. - ISBN 978-5-4387-0420-1.

3. Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов : учеб. пособие / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – М. : Академкнига, 2008. – 416 с.: ил.

4. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии: 4-е изд., перераб., доп. Учебник для вузов. – М.: Химия, 1985. – 448 с.

5. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств: Учеб. пособие для вузов. – М.: Высш. шк., 1991. – 400 с.

6. Справочник азотчика: Физико-химические свойства газов и жидкостей. Производство технологических газов. Синтез аммиака. – М.: Химия, 1986. – 512 с.

7. Структурно-параметрический синтез математических моделей гидродинамики: Учебн. пособие/ Чистякова Т.Б., Гольцева Л.В. – СПб.: Изд-во СПбГТИ(ТУ), 2002. – 48 с.

8. Френкс Р. Математическое моделирование химической технологии. – М.: Химия, 1971. – 273 с.

