

1. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

1.1. Моделирование и виды моделей

Разработка новых машин, аппаратов, технологических установок всегда сопровождается выбором оптимального варианта конструкции, конструктивной схемы. Оптимизация реализуется путем анализа различных вариантов конструкции, сравнения их характеристик, например, таких как производительность, энергопотребление, эффективность процесса. Эти характеристики определяются экспериментально или рассчитываются по методикам.

Однако специфика химической промышленности, производства строительных материалов заключается в том, что проводить эксперименты, вводить новые элементы в конструкцию промышленных объектов практически невозможно. Это обусловлено, прежде всего, непрерывностью технологического процесса и невозможностью вклиниться в него без остановки всей технологической линии. К тому же любая установка в крупнотоннажном производстве, к которому относится большинство технологических установок химической и строительной индустрии, приводит к значительному снижению объема выпускаемой продукции. Дополнительные ограничения на проведение промышленных экспериментов возникают из-за требований техники безопасности. Как известно, большинство агрегатов работают под высоким давлением и при высоких температурах, в них обрабатываются агрессивные и пожаро- и взрывоопасные компоненты. Все вышесказанное вынуждает исследователей проводить эксперименты на моделях.

Модель – это упрощенная система, которая раскрывает отдельные части, характеристики оригинала. Естественно, что оригинал – это промышленный объект. Весь комплекс действий по созданию модели, ее исследованию и распространению результатов на оригинал с целью его совершенствования называется *моделированием*.

По способу реализации модели подразделяются на материальные и мысленные.

Материальная модель – материальный объект, подобный на оригинал с некоторым упрощением, выполненный в уменьшенном масштабе. Это самая распространенная модель в химическом машиностроении. Значительная часть промышленных агрегатов имеет большие габариты. Так, высота массообменных колонных аппаратов на нефтеперерабатывающих заводах достигает нескольких метров, а длина вращающихся печей цементного производства превышает 100 м. Естественно, что экспериментировать на таких агрегатах проблематично и приходится изготавливать их уменьшенные модели. Причем для полного изучения процесса может быть создано несколько установок. Например, одна предназначена для изучения гидродинамики, а вторая – эффективности массопередачи массообменного аппарата. На этих установках (моделях) исследуются технологические режимы, конструктивные элементы, и результаты испытаний переносятся затем на оригинал.

Мысленная модель – это мысленная схема оригинала, которая показывает его истинную сущность и принципиальные отличия.

Мысленное моделирование всегда присутствует в материальном. Во-первых, оно предшествует материальному, так как нельзя создать материальную модель без ее предварительного осмысления. Во-вторых, без мысленной модели невозможно распространить результаты на оригинал. Но понятие «мысленное моделирование» гораздо шире, чем материальное. По сути, вся наука представляет собой совокупность мысленных моделей.

Как материальные, так и мысленные модели могут реализовываться в разных направлениях и в связи с этим разделяются на физические и математические. **Физическая модель** – совокупность физических образов, выраженная языком физики. Это модель атома Резерфорда, подобная на планетарную модель вселенной, модель бензольного кольца, модель бетонной смеси, как неньютоновской жидкости, одновременно обладающей свойствами вязкой жидкости (поршень) и упругого твердого тела (пружина). Такой же типичной можно считать и модель теплопередачи через разделительную стенку. Все это не реальные объекты, а именно физические модели, представленные в виде физических образов. Но по каким-то характеристикам, параметрам эти модели подобны на оригинал, что позволяет изучать соответствующие показатели на моделях и результаты исследований переносить на реальный объект. Отсюда главная особенность физических моделей заключается в том, что они базируются на принципе подобия.

Второй разновидностью мысленной модели является математическая. **Математическая модель** – это описание процесса с помощью

математических символов. Математическая модель может быть представлена в виде уравнений, систем уравнений, критериальных зависимостей и даже графиков и таблиц. *Математическое моделирование*, как и любое другое, – это также процесс, включающий четыре взаимосвязанных этапа: постановка задачи, составление математического описания объекта, выбор метода решения задачи и реализация его в форме моделирующей программы (алгоритма), проверка соответствия (адекватности) модели реальному объекту.

Перед началом моделирования и в процессе проведения необходимо оценивать его целесообразность. Объективно считается, что оно должно удовлетворять двум требованиям: экономичности и продуктивности (лат. *traductio* – перенесение, перевод).

Процесс математического моделирования, на первый взгляд, кажется наиболее простым, не требующим больших материальных затрат. Основные атрибуты для его реализации – это лист бумаги, ручка, компьютер и хорошая математическая подготовка. В отличие от создания материальных моделей нет необходимости приобретения материалов, комплектующих изделий, контрольно-измерительных приборов, проведения монтажа экспериментальной установки. Но это кажущаяся простота. За ней скрывается ряд подводных камней и сложно преодолимых препятствий.

Первая трудность заключается в том, что исследователь, кроме хорошего владения математическим аппаратом, должен глубоко понимать и чувствовать те физико-химические процессы, которые реализуются в технологических аппаратах. А они зачастую настолько сложны и взаимосвязаны, что просто не поддаются математическому моделированию. Приходится разделять их на элементарные процессы и составлять математические модели для каждого в отдельности.

Приступая к созданию математической модели, исследователь уже заранее должен предполагать и прогнозировать пути решения поставленной задачи. Правда, в настоящее время в связи с появлением мощных компьютеров и соответствующих им пакетов прикладных программ эта проблема несколько упрощается. Но все равно из-за сложности химико-технологических процессов и на этапе физического моделирования, и при составлении математической модели приходится прибегать к идеализации и упрощениям. Важным также следует считать и правильный выбор начальных и граничных условий при решении математической модели. И, наконец, математическая модель должна быть адекватной оригиналу.

Начиная работу по составлению математической модели, исследователь должен представлять весь этот комплекс проблем и искать из него выход. Но часто проблемы становятся непреодолимыми из-за временных затрат и особенно по причине недостаточной адекватности модели. В этом случае бывает проще заняться созданием материальной модели к последующим ее исследованиям. Но все же математическое моделирование подкупает своей простотой и, главное, эффективностью реализации. Никакой другой способ моделирования не может обеспечить такой многовариантности исследования параметров процесса. Математические модели менее чувствительны к масштабному переходу и обеспечивают высокую достоверность результатов и адекватность. Все это говорит о неоспоримых преимуществах математического моделирования и необходимости им заниматься.

1.2. Виды математических моделей и этапы их разработки

Математическая модель – приближенное описание какого-то явления (процесса), выраженное с помощью математической символики.

В зависимости от конкретной реализации процесса и его аппаратного оформления все многообразие химико-технологических процессов можно разделить на классы исходя из временного и пространственного признаков:

– процессы, переменные во времени (нестационарные), и процессы, не меняющиеся во времени (стационарные);

– процессы, в ходе которых их параметры изменяются в пространстве, и процессы без пространственного изменения параметров.

Соответственно, и математические модели, описывающие эти процессы, подразделяются на следующие виды:

1) модели, неизменные во времени (стационарные), – статические модели;

2) модели, переменные во времени (нестационарные), – динамические модели;

3) модели, неизменные в пространстве, – модели с сосредоточенными параметрами;

4) модели, изменяющиеся в пространстве, – модели с распределенными параметрами.

Статические модели характеризуют работу объекта в стационарных условиях, т. е. при параметрах, неизменных во времени. Математическое

описание не включает время как переменную и состоит из алгебраических уравнений либо дифференциальных уравнений в случае объектов с распределенными параметрами.

Динамическая модель отражает изменение объекта во времени. Математическое описание таких моделей обязательно включает производную во времени. Примером динамической модели может быть модель аппарата полного смешения, но работающего в неустановившемся режиме.

Для класса *моделей с сосредоточенными параметрами* характерно постоянство переменных в пространстве. Математическое описание включает алгебраические уравнения либо дифференциальные уравнения первого порядка для нестационарных процессов. Примером может быть модель аппарата с полным (идеальным) перемешиванием жидкости, когда концентрация во всех точках аппарата одинакова.

Если основные переменные процесса изменяются как во времени, так и в пространстве, или эти изменения происходят только в пространстве, то модели, описывающие такие процессы, называются *моделями с распределенными параметрами*. Эти модели описываются обычно дифференциальными уравнениями в частных производных либо обыкновенными дифференциальными уравнениями в случае стационарных процессов с одной пространственной переменной.

Кроме того, математические модели по направлению реализации можно разделить:

- на расчетные;
- оптимизационные;
- кибернетические.

Независимо от вида математической модели ее составление включает четыре основных этапа:

- 1) постановка задачи (формализация объекта);
- 2) создание математического описания объекта;
- 3) составление алгоритма и реализация его аналитически или в виде программы;
- 4) определение соответствия (адекватности) модели объекту.

Порядок составления математической модели представим в виде схемы (рис. 1.1).

При постановке задачи предварительно проводят физическое моделирование объекта. При этом выделяют основные элементы объекта и анализируют явления, происходящие в нем, устанавливают взаимосвязь между ними. Реальный процесс, протекающий в объекте моде-

лирования, представляется как совокупность различных элементарных процессов. В качестве таковых могут быть движение потоков, теплообмен, химические превращения и т. д. Для каждого элементарного процесса разрабатывается физическая модель с рядом упрощений и допущений.

Далее на этапе разработки математически описанных процессов составляются уравнения или системы уравнений, которые отражают сущность и физические (химические) свойства. Кроме того, в математическое описание включают уравнения связи между различными процессами и явлениями. На этапе построения математической модели также возможны дополнительные упрощения, необходимые для возможности последующего решения поставленной задачи.



Рис. 1.1. Порядок составления математической модели

Этап проверки адекватности математической модели объекта является заключительным. Причем адекватность устанавливается при сравнении результатов, полученных расчетным путем с использованием математической модели, и результатов экспериментальных исследований на оригинале в реальных промышленных условиях.

Успех математического моделирования предопределяется несколькими факторами. Во-первых, в модели следует учесть все наиболее существенные факторы, влияющие на процесс. Во-вторых, она не должна включать множество второстепенных факторов, приводящих к усложнению математического описания до степени невозможности его реализации.

Применительно к моделированию, непосредственно направленному на совершенствование технологических агрегатов, расчетные математические модели представляют собой уравнения, эмпирические соотношения для расчета конкретных параметров и установления их взаимосвязи. Примером может служить зависимость гидравлического сопротивления и коэффициента массопередачи от скорости газа в аппарате. Расчетные модели могут использоваться и для определения диапазона устойчивой работы агрегата, а соответственно, конкретных числовых значений параметров, которые будут приняты в качестве начальных и граничных условий при его оптимизации.

1.3. Составление математического описания объекта

В начале создания математической модели на нее накладывается ряд ограничений. Это, прежде всего, вид и целевое назначение моделируемого физико-химического процесса, а также задача исследований. Кроме того, учитывается достоверность исходных данных и требуемая точность определения параметров с использованием математической модели.

В общем случае математическое описание объекта представляет собой комплекс зависимостей, связывающих параметры различных процессов в единую систему уравнений. Это могут быть уравнения, основанные на общих законах физики, уравнения элементарных процессов, теоретические и эмпирические уравнения, устанавливающие взаимосвязь между параметрами общего химико-технологического процесса. В дополнение ко всему часто на изменение параметров элементарных процессов накладываются ограничения в виде диапазона устойчивого функционирования технологического агрегата, проведения процесса в целом. Схематично математическое описание представлено на рис. 1.2.

Общие материальные и энергетические балансы – это уравнения баланса массы и энергии, записанные с учетом гидродинамики движения потоков. Они характеризуют распределение в потоках температуры, составов и связанных с ними свойств, таких, например, как вязкость, плотность, теплоемкость и т. д.

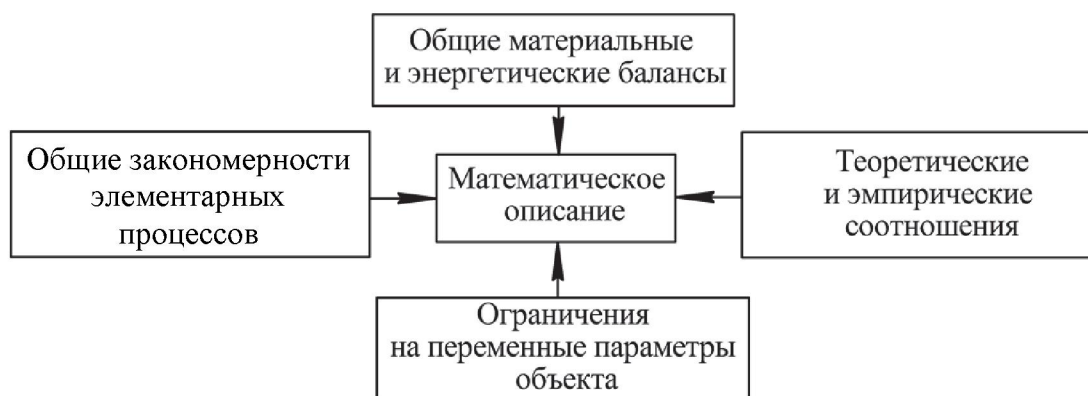


Рис. 1.2. Состав математического описания

Общие закономерности элементарных процессов представляют собой уравнения этих процессов для локальных элементов потока. К этой группе можно отнести описания процессов диспергирования, сепарации, тепло- и массообмена и др.

Теоретические и эмпирические соотношения устанавливают связь между различными параметрами процесса. Таковыми, например, являются зависимости эффективности сепарации и коэффициента массопередачи от скоростей потоков фаз, зависимость теплоемкости раствора от состава и т. д.

Ограничения на параметры объекта моделирования обычно представляются в виде численных значений. При моделировании процесса в конкретном технологическом аппарате вводятся ограничения по его геометрическим параметрам.

Основой всей структуры математического описания является гидродинамическая модель процесса. Действительно, гидродинамикой определяется эффективность процессов сепарации, переноса и даже диспергирования. Поэтому математическое моделирование обычно начинается с составления гидродинамической модели процесса, а затем исследуются все остальные элементарные процессы в связи с гидродинамикой. В заключении проводится объединение описаний всех элементарных процессов в единую систему уравнений математического описания объекта.

Составление математического описания может осуществляться несколькими методами (см. рис. 1.1 на с. 9):

- аналитическими;
- экспериментальными;
- экспериментально-аналитическими.

Аналитическими методами составления математического описания обычно называют способы вывода уравнений статики и динамики на основе теоретического анализа физических и химических процессов,

происходящих в исследуемом объекте, а также на основе заданных конструктивных параметров аппаратуры и характеристик перерабатываемых веществ. При выводе этих уравнений используются фундаментальные законы сохранения вещества и энергии, а также кинетические закономерности процессов переноса массы и теплоты, химических превращений.

Для составления математического описания с помощью аналитических методов не требуется проведения каких-либо экспериментов на объекте, поэтому такие методы пригодны для нахождения статических и динамических характеристик вновь проектируемых объектов, физико-химические процессы в которых достаточно хорошо изучены.

Параметры (коэффициенты) составленных уравнений функционально зависят от определяющих размеров химико-технологического аппарата (диаметра, длины и т. д.), свойств обрабатываемых веществ и величин, характеризующих протекание физико-химических процессов (констант скорости реакций, коэффициентов диффузии и др.). Некоторые параметры уравнений могут быть определены расчетным путем, другие находятся с помощью принципа подобия по результатам выполненных исследований.

Недостатком аналитических методов составления математического описания является сложность решения получающейся системы уравнений при достаточно полном описании объекта.

Экспериментальный метод составления математического описания используется для управления и исследования объектов в узком, «рабочем» диапазоне изменения входных и выходных переменных. Эти методы чаще всего основываются на предположении о линейности и сосредоточенности параметров объекта. Принятие этих допущений позволяет сравнительно просто описывать наблюдаемые процессы алгебраическими или линейными дифференциальными уравнениями с постоянными коэффициентами. При экспериментальном подходе к составлению математического описания всегда требуется постановка опытов непосредственно на изучаемом объекте.

Достоинством экспериментальных методов является простота получаемого математического описания при достаточно точном описании свойств объекта в узком диапазоне изменения параметров. Основной недостаток экспериментальных методов – невозможность установления функциональной связи между входящими в уравнения числовыми параметрами и конструктивными характеристиками объекта, режимными параметрами процесса, физико-химическими свойствами веществ. Кроме того, полученные экспериментальным методом математические описания нельзя распространять на другие однотипные объекты.

Наличие «сильных» и «слабых» сторон аналитического и экспериментального методов составления математического описания привело к необходимости разработки комбинированного *экспериментально-аналитического метода*. Сущность его заключается в аналитическом составлении уравнений описания, проведении экспериментальных исследований и нахождении по их результатам параметров уравнений. При подобном подходе к получению математического описания сохраняются многие положительные свойства экспериментальных и аналитических методов.

При составлении математического описания объекта моделирования используются уравнения различного вида: алгебраические, обыкновенные дифференциальные, дифференциальные в частных производных и интегральные.

К *алгебраическим уравнениям* обычно сводится математическое описание стационарных режимов объектов, рассматриваемых как объекты с сосредоточенными параметрами; примером может служить реактор идеального смешения. Уравнения этого типа применяют также при математическом описании более сложных объектов, используя их для выражения стационарных связей между разными параметрами.

Обыкновенные дифференциальные уравнения применяют для математического описания нестационарных режимов (динамики) объектов с сосредоточенными параметрами, а также стационарных режимов объектов с распределенными параметрами, в которых значения параметров зависят только от одной пространственной координаты. В первом случае в качестве независимой переменной в дифференциальных уравнениях используют время, во втором – пространственную координату. Важной особенностью математического описания, в которое входят обыкновенные дифференциальные уравнения, является необходимость задания начальных условий.

Дифференциальные уравнения в частных производных используют для математического описания динамики объектов с распределенными параметрами и стационарных режимов таких объектов, в которых распределенность имеется более чем по одной пространственной координате. При описании динамики объекта для указанных уравнений наряду с начальными условиями нужно задавать также условия, в общем случае являющиеся функциями времени. Для стационарных режимов объектов, характеризуемых уравнениями в частных производных, задают только граничные условия, которые могут зависеть от координат.

Применение *интегральных уравнений* возможно в случае описания процессов на элементарном уровне в виде алгебраических уравнений

с последующим интегрированием в каких-то пределах. С помощью таких уравнений определяется среднерасходная скорость потока в трубе при известном профиле ее распределения, мощность перемешивающего устройства и т. д.

Общим для всех математических моделей является то, что число уравнений, включенных в математическое описание, должно быть равно числу переменных, определяемых в результате моделирования.

После составления математического описания, задания начальных условий и ограничений необходимо выбрать метод решения и составить алгоритм и программу решения задачи. Алгоритм – четкое описание последовательных логических и вычислительных действий, обеспечивающих решение.

При возможности чисто аналитического решения необходимость в алгоритме и программе отпадает. Однако для более сложных задач, которые описываются системами дифференциальных уравнений, аналитического решения обычно не существует. Эти уравнения решаются численными методами с помощью ЭВМ. Необходимость выбора численного метода в последнее время отпала, так как применяются специальные пакеты прикладных программ Mathcad, Matlab и др.

Представим общую блок-схему математической модели процесса (рис. 1.3).

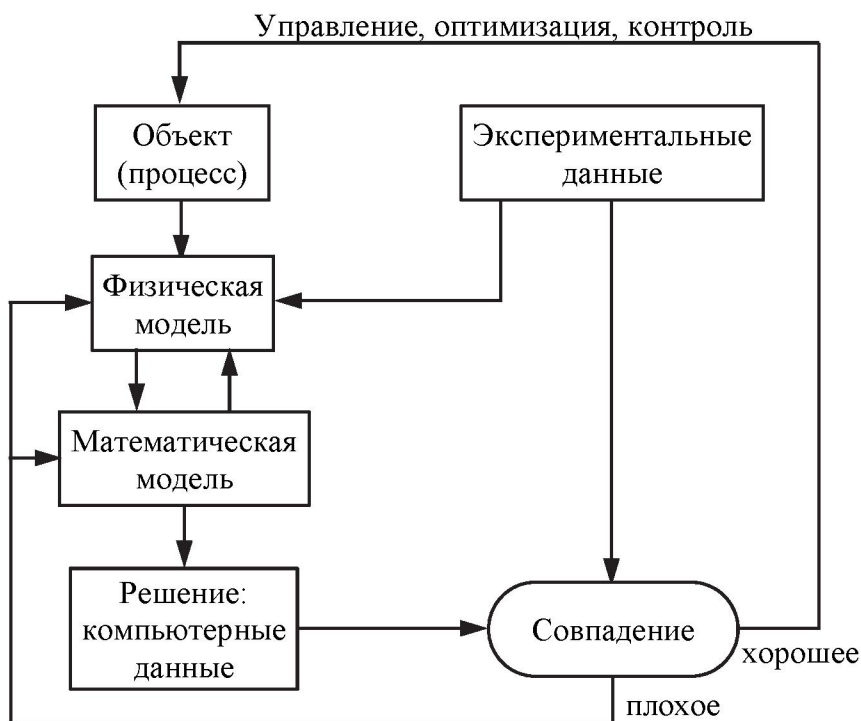


Рис. 1.3. Блок-схема построения математической модели процесса

В блок-схеме присутствуют обратные связи, обеспечивающие уточнение модели. В настоящее время для компьютерного исследования и моделирования химико-технологических процессов используются современные системы компьютерной математики. Пользователи с их помощью способны решать практически любые математические прикладные задачи.

Из всего многообразия таких систем остановимся вкратце на основных характеристиках систем Derive, Mathcad, Maple, Mathematica, Matlab (табл. 1.1).

Таблица 1.1

Сравнительные характеристики систем компьютерной математики

Система	Назначение и достоинства	Ограничения и недостатки
Derive	Умеренная математическая подготовка. Аналитические вычисления. Скромные требования к аппаратным ресурсам	Слабая графика и визуализация, отсутствие средств программирования. Слабая поддержка специальных функций в символьных расчетах
Mathcad	Понятный интерфейс. Ввод данных с помощью палитр математических знаков. Хороший набор операторов и функций. Множество примеров, электронных книг и библиотек	Ограниченные средства символьной математики. Прimitивные средства программирования
Maple	Уникальное ядро символьных вычислений. Мощнейшая графика. Удобная справочная система. Развитые средства форматирования документов	Ориентация на опытных пользователей и специалистов по математике
Mathematica	Совместимость с разными компьютерными платформами. Уникальная трехмерная графика. Развитые средства форматирования документов	Ориентация на опытных пользователей. Чрезмерная защита от копирования
Matlab	Научные расчеты, численное моделирование. Уникальные матричные средства, обилие численных методов, описательная графика, высокая скорость вычислений, легкость адаптации к задачам пользователя благодаря множеству пакетов расширения системы	Скромные возможности символьных вычислений. Дороговизна как самой системы, так и пакетов расширения

Указанные в табл. 1.1 особенности системы Mathcad позволили использовать ее в качестве мощного помощника-вычислителя для обработки результатов исследований химических процессов и моделирования процессов в жидких средах, газовых смесях, системах пар –

жидкость, осуществлять расчет статических и динамических режимов в аппаратах химической технологии, моделировать процессы регулирования химико-технологических процессов, осуществлять их оптимизацию.

1.4. Моделирование механических процессов

Механические процессы описываются законами механики твердых тел. Эти процессы применяются в основном для подготовки исходных твердых материалов и обработки конечных твердых продуктов, а также для транспортирования кусковых и сыпучих материалов. К механическим процессам относятся измельчение, транспортирование, сортировка (классификация) и смешение твердых веществ.

Получение математической модели, описывающей механический процесс, рассмотрим на примере моделирования движения материала по вращающемуся диску.

Часто эту задачу упрощают до прямолинейного движения под воздействием силы трения и центробежной инерционной силы. На самом деле частицы движутся по некоторой криволинейной траектории.

Для описания движения твердых частиц по вращающемуся диску пригодно уравнение динамики несвободной материальной точки.

В качестве активных сил здесь выступают сила тяжести

$$G = mg \quad (1.1)$$

и сила трения

$$F_{\text{тр}} = fN = fmg, \quad (1.2)$$

где f – коэффициент трения скольжения частицы по диску.

Поскольку движение рассматривается в плоскости диска, то перпендикулярные к ней сила тяжести и нормальная реакция не оказывают влияния на характер движения. Тогда для абсолютного движения вдоль плоскости тарелки уравнение движения примет вид

$$m\bar{a} = \bar{F}_{\text{тр}}. \quad (1.3)$$

Движение частицы по диску рассмотрим как сложное, состоящее из переносного и относительного. За определяющий параметр примем полную скорость движения частицы по диску v . В системе координат $0ur$ (рис. 1.4) переносное движение – это поворот системы координат на угол φ со скоростью v_φ , а относительное – движение частицы вдоль оси r со скоростью v_r .

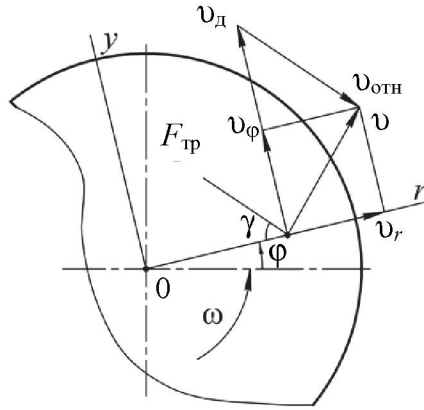


Рис. 1.4. Расчетная схема движения частицы по вращающемуся диску

Абсолютное ускорение частицы в векторной форме находится по формуле

$$\bar{a} = \bar{a}_e^n + \bar{a}_e^\tau + \bar{a}_r + \bar{a}_c, \quad (1.4)$$

где \bar{a}_e^n – переносное нормальное ускорение, м/с²; \bar{a}_e^τ – переносное касательное ускорение, м/с²; \bar{a}_r – относительное ускорение, м/с²; \bar{a}_c – кориолисово ускорение, м/с².

Ускорения, входящие в уравнение (1.4), рассчитываются по следующим формулам:

$$a_e^n = r \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2, \quad a_e^\tau = r \frac{d^2\phi}{dt^2}, \quad a_r = \frac{d^2r}{dt^2}, \quad a_c = 2 \frac{d\phi}{dt} \frac{dr}{dt}. \quad (1.5)$$

С учетом выражения для ускорения (1.4) уравнение движения (1.3) в проекциях на оси координат r и y примет вид

$$\begin{cases} m(a_r - a_e^n) = -F_{\text{тр}} \cos\gamma; \\ m(a_e^\tau + a_c) = F_{\text{тр}} \sin\gamma, \end{cases} \quad (1.6)$$

где γ – угол между вектором силы трения и осью r .

Направление вектора силы трения совпадает с вектором разности скоростей движения точки диска и частицы:

$$\bar{v}_{\text{отн}} = \bar{v}_d - \bar{v}, \quad (1.7)$$

где \bar{v} – вектор полной скорости частицы, м/с; \bar{v}_d – вектор скорости точки диска, совпадающей с частицей, м/с:

$$\bar{v}_d = \omega r, \quad (1.8)$$

где ω – угловая скорость диска, рад/с; r – текущий радиус, м.

Тригонометрические функции угла γ определяются из расчетной схемы (см. рис. 1.4 на с. 17) по следующим формулам:

$$\sin \gamma = \frac{v_d - v_\phi}{|\bar{v}_d - \bar{v}|} = \frac{\omega r - r \frac{d\phi}{dt}}{\sqrt{\left(\omega r - r \frac{d\phi}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dr}{dt}\right)^2}};$$

$$\cos \gamma = \frac{v_r}{|\bar{v}_d - \bar{v}|} = \frac{\frac{dr}{dt}}{\sqrt{\left(\omega r - r \frac{d\phi}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dr}{dt}\right)^2}}.$$
(1.9)

С учетом вышеизложенного уравнения движения (1.6) преобразуются к виду

$$\left\{ \begin{array}{l} m \left(\frac{d^2 r}{dt^2} - r \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right) = -fmg \frac{\frac{dr}{dt}}{\sqrt{\left(\omega r - r \frac{d\phi}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dr}{dt}\right)^2}}; \\ m \left(r \frac{d^2 \phi}{dt^2} + 2 \frac{d\phi}{dt} \frac{dr}{dt} \right) = fmg \frac{\omega r - r \frac{d\phi}{dt}}{\sqrt{\left(\omega r - r \frac{d\phi}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dr}{dt}\right)^2}}. \end{array} \right.$$
(1.10)

После сокращения на массу и переноса всех производных первого порядка в правую часть получаем систему уравнений движения частицы по вращающемуся диску:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 r}{dt^2} = r \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 - fg \frac{\frac{dr}{dt}}{\sqrt{\left(\omega r - r \frac{d\phi}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dr}{dt}\right)^2}}; \\ \frac{d^2 \phi}{dt^2} = -\frac{2}{r} \frac{d\phi}{dt} \frac{dr}{dt} + \frac{fg}{r} \frac{\omega r - r \frac{d\phi}{dt}}{\sqrt{\left(\omega r - r \frac{d\phi}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dr}{dt}\right)^2}}. \end{array} \right.$$
(1.11)

Решая полученную систему (численным методом при помощи ЭВМ), определяем составляющие полной скорости v_r и v_ϕ движения частицы по диску.

По найденным составляющим вычисляем полную скорость движения частицы по диску:

$$v = \sqrt{v_r^2 + v_\phi^2}. \quad (1.12)$$

В заключение определяем угол отрыва β частицы с диска, исходя из расчетной схемы (см. рис. 1.4 на с. 17):

$$\cos\beta = \frac{v_\phi}{v}. \quad (1.13)$$

1.5. Моделирование гидромеханических процессов

Гидромеханические процессы – процессы, скорость которых определяется законами гидродинамики – науки о движении жидкостей и газов. К этим процессам относятся: перемещение жидкостей, сжатие и перемещение газов, разделение жидких и газовых неоднородных систем в поле сил тяжести (отстаивание), в поле центробежных сил (центрифугирование), а также под действием разности давлений при движении через пористый слой (фильтрование) и перемещение жидкостей.

Движение твердых тел в жидкости (газе). Это движение наблюдается в процессах осаждения, воздушной классификации и т. д. Рассмотрим простейший случай – движение частицы в осевом потоке газа (рис. 1.5, а).

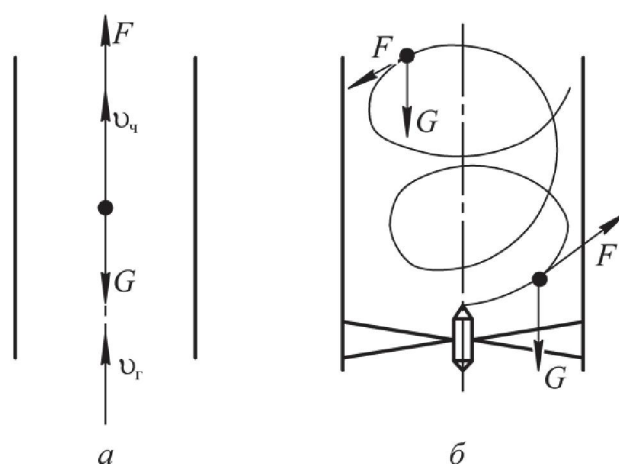


Рис. 1.5. Движение частицы в восходящем газовом потоке: а – осевой газовый поток; б – закрученный газовый поток

Поскольку движение одномерное, то уравнение движения имеет вид

$$m \frac{dv_{\text{ч}}}{dt} = -mg + F. \quad (1.14)$$

Сила аэродинамического воздействия находится по формуле

$$F = cS \frac{\rho v_{\text{отн}}^2}{2}, \quad (1.15)$$

где c – коэффициент аэродинамического сопротивления; S – площадь поперечного сечения частицы, м^2 ; ρ – плотность газа, $\text{кг}/\text{м}^3$; $v_{\text{отн}}$ – относительная скорость, равная разности скорости газа $v_{\text{г}}$ и скорости частицы $v_{\text{ч}}$.

В качестве примера рассмотрим моделирование движения частицы в кольцевом зазоре среднеходной мельницы под воздействием осевого газового потока после отрыва ее с вращающейся размольной тарелки. В качестве начальных условий для этой задачи принимаются полная скорость частицы на выходе с тарелки и угол ее отрыва.

На частицу в газовом потоке действует большое количество сил. Однако, учитывая небольшие размеры частицы и используя ряд допущений, можно сделать вывод, что существенное влияние на движение частицы оказывают сила тяжести G , сила аэродинамического воздействия потока P (рис. 1.6).

В общем виде уравнение движения одиночной частицы материала в кольцевом зазоре между кромкой тарелки и корпусом мельницы может быть представлено следующим образом:

$$m \frac{d\bar{U}}{d\tau} = \sum_{i=1}^q \bar{F}_i, \quad (1.16)$$

где \bar{U} – скорость движения частицы в кольцевом зазоре, $\text{м}/\text{с}$; τ – время движения частицы, с ; q – количество внешних сил, действующих на частицу; \bar{F}_i – внешние силы, Н .



Рис. 1.6. Расчетная схема

Сила аэродинамического воздействия потока находится по формуле

$$P = kc \frac{\pi d^2 \rho (W - U_y)^2}{8}, \quad (1.17)$$

где k – коэффициент формы частиц ($k = 1$ – для шаровидных частиц); c – коэффициент аэродинамического сопротивления; d – приведенный диаметр частицы, м; ρ – плотность газа, кг/м³; W – осевая скорость потока газа в кольцевом зазоре, м/с; U_y – проекция скорости частицы на ось y , м/с.

Коэффициент аэродинамического сопротивления зависит от формы частицы, что обычно учитывается коэффициентом формы, и главным образом от числа Рейнольдса, величина которого для частицы шаровидной формы в данном случае определяется по формуле

$$\text{Re} = \frac{d |W - U_y|}{\nu}, \quad (1.18)$$

где ν – кинематическая вязкость газа, м²/с.

Коэффициент аэродинамического сопротивления, входящий в формулу (1.17), можно рассчитать по формуле Клячко:

$$c = \frac{24}{\text{Re}} + \frac{4}{\sqrt[3]{\text{Re}}} = \frac{24}{\text{Re}} (1 + 0,17 \text{Re}^{2/3}). \quad (1.19)$$

Сила инерции вычисляется по формуле

$$F_{\text{и}} = \frac{m v_{\tau}^2}{R}, \quad (1.20)$$

где v_{τ} – тангенциальная скорость частицы на выходе с тарелки, м/с; R – текущий радиус, м.

Таким образом, учитывая только силу инерции, силу тяжести и силу аэродинамического воздействия воздуха, в проекциях на оси x и y получим систему дифференциальных уравнений движения частицы в кольцевом зазоре:

$$\begin{cases} m \frac{dU_x}{dt} = 0; \\ m \frac{dU_y}{dt} = P - G. \end{cases} \quad (1.21)$$

Подставляя в систему дифференциальных уравнений (1.21) выражение (1.17) и выполняя соответствующие преобразования, окончательно имеем:

$$\begin{cases} \frac{dU_x}{dt} = 0; \\ \frac{dU_y}{dt} = kc \frac{\pi d^2 \rho (W - U_y)^2}{8m} - g. \end{cases} \quad (1.22)$$

Получить аналитическое решение системы дифференциальных уравнений (1.22) не представляется возможным, поэтому расчет осуществляется численным методом, например методом Рунге – Кутты с использованием пакета Mathcad.

Таким образом, решая систему дифференциальных уравнений, а также принимая во внимание начальные условия, получаем численные значения скоростей U_x и U_y при различных значениях текущего радиуса.

Полная скорость движения одиночной частицы материала в кольцевом зазоре мельницы определяется по следующей формуле:

$$U = \sqrt{U_x^2 + U_y^2}. \quad (1.23)$$

Более сложным случаем является движение частиц в закрученном газовом потоке (циклоны, прямоточные элементы и т. д.). Там движение пространственное, и газ и частицы движутся по спиралеобразным траекториям (см. рис. 1.5, б на с. 19).

Активными силами, которые оказывают существенное влияние на характер движения, остаются сила тяжести G и сила аэродинамического воздействия F_B (рис. 1.7).

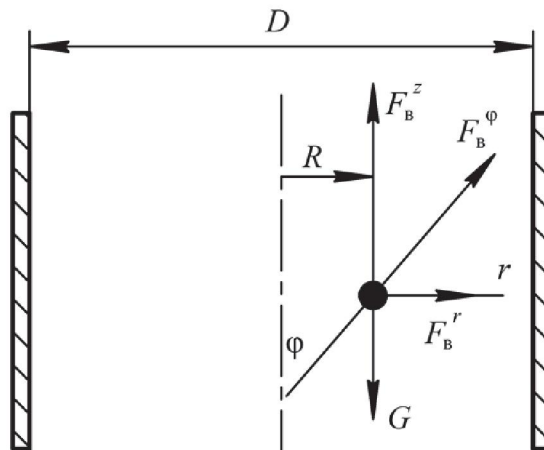


Рис. 1.7. Силы, действующие на частицу в закрученном газовом потоке

В общем виде уравнение движения частицы материала в закрученном воздушном потоке может быть представлено следующим образом:

$$m \frac{d\bar{v}}{dt} = \sum_{i=1}^k \bar{F}_i, \quad (1.24)$$

где \bar{v} – скорость движения частицы в закрученном газовом потоке, м/с; t – время движения частицы, с; k – количество внешних сил, действующих на частицу материала при ее движении; \bar{F}_i – активные силы, Н.

Основное влияние на движение частицы материала в закрученном потоке оказывает сила аэродинамического воздействия газа, которая в данном случае находится по формуле

$$\bar{F}_B = \frac{1}{2} k_\phi c_\rho S |\bar{w}_i - \bar{v}| (\bar{w}_i - \bar{v}) = \frac{1}{8} k_\phi c_\rho \pi d^2 |\bar{w}_i - \bar{v}| (\bar{w}_i - \bar{v}), \quad (1.25)$$

где k_ϕ – коэффициент формы частицы; c – коэффициент аэродинамического сопротивления; ρ – плотность газа, кг/м³; S – площадь поперечного сечения частицы, м²; \bar{w}_i – скорость газового потока в данной точке аппарата, м/с; \bar{v} – скорость движения частицы, м/с; d – диаметр частицы, м.

Модуль разности скоростей газового потока и частицы (относительная скорость) можно представить в виде

$$w_{\text{отн}} = |\bar{w}_i - \bar{v}| = \sqrt{(w_r - v_r)^2 + (w_\phi - v_\phi)^2 + (w_z - v_z)^2}. \quad (1.26)$$

Коэффициент аэродинамического сопротивления зависит от формы частицы, что обычно учитывается коэффициентом формы, и главным образом от числа Рейнольдса:

$$c = \frac{24}{\text{Re}} (1 + 0,17 \text{Re}^{2/3}). \quad (1.27)$$

Критерий Рейнольдса в данном случае находится так:

$$\text{Re} = \frac{d |\bar{w}_i - \bar{v}|}{\nu}, \quad (1.28)$$

где ν – кинематическая вязкость газа, м²/с.

Движение закрученного газового потока носит сложный пространственный характер. Твердые частицы, попавшие в данный поток, увлекаются газом и начинают двигаться по спиралеобразным траекториям. Движение по таким траекториям обычно рассматривается в цилиндрической системе координат. Центр системы координат совместим с центром трубы. Текущими координатами в данном случае будут r , ϕ , z . Полная скорость движения частиц при этом будет характеризоваться тремя составляющими: v_r , v_ϕ , v_z .

Тогда в проекциях на оси цилиндрической системы координат уравнения движения твердой частицы в закрученном газовом потоке примут вид

$$\begin{cases} m \left(\frac{dv_r}{dt} - \frac{v_\varphi^2}{R} \right) = F_B^r; \\ m \left(\frac{dv_\varphi}{dt} + \frac{2v_r v_\varphi}{R} \right) = F_B^\varphi; \\ m \frac{dv_z}{dt} = F_B^z - G. \end{cases} \quad (1.29)$$

Подставляя в систему дифференциальных уравнений выражения (1.25)–(1.28) и выполняя соответствующие преобразования, окончательно получаем:

$$\begin{cases} \frac{dv_r}{dt} = 18 \frac{k_\phi \rho_B}{d^2 \rho_M} (w_r - v_r) \left(1 + 0,17 \left(\frac{dw_{\text{отн}}}{v} \right)^{\frac{2}{3}} \right) v + \frac{v_\varphi^2}{R}; \\ \frac{dv_\varphi}{dt} = 18 \frac{k_\phi \rho_B}{d^2 \rho_M} (w_\varphi - v_\varphi) \left(1 + 0,17 \left(\frac{dw_{\text{отн}}}{v} \right)^{\frac{2}{3}} \right) v - \frac{2v_r v_\varphi}{R}; \\ \frac{dv_z}{dt} = 18 \frac{k_\phi \rho_B}{d^2 \rho_M} (w_z - v_z) \left(1 + 0,17 \left(\frac{dw_{\text{отн}}}{v} \right)^{\frac{2}{3}} \right) v - g, \end{cases} \quad (1.30)$$

где v_r, v_φ, v_z – составляющие полной скорости движения частицы материала в закрученном потоке, м/с; w_r, w_φ, w_z – составляющие полной скорости движения газового потока в трубе, м/с; R – текущий радиус движения частицы материала и газового потока, м.

Таким образом, решая систему дифференциальных уравнений, находим численные значения координат, а также составляющие полной скорости движения одиночной частицы в закрученном газовом потоке.

По величине отдельных составляющих рассчитываем значение полной скорости частицы при соприкосновении со стенкой трубы:

$$v = \sqrt{v_r^2 + v_\varphi^2 + v_z^2}. \quad (1.31)$$

1.6. Моделирование теплообменных процессов

Теплообменные процессы – процессы, протекающие со скоростью, определяемой законами теплопередачи – науки о способах распространения тепла. Такими процессами являются нагревание, охлаждение, выпаривание и конденсация паров.

Кинетические закономерности теплообменных процессов, как и всех других, могут быть сформулированы на основе обобщенного закона: скорость любого процесса прямо пропорциональна движущей силе и обратно пропорциональна сопротивлению:

$$\frac{dQ}{dSd\tau} = \frac{\Delta t}{R} = k\Delta t, \quad (1.32)$$

где Q – количество тепла, Дж; S – площадь поверхности, м^2 ; τ – время, с; Δt – движущая сила, $^{\circ}\text{C}$; R – термосопротивление, $\text{м}^2 \cdot ^{\circ}\text{C} \cdot \text{с}/\text{Дж}$; k – коэффициент теплопередачи, $\text{Дж}/(\text{м}^2 \cdot ^{\circ}\text{C} \cdot \text{с})$.

Для элементарного участка основное уравнение теплопередачи записывается следующим образом:

$$dQ = k\Delta t dS d\tau. \quad (1.33)$$

Для стационарного процесса:

$$Q = kS\Delta t. \quad (1.34)$$

Однако процесс теплопередачи довольно сложный и определить точно k тяжело. Сложные процессы обычно разделяются на элементарные, затем строится физическая модель процесса, а каждый из элементарных процессов описывается математической моделью. Тепло может распространяться разными способами: теплопроводностью (движение молекул – молекулярный уровень), конвекцией (движение масс частиц – макроуровень) и излучением (движение элементарных частиц). Для промышленности первые два способа основные.

Физическая модель представлена на рис. 1.8.

Процесс перехода тепла через разделительную стенку описывается в общем виде дифференциальным уравнением Фурье:

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} = \frac{\lambda}{c\rho} \left(\frac{\partial^2 t}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial z^2} \right), \quad (1.35)$$

где λ – коэффициент теплопроводности, $\text{Вт}/(\text{м} \cdot ^{\circ}\text{C})$; c – теплоемкость материалов, $\text{Дж}/(\text{кг} \cdot ^{\circ}\text{C})$; ρ – плотность, $\text{кг}/\text{м}^3$.

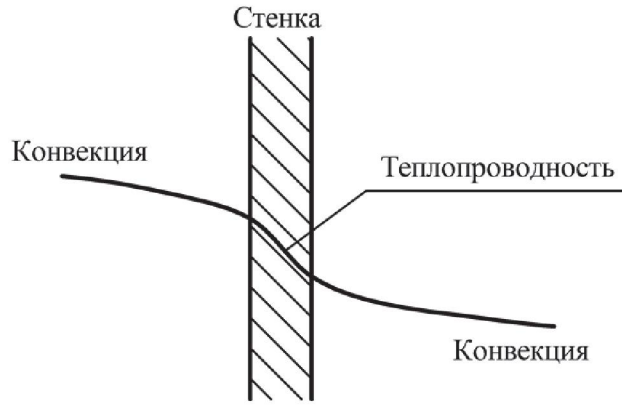


Рис. 1.8. Физическая модель

По уравнению (1.35) можно определить температуру в любой точке тела, но оно в общем виде не решается, а используется только для упрощенных задач. Так, для стационарного процесса $\frac{\partial t}{\partial \tau} = 0$ и теплопроводности через плоскую стенку имеем:

$$\frac{\partial^2 t}{\partial y^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 t}{\partial z^2} = 0. \quad (1.36)$$

Остается:

$$\frac{\partial^2 t}{\partial x^2} = 0. \quad (1.37)$$

Проинтегрировав, получаем:

$$t = c_1 x + c_2. \quad (1.38)$$

Определим постоянные интегрирования: при $x = 0$ $t = t_1$, $c_2 = t_1$; при $x = \delta$ $t = t_2$, $t_2 = c_1 \delta + t_1$, $c_1 = (t_2 - t_1) / \delta$, где t_1, t_2 – температура по обе стороны стенки, °C; δ – толщина стенки, м.

Подставив их в уравнение (1.38), находим:

$$t = \frac{t_2 - t_1}{\delta} x + t_1, \quad (1.39)$$

$$\frac{dt}{dx} = \frac{t_2 - t_1}{\delta}, \quad dQ = -\lambda \frac{t_2 - t_1}{\delta} dS d\tau.$$

Количество тепла, переданное за единицу времени:

$$Q = \frac{\lambda}{\delta} (t_1 - t_2) S \tau. \quad (1.40)$$

Таким образом, получили уравнение теплопроводности для плоской стенки.

Передача тепла конвекцией сильно зависит от гидродинамических условий (скорости). Так, в основном течении теплоносителя передача тепла происходит за счет движения масс частиц. Но возле стенки скорость движения снижается, образуется малоподвижный слой, где передача тепла осуществляется теплопроводностью. Общий закон конвективного переноса тепла учитывает это.

Дифференциальное уравнение конвективного переноса (уравнение Фурье – Кирхгофа) имеет вид

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} + \frac{\partial t}{\partial x} v_x + \frac{\partial t}{\partial y} v_y + \frac{\partial t}{\partial z} v_z = \frac{\lambda}{c\rho} \left(\frac{\partial^2 t}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial z^2} \right). \quad (1.41)$$

Количество тепла, которое передается теплопроводностью по закону Фурье, определяется по формуле

$$dQ = -\lambda \frac{dt}{dn} dS d\tau, \quad (1.42)$$

где $\frac{dt}{dn}$ – градиент температур.

В то же время по закону Ньютона (закон охлаждения):

$$dQ = \alpha (t_{ст} - t_{пот}) dS d\tau$$

или

$$-\lambda \frac{dt}{dn} = \alpha (t_{ст} - t_{пот}), \quad (1.43)$$

где α – коэффициент теплоотдачи, Вт/(м² · °С).

Эти два уравнения целиком описывают процесс конвективного переноса тепла, однако в общем виде не решаемы. Поэтому обычно используют переход к критериальным уравнениям. Тепловое подобие по аналогии с гидродинамическими описывается следующими основными критериями:

$$\begin{aligned} \frac{\alpha l}{\lambda} &= Nu \text{ – критерий Нуссельта,} \\ \frac{\vartheta l}{\alpha} &= Pe \text{ – критерий Пекле,} \\ \frac{\alpha \tau}{l^2} &= Fo \text{ – критерий Фурье.} \end{aligned} \quad (1.44)$$

Кроме того, необходимо выполнение гидродинамического и геометрического подобия. И поэтому общее критериальное уравнение процесса теплопередачи обычно имеет следующий вид: $Nu = f(Fo, Pe, Re, Fr, \Gamma)$, а $\alpha = f(Nu)$.

2. МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

2.1. Цели и задачи оптимизации

Человек всегда организует свою деятельность таким образом, чтобы получить наилучшие результаты. Причем это характерно для всех сфер деятельности, начиная с бытовой, социальной и заканчивая производственной. Стремление к наилучшему результату, в общем, и есть оптимизация. Или, если перефразировать с учетом дополнительных обстоятельств, то *оптимизация* – это целенаправленная деятельность, заключающаяся в получении наилучших результатов при соответствующих условиях.

Для определения места и роли оптимизации в производственной сфере следует обратиться к такому понятию, как жизненный цикл технической системы (рис. 1.9).

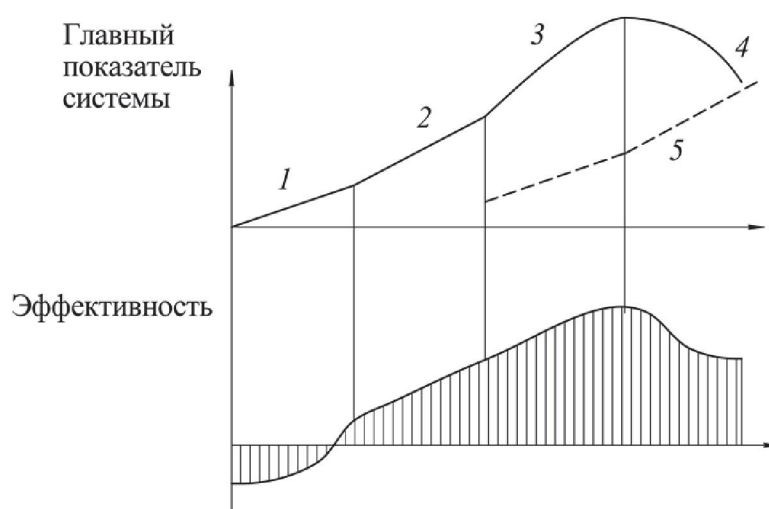


Рис. 1.9. Этапы развития технической системы:
1 – появление; 2 – интенсивное развитие; 3 – замедление развития;
4 – моральное старение; 5 – новая техническая система

Жизненный цикл любой технической системы включает несколько этапов: создание, интенсивное развитие, замедление развития, моральное старение. На каждом из этих этапов ведется работа по улучшению показателей технической системы, т. е. оптимизация. Это в полной мере относится к технологическому процессу в целом или к отдельному аппарату. Из рис. 1.9 видно, что оптимизация имеет смысл на двух первых этапах. Именно здесь темпы роста показателей системы увеличиваются. Но уже на третьем этапе они уменьшаются, не говоря уже о четвертом – моральном старении. В связи с этим при замедленном развитии требуется переход на новую техническую систему, основанную на новом принципе, который кардинально изменяет показатели в сторону повышения (линия 5).

Появление новой технической системы – это чаще всего результат фундаментальных исследований, открывающих новые явления, свойства, закономерности. А вот повышение качественных и количественных показателей системы на этапе интенсивного развития обеспечивается преимущественно за счет оптимизации технологических и конструктивных параметров ее объектов.

Математическое моделирование позволяет установить взаимосвязь между элементарными процессами, отдельными стадиями технологического процесса и решить многовариантные оптимизационные задачи. Но в особом случае математическое моделирование остается средством или инструментом для реализации задач оптимизации, основной целью которых является достижение наилучшего результата.

В настоящее время для решения задач оптимизации используются преимущественно следующие методы:

- метод исследования функций классического анализа;
- метод множителей Лагранжа;
- вариационное исчисление;
- динамическое программирование;
- принцип максимума;
- линейное программирование;
- нелинейное программирование;
- геометрическое программирование.

Указанные методы являются довольно разноплановыми. Одни из них, такие, например, как метод множителей Лагранжа, вариационное исчисление, представляются единым комплексным методом оптимизации. Вместе с тем название «нелинейное программирование» объединяет довольно большое количество градиентных, безградиентных методов и методов случайного поиска. Некоторые методы (исследования

функций классического анализа, множителей Лагранжа, нелинейное программирование) на определенных этапах решения оптимальных задач можно использовать в сочетании с другими методами, например динамическим программированием или принципом максимума.

2.2. Формулировка задач оптимизации

Поиск оптимального решения любой задачи состоит из трех этапов:

- 1) формулировка задачи;
- 2) поиск оптимальных условий на основе какого-то алгоритма оптимизации;
- 3) реализация оптимальных условий на практике.

Очень важным считается первый этап – формулировка задачи. Если задача оптимизации плохо сформулирована, то совершенно правильное ее решение даст результат, для практики абсурдный. Иногда именно хорошая формулировка задачи определяет успех оптимизации в целом.

Как правило, формулировка задачи оптимизации включает выбор критерия оптимальности, установление ограничений, выбор оптимизируемых факторов и запись целевой функции.

Для выбора указанных параметров представим технологический процесс в виде системы. Элементами этой системы являются элементарные процессы: тепло- и массообмен, движение фаз, химические реакции и др. Анализ этих процессов порознь не дает возможности судить обо всем процессе в целом. Поэтому необходимо обращать внимание на взаимодействие составляющих его элементов.

Внешние связи системы можно представить схемой, изображенной на рис. 1.10.

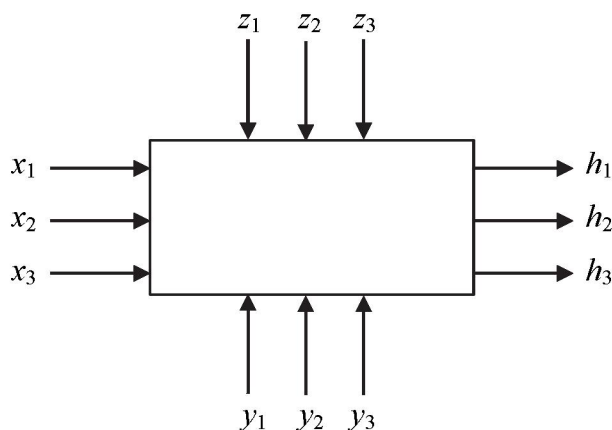


Рис. 1.10. Схема внешних связей системы

Из схемы видно, что химико-технологический процесс представляет собой систему с рядом входных и выходных параметров: x , y , z – входные параметры, при этом:

x – контролируемые и регулируемые параметры;

y – контролируемые и нерегулируемые параметры;

z – неконтролируемые параметры;

h – выходные параметры.

Критерий оптимальности – это главный признак, по которому оценивают, насколько хорошо функционирует рассматриваемая система, работает данный процесс, насколько хорошо решена задача оптимизации.

О работе судят по ее результатам. Поэтому критерий оптимальности является одним из результатов, одним из выходов системы (рис. 1.10). Чтобы выбранный критерий оптимальности можно было эффективно использовать на следующем этапе, он должен удовлетворять трем основным требованиям.

Во-первых, *критерий оптимальности должен быть единственным*. Это самое тяжелое требование. Дело в том, что, как правило, нас интересует ряд выходов системы, и мы хотим, чтобы по всем им система была наилучшей.

Иногда говорят так: оптимальным является такое ведение технологического процесса, при котором производительность установки и качество продукта максимальны, а затраты и потери минимальны. При внешней привлекательности такая постановка задачи утопична и потому объективно вредна. Так вести процесс невозможно.

Например, оптимизируется работа ректификационной колонны; желательно получить максимально чистые продукты (наибольшую четкость разделения). Однако, если стремиться только к улучшению этого показателя, то «оптимальным» окажется режим при бесконечном флегмовом числе, т. е. без питания и без отбора дистиллята. Производительность в таком «оптимуме» равна нулю.

С другой стороны, если мы будем стремиться лишь к увеличению производительности, то придем к противоположному, но также абсурдному решению: используя колонну просто как трубопровод, мы сможем пропустить через нее огромное количество смеси, но разделение окажется нулевым.

В дальнейшем станет ясно, что можно пользоваться либо тем, либо другим критерием (введя ограничения). Но обоими сразу воспользоваться нельзя: они предъявляют к режиму несовместимые требования.

В настоящее время предпринимается ряд попыток разработать процедуру оптимизации по нескольким критериям, но методики, пригодной

для широкого использования, пока нет. Мы умеем, как следует, оптимизировать лишь по одному критерию.

Поэтому так важно хорошо выбрать критерий оптимальности. Именно неудачно выбранный критерий может сделать всю задачу бессмысленной.

Обычно наиболее обоснованы, наиболее хорошо работают экономические критерии, такие как прибыль, норма прибыли, рентабельность, приведенный доход, себестоимость. Однако чаще всего характер зависимости этих критериев от входных параметров системы сложен. Для упрощения задачи зачастую пользуются технологическими критериями – например, производительностью, чистотой продукта, выходом продукта и т. д. Каждый технологический критерий в конечном счете связан с экономикой: чем больше производительность, тем выше будет прибыль; чем выше чистота, тем меньше будут затраты на следующих стадиях и т. д.

При оптимизации производства в целом или его крупных подразделений естественно применять экономические критерии. Технологические критерии удобны при оптимизации более мелких объектов: отдельного узла, аппарата, небольшой цепочки аппаратов, т. е. при локальной оптимизации. При их использовании следует особенно тщательно учитывать особенности процесса: критерий, подходящий в одних условиях, может совершенно не годиться в другом.

Второе требование состоит в том, что *критерий оптимальности должен выражаться числом*. В противном случае сопоставление разных вариантов становится крайне затруднительным, и тогда критерий оптимальности можно выразить в баллах.

Третье обязательное свойство критерия оптимальности: *его величина должна изменяться монотонно при улучшении качества функционирования системы*. Это значит, что оценивать объект можно по принципу: «чем больше критерий, тем лучше», либо «чем меньше критерий, тем лучше», но ни в коем случае не по принципу: «вот это значение критерия оптимально, и отклоняться от него не следует».

В приведенных формулировках безразличны оценки «больше» или «меньше». Они определяются физическим смыслом критерия. Хорошо, когда прибыль велика, но когда себестоимость мала; когда велика производительность, но малы потери. Умножив любой критерий на -1 , мы превратим «больше» в «меньше», и наоборот.

Но вот критерий, обладающий некоторым оптимальным значением, от которого нежелательно отклоняться, не годится. Например, в лекарственной смеси содержание того или иного ингредиента не может являться критерием оптимальности: иначе мы бы получили

не смесь заданного состава, а максимальную концентрацию одного вещества.

Если для какого-то параметра, характеризующего систему, существует оптимальное значение, то этот параметр – не критерий оптимальности, а оптимизирующий фактор.

Ограничения. Как бы хорошо ни был выбран критерий оптимальности, этого в большинстве задач недостаточно, чтобы учесть все условия, в которых должен проходить процесс. С одной стороны, нас всегда интересует не один результат процесса, а многие. С другой – никогда не удастся реализовать все значения входных параметров, которые желательны. Условия, которые необходимо соблюдать независимо от того, как их соблюдение повлияет на величину критерия оптимальности, называют ограничениями.

Чаще всего ограничения возникают по следующим причинам:

- по количеству и качеству сырья и продукции: состав сырья, как правило, задается не нами, и менять его нельзя; количество сырья также может быть ограничено; выпуск продукции не должен быть меньше планового и больше того, что можно реализовать; качество продукта не должно быть ниже требований ГОСТа;

- по условиям технологии: расход воздуха не может превышать производительность вентилятора; температура не может быть выше предела, при котором портится материал аппарата или катализатор; размеры аппаратов изменять мы не можем и т. д.;

- по экономическим и конъюнктурным соображениям: капитальные затраты не должны превышать выделенной суммы; срок ввода нового производства не должен быть позже запланированного; нельзя применять методы и устройства, защищенные иностранными патентами;

- по соображениям охраны труда и окружающей среды – чрезвычайно важная группа ограничений, жесткость которых все возрастает.

Кроме этой классификации, ограничения можно различать по формально-математическим признакам. Так, выделяют ограничения типа равенств и типа неравенств.

Ограничения типа равенств устанавливают определенное значение того или иного фактора. Чаще всего фактор можно рассматривать как один из контролируемых нерегулируемых входов. Так, в конкретных условиях работы задаются численные значения, характеризующие состав сырья, размеры аппаратов, нагрузку на аппарат и т. д.

Ограничения типа неравенств определяют пределы, в которых допустимо изменение параметров процесса.

Для одних ограничения задают односторонние пределы (например, производительность не ниже заданной; температура не выше той, на которую рассчитан материал), для других – двусторонние (например, температура в пределах от температуры замерзания до температуры кипения).

Оптимизирующие факторы – те из входов системы, которые в процессе оптимизации относят к управляющим. Это те воздействия, которые мы применяем для оптимизации процесса. Остальные факторы при этом не регулируются, хотя их значения, разумеется, учитывают при определении оптимальных условий: эти факторы фигурируют в задаче в качестве ограничений типа равенств.

Число оптимизирующих факторов зависит от того, на какой стадии разработки производства осуществляется оптимизация. Если производство еще проектируется (оптимальное проектирование), то к числу оптимизирующих целесообразно отнести как можно большее число факторов. Действительно, на этой стадии регулировать факторы проще всего: регулирование (изменение значений) осуществляется не в действительности, а на математической модели. Поэтому здесь желательно найти оптимальные значения максимального числа факторов.

Но задача оптимизации возникает и после пуска производства (оптимальное управление). При этом число оптимизирующих воздействий становится существенно меньшим. Часть факторов мы уже не можем менять: таковы, например, размеры аппаратов. Но и не все остальные факторы целесообразно теперь регулировать. Дело в том, что чем больше управляющих факторов, тем сложнее система управления, сложнее ее математическая модель.

При большом числе факторов она может стать столь сложной, что ЭВМ, рассчитывающая оптимальные режимы, перестанет поспевать за изменением условий протекания процесса: рекомендации по оптимизации придут, когда их реализация уже запоздает. Все это заставляет использовать для оптимального управления сравнительно небольшое число факторов.

2.3. Характеристика методов решения задач оптимизации

Исследователями разработано много методов оптимизации. Выбор того или иного метода обусловлен постановкой задачи оптимизации и математической моделью объекта.

К специальным методам решения оптимизационных задач, ориентированных на оптимизацию параметров технологического оборудования, можно отнести:

- 1) метод исследования функций классического анализа;
- 2) метод множителей Лагранжа;
- 3) линейное программирование;
- 4) нелинейное программирование;
- 5) геометрическое программирование.

Методы исследования функций классического анализа представляют собой наиболее известные методы решения несложных оптимальных задач, с которыми инженер знакомится при изучении курса математического анализа. Обычной областью использования данных методов являются задачи с известным аналитическим выражением критерия оптимальности, что позволяет найти не очень сложное, также аналитическое выражение для производных. Полученные приравнением нулю производных уравнения, определяющие экстремальные решения оптимальной задачи, крайне редко удается решить аналитическим путем, поэтому, как правило, применяют вычислительные машины. При этом надо решить систему конечных уравнений, чаще всего нелинейных, для чего приходится использовать численные методы, аналогичные методам нелинейного программирования.

Дополнительные трудности при решении оптимальной задачи методами исследования функций классического анализа возникают вследствие того, что система уравнений, получаемая в результате их применения, обеспечивает лишь необходимые условия оптимальности. Поэтому все решения данной системы (а их может быть и несколько) должны быть проверены на достаточность. По итогам такой проверки сначала отбрасываются решения, которые не определяют экстремальные значения критерия оптимальности, а затем среди остающихся экстремальных решений выбирают решение, удовлетворяющее условиям оптимальной задачи, т. е. наибольшему или наименьшему значению критерия оптимальности в зависимости от постановки задачи.

Методы исследования при наличии ограничений на область изменения независимых переменных можно использовать только для отыскания экстремальных значений внутри указанной области. В особенности это относится к задачам с большим числом независимых переменных (практически больше двух), в которых анализ значений критерия оптимальности на границе допустимой области изменения переменных становится весьма сложным.

Метод множителей Лагранжа применяют для решения задач такого же класса сложности, как и при использовании обычных методов исследования функций, но при наличии ограничений типа равенств

на независимые переменные. К требованию возможного получения аналитических выражений для производных от критерия оптимальности при этом добавляется аналогичное требование относительно аналитического вида уравнений ограничений.

В основном при использовании метода множителей Лагранжа приходится решать те же задачи, что и без ограничений. Некоторое усложнение в данном случае возникает лишь от введения дополнительных неопределенных множителей, вследствие чего порядок системы уравнений, решаемой для нахождения экстремумов критерия оптимальности, соответственно повышается на число ограничений. В остальном процедура поиска решений и проверки их на оптимальность отвечает процедуре решения задач без ограничений.

Множители Лагранжа можно применять для решения задач оптимизации объектов с распределенными параметрами и задач динамической оптимизации. При этом вместо решения системы конечных уравнений для отыскания оптимума необходимо интегрировать систему дифференциальных уравнений.

Следует отметить, что множители Лагранжа используют также в качестве вспомогательного средства и при решении специальными методами задач других классов с ограничениями типа равенств, например, в вариационном исчислении и динамическом программировании. Особенно эффективно применение множителей Лагранжа в методе динамического программирования, где с их помощью иногда удается снизить размерность решаемой задачи.

Линейное программирование представляет собой математический аппарат, разработанный для решения оптимальных задач с линейными выражениями для критерия оптимальности и линейными ограничениями на область изменения переменных. Такие задачи обычно встречаются при решении вопросов оптимального планирования производства с ограниченным количеством ресурсов, при определении оптимального плана перевозок (транспортные задачи) и т. д.

Для решения большого круга задач линейного программирования имеется практически универсальный алгоритм – симплексный метод, позволяющий за конечное число итераций находить оптимальное решение подавляющего большинства задач. Тип используемых ограничений (равенства или неравенства) не сказывается на возможности применения указанного алгоритма. Дополнительной проверки на оптимальность для получаемых решений не требуется. Как правило, практические задачи линейного программирования отличаются весьма значительным числом независимых переменных. Поэтому для их ре-

шения обычно используют вычислительные машины, необходимая мощность которых определяется размерностью решаемой задачи.

Методы нелинейного программирования применяют для решения оптимальных задач с нелинейными функциями цели. На независимые переменные могут быть наложены ограничения также в виде нелинейных соотношений, имеющих вид равенств или неравенств. По существу, методы нелинейного программирования используют, если ни один из перечисленных выше методов не позволяет сколь-нибудь продвинуться в решении оптимальной задачи. Поэтому указанные методы иногда называют также прямыми методами решения оптимальных задач.

Для получения численных результатов важное место отводится нелинейному программированию и в решении оптимальных задач такими методами, как динамическое программирование, принцип максимума и т. п., на определенных этапах их применения.

Под названием «методы нелинейного программирования» объединяется большая группа численных методов, многие из которых приспособлены для решения оптимальных задач соответствующего класса. Выбор того или иного метода обусловлен сложностью вычисления критерия оптимальности и сложностью ограничивающих условий, необходимой точностью решения, мощностью имеющейся вычислительной машины и т. д. Ряд методов нелинейного программирования практически постоянно используется в сочетании с другими методами оптимизации, как, например, метод сканирования в динамическом программировании. Кроме того, эти методы служат основой построения систем автоматической оптимизации – оптимизаторов, непосредственно применяющихся для управления производственными процессами.

Геометрическое программирование есть метод решения одного специального класса задач нелинейного программирования, в которых критерий оптимальности и ограничения задаются в виде полиномов – выражений, представляющих собой сумму произведений степенных функций от независимых переменных. С подобными задачами иногда приходится сталкиваться в проектировании. Кроме того, некоторые задачи нелинейного программирования иногда можно свести к указанному представлению, используя аппроксимационное представление для целевых функций и ограничений.

В некоторых случаях оптимизировать конструктивные и технологические параметры машин и аппаратов можно с помощью экспериментально-статистических методов.

2.4. Постановка задачи линейного программирования

Линейное программирование используется для решения оптимизационных задач в том случае, когда критерий оптимальности задан в виде линейной функции независимых переменных. Причем на указанные переменные могут быть наложены ограничивающие условия в форме линейных равенств и неравенств. Иногда даже при рассмотрении сложных нелинейных задач удается представить математическое описание оптимизируемого объекта в некоторых локальных областях изменения независимых переменных приближенными линейными соотношениями, выполнить так называемую линейаризацию. Это дает возможность перевести исходную задачу к задаче линейного программирования с хорошо разработанным математическим аппаратом и надежными алгоритмами расчета.

Общая задача линейного программирования заключается в минимизации (максимизации) линейной целевой функции вида

$$R = c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_nx_n$$

или

$$R = \sum_{i=1}^n c_i x_i, \quad (1.45)$$

где c_i – заданные постоянные коэффициенты (могут быть с минусом или с плюсом); x_i – переменная.

Поскольку переменные – это реальные величины (параметры), то они должны быть положительными ($x_i \geq 0$).

На независимые переменные накладываются линейные ограничения в виде равенств или неравенств:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n \leq b_1; \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n \leq b_2; \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n \leq b_m, \quad \text{обычно } b_i > 0. \end{cases} \quad (1.46)$$

С помощью метода линейного программирования хорошо решаются экономические задачи. Рассмотрим одну из них.

Пример. Завод выпускает пластмассовые изделия двух типов: А и Б. Для изделия А требуется 3 кг полиэтилена, для изделия Б – 4 кг. Завод на неделю может получить только 1700 кг полиэтилена. Для каждого

изделия А требуется 12 мин времени на изготовление, а для изделия Б – 30 мин. В неделю суммарно можно использовать 160 ч рабочего времени. Изделие А приносит 2 тыс. руб. прибыли, изделие Б – 4 тыс. руб. Сколько изделий А и Б необходимо изготовить в неделю, чтобы получить максимальную прибыль?

Решение. Обозначим через x_1 – выпуск изделий А; x_2 – выпуск изделий Б.

Целевая функция – максимальная прибыль:

$$R = 2x_1 + 4x_2. \quad (1.47)$$

Ограничения:

– по полиэтилену:

$$3x_1 + 4x_2 \leq 1700; \quad (1.48)$$

– по времени:

$$0,2x_1 + 0,5x_2 \leq 160 \text{ (или } 2x_1 + 5x_2 \leq 1600\text{)}. \quad (1.49)$$

Получили все функции линейными, а поскольку x_1 и x_2 положительные, то решение будет находиться в положительном квадрате и ограничиваться прямыми: $3x_1 + 4x_2 \leq 1700$ и $2x_1 + 5x_2 \leq 1600$.

Из рис. 1.11 следует, что штриховая линия – это линия уровня целевой функции R . Когда она проходит через 0 , то выполняется условие $2x_1 + 4x_2 = 0$.

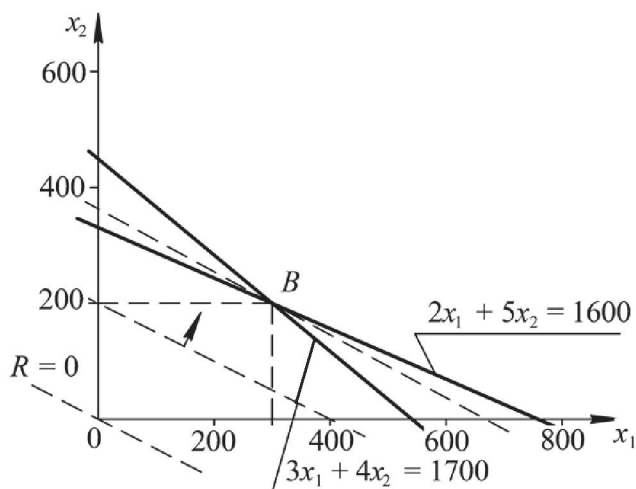


Рис. 1.11. Графический способ решения задачи

Так, перемещая R параллельно, мы увеличиваем целевую функцию. В пункте B – $R = \max$. При этом $x_1 = 300$ и $x_2 = 200$, а $R = 1400$. Эти же значения можно получить, решив систему уравнений:

$$\begin{cases} 3x_1 + 4x_2 = 1700; \\ 2x_1 + 5x_2 = 1600. \end{cases} \quad (1.50)$$

Это простая задача всего с двумя переменными решается графически на плоскости. Задачи с большим числом переменных означают переход в многомерное пространство и таким простым способом не решаются.

2.5. Экспериментально-статистическая оптимизация

Сущность экспериментально-статистической оптимизации.

Современная химическая промышленность выпускает несколько десятков тысяч наименований продуктов. Одновременно в лабораториях разрабатываются сотни новых технологических процессов и проводятся испытания новых машин и аппаратов. Конечной задачей этих экспериментальных исследований является поиск оптимальных условий проведения процесса, оптимальных геометрических соотношений машин и аппаратов. Технологические процессы, даже на стадии экспериментов, часто настолько сложные и многофакторные, что их невозможно разделить на элементарные и составить для них математические модели. Поэтому задачи управления такими процессами решаются экспериментально-статистическими методами. Этими же методами на стадии экспериментальных исследований проводится оптимизация параметров технологических процессов, а также конструктивных и технологических параметров вновь разрабатываемых машин и аппаратов.

Сущность экспериментально-статистической оптимизации заключается в получении оптимальных параметров исследуемого процесса или их соотношений, которые установлены экспериментально, для достижения экстремума целевой функции (критерия оптимальности).

Необходимость проведения экспериментально-статистической оптимизации на стадии лабораторных исследований рассмотрим на примере определения эффективности массопередачи по водной фазе при десорбции CO_2 . В общем виде эффективность массопередачи рассчитывается по следующей формуле:

$$E = \frac{c_{\text{Н}} - c_{\text{К}}}{c_{\text{Н}}}, \quad (1.51)$$

где $c_{\text{Н}}$, $c_{\text{К}}$ – соответственно начальная и конечная концентрации CO_2 в воде.

При проведении экспериментов получены зависимости эффективности массопередачи от скорости газа $E = f(v)$ при разной плотности орошения $q_1 = 2 \text{ л}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})$ и $q_2 = 8 \text{ л}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})$ (рис. 1.12).

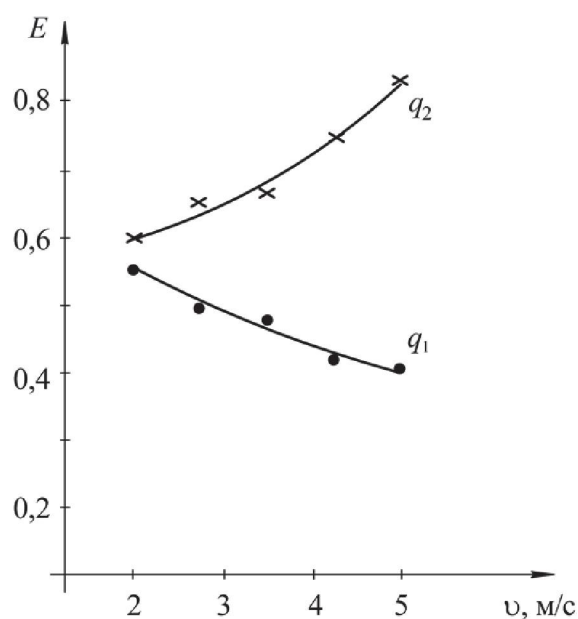


Рис. 1.12. Зависимости эффективности массопередачи от скорости газа

Плотность орошения значительно влияет на гидродинамическую обстановку в массообменном аппарате. По этой причине при низкой плотности орошения эффективность массопередачи с увеличением скорости газа падает, а при высокой, наоборот, возрастает.

Возникает вопрос: какую оптимальную скорость газа и плотность орошения рекомендовать по результатам экспериментальных исследований для производственных условий? Ответ на этот вопрос может дать экспериментально-статистическая оптимизация, реализуемая в виде планирования эксперимента. Возникновение современных статистических методов планирования эксперимента связано с именем англичанина Р. Фишера, работы которого датируются началом XX в. Фишер разработал метод факторного планирования, дисперсионный анализ. При этом он широко использовал латинские квадраты и блок-схемы.

В 1951 г. благодаря работе американских ученых Дж. Бокса и К. Уилсона начался новый современный этап развития планирования эксперимента. Ими сформулирована и реализована идея последовательного экспериментального определения оптимальных условий проведения процессов, а также доказана возможность использования планирования эксперимента при исследовании их физико-химических механизмов.

Планирование эксперимента позволяет одновременно варьировать все факторы и количественно оценивать основные эффекты и эффекты взаимодействия. Применение методов планирования эксперимента существенно повышает эффективность эксперимента и, что немало важно, значительно снижает количество опытов.

Полный факторный эксперимент. При полном факторном эксперименте (ПФЭ) реализуются все возможные комбинации факторов на всех выбранных для исследования уровнях.

Необходимое число опытов при ПФЭ определяется по формуле

$$N = l^k, \quad (1.52)$$

где l – число уровней; k – число факторов.

Уровни факторов – это ограничивающие значения диапазона изменения какого-то параметра. Обычно диапазон характеризуется двумя значениями: большим и меньшим. В примере с десорбцией CO_2 скорость газа ограничивается значениями $v = 2\text{--}5$ м/с, а плотность орошения – $q = 2\text{--}8$ л/(м² · с). В обоих случаях количество уровней $l = 2$. Такой план носит название полного факторного эксперимента типа 2^k . Количество факторов в указанном примере тоже два: скорость газа и плотность орошения, т. е. $k = 2$. Таким образом, в данном случае будет реализована экспериментально-статистическая оптимизация в виде простейшего полного факторного эксперимента вида 2^2 . Необходимое минимальное количество опытов для определения оптимальных соотношений таких факторов, как v и q , будет равно: $N = 2^2 = 4$.

Минимальное число уровней $l = 2$ обычно применяется на первом этапе работы, на стадии движения в область оптимума и при описании объекта линейными моделями.

Работу по планированию эксперимента начинают со сбора информации (экспериментальные исследования). Анализ этой информации позволяет получить представление о параметре оптимизации, о факторах, о наилучших условиях ведения исследования, о характере поверхности отклика и т. д. На основе анализа полученных данных делается выбор экспериментальной области факторного пространства, который заключается в выборе основного (нулевого) уровня и интервалов варьирования факторов. Основной уровень является исходной точкой для построения плана эксперимента, а интервалы варьирования определяют расстояния по осям координат от верхнего и нижнего уровней до основного уровня. При планировании эксперимента значения факторов кодируются путем линейного преобразования координат факторного пространства с переносом начала координат в ну-

левую точку и выбором масштабов по осям в единицах интервалов варьирования факторов.

Реализацию этой части планирования эксперимента проанализируем на примере эффективности массопередачи при десорбции CO_2 . Экспериментальная область факторного пространства в реальных величинах: $v_{\min} = 2 \text{ м/с}$, $v_{\max} = 5 \text{ м/с}$, $q_{\min} = 2 \text{ л/(м}^2 \cdot \text{с)}$, $q_{\max} = 8 \text{ л/(м}^2 \cdot \text{с)}$.

Область факторного пространства довольно удобно и наглядно отображается геометрически в виде прямоугольника (рис. 1.13).

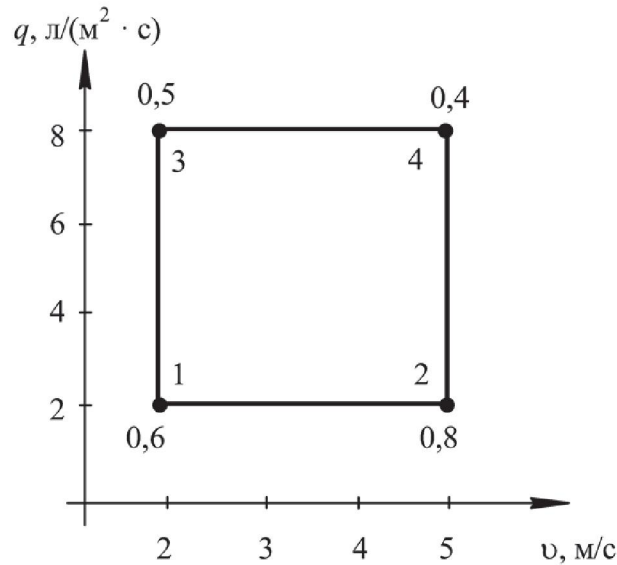


Рис. 1.13. Область факторного пространства

Вершины прямоугольника получены на пересечении перпендикуляров, опущенных на оси координат в точки максимальных и минимальных значений факторов оптимизации. В углах прямоугольника указаны номера опытов и значения целевой функции (эффективности массопередачи) при соответствующих значениях этих факторов. Все оптимальные значения факторов находятся внутри прямоугольника.

Для дальнейшей реализации первого этапа проведем кодирование целевой функции и факторов оптимизации, заменив их безразмерными параметрами. Введем обозначения: $E = y$, $v = z_1$, $q = z_2$.

Следующий шаг заключается в определении центра плана и интервала варьирования.

Центр плана, или основной уровень, для любого фактора z_i находится как среднее арифметическое:

$$z_i^0 = \frac{z_i^{\max} + z_i^{\min}}{2}. \quad (1.53)$$

Интервал варьирования рассчитывается из соотношения

$$\Delta z_i = \frac{z_i^{\max} - z_i^{\min}}{2}, \quad (1.54)$$

где $i = 1, 2, \dots, k$.

Для рассматриваемого примера:

$$z_1^0 = \frac{5+2}{2} = 3,5; \quad \Delta z_1 = \frac{5-2}{2} = 1,5;$$

$$z_2^0 = \frac{8+2}{2} = 5; \quad \Delta z_2 = \frac{8-2}{2} = 3.$$

Имея данные по интервалу варьирования оптимизируемых факторов и необходимому количеству опытов $N = 2^2 = 4$, можно приступить к составлению плана проведения эксперимента в виде таблицы, называемой матрицей планирования (табл. 1.2). Ее заполнение начинается с указания номера опыта и записи закодированных в натуральном масштабе значений факторов z_i , соответствующих каждому из них, что можно наглядно установить по области факторного пространства (см. рис. 1.13 на с. 43).

Таблица 1.2

Матрица планирования эксперимента $N = 2^2$

Номер опыта	Значение факторов				Целевая функция y
	в натуральном масштабе		в безразмерной системе координат		
	z_1	z_2	x_1	x_2	
1	2	2	-1	-1	0,6
2	5	2	-1	-1	0,8
3	2	8	+1	+1	0,5
4	5	8	+1	+1	0,4

От системы координат z_1, z_2, \dots, z_k перейдем к новой безразмерной системе координат x_1, x_2, \dots, x_k . Формула перехода, или кодирования, имеет вид

$$x_i = \frac{z_i - z_i^0}{\Delta z_i}; \quad i = 1, 2, \dots, k. \quad (1.55)$$

Для каждого из четырех опытов, которые необходимо провести, по формуле (1.55) можно рассчитать кодированное значение факторов.

Так, для опыта № 1:

$$x_1 = \frac{2 - 3,5}{1,5} = -1; \quad x_2 = \frac{2 - 5}{3} = -1;$$

для опыта № 2:

$$x_1 = \frac{5 - 3,5}{1,5} = 1; \quad x_2 = \frac{2 - 5}{3} = -1 \text{ и т. д.}$$

Рассчитанные значения закодированных факторов заносятся в соответствующие графы матрицы планирования (табл. 1.2). Каждый столбец в матрице планирования называют вектор-столбцом, а каждую строку – вектор-строкой. Из расчета кодированных значений факторов видно, что в безразмерной системе координат верхний уровень равен (+1), нижний – (-1). Координаты центра плана равны нулю и должны совпадать с началом координат.

То, что записано в алгебраической форме, можно изобразить графически. В области определения факторов находится точка, соответствующая основному уровню, и через нее проводят новые оси координат, параллельные осям натуральных значений факторов. Далее выбирают масштабы по новым осям так, чтобы интервал варьирования для каждого фактора равнялся единице. Тогда условия проведения опытов будут соответствовать вершинам какой-то геометрической фигуры или тела. Например, при $k = 2$ это квадрат в новой системе координат $0x_1x_2$ (рис. 1.14).

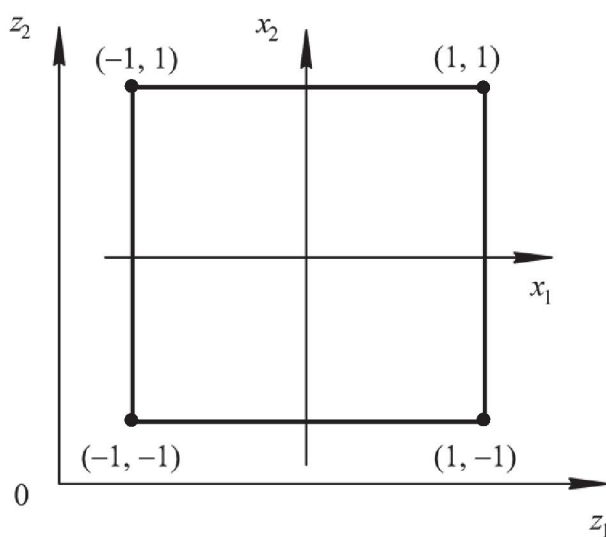


Рис. 1.14. Расположение экспериментальных точек в факторном пространстве

Центрами этих фигур является основной уровень, а каждая сторона равна двум интервалам (рис. 1.14). Номера вершин фигуры (тела) соответствуют номерам опытов в матрице планирования. Площадь, ограниченная этими фигурами, называется областью эксперимента.

После построения матрицы планирования осуществляют эксперимент и определяют значения целевой функции. Эти значения заносятся в последний столбец таблицы (см. табл. 1.2 на с. 44), завершая построение матрицы планирования.

Принимаем изначально, что для поиска оптимума целевой функции у оптимизирующие факторы связаны в виде линейной зависимости:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_kx_n. \quad (1.56)$$

При двух факторах (переменных) уравнение упрощается до вида

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2. \quad (1.57)$$

Коэффициенты регрессии линейного уравнения в общем виде вычисляются по следующей формуле:

$$b_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_{ij}y_j, \quad (1.58)$$

где x_{ij} – кодированное значение фактора x_i в j -м опыте.

Например:

$$b_1 = \frac{(-1) \cdot y_1 + (+1) \cdot y_2 + (-1) \cdot y_3 + (+1) \cdot y_4}{4}. \quad (1.59)$$

Поскольку фиктивная переменная по аналогии с методом наименьших квадратов принимается $x_0 = (+1)$, то значение свободного числа в уравнениях регрессии рассчитывается как среднее арифметическое всех значений целевой функции:

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j. \quad (1.60)$$

Для конкретного примера по составленной матрице планирования:

$$b_0 = \frac{y_1 + y_2 + y_3 + y_4}{4} = \bar{y}, \quad (1.61)$$

где \bar{y} – среднеарифметическое значение критерия оптимизации.

Определив, таким образом, коэффициенты, мы можем записать уравнение регрессии, связывающее целевую функцию с двумя (или более) оптимизирующими факторами. Причем каждый коэффициент соответствует вкладу данного фактора в величину целевой функции.

При нахождении коэффициентов регрессии было сделано допущение о линейности математической модели, связывающей параметры

процесса. Однако полной гарантии этого не существует. Возможная нелинейность уравнения регрессии оценивается эффектом взаимодействия оптимизирующих факторов.

Для полного факторного эксперимента $N = 2^2$ вид матрицы планирования с эффектом взаимодействия представим в табл. 1.3.

Таблица 1.3

Матрица планирования эксперимента $N = 2^2$ с эффектом взаимодействия

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

Математическая модель процесса при этом будет иметь вид

$$y = b_0 x_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_{12} x_1 x_2. \quad (1.62)$$

Коэффициент эффекта взаимодействия в общем случае определяется по следующей формуле:

$$b_{12} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (x_1 x_2)_j y_j. \quad (1.63)$$

Для приведенной матрицы (табл. 1.3):

$$b_{12} = \frac{(+1) \cdot y_1 + (-1) \cdot y_2 + (-1) \cdot y_3 + (+1) \cdot y_4}{4}. \quad (1.64)$$

В скобках указано произведение $(x_1 x_2)$.

По аналогичному принципу реализуется полный факторный эксперимент при большем числе факторов оптимизации. Но если для двух факторов все возможные комбинации уровней легко найти перебором, то с ростом числа факторов возникает необходимость в некотором приеме построения матриц. Обычно используются три приема, основанные на переходе от матриц меньшей размерности к матрицам большей размерности.

Рассмотрим первый прием. При добавлении нового фактора каждая комбинация уровней исходного фактора встречается дважды, в сочетании с верхним и нижним уровнями нового фактора. Отсюда естественно появляется прием: записать исходный план для одного уровня нового фактора, а затем повторить его для другого уровня. Этот прием можно применить для матриц любой размерности.

Во втором приеме вводится правило перемножения столбцов матрицы. При построчном перемножении уровней исходной матрицы получается дополнительный столбец произведения (x_1x_2) , далее повторяется исходный план, а у столбца произведений знаки меняются на обратные. Этот прием применим для построения матриц любой размерности, однако он сложнее, чем первый.

Третий прием основан на чередовании знаков. В первом столбце знаки меняются поочередно, во втором столбце они чередуются через 2 раза, в третьем – через 4, в четвертом – через 8 и т. д. по степеням двойки.

Пример матрицы планирования для полного факторного эксперимента вида $N = 2^3$ представим в табл. 1.4.

Таблица 1.4

Матрица планирования эксперимента $N = 2^3$

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

Приведенный в табл. 1.4 кодированный план может быть геометрически интерпретирован в виде куба (рис. 1.15), восемь вершин которого представляют собой восемь экспериментальных точек.

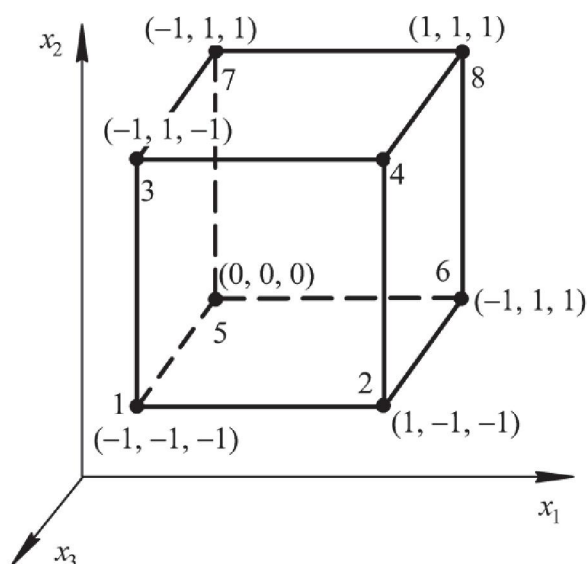


Рис. 1.15. Кодированный план, интерпретированный в виде куба

Полный факторный эксперимент $N = 2^k$ при $k > 3$ геометрически представляется гиперкубом.

Если при трех факторах оптимизации учитывается их взаимодействие, то полное уравнение регрессии будет иметь вид

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3. \quad (1.65)$$

Причем коэффициенты b_{12} , b_{13} , b_{23} учитывают эффект двойного взаимодействия, а b_{123} – тройного.

С учетом эффектов взаимодействия матрица планирования трансформируется к следующему виду (табл. 1.5).

Таблица 1.5

Трансформированная матрица планирования

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	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	y_1
2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	y_2
3	+1	-1	+1	-1	+1	+1	+1	+1	y_3
4	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	y_4
5	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	y_5
6	+1	+1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	y_6
7	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	y_7
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_8

Эффекты взаимодействия находятся по аналогии с примером с двумя переменными.

Все определяемые коэффициенты регрессии проверяются по критерию Стьюдента и незначительные отбрасываются. Адекватность конечного уравнения регрессии оценивается по критерию Фишера.