

НАЦІОНАЛЬНИЙ АВІАЦІЙНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
Факультет екологічної безпеки, інженерії та технологій  
Кафедра хімії і хімічної технології

## **КОНСПЕКТ ЛЕКЦІЙ**

Дисципліна «Математичне моделювання та оптимізація хіміко-  
технологічних процесів»

Автори: д.х.н., професор Чумак В.Л.  
асистент Кравчук Т.В.

# 1. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

## 1.1. Загальні поняття

**Моделювання** - це вивчення об'єкту шляхом побудови і дослідження його моделі, здійснюване з певною метою і складається у заміні експерименту з оригіналом експерименту на моделі.

Модель повинна будуватися так, щоб вона найбільш повно відтворювала ті якості об'єкта, які необхідно вивчити у відповідності з поставленою метою. В усіх відносинах модель повинна бути плоче об'єкту та зручне для його вивчення.

Таким чином, для одного й отого ж об'єкту можуть існувати різноманітні моделі ( клас моделей), відповідні різноманітним цілям його вивчення.

Необхідною умовою моделювання є подобність об'єкту та його моделі. Від спеціаліста, що займається побудовою моделей, вимагаються слідуєчи основні якості :

- чітке уявлення про сутність фізико-хімічних явищ, протікаючих в об'єкті;
- уміння математично описувати протікаючі процеси та застосовувати засоби моделювання;
- бути у стані забезпечити одержання на моделі змістовних результатів.

### **Цілі і завдання моделювання :**

1. Оптимальне проектування нових та інтенсифікація діючих технологічних процесів.

2. Контроль за ходом процесу, одержання необхідної інформації про нього та обробка одержаної інформації з метою управління ходом технологічного процесу.

3. Рішення задач дослідження об'єктів, де ніяк не можна проводити активні експерименти ( режими роботи реакторів, траєкторії космічних об'єктів і т. д.).

4. Максимальне прискорення переносу результатів лабораторних досліджень в промислові масштаби.

### **Вимоги до моделі :**

1. Витрати на створення моделі повинні бути значно менш витрат на створення оригіналу.

2. Повинні бути чітко визначені правила інтерпретації результатів обчислювального експерименту .

3. Основна вимога - модель повинна бути істотною. Ця вимога укладається в тому, що модель повинна відбивати необхідні, істотні для рішення конкретного завдання властивості об'єкту. Для одного й отого ж об'єкту складно створити узагальнену модель, що відбиває всі його властивості. Тому важливо забезпечити істотність моделі.

## 1.2. Класифікація моделей.

Класифікацію моделей можна проводити за різними ознаками :

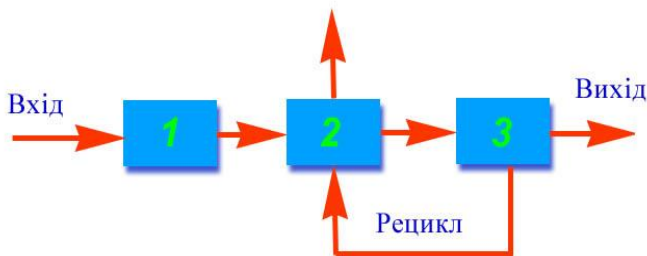
- по способу пізнання : науково-технічні, художні, життєві.
- по природі моделей : предметні (фізичні / матеріальні ; знакові (уявні) ).



**Матеріальні моделі** - зменшене ( збільшене ) відображення оригіналу з збереженням фізичної суттєвості ( реактор - пробірка ).

**Уявна модель** - відображення оригіналу, що відбиває істотні риси і що виникає у свідомості людини в процесі пізнання.

**Образні моделі** носять описовий характер.



(рис.1.1)

**Знакові моделі** — є математичними описами процесів, явищ, об'єктів і звичайно називаються математичними моделями. Знакові моделі можуть також включати у себе схеми та креслення наприклад,

Рис. 1. 1 Схема з рециклом

**Математична модель** - сукупність математичних залежностей, що відображають суттєвість явищ технологічного процесу, т.є., всі істотні параметри технологічного об'єкту пов'язані системою математичних рівнянь.

По повноті відбивання внутрішніх властивостей об'єкту моделювання моделі поділяють на **динамічні** та **статичні**.

**Динамічні моделі** в основному використовуються при розробці систем автоматизованого управління процесами, бо вони враховують перехідні характеристики об'єкту.

**Статичні моделі** описують стаціонарні процеси.

По використовуваному математичному апарату математичні моделі поділяються на :

1. детерміновані - при зміні будь-якого параметра значення вихідних величин визначаються однозначно.

2. статистичні - результат визначається з визначеною мірою вірогідності (т. є. неоднозначно визначається заданими параметрами).

### 1.3. Фізичне моделювання

**Фізичне моделювання** - це спосіб дослідження на моделях, що мають однакову фізичну природу з об'єктом моделювання, тобто становлять деякий макет об'єкту, що вивчається. Фізичні моделі відтворюють увесь комплекс властивостей об'єкту.

В фізичному моделюванні важливу роль грає теорія подібності. Її основне положення : необхідне фізичне подібність моделі та об'єкту забезпечується лише при рівності всіх однотипних комплексів ,що визначаються безрозмірних комплексів (критеріїв подібності) у східних точках моделі та об'єкту. При фізичному моделюванні в додаток до геометричного подібності передбачається подібність швидкостей, сил, матеріальних середовищ і т.п.

При моделюванні на основі засобу подібності безрозмірні комплекси грають двояку роль. По-перше, на їх основі визначають, коли модель подібна оригіналу, при цьому комплекси служать власно критеріями подібності. По-друге, значення отих же комплексів у подібних точках і є ота кількісна міра , що і переноситься з моделі на об'єкт.

Розглянемо деякі часто використовувані критерії подібності :

- **Критерій Рейнольдса** ( критерій гідродинамічного подібності):

$$Re = W L / \nu$$

де  $W$  - швидкість потоку,

$L$  - розмір, що визначається,

$\nu$  - кінематична в'язкість середовища.

- **Критерій Нуссельта** ( критерій теплового подібності ) :

$$Nu = a L / \lambda$$

де  $a$  - коефіцієнт теплоотдачі,

$\lambda$  - коефіцієнт теплопровідності,

$L$  - розмір, що визначається.

Критерії подібності дозволяють установити аналогію між різними явищами. Можливість фізичного моделювання визначається наступною залежністю :

$$f = A - R.$$

де  $f$  - число ступенів свободи,

$A$  - кількість параметрів, критеріїв, що характеризують процес,

$R$  - число критеріїв подібності, які необхідно підтримувати рівними у процесі дослідження.

Якщо число ступенів свободи  $f < 0$  - то застосовувати фізичне моделювання не можна, бо немає ступенів свободи параметрів моделі.

**Позитивні сторони фізичного моделювання:**

- наочність – фізична модель відтворює практично всі сторони оригіналу ;
- можливо вивчення процесу без складання його математичного опису;
- можливість відтворення виробничого процесу у лабораторних умовах.

**Недоліки фізичного моделювання :**

- відсутність універсальності – для кожного нового процесу необхідно створювати нову модель;

- висока вартість моделей для дослідження складних процесів;
- неможливість застосування цього засобу для моделювання більшої частини хімічних процесів та реакторів, а також інших складних об'єктів.

Більш докладно зупинимося на останньому *недоліку*. Застосування теорії подібності дозволяє сформулювати вимоги до моделі, задоволення яких забезпечує можливість кількісного розповсюдження результатів експерименту з моделі на оригінал. Але в отих випадках, коли процес у оригіналі складний, задовольнити цим вимогам виявляється дуже тяжко. Коли число критеріїв, що визначають подібність, достатньо велика, побудова подібної моделі стає нереальною задачею. Саме цим визначаються труднощі, виниклі при спробах застосування засобу подібності для моделювання хімічних процесів та реакторів.

Рядом дослідників були сформульовані критерії подібності для наданого класу процесів. Але опинилося, що в переважній більшості випадків ці процеси настільки важки, що для дотримання подібності моделі та оригіналу вимоглося би ідентичність дуже великого числа критеріїв подібності зразу, забезпечити яку практично неможна.

Для прикладу розглянемо систему, у якій перебігає хімічна реакція.

Виходячи з теорії подібності, для такої системи можна скласти критерії подібності, зокрема *критерій Рейнольдса*  $Re = W L / V$ , що характеризує гідродинамічний режим, *критерій Дамкеллера*  $Da = V L / (W C)$ , що характеризують хімічне перетворення та ін.

В наданих критеріях

$C$  – концентрація вихідної речовини, що реагує,

$V$  – швидкість хімічної реакції.

Інші позначення приведені вище.

Критерії  $Re$ ,  $Da$  (інші критерії в цілях спрощення не розглядаються) характеризують систему, що вивчається. Однак ці критерії несумісні між собою, оскільки при  $Re = const$  величина  $W$  протилежно пропорційна, а при  $Da = const$  – прямо пропорційна величині  $L$ . З приведенного зіставлення слідує, що для збереження гідродинамічного подібності швидкість потоку  $W$  повинна змінюватися обернено пропорційно, а для збереження хімічного подібності - прямо пропорційно лінійному розміру  $L$ . Причина цього лежить не в невдалому виборі критеріїв подібності, а у неможливості, у загальному випадку, зберегти однаковим вплив фізичних факторів на швидкість хімічного перетворення у реакторах різноманітного масштабу.

В дійсності, у складних системах зміна масштабу викликає, як правило, зміну структури системи та характеру вдачі протікаючих у неї процесів. Всім відоме існування критичних розмірів системи, що містить U-235 та U-238. Ці розміри визначають співвідношенням між числом що створюються при діленні нейтронів та числом поглинаємих та відходящих назовні. З збільшенням масштабу частка часток, що губляться зменшується та змінює характер протікання процесу - замість повільного ділення настає вибух.

В хімічному реакторі швидкість власне хімічного перетворення не залежить від розмірів реакційної системи. Але протікання хімічної реакції приводить до зміни складу та температури. Наслідком цього є виникнення процесів переносу

речовини та тепла, бистрота яких надто істотно залежить від розмірів системи. Склад та температура у свою чергу дуже сильно впливають на швидкість хімічної реакції.

Внаслідок виникає дуже складна залежність умов протікання хімічного процесу від розмірів апарату. Причому зміна розміру реактора може значно змінити як загальну швидкість процесу, так і співвідношення швидкостей реакцій, які приводять до різноманітних продуктів реакції, т. є. вибірність процесу.

Таким чином, можна зробити висновок, що неможливість використання засобу фізичного моделювання для хімічних реакторів пояснює несумісність умов подібності фізичних та хімічних що складають процес. Цей висновок справедливий для більшості хімічних процесів та реакторів. Лише у випадку, якщо швидкість хімічного процесу не впливає на швидкість сумарного процесу наприклад, каталітичні процеси у галузі зовнішньої дифузії, критерії хімічного подібності випадають та застосування теорії подібності стає можливим.

Крім отого, широко використовується фізичне моделювання гідродинамічних та теплових процесів, протікаючих в отих частинах реактора, де хімічне перетворення відсутнє.

#### 1. 4. Математичне моделювання

Це найважливіший засіб сучасного наукового дослідження, основний апарат системного аналізу. **Математичне моделювання** – це вивчення об'єкту в отих чи інших умовах шляхом рішення рівнянь його математичної моделі. У хімічній технології математичне моделювання застосовують практично на всіх рівнях дослідження, опрацювання та впровадження. Наданий засіб базується на математичному подібності. У математично подібних об'єктів процеси володіють різноманітною фізичною природою, але описуються ідентичними рівняннями.

Для прикладу розглянемо декілька різноманітних по фізичній природі явищ та їх математичного опису :

1. Закон Фур'є ( перенос тепла )

$$q = -\lambda dT / dx$$

**dT / dx** градієнт

де : **T**- температура, **q** - тепловий потік, **x**- поточна координата, **λ** - коефіцієнт теплопровідності.

2. Закон Фіка ( перенос речовини )

$$j = -D * dc / dx$$

де : **D** - коефіцієнт дифузії, **C** - концентрація.

3. Закон Ньютона ( перенос кількості руху )

$$f_{тр} = -m * dw / dx$$

де : **w** - швидкість потоку, **m** - в'язкість, **f<sub>тр</sub>** - сила тертя.

4. Закон Ома ( перенос електрики )

$$i = - \kappa * du / dx$$

де **i** - густина струму, **κ** - питома електропровідність, **u** - потенціал.

Знак ( – ) при коефіцієнтах рівнянь означає, що потік спрямований з областей з більшими значеннями параметра у область, де цей параметр має менше значення.

В усіх чотирьох законах спостерігаємо подібність математичних описаній різноманітних фізичних явищ. Тому будь-який з перелічених процесів може служити моделлю другого. Кожний з приведених законів можна з використанням визначених перерахувальних коефіцієнтів інтерпретувати, наприклад, на електричній моделі, що ілюструє закон Ома. Серед розглянутих прикладів електрична модель є найбільш простою й може бути застосована для деяких оригіналів з різноманітною фізичною природою, вона стає універсальною. На такій моделі відтворюється не самий фізичний процес, а його математичний опис чи аналогія між законами, що виражають явища в оригіналі та у моделі.

Практика наукових досліджень підтвердила, що можливо представляти процес, що вивчається на моделі, в якій протікає інший по своїй природі процес, якщо математичний опис цих процесів ізоморфен. Гомоморфізм - ця відповідність деяких властивостей оригіналу властивостям моделі. Ізоморфізм - взаємний гомоморфізм, тобто коли всі властивості моделі відповідають властивостям оригіналу.

На перших порах свого розвитку математичне моделювання називалося аналоговим. Більш отото, використання засобу аналогії привело до появи аналогових обчислювальних машин - АОМ.

Це електронні будови, що складаються з інтеграторів, будов, що диференціюють, суматорів та підсилювачей. На АОМ моделюється фізичні явища, що аналогічні ефектам електричної природи.

У порівнянні з фізичним математичне моделювання - більш універсальний засіб.

#### ***Математичне моделювання :***

- дозволяє здійснити за допомогою однієї будови рішення цілого класу задач, що мають однаковий математичний опис;
- забезпечує простоту переходу від одного завдання до іншого ,
- дозволяє вводити перемінні параметри, різноманітні початкові умови;
- дає можливість проводити моделювання по частинам ("елементарним процесам "), що особливо важливо при дослідженні складних об'єктів хімічної технології;
- економічне засобу фізичного моделювання як по витратам, так і по вартості.

### **1. 5. Методи складання математичних моделей.**

У ході математичного моделювання об'єктів хімічної технології завжди потрібно вирішувати три основні задачі:

- побудова математичного опису;
- дослідження математичної моделі;
- прийняття оптимальних рішень.



Під математичним описом розуміємо запис закономірностей протікання процесу в об'єкті у вигляді рівнянь, **краєвих** та початкових умов й логічних зв'язків.

Задача складання математичного опису - сама складна, тонка і відповідальна частина математичного моделювання. При цьому важливо не стільки знання математики, скільки глибоке розуміння сутності протікаючих в об'єкті фізико-хімічних процесів.

Побудова моделі у загальному випадку включає:

- складання математичного опису;
- рішення рівнянь математичного опису (аналітичне або шляхом утворення моделюючого алгоритму);
- перевірку адекватності моделі;
- остаточний вибір моделі (при наявності деяких моделей).

Існують три методи складання математичного опису моделей:

- 1) Емпіричний ( експериментально статистичний, метод "чорного ящика" ).
- 2) Експериментально-аналітичний ( феноменологічний ).
- 3) Теоретичний.

### 1. 5. 1. Емпіричний метод

Емпіричний метод, в основному, використовується, коли процес мало вивчений або нічого невідомо про його природу. Цей метод також дозволяє отримати математичний опис діючого об'єкту без дослідження його внутрішньої структури.



Зовнішні зв'язки будь-якої системи можна представити у вигляді такої схеми (рис. 1. 2).

Вхідні параметри поділяються на три групи **X** - контрольовані, але не регулюємі параметри;

**U** - контрольовані і регулюємі параметри ( керуючі параметри );  
**Z** - неконтрольовані та нерегулюємі параметри ( обурення ).

$\bar{X} \ \bar{U} \ \bar{Z}$  - вектора вхідних параметрів  
 $\bar{Y}$  - вектор вихідних параметрів

Рис. 1. 2

Модель "чорного ящика" - модель об'єкта, створена безвідносно внутрішніх властивостей об'єкта, без врахування фізичної сутності процесів, що протікають у ньому. Дана модель відображає залежність значень вихідних параметрів від вхідних.

Математичний опис у загальному виді становить систему рівнянь виду:

$$\bar{Y} = F(\bar{U}, \bar{X}, \bar{Z}) \quad (1.1)$$

В принципі ці рівняння визначають залежність і-го виходу від всіх вхідних впливів. Але установити вид функцій **F** принципово ніяк - адже обурення **Z** нам

невідомі. Проте, у більшості випадків, кожне з рівнянь можна представити у вигляді

$$Y_i = F_i(U_i, X_i) + f_i(Z) \quad (1.2)$$

Тут функція поділена на дві складові: залежність  $F$  від контролюємих параметрів та похибка ("шум")  $f(z)$ . Тепер задача і ставиться таким чином: установити вид функції  $F_i$  та оцінити "шум"  $f(z)$ . Під математичною моделлю будемо розуміти саме  $Y_i = F_i(U_i, X_i)$ . Це рівняння, що встановлює зв'язок між вихідними та її вхідними параметрами, називають рівнянням регресії. Найбільш часто цю функцію представляють алгебраїчним многочленом.

Звичайно спершу розраховують більш прості многочлени, відхилення експериментальних точок від розрахункових значень порівнюють з випадковою помилкою експерименту. Якщо обидві величини одного порядку, отой опис вважають задовільним. Якщо відхилення не можна пояснити випадковою помилкою, оте розраховують більш складний многочлен. По мірі збільшення порядку многочлена точність опису зростає, але одночасно, по-перше, збільшується необхідне число опитів для знаходження коефіцієнтів многочлена, а, по-друге, ускладнюється трактова моделі.

Рівняння регресії можна отримати одним з трьох способів:

1. Пасивний експеримент.
2. Активний експеримент.
3. Визначення реакції об'єкту на стандартне обурення.

Пасивний експеримент - виробляється збиранням та аналізом інформації про стан технологічних параметрів об'єкту без спеціальної зміни вхідних параметрів процесу.

Позитивні сторони наданого методу - практично повністю відсутні витрати на експеримент.

**Недоліки:** 1. У нормальних умовах експлуатації зміни технологічного режиму невеликі і тому експериментальні точки близькі друг до друга. В цих умовах на точність опису можуть сильно впливати випадкові похибки.

2. Необхідно мати достатньо велику кількість експериментальних даних.

Активний експеримент - складається у цілеспрямованій зміні вхідних параметрів технологічного процесу. В основі цього методу лежить планування експерименту.

Практично всі процеси хімічної технології є складними і на показники процесу виявляють вплив велике число факторів. Можливі два підходу до дослідження таких багатофакторних систем. Перший заснований на отому, що дослідження об'єкту розбивається на серії, в кожній з яких досліджується зміна тільки одного параметра при фіксованих інших. Другий підхід заснований на побудові плану експерименту, що передбачає зміну всіх спливаючих факторів. Такий план повинен забезпечити максимум точності та мінімум кореляції. Такий експеримент називають багатофакторним.

Достоїнством першого підходу є його наочність та простота інтерпретації результатів, що отримуються. Другий підхід значно ефективне - при отому

ж обсязі експериментальних досліджень та отієї ж точності дослідів отримуються істотно велика точність результатів.

### Виникнення та становлення планування експерименту

Планування експерименту — продукт нашого століття, проте зародження його сягає в глибину віків. Перші спроби планування експерименту пов'язані з числовою містикою та пророцтвами. Ішлося, по суті, про планування не фізичного, а числового експерименту, який полягав у розміщенні чисел у такий спосіб, щоб виконувалися деякі чіткі умови, наприклад рівність сум по рядках, стовпцях і діагоналях квадратної таблиці, клітинки якої заповнені числами натурального ряду. Зазначені умови виконуються в магічних квадратах, яким, мабуть, належить першість в історії плануванні експерименту.

Згідно з однією легендою близько 2200 року до н.е. китайський імператор Ю виконував містичні обчислення за допомогою магічного квадрата, який було зображено на панцирі божественної черепахи (рис. 6.1).

4	9	2
3	5	7
8	1	6

Рис. 6.1. Квадрат імператора Ю

Клітинки цього квадрата заповнено числами від 1 до 9, а суми чисел по рядках, стовпцях і головних діагоналях дорівнюють 15.

У 1514 році німецький художник Альбрехт Дюрер зобразив магічний квадрат у правому нижньому куті своєї знаменитої гравюри–алегорії «Меланхолія». Два числа у нижньому горизонтальному ряду (15 і 14) утворюють рік виконання гравюри. У тому полягав своєрідний «додаток» до магічного квадрата (рис.6.2).

16	3	2	13
5	10	11	8
9	6	7	12
4	15	14	1

Рис. 6.2. Квадрат Дюрера

Протягом кількох століть побудовою магічних квадратів переймалися індійські, арабські, німецькі, французькі математики.

Нині магічні квадрати використовуються при плануванні експерименту в умовах лінійного дрейфу, при плануванні економічних розрахунків і складанні раціонів харчування, у теорії кодування і т.ін.

Побудова магічних квадратів є завданням комбінаторного аналізу, основи якого в сучасному розумінні заклав Г. В. Лейбніц. Він не тільки сформулював і розв'язав основні комбінаторні задачі, а й вказав на широке практичне застосування комбінаторного аналізу: у кодуванні і декодуванні, у теорії ігор і статистиці,

медицині, юриспруденції, технології, а також у комбінації спостережень. Остання галузь застосування найбільш близька до планування експерименту.

**Планування експерименту** — це розділ математичної статистики, що вивчає методи організації сукупності дослідів із різними умовами проведення для одержання вірогідної інформації про властивості досліджуваного об'єкта за наявності неконтрольованих випадкових змін.

Під *плануванням експерименту* розуміють оптимальне, найбільш ефективне керування ходом експерименту з метою одержання максимально можливої інформації на основі мінімально припустимої кількості досліджуваних даних. Увесь експеримент звичайно розбивається на кілька етапів. Інформація, отримана після кожного етапу, використовується для планування досліджень на наступному етапі.

Статистичні методи планування експерименту виникли ще на початку нашого століття. Честь відкриття цієї ідеї належить англійському статистику Рональду Фішеру (1935), який уперше показав доцільність одночасного варіювання всіх чинників, що впливають на об'єкт експерименту, на противагу поширеному в той час підходу, що полягав у вивченні впливу одного чинника (фактора).

Планування експерименту використовують для вивчення та математичного опису процесів і явищ шляхом побудови математичних моделей (у формі рівнянь регресії) — співвідношень, що пов'язують за допомогою ряду параметрів значення факторів і результатів експерименту, які називають *відгуками*.

Сутністю теорії факторного планування є побудова планів проведення експериментів, які дають змогу за результатами вимірювань у певних точках дуже просто реалізувати процедури побудови статистичних висновків про невідомі параметри поліноміальних функцій регресії.

Основна вимога до планів факторного експерименту (на відміну від пасивного, тобто не спланованого, експерименту) — це мінімізація кількості дослідів, при яких одержують вірогідні оцінки параметрів із досягненням прийнятної точності математичних моделей у заданій області факторного простору. У цьому разі завдання обробки результатів факторного експерименту полягає у визначенні числових значень розглянутих параметрів. Використовуючи *активний* (спланований) експеримент, можна досягти істотно більшого — оптимізувати і стадію постановки експерименту.

Знадобилося ще кілька десятиріч після ідеї Фішера, щоб на початку 1950-х років з'явився новий напрям у плануванні експерименту, пов'язаний з оптимізацією процесів, — *планування екстремального експерименту*. Першу працю в цій галузі 1951 року опублікували в Англії Бокс і Уїлсон.

Ідея методу Бокса — Уїлсона вкрай проста. Експериментаторові пропонується ставити послідовні невеликі серії дослідів, у кожній з яких одночасно варіюються за певними правилами всі фактори. Серії організуються таким чином, щоб після математичної обробки попередньої можна було вибрати умови проведення (тобто спланувати) наступну серію дослідів. Так послідовно, крок за кроком досягається область оптимуму.

Щоб побудувати сучасну теорію планування експерименту, бракувало однієї ланки — формалізації об'єкта дослідження. Ця ланка з'явилася 1947 року після створення Н. Вінером теорії кібернетики. Кібернетичне поняття «чорна скринька»,

відіграє у плануванні важливу роль. Окрім того, кібернетика стимулювала розвиток обчислювальної техніки, давши в руки дослідників інструмент, що дає змогу швидко розв'язувати математичні задачі, які постають при плануванні.

Сьогодні методи планування та оптимізації експерименту широко застосовуються при вивченні процесів у лабораторних і напівзаводських умовах, а також (щоправда, і трохи рідше) у промисловості.

Завдяки розвитку програмного забезпечення статистичних розрахунків методи планування експерименту закладено в спеціалізованих пакетах, широко представлених на ринку програмних продуктів, наприклад Statistica, StatGrafics, SYSTAT і т.ін.

## 6.2. Планування експерименту. Основні поняття та визначення

Читач, напевне, відразу схильний перейти до справи. Але доведеться почекати, оскільки планування експерименту, як і кожний розділ науки, має свою термінологію. Засвоювати спеціальну термінологію потрібно, щоб глибше розуміти відповідний матеріал. Визначення деяких найбільш загальних термінів із теорії планування експерименту наведено в цьому розділі.

*Експеримент* (від лат. *experimentum* — спроба, дослід).

У словнику іноземних слів дається таке визначення: *експеримент* — науково поставлений дослід, спостереження досліджуваного явища в певних умовах, які дають змогу відстежувати перебіг явища та відтворювати його щоразу при повторенні цих умов. Саме властивість відтворюваності експерименту покладено в основу алгоритму планування.

Під експериментом розуміють також сукупність операцій, виконуваних з об'єктом дослідження для отримання інформації про його властивості. Експеримент може бути фізичним, психологічним або модельним. Він може проводитися або безпосередньо на об'єкті або на його моделі. Найважливішим завданням методів обробки отриманої в ході експерименту інформації є побудова математичної моделі досліджуваного явища, процесу, об'єкта. Зазвичай модель відрізняється від об'єкта масштабом, а іноді й природою.

Математичну модель можна використовувати як при аналізі процесів, так і при проектуванні об'єктів. Можна дістати добру математичну модель, цілеспрямовано застосувавши активний експеримент.

Іншим завданням обробки отриманої в ході експерименту інформації є розв'язування задач оптимізації, тобто відшукання такої комбінації незалежних змінних, при якій вибраний показник оптимальності набуває екстремального значення.

Отримана в ході експерименту інформація складається з результатів окремих дослідів, які є складовими всього експериментального дослідження.

Планування експерименту поширюється і на такі процеси та явища, які залежать від керованих (тобто таких, які можна змінювати й підтримувати на заданих рівнях) факторів.

*Планування експерименту* — це процедура вибору кількості дослідів, необхідної і достатньої для розв'язання поставленої задачі з необхідною точністю.

Завдання планування експерименту полягає в установленні мінімально необхідної кількості дослідів та умов їх проведення, у виборі методів математичної обробки результатів дослідів та у прийнятті відповідних рішень. Планування експерименту значно скорочує кількість дослідів, необхідних для побудови моделі процесу.

На першій стадії в результаті розумової діяльності дослідника виникають ідеї, задуми, будуються гіпотези, зважаються різні ва-ріанти втілення задуманого.

На другій стадії здійснюється експериментальна перевірка, втілення ідей у якийсь продукт. Експериментальна перевірка може здійснюватися як на кінцевому продукті, так і на його зменшеній або збільшеній фізичній моделі.

Експериментальній перевірці передують планування експерименту, що складається з таких кроків:

- 1) обґрунтування, усвідомлення факту необхідності експерименту;
- 2) вибір головних керованих факторів та їхніх значень (рівнів факторів);
- 3) вибір параметра оптимізації (функції відгуку);
- 4) вибір плану проведення експерименту.

Класичний експеримент передбачає постійність усіх змінних факторів, крім одного, значення якого певним чином змінюють в області його існування. Такі дії становлять основу однофакторного експерименту.

При однофакторному експерименті залежність досліджуваної величини від одного якогось фактора знаходять, змінюючи цей фактор.

Виконуючи велику кількість однофакторних експериментів при вивченні багатофакторної системи, дістають частотні залежності, подані багатьма графіками, що мають ілюстративний характер. Знайдені в такий спосіб залежності дуже важко або й неможливо об'єднати в одну загальну.

Використання однофакторного експерименту для всебічного дослідження багатофакторного процесу потребує виконання дуже великої кількості дослідів. Для їх виконання здебільшого потрібно багато часу, протягом якого вплив неконтрольованих факторів на результати дослідів може істотно змінитися. Очевидно, що результати однофакторних експериментів, отримані при дослідженні багатофакторних систем, часто мало придатні для практичного використання. Крім того, при виконанні експериментальних завдань дані багатьох дослідів стають непотрібними, оскільки їх було отримано для області, далекої від оптимуму.

Для вивчення багатофакторних систем найдоцільніше застосовувати статистичні методи планування експерименту, для реалізації яких потрібно створити план експерименту.

*План експерименту* — це заздалегідь розроблена сукупність дій, що визначають кількість, умови та порядок проведення відповідних дослідів. Під плануванням експерименту розуміють також процес визначення умов проведення дослідів, необхідних і достатніх для розв'язання поставленого завдання з необхідною точністю.

Планування експерименту передбачає складання його плану, який задовольняє задані вимоги, а також сукупності дій, спрямованих на розробку стратегії експериментування (від одержання апріорної інформації до побудови ефективної математичної моделі або визначення оптимальних умов). Це цілеспрямована

раціональна організація вимірювань, яку можна бути реалізувати в умовах неповного знання механізму досліджуваного явища та керування експериментом.

Найчастіше планування експерименту застосовується в тих галузях, де без фізичного моделювання не обійтися: у хімічній, харчовій промисловості, металургії тощо.

Елементи планування використовуються в системах автоматичного проектування.

У процесі вимірювань, подальшої обробки даних, а також формалізації результатів у вигляді математичної моделі виникають похибки, через що втрачається частина інформації, яка міститься у вихідних даних. Застосувавши методи планування експерименту, можна визначити похибку математичної моделі та зробити висновок про її адекватність.

Якщо точність математичної моделі виявляється недостатньою, то за допомогою методів планування експерименту можна вдосконалити цю модель, виконавши додаткові дослідження без втрати попередньої інформації та з мінімальними матеріальними витратами.

Мета планування експерименту — відшукування таких умов і правил проведення дослідів, за яких із найменшими витратами праці вдається дістати надійну й вірогідну інформацію про об'єкт, подавши її в компактній і зручній формі з належною оцінкою точності.

Розв'язання більшості проблем у галузі хімії чи у сфері створення нової технології пов'язана з виконанням складних і високовартісних експериментів. Для створення нової технології, оптимізації нових і вже відомих процесів доводиться ставити величезну кількість дослідів, а тому планування експерименту є важливою складовою проведення наукових досліджень.

Планування експерименту стрімко розвивається і викликає дедалі більший інтерес у дослідників. Інтерес цілком зрозумілий, адже дуже важливо скоротити кількість дослідів, знайти оптимальні умови перебігу процесів, дістати кількісні оцінки впливу факторів і визначити похибки обчислень.

Але коли експериментатор робить спробу ознайомитися з плануванням експерименту, він часто стикається із серйозними труднощами. Більш того, іноді він просто неправильно застосовує методи планування або вибирає не оптимальний для даної ситуації шлях дослідження, або припускається ще якихось прикрих помилок. При цьому знижується ефективність його роботи і постає небезпека дискредитації важливого і корисного наукового напрямку.

Зазначені труднощі зумовлюються об'єктивними причинами, з-поміж яких і новизна цього напрямку, неусталеність термінології, недостатність практичного досвіду і дуже абстрактний характер багатьох опублікованих праць, недостатня математична підготовка експериментаторів і т.ін.

Методи оптимального планування експерименту дають змогу використовувати математичний апарат не тільки на стадії обробки результатів вимірювання, а й при підготовці та проведенні дослідів. Завдяки цим методам у багатьох випадках вдається за мінімальної кількості дослідів розв'язувати завдання з удосконалення виробничих технологій.

Експериментально вивчати нові технологічні процеси нереально, а проте оптимізувати ці процеси та керувати ними необхідно. Із цією метою успішно

застосовуються експериментально-статистичні методи. За допомогою цих методів складається *математична модель* досліджуваного об'єкта, усередині якого відбуваються процеси, механізми перебігу котрих невідомі. Вивчається залежність відгуку системи на зміни основних параметрів.

Модель зазвичай відрізняється від об'єкта масштабом, а іноді й природою. Експеримент може безпосередньо проводитися на об'єкті або на його моделі. Якщо модель достатньо точно описує властивості об'єкта, то експеримент на об'єкті можна замінити експериментом на моделі. Останнім часом поряд із фізичними моделями дедалі більшого поширення набувають абстрактні математичні моделі.

### Кінець лекції

Для проведення експерименту необхідно впливати на поведження «чорного ящика». Усі способи дії позначаються літерою  $x$  і називаються *вхідними параметрами*, або *факторами* (вхід «чорного ящика»).

Отже, з математичного погляду експеримент — це вивчення залежності вихідних параметрів (цільової функції, або функції відгуку)  $y$  від вхідних параметрів (факторів):

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n).$$

Кожний фактор може набувати в досліді одного з кількох значень. Такі значення називаються *рівнями*.

Коли зафіксовано певний набір рівнів факторів (для кожного фактора встановлено деякі значення), то цим самим визначено один із можливих станів «чорного ящика», тобто умови проведення одного з можливих дослідів. Перебравши всі можливі набори станів, дістанемо повну множину різних станів «чорного ящика», тобто кількість різних можливих дослідів.

Результати експерименту використовуються для побудови математичної моделі об'єкта дослідження.

Використання для моделі всіх можливих дослідів призвело б до абсурдно великих експериментів. Саме тому екстремальний експеримент необхідно планувати.

Завдання такого планування полягає у виборі необхідних для експерименту дослідів, методів математичної обробки відповідних результатів і прийняття рішень.

Ефективність застосування статистичних методів планування експерименту при дослідженні технологічних процесів пояснюється тим, що багато важливих властивостей цих процесів є випадковими величинами.

Характерні особливості процесу планування експерименту полягають у тому, що можна:

- мінімізувати кількість дослідів;
- одночасно варіювати всі досліджувані фактори за спеціальними правилами — алгоритмами;
- застосовувати математичний апарат, який визначає багато дій дослідника;
- вибирати стратегію, що дає змогу приймати обґрунтовані рішення після кожної серії дослідів.



Сучасна математична теорія оптимального планування експерименту складається з двох основних розділів:

1. Планування експерименту для вивчення механізмів складних процесів і властивостей багатокомпонентних систем.

2. Планування експерименту для оптимізації технологічних процесів.

Основні напрямки використання планування експерименту в хімічній технології такі:

1) визначення значущих факторів, що істотно впливають на досліджуваний процес;

2) побудова математичних моделей об'єктів дослідження ;

3) пошук оптимальних умов перебігу процесів, тобто сукупності значень факторів, при якій заданий критерій оцінки ефективності процесу має найкраще (екстремальне) значення;

4) побудова діаграм склад—властивість;

5) вивчення кінетики й механізму хімічних процесів.

Особливості планування експерименту:

- прагнення до мінімізації загальної кількості дослідів;
- одночасне варіювання факторів, що впливають на процес, за спеціальними правилами — алгоритмами;
- вибір чіткої стратегії, що дає змогу приймати обґрунтовані рішення після кожної серії експериментальних дослідів.

### **6.3. Планування екстремального експерименту**

Як уже зазначалося, планування експерименту — це вибір кількості дослідів та умов їх проведення, необхідних і достатніх для розв'язання поставленої задачі з необхідною точністю.

Нині розроблено різні методи планування експериментів. Вибір методу відбувається з урахуванням поставленої задачі і об'єкта дослідження.

Найчастіше експеримент ставлять для розв'язання одного з двох основних завдань. Перше завдання називають *екстремальним*. Воно полягає у відшуканні умов процесу, що забезпечують одержання оптимального значення вибраного параметра. Тому перш ніж приступати до експерименту, необхідно однозначно сформулювати мету і вибрати кількісну характеристику мети, яку називають *параметром оптимізації*.

Ознакою екстремальних завдань є вимога пошуку екстремуму деякої функції. Експеримент, який ставиться для розв'язання оптимізації, називається *екстремальним*. Ця назва пояснюється аналогією між розв'язанням задачі оптимізації і пошуком екстремуму деякої функції. Задача є екстремальною, якщо її мета — пошук екстремуму деякої функції.

Послідовність дій із визначення умов та послідовності виконання експерименту для розв'язання поставленої задачі — це планування екстремального експерименту, тобто експерименту, поставленого з метою пошуку оптимальних умов функціонування об'єкта.

Таким чином, планування екстремального експерименту — це вибір кількості дослідів і умов їх проведення, мінімально необхідних для пошуку оптимальних умов функціонування об'єкта.

Друге завдання називають *інтерполяційним*. Воно полягає в побудові інтерполяційної формули для обчислення значень досліджуваного параметра, що залежить від низки факторів. Для розв'язування екстремального або інтерполяційного завдання необхідно побудувати математичну модель досліджуваного об'єкта. Модель об'єкта дістають, використовуючи результати дослідів. При дослідженні багатофакторного процесу постановка всіх можливих дослідів для побудови математичної моделі пов'язана з величезною трудомісткістю експерименту, бо кількість усіх можливих дослідів дуже велика.

При плануванні експерименту об'єкт дослідження має характеризуватися неодмінними властивостями:

- 1) результати експерименту мають бути відтворюваними;
- 2) об'єкт має бути керованим.

Експеримент називається *відтворюваним*, якщо за фіксованих умов досліду в різний час отримується один і той самий вихід у межах заданої і порівняно невеликої (2 – 5 %) похибки експерименту.

Для виявлення відтворюваності експерименту вибираються деякі рівні для всіх факторів і за цих умов проводиться експеримент. Потім він повторюється через нерівні проміжки часу і значення параметра оптимізації порівнюються. Розкид цих значень характеризує відтворюваність результатів. Якщо він не перевищує деякого наперед заданого значення (наших вимог до точності експерименту), то об'єкт задовольняє вимогу відтворюваності результатів.

Планування експерименту припускає активне втручання в процес і можливість вибору в кожному досліді тих рівнів факторів, які становлять інтерес.

Експериментальне дослідження впливу вхідних параметрів (факторів) на вихідні може відбуватися методом пасивного або активного експерименту. Якщо експеримент зводиться до отримання результатів спостереження за поведінням системи при випадкових (стохастичних) змінах вхідних параметрів, то він називається *пасивним*. Якщо ж при проведенні експерименту вхідні параметри змінюються за наперед складеним, залежним від волі експериментатора планом, то він називається *активним*.

Об'єкт, на якому можливий активний експеримент, називається *керованим*. На практиці немає абсолютно керованих об'єктів. На реальний об'єкт зазвичай діють керовані і некеровані фактори. Некеровані фактори впливають на відтворюваність експерименту.

Якщо всі фактори некеровані, постає задача встановлення зв'язку між параметром оптимізації і факторами за наслідками спостережень за об'єктом або на підставі пасивного експерименту.

Можлива погана відтворюваність унаслідок дрейфу — зміни факторів у часі. У такому разі потрібно використовувати спеціальні методи планування. Прикладами задач оптимізації є задачі на вибір оптимального складу багатокомпонентних сумішей, підвищення продуктивності діючої установки, підвищення якості продукції, зниження витрат на її вироблення.

Перш ніж планувати експеримент, потрібно сформулювати мету дослідження. Від точного формулювання мети значною мірою залежить і успіх дослідження. Необхідно також впевнитися, що об'єкт дослідження відповідає висуненим до нього вимогам.

У технологічних задачах метою дослідження при оптимізації процесу здебільшого є підвищення виходу продукту, поліпшення його якості та зниження собівартості. Іноді ставиться обмежена мета — знаходження області реакції з більш низьким параметром, скорочення часу процесу, зменшення кількості дефіцитного компонента.

Характерні в цьому розумінні компромісні задачі, наприклад на отримання максимального виходу при собівартості продукту, не вищій за деяке задане значення, і при певній його якості.

### 6.3.1. Параметри і фактори оптимізації технологічного процесу

**Вибір параметра оптимізації.** При плануванні екстремального експерименту важливо вибрати параметр оптимізації, тобто той показник процесу, за яким оптимізація проводитиметься. Зробити це зовсім не так просто, як здається на перший погляд. Мета дослідження має бути сформульована дуже чітко і припускати кількісну оцінку.

Оптимізація зазвичай починається в умовах, коли об'єкт вже піддавався деяким дослідженням. Інформацію, яка міститься в результатах попередніх досліджень, будемо називати *апріорною* (тобто одержаної до початку експерименту). Істотну роль при виборі параметрів оптимізації відіграє рівень апріорних відомостей про об'єкт дослідження. Для цього можна використовувати результати (графіки або таблиці) експериментів, здійснюваних у попередніх дослідженнях або описаних у літературі. При дослідженні хімічних і технологічних процесів як вихідні параметри розглядаються вихід реакції у відсотках або продуктивність апарату, показники якості продукту, його собівартість або сировинні витрати. Вихід реакції звичайно визначається кількісно. Він дає змогу оцінити інтенсивність процесу, має чіткий фізичний зміст, сприяє розумінню фізико-хімічних закономірностей, тому ним легко користуватися як параметром оптимізації.

Важливе значення має також і економічний параметр оптимізації. Для багатьох технологічних процесів характерне застосування високовартісних початкових напівпродуктів і сировини. Тому при оптимізації таких процесів доводиться прагнути не лише до максимального виходу реакції, а й до мінімальних витрат.

Від вибору параметра оптимізації багато в чому залежить успіх дослідження, успіх розв'язання поставленої задачі.

Реальні ситуації завжди складні, вони потребують одночасного врахування кількох або й дуже багатьох параметрів. Але рух до оптимуму можливий, якщо вибрано єдиний параметр оптимізації. При цьому інші характеристики процесу вже не виступають як параметри оптимізації, а слугують обмеженнями. Інший шлях — побудова узагальненого параметра оптимізації як деякої функції від початкових параметрів. Побудова узагальненого параметра оптимізації пов'язана зі створенням єдиної ознаки, що кількісно визначає функціонування досліджуваного об'єкта з багатьма вихідними параметрами.

Параметр оптимізації має бути кількісним, задаватися числом. Множина значень, що їх може набувати параметр оптимізації, називається його *областю визначення*. Область визначення може бути дискретною і неперервною, обмеженою і необмеженою.

Параметр оптимізації потрібно вимірювати за допомогою приладу, а якщо такого приладу не існує, то вдаються до прийому ранжування, або рангового підходу. При цьому параметрам оптимізації присвоюються оцінки — ранги за заздалегідь вибраною шкалою: дво-, п'ятибальною і т.ін.

Прикладом рангового підходу може бути суддівство у фігурному катанні, гімнастиці або КВК.

Параметр оптимізації має:

- задовольняти вимогу однозначності у статистичному сенсі — заданому набору значень факторів має відповідати одне значення параметра оптимізації (з точністю до похибки експерименту);
- бути ефективним з погляду досягнення мети;
- універсальним;
- кількісним і виражатися одним числом;
- мати фізичний сенс, бути простим і легко обчислюваним;
- існувати для всіх різних станів процесу.

При дослідженні технологічних процесів параметром оптимізації може бути вихід продукції, продуктивність апарата, показники якості продукції, собівартість, сировинні витрати. Дуже поширені задачі з оптимізації виходу деякого продукту (спирту, екстракту) в результаті технологічного процесу.

Для багатьох технологічних процесів характерне застосування високовартісних видів сировини (ферментні препарати, хміль, піногасники). Тому при оптимізації таких процесів необхідно намагатися не лише максимізувати вихід, а й мінімізувати витрати.

### **Вибір факторів, що визначають процес.**

Фактори поділяються на якісні та кількісні.

*Якісні фактори* — це різні речовини, технологічні способи, апарати тощо.

Якісним факторам безпосередньо не відповідає числова шкала. Тому проводять кодування якісного фактора. Кодування полягає в тому, що різним рівням фактора ставлять у відповідність значення чисел натурального ряду. Порядок рівнів може бути довільним, але після кодування він фіксується.

Час перебігу процесу, температура, концентрація реагентів, значення рН, тиск, витрата теплоносія, швидкість подачі речовин — це приклади *кількісних факторів*, з якими доводиться стикатися най-частіше.

Кожний фактор має певну область значень і вважається заданим, якщо разом із його назвою задано цю область, тобто сукупність усіх значень, яких він може набувати. У практичних задачах область значень кожного з факторів обмежена найбільшим (верхнім) і найменшим (нижнім) значеннями. Обмеження щодо значень фактора мають або принциповий, або суто технічний характер.

Отже, фактори — це змінні величини, що характеризують способи впливу зовнішнього середовища на досліджуваний об'єкт.

При плануванні експерименту до факторів також висувуються певні вимоги, а саме вони мають бути керованими, тобто такими, що їх можна зафіксувати на вибраних рівнях і підтримувати ці значення.

Фактори мають бути однозначними і безпосередньо впливати на об'єкт дослідження. У плануванні експерименту можуть брати участь складні

фактори, такі як логарифми концентрацій, співвідношення між компонентами тощо.

Точність вимірювання факторів має бути якомога вищою, але з урахуванням поставленої задачі. Так, якщо вивчається процес, котрий триває впродовж десяти годин, то немає потреби враховувати секунди. При реакціях, що тривають кілька хвилин, слід рахувати й секунди.

Кількість факторів потрібно встановити якомога точніше. Якщо якийсь істотний фактор пропущено, то це може призвести до неправильного визначення оптимальних умов, а отже, і до значної похибки досліду. У процесі планування експерименту зазвичай одночасно змінюються кілька факторів. До сукупності факторів висувають вимоги щодо їх сумісності та взаємної незалежності.

*Сумісність* факторів означає, що всі їхні комбінації можливі та безпечні. Наприклад, не призведуть до вибуху апарата, виходу з ладу реєструвального приладу чи обсмолення продукту.

*Незалежність* — можливість установаження фактора на будь-якому рівні незалежно від рівнів інших факторів. Якщо ця умова не виконується, експеримент планувати не можна.

При плануванні експерименту дослідник має намагатися розглядати вплив якомога більшої кількості факторів (вочевидь, у розумних межах). Але чим більше факторів, тим більше дослідів має бути проведено для розв'язання поставленої задачі.

Після того як вибрано об'єкт дослідження і параметр оптимізації, потрібно розглянути всі істотні фактори, які можуть впливати на процес, та встановити межі областей значень факторів.

Після цього в області значень параметра оптимізації потрібно знайти локальну підобласть для планування експерименту. Процедура вибору цієї підобласті складається з двох етапів: вибору основного рівня і вибору інтервалів варіювання. Вибір основного рівня має відповідати найкращим умовам, визначеним на підставі аналізу апріорної інформації, яка відповідає комбінації (або кільком комбінаціям) рівнів факторів. Кожна комбінація є багатовимірною точкою у просторі фактора. Її можна розглядати як початкову точку для побудови плану експерименту.

### 6.3.2. Поверхня відгуку та рівняння регресії

Будь-який процес у системі можна схарактеризувати деякою залежністю параметра оптимізації у від факторів  $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ , що діють у системі.

Незалежні змінні  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  (фактори) також повинні мати кількісну оцінку.

Якщо використовуються якісні фактори, то кожному рівню таких факторів потрібно присвоїти деяке число. Важливо вибирати як фактори лише незалежні змінні, тобто такі, які можна змінювати незалежно від інших факторів. Фактори мають бути однозначними. Для побудови ефективної математичної моделі доцільно виконати попередній аналіз значущості факторів (ступеня впливу на функцію відгуку), ранжувати їх і виключити малозначущі фактори.

Діапазони зміни значень факторів задають область визначення досліджуваної властивості  $y$ . Якщо вважати, що кожному факторові відповідає координатна вісь, то побудований простір називається *факторним простором*.

При виборі інтервалів зміни факторів потрібно враховувати їхню сумісність, тобто контролювати, щоб у цих діапазонах будь-які поєднання факторів можна було б реалізувати в дослідах, не приходячи до абсурду. Для кожного з факторів зазначають граничні значення:

$$x_{i \min} \leq x_i \leq x_{i \max}, i = 1, \dots, n.$$

Вивчення властивості  $y$  будь-якої системи або об'єкта залежно від факторів  $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ , можна розглядати як дослідження функції багатьох змінних, тобто залежності вигляду

$$y = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n). \quad (6.1)$$

Це рівняння називають *функцією відгуку*. Відгук має бути визначений кількісно. Проте можливі і якісні ознаки  $y$ . У цьому разі застосовують ранговий підхід, прикладом якого є оцінка на іспиті, коли одним числом оцінюється здобута інформація про знання студента.

Функція відгуку описує деяку гіперповерхню в  $(n + 1)$ -вимірному просторі ( $n$  — кількість факторів). Отже, вивчення багатофакторної системи можна розглядати як дослідження форми цієї поверхні, названої *поверхнею відгуку*.

Відшукування оптимуму функції відгуку — питання стратегії. Оскільки перебором усіх можливих станів з огляду на їхню величезну кількість задачу розв'язати не можна, доводиться шукати інші шляхи.

Вивчення форми поверхні відгуку, знаходження оптимальних значень досліджуваних параметрів покладено в основу методів планування експерименту.

До основних методів планування, застосовуваних на різних етапах дослідження, належать:

- планування експерименту з метою виділення з усієї сукупності факторів групи істотних факторів, що підлягають подальшому докладному вивченню;
- планування експерименту для дисперсійного аналізу, тобто складання планів для об'єктів з якісними факторами;
- планування регресійного експерименту, що дає змогу будувати регресійні моделі (поліноміальні та інші);
- планування екстремального експерименту, в якому головне завдання — експериментальне визначення оптимуму вихідного фактора;
- планування при вивченні динамічних процесів.

Якщо проводиться однофакторний експеримент  $y = f(x_1)$ , то поверхня відгуку перетворюється на лінію на площині (рис. 6.4). Зазвичай легко побачити, при яких значеннях фактора процес іде найкраще.

За виглядом цієї лінії можна підібрати математичне рівняння для функції відгуку, що, утім, для однофакторного експерименту не є конче потрібним.

Якщо ми не впевнені в добрій відтворюваності дослідів, то доводиться повторювати їх кілька разів, дістаючи залежність з урахуванням розкиду експериментальних даних.

Умовою оптимального перебігу такого процесу (коли  $y = y_{\max}$ ) буде рівність

$$x_1 = x_{1\text{опт}}.$$

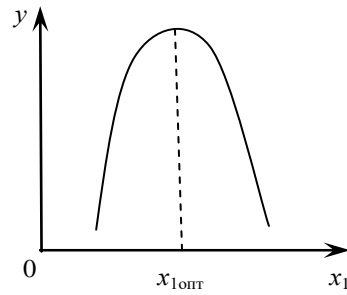


Рис. 6.4. Залежність виходу процесу від одного фактора

При двофакторному експерименті  $y = f(x_1, x_2)$  поверхня відгуку міститиметься в тривимірному факторному просторі (рис. 6.5). У цьому разі кожній точці на площині  $x_1 \times x_2$  відповідатиме певна точка на поверхні відгуку.

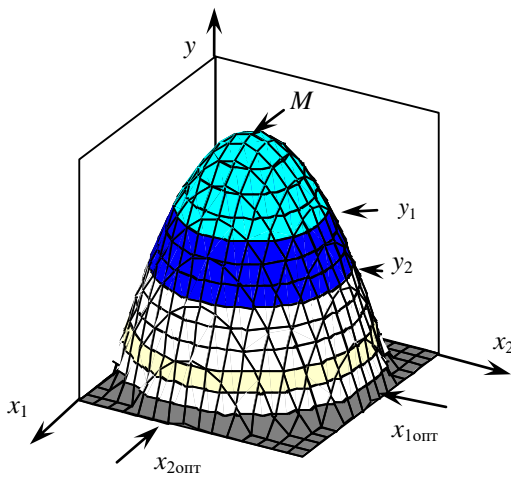


Рис. 6.5. Поверхня відгуку

Перетнемо поверхню відгуку площинами, паралельними площині  $x_1 \times x_2$ , і утворені в перерізах лінії ( $y_1 = \text{const}$ ,  $y_2 = \text{const}$  і т. д.) спроектуємо на площину  $x_1 \times x_2$ , тоді дістанемо лінії, аналогічні горизонталям на топографічних картах (рис. 6.6).

Кожна лінія відповідає певному значенню параметра оптимізації  $y$  і називається *лінією однакового відгуку*, або *ізолінією*. Точка  $M$  на рис. 6.6 є точкою оптимуму, яку ми шукаємо.

Якщо провести переріз поверхні відгуку площинами, паралельними площині  $y \times x_2$  або  $y \times x_1$ , і утворені в перерізах лінії ( $x_1 = \text{const}$  або  $x_2 = \text{const}$  і т.ін.) спроектувати на площину  $y \times x_2$  або  $y \times x_1$ , то поверхню відгуку для двофакторного процесу буде зображено на площині (рис. 6.7).

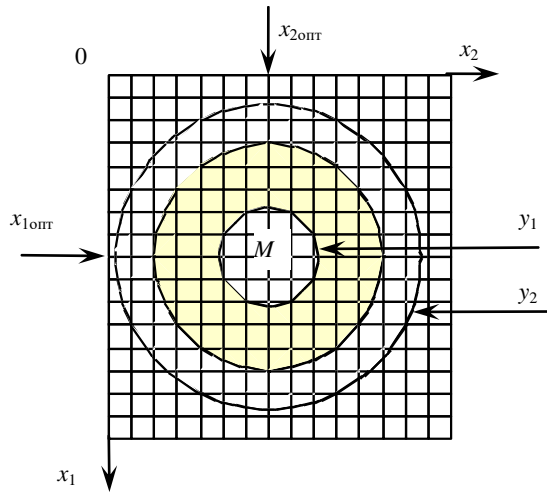


Рис. 6.6. Проекції перетинів поверхні відгуку на площину  $x_1Ox_2$

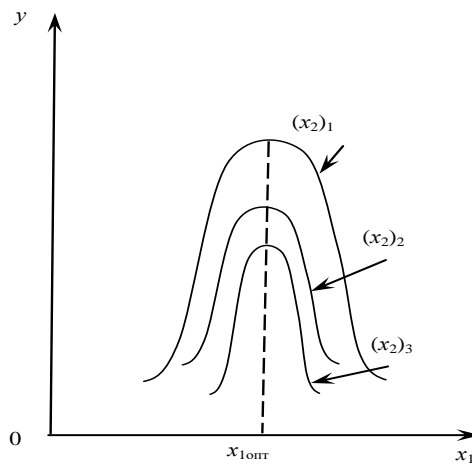


Рис. 6.7. Залежності функції відгуку від  $x_1$  при фіксованих значеннях змінної  $x_2$

Відокремлені графіки перерізів можна апроксимувати сукупністю математичних рівнянь.

При трифакторному експерименті залежність  $y = f(x_1, x_2, x_3)$  має зображатися поверхнею відгуку в чотиривимірному просторі (три осі —  $Ox_1, Ox_2, Ox_3$  і вісь  $Oy$ ), що наочно зобразити вже неможливо.

Проте  $x_3$  можна надати деяких фіксованих значень і уявити собі зміну форми поверхні відгуку в тривимірному просторі, тобто графіка функції  $y = f(x_1, x_2)$ , залежно від рівня фактора, координати якого містяться в четвертому вимірі. Тоді графічно це можна подати як зображення набору поверхонь  $y = f(x_1, x_2)$  при різних значеннях  $x_3$  (рис. 6.8).



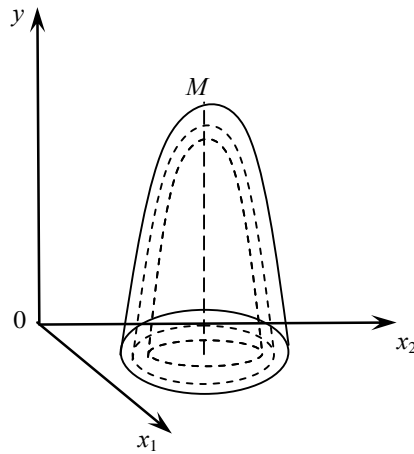


Рис. 6.8. Вигляд поверхонь відгуку  $y = f(x_1, x_2)$  при різних значеннях  $x_3$

У разі великої кількості факторів ( $n > 3$ ) графічно зобразити поверхню відгуку неможливо, а тому доводиться обмежуватися тільки математичною залежністю.

Наприклад, нехай необхідно дослідити вплив рН, тиску  $P$  і температури  $T$  на вихід продукту реакції  $Q$  (рис.6.9).

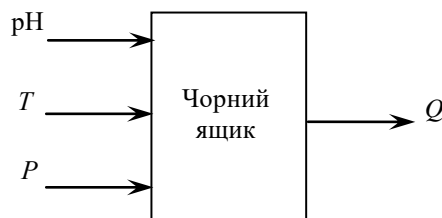


Рис. 6.9. Дослідження впливу рН,  $P$  і  $T$  на  $Q$

Нехай у діапазоні зміни кожного фактора взято по п'ять точок.

Тоді для провести всіх комбінаціях факторів (їх три), необхідно виконати  $5^3 = 125$  дослідів і сформуванати по  $5^2 = 25$  кривих функції відгуку.

рН	4,0	4,5	5,0	5,5	6,0
$P$ , атм	1	2	3	4	5
$T$ , К	283	293	303	313	323

того щоб досліди при можливих значень

Коли потрібно продублювати досліди, щоб знизити похибку, то кількість дослідів пропорційно зростає, а отже, виконати досліди при всіх можливих комбінаціях значень факторів (якщо факторів більш як два) і скористатись їхніми результатами практично нереально.

Розглянемо традиційний підхід до планування експерименту на прикладі пошуку оптимальних умов проведення біотехнологічного процесу, в якому вихід продукту  $Q$  залежить від рН середовища та температури  $T$ .

У нашому випадку цільовою функцією є вихід продукту, а змінні фактори — рН та  $T$ . Потрібно знайти умови (значення факторів), при яких вихід продукту досягає максимуму.

Загальний вигляд графіка залежності цільової функції  $Q$  від параметрів рН ( $x_1$ ) та  $T$  ( $x_2$ ) буде подібний до наведеного на рис. 6.5.

Проекції поверхні відгуку на площину  $pH-0-T$  та шлях традиційного експерименту для пошуку максимуму (позначений хрестиками) наведено на рис. 6.10.

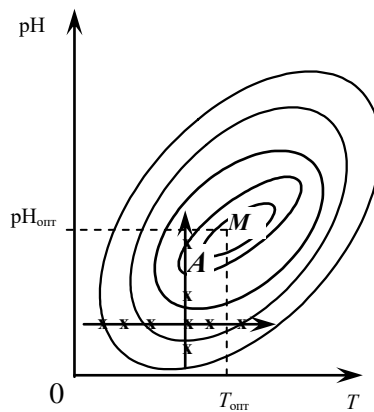


Рис. 6.10. Проекції поверхонь відгуку  $Q$  на площину  $pH-0-T$

Якщо провести традиційний експеримент (коли варіюють один параметр, шукають максимум, потім варіюють інший параметр і також шукають максимум), то максимум у такий спосіб знайти не вдасться (або доведеться багато разів по черзі варіювати параметри).

Як впливає з рис. 6.10, традиційний експеримент може привести до визначення помилкового значення максимуму функції відгуку, (яке позначено літерою  $A$ ).

Таким чином, доходимо висновку: необхідно варіювати одно-часно всі фактори і рухатися в напрямі зростання функції відгуку (рис. 6.11).

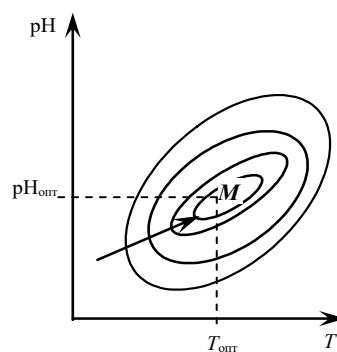


Рис. 6.11. Проекції поверхонь відгуку  $Q$  на площину  $pH-0-T$

Для розв'язання задачі пошуку максимуму (мінімуму) функції відгуку звичайно використовується метод факторного планування експерименту, що дає змогу дістати максимально точний розв'язок за мінімальну кількість вимірювань.

Для знаходження екстремальних точок поверхонь відгуку потрібно знати, яким рівнянням можна описати функцію відгуку.

Зазвичай рівняння функції невідоме, і тому аналітичним чином визначити координати екстремумів неможливо.

### 6.3.3. Розкладання функції відгуку в степеневий ряд

Оскільки істинний вигляд функції відгуку  $y = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$  невідомий, то для опису поверхні відгуку використовують рівняння, яке можна дістати розкладанням цієї функції у степеневий ряд:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i x_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \dots, \quad (6.2)$$

де  $x_i, x_j$  — змінні фактори при  $i = \overline{1, n}; j = \overline{1, n}; k = \overline{1, n}$ ;

$\beta_0, \beta_i, \beta_{ij}, \dots$  — коефіцієнти регресії при відповідних змінних, значення яких визначають форму поверхні відгуку.

Розкладання в степеневий ряд функції можливе в тому разі, коли ця функція є неперервною та монотонною в досліджуваному інтервалі змінних.

Якщо функція є неперервною та монотонною, тобто диференційовною в деяких межах в околі точки  $A$  з координатами  $x_1 = A_1, x_2 = A_2, x_3 = A_3, \dots, x_n = A_n$ , то її можна розкласти в ряд Тейлора:

$$y = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = f(A_1, A_2, A_3, \dots, A_n) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} (x_i - A_i) + \frac{1}{2!} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} (x_i - A_i)(x_j - A_j) + \dots$$

Якщо  $A_1 = A_2 = A_3 = A_n = 0$ , то ряд Тейлора має вигляд рівняння (6.2), в якому

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \beta_i, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \beta_{ij}, \quad \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} = \beta_{ii}.$$

На практиці звичайно обмежуються певною кількістю членів степеневого ряду й апроксимують функцію поліномом деякого степеня.

Таке рівняння називають *рівнянням регресії*. У цьому рівнянні члени другого степеня  $x_i x_j$  і квадратичні члени  $x_i^2, x_j^2$  характеризують кривину поверхні. В околі екстремуму, де кривина зростає, для точного опису процесу потрібні квадратичні члени  $x_i^2, x_j^2$  та члени третього степеня, такі як  $x_i^3$ .

Чим більша кривина поверхні, тим більше в рівнянні регресії членів вищих степенів  $i$ , відповідно, коефіцієнтів регресії, які необхідно визначити.

Це призводить до різкого збільшення кількості дослідів, які необхідно поставити для відшукування таких коефіцієнтів.

З огляду на сказане на практиці намагаються обмежитися лінійною моделлю (поліномом першого степеня). Для цього експерименти слід проводити в достатньо вузькій області поверхні відгуку, щоб досліджуваний процес можна було подати площиною.

При цьому рівняння регресії набирає вигляду

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i x_i = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_n x_n. \quad (6.3)$$

Оскільки площина є поверхнею першого порядку, то всі коефіцієнти регресії при змінних (у степені, вищому за перший) перетворюються на нуль.

Якщо необхідно розширити область дослідження процесу (коли не можна обмежитися лінійним наближенням), то доводиться враховувати члени другого степеня:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i x_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_{ij} x_i x_j. \quad (6.4)$$

Рівняння регресії процесу, вихід якого залежить від двох факторів, набирає вигляду

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{112} x_1^2 x_2 + \beta_{122} x_1 x_2^2 \dots, \quad (6.5)$$

де  $\beta_0$  — вільний член рівняння;

$\beta_1 x_1, \beta_2 x_2$  — лінійні члени рівняння;

$\beta_{12} x_1 x_2$  — члени другого порядку, що характеризують ефекти парних міжфакторних взаємодій;

$\beta_{11} x_1^2, \beta_{22} x_2^2$  — члени другого порядку (квадратичні члени) і т.д.

Якщо функція відгуку має вигляд  $y = f(x_1, x_2)$ , то для лінійної ділянки відповідної поверхні відгуку це рівняння набирає вигляду:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2. \quad (6.6)$$

А якщо необхідно описати ширшу область, додаються члени другого степеня:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2. \quad (6.7)$$

#### 6.4. Способи розв'язування задач оптимізації

Здебільшого математичні методи планування екстремальних експериментів дають змогу за результатами експериментів скласти математичний опис процесу у вигляді рівняння регресії. Аналіз рівняння регресії дає змогу за певними алгоритмами визначати напрям пошуку екстремуму функції відгуку. Він показує, в який спосіб потрібно змінювати фактори у процесі експериментальних досліджень для розв'язування задач оптимізації.

У цьому разі планування екстремального експерименту та його проведення складаються з таких етапів:

1. Висловлюється гіпотеза про можливість опису процесу рівнянням регресії (степеневим рядом певного порядку).

2. Відповідно до цієї гіпотези планується і проводиться експеримент.

3. За результатами експерименту розраховуються коефіцієнти регресії і складається математичний опис згідно з первинною гіпотезою.

4. Проводиться статистичне оцінювання значущості коефіцієнтів рівняння регресії.

5. Здійснюється статистичний аналіз адекватності (відповідності) отриманого рівняння справжньому перебігу процесу, перевіряється первинна гіпотеза, а також гіпотези, які сприяють максимальному спрощенню рівняння зі збереженням його адекватності досліджуваному процесу.

6. За допомогою здобутого рівняння тим чи іншим методом визначаються оптимальні умови перебігу досліджуваного процесу.

З геометричного погляду розв'язування задачі оптимізації полягає в досягненні найвищої точки поверхні відгуку, що відповідає відшуканню максимуму функції  $y = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$  за всіма змінними. У разі, коли вигляд цієї функції відомий, тобто відомий механізм процесу оптимізації, максимум функції можна визначити аналітично без здійснення додаткового експерименту. Проте при оптимізації технологічних процесів дослідник має розв'язувати задачу оптимізації

експериментально. Процес розв'язання такої задачі можна подати як маршрут, по якому рухається дослідник з деякої початкової точки в область максимуму.

Задачу оптимізації щодо технологічних процесів розв'язують експериментально, змінюючи фактори певним чином. Послідовність дій залежить від припущень, які потрібно зробити щодо властивостей невідомої моделі до початку експерименту.

Які ж припущення про властивості поверхні відгуку потрібно зробити? Головне — це неперервність поверхні, її гладкість і наявність єдиного оптимуму (можливо, і на межі області визначення факторів).

Ці постулати дають змогу подати досліджувану функцію у вигляді ряду Тейлора в околі деякої точки факторного простору. Окрім того, потрібно використовувати метод, згідно з яким вдається поступово наближатися до точки оптимуму.

При проведенні однофакторного експерименту поверхня відгуку стискається в лінію на площині (див. рис. 6.4). Приклад, наведений на рис. 6.4, — це сприятливий випадок, оскільки функція неперервна і має один екстремум. На рис. 6.12 наведено графік функції відгуку для одного фактора за наявності двох максимумів.

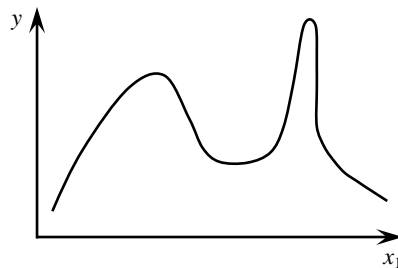


Рис. 6.12. Приклад складної функції відгуку

Якщо в пошуках оптимуму ми почнемо послідовно рухатися зліва направо, то знайдемо найменший із максимумів і навряд чи довідаємося про існування другого, найбільшого. Щоправда, він такий локалізований і гострий, що його можна пропустити і при русі з правого кінця, якщо ставити досліди не в усіх точках.

Існує кілька методів екстремального пошуку. Одним із найпоширеніших в різного роду технологічних дослідженнях є метод Зайделя–Гаусса.

*Метод Зайделя–Гаусса* передбачає послідовне варіювання вибраних факторів у процесі знаходження окремих максимумів кожного з них.

Рух до екстремуму згідно з цим методом для двофакторного експерименту ілюструє рис. 6.13.

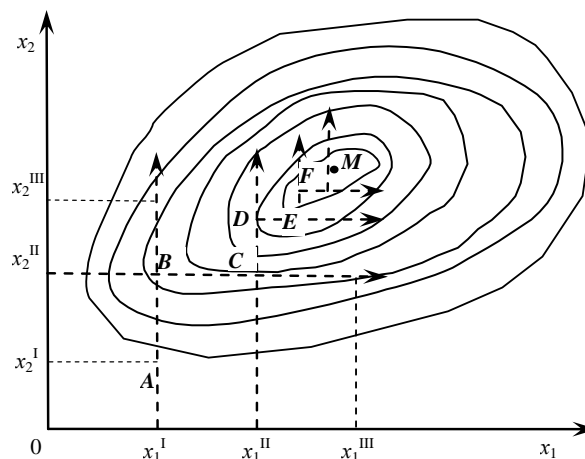


Рис. 6.13. Схема оптимізації процесу за методом Зайделя–Гаусса

Якщо, наприклад, за вихідну взято точку  $A$ , то при фіксованому значенні  $x_1$  рухаються з деяким постійним кроком, змінюючи змінну  $x_2$  до досягнення окремого максимуму в точці  $B$ .

Далі, фіксуючи  $x_2$  на рівні, який відповідає знайденому максимуму в точці  $B$ , рухаються із деяким новим кроком, змінюючи  $x_1$  до досягнення нового окремого максимуму в точці  $C$ . Після цього змінна  $x_1$  знову фіксується і рух з меншим кроком відбувається знову в напрямі  $x_2$  до окремого максимуму в точці  $D$  і т.д.

Отже, багаторазовим варіюванням кожного фактора при фіксованому положенні другого (або всіх інших при більшій кількості факторів) досягають оптимальної області.

Проте оптимізація за Зайделем–Гауссом має низку недоліків:

- 1) довгий шлях до оптимуму (особливо, якщо багато факторів);
- 2) громіздка система рівнянь, що подає результати дослідів в аналітичній формі;
- 3) принципова неможливість з'ясування взаємодії факторів, що може мати велике значення в технологічних процесах.

Окрім того, «оптимальні умови», знайдені за методом Зайделя–Гаусса, насправді можуть виявитися не якнайкращими через деякі особливості поверхні відгуку. Існують більш досконалі методи досягнення області функції відгуку, де міститься оптимум. Ідеться про методи математичного планування.

Дослідження із застосуванням математичних методів планування (метод випадкового балансу, факторний експеримент, метод Бокса–Уїлсона та ін.) з успіхом використовуються для оптимізації різних технологічних процесів. Основною перевагою методів математичного планування порівняно з класичними методами дослідження є можливість одночасного вивчення великої кількості факторів, що діють у системі. При цьому враховується взаємодія факторів і є можливість оцінити ефекти такої взаємодії.

При оптимізації багатфакторних систем за наявності в них істотних міжфакторних взаємодій першим кроком має бути добір істотних факторів. Це можна здійснити плануванням експерименту за методом випадкового балансу. Переваги досліджень із застосуванням математичних методів полягають у величезному скороченні часу та витрат і великій імовірності досягти справжнього оптимуму.

#### 6.4.1. Градієнтні методи визначення екстремуму функції

Градієнтні методи (найшвидшого спуску) оптимізації, що належать до чисельних методів пошуку екстремуму, ефективні при пошуках екстремальних значень нелінійних функцій без обмежень або з обмеженнями.

*Градієнт* — це вектор у факторному просторі, координати якого задаються частинними похідними за однойменними координатами:

$$\nabla y = \frac{\partial y}{\partial x_1} \vec{i} + \frac{\partial y}{\partial x_2} \vec{j} + \dots + \frac{\partial y}{\partial x_k} \vec{k}.$$

Якщо модель лінійна, то градієнт функції відгуку розраховується через коефіцієнти рівняння регресії:

$$\nabla y = f(b_1, b_2, \dots, b_k).$$

Напрямок градієнта функції відгуку перпендикулярний до ліній рівня (ізоліній). З математики відомо, що градієнт скалярної функції відгуку напрямлений у бік найшвидшого зростання функції. Тому найкоротшим, найбільш крутим шляхом досягнення екстремуму буде рух із початкової точки за градієнтом перпендикулярно до ізоліній  $y = \text{const}$  (див. рис. 6.11). Отже, шлях найшвидшого спус-

ку — це найкоротший шлях до екстремуму, за напрямом градієнта функції відгуку.

Отже, змінюючи незалежні змінні (фактори) пропорційно до лінійних коефіцієнтів регресії, можна рухатися в напрямі градієнта відгуку шляхом найшвидшого спуску.

Для знаходження якнайкращої комбінації відібраних істотних факторів ефективним є метод найшвидшого спуску, відомий як метод *Бокса–Уїлсона*.

Для реалізації методу найшвидшого спуску Бокс та Уїлсон запропонували кроковий метод руху по поверхні відгуку. Згідно з цим методом поблизу вихідної точки (рис. 6.14, окіл точки  $A$ ) ставиться у спеціальний спосіб спланована невелика серія дослідів, в якій одночасно варіюються всі досліджувані фактори, кожний на двох рівнях — верхньому і нижньому. Результати цих дослідів математично обробляють для відшукування наближеного математичного опису процесу в цій локальній області. Для двох рівнів варіювання факторів можна знайти тільки лінійне рівняння, в яке значення факторів входять у першому степені (рівняння регресії):

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2.$$

У це рівняння можуть входити також коефіцієнти при  $x_1 x_2$ ,  $x_2 x_3$ ,  $x_1 x_3$  і так далі — мультиплікативні члени, що враховують міжфакторні взаємодії.

Проаналізувавши рівняння регресії, можна знайти такі точки фазового простору функції відгуку, для яких очікується найбільше зростання (чи спадання, якщо шукаємо мінімум) параметра оптимізації.

Рух із точки  $A$  починається в напрямі градієнта лінійного наближення:

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = b_1, \quad \frac{\partial y}{\partial x_2} = b_2.$$

Таким чином, рівняння регресії використовують для визначення напрямку найшвидшого спуску (див. рис. 6.14, напрям від точки  $A$  до точки  $B$ ), при якому вихідний показник зростає найбільш стрімко. Розглядаючи рух за градієнтом функції відгуку, нехтують незначущими факторами. Вони стабілізуються на одному з рівнів  $\pm 1$ .

Для випадку, наведеного на рис. 6.14, вибіркові коефіцієнти при лінійних членах в околі  $A$  мають однакові знаки ( $b_1 > 0$ ,  $b_2 > 0$ ), тому при русі до максимуму функції відгуку значення  $x_1$  і  $x_2$  зростають.

Далі після визначення напрямку найшвидшого спуску за методом Бокса–Уїлсона виконують 5 – 8 перевірних експериментів з очікуванням зростання величини  $y$ , розрахованої за рівнянням регресії.

При проведенні дослідів крок фактора має бути пропорційним до добутку  $b_i \lambda_i$  коефіцієнта  $b_i$  на інтервал варіювання. При цьому для одного з факторів — найбільш впливового — крок вибирається, а для решти розраховується так, щоб

значення кожного кроку було пропорційним до добутку  $b_i \lambda_i$ . Інваріантними до зміни інтервалу залишаються тільки знаки складових градієнта.

У деякій точці при експериментальній перевірці цих дослідів відбувається зниження параметра оптимізації (після його підвищення в попередніх точках) (див. рис. 6.14, напрям від точки  $B$  до точки  $D$ ). Рух за градієнтом лінійного наближення триває доти, доки не припиняється приріст  $y$ .

Тоді, коли це відбулося, у найкращій точці (див. рис. 6.14, точка  $B$ ), здійснюють нову серію експериментів, і цикл найшвидшого спуску повторюється.

Так, у точці з найбільшим значенням  $y$  (точка  $B$  на рис. 6.14 — центр плану другої серії експериментів) ставиться нова серія дослідів і визначається новий напрям руху по поверхні відгуку. Такий покроковий процес триває до досягнення області, близької до екстремуму.

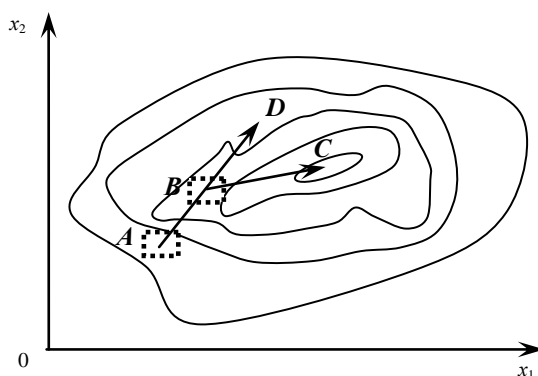


Рис. 6.14. Схема руху до максимуму за методом найшвидшого спуску

Виконавши новий експеримент, можна знову оцінити напрям, в якому найшвидше можна рухатися (див. рис. 6.14, напрям до точки  $C$ ).

Так це повторюється доти, доки рівняння адекватне процесу. Якщо воно стане неадекватним, то поверхня має оптимум у вигляді «хребта» або «купола».

Якщо максимум єдиний, то, виконуючи експерименти в зазначеній послідовності, ми його досягнемо.

Такий принцип відшукування оптимуму називається *кроковим*.

Для визначення оптимуму часто використовують розглянуту скорочену схему дослідження. Проте це можливо тільки в тому разі, коли щодо поверхні відгуку зроблено певні припущення, головним з яких є припущення про неперервність поверхні відгуку і наявність тільки одного екстремуму.

### Властивості методу найшвидшого спуску

#### 1. Вплив співвідношення числових значень коефіцієнтів регресії.

Якщо один із коефіцієнтів регресії значно перевищує інші, то багатofакторна задача вироджується в однофакторну. Аналогічно, якщо частина коефіцієнтів значно відрізняється від інших, то ефективна розмірність факторного простору зменшується.

Функція, значення коефіцієнтів якої різняться не істотно, називається *симетричною відносно коефіцієнтів*. Рух за градієнтом функції відгуку більш



ефективний для симетричної функції регресії. Це досягається зміною інтервалів варіювання факторів.

2. *Рух за градієнтом функції відгуку має починатися з нульової точки.* Здавалося б, у разі вибору точки з максимальним значенням відгуку рух має бути ефективнішим, оскільки напрям градієнта скрізь однаковий. Проте дослід було сплановано відносно нульової точки (точки старту), і градієнт має найменшу похибку саме для неї. Математично функція регресії наближається статистично до розкладу функції відгуку в ряд Тейлора саме околі нульової точки (рис. 6.15, точка *A*).

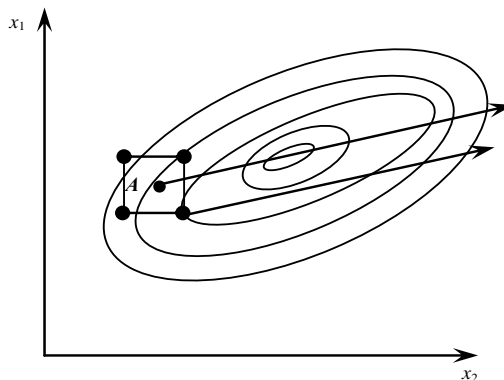


Рис. 6.15. Рух за градієнтом функції відгуку з нульової і найкращої точок плану

Розрахувавши складові градієнта функції регресії, дістанемо умови проведення подальших дослідів. Кількість дослідів залежить від конкретної задачі (від меж області визначення хоча б за одним фактором).

Коли визначено умови проведення дослідів, дослідник має з'ясувати таке:

- 1) виконувати всі досліди підряд або тільки деякі з них;
- 2) з якого дослідів починати;
- 3) як діяти, коли досягнуто межі за якимось фактором;
- 4) чи потрібно проводити повторні досліди.

Перше питання стосується тактики проведення дослідів. Можливі такі дії:

- усі досліди виконуються або підряд, один за одним, або через один чи через два;
- виконуються один за одним два-три досліди і результати аналізуються.

Стосовно другого питання діють так:

якщо модель адекватна, то починають з тих дослідів, що виходять за область проведеного експерименту хоча б за одним із факторів. Для неадекватної моделі один-два досліди виконують в області експерименту.

Якщо досягнуто меж одного з факторів, то можливі два варіанти:

- значення цього фактора фіксують і далі змінюють решту факторів;
- виконують нову серію дослідів з іншими інтервалами варіювання.

Зауважимо, що повторних дослідів загалом не проводять, але бажано продублювати дослід із найкращим результатом.

Після проведення першої серії дослідів за методом найшвидшого спуску можливі дві ситуації: найшвидший спуск ефективний і неефективний.

Найшвидший спуск вважається ефективним, якщо хоча б один із реалізованих варіантів дослідів дасть кращий результат порівняно з найкращим дослідом початкової серії дослідів.

Якщо області оптимуму досягнуто, то або дослідження закінчується, або функція відгуку уточнюється, деталізується за допомогою планів другого порядку, а результати експерименту подаються у вигляді полінома другого степеня.

Якщо області оптимуму не досягнуто, то найкращий дослід береться за нульовий для виконання наступного кроку в серії дослідів за матрицею планування.

У разі, коли найшвидший спуск неефективний, то можливі дві ситуації.

1. *Область оптимуму близька.*

Це означає, що вже при реалізації матриці планування здобуто настільки високі результати, що найшвидший спуск ситуації не поліпшив. У цьому разі можна закінчити дослідження, перейти на планування другого порядку або, якщо модель була неадекватною, досліджувати причини неадекватності.

2. *Область оптимуму далека за адекватної лінійної моделі.*

На практиці найшвидший спуск іноді буває неефективним, оскільки реальна функція відгуку не підпорядковується постулатам лінійного програмування. Тоді вибирають іншу нульову точку, тобто повторюють планування, стартуючи з іншої області факторного простору.

## 6.5. Повний факторний експеримент

Як уже зазначалося, при оптимізації хімічних та інших процесів дослідникові доводиться розв'язувати задачу оптимізації експериментально. Для цього він має розробити план експерименту — маршрут, по якому рухається дослідник із деякої початкової точки в область оптимуму, тобто певний алгоритм вибору умов та послідовності проведення експериментальних досліджень.

Перш ніж приступити до планування експерименту, потрібно з'ясувати, як вибрати локальну область факторного простору, де її вибирати і якою вона має бути.

Потрібно також ретельно проаналізувати апріорну інформацію: графіки або таблиці однофакторних експериментів чи дані з літературних джерел, які характеризують параметри оптимізації, відомості про фактори, найкращі умови перебігу процесу та особливості поверхні відгуку.

Цей етап передує побудові плану першої серії експерименту.

Увесь процес дослідження складається з послідовних етапів, частина з яких повністю формалізована, а частина потребує інтуїтивних рішень.

**Прийняття рішень перед плануванням експерименту.** Щоб вибрати область експерименту, необхідно:

- 1) оцінити межі областей визначення факторів;
- 2) узяти до уваги інформацію, що міститься в результатах попередніх досліджень (апріорну, тобто отриману до початку експерименту) та скористатись графіками однофакторних експериментів, проведених раніше.

Таким чином, вибір експериментальної області факторного простору пов'язаний із ретельним аналізом апріорної інформації.

Область проведення експерименту вибирається в два етапи: на першому визначається основний рівень, а на другому — інтервали варіювання.

Для кожного фактора, досліджуваного в даному експерименті, вибирають умовний *нульовий* (який називають також основним), тобто те значення цього фактора, з якого починають вивчати відповідний процес, маючи на меті знайти напрям від вибраного умовного нульового рівня до оптимального значення фактора. Побудова плану експерименту зводиться до вибору експериментальних точок, симетричних відносно основного рівня.

При встановленні нульового рівня доводиться розглядати різні ситуації. Ситуації задаються інформацією про найкращі точки і визначають приймане рішення. У різних випадках маємо в розпорядженні різні відомості про область найкращих умов. Якщо є відомості про координати однієї точки і немає інформації про межі визначення факторів, то залишається розглядати цю точку як нульовий рівень. Аналогічне рішення приймається, якщо межі відомі і якнайкращі умови лежать усередині області. Ситуація ускладнюється, якщо ця точка лежить на межі (або дуже близько до межі) області. Тоді доводиться нульовий рівень вибирати з деяким зсувом від найкращих умов. Може статися, що координати найкращої точки невідомі, але є відомості про деяку підобласть, в якій процес відбувається достатньо добре. Тоді нульовий рівень вибирають або в центрі, або у випадковій точці цієї підобласті. Щодо нульового рівня висувують дві вимоги:

1) у цій точці значення параметра оптимізації мають бути найкращими з-поміж усіх відомих нам значень;

2) координати нульового рівня мають лежати всередині області визначення. Якщо ці вимоги суперечать одна одній, то доводиться нехтувати першою.

**Вибір інтервалів варіювання.** Для кожного фактора вибирають два рівні, на яких він варіюватиметься в експерименті, — верхній і нижній. Домовимось позначати фактори, що мають натуральну розмірність, великими літерами  $X_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ).

Якщо на координатній осі зобразити точкою  $X_{i,0}$  нульовий рівень, тоді верхній і нижній рівні зобразяться симетричними точками  $A, B, C, D$  (рис. 6.16).

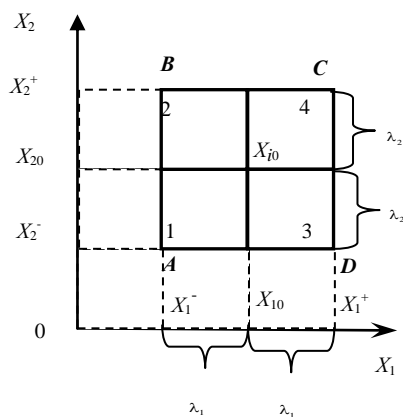


Рис. 6.16. Область визначення двох факторів

Наприклад, уявімо координатну вісь, на якій відкладаються значення конкретного фактора — тиску. Нехай нульовий рівень вже вибрано і він дорівнює 10 атм. Це значення зображається точкою. Тоді два рівні, які нас цікавлять, можна зобразити двома точками, симетричними відносно основного рівня.

*Інтервалом варіювання* факторів називається деяке число (своє для кожного фактора), додавання якого до нульового рівня дає верхній, а віднімання — нижній

рівень фактора. На координатній осі інтервал варіювання — це відстань між нульовим і верхнім (або нижнім) рівнями.

### КОНЕЦ ЛЕКЦІИ

Таким чином, задача вибору рівнів факторів зводиться до простішої — вибору інтервалу варіювання.

Інтервал варіювання коригується в ході експерименту, якщо не задовольняється умова адекватності моделі.

Фактори можуть мати різні розмірності (наприклад, температура, тиск або концентрація) і різко відрізнятися кількісно.

Через те, що незалежні змінні можуть бути різними за фізичною природою і змінюватися в різних динамічних діапазонах, у теорії планування експерименту прийнято для зручності здійснювати кодування незалежних змінних. Це дає змогу формалізувати процедуру планування та обробки результатів і з однаковою точністю враховувати всі передбачувані впливові величини.

При кодуванні факторів проводиться перетворення натуральних значень змінних факторів у безрозмірні величини  $x_i$ .

Для спрощення запису умов експерименту і обробки експериментальних даних вибір нового масштабу для кодованих факторів здійснюється так, щоб мінімальне значення цих факторів відповідало  $-1$ , а максимальне значення  $+1$ . При цьому початок координат переноситься в точку з нульовими координатами, тобто в ту, де значення кодованих факторів є  $0$ .

Перетворення змінних виконується за такою формулою:

$$x_i = \frac{X_i - X_{i0}}{\lambda_i}, \quad (6.8)$$

де  $X_i$  — значення фактора на одному з рівнів у натуральних змінних;  $x_i$  — значення фактора в кодованих змінних;

$X_{i0}$  — значення  $i$ -го фактора в натуральних змінних на нульовому рівні, яке розраховується як середнє арифметичне між вибраними рівнями фактора:

$$X_{i0} = \frac{X_{i\max} - X_{i\min}}{2} = \frac{X_i^+ + X_i^-}{2};$$

$\lambda_i$  — інтервал варіювання, що дорівнює різниці між будь-яким із рівнів та нульовим рівнем фактора;  $i$  — номер фактора.

На вибір інтервалів варіювання накладаються природні обмеження згори і знизу. Інтервал варіювання не може бути меншим від тієї помилки, з якою експериментатор фіксує рівень фактора. Проте інтервал не може бути настільки великим, щоб верхній або нижній рівень потрапив за межі області визначення. У середині цих обмежень звичайно ще залишається значна невизначеність вибору, яка усувається за допомогою інтуїтивних рішень. Потрібно пам'ятати, що при розв'язуванні задачі оптимізації слід намагатися вибирати для першої серії експериментів таку підобласть, яка уможливила б покроковий рух до оптимуму. А в задачах інтерполяції інтервал варіювання має охоплювати всю існуючу область факторів.

Можливе існування так званих *широких, середніх і вузьких інтервалів варіювання*. Розмір інтервалу варіювання становить деяку частку від області визначення фактора. Можна, наприклад, домовитися про таке: якщо інтервал

становить не більш як 5% від області визначення, та вважати його вузьким, не більш як 20% — середнім, а в інших випадках — широким. Це, вочевидь, досить умовний поділ, і в кожній конкретній задачі доводиться спеціально визначати ці поняття, які залежать не тільки від розміру області визначення, й від характеру поверхні відгуку та точності фіксації факторів. Вузький інтервал варіювання не використовується в разі низької точності вимірювання експериментальних величин.

Таким чином, після вибору основних рівнів та інтервалів варіювання факторів можна приступити до побудови плану проведення експерименту.

### 6.5.1. Плани повного факторного експерименту

Експеримент, в якому реалізуються всі можливі поєднання факторів на вибраних рівнях, називається *повним факторним експериментом* (ПФЕ). При ПФЕ кількість дослідів дорівнює кількості всіх можливих комбінацій рівнів факторів і за однакової кількості рівнів для кожного фактора визначається формулою:

$$N = L^n,$$

де  $N$  — кількість дослідів;  $n$  — кількість факторів;  $L$  — кількість рівнів.

Спробуємо оцінити, скільки дослідів потрібно поставити при ПФЕ, якщо кількість рівнів для кожного фактора взяти 5 і кількість факторів також 5. У цьому разі необхідно виконати  $N = 5^5 = 3125$  експериментів. Для кількості факторів 8 кількість експериментів буде 390 625. Якщо зменшити кількість рівнів для факторів, наприклад до 4, то кількість експериментів для 4 факторів буде 256.

Із цього випливає, що при ПФЕ потрібно провести доволі велику кількість дослідів.

Оскільки час і матеріальні ресурси в дослідника звичайно обмежені, застосовувати таку схему на практиці недоцільно. Якби аналітичний вигляд функції  $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  був би відомий, то на комп'ютері такий підхід став би цілком здійсненним.

Проведення ПФЕ можливе й прийнятне на практиці тільки за наявності незначної кількості факторів.

Значного поширення на практиці при проведенні експериментальних досліджень набули дворівневі плани.

При проведенні дослідів за планом ПФЕ  $2^n$  кожний із  $n$  факторів розглядається тільки на двох рівнях. При цьому рівні факторів являють собою межі варіювання даного параметра.

При кількості рівнів  $L = 2$ , однакової для кожного фактора, кількість дослідів у ПФЕ обчислюється за формулою:

$$N = 2^n. \quad (6.9)$$

Плани ПФЕ  $2^n$  є найпростішими планами першого порядку і необхідні на початковому етапі планування експерименту для отримання лінійної моделі, яка ґрунтується на варіюванні факторів на двох рівнях.

За формулою (6.9) легко підрахувати необхідну кількість дослідів при різній кількості факторів.

Для плану ПФЕ  $2^2$  кількість факторів дорівнює двом ( $n = 2$ ) і кількість рівнів фіксування факторів також 2. При реалізації ПФЕ  $2^2$  потрібно виконати  $N = 2^2 = 4$  досліди.

Запишемо всі комбінації рівнів для ПФЕ  $2^2$  (двофакторний експеримент).

Припустимо, що вивчається вплив на вихід продукту у двох параметрів (факторів)  $X_1$  і  $X_2$ : відповідно температури в інтервалі 280–300 К і рН у діапазоні 4–6.

Позначимо  $x_1^-, x_2^-$  — нижній рівень факторів;  $x_1^+, x_2^+$  — верхній рівень факторів.

Тоді план ПФЕ  $2^2$  можна записати у вигляді табл. 6.1.

Таблиця 6.1

### ПЛАН ПФЕ $2^2$ У НАТУРАЛЬНИХ ЗМІННИХ

Номер дослід у $N$	Фактор $X_1$		Фактор $X_2$		Функція відгуку $y$
	Температура, К		рН		
	Значення	Позначення	Значення	Позначення	
1	280	$X_1^-$	4	$x_2^-$	$y_1$
2	300	$X_1^+$	4	$x_2^-$	$y_2$
3	280	$X_1^-$	6	$x_2^+$	$y_3$
4	300	$X_1^+$	6	$x_2^+$	$y_4$

Графічно ці чотири досліди можна подати на площині в координатах  $X_1$  та  $X_2$  точками, які відповідають тому чи іншому досліді (див. рис. 6.16).

Задавши нульову точку  $X_{i0}$  та інтервал варіювання  $\lambda_i$ , можна обчислити значення факторів у натуральній розмірності за такою формулою:

$$X_i^+ = X_{i0} + \lambda_i, \quad X_i^- = X_{i0} - \lambda_i. \quad (6.10)$$

Згідно з рівнянням (6.8) при переході від натуральних змінних до кодованих на верхньому рівні для обох факторів дістанемо:

$$x_1^+ = \frac{X_1^+ - X_{10}}{X_1^+ - X_{10}} = +1,$$

$$x_2^+ = \frac{X_2^+ - X_{20}}{X_2^+ - X_{20}} = +1;$$

на нижньому рівні:

$$x_1^- = \frac{X_1^- - X_{10}}{X_{10} - X_1^-} = -1,$$

$$x_2^- = \frac{X_2^- - X_{20}}{X_{20} - X_2^-} = -1.$$

Тоді ПФЕ, наведений у табл. 6.1, набере вигляду табл. 6.2.

Таку таблицю часто називають *матрицею планування*.

Таблиця 6.2

## ПЛАН ПФЕ $2^2$ У КОДОВАНИХ ЗМІННИХ

Номер дослід у $N$	Фактор у натуральному масштабі		Фактор у безрозмірному масштабі		Функція відгуку $y$
	$X_1$	$X_2$	$x_1$	$x_2$	
1	$x_1^-$	$x_2^-$	-1	-1	$y_1$
2	$x_1^+$	$x_2^-$	+1	-1	$y_2$
3	$x_1^-$	$x_2^+$	-1	+1	$y_3$
4	$x_1^+$	$x_2^+$	+1	+1	$y_4$

Кожний стовпець такої таблиці називають *вектором-стовпцем*, а кожний рядок — *вектором-рядком*. Таким чином, у табл. 6.2 є два вектори-стовпці незалежних змінних і один вектор-стовпець параметра оптимізації. Дані, наведені в табл. 6.2, можна зобразити графічно (рис. 6.17).

Знайдемо в області визначення факторів точку, що відповідає основному рівню, і проведемо через неї нові осі координат, паралельні осям натуральних значень факторів. Далі виберемо масштаби по нових осях так, щоб інтервал варіювання для кожного фактора дорівнював одиниці. Тоді умови проведення дослідів відповідатимуть вершинам квадрата, центром якого є основний рівень, а кожна сторона паралельна одній з осей координат і дорівнює двом інтервалам (див. рис. 6.15). Номери вершин квадрата відповідають номерам дослідів (див. табл. 6.2).

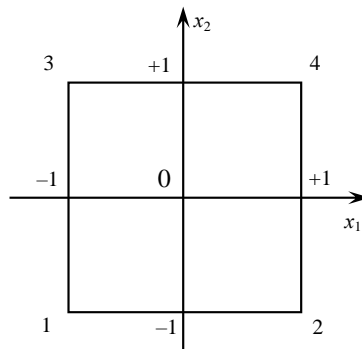


Рис. 6.17. Графічна інтерпретація ПФЕ  $2^2$   
(змінні подано в кодіваних значеннях)

При такому перетворенні змінних унаслідок зміни одиниць масштабу по осях координат (див. рис. 6.16 і 6.17) відбувається деформація досліджуваної поверхні відгуку, що виражається перетворенням прямокутника, утвореного точками експерименту в просторі натуральних змінних (див. рис. 6.16), у квадрат (див. рис. 6.17). Площа, обмежена квадратом, називається *областю експерименту*.

Завдяки такому перетворенню за результатами дослідів можна визначити коефіцієнти регресії для лінійної моделі:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2, \quad (6.11)$$

виконавши прості обчислення. Для цього підставимо в рівняння (6.11) значення  $x_1$  та  $x_2$  з табл. 6.2. У результаті дістанемо систему рівнянь, що пов'язують результати дослідів  $y_N$  зі значеннями коефіцієнтів регресії  $\beta_i$  ( $N$  — номер досліду;  $i$  — номер фактора):

$$\begin{aligned} y_1 &= \beta_0 + (-1)\beta_1 + (-1)\beta_2 = \beta_0 - \beta_1 - \beta_2, \\ y_2 &= \beta_0 + (+1)\beta_1 + (-1)\beta_2 = \beta_0 + \beta_1 - \beta_2, \\ y_3 &= \beta_0 + (-1)\beta_1 + (+1)\beta_2 = \beta_0 - \beta_1 + \beta_2, \\ y_4 &= \beta_0 + (+1)\beta_1 + (+1)\beta_2 = \beta_0 + \beta_1 + \beta_2. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Із цих чотирьох рівнянь неважко знайти невідомі коефіцієнти. Для цього рівняння алгебраїчно додають після множення на  $+1$  або  $(-1)$ .

Ці стовпці повністю відповідають плану ПФЕ  $2^2$  (стовпець для визначення  $\beta_1$  відповідає стовпцю  $u$  плані для  $x_1$ , відповідно для  $\beta_2$  — стовпцю для  $x_2$ ).

Для обчислення  $\beta_0$  достатньо додати всі чотири рівняння:

$$y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 4 \beta_0.$$

Для знаходження значення  $\beta_1$  необхідно змінити знаки на протилежні в рівняннях першому і третьому (згідно зі стовпцем  $x_1$  табл. 2), а далі рівняння підсумувати. У результаті дістанемо:

$$-y_1 + y_2 - y_3 + y_4 = 4 \beta_1.$$

Аналогічно, змінивши знаки на протилежні в рівняннях першому і другому (згідно зі стовпцем  $x_2$  табл. 6.2), після підсумовування дістанемо:

$$-y_1 - y_2 + y_3 + y_4 = 4 \beta_2.$$

Звідси для обчислення коефіцієнтів регресії дістанемо такі формули:

$$\begin{aligned} \beta_0 &= \frac{y_1 + y_2 + y_3 + y_4}{4}, \quad \beta_1 = \frac{-y_1 + y_2 - y_3 + y_4}{4}, \\ \beta_2 &= \frac{-y_1 - y_2 + y_3 + y_4}{4}. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Із чотирьох рівнянь (6.12) визначено тільки три параметри ( $\beta_0, \beta_1, \beta_2$ ). Проте в загальному випадку система з чотирьох рівнянь дає змогу визначити чотири невідомі. Отже, залишається ще один степінь вільності, яким можна скористатися для оцінювання взаємодії факторів  $x_1$  та  $x_2$ . Для цього необхідно, скориставшись правилами множення стовпців, дістати стовпець цих двох факторів. При обчисленні коефіцієнта, що відповідає ефекту взаємодії факторів, можна з новим вектором-стовпцем поводитись так само, як і з вектором-стовпцем будь-якого фактора.

Рівняння регресії, що враховує ефекти парних міжфакторних взаємодій, набирає вигляду:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2. \quad (6.14)$$

План ПФЕ  $2^2$  з урахуванням ефектів взаємодій факторів наведено в табл. 6.3.

Ефекти взаємодії факторів має фізичне пояснення. Наприклад, на хімічний процес впливають два фактори: температура і тиск. В області низьких температур



із підвищенням тиску зростає вихід продукту. Якщо в області високих температур ця закономірність порушується, то тоді, навпаки, необхідно зменшувати тиск при проведенні реакції. Таке явище є проявом ефекту взаємодії факторів.

Коефіцієнт  $\beta_{12}$  розраховується аналогічно (6.13) з урахуванням знаків стовпця  $x_1x_2$  табл. 6.3:

$$\beta_{12} = \frac{(+1)y_1 + (-1)y_2 + (-1)y_3 + (+1)y_4}{4} = \frac{y_1 - y_2 - y_3 + y_4}{4}. \quad (6.15)$$

У табл. 6.3 є ще один вектор–стовпець  $x_0$ . Значення його для всіх дослідів береться +1. Він не несе жодної інформації про змінні і введений у табл. 6.3. лише для зручності розрахунків.

Буквою  $\beta$  позначено істинні значення коефіцієнтів регресії. Проте при вивченні форми поверхні відгуку можливі експериментальні похибки (дія в системі неврахованих факторів, похибки вимірювання), тому на практиці знаходимо не  $y_N$ , а лише деяку його оцінку  $y_N \pm \Delta y_N$ . Через це коефіцієнти регресії, розраховані за наведеними формулами, також визначаються з деякою похибкою. У результаті експерименту знаходимо не істинні значення коефіцієнтів регресії  $\beta_i$ , а лише деякі їхні оцінки  $b_i$  ( $b_i \rightarrow \beta_i$ ).

Таблиця 6.3

### ПЛАН ПФЕ $2^2$ З УРАХУВАННЯМ ВЗАЄМОДІЇ ФАКТОРІВ

Номер дослідів $N$	$x_0$	Кодовані змінні		$x_1 x_2$	$y_N$
		$x_1$	$x_2$		
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	$y_4$
	$\beta_0$	$\beta_1$	$\beta_2$	$\beta_{12}$	

Тоді рівняння регресії, здобуте в результаті ПФЕ  $2^2$ , набере вигляду:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2. \quad (6.16)$$

де замість істинних значень  $\beta_i$  записано їхні експериментальні оцінки  $b_i$ .

Коефіцієнти при незалежних змінних вказують на вагомість впливу факторів на параметр оптимізації. Чим більше значення коефіцієнта, тим більший вплив фактора. Якщо коефіцієнт має знак «плюс», то зі збільшенням значення фактора параметр оптимізації збільшується, а якщо «мінус», то зменшується.

Величина коефіцієнта відповідає внеску даного фактора у значення параметра оптимізації під час переходу фактора з нульового рівня на верхній або нижній.

Наведені раніше формули розрахунку коефіцієнтів регресії (6.13) і (6.15) можна подати в загальному вигляді:

$$b_i = \frac{\sum x_{ik} y_k}{N}, \quad (6.17)$$

$$b_{ij} = \frac{\sum x_{ik} x_{jk} y_k}{N}, \quad (6.18)$$

де  $x_{ik}$  — значення змінної у відповідному стовпці плану експерименту ( $x_{iN} = \pm 1$ );  $y_k$  — результат  $N$ -го дослідів;  $N$  — загальна кількість дослідів;  $k$  — номер варіанта дослідів;  $i$  — номер фактора;  $j$  — номер фактора, відмінний від  $i$ .

Якщо ввести в таблицю планування стовпець для фіктивної змінної  $x_0 = 1$ , то формула (6.17) поширюється і на розрахунок значень коефіцієнта регресії

$$b_0 = \frac{\sum y_k}{N},$$

а відповідний стовпець у табл. 6.3 складатиметься тільки з +1.

У плані ПФЕ  $2^2$  (див. табл. 6.3) стовпці  $x_1$  та  $x_2$  утворюють власне план експерименту, визначаючи рівні факторів у конкретних дослідів. Що ж до стовпців  $x_0$  та  $x_1 x_2$ , то вони слугують тільки для розрахунків коефіцієнтів регресії  $b_0$  і  $b_{12}$  за рівняннями (6.17) і (6.18).

У спеціальній літературі зазвичай значення +1 та -1 для  $x_i$  замінюють відповідними знаками «+» або «-».

При плануванні експерименту допоміжні стовпці, як правило, виписують, подаючи план ПФЕ  $2^2$  у скороченому вигляді (табл. 6.4).

Таблиця 6.4

### СКОРОЧЕНИЙ ПЛАН ПФЕ $2^2$

Номер дослідів $k$	$x_1$	$x_2$
1	-	-
2	+	-
3	-	+
4	+	+

Якщо для двох факторів усі можливі комбінації рівнів легко знайти прямим перебором (або просто запам'ятати), то зі зростанням кількості факторів доводиться використовувати інший прийом побудови планів ПФЕ. Існує кілька способів переходу від планів ПФЕ меншої розмірності до планів більшої розмірності. Розглянемо два з них.

1. При додаванні нового фактора кожна комбінація рівнів початкового плану трапляється двічі в поєднанні з нижнім і верхнім рівнями нового фактора. Відповідну картину при переході від плану ПФЕ  $2^2$  до ПФЕ  $2^3$  ілюструє табл. 6.5. План двофакторного експерименту подвоюємо і перші 4 отримані з 8 дослідів проводимо на нижньому рівні (-1), а решту 4 — на верхньому (+1).

2. Перемножуємо стовпці вихідного плану по рядках з урахуванням знаків, а далі повторюємо вихідний план і перемножуємо стовпці по рядках, але змінюємо знак добутку на протилежний (див. табл. 6.5).

Таблиця 6.5

## ПЛАНИ ПФЕ 2<sup>3</sup>

Номер досліду	x <sub>1</sub>	x <sub>2</sub>	x <sub>3</sub>	Номер досліду	x <sub>1</sub>	x <sub>2</sub>	x <sub>3</sub>
1	-	-	-	1	-	-	+
2	+	-	-	2	+	-	-
3	-	+	-	3	-	+	-
4	+	+	-	4	+	+	+
5	-	-	+	5	-	-	-
6	+	-	+	6	+	-	+
7	-	+	+	7	-	+	+
8	+	+	+	8	+	+	-

Поява третього стовпця x<sub>3</sub> у ПФЕ 2<sup>3</sup> спричинюється до утворення чотирьох допоміжних стовпців (x<sub>1</sub>x<sub>2</sub>, x<sub>2</sub>x<sub>3</sub>, x<sub>1</sub>x<sub>3</sub>, x<sub>1</sub>x<sub>2</sub>x<sub>3</sub>).

За наслідками поставленого за цим планом експерименту можна обчислити вісім коефіцієнтів рівняння регресії

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

Практично кількість

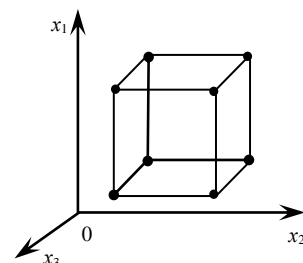


Рис. 6.18. Графічна інтерпретація ПФЕ 2<sup>3</sup>

коефіцієнтів має бути дещо меншою, бо інакше унеможливується статистичний аналіз адекватності рівняння регресії.

За аналогією ПФЕ 2<sup>2</sup> можна розглядати ПФЕ 2<sup>3</sup>. Він задається координатами вершин куба (рис. 6.18). На жаль, картину для більш як трьох факторів зобразити неможливо, але фігура, що задає область експерименту в багатовимірному просторі, являє собою аналог куба — гіперкуб.

### Особливості плану ПФЕ 2<sup>2</sup>

Зауважимо, що у табл. 6.3 маємо чотири стовпці, які містять різні значення, і коли б ми додали стовпці, що відповідають за значення квадратів факторів, то ці значення дорівнювали б значенням у стовпці x<sub>0</sub>. Це не дає змоги виконати окремі розрахунки для визначення коефіцієнтів при квадратах факторів, і тому плани ПФЕ 2<sup>2</sup> називають *планами першого порядку*.

Кількість стовпців, рядків, а також кількість дослідів одна й та сама, що дає змогу обчислювати всі коефіцієнти лінійного полінома, зокрема й коефіцієнти, які враховують взаємодію факторів (наприклад, x<sub>1</sub>x<sub>2</sub>).

### Властивості ПФЕ типу 2<sup>n</sup>

*Симетричність матриці планування експерименту відносно центра експерименту.* Алгебраїчна сума елементів вектора-стовпця кожного фактора дорівнює нулю:

$$\sum_{i=1}^N x_{ik} = 0.$$

*Умова нормування.* Сума квадратів елементів кожного стовпця дорівнює кількості дослідів:

$$\sum_{i=1}^N x_{ik}^2 = N.$$

*Ортогональність матриці планування.* Скалярний добуток двох векторів-стовпців дорівнює нулю для будь-яких двох різних факторів із загальної кількості  $P$ :

$$\sum_{i=1}^N x_{ki}x_{mi} = 0, k \neq m, k, m = 1, 2, \dots, P. \quad (6.20)$$

*Рототабельність.* Точки в матриці планування добирають так, щоб точність значень параметра оптимізації була однакою на рівних відстанях від центра експерименту і не залежала від напрямку.

План ПФЕ  $2^n$  може бути насиченим, якщо кількість членів рівняння регресії дорівнює кількості дослідів, тобто  $t + 1 = N$ , або *ненасиченим* при  $t + 1 < N$ . План ПФЕ  $2^n$  є також рототабельним, оскільки всі точки плану лежать на колі (або сфері, гіперсфері) радіуса  $r = \sqrt{n}$ , центр якого збігається з центром плану.

Таким чином, насичений план — це план ПФЕ з мінімально можливою кількістю дослідів. Такі плани мають назву *симплекс-планів* (рис. 6.19). Симплекс-плани зазвичай використовуються на стадії попереднього дослідження.

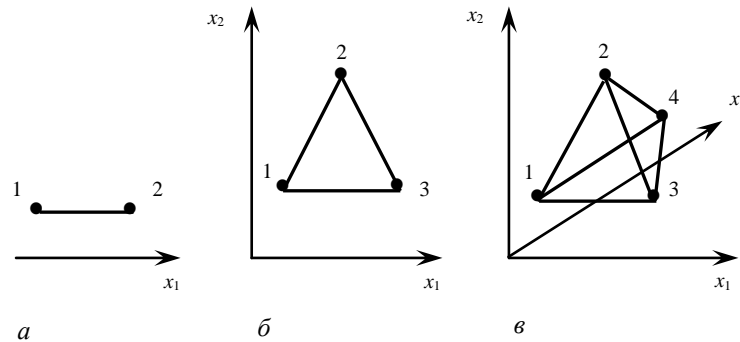


Рис. 6.19. Симплекс-план для  $n = 1, N = 2$  (а);  $n = 2, N = 3$  (б);  $n = 3, N = 4$  (в)

Симплекс-план називають *правильним*, якщо відстань між кожними двома його точками однакова.

### 6.5.2. РОЗРАХУНОК КОЕФІЦІЄНТІВ РІВНЯННЯ РЕГРЕСІЇ

Після реалізації експериментів згідно з планом ПФЕ виконують розрахунок коефіцієнтів рівняння регресії.

Для розрахунку коефіцієнтів рівняння регресії використовують формули (6.17) і (6.18). Якщо досліди ставляться згідно з планом ПФЕ  $2^n$  результати  $2^n$  дослідів уміщуються у відповідний вектор-стовпець  $y_N$ .

Обчислення виконано правильно, якщо виконується така рівність:

$$\sum_{i=1}^N y_i^2 - N \sum_{i=1}^n b_i^2 = 0. \quad (6.21)$$

Отже, для виконання перевірки потрібно обчислити суму квадратів усіх результатів дослідів  $y_N$  і переконатися, що вона дорівнює сумі квадратів усіх коефіцієнтів регресії, помноженій на кількість дослідів у плані факторного експерименту.

Розглянемо приклад.

Нехай у досліді вивчали вплив трьох факторів  $x_1$ ,  $x_2$  та  $x_3$  на вихід продукту хімічного процесу  $y_N$ . Кожний варіант досліді було виконано тричі.

План експерименту, з виходу  $y_{Nn}$  (де  $n$  — номер повторення) і середні значення виходу  $y_{Ncp}$  для цих трьох повторень наведено в табл. 6.6.

Таблиця 6.6

### ПЛАН І РЕЗУЛЬТАТИ ПФЕ $2^3$

	$X_{i,0}$	$\lambda_i$	$x_i$	$x_i$
$X_1$	400	100	500	300
$X_2$	10	5	15	5
$X_3$	6	2	8	4

N	Основні стовпці			Допоміжні стовпці				Вихід процесу			
	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_1$ $x_2$	$x_2$ $x_3$	$x_1$ $x_2$ $x_3$	$x_1$ $x_2$ $x_3$	$y_{N1}$	$Y_N$ 2	$Y_N$ 3	$\bar{y}_N$
1	-	-	-	+	+	+	-	70	75	74	73
2	+	-	-	-	+	-	+	67	72	67	69
3	-	+	-	-	-	+	+	64	60	62	62
4	+	+	-	+	-	-	-	99	94	86	93
5	-	-	+	+	-	-	+	98	10 8	10 3	10 3
6	+	-	+	-	-	+	-	99	10 3	93	98
7	-	+	+	-	+	-	-	93	81	88	87
8	+	+	+	+	+	+	+	10 5	10 6	11 7	10 9

Коефіцієнти регресії за результатами цієї таблиці можна розрахувати в такий спосіб.

Згідно з формулами (6.17) і (6.18) кожний коефіцієнт регресії визначається підсумовуванням результатів дослідів  $\bar{y}_N$  зі знаками векторів-стовпців відповідних факторів у плані експерименту.

Такі розрахунки зручно виконувати в середовищі MS EXCEL (рис. 6.20).

Після розрахунку коефіцієнтів рівняння регресії набере такого вигляду:

$$y = 86,83 + 5,5x_1 + 1,08x_2 + 12,67x_3 + 7,75x_1x_2 - 1,17x_1x_3 - 2,25x_2x_3 - 1,08x_1x_2x_3. \quad (6.22)$$

Такі поліноми описують поверхню відгуку, що проходить точно через усі експериментальні точки, за допомогою яких визначаються коефіцієнти. Постає

запитання: за якими критерієм можна судити про припустимість використання неповного квадратичного полінома, побудованого на основі планів ПФЕ  $2^n$ ?

З повного факторного експерименту не можна дістати інформацію про квадратичні члени. Справді, побудова стовпця для квадрата фактора приводить до значень  $+1$ . У цьому разі розраховане значення коефіцієнта  $b_0$  є складеним. Символічно це записують так:

$$b_0 \rightarrow \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_{jj}$$

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_1x_2$	$x_2x_3$	$x_1x_3$	$x_1x_2x_3$	$y_{k1}$	$y_{k2}$	$y_{k3}$	$y_{kcp}$		
2													
3													
4	-1	-1,0	-1	1	1	1	-1	70	75	74	73		
5	1	-1,0	-1	-1	1	-1	1	67	72	67	69		
6	-1	1,0	-1	-1	1	1	1	64	60	62	62		
7	1	1,0	-1	1	-1	-1	-1	99	94	86	93		
8	-1	-1,0	1	1	-1	-1	1	98	108	103	103		
9	1	-1,0	1	-1	-1	1	-1	99	103	93	98		
10	-1	1,0	1	-1	1	-1	-1	93	81	88	87		
11	1	1,0	1	1	1	1	1	105	106	117	109		
12													
13													
14													
15													
16													
17													
18													
19													
20													
21													
22													
23													
24													
25													
26													

Рис. 6.20. Розрахунки коефіцієнтів рівняння регресії

Грецькими літерами в статистиці позначають невідомі істинні значення — у нашому випадку вільного члена та квадратичних коефіцієнтів.

У такому разі кажуть, що оцінка вільного члена мішана, а оцінки лінійних коефіцієнтів та ефекту взаємодії не мішані.

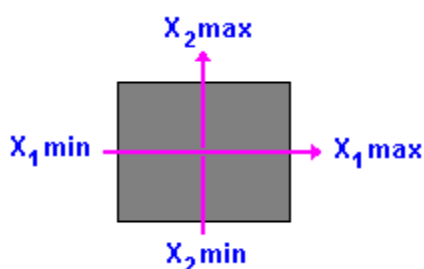
Можливі випадки, коли реальна поверхня відгуку

визначається поліномами другого або вищого порядків. Тоді поверхня функції відгуку, побудована за планом ПФЕ, збігаючись із реальною поверхнею в граничних точках, може відрізнятись в інших точках факторного простору.

Однією з ознак незадовільної апроксимації поліномами за планом ПФЕ є розбіжність результатів функції відгуку з реальною функцією в центральній точці плану.

При багатофакторному експерименті можливі випадки, коли у насправді функція відгуку залежить від квадратів факторів, в яких коефіцієнти мають різні знаки, наприклад для «сідлоподібної» по-верхні. При цьому, незважаючи на те, що ця поверхня явно нелінійна, результат досліду в центральній точці може бути близьким до результату, здобутого за неповним квадратичним поліномом плану ПФЕ. Проте розбіжності виникатимуть у всіх інших точках плану експерименту. У таких випадках бажано перейти до плану ПФЕ з більшою кількістю рівнів варіювання факторів, наприклад до планів із варіюванням факторів на трьох рівнях, тобто до планів ПФЕ  $3^n$ . Такі плани мають назву *планів другого порядку* і дають змогу сформулювати функцію відгуку у вигляді повного квадратичного полінома, що містить більшу кількість членів, ніж неповний квадратичний поліном, сформований за планами першого порядку. З математики відомо, що для відшукування квадратичної залежності кожний фактор має фіксуватися не менш як на трьох рівнях, а це вимагає проведення більшої кількості дослідів.

У вигляді прикладу розглянемо вплив температури ( $x_1$ ), та часу перебування ( $x_2$ ), на вихід продукту ( $y_2$ ). Математичну модель отримуємо у виді полінома 1-ї міри лінійного рівняння регресії –  $y = a + b_1 x_1 + b_2 x_2$ . Для цього використовуємо плани 1-го порядку, що будуються наступним чином. Обираємо центр області, що досліджується (центр плану), й у нього переноситься початок координат. Задаються мінімальні (min) та максимальні (max) значення вхідних параметрів  $x_1$  та  $x_2$ . Складаємо план експерименту (рис. 1.3а). При цьому кожний фактор приймає лише два значення - варіюється на двох рівнях (верхньому та нижньому).



На наступному етапі перемінні кодуються. При цьому координати центру плану прирівнюються до нуля, а інтервали варіювання приймають за одиницю. Кодовані змінні значно полегшують обробку результатів дослідів, що в даному випадку проводиться у стандартній формі, не залежно від конкретних умов завдання.

$X_1$	$X_2$	$Y$
+1	+1	$Y_1$
-	+	$Y_2$
+	-	$Y_3$
-	-	$Y_4$

Матриця планування для кодованих змінних має вид (рис. 1.3б)

Рис. 1. 3а Рис. 1. 3б

На практиці для скорочування запису часто замість "+1" та "-1" просто пишуть "+", "-". план, що розглядається, побудован так, що кожний фактор варіюється на двох рівнях, причому у опитах перебираються всі можливі комбінації двох рівней факторів. Такий план називають планом повного факторного експерименту на двох рівнях. Визначимо значення коефіцієнтів по наступним формулам :

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j \quad b_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_{ji} y_j ; \quad i = 1, 2, 3, \dots, n$$

Активний експеримент дозволяє за рахунок цілеспрямованої зміни вхідних параметрів отримувати необхідний обсяг інформації при істотно меншому числі опитів, чим при пасивному експерименті .

При визначення реакції об'єкту на стандартні обурення на вхід подається який-то стандартний сигнал - одиничний імпульс, східчаста або синусоїдальна зміна вхідного параметра рис. 1.4.

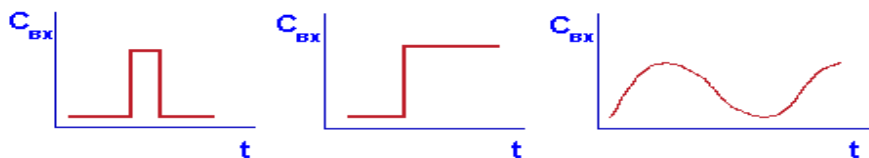


Рис. 1. 4  
де t – час;  
 $C_{вх}$  – концентрація вхідного компонента

Дослідження об'єкту при нанесенні стандартних обурень помітно полегшує обробку інформації ,що одержується . Цим способом в основному користуються при вивченні динаміки ( перехідних характеристик ) об'єкту, при визначенні гідродинамічних обставин та ін.

При використанні емпіричних засобів математичний опис складається

наступним чином :

1. Проводяться експерименти засобом "чорного ящика ", т. є. вивчається реакція об'єкту на різноманітні обурення.
2. Здійснюється статистична обробка результатів та пошук найкращий форми апроксимації одержаних даних.
3. Будується математичний опис.

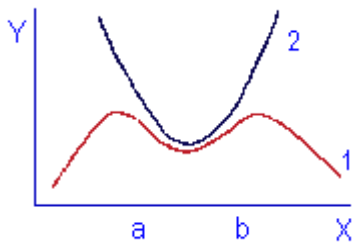
Єдиним критерієм застосування одержаного математичного опису є найвелика простота рівняння при хорошій апроксимації експериментальних даних.

### Загальна оцінка експериментальних методів.

**Позитивні сторони:** простота описання доступність одержання моделей можливість побудови моделі за відсутності теорії процесу.

**Недоліки :** неможливість застосування моделі для режимів, для яких не проводилися вимірювання; неможливість застосування моделі при переході до інших установок; неможливість екстраполяції результатів.

#### Приклад



Модель будувалася для значень інтервалу (а в) Одержана квадратична залежність 2. Видно, що на інтервалі (а в) модель добре описує процес, протікаючий в оригіналі, експериментальна залежність  $Y = f(x)$  відображається кривою 1. При виході величини значення  $x$  за межі відрізка (а, в)

модель (крива 2) дає чималі похибки.

Емпіричні методи корисні і застосовуються для вивчення складних систем, якщо їх структура не змінюється в часу, теорія процесу невідома і (або ) коли необхідно швидко одержати модель без дослідження процесу.

#### 1.5.2. Експериментально - аналітичний засіб

При використанні цього методу дослідник намагається визначити фізичну суттєвість явищ, протікаючих в об'єкті. Використовується декомпозиція складного явища, т. є. на основі аналізу визначаються більш прості, елементарні процеси, що можна досліджувати більш доступними способами. Після аналізу впливу елементарних процесів на процес в цілому, несуттєві фактори відкидаються, і вибирається отой елементарний процес, що виявляє найбільш істотний вплив.

Після цього складається математичний опис, причому не в формі полінома, а у вигляді залежності, що характерна для наданого елементарного процесу. Вплив інших елементарних процесів враховується зміною коефіцієнтів, входивших в цю залежність.

Для прикладу розглянемо побудову моделі для опису процесу переносу тепла в



нерухомому зернистому шарі в аксіальному напрямі .



Процес переносу тепла здійснюється за рахунок наступних процесів :

- 1 – конвекція
- 2 – теплопровідність
- 3 – випромінювання

При температурах менш 800 К та малих лінійних швидкостях потоку газу перенос тепла, в основному, визначається теплопровідністю.

Цей процес описується рівнянням Фур'є:

$$q = -\lambda * dT/dx \quad (1.4)$$

Однак користуватися рівнянням (1.4) ще не можна, так як в ньому не враховані 1 та 3 елементарні що складають процес переносу тепла. Для їх врахування замість дійсного значення  $\lambda$  вводиться деяке "ефективне" значення  $\lambda_{\text{еф}}$ , що визначається експериментально, тоді рівняння (1.4) приймає вид:

$$q = -\lambda_{\text{еф}} * dT/dx \quad (1.5)$$

Рівняння (1.5) є експериментально-аналітичною моделлю процесу переносу тепла в нерухомому зернистому шарі. Цілком очевидно, що  $\lambda_{\text{еф}}$  не є фізичною константою, а залежить від умов експериментів, при яких вона була одержана від масштабів установки.

**Позитивні сторони:** - краще описує нелінійні властивості об'єкту моделювання, так як дозволяє більш надійно вибрати вигляд рівняння.

**Недоліки:** - ефективні коефіцієнти змінюються у залежності від умови проведення опитів, тому експериментально – аналітична модель справедлива лише в тому інтервалі, у якому вироблявся експеримент.

Зіставимо емпіричний та експериментально-аналітичний засоби побудови математичних моделей. Експериментально-аналітичний засіб має перевагу перед чисто експериментальним в тому, що він описує теорію процесу.

Для врахування впливу явищ, не обчислених при складанні моделі, вводяться ефективні коефіцієнти. В першому нерухомому і експеримент необхідний для одержання моделі, в другому - для визначення коефіцієнтів моделі.

### 1. 5. 3. Теоретичний метод

Цей метод припускає складання математичного опису на основі детального вивчення та глибокого розуміння фізичних та хімічних закономірностей процесів, протікаючих в ньому. Складений на основі цього засобу математичний опис дає можливість з великою точністю прогнозувати результати протікання процесу у заданих нами умовах.

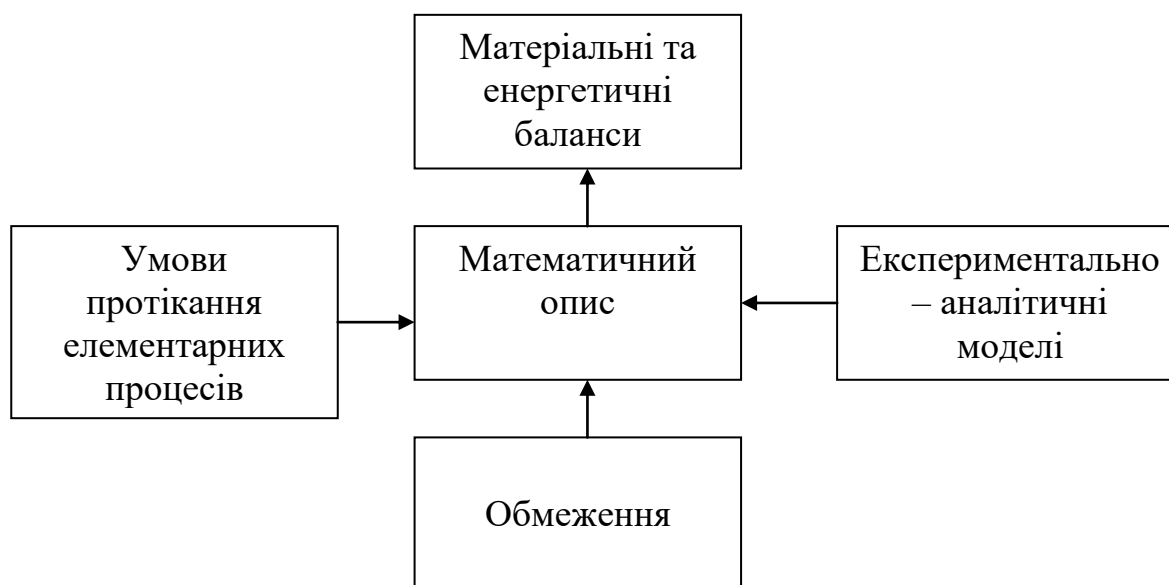
Теоретичний метод - найбільш надійний спосіб складання математичного опису. Математичний опис об'єкту складають такі частини (рис. 1. 5 )

Матеріальні та енергетичні баланси складаються на основі закону збереження енергії та маси :

$$\text{“прихід”} - \text{“витрата”} = \text{“накопичення”}.$$

Обмеження можуть бути зумовлені технологічними, технічними або економічними причинами. Експериментально-аналітичні залежності - моделі

елементарних процесів, які входять у складний процес, всілякі коефіцієнти та їх залежності від параметрів.



*Рис. 1. 5*

**Позитивні сторони:** можливість широкої екстраполяції розділення складного процесу на окремі, та дослідження процесу по частинам полегшує складання моделі процесу в цілому, можливість вивчення процесу на різних рівнях.

**Недоліки:** трудність утворення надійної теорії складних процесів неможливість використання при невідомому механізмі процесу великої витрати часу.

#### **1. 5. 4. Зіставлення методів побудови математичних моделей**

Вибір методу залежить від важливості та міри важкості процесу. Для дорідних багатотонажних виробництв необхідні хороші моделі, тут застосовують теоретичний засіб. Цим же методом користуються при утворенні принципово нових технологічних процесів.

Для дрібних виробництв зі складним характером процесу використовують експериментальний метод. На практиці, як правило, використовується разумне поєднання всіх методів.

#### **1. 5. 5. Вірогідність та простота моделі**

Збудована одним з розглянутих вище методів математична модель одночасно повинна задовольняти вимогам вірогідності та простоти.

Достовірна модель, яка правильно описує поведження об'єкту, може опинитися надто складної. Складність моделі визначається, як правило, складністю об'єкту, що досліджується та мірою точності, що пред'являє практикою до результатів розрахунку. Необхідно, щоб ця складність не переважала деякої межі, що визначається можливостями існуючого математичного апарату. Отже, модель повинна бути достатньо простою у математичному відношенні, щоб її можна було вирішити наявними засобами та коштами.

### ***1. 5. 6. Рішення рівнянь математичного опису***

При рішенні рівнянь математичного опису з використанням ЕОМ необхідно утворення моделюючого алгоритму ("машинної" моделі). Моделюючий алгоритм є перетвореним математичним описом та становить послідовність арифметичних та логічних операцій рішення, записану у вигляді програми.

При розробці такого алгоритму раніше всього необхідно обрати засіб рішення рівнянь математичного опису – аналітичний чи численний. Треба пам'ятати про необхідність перевірки точності обраного засобу розрахунку.

Інколи із-за обмеженості існуючих засобів приходиться спрощувати математичний опис. В цьому випадку необхідна оцінка внесеної при цьому похибки

### ***1. 5. 7. Перевірка адекватності та ідентифікація моделі***

Перевірка адекватності - це оцінка вірогідності збудованої математичної моделі, дослідження її відповідності об'єкту, що вивчається.

Перевірка адекватності здійснюється на тестових експериментах шляхом рівняння результатів розрахунку по моделі з результатами експерименту на об'єкті, що вивчає при однакових умовах. Це дозволяє установити межі застосовності побудованої моделі.

Основним етапом в побудові адекватної моделі є ідентифікація математичного опису об'єкту. Задачею ідентифікації є визначення виду моделі та знаходження невідомих її параметрів - окремих констант або їх комплексів, що характеризують властивості об'єкту. Ідентифікація можлива при наявності необхідної експериментальної інформації про об'єкт, що вивчає.

### ***1. 5. 8. Вибір математичної моделі***

Задача вибору моделі виникає при наявності для одного й отого ж об'єкту класу моделей. Вибір моделі є одним з найважливіших етапів моделювання. В кінцевому рахунку перевага одній чи іншій моделі визначає критерій практики, що розуміє у широкому змісті.

При виборі моделі треба сходити з розумного компромісу між важкістю моделі, повнотою характеристик, що одержують з її допомогою об'єкту та точністю цих характеристик. Так, якщо модель недостатньо точна, оте її треба доповнити, уточнити введенням нових факторів може також опинитися, що надана модель занадто важка та оті ж результати можна отримати за допомогою більш простої моделі.

## 2. МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІЧНИХ РЕАКТОРІВ

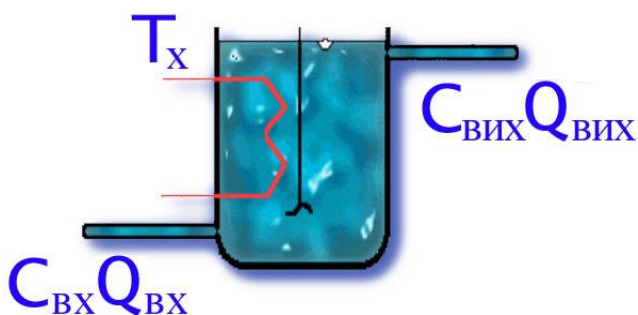
На основі математичних моделей хімічних реакторів вирішуються наступні завдання :

- вибір конструкції та розмірів реакторів;
- визначення оптимальних режимів роботи;
- дослідження і оптимізація процесів та реакторів;
- розробка систем автоматичного управління.

Нижче будуть розглянуті математичних моделей реакторів, що найбільш часто використовуються на практиці.

### 2. 1. Модель реактора ідеального змішування

Особливістю моделі реактора ідеального змішування (РІЗ) є те, що концентрація і температура однакові по всьому об'єму реактора та дорівнює відповідним значенням на виході. Схематично модель РІЗ приведена на **рис. 2.1**



Прийmemo наступні позначення:

- $T_x$  - температура холодогента
- $Q_i$  - об'ємна витрата;
- $C_i$  - концентрація компоненту;
- $T_i$  - температура;
- Індекси:** вх. - вхід, вих.- вихід

**Рис.2.1**

Оскільки в РІЗ змішування діється миттєво по всьому реактору, то  $C_{\text{вих}}=C$ ,  $T_{\text{вих}} = T$ . Для спрощення також прийmemo, що  $Q_{\text{вх}} = Q_{\text{вих}} = Q$ .

Позначимо :  $V$  - об'єм реактору ;  $S$  - поверхня теплообміну ;  $W$  - швидкість хімічного перетворення.

У реакторі ідеального змішування зміна кількості кожної речовини може відбуватися не тільки в результаті хімічної реакції, але і в результаті масообміну. Тоді, зміна кількості речовини за одиницю часу у відкритій системі, тобто похідна, дорівнює:

$$\frac{dn_i}{dt} = \Delta n_{i,m} \pm \Delta n_{i,x}$$

Де  $\Delta n_{i,m}$  та  $\Delta n_{i,x}$  зміна кількості і-го речовини в результаті масопереносу і в результаті хімічної реакції. Швидкістю хімічної реакції по деякої речовині у відкритій системі називається зміна кількості цієї речовини тільки в результаті хімічної реакції в одиницю часу в одиниці об'єму реакційної суміші. Отже

$$W_i = \pm \frac{1}{V} \Delta n_{i,x} = \frac{1}{V} \left( \frac{dn_i}{dt} - \Delta n_{i,m} \right)$$

де  $V$  - об'єм реакційної суміші.

Матеріальний баланс записується на основі закону збереження кількості речовини :

$$W = -\frac{\partial C}{\partial t} + (Q \cdot C_{ВХ} - Q \cdot C_{ВИХ}) / V$$

$$Q \cdot C_{ВХ} - Q \cdot C_{ВИХ} - V \cdot W = V \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.1)$$

Перетворюємо :  $Q \cdot (C_{ВХ} - C_{ВИХ}) - V \cdot W = V \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.2)$

Рівняння (2.2) стає рівнянням *матеріального балансу* РІЗ.

Енергетичний баланс записується на основі закону збереження енергії :

$$QC_p \rho T_{ex} - QC_p \rho T_{вих} + VW(-\Delta H) - \alpha S(T - T_x) = VC_a \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.3)$$

де  $C_p$  - теплоємність реакційної суміші;  $\rho$  - густина реакційної суміші;

$\alpha$  - коефіцієнт теплопередачі;  $S$  - поверхня теплообміну;

$C_a$  - усереднена об'ємна теплоємність апарату.

$$C_A = C_R \cdot X_R \cdot \rho_R + C_P \cdot X_P \cdot \rho_P + C_K \cdot X_K \cdot \rho_K$$

де  $X_R, X_P, X_K$  - частка загального об'єму, що займається внутрішніми конструкціями, реакційною середою й каталізатором, відповідно;

$C_R, C_P, C_K$  - теплоємності конструкції реактору, реакційної середи та каталізатора;

$\rho_R, \rho_P, \rho_K$  - густина матеріалу реактора, реакційного середовища, та каталізатору.

Перетворюємо рівняння (2.3)

### КОНЕЦ ЛЕКЦІЙ 8.04.2014

$$QC_p \rho (T_{ex} - T_{вих}) + VW(-\Delta H) - \alpha S(T - T_x) = VC_a \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.4)$$

Рівняння (2.4) є рівнянням *теплого балансу* РІЗ.

#### **Рівняння кінетики.**

В загальному виді швидкість реакції визначається як функція складу та температури реакційної суміші :

$$W = F(C, T) \quad (2.5)$$

де:

$C$  - вектор концентрацій,  $T$  - температура;

а) проста реакція :

$$W = kf(C);$$

де:  $k$  - константа швидкості реакції, що визначається по рівнянню Арреніуса :

$$k = k_0 * e^{-E/RT}$$

де:  $k_0$  - предекспонента;  $E$  - енергія активації;

в) оборотна реакція : \_ \_

$$W = k_1 f_1(C) - k_2 f_2(C)$$

де:  $k_1$  - константа швидкості прямої реакції,  $k_2$  - константа швидкості зворотної реакції.

#### **Початкові умови.**

Початкові умови визначають поля температур та концентрацій в початковий момент часу, що, взагалі кажучи, може бути обрано довільно.

$$t = 0; C = C_{поч}; T = T_{поч}; \quad (2.6)$$

### Обмеження.

Визначають діапазон параметрів, в яких працює реактор.

$$\begin{aligned} T_{\min} < T < T_{\max} & \quad (T_{\min} \text{ і } T_{\max} - \text{робочий діапазон температур}) \\ C_{\text{вх min}} < C_{\text{вх}} < C_{\text{вх max}} & \quad (C_{\text{вх min}} \text{ і } C_{\text{вх max}} - \text{робочий діапазон вхідних концентрацій}) \\ Q_{\min} < Q < Q_{\max} & \quad (Q_{\min} \text{ і } Q_{\max} - \text{робочий діапазон об'ємної витрати}) \end{aligned}$$

### Модель РІЗ для опису стаціонарного режиму

Стаціонарний режим характеризується значеннями параметрів, які установились, тому для його опису можна користуватися статичною моделлю РІЗ, в якій складові, що враховують зміну речовини і тепла в часу (праві частини рівнянь) дорівнюють нулю.

$$\frac{dC}{dt} = 0; \quad \frac{dT}{dt} = 0;$$

Тоді рівняння балансів приймуть такий вигляд:

матеріальний баланс :

$$Q \cdot (C_{\text{вх}} - C) - V \cdot W = 0 \quad (2.7)$$

енергетичний баланс:

$$Q \cdot C_p \cdot \rho \cdot (T_{\text{вх}} - T) + V \cdot W \cdot (-\Delta H) - \alpha S (T - T_x) = 0 \quad (2.8)$$

Таким чином, модель РІЗ становить систему алгебраїчних рівнянь.

### Модель РІЗ при перебігу деяких реакцій

В цьому випадку матеріальний баланс - це система рівнянь, кількість яких дорівнює кількості реагуючих компонентів.

$$V \frac{\partial C_1}{\partial t} = Q \cdot (C_{1\text{вх}} - C_1) - V \cdot W_1$$

.....  
.....  
.....

$$V \frac{\partial C_n}{\partial t} = Q \cdot (C_{n\text{вх}} - C_n) - V \cdot W_n$$

Якщо речовина бере участь в декількох реакціях, то швидкість її зміни буде дорівнювати сумі швидкостей реакцій, в яких бере участь дана речовина. Рівняння енергетичного балансу тільки одне. Виділення тепла в результаті перебігу хімічних реакцій розраховується як сума добутку швидкостей реакцій на тепловий ефект відповідної реакції.

$$C_A V \frac{\partial T}{\partial t} = Q C_p \rho (T_{\text{вх}} - T) + V \sum \{W_i (-\Delta H_i)\} - \alpha S (T - T_x)$$

Рівняння кінетики:  $\bar{W}_1 = k_1 \cdot f_1(C_1) \dots W_n = k_n \cdot f_n(C)$

## Дослідження моделі РІЗ

Поводження об'єкту визначається сукупністю значень параметрів, які входять у математичний опис. Проведемо класифікацію параметрів моделі РІЗ.

Вхідні параметри :

– технологічні :  $T_{\text{вх}}, C_{\text{вх}}, Q_{\text{вх}}, T_x^*$  ;

– конструктивні:  $V, S^*$  ;

– фізичні:  $a, C_p, \rho, C_A$  ;

– параметри, які характеризують реакцію:  $(-\Delta H), E$ .

Вихідні параметри :

– технологічні:  $T_{\text{вих}}, C$ ;

– час:  $t$ .

Для знаходження всього трьох вихідних параметрів необхідно задати 12 вхідних параметрів. Для спрощення моделі і скорочування кількості параметрів застосовують запис рівнянь моделі в безрозмірній формі. Вводиться ряд безрозмірних параметрів (табл. 2.1).

Таблиця 2. 1

Безрозмірні	Розмірні	Збільшення
Ступінь перетворення $X = (C_0 - C)/C_0$	Концентрація $C = (1 - X) \cdot C_0$	$dC = -C_0 dx$
Час $t' = t / \tau$	Час $t = \tau \cdot t'$	$dt = \tau dt'$
Температура $\theta = (T - T_0)/(b \cdot T_0)$	Температура $T = T_0 \cdot (1 + b\theta)$	$dT = b \cdot T_0 d\theta$
Швидкість реакції $\bar{W} = W \cdot \tau / C_0$	Швидкість реакції $W = \bar{W} \cdot C_0 / \tau$	
Константа швидкості реакції $\bar{K} = K \cdot \tau / C_0^{n-1}$	Константа швидкості реакції $K = \bar{K} \cdot C_0^{-(n-1)} / \tau$	

Внаслідок одержуємо модель РІЗ в безрозмірному вигляді :

- **Матеріальний баланс :**

$$\frac{\partial X}{\partial t'} = X_{\text{вх}} - X + \bar{K} f(X) \quad (2.9)$$

- **Енергетичний баланс :**

$$\beta \frac{\partial \theta}{\partial t'} = \theta_{\text{вх}} - \theta + \Delta \theta_{\text{ад}} \bar{K} f(X) - \gamma(\theta - \theta_x) \quad (2.10)$$

- **Рівняння кінетики :**

$$\bar{W} = \bar{K} f(X) \quad (2.11)$$

де  $\bar{K} = \bar{K}_0 \exp(\theta/1+b\theta)$

$\beta = C_A / (C_p \rho)$  – відношення усередненої теплоємності апарату до теплоємності реакційної суміші ("безрозмірна теплоємність") ;

$\Delta T_{Ад} = (-\Delta H)C_0 / (C_p \rho)$  - адіабатичний розігрів, тобто величина, що характеризує на скільки градусів розігріється реакційна суміш при повному перетворенню;

$\Delta \theta_{Ад} = \Delta T_{Ад} / (bT_0)$  – адіабатичний розігрів в безрозмірній формі;

$\gamma = \alpha F / (Q C_p \cdot \rho)$  - безрозмірний параметр тепловідводу;

$b = R \cdot T_0 / E$  - критерій Арреніуса;

$X$  - ступінь перетворення;

$T_0$  - опорна температура, К;

$\bar{K}_0$  - константа швидкості реакції при опорній температурі;

$R$  - газова постійна;

$\tau$  - час перебування (контакту);

$C_0$  – концентрація на вході;

$t$  - відношення поточного значення часу до часу контакту (" безрозмірний час ").

Підрахуємо кількість параметрів в безмірній моделі ;

а) **вихідні параметри** : - технологічні  $\theta, X$   
- час  $t$ .

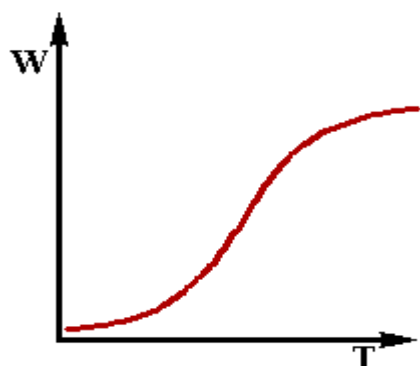
б) **вхідні параметри** : - технологічні  $X_{ВХ}, \theta_{ВХ}, \theta_X$ .

в) **фізичні** -  $\beta, \gamma$ .

г) **параметри, що характеризують реакцію** -  $\bar{K}_0, b, \Delta \theta_{ад}$ .

В безмірній моделі 8 параметрів. Таким чином число параметрів скоротилося за рахунок зникнення конструктивних параметрів. Це є важливим достоїнством безрозмірної моделі РІЗ.

### *Побудова Q - T - діаграми і дослідження стійкості стаціонарних режимів РІЗ*



Однією із основних характеристик хімічного реактора є його стійкість, тобто спроможність вертатися до вихідного стаціонарного стану після усунення зовнішніх збурень. Для дослідження стійкості РІЗ широко використовують діаграму залежності тепловиділення і тепловідводу від температури (Q-T діаграму).

Спершу розглянемо залежність швидкості реакції, яка протікає в РІЗ, на прикладі єдиної необоротної

реакції 1-го порядку.

**Рис 2.2**



Швидкість реакції в розмірному виді виражається наступною залежністю:

$$W = KC = K_0 \cdot e^{-E/RT} \cdot C \quad (2.12)$$

Значення концентрації  $C$  в реакторі залежить від величини концентрації на вході  $C_0$  і температури в реакторі  $T$ . Із рівняння матеріального балансу для стаціонарного режиму (2.7) слідує, що  $C = C_0 / (1 + K\tau) = C_0 / (1 + K_0 \cdot e^{-E/RT} \cdot \tau)$  (2.13) де  $t = V/Q$  - час контакту, с.

Підставляючи (2.13) в (2.12), остаточно одержимо :

$$W = \frac{K_0 e^{-E/RT} C_0}{1 + K_0 e^{-E/RT} \tau} \quad (2.14)$$

Графік залежності (2.14) має наступний вид (див. рис.2.2):

**КОНЕЦ ЛЕКЦІЙ 15.04.2014**

При малих значеннях температури  $T$  другий доданок в знаменнику зневажливо малий по зрівнянню з одиницею. Тоді :

$$W = K_0 e^{-E/RT} C_0 \quad (2.15)$$

В цій області з підвищенням температури швидкість реакції зростає по закону Арреніуса (нижня частина графіка).

При великих температурах, навпаки, другий доданок в знаменнику формули (2.14) стає набагато більше одиниці. Тоді :

$$W_0 = C_0 \tau \quad (2.16)$$

де  $\tau = V/Q$  - час контакту.

Фізичний зміст залежності (2.16) достатньо зрозуміло. При високих температурах реакція протікає настільки хутко, що реагує практично вся речовина, що надходить в апарат. В цьому режимі швидкість реакції  $W$  практично не залежить від температури (верхня частина графіку).

Аналогічний вид мають ці залежності і в безрозмірній формі. Для побудови Q-T-діаграми розглянемо рівняння енергетичного балансу в безрозмірній формі (2.10). В стаціонарному режимі накопичування тепла дорівнює нулю. Запишемо рівняння енергетичного балансу у наступному виді:

$$\Delta\theta_{ao} \bar{K} f(X) = \theta - \theta_{Bx} + \gamma(\theta - \theta_x) \quad (2.17)$$

Позначимо ліву частину рівняння  $q_R$  - виділення тепла, тобто кількість тепла, що виділяється при проходженні хімічної реакції в одиницю часу, а праву -  $q_T$  - відвід тепла, тобто кількість тепла, що відводиться через стінку холодильника. В стаціонарному режимі виділення і відвід тепла дорівнюють між собою  $q_R = q_T$ .

Перетворюємо вираз для розрахунку величини тепловідводу  $q$  :

$$q_T = \theta - \theta_{Bx} + \gamma(\theta - \theta_x) = -(\theta_{Bx} + \gamma\theta_x) + \theta(1 + \gamma)$$

Остаточно :

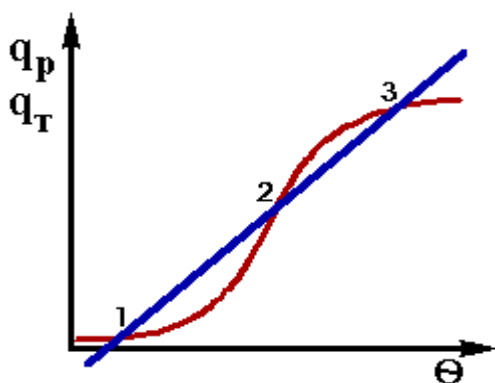
$$q_T = -a + (1 + \gamma)\theta \quad (2.18)$$

де  $a = \theta_{Bx} + \gamma\theta_x$ .

Вираз для розрахунку величини тепловиділення  $q_R$ :

$$q_R = -\theta_{ao} \bar{K} f(X) \quad (2.19)$$

Характер залежностей (2.18) і (2.19) від температури: рівняння (2.18) є рівняння прямої лінії, причому  $q$  зростає, коли збільшується  $\theta$ . У рівнянні (2.19)  $\Delta\theta_{\text{Ад}}$  - коефіцієнт, який не залежить від температури, так що



залежність  $q_R$  від  $\theta$  має такий вид, як функція  $W = f(T)$  (рівняння 2.14), відрізняючись лише масштабом (рис. 2.3).

Лінії залежностей  $q_R$  і  $q_T$  від температури пересікаються в трьох точках - 1, 2 і 3. В цих точках при температурах  $q_1$ ,  $q_2$ ,  $q_3$  процес стаціонарний, тому що дотримується умова стаціонарності  $q_R = q_T$  або  $\beta \cdot d\theta/dt' = 0$ . **Рис.2.3.**

Як видно із графіку (рис.2.3) в наданій ситуації при одних і тих же значеннях вхідних параметрів можливі три різноманітних стаціонарних режими, що забезпечують не тільки значення різноманітних вихідних параметрів, але і відрізняються по стійкості.

Розглянемо спершу стаціонарний режим 3, що відповідає режиму роботи при температурі  $\theta_3$ . Так як швидкості виділення і відводу тепла однакові, оте поки температура  $\theta$  не зміниться, режим залишається стаціонарним. Припустимо, що внаслідок випадкового обурення змінюється значення  $X$  і відбувається зміщення на величину  $\Delta\theta$ . При цьому за рахунок прискорення швидкості реакції зростає швидкість виділення тепла; це зростання діється по лінії, яка відповідає кривій тепловиділення. Одночасно, за рахунок збільшення різниці температур між температурами в реакторі і теплоносія зростає швидкість відведення тепла, це зростання діється по лінії тепловідводу.

В точці 3 лінія тепловідводу минає з більш великим кутом нахилу, чим лінія тепловиділення. Тому при температурі  $\theta_3 + \Delta\theta$  швидкість відводу виявляється вищою, ніж швидкість його виділення. В цих умовах, після зняття обурення  $\Delta\theta$  реактор почне охолоджуватися. Охолодження буде тривати до тих пор, поки температура в реакторі не стане дорівнювати  $\theta_3$ . При цій температурі швидкості відвода і виділення тепла знову зрівняються і режим знов стане стаціонарним.

Навпаки, якщо внаслідок обурення ( $\theta = \theta - \Delta\theta$ ) реактор почне охолоджуватися, оте після зняття обурення (тому що швидкість виділення тепла при цих умовах перевищує швидкість тепловідводу) реактор знову почне нагріватися до досягнення в ньому температури, яка дорівнює  $\theta_3$ .

Таким чином, стаціонарний режим в точці 3 повертається до вихідного стану після зняття зовнішніх обурень, можна сказати що режим стійкий.

**Спроможність системи (реактора) вертатися до вихідного стаціонарного стану після зняття обурень називається стійкістю.**

Інакше кажучи, вихідний стаціонарний режим є стійким, якщо після усунення джерел порушення режиму будь-які малі відхилення з течією часу прагнуть до нуля. Якщо ж значення відхилень наростають в часу, оте вихідний стаціонарний режим нестійкий.

При температурі  $\theta_1$ , відповідній стаціонарному режиму 1, з погляду стійкості картина повністю подібна розглянутому вище режиму в точці 3, тому що і в цьому

випадку лінія тепловідводу іде круче, чим лінія тепловиділення і вихідний стаціонарний режим стійкий.

Тепер розглянемо режим в точці 2. Тут нахил лінії тепловідводу менш, чим лінії тепловиділення. Але також, як і в точках 1 і 3,  $q_R = q_T$  і якщо немає обурень, режим буде стаціонарним. Хай сталося випадкове обурення і температура  $\theta_1$  підвищилася на величину  $\Delta\theta$ . При температурі  $\theta = \theta + \Delta\theta$  швидкість виділення тепла стає більше, ніж швидкість тепловідводу. І тому після зняття обурення реактор буде не охолоджуватися, а нагріватися, віддаляючись від вихідного стану. Нагрів буде тривати до тих пор, поки знов швидкість тепловиділення не буде дорівнювати швидкості тепловідводу, тобто реактор досягне нового стаціонарного стану - при температурі  $\theta_3$ . Аналогічно, внаслідок обурення ( $\theta = \theta - \Delta\theta$ ) реактор почне охолоджуватися і буде самочинно охолоджуватися до тих пор, поки не досягне стійкого стаціонарного стану при температурі  $\theta_1$ .

Проведений аналіз показав, що із трьох можливих в наданих умовах стаціонарних режимів тільки два :

- при низькій температурі і, відповідно, малої швидкості реакції) і -при високій температурі і великої швидкості реакції є стійкими,

а третій - при проміжних значеннях температури і швидкості реакції (точка 2) - нестійкий.

## Умова стійкості

Умова стійкості визначається співвідношенням тепловідводу і тепловиділення. Режими є стійкими, якщо швидкість тепловідводу перевищує швидкість тепловиділення. Враховуючи геометричний зміст похідної умову стійкості можна сформулювати наступним образом система стійка, якщо кут нахилу кривої тепловиділення менш, чим лінії тепловідводу

$$\frac{dq_T}{d\theta} > \frac{dq_R}{d\theta} \quad (2.20)$$

### Вплив вхідних параметрів на стаціонарні режими. Побудова статичних характеристик РІЗ

Розглянемо вплив зміни основних параметрів на вході в РІЗ на стаціонарні режими. Швидкість тепловідводу є функцією наступних параметрів :

$$q_T = f(\theta_{вх}; \theta_x; \gamma) \quad (2.21)$$

Оскільки рівняння залежності швидкості тепловідводу від параметрів (2.18) подає рівняння прямої лінії, оте при зміні параметрів, які входять в коефіцієнт а -  $\theta_{вх}$  і  $\theta_x$ , лінія тепловідводу буде переміщатися паралельно самої собі.

Розглянемо вплив температури входу на стаціонарні режими. При збільшенні  $\theta_{вх}$  лінія тепловідводу буде зміщатися праворуч. При цьому умови існування стаціонарних режимів будуть іншими. На рис.2.4 показані лінії тепловідводу, збудовані при різних значеннях  $\theta$ .

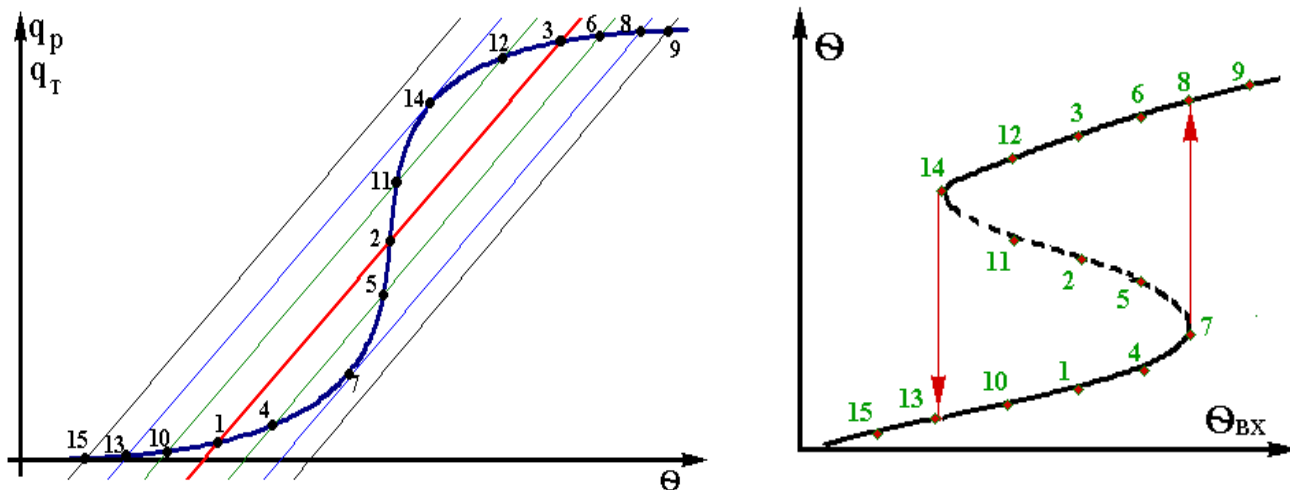


Рис 2.4 Рис 2.5

Стаціонарні режими, одержані при базовому значенні  $\theta_{вх}$ , позначені цифрами 1,2,3. При збільшенні  $\theta_{вх}$  лінія тепловідводу зміщується праворуч.

При цьому число стаціонарних режимів залишається попереднім (позначені 4,5,6). При подальшому збільшенні  $\theta_{вх}$  число стаціонарних режимів спромагається змінитися. Для деякого

значення  $\theta_{вх}$  одержуємо тільки два стаціонарних режиму – точки 7 та 8, причому стаціонарний режим в крапці 7 - нестійкий. При більш великих значеннях  $\theta_{вх}$  лінія тепловідводу лежить нижче лінії тепловиділення практично у всієї області, за

винятком високих значень  $\theta$ . В даному випадку має місце тільки один стаціонарний режим – точка 9. Аналогічна картина спостерігається і при зменшенні значення  $\theta$ . Розглянемо докладно стаціонарні режими в крапках 7 і 13. Незначна зміна температури приводить до того, що реактор практично миттєво переходить на високотемпературний режим (із точки 7 в точку 8 на верхньої частині графіку) або, навпаки, на швидкотемпературний режим (із точки 13 в точку 14 на нижньої частині).

Аналіз роботи реактора слушно проводити з використанням статичних характеристик, що показують зміну вихідних величин (в даному випадку -  $\theta$ ) в стаціонарному режимі при зміні параметрів на вході.

Кількісною мірою зміни вихідних величин при зміні вхідних параметрів служить параметрична чутливість - межа відношення зміни вихідної величини до відповідної зміни вхідної :

$$P = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta \theta}{\Delta A} \quad (2.22)$$

де  $A$  - вхідний параметр.

Вираз (2.22) є ніщо інше, як:

$$P = d\theta/dA \quad (2.23)$$

На практиці звичайно використовують наступний вираз:

$$P \approx \Delta\theta/\Delta A \quad (2.24)$$

Статична характеристика при зміні  $\theta_{\text{вх}}$  приведена на рис.2.5. Для побудови статичної характеристики використовуються тільки крапки стаціонарних режимів, одержаних при побудові Q-T діаграми при зміні температури входу. Для кожного значення температури входу вибираються крапки, відповідні стаціонарним режимам і переносяться на графік статичної характеристики.

Позначимо  $m$ -основний робочий режим. Розглянемо інтервал  $\theta_{\text{вх}}^{\cdot} - \theta_{\text{вх}}^{\cdot\cdot}$ . В цьому діапазоні температур можливо існування трьох режимів. У разі, коли  $\theta_{\text{вх}} > \theta_{\text{вх}}^{\cdot\cdot}$  або  $\theta_{\text{вх}} < \theta_{\text{вх}}^{\cdot}$  в реакторі буде тільки один стійкий режим (високо або низькотемпературний). Із статичної характеристики також видно, що вдалині від крапок 7 і 13 (що називаються крапками зриву) величина параметричної чутливості невелика. По мірі наближення до цих крапок величина параметричної чутливості різко зростає, а після цього діється скачкоподібний перехід на інший режим - зрив. В точках зриву величина  $P$  нескінченно велика.

В ході нормальної експлуатації реактора завжди мають місце невеликі вагання вхідних параметрів. В зв'язку з цим виникає завдання визначення запасу стійкості сукупності допустимих відхилень параметрів процесу. Практично запас стійкості становить інтервал від заданого режиму до кордону стійких стаціонарних станів. Так, наприклад, для режиму  $m$  запас стійкості по температурі входу складає :

$$\Delta\theta_{\text{вх}} = \theta_{\text{вх}}^7 - \theta_{\text{вх}}^m$$

Для забезпечення стійкої і безпечної роботи реактора необхідно виконання наступного обмеження :

$$\Delta\theta_{\text{вх}} > \delta\theta_{\text{вх}}$$

де  $\Delta\theta_{\text{вх}}$  - можливий інтервал зміни  $\theta$  в процесі експлуатації

Розглянемо вплив параметра  $g$  на стаціонарні режими в РІЗ.

З рівняння (2.18) виходить, що параметр  $\gamma$  визначає нахил лінії тепловідводу. Із збільшенням величини  $\gamma$  кут нахил буде зростати, а лінія тепловідводу буде повертатися навкруг деякої точки (рис.2.6). Визначимо координати цієї точки. Для цього розглянемо два випадки:  $\gamma_1 = 0$  і  $\gamma_2 = 1$ . В цьому випадку, величина тепловідводу буде:  $q_{T1} = \theta - \theta_{ВХ}$  і  $q_{T2} = 2 \cdot \theta - \theta_{ВХ} - \theta_X$ . Оскільки ця точка - "центр обертання" є загальною для обох випадків, оте у неї  $q_{T1} = q_{T2}$ . Тоді:  $\theta - \theta_{ВХ} = 2\theta - \theta_{ВХ} - \theta_X$ . Звідси  $\theta = \theta_X$  - абсциса центру обертання. Ордината наданої крапки -  $q_T = \theta_X - \theta_{ВХ}$ . Статична характеристика РІЗ по каналу  $\theta - \gamma$  приведена на рис. 2.7.

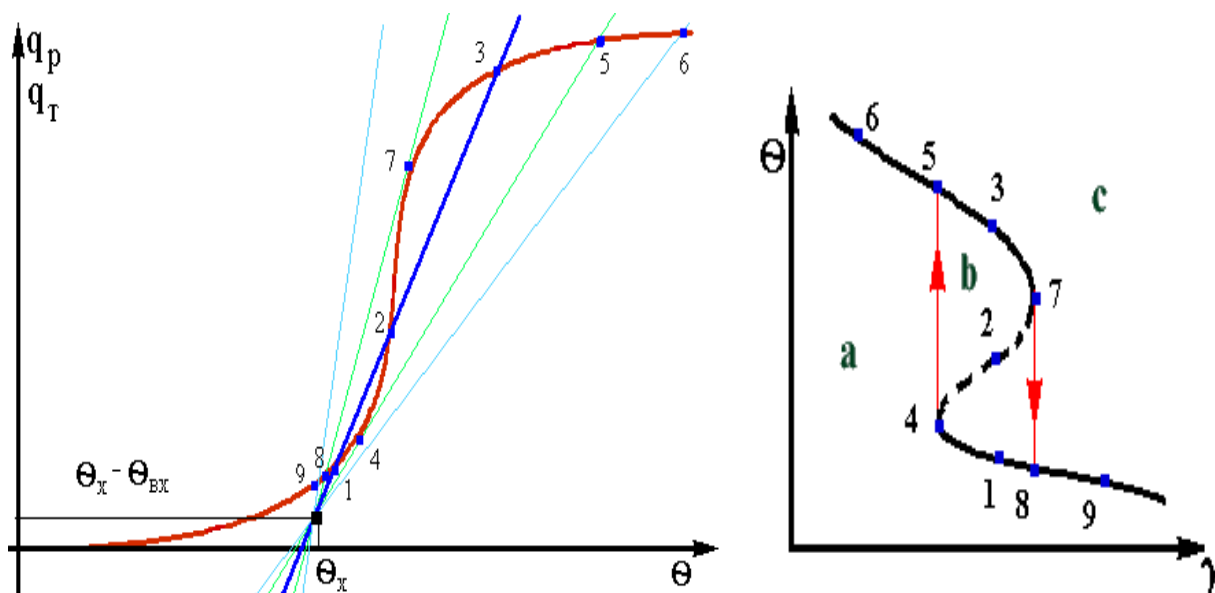
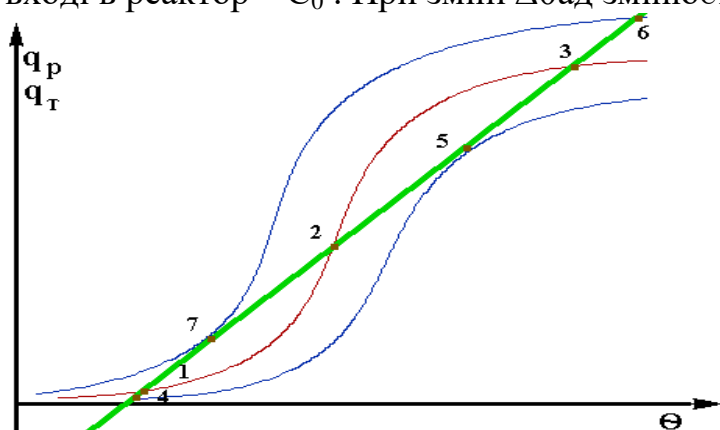


Рис 2.6 Рис 2.7

При малих значеннях  $\gamma$  існує єдиний високотемпературний режим - область **a**. По мірі збільшення  $\gamma$  спостерігається перехід в область існування трьох режимів - область **b**. При великих значеннях  $\gamma$  буде існувати єдиний низькотемпературний режим - область **c**. При певних значеннях параметра  $\gamma$  можливі "зриви" із високотемпературного режиму на низькотемпературний - точка 13 і навпаки - точка 7.

Порівнявши статичні характеристики  $\theta = f(\theta_{ВХ})$  і  $\theta=f(\gamma)$  можна спостерегти, що вони є дзеркальним відбиванням друг друга. Розглянемо вплив величини адиабатичного розігріву на характер стаціонарних режимів в РІЗ. Величина адиабатичного розігріву для однієї і отієї ж реакції є функцією тільки концентрації на вході в реактор -  $C_0$ . При зміні  $\Delta\theta_{ад}$  змінюється положення лінії тепловиділення -  $q_p$  (рис.2.8).

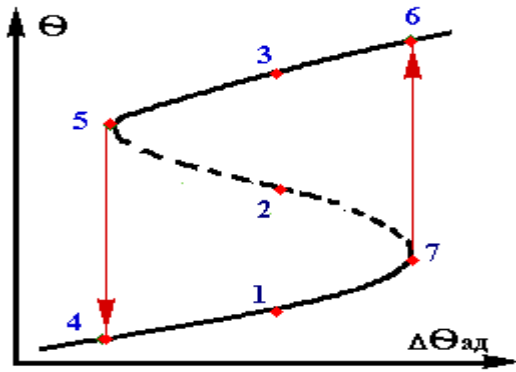


-  $q_p$  (рис.2.8).

Із зменшенням величини адиабатичного розігріву графік залежності  $q_R = f(\theta)$  зменшується по висоті і зміщується праворуч. В крапці 13 діється зрив на низькотемпературний режим. При збільшенні  $\Delta\theta_{ад}$  картина змінюється. Графік залежності

зміщується ліворуч, збільшуясь  
переходить скачкоподібно на високотемпературний режим.

**Рис 2.8** по висоті, і в крапці 7



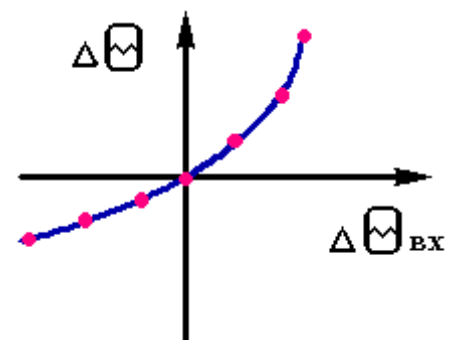
Статична характеристика по каналу  $\theta - \Delta\theta_{ад}$  (рис.2.9) має такий же вигляд, як і статична характеристика по каналу  $\theta - \theta_{вх}$ .

Аналогічним образом будуються статичні характеристики при варіюванні інших параметрів.

**Рис 2.9**

Необхідно визначити наступне. Вище були розглянуті випадки, коли можливе існування в реакторі деяких стаціонарних режимів. В тому випадку, якщо існує єдиний стаціонарний режим, оте вид статичних характеристик змінюється. Побудова статичних характеристик проводиться наступним чином. Вибирається вихідний стаціонарний режим. Після цього при варіюванні одного із вхідних параметрів визначаються нові стаціонарні режими. Статичні характеристики будуються, як правило, в координатах  $\Delta\theta_{вих} = f(\Delta a_{вх})$ , де  $a_{вх}$  - параметр на вході (рис. 2.10).

Дослідження статичних характеристик в будь-якому реакторі необхідно, по-перше, для передбачення поведінки об'єкту при зміні умов на вході; по-друге, для вибору каналу управління, тобто отакого параметра, яким можна варіювати, щоб здійснювати процес в заданих умовах при можливих флуктуаціях вхідних параметрів.



**Рис 2.10**

При виборі каналу управління необхідно, щоб :

1. Зміна параметра на вході виявляла помітний вплив на вихідні параметри.
2. Обраний канал управління повинен бути найменш інерційним, тобто часу, протягом якого параметр на виході відреагує на зміну вхідного параметра, слід бути мінімально можливим.

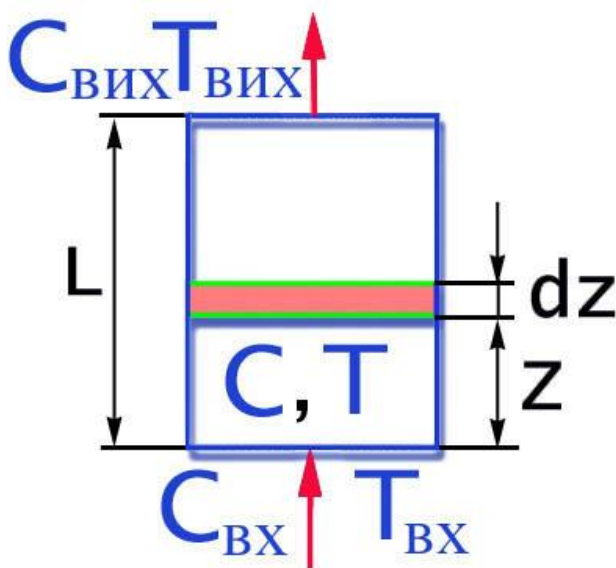
## 2. 2. Реактор ідеального витиснення (РІВ)

Характерною особливістю РІВ є те, що в ньому не діється змішення вдовж напрямку руху потоку. У будь-якому поперечному перетині реактора частки мають однакову швидкість руху.

### 2. 2. 1. Математична модель РІВ

Якщо у РІВ параметри змінюються по довжині реактора, то для висновку рівнянь балансів виділяється елементарний обсяг шару висотою  $dZ$ .

Запровадимо наступні позначення :



- $L$  - довжина реактора, м;
- $Z$  - відстань від входу до вибраного шару висотою  $dz$ , м;
- $S$  - перетин реактора,  $m^2$ ;
- $U$  - швидкість струму (м/с);
- $Q = U \cdot S$  ( $m^3 / c$ )- об'ємний видаток;
- $V = S \cdot dz$ - обсяг виділеного елементарного шару,  $m^3$ ;
- $C_{ВХ}, T_{ВХ}$  - концентрація і температура на вході в шар;
- $C, T$  - концентрація і температура на вході у виділений шар;
- $W$  - швидкість хімічного перетворення;

Рис 2.11

Складемо рівняння **матеріального балансу** для виділеного елементарного прошарку за одиницю часу  $dt$ .

$$U \cdot S \cdot C - U \cdot S \cdot (C + \frac{\partial C}{\partial Z} \partial Z) - S \cdot dZ \cdot W = S \cdot dZ \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.25)$$

В рівнянні (2.25) перша складова враховує кількість речовини, що вноситься із струмом у виділений елементарний обсяг прошарку; друге-кількість речовини, що виноситься з потоком; третя- кількість речовини, яка витрачається (утворюється) внаслідок хімічного перетворення. Права частина враховує зміну кількості речовини у виділеному елементарному прошарку. Перетворив (2.25), одержимо остаточний вигляд рівняння матеріального балансу для РІВ:

$$U \frac{\partial C}{\partial Z} - W = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.26)$$

**Енергетичний баланс** складається аналогічно.

$$U \cdot S \cdot C_p \rho T - U \cdot S \cdot C_p \rho (T + \frac{\partial T}{\partial Z} \partial Z) - S \cdot dZ \cdot W(-\Delta H) = C_A S dZ \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.27)$$



Тут перший та другий доданок враховують прихід і видаток тепла з конв'єктивним струмом у виділений елементарний об'єм; третій - тепловідлення за рахунок хімічної реакції, четвертий-відвід(підвід) тепла з теплоносієм. Права частина - накопичення тепла.

Вважаючи, що  $C_p$  і  $r$  - незмінні у всьому обсязі реактора і спростивши цю залежність, одержимо остаточний вигляд енергетичого балансу для РІВ:

$$U \cdot S \cdot C_p \rho T - U \cdot S \cdot C_p \rho (T + \frac{\partial T}{\partial Z} dZ) - S \cdot dZ \cdot W(-\Delta H) = C_A S dZ \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.28)$$

**Рівняння кінетики.** В загальному випадку швидкість хімічного перетворення описується наступною залежністю :

$$W = F(\bar{C} \cdot T) \quad (2.29)$$

де  $C$  - вектор концентрації  $\{C_1, C_2, \dots, C_n\}$ .

В математичну модель РІВ входять граничні і початкові умови, а також обмеження.

**Граничні умови** для РІВ - умови протікання процесу на вході в прошарок.

$$Z = 0 \quad C = C_{ВХ} \quad T = T_{ВХ} \quad (2.30)$$

**Початкові умови** встановлюють значення концентрації і температури у реакторі в початковий момент часу.

$$t = 0 \quad C = C_{ВХ} \quad T = T_{ВХ} \quad (2.31)$$

**Обмеження :**

$$T_{\min} < T < T_{\max} \quad C_{\min} < C < C_{\max} \quad (2.32)$$

Система рівнянь (2.26) - (2.32) становить математичний опис РІВ в розмірній формі. При описі стаціонарних режимів в зрівняннях балансів похідні по часу прирівнюються нулю.

## 2. 2. 2. Дослідження РІВ.

### 1.Зміна ступені перетворення при ізотермічному режимі

Для визначення ступені перетворення по довжині реактора необхідно визначити залежність зміни міри перетворення ( $x$ ) по довжині реактору. Для цього розглянемо стаціонарний режим у РІВ. Швидкість хімічного перетворення для реакції першого порядку визначається наступним виразом:

$$W = K \cdot C = K \cdot C_0 \quad (2.33)$$

де  $K$ -константа швидкості реакції, залежна від температури

$$K = K_0 \cdot e^{-E/(R \cdot T)}$$

$C_0, C$  - початкове і поточне значення концентрації;

$X = (C_0 - C)/C_0$  - ступінь перетворення

В ізотермічному режимі  $T = \text{const}$ , отже,  $K = \text{const}$ .

В стаціонарному режимі рівняння матеріального балансу має наступний вигляд (тому що  $dC/dt=0$ ):

$$-U = \frac{\partial C}{\partial Z} = W \quad (2.34)$$

У (2.34) висловимо значення концентрації через ступінь перетворення і замість  $W$  підставимо його значення з (2.33). Одержимо:

$$U \frac{\partial X}{\partial Z} = K(1 - X) \quad (2.35)$$

Так як  $L/U = \tau$ , отже  $dZ/U = dt$ . Тоді замість (2.35) можна записати:

$$dX / dZ = K(1 - X) \quad (2.36)$$

Для того, щоб визначити зміну ступені перетворення по довжині реактора, слід проінтегрувати (2.36).

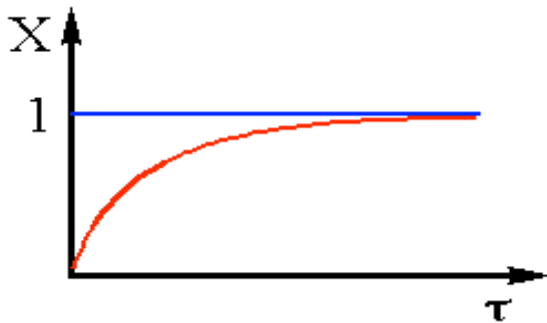
$$\int_{X_{\text{вх}}}^X dX / (1 - X) = K \int_0^\tau d\tau$$

Отримаємо:

$$-\ln(1 - X) = K\tau \quad (2.37)$$

Перетворив (2.37), одержимо:

$$X = 1 - e^{-K\tau} \quad (2.38)$$



Одержаний вираз дозволяє визначити  $X$  по довжині реактора (рис.2.12).

З аналізу (2.38) видно, що практично неможливо одержати ступінь перетворення рівну 1

Аналогічна залежність-зміна концентрації по довжині реактора має вигляд :

$$\text{Рис 2.12 } C = C_0 - e^{-K\tau} \quad (2.39)$$

## 2.3. Зміна ступеня перетворення при адіабатичному режимі

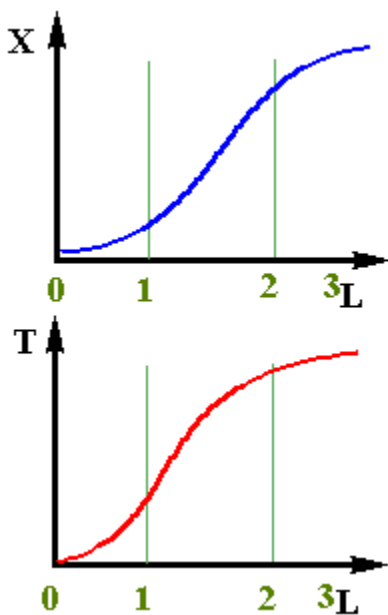


Рис 2.13 змінюється

При адіабатичному протіканні процесу визначити зміну ступеня перетворення по довжині реактора можна тільки при сумісному рішенні дорівнень матеріального і теплового балансів. Якісно цю залежність можна пояснити наступним чином (рис.2.13). На початковій ділянці шару (0- 1) ступінь перетворення буде мала, тому що із-за низьких температур швидкість хімічного перетворення буде невелика. На наступних ділянцях шару за рахунок протікання хімічної реакції температура зростає, концентрація вихідного компонента ще достатньо велика і швидкість реакції помітно збільшується, що приводить до чималого збільшення ступеня перетворення (участок 1 - 2). До кінця шару (участок 2 - 3) вихідного компонента практично не залишається і, відповідно, швидкість реакції зменшується і ступінь перетворення практично не

### 2. 2. 3. Зіставлення РІЗ та РІВ

Рівняння реакторів найбільш слушно проводити по якомусь параметру, що визначає техніко-економічні показники. У вигляді такого параметра частіше всього використовують час перебування  $t$ . Співвідношення між часами перебування в РІЗ ( $\tau_3$ ) і в РІВ ( $\tau_B$ ) залежно від ступеня перетворення розглянемо для простішого випадку - протікання реакції першого порядку при ізотермічних умовах і постійному обсязі.

Для РІЗ із (2.7) слідує :

$$\tau = (C_{Bx} - C) / W \quad (2.40)$$

де  $\tau = V / Q$ .

Так як у данному випадку  $W = K \cdot C$ , то висловивши в (2.40) значення концентрації через ступінь перетворення, отримаємо залежність часу перебування від ступені перетворення для РІЗ :

$$\tau_3 = \frac{1}{K} \frac{X}{1 - X} \quad (2.41)$$

Для РІВ залежність часу перебування від ступені перетворення може бути одержана з рівняння (2.37)

$$\tau_B = -1 / K - \text{Ln}(1 - X) \quad (2.42)$$

Тоді відношення  $\tau = -1 / K - \text{Ln}(1 - X)$  буде функцією тільки ступені перетворення:

$$\frac{\tau_3}{\tau_B} = - \frac{X}{(1 - X) \text{Ln}(1 - X)} \quad (2.43)$$

Проведемо зіставлення РІЗ і РІВ, задаючи різні значення міри ступені перетворення, зіставляючи моделі по відношенню  $\tau_C / \tau_B$  (табл.2.2)

Таблиця 2.2

X	0	0.5	0.7	0.8	0.9	0.99
$\tau_C / \tau_B$	1	1.5	2.0	2.5	4	22

З приведенного зіставлення видно, що час перебування у реакторі ідеального змішення завжди більше, ніж у реакторі ідеального витиснення. При цьому, чим вище ступінь перетворення  $X$ , тим  $t$  більше відрізняється від  $\tau_B$ .

Оскільки час перебування прямопропорційний обсягу апарата, то необхідний обсяг РІЗ завжди більше, чим обсяг РІВ. При рівних обсягах реакторів ступінь перетворення  $X$  в РІВ досягає понад більш високих значень, чим у РІЗ. Треба визначити, що відношення обсягу реакторів збільшується з підвищенням порядку реакції.

Графіки залежності ступеня перетворення і концентрації від часу контакту приведені на рис.2.14 та 2.15.

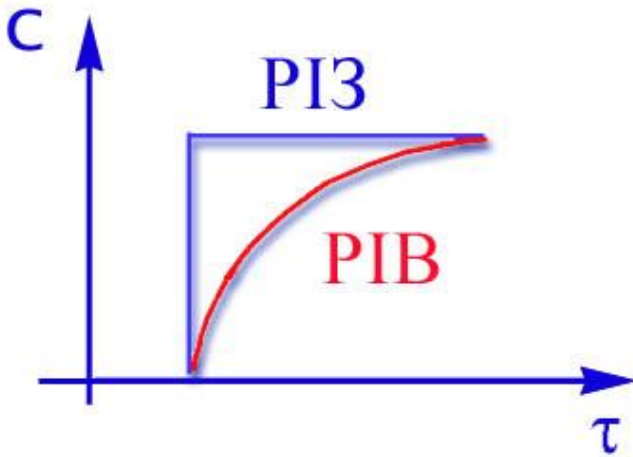


Рис 2.14

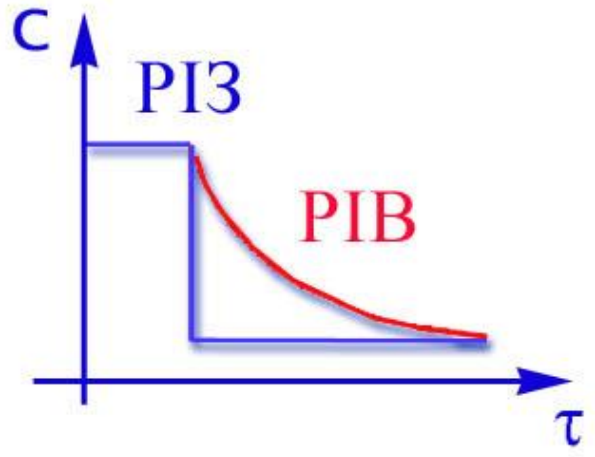


Рис 2.15

Для РІВ ступінь перетворення та концентрація змінюється плавно по всій довжині реактора, тому у будь-якому перетині по  $\tau$  середня швидкість процесу вище, чим у РІЗ.

Незважаючи на очевидні привілеї РІВ в хімічній промисловості надто часто застосовуються і РІЗ, особливо у вигляді каскада реакторів. Це пояснюється передусім простотою їх виготовлення, полегкістю регулювання температури, доступністю узлів апарату, що полегшує очистку внутрішніх поверхностей.

### 2. 3. 5. Комірочна модель

Ця модель схематично представляє реальний апарат як деяке число однакових послідовно сполучених комірок (апаратів) ідеального змішення (рис.2.17) Сумарний обсяг всіх ячеек дорівнює обсягу реального апарату, отже, обсяг кожної комірки дорівнює  $V/n$ . Кількість комірок  $n$  є параметром, що характеризує комірочну модель реального апарату. Якщо  $n = 1$ , оте комірочна модель переходить у модель ідеального переміщення, а у випадку  $n = \infty$  – у модель ідеального витіснення.

У ряді випадків в апаратах справді можна виділити ділянки по ходу потоку, в кожному з яких режим близьок до ідеального переміщення - каскад реакторів ідеального переміщення, тарельчата барботажна колона, реактор з киплячим шаром.



Рис 2.17

При складанні ячеечної моделі використовуються наступні допущення :

- в кожній ячейці потік має структуру ідеального переміщення й концентрація  $C_i$  не змінюється у межах відповідної ячейки ( $i=1,2, n$  - індекс ячейки);
- переміщення між ячейками відсутнє;
- об'ємна швидкість  $Q$  не змінюється.

Крім отого, частіше всього для вигоди розрахунків приймається, що

- об'єм кожної з  $n$  ячеек однаков та дорівнює  $V_i$ ;

- сума об'ємів всіх ячеек дорівнює загальному об'єму зони, для якої справедлива ячеечна модель ( $V = nV_i$ )

- середній час перебування часток у кожній ячейці  $\tau = V/Q = \tau_c/n$ , а середній час перебування у системі  $\tau_c = V/Q$ .

Оскільки у кожній ячейці дотримується режим ідеального переміщення, оте для будь-якої  $i$ -ої ячейки справедливо рівняння моделі РІС:

$$V_i \frac{\partial C_i}{\partial t} = Q(C_{i-1} - C_i) - V_i W_i \quad (2.43)$$

або

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{1}{\tau} (C_{i-1} - C_i) - W_i \quad (2.44)$$

де  $i = 1, 2, \dots, n$ .

Система рівнянь уявляє собою матеріальні баланси в кожній з прийнятих  $n$  ячеек.

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1}{\partial t} &= \frac{1}{\tau} (C_0 - C_1) - W_1 \\ \frac{\partial C_2}{\partial t} &= \frac{1}{\tau} (C_1 - C_2) - W_2 \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{\partial C_n}{\partial t} &= \frac{1}{\tau} (C_{n-1} - C_n) - W_n \end{aligned} \quad (2.45)$$

Рівняння енергетичного балансу має наступний вигляд .:

$$\begin{aligned} V_1 C_A \frac{dT}{dt} &= Q C_P \rho (T_0 - T) + W_1 V_1 (-\Delta H_1) - \alpha S_1 (T_1 - T_X) \\ &\dots\dots\dots (2.46) \\ V_n C_A \frac{dT}{dt} &= Q C_P \rho (T_{n-1} - T_n) + W_n V_n (-\Delta H_n) - \alpha S_n (T_n - T_X) \end{aligned}$$

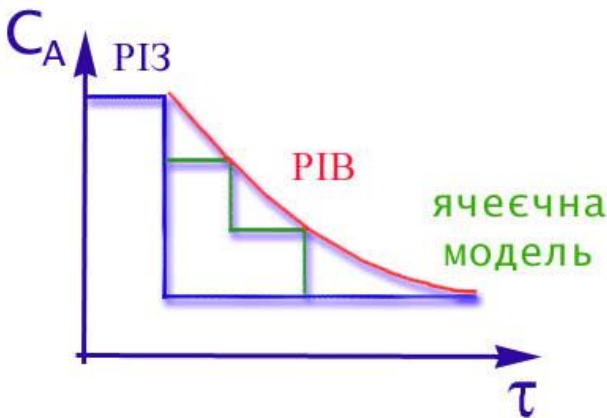
**Кінетичні рівняння**

Оскільки концентрація змінюється східчасто від ячейки до ячейки, оте швидкості реакції в кожному реакторі різні.

$$W = F(C_I, T_I), I = 1, 2, 3... n$$

**Початкові умови та обмеження** записуються для кожної ячейки аналогічно моделі РІС.

Порівняємо профілі концентрацій у реакторах РІВ, РІЗ та каскаді реакторів ідеального переміщення при n=3 (рис. 2.18). Зіставлення проводиться при однакових початкових концентраціях C<sub>A0</sub> і X = const, де X - міра перетворення.



Для останньої ячейки концентрація речовини А у ячеєчній моделі співпадає з його концентрацією при ідеальних режимах (витиснення та переміщення). Но перші ячейки працюють при великих значеннях C<sub>A</sub>, чим ячеєчна модель при режимі ідеального витиснення, та, відповідно, в них швидкість хімічного перетворення вище. Інакше кажучи, середня концентрація у каскаді реактора виявляється більш

**Рис.2.18** високою, чим у РІС. Тому обсяг каскаду реакторів завжди менш, ніж обсяг одного РІС при отих же характеристиках процесу.

Для необернутої реакції першого порядку міра перетворення при будь-якому числі ячеек n визначається по наступній формулі:

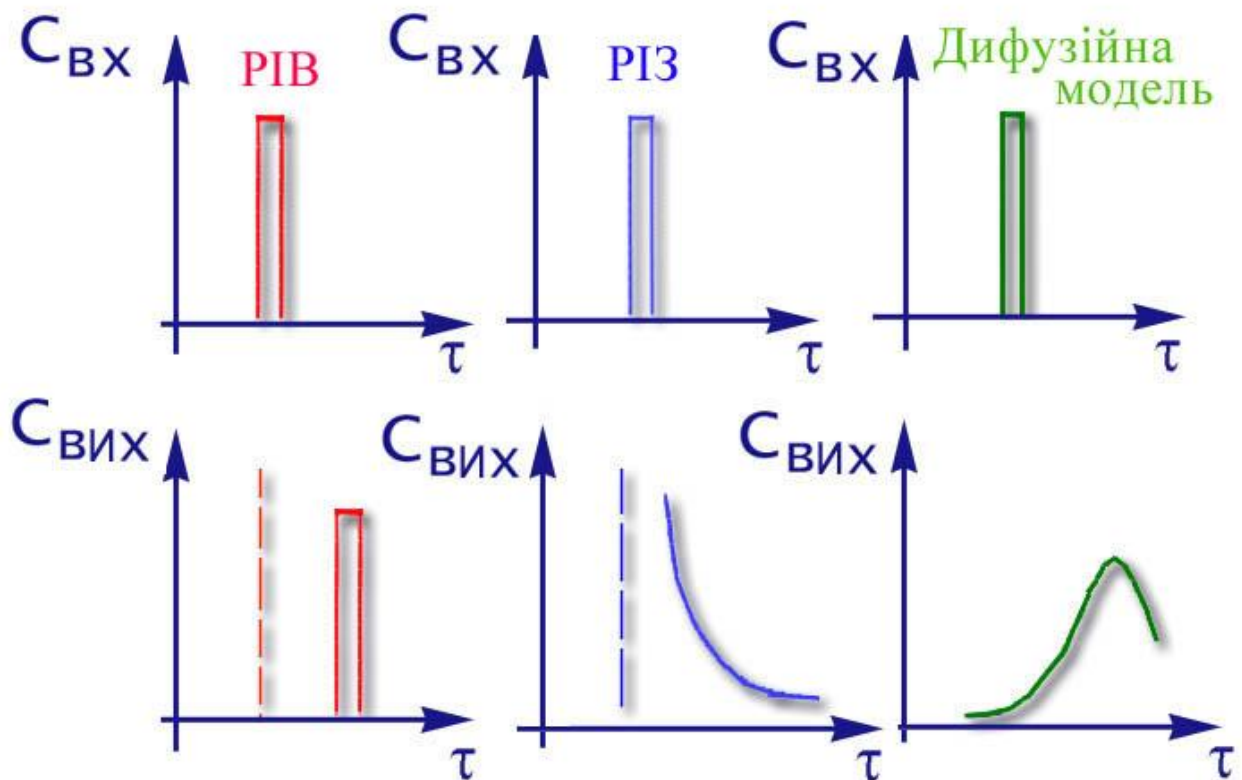
$$X = 1 - \frac{1}{\{1 + K\tau/n\}^n} \quad (2.47)$$

Легко переконатися, що при n = 1 вираз (2.47) переходить у (2.13), а при n → ∞ прагне до (2.38). Також з (2.47) видно, що з зростанням числа ячеек міра перетворення достатньо швидко наближається до результатів, характерних для режиму ідеального витіснення.

Цим і пояснюється, що у хімічній технології часто використовують прийом секціонування - апарати, у яких створюється інтенсивне зміщення потоку, поділяють на послідовні секції.

## 2. 4. Дифузійна модель з подовжнім переносом речовини та тепла

Далеко не завжди вдається описати процес, який протікає у промисловому реакторі, ідеальними моделями. Так, наприклад, для рівняно невеликих по довжині реакторів при малих лінійних швидкостях потоку реакційної суміші для опису адіабатичного режиму протікання процесу не підходить ані РІЗ, ані РІВ. Очевидно, що ми маємо справу з деякою проміжною нагодою, де має місце неповне зміщення по потоку, т.е. на режим ідеального витиснення накладається часткове переміщення. Це підтверджується імпульсними та разгонними характеристиками дифузійної моделі, що показують реакцію об'єкту при нанесенні на вході імпульсного або стрибкообразного обурення (рис.2.19, 2.20)



Р

рис 2.19. Імпульсні характеристики (τ- час перебування суміші у реакторі).

Спершу розглянемо одномірний випадок – перенос речовини здійснюється тільки у продольному напрямку. Така модель отримала назву однопараметрична дифузійна модель (рис.2.21). Висновок рівнянь балансів здійснюється аналогічно РІВ.

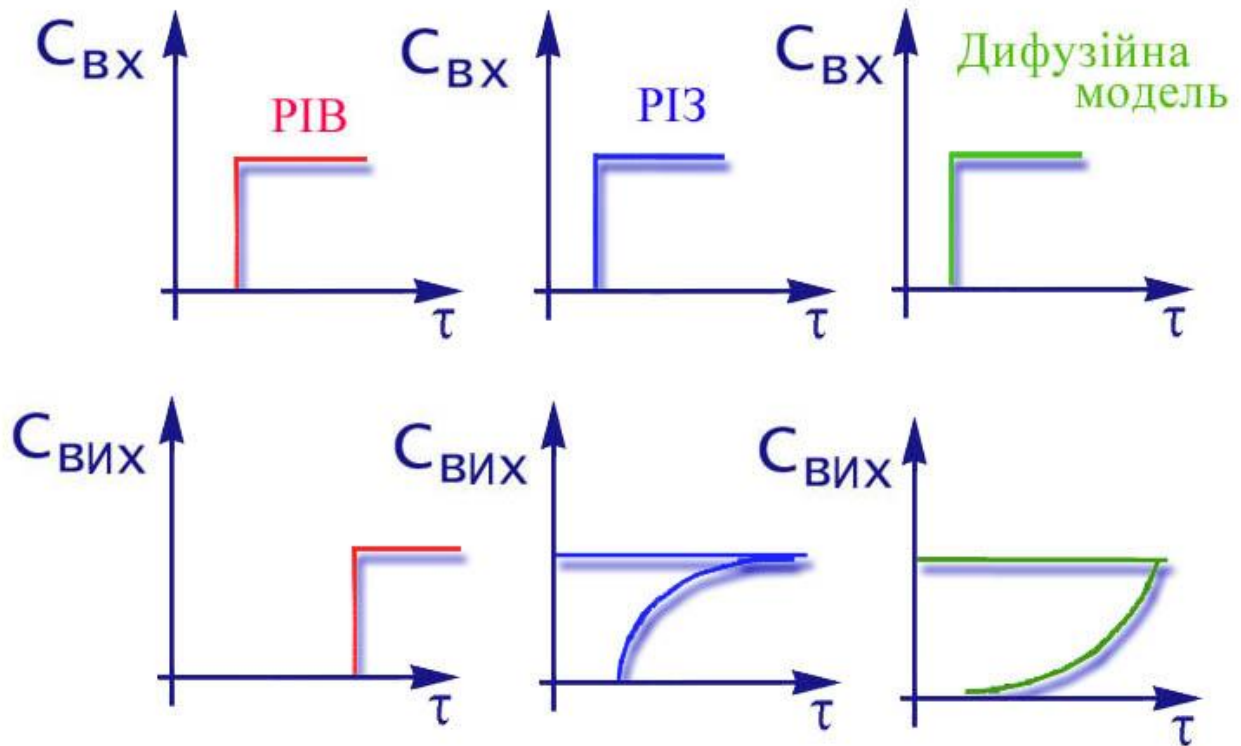
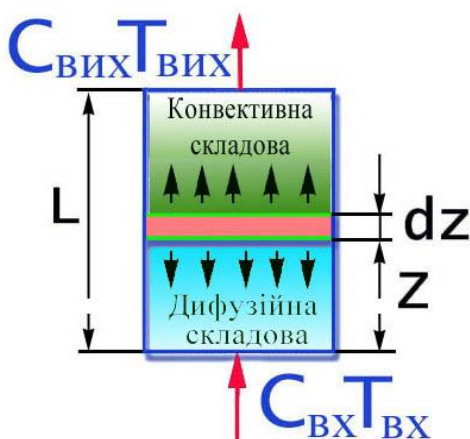


Рис 2.20. Разгонні характеристики



Характер процесів переносу визначається двома складовими:

1. конвективної – яка відповідає режиму ідеального витиснення;
2. дифузійної – яка описує гуртовий вплив різноманітних факторів, що виражаються у відході однієї частки потоку вперед і відставанні інших

Для опису другої складової використовуємо закон Фіка :

$$q_M = -D_L S \frac{dC}{dz} \quad (2.48) \quad \text{Рис.2.21}$$

де  $q_M$  - кількість речовини, що дифундує у прямому та зворотному напрямку;

$D_L$  - ефективний коефіцієнт продольної дифузії;

$dc/dz$  - градієнт концентрації;

$S$  - площа поперечного перетину.

Знак " - " у рівнянні (2.48) показує, що дифузійний потік завжди скерований в бік зменшення концентрації.

Складемо математичну модель дифузійної моделі.

Матеріальний баланс :

$$U.S.C - D_L S \frac{dC}{dz} - U.S(C + \frac{dC}{dz} dz) + D_L S \frac{d}{dz} (C + \frac{dC}{dz} dz) - SdZW = SdZ \frac{dC}{dt} \quad (2.49)$$

У рівнянні (2.49) перші два доданки враховують перенос речовини через нижній кордон виділеного елементарного обсягу: перше - прихід за рахунок конвективного



поток, друге - унос за рахунок дифузійного потоку. Третій та четвертий доданок - перенос речовини через верхній кордон :третє - унос з конвективним потоком, четверте - прихід за рахунок дифузійного потоку. П'ятий доданок враховує зміну кількості речовини за рахунок хімічної реакції.

В правій частині - зміна кількості речовини у виділеному елементарному обсязі в часу. Після скорочення і ділення на  $SdZ$  одержимо :

$$U \frac{dC}{dZ} + D_L \frac{d^2C}{dZ^2} - W = \frac{dC}{dt} \quad (2.50)$$

Рівняння (2.50) становить матеріальний баланс однопараметричної дифузійної моделі. Перший доданок враховує перенос речовини за рахунок конвективного потоку, другий - за рахунок дифузійного потоку, третій-за рахунок хімічної реакції.

Рівняння енергогетичного балансу складається аналогічно, а замість закона Фіка використовується закон Фур'є:

$$q_T = -\alpha_L S \frac{dT}{dZ} \quad (2.51)$$

де  $q_T$  - кількість теплоти, яка переноситься за рахунок теплопроводності;

$\alpha_L$  - ефективний коефіцієнт продольної теплопроводності;

$dT/dz$ - градієнт температур.

Знак " - " у (2.51) означає, що передача тепла здійснюється у сторону зменшення температури.

$$U.S.C_p\rho T - \lambda_L S \frac{dT}{dZ} - U.S.C_p\rho \left(T + \frac{dT}{dZ} dZ\right) + \lambda_L S \frac{d}{dZ} \left(T + \frac{dT}{dZ} dZ\right) + W(-\Delta H)SdZ = C_A SdZ \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.52)$$

Перетворив (2.52), одержимо рівняння енергетичного балансу :

$$C_A = \lambda_L \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - UC_p\rho \frac{dT}{dZ} + W(-\Delta H) \quad (2.53)$$

Рівняння кінетики й початкові умови аналогічні моделі РІВ :

$$W = f(T, C) \quad (2.54)$$

$$T = T_{\text{Поч}}(Z) \quad C = C_{\text{Поч}}(Z) \quad (2.55)$$

Краєві (кордонні) умови необхідно задавати як на вході, так і на виході із реактора. Для висновку цих умов у загальному випадку необхідно скласти матеріальний та тепловий баланси для вхідного та вихідного перетина реактора. На відміну від балансів, які виводяться для елементарного обсягу, в даному випадку не враховуються зміни за рахунок хімічної реакції та накопичування, тому що товщина шару  $dZ=0$  та отже, доданки, що містять  $dZ$ , також дорівнюють 0.

Спочатку розглянемо перетин  $Z=0$  :

$$U.S.C_{\text{ВХ}} - U.S.C = -D_L S \frac{dC}{dZ} \quad (2.56)$$

$$U.S.C_p\rho T_{\text{ВХ}} - U.S.C_p\rho T = -\lambda_L S \frac{dT}{dZ} \quad (2.57)$$

Після перетворень одержимо кордонні умови у наступному виді :

$$Z = 0: U(C - C_{\text{ВХ}}) = D_L \frac{dC}{dZ} \quad U.S.C_p\rho(T - T_{\text{ВХ}}) = -\lambda_L S \frac{dT}{dZ} \quad (2.58)$$

При  $Z=L$ , т.є. на виході з реактора, як правило, швидкість хімічного перетворення вкрай мала, оскільки процес виходить або на повну, або на рівноважну міру перетворення. Отже, градієнти температур та концентрацій відсутні. Тому можна записати :

$$Z = L : dC/dZ=0; dT/dZ=0; (2.59)$$

## 2.5. Двохпараметрична дифузійна модель

На відміну від попередньої моделі, що враховує зміну концентрацій та температури тільки у продольному напрямі, двухпараметрична модель враховує зміну цих параметрів ще й у радіальному напрямі. Надана модель використовується, в основному, для опису процесів у трубчатих реакторах.

За рахунок чого виникає радіальний перенос? При проходженні хімічної реакції в трубчатому реакторі у його міжтрубному просторі циркулює теплоноситель, що відводить або підводить тепло. Температура теплоносителя  $T_x$  відрізняється від температури всередині трубки  $T$ , що приводить до виникнення градієнту температур по діаметру трубки. Це, у свою чергу, буде причиною виникнення градієнту концентрацій.

Для опису радіального переносу використовуються  $D_r$ ,  $g_l$  - ефективні коефіцієнти дифузії та теплопроводності у радіальному напрямку. Інші позначення аналогічні попередньої моделі.

Рівняння матеріального балансу має вид :

$$-U \frac{\partial C}{\partial Z} + D_L \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} + D_R \left( \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \right) - W = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.60)$$

Перші три доданки цілком аналогічні однопараметричній дифузійній моделі. Четвертий доданок враховує перенос речовини за рахунок радіальної дифузії. В

останньому доданку  $\frac{1}{r} \frac{\partial^2 C}{\partial r^2}$  облічуємо зміну площі поперечного перетину по мірі

віддаління від центру трубки Рівняння енергетичного балансу має вигляд :

$$C_A \frac{\partial T}{\partial Z} = -UC_p \rho \frac{\partial T}{\partial Z} + W(-\Delta H) - \alpha F_{уд} (T - T_x) + \lambda_L \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \lambda_R \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (2.61)$$

Кінетичне рівняння та початкові умови такі ж, як і в попередній моделі :

$$W=f(C,T) \quad (2.62)$$

$$t = 0 : T = T_{поч}(Z) ; C = C_{поч}(Z); \quad (2.63)$$

До кордонних умов однопараметричній дифузійній моделі (2.58) і (2.59) додаються умови при  $r = 0$  та  $r = R$ .

$$\begin{aligned}
Z=0: & \quad U(C-C_{\text{вх}}) = D_l \frac{dC}{dZ}; \quad UC_p \rho (T - T_{\text{вх}}) = \lambda_l \frac{dT}{dZ} \\
Z=L: & \quad \frac{dC}{dZ} = 0; \quad \frac{dT}{dZ} = 0; \\
r=0: & \quad \frac{\partial C}{\partial r} = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0; \\
r=R: & \quad \frac{\partial C}{\partial r} = 0; \quad \lambda_R \frac{\partial T}{\partial r} = \alpha F_{\text{уд}} (T - T_{\text{ж}}).
\end{aligned}
\tag{2.64}$$

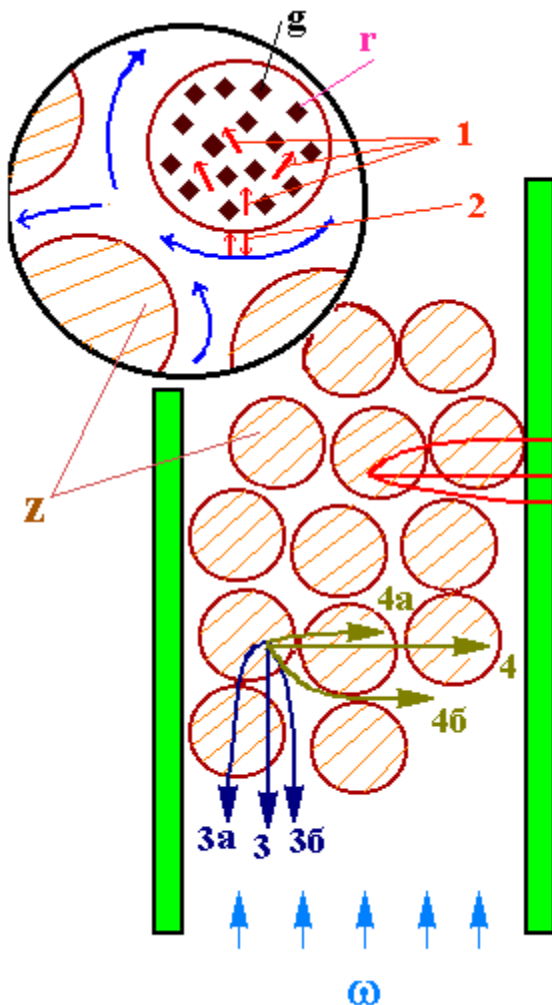
Розглянуті вище моделі використовуються для розрахунку різноманітних хімічних реакторів залежно від типу реактора, процесу, який протікає в ньому і поставленої мети дослідження.

### 3. ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ КАТАЛІТИЧНОГО РЕАКТОРА

#### 3. 1. Етапи побудови математичної моделі

В хімічному реакторі відбувається складний процес, що складається взаємодіючих елементарних процесів - хімічних перетворювань та фізичних етапів переносу речовини і тепла. У вигляді прикладу представимо схематично основні складові процесу, що тече у шарі каталізатора рис. 3.1.

На рисунку 3.1 позначено:



$r$  - хімічна реакція;  
 $w$  - струм реакційної суміші;  
 $z$  - зерна каталізатора;  
 $g$  - глобули каталізатора;

Процеси переносу :

1- всередині зерна каталізатора;  
2- між поверхнею та струмом суміші;  
3 - у продольному напрямі по верстві каталізатора :  
3а – тепла по зернам каталізатора;  
3б - речовини і тепла по газовій фазі;  
4 - у радіальному напрямі по шару каталізатора :  
4а - тепла по зернам каталізатора  
4б - речовини та тепла по газовій фазі  
5 - тепла від шару каталізатора до стінки апарату :  
5а - від газової фази  
5б - від зерен каталізатора.

Навіть з цієї об'легшеної схеми видно, наскільки складні і різноманітні процеси в шарі каталізатора. В реакторі, крім деяких шарів каталізатора, як правило, існують різноманітні теплообміни, смісительні та розподільні будови. Отже, реактор можна представити у вигляді багатоступінчастої структури. Математична модель такого складного об'єкту будує послідовно на основі попередньої побудови моделей його складових частин.

Дослідження складного процесу по частинам дає можливість переходити до моделі більш високого рівня, включаючи в неї як складову частину " вузьку" модель більш низького рівня. Цей перехід є коректним лише в тому випадку, якщо:

- відома область зміни перемінних, що цікавить нас, вхідних в "широку" модель більш низького рівня;
- проаналізована вузька модель всієї цієї області;
- показано, що "вузька" модель задовільно описує процес на більш низькому рівні.

Для складання математичного опису хіміко-технологічного процесу в реакторі та його дослідження необхідно поділити процес на більш прості частини та установити зв'язки між ними. Можливі різноманітні шляхи виділення рівней і складових частин складного процесу. Для цього, як правило, використовують системний та еволюційний спосіб.

Системний - реактор розглядається як сукупність підсистем, відображаючи при цьому його ієрархичну (взаємопідлеглу) будівлю, таким чином надана система розглядається у просторі.

Еволюційний - система (реактор) розглядається в розвитку, в часі. Послідовність етапів побудови математичної моделі каталітичного реактора розглянемо на прикладі найбільш расповсюдженого типу хімічних реакторів-реактору з непорушним шаром каталізатора рис. 3.2.

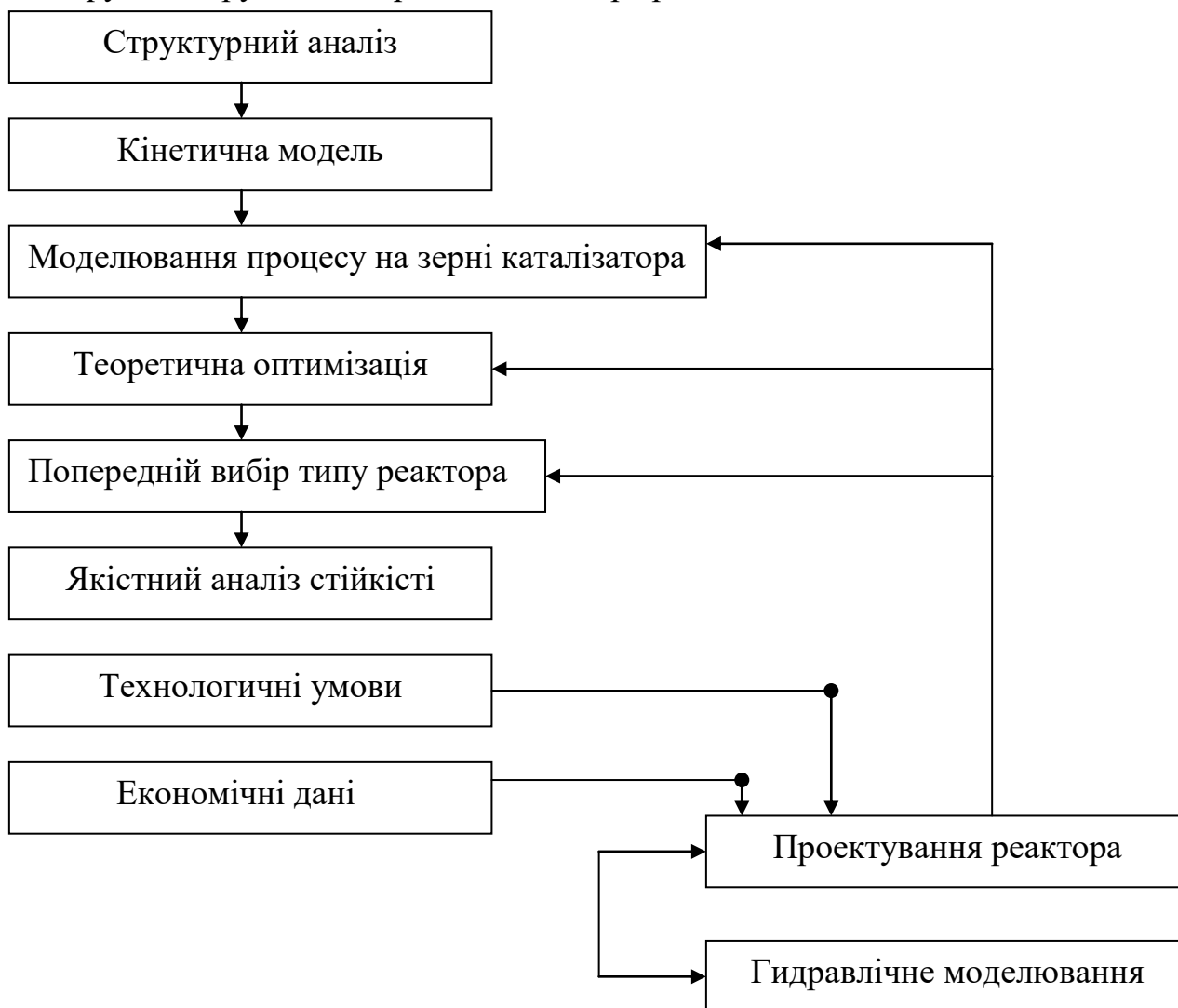


Рис. 3.2.

Треба визначити, що приведені етапи не задають однозначної послідовності,

а носять ітераційний характер .

Спершу сформулюємо завдання, що вирішуються на кожному з етапів, а після цього розглянемо більш докладно деякі з них.

1. Завданням **структурного аналізу** є вияв та опис структури реактора - виділення рівней більш простих складових складного процесу, протікаючого в реакторі, і встановлення зв'язків між ними.

2. **Кінетична модель** - сукупність стадій реакцій та дорівнень, що характеризують залежність швидкості реакції від концентрації, температури і тиска у всієї області їх зміни, що охоплює практичні умови реалізації конкретних процесів. Кінетична модель - основа математичного моделювання хімічних процесів і реакторів. На основі кінетичних закономірностей проводиться визначення оптимальної форми, розмірів і пористої структури зерен каталізатора, розрахунок необхідної кількості каталізатора в заданих умовах, оптимізація процесу і дослідження його стійкості, розрахунок статичних і динамічних характеристик процесу.

Дані, необхідні для побудови кінетичних моделей, одержують внаслідок експериментальних досліджень. Причому обов'язковою вимогою є забезпечення таких умов проведення експерименту досліду, що би цілком виключали вплив процесів переносу речовини і тепла при кінетичних вимірах, оскільки швидкість реакції повинна однозначно визначитися концентраціями, температурою і тиском в даний момент.

Засоби обробки експериментальних даних і побудови кінетичних моделей докладно розглядаються в курсі " Теорія хімічних процесів " .

3. **Модель процесу на одіночному зерні каталізатора** будується з урахуванням того, що хімічне перетворення протікає на внутрішній поверхні пористих зерен каталізатора, що утворюються багаточісленими парами різноманітного розміру і форми. Внаслідок виникають процеси переносу речовини і тепла у середині зерен.

Якщо відома детальна структура пор, то, використовуючи математичну модель, треба розрахувати швидкість реакції як функцію складу і температури реакційної суміші  $W_H = f ( C_{II}, T_{II} )$ , а також міра використання внутрішньої поверхні.

Математична модель процесу на одіному зерні каталізатора дозволяє вирішити і зворотне завдання - завбачити оптимальну пористу структуру, форму і розміри зерен каталізатора, показники, що забезпечують найкращу його працю.

4. На етапі **теоретичної оптимізації** визначаються найкращі умови здійснення процесу, не дбаючи про те, чи можуть вони бути реалізовані в реальних апаратах. Початковими даними для проведення всіх розрахунків на наданому етапі служать кінетичні дані. Одержані теоретичні оптимальні умови використовуються на наступних етапах - попереднього вибору типу реактора і техніко - економічних розрахунків.

5. **Попередній вибір типу реактора** проводиться на основі знайденого теоретичного оптимального режиму. Як правило, використовуючи математичні моделі, проводиться розрахунок деяких можливих варіантів і обирає той з них, що дозволяє найбільш повно реалізувати теоретично оптимальний режим.

6. **Стійкість процесу** має істотне значення при виборі конструкції апарату. Проблема дослідження стійкості виникає при здійсненні екзотемічних реакцій. Якщо при проектуванні обирати режими реактора тільки з умов матеріального і

теплового балансів та інтенсивності теплообміну, то можна легко зробити помилку, запроектувавши нестійкий режим.

Визначення параметричної чутливості необхідно для прогнозу поведінки реактора при різноманітних флуктуаціях вхідних параметрів, а також для вибору каналу управління технологічним режимом опрацювання системи автоматичного регулювання.

7. На етапі **проектування реактора**, використовуючи одержані раніше результати з обліком технологічних умов, обмежень і економічних даних, виробляє остаточний вибір технологічної схеми реактора, режиму його роботи і розрахунок необхідної кількості каталізатора. Залежно від особливостей процесу та міри його вивченності обирає масштаб першого досвідчено-промислового реактора.

8. **Гідравлічне моделювання** проводиться для визначення і подальшого усунення можливих відхилень від заданого технологічного режиму, обумовлених неоднорідністю умов подогріва або охолодження, неравномірністю підвода реакційної суміші в реактор, неоднорідністю прохідного струму крізь шар каталізатора та ін. Як правило, гідравлічне моделювання проводиться на фізичних моделях при виконанні умов геометричної і гідродинамічної подібності.

### 3. 2. Структурний аналіз

У вигляді прикладу розглянемо структурний аналіз процесу, протікаючого в реакторі з непорушним шаром каталізатора рис. 3.3.

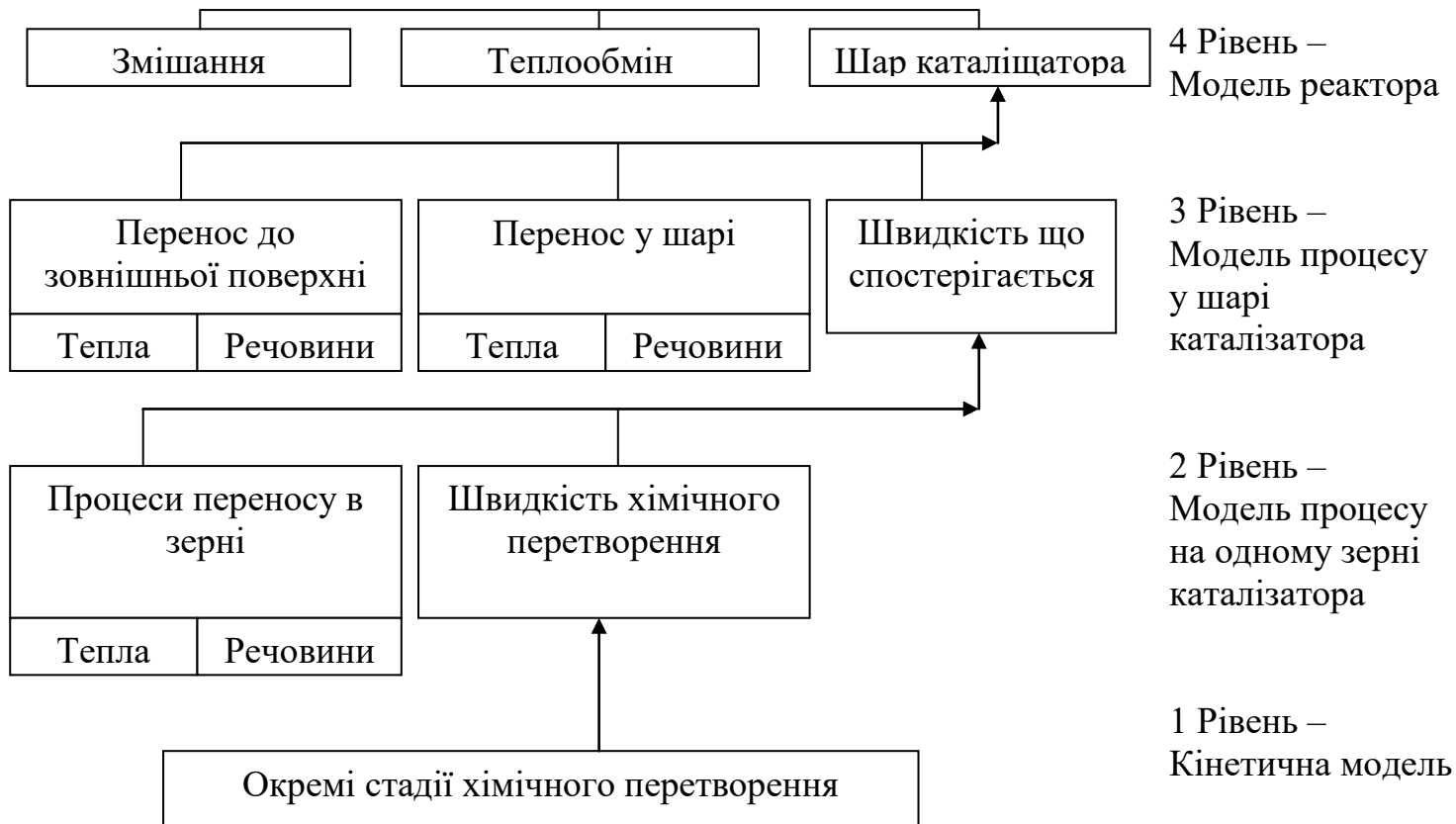


Рис 3.3

**Першим рівнем**, що складається із окремих стадій хімічного перетворення, служить знакова модель складної хімічної реакції, протікаючої в кінетичній області в відсутності процесів переносу тепла і речовини. Дорівнення, що описують швидкість хімічного перетворення (кінетична модель), входять як складні в модель **другого рівня** - модель процесу на одіночному зерні каталізатора.

Складовими частинами цього рівня є також стадії переносу речовини та тепла у середині зерна каталізатора. Зв'язки між окремими складовими описуються дорівненнями матеріального і теплового балансів. **Третій рівень** - модель процесу у шарі каталізатора урахуванням процесів переносу речовини і тепла як по шару каталізатора, так і до зовнішньої поверхні зерен. Модель другого рівня - швидкість, що спостерігає хімічне перетворення - входить у модель третього рівня як складова частина.

Модель **четвертого рівня** - модель реактора з урахуванням розміщення окремих прошарків каталізатора, теплообмінних, смесітельних та інших вузлів. Модель процесу в шарі каталізатора (модель третього рівня) входить як складова до моделі четвертого рівня.

Уявляючи реактор у вигляді багатоступінчастої моделі, ми поділяємо складний процес на більш прості частини і одержуємо можливість проводити вивчення по частинам і влаштовувати зв'язки між окремими частинами.

Можливі різноманітні шляхи виділення рівней і складових частин складного процесу у реакторі. Проте всі роздроблення повинні відповідати *принципу інваріантності складових частин до масштабу*, що укладає в наступному – закономірності протікання процесів в складових частинах наданого рівня моделі не повинні залежати від масштабу рівня, що роздивляється, а вплив масштабу слід враховуватися взаємодією між складовими частинами і краєвими умовами.

Необхідно визначити, що в цьому визначенні промова іде про інваріантності саме закономірності протікання процесів на нижньому рівні до процесів на більш високому рівні, а не про інваріантності кількісних залежностей. Так, зміна масштабу більш високого рівня може значно деформувати кількісну картину на більш низькому рівні, проте залежність протікання процесів залишаться минулими.

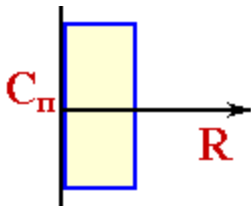
При дотриманні принципу інваріантності одержані суммарні залежності протікання процесу на нижньому рівні будуть входити як складні наступного рівня моделі і не будуть залежати від його масштабу. Наприклад, закономірності протікання процесів в складових частинах моделі другого рівня – порістого зерна каталізатора – перенос речовини і тепла у середині пор каталізатора і швидкості хімічного перетворення не залежать від масштабів зерна. Вплив же масштабу на розподіл концентрацій і температури по радіусу зерна визначаються краєвими умовами і характером тепло- і масообміну між зовнішньої поверхні зерна і ядром струму. Одержані залежності що спостерігаються швидкості реакцій на порістому зерні не залежать від масштабу наступного рівня - слоя каталізатора і входять в нього як складова частина математичної моделі процесів, протікаючих в шарі каталізатора.



### 3.3. Моделювання процесу на одному зерні каталізатора

У всякому гетерогенному процесі взаємодія між компонентами діється на поверхні розділу фаз чи в безпосередньою близькості від неї. Тому сучасні каталізатори становлять порісті матеріали з високорозвиненою внутрішньою поверхністю. Головна причина, що змушує застосовувати подібні каталізатори це багаторазове збільшення поверхні розділу фаз. Так, якщо непоріста гранула діаметром 5 мм має поверхність порядку  $10^{-4} \text{ м}^2$ , то поверхність пор в порістої гранулі такого ж розміру може складати 20-600  $\text{м}^2$ , т.ч. різниця може досягати  $10^5$  раз.

Картина процесу, протекаючого в порістому зерні каталізатора відрізняється великою складністю, тому що дифузія речовини проходить в вузьких порах, форма і перетин яких непостоянні. Для аналізу процесів в зерні каталізатора була запропонована достатньо проста схема - квазігомогенна модель. Відповідно до цього зерно розглядається не як складна система пор, а як деяке суцільне непорушне середовище, всередині якого іде дифузія реагентів (обумовлена ефективним коефіцієнтом дифузії  $D_3^*$ ) і в якій протікає хімічеська реакція (визначаєма константой швидкості реакції, віднесеною до одиниці обсягу зерна  $K_3$ ). При цьому, якщо реакція іде при постійній температурі, то значення  $D_3^*$  і  $K_3$  вважаються однаковими в всіх крапках зерна.



Для побудови моделі введем слідуєче спрощення - будемо розглядати зерно каталізатора безкінцевих розмірів. При цьому дифузійний струм спрямований від поверхні зерна вглиб уздовж осі R на безмежну глибину (рис.3.4). Мета цього спрощення складається у отому, щоб завдання стало одномерним - розглядається тільки одна координата.

**Рис 3.4** При зроблених допущеннях ізотермічеський процес в зерні каталізатора описується рівнянням :

$$\epsilon_3 \frac{\partial C}{\partial t} = D_3^* \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} - W \quad (3.1)$$

- де C - поточна концентрація;
- $\epsilon$  - порістость зерна каталізатора;
- r - поточна координата;
- t - час;
- D - ефективний коефіцієнт дифузії;
- W - швидкість хімічного перетворення;

**Краєві умови :** при  $r = 0$   $C = C_{\text{п}}$  ( 3. 2 )

при  $r \rightarrow \infty$   $C \rightarrow 0$

Для реакції 1-го порядку  $W = K S_{\text{уд}} W_c$  ( 3. 3 )

де K-константа швидкості реакції, віднесена до одиниці поверхні;

Sуд - питома поверхня, рівна відношенні суммарноу поверхні до обсягу зерна.

Для опису стаціонарного режиму при проходженні реакції першого порядку дорівнення (3.1) прийме наступний вигляд:

$$\varepsilon_3 * D_3^* \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} - K * S_{уд} * C = 0 \quad (3.4)$$

Вираз (3.4) з урахуванням крайових умов (3.2), одержимо

$$C = C_{П} * e^{-r * \sqrt{K_3 / D_3^*}} \quad (3.5)$$

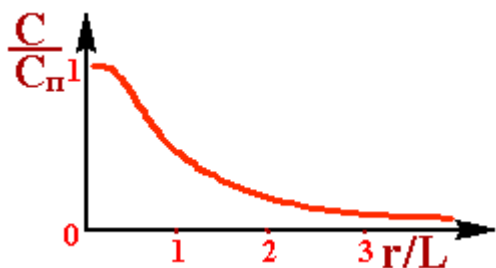
Позначимо :

$$L = \sqrt{D_3^* / K_3} \quad (3.6)$$

Тоді, замість (3.5) можна записати :

$$C = C_{П} * e^{-r / L} \quad (3.7)$$

Формула (3.7) у безмірному вигляді виражає глибину проникнення реагента в зерно каталізатора. На рис. 3.5 зображений графік цієї формули. По мірі углублення в зерно каталізатора концентрація зменшується. Теоретично зменшення може тривати до  $r = \infty$ .



Практично це вірно, починаючи з  $r/L \approx 5$  при цьому відношення концен трацій  $C/c \approx 0,01$ , і, відповідно швидкість реакції на два порядки менша, чим у зовнішню поверхні.

Для аналізу впливу різноманітних факторів на хід реакції слушно аналізувати протікання процесу,

**Рис.3.5.** прийнявши за абсцису або  $r$ , або аналізувати протікання

або відношення  $r/d$ , де  $d$  -діаметр зерна каталізатора. В цьому випадку розподіл концентрацій по зерну нескінченних розмірів, а певного діаметру  $d$ .

Виявляється, що розподіл концентрацій істотно залежить від відношення  $L/d$ . Взагалі кажучи, параметр  $L$  можна трактувати як масштаб глибини проникання реагента в зерно каталізатора. З іншого боку, цей параметр можна трактувати як деяку міру співвідношення швидкості дифузії і реакції: при малому значенні швидкість дифузії значно менш швидкості реакції та навпаки. В літературі широко використовується наступний параметр, називається пропорційний параметру

$L$ - безмірний модуль Тіле :

$$\Psi = R * \sqrt{K_3 / D_3^*} \quad (3.8)$$

де  $R$  - радіус зерна.

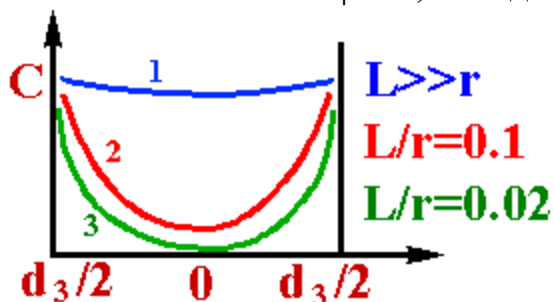
Модуль Тіле визначає відношення швидкості реакції до швидкості дифузії.

Залежно від величини параметра  $\Psi$  можливі різноманітні режими роботи каталізатора.

1. При малих значеннях модуля Тіле ( $\Psi < 0,5$ ) швидкість хімічної реакції значно менш, чим швидкість дифузії. В цьому випадку центру зерна буде відповідати дуже малі значення відношення  $r/L$ . Із рис. 3.7 видно, що при цьому

концентрація реагента в центрі зерна буде така ж, як і на поверхні, т. ч.  $C \approx C_p$  обсяг каталізатора працює з однаковою інтенсивністю, а швидкість процесу на зерні буде визначатись хімічною реакцією. Профіль концентрації по діаметру зерна показаний на рис. 3.6 (верхня крива), цю область роботи каталізатора прийнято називати кінетичною т. ч. лімітуючою стадією є кінетика процесу.

2. Більші значення  $\psi > 2,5$  відповідають режиму, при якому швидкість реакції значно більше швидкості дифузії. При цьому проходить швидке падіння концентрації реагента і реакція завершується в гирлі пор. Наданому режиму відповідає нижня крива на рис. 3.6. Таку область роботи каталізатора прийнято називати внутрідифузійною, так як лімітуюча стадія всього процесу є дифузія реагента у середину зерна каталізатора.



**Рис 3.6** Однією з найважливіших характеристик процесу на пористому зерні каталізатора є ступінь використання внутрішньої поверхні каталізатора, рівна відношенню спостережуваної швидкості реакції до швидкості реакції у відсутності внутрішнього дифузійного гальмування, у кінетичній області :

$$\eta = W_{\text{набл}} / W_{\text{кин}} \quad (3.9)$$

Для кінетичної області (при значеннях  $\psi < 0,5$ ) міра використання близька до 1, тобто використовується практично вся внутрішня поверхня. З зростанням модуля Тіле величина міри використання  $\eta$  монотонно прагне до нуля і у галузі значень  $\psi > 2,5$  процес протікає в внутрідифузійній області. В цьому випадку  $\eta = 1/\psi$ , тобто чим більше  $\psi$ , тим менш  $\eta$ .

Між дифузійною і кінетичною областями лежить перехідна область, відповідаюча умовам, при яких концентрація реагента в центрі зерна каталізатора менш, ніж на зовнішній поверхні, але вище розрахованій по рівненню (3.5).

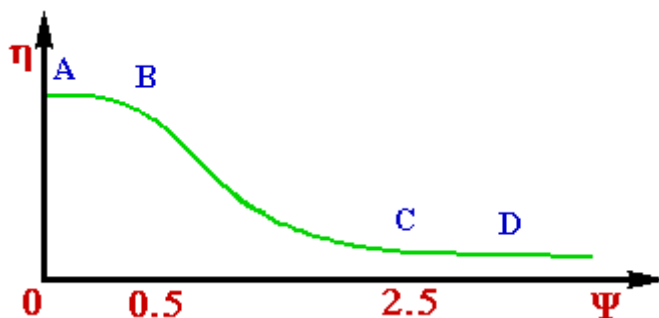
В цій області з зростанням параметру  $\psi$  міра використання змінюється від значень, характерних для кінетичної області, до значень, характерних для дифузійної області. У перехідній області працюють багато промислові каталізатори.

На графіку залежності міри використання внутрішньої поверхні від параметра Тіле (рис. 3.7) чітко відні ці три області протікання процесу на зерні:

- відтинки АВ ( $\psi < 0,5$ ) - кінетична;
- відтинки CD ( $\psi > 2,5$ ) - дифузійна;
- відтинки BC - перехідна область.

Зміщенню процесу з дифузійної в перехідну сприяють зменшення розміру зерна R збільшення ефектив коефіцієнту дифузії D.

Останнє в значно визначається збільшенням діаметрів пор. Щоб за рахунок такого зростання не надто зменшити внутрішню поверхню зерна каталізатора, доцільно застосовувати



**Рис 3.7**

каталізатори з бідисперсною структурою - широкі транспортні пори та дрібні мікропори. Таким чином, знаючи швидкість переносу реагентів всередині зерна каталізатора, можна зробити попередні висновки про його оптимальні порісті структури. Дано визначення оптимальної структури. Швидкість реакції  $W$ , віднесена до одиниці обсягу зерна каталізатора, - це по суті активність одиниці обсягу каталізатора. Вона залежить від питомої активності  $W_{уд}$  - скорості реакції, віднесеної до одиниці поверхні каталізатора, питомої повехності каталізатора  $S_{уд}$  і її доступності, що характеризується мірою використання внутрішньої поверхні  $\eta$

$$W = W_{уд} * S_{уд} * \eta \quad (3.10)$$

Для наданого хімічного складу каталізатора його питома активність приблизно постійна. Отже, максимальна активність каталізатора відповідає максимальному значенню  $S_{уд} * \eta$ . Порісту структуру, що забезпечує цю умову, прийнято називати оптимальною. Надане визначення відноситься до нагоди протікання простих реакцій. Для складних реакцій оптимальна поріста структура повинна забезпечувати максимальну швидкість реакції при заданій селективності.

Для реакцій, протікаючих у кінетичній області, швидкість реакції прямо пропорційна загальній внутрішньої поверхні ( $\eta = 1$ ). Максимальне значення твору  $S_{уд} * \eta$  можливо при тонкопорістій структурі зерна каталізатора.

Для реакцій, протікаючих в дифузійній області, міра використання менш 1, що пояснюється впливом внутрідифузійного гальмування. Максимальне значення твору  $S_{уд} * \eta$  у данному випадку залежить не тільки від величини внутрішньої поверхні, але і від параметра  $\psi$ . При інших рівних параметрах зменшити величину  $\psi$  і відповідно, збільшити  $\eta$  можна за рахунок зменшення розміру зерна. При цьому відкриваються нові устя пор, в яких протікає реакція.

При подальшому роздрібненні наступить такий стан, коли в усіх порах концентрація  $C$  стане рівної  $C_p$  і процес перейде в кінетичну область. Основні рекомендації по вибору оптимальної порістої структури повинні засновуватися на аналізі впливу процесів переносу речовини всередині зерна і хімічного перетворення, а також обліку технологічних умов здійснення конкретного процесу.

Помімо оптимальної порістої структури на показники роботи реактора істотний вплив оказують розміри зерна каталізатора і його форма. Під оптимальними формами і розмірами зерен каталізатора будемо розуміти такі, що дозволяють досягнути задану продуктивність при мінімальних видатках на контактний апарат з каталізатором і подолання його гідравлічного опору.

### 3.4 Теоретична оптимізація.

На етапі теоретичної оптимізації визначається теоретичний оптимальний режим, що надалі є об'єктивним критерієм оцінки вибору конструкції реактора і всієї технологічної схеми.

У вигляді прикладу розглянемо залежності міри перетворення від температури при різноманітних часах контакту для єдиної екзотермічної реакції - необоротної і оборотної.

На рис. 3.8 приведені ці залежності для нагоди протікання необоротної реакції для трьох значень часу контакту, причому  $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3$ .

З зростанням температури збільшується константа швидкості реакції, відповідно, швидкість хімічного перетворення. По мірі протечи реакції зменшується концентрація, що у кінці прагне до 0, тому що  $X \rightarrow 1$ .

Вихід продукту при цьому максимален.

Із рис. 3.8 також видно, що збільшення часу контакту в реакторі дозволяє при заданій температурі забезпечити понад високу міру перетворення.

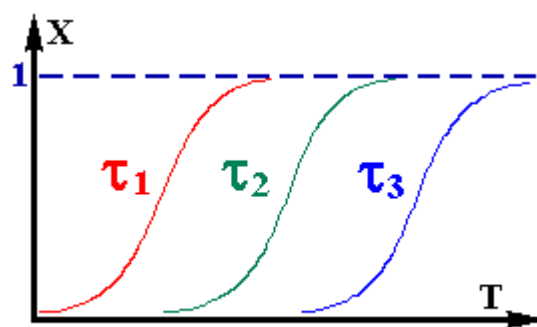


Рис. 3.8

На рис. 3.9 приведені аналогічні залежності для випадку протечи оборотної реакції.

В цьому випадку для кожного значення часу контакту при підвищенні температури спершу спостерігається зростання міри перетворення до деякого максимального значення, а після цього - зниження. Температура, яка відповідає максимальному виходу продукту називається оптимальною температурою.

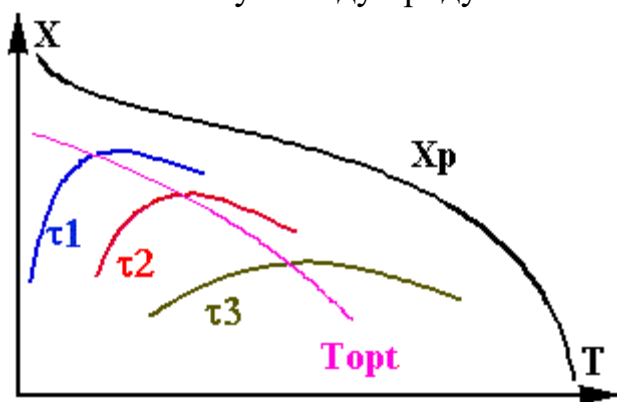


Рис. 3.9

Розглянемо одну із простіших задач оптимізації - визначення оптимальної температури в кожному перетині реактора ідеального витиснення. Состав продуктів на виході із реактора залежить від профіля температури в самому реакторі.

Очевидно, що повинен існувати такий температурний профіль, при якому вихід цільового продукту буде максимальним. Для простих процесів (з однією хімічною реакцією) визначення оптимальних умов

упрощається. Ці процеси є незв'язними, для них оптимальний режим не залежить від протечи процесу в інші моменти часу. Інакше кажучи, локальна швидкість хімічного процесу повинна бути максимальною в кожний момент часу чи в кожному перетині реактора.

Розглянемо деякі випадки, коли можна вказати характер оптимального температурного профіля. Якщо ріст температури, пришвидчуючи процес, збільшує селективність (або не впливає на неї), то оптимальна температура повинна бути максимально високою. Так, підвищення температури:

- при протеканні єдиної необоротної реакції збільшує її швидкість;
- не тільки прискорює швидкість оборотної ендотермічної реакції, але і зміщає рівновагу в сторону утворення цільового продукту;
- для паралельних та послідовних реакцій, в тому випадку, коли енергія активації основної реакції більше енергії активації побочної, збільшує як швидкість, так і селективність процесу. В усіх цих випадках температуру процесу треба підтримувати на верхній допустимій межі  $T_{max}$ , що може визначатися термостійкістю каталізатора, появою небажаних побочних реакцій чи переходом реакції в обсяг.

При протеканні хімічних реакцій іншого типу для визначення оптимального температурного режиму використовуються різноманітні засоби рішення завдань оптимізації. У вигляді прикладу розглянемо знаходження оптимального



температурного профіля для оборотної екзотермічної реакції  $A \rightarrow B + Q$  причому енергія активації прямої реакції менш, що зворотної, тобто  $E_1 < E_2$ . В цьому випадку підвищення температури прискорює зворотну реакцію сильніше, чим пряму, так що рівновага процесу зміщується в небажану сторону. При деякій температурі швидкість утворення цільового продукту проходить крізь максимум. Ця оптимальна температура залежить від складу реакційної суміші, змінюясь по мірі зниження концентрації вихідної речовини рис. 3.9. Таким чином, спершу, поки що не накопичилася кількість кінцевого продукту, процес вигідно вести при високій температурі, щоб збільшити швидкість прямої реакції, а після цього температуру треба знижувати, щоб змістити рівновагу в потрібну сторону, добитися максимального виходу цільового продукту. Температура в кожному перетині реактора повинна бути обрана так, щоб швидкість утворення цільового продукту в цьому перетині була максимальною, щоб викону валася рівність  $dr/dt = 0$  ( умова існування екстремума функції ).

Якщо температурна залежність константи швидкості реакції визначається рівнянням Аррейніуса, оте рівняння швидкості реакції має наступний вигляд :

$$r = K_{01} * e^{-\frac{E_1}{R * T}} * f(C) - K_{02} * e^{-\frac{E_2}{R * T}} * v(C) \quad (3.17)$$

де  $K_{01}, K_{02}$  - предекспоненціальні множители прямої та зворотної реакцій.

$E_1, E_2$  - енергії активації прямої та зворотної реакцій\*

$f(C), v(C)$  - кінетичні функції прямої та зворотної реакцій, відбиті через концентрацію одного із початкових речовин, що приймається за ключеве.

Диференціюя (3.17) по температурі та приравняв похідну до нулю, одержимо вираз для визначення оптимальної температури процесу як функцію концентрації ключевого компоненту:

$$T_{opt} = \frac{E_1 - E_2}{R} * \ln \left[ \frac{K_{02} * E_2}{K_{01} * E_1} * \frac{v(C)}{f(C)} \right] \quad (3.18)$$

Підставив в (3.18) відповідні значення концентрації ключевого компоненту чи міри перетворення, можна одержати оптимальний температурний профіль.

Аналогічні залежності одержані і для інших типів реакцій.

Оптимальний температурний режим для найбільш поширених типів реакцій зображено на рис. 3.10

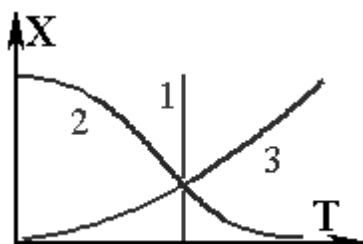


Рис. 3.10

Лінія 2 визначає оптимальний температурний профіль для оборотних реакцій типу  $A \rightleftharpoons B + Q$  та послідовних реакцій типу  $A \rightarrow B \rightarrow C$ , коли  $E_1 < E_2$ .

Для паралельних реакцій у випадку, коли енергія активації побіної реакції більше, чим основної  $E_1 > E_2$ , оптимальний температурний профіль відповідає лінії 3.

Розглянуті вище приклади відносяться до випадку, коли

керуючим параметром служить температура. В інших випадках для мети управління можна використовувати тиснення, склад реакційної суміші та ін.

Необхідно також визначити, що при визначенні оптимального режиму необхідно, як правило, враховувати різноманітні обмеження - по составу газової суміші, термостійкості каталізатора, обсяговому витрату реакційної суміші.

### 3. 5. Попередній вибір типу реактора .

У якості прикладу розглянемо вибір типу апарату для процесу одержання формальдегіда із метанола. В наданому процесі протікає дві послідовні необоротні екзотермічні реакції, причому енергія активації другої побочної реакції менш енергії активації основної реакції. В цьому випадку теоретично оптимальним є ізотермічний режим при максимально можливій температурі, що визначається умовами термостійкості каталізатора.

Моделювання було проведено для трьох різноманітних апаратів : трубчатий реактор з безупинним відведенням тепла (а), апарат з трьома адіабатично працюючими верствами каталізатора та відведенням тепла між ними (б), апарат, що комбінувався послідовно, що становить послідовно розміщені трубчаті частину і одну адіабатичну працюючу верству каталізатора (в) (Рис. 3. 11).

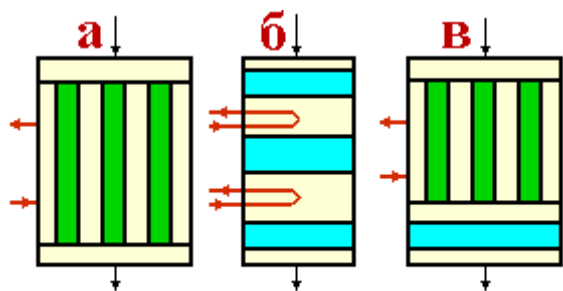


Рис. 3.11

Профілі температур для кожного із

розглянутих апаратів приведені на Рис. 3. 12.

Як видно з приведених графіків, найкращим образом наблизитися до теоретично оптимального режиму можна в апараті, що комбінувався. Параметрами, що визначаються вибір реактора, є жарактер і число фаз, потужність реактора, активність каталізатора, величина адіабатичного розігріву, температурний інтервал допущеної праці каталізатора, наявність дифузійного гальмування, зміна активності каталізатора в часу та ін. .

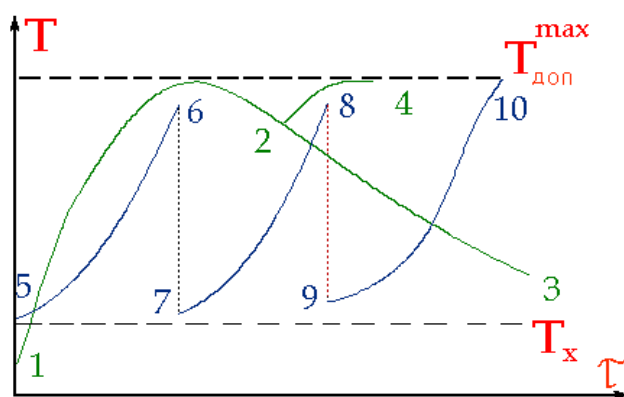


Рис. 3.12

### 3. 6. Моделювання процесу в шару каталізатора.

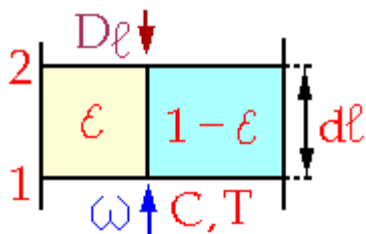
При моделюванні процесів в шару необхідно враховувати ряд особливостей :

1. Наявність двох фаз - твердої - зерна каталізатора та газоподібної (жідкої) - струм реакційної суміші.
2. Температура і концентрації компонентів в газовій і твердій фазах можуть розрізнятися надто значно.
3. Перенос тепла по шару здійснюється як по твердій фазі, так і потоку реагентів, а перенос речовини - тільки по потоку реагентів.

Для більшості промислових процесів в залежності від співвідношення висоти шара каталізатора ( $L$ ) до діаметру ( $D$ ) стає можливим не враховувати оті чи інші елементарні процеси (рис. 3.13). Так, якщо  $L > D$ , оте істотне значення мають процеси переносу в радіальному напрямку і передачі тепла крізь стінку апарату, а при  $L \gg D$ , оте, як правило, можна зневажити процесами переносу в продольному напрямку за рахунок дифузії і теплопровідності. Процес в апараті такого типу може бути описаний двухпараметричною дифузійною моделлю за умови, що  $D=0$ .

Для апаратів, коли  $L < D$ , картина міняється: процесами радіального переносу і теплоотвода крізь стінку часто можна зневажити, а процеси подовжнього переносу грають надто помітну роль. Розглянемо понад докладно останній випадок. Якщо процеси переносу між зовнішньою поверхню зерна каталізатора і ядром струму не виявляють помітного впливу на показники процесу, відбувається інтенсивний тепло і масообмін поміж фазами, оте для опису процесу в цьому випадку можна використовувати дифузійну модель з одним параметром. В разі достатньо більших лінійних швидкостей потоку та високих шар каталізатора укладення дифузійної, що складає, надто незначтний і для опису процесу в шару каталізатора можна використовувати модель РІВ. Коли вплив зовнішнього тепло- і масообміна істотно, оте в цьому випадку використовується двухфазна модель для опису процесів в шару каталізатора. Схематично надану модель можна представити слідующим чином (рис.3.13).

Шар ділиться на дві частини - тверда фаза (зерна каталізатора) і вільний обсяг, по якому проходить весь струм реагентів. Хімічне перетворення діється тільки в твердій фазі. При висновку рівнянь математичної моделі прийняті наступні позначення:



**Рис. 3.13**

- - частка вільного обсягу шару та зерна; долі;
- $dF$  - поверхня обміну між фазами у виділеному елементарному обсязі шаруючи висотою  $dl$ ,  $m^2$ ;
- $\square_K$  - ефективний коефіцієнт теплопровідності по твердій фазі,  $вт/(м.К)$ ;
- $\square_m, \square_T$  - коефіцієнти масо- і теплообміну,  $м/с$  і  $вт/(м^2.К)$ , відповідно;

$C_z, T_z$  - концентрація і температура на зерні каталізатора;

$C_k$  - теплоємність каталізатора,  $Дж/(м^3.К)$ ;

$W_n, W$  - швидкість хімічного перетворення, що спостерігається, віднесена до одиниці об'єму зерна каталізатору чи шару,  $моль/(м^3.с)$ .

Інші позначення аналогічні дифузійної моделі.

Математичний опис процесу має наступний вид :

1. Матеріальний баланс в газовій фазі враховує процеси переносу маси за рахунок дифузійного і конвективного струмів і масообмін між фазами. Розглянемо докладно висновок цього рівняння :

- Прихід речовини з струмом

$$+ \frac{W}{\varepsilon} S * \varepsilon * C|_1$$

-Витрата речовини з струмом



$$- \frac{\Omega}{\varepsilon} S * \varepsilon * C \Big|_2$$

- Прихід речовини за рахунок  $dC$  потоком продольної дифузії

$$+ D_l * S * \varepsilon \frac{\partial C}{\partial l} \Big|_2$$

- Видаток речовини за рахунок продольної дифузії

$$- D_l * S * \varepsilon \frac{\partial C}{\partial l} \Big|_1$$

- Передається каталізатору за рахунок масообміну

$$\square \square_m * dF * C$$

- Приймається від каталізатора за рахунок масообміну

$$\square \square_m * dF * C_3$$

- Зміна кількості речовини в вільному обсязі шара  $\square \square * S * dl$

Поділивши всі доданки на  $S dl$  і привівши подібні, одержимо в остаточному виді дорівнення матеріального балансу для газової фази :

$$D_l \cdot \varepsilon \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial l^2} - \varpi \frac{\partial C}{\partial l} + \alpha_m \cdot S_{y\partial} \cdot (C_3 - C) = \varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} \quad (3.19)$$

2. Тепловий баланс в газовій фазі враховує процеси переносу тепла за рахунок продольної теплопроводності, конвективного потоку і теплообміну між фазами. Висновок аналогічен попередньому.

$$\lambda_l \cdot \varepsilon \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial l^2} - \varpi \cdot C_p \cdot \rho \frac{\partial T}{\partial l} + \alpha_T \cdot S_{y\partial} \cdot (T_3 - T) = \varepsilon \cdot C_p \cdot \rho \frac{\partial C}{\partial t} \quad (3.20)$$

3. Матеріальний баланс в твердій фазі враховує перенос речовини між фазами за рахунок масообміну та хімічне перетворення :

$$\alpha_m \cdot S_{y\partial} (C - C_3) - W_n \cdot (1 - \varepsilon) = \varepsilon_3 \cdot (1 - \varepsilon) \frac{\partial C_3}{\partial t}$$

Позначивши  $W = W_n \cdot (1 - \varepsilon)$  та  $\varepsilon_k = \varepsilon_3 \cdot (1 - \varepsilon)$  одержимо:

$$\alpha_m \cdot S_{y\partial} (C - C_3) - W = \varepsilon_k \frac{\partial C_3}{\partial t} \quad (3.21)$$

4. Тепловий баланс в твердій фазі враховує процеси переносу тепла за рахунок теплопроводності і теплообміна між фазами, виділення тепла за рахунок хімічної реакції

$$\frac{\lambda_K \cdot (1 - \varepsilon)}{C_p \cdot \rho} \cdot \frac{\partial^2 T_3}{\partial l^2} - \frac{\alpha_T \cdot S_{y\partial}}{C_p \cdot \rho} \cdot (T_3 - T) + \frac{W \cdot (-\Delta H)}{C_p \cdot \rho} = \frac{C_K}{C_p \cdot \rho} (1 - \varepsilon) \cdot \frac{\partial T_3}{\partial t} \quad (3.22)$$

Система рівнянь становить собою двохфазну математичну модель процесу в непорушному шарі каталізатора. Надану модель використовують при моделюванні процесів, для яких істотне значення має зовнішній тепло- і масообмін, а також для розрахунку перехідних режимів.

## 4. УСТАЛЕНІСТЬ РЕАКТОРНИХ СХЕМ

Усталеність - здатність системи повертатися у вихідний стаціонарний стан після усунення зовнішніх впливів.

Дослідження стійких і хитливих стаціонарних станів здійснюються на основі аналізу поведінки системи в часі після впливу якого-небудь збурювання. Подібний аналіз звичайно проводиться за допомогою аналітичних або чисельних методів. Однак у ряді випадків можна використовувати критерії стійкості - умови, що дозволяють визначати усталеність стаціонарного стану реактора по величині його параметрів.

У цьому розділі розглянутий такий підхід для дослідження стійкості простих реакторних схем. Приведено висновки критеріїв стійкості для двох схем. Як приклади розглянуті два промислових

### 4.1 Методи дослідження усталеності

Усталеність - одна з найважливіших характеристик матеріальних систем. Під стійкістю розуміють здатність системи зберігати свій стан в умовах впливу середовища, що обурює.

Дослідження стійких і хитливих стаціонарних станів здійснюються на основі аналізу поведінки системи в часі після впливу якого-небудь збурювання.

А.М.Ляпунов у 1935 році вперше дав строгу постановку задачі про усталеність руху і запропонував два методи рішення. Ці роботи стали основою вивчення стійкості технічних систем, у тому числі і хімічних процесах і реакторів.

Загальний аналіз точними методами, що дозволяє визначити число стаціонарних станів і їхню усталеність, є досить складною математичною задачею. Детальний розгляд цих методів виходить за рамки даного курсу, тому дамо лише їхній короткий опис.

Перший метод Ляпунова заснований на аналізі коренів характеристичного рівняння і побудові траєкторій на фазовій площині. Для стійкості лінійної системи n-го порядку необхідно і досить, щоб усі n коренів її характеристичного рівняння:

$$a_0 p^n + a_1 p^{n-1} + a_2 p^{n-2} + \dots + a_{n-1} p + a_n = 0 \quad (4.1)$$

розташовувалися на комплексній площині коренів  $p = a + b_i$  ліворуч від мнімої осі.

Як правило, математичні моделі хімічних реакторів складаються з нелінійних рівнянь. Але при малих відхиленнях від стаціонарного режиму ці рівняння можна лінеаризувати в околицях стаціонарного режиму і надалі використовувати апарат дослідження лінійних рівнянь.

Другий метод Ляпунова заснований на аналізі стійкості з використанням функції Ляпунова  $V(x)$ , що повинна задовольняти наступним умовам:

$$\begin{aligned} V(x) > 0 \text{ при } x \neq 0 \\ V(x) = 0 \text{ при } x = 0 \\ \frac{d}{dt} < 0 \text{ при } x \neq 0 \\ \lim(x) \rightarrow \text{при } |x| \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (4.2)$$

Основна складність при використанні цього методу складається в перебуванні самої функції Ляпунова і знака її похідної. Однак при використанні

цього методу для дослідження стійкості відпадає необхідність у побудові всіх траєкторій на фазовій площині.

Може створитися враження, що усталеність по Ляпунову недостатня через малість збурювань, що накладаються, і необхідно розглядати "технічну" усталеність - при кінцевих збурюваннях. Дійсно, усталеність по Ляпунову, є необхідним, але, узагалі говорячи, недостатньою умовою для рішення технічних задач. Проте, у більшості практичних випадків аналіз стійкості методами Ляпунова дає і достатні умови.

Якщо виникає необхідність досліджувати чутливість технологічного режиму реактора до значних відхилень від стаціонарного режиму, то використовується чисельний аналіз перехідних режимів на основі моделі, що описує нестационарний процес. Такий аналіз виконується на ЕОМ.

Однак далеко не завжди виникає необхідність прибігати до досить складного апарата дослідження стійкості за допомогою точних методів або до досить великому дослідженню чисельними методами. У ряді випадків можна використовувати критерії стійкості. Критерії стійкості - умови, що дозволяють визначати усталеність стаціонарного стану реактора по величині його параметрів. Так, для простих схем контактних вузлів справедливий якісний підхід, заснований на обчисленні параметричної чутливості стаціонарних режимів.

#### 4.2 Усталеність простих схем

Простою схемою контактного вузла називається схема, у якій мається тільки один зворотний зв'язок - вплив результатів протікання процесу на початкові умови в реакторі. Наприклад, зворотним зв'язком є зовнішній теплообмін між газовим потоком, що виходить з реактора, і вихідною реакційною сумішшю, що надходить у реактор. Зворотний зв'язок може бути також обумовлена внутрішнім теплообміном, подовжнім переносом речовини і тепла в шарі, циркуляцією реагуючих речовин і ін.

При малих змінах параметрів параметрична чутливість визначається як частинна похідна функції, що характеризує технологічний режим у реакторі, по відповідному параметрі при стаціонарному режимі. Вона визначає ступінь впливу параметрів режиму і граничних умов на роботу реактора і тісно зв'язана зі стійкістю і можливостями регулювання процесом.

Як приклад розглянемо просту реакторну схему, що складається з реактора з одним адіабатичним шаром каталізатора (1) і зовнішнього теплообмінника (2) з байпасом для регулювання температури перед шаром каталізатора (рис.4.1).

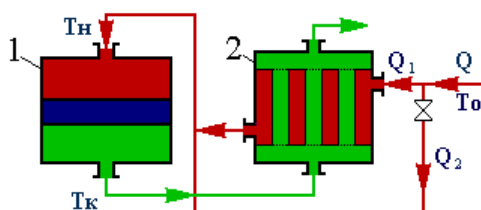


Рис.4.1

Подібні реакторні схеми широко застосовуються в промисловості.

Справа в тім, що з метою економії енергії для підігріву вихідної суміші доцільно утилізувати частину тепла, що виділяється в результаті хімічної реакції.

Для спрощення висновку прийемо, що  $Q_2=0$ , тобто байпас відсутній. З теплового балансу випливає, що в стаціонарному режимі

$$Q C_p \rho (T_H - T_e) = K_T F \Delta t_{cp} \quad (4.3)$$

де

$Q$  - об'ємна витрата;

$K_T$  - коефіцієнт теплопередачі;

$F$  - поверхня теплообміну;

$\Delta t_{cp}$  - середня різниця температур гарячого і холодного теплоносіїв;

$C_p, \rho$  - теплоємність і щільність реакційної суміші, відповідно.

$$\text{Але } \Delta t_{cp} = (T - T_0 + T_K - T_H) / 2 \quad (4.4)$$

Якщо об'ємні витрати, теплоємності і щільності обох теплоносіїв однакові, а тепловими втратами можна знехотити, то з балансу для теплообмінника

$$Q C_p \rho (T_K - T) = Q C_p \rho (T_H - T_e)$$

можна знайти значення  $T$ :

$$T = T_K - T_H + T_e \quad (4.5)$$

Підставивши (4.5) у (4.4) одержимо:

$$\Delta t_{cp} = T_K - T_H \quad (4.6)$$

Тоді, підставивши (4.6) у (4.3), можна записати:

$$Q C_p \rho (T_H - T_e) = K_T F (T_K - T_H) \quad (4.7)$$

чи:

$$T_H - T_e = \gamma (T_K - T_H) \quad (4.8)$$

$$\text{де } \gamma = K_T F / (Q C_p \rho) \quad (4.9)$$

Для адиабатичного шару температуру на виході можна знайти по наступному вираженню:

$$T_K = T_H + \Delta T_{ад} \quad (4.10)$$

де  $\Delta T_{ад} = (-\Delta H) C_{ix} / (C_p \rho)$  - адиабатичний розігрів реакційної суміші.

З (4.10) випливає, що  $T_K = f_1(T_H)$ .

Перетворивши (4.8), одержимо:

$$T_H = (\gamma T_K + T_e) / (1 + \gamma) \quad (4.11)$$

З (4.11) видно, що початкова температура  $T_H$  залежить від результатів протікання процесу, тобто  $T_H = f_2(T_K)$ . Отже, у даній схемі має місце зворотний зв'язок.

Область стійкості являє собою сукупність значень параметрів, для яких дотримується умова стійкості (2.20), обумовлене в даному випадку наступним нерівністю:

$$\frac{d(T_K - T_H)}{dT_H} < \frac{Q \cdot C_p \cdot \rho}{K_T \cdot F} \quad (4.12)$$

З теплового балансу (4.7):

$$\frac{Q \cdot C_p \cdot \rho}{K_T \cdot F} = \frac{1}{\gamma} = \frac{T_K - T_H}{T_H - T_0} \quad (4.13)$$

Підставивши (4.13) у (4.12), умова стійкості можна записати:

$$\frac{dT_K}{dT_H} < 1 + \frac{T_K - T_H}{T_H - T_0} \quad (4.14)$$

чи:

$$\frac{dT_K}{dT_H} < 1 + \frac{1}{\gamma} \quad (4.15)$$

При роботі будь-якого промислового апарата дуже часто можливі різні коливання параметрів процесу. Для можливості їхньої компенсації і підтримки технологічного режиму в заданих межах передбачають байпас свіжої реакційної суміші повз теплообмінник, але при цьому трохи збільшують поверхню теплообміну. Розглянемо випадок, коли  $Q_2 \neq 0$ . У цьому випадку умова стійкості має наступний вид:

$$\frac{dT_K}{dT_H} < 1 + \frac{1}{\gamma} + \frac{Q_2}{2 \cdot Q_1} \quad (4.16)$$

Збільшення поверхні теплообміну приводить до збільшення параметра тепловідводу  $\gamma$ , що зменшує область стійкості, при якій можливий автотермічний режим. Але наявність байпасу дає можливо стабілізувати вхідну температуру.

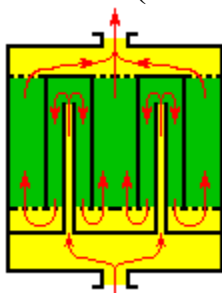
Аналіз умови (4.16) показав, що доданок, що враховує вплив байпасу  $Q_2/(2Q_1)$ , тільки компенсує зменшення що складається  $QC_p \rho / (K_T F_p)$  у рівнянні з величиною  $QC_p \rho / (K_T F_T)$ , але не розширює область стійкості (тут  $F_T$  - теоретично необхідна величина поверхні теплообміну,  $F_p$  - реальна поверхня теплообміну). Отже, байпасом можна стабілізувати процес тільки в межах області стійкості, обумовленої умовою (4.12) чи (4.15), причому  $F = F_T$ .

Розглянемо умову (4.14). З (4.10) випливає, що  $T_K - T_H = \Delta T_{ад}$ . Різниця  $T_H - T_e$  визначає величину зміни температури вихідної суміші. Позначивши її  $\Delta T_{нагр}$  і підставивши в (4.14), одержимо:

$$\frac{dT_K}{dT_H} < 1 + \frac{\Delta T_{ад}}{\Delta T_{нагр}} \quad (4.17)$$

Область стійкості визначається відношенням величини підвищення температури реакційної суміші в шарі каталізатора ( $\Delta T_{ад} = T_K - T_H$ ) до величини підвищення температури вихідної суміші. Співвідношення (4.17) визначає область стійкості й автотермічності процесу. Чим більше ступінь використання тепла реакційних газів, тим менше область стійкості.

Умови стійкості, аналогічні (4.12), отримані і для реакторів із внутрішнім теплообміном (мал.4.2):



$$\frac{d(T_K - T_0)}{dT_H} < \frac{2 \cdot Q \cdot C_p \cdot \rho}{K_T \cdot F} \quad (4.18)$$

Рис.4.2

### 4.3 Усталеність промислових реакторів.

Розглянемо усталеність двох промислових каталітичних реакторів - окислювання диоксиду сірки й очищення газових викидів від оксиду вуглецю.

Реактор для окислювання діоксида сірки являє собою багат шаровий апарат з теплообмінниками після кожного шару каталізатора (рис.4.3). У якості хладагента використовується вихідна реакційна суміш. Усталеність всього апарата визначається стійкістю роботи перших шарів каталізатора.

Для першого шару каталізатора, використовуючи умову стійкості (4.14), одержимо:

$$\frac{dT_{1к}}{dT_{1н}} < 1 + \frac{T_{1к} - T_{1н}}{T_{1к} - T_{2н}} \quad (4.19)$$

Значення параметричної чутливості ( $dT_{1до} / dT_{1н}$ ) визначається розрахунковим шляхом. Значення ( $T_{1к}$ ,  $T_{1н}$ ) і  $T_{2н}$  визначаються з умов оптимального технологічного режиму.

Побудуємо графік залежності ( $dT_{1до} / dT_{1н}$ ) від температури на вході в перший шар каталізатора для різних часів контакту (рис.4.4).

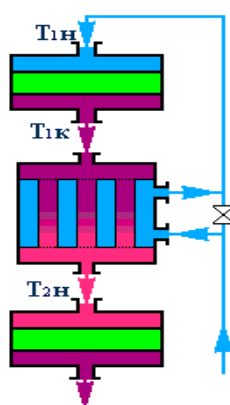


Рис.4.3

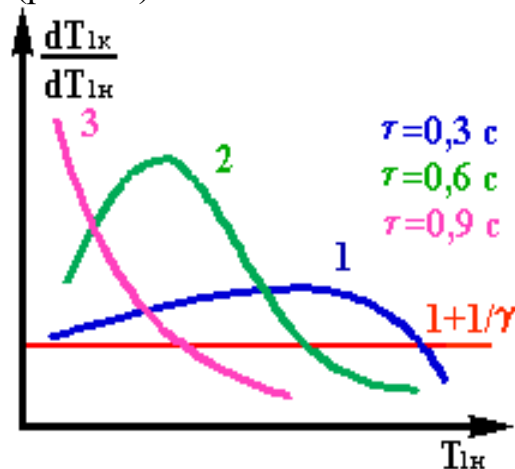


Рис.4.4

Правій частини умови (4.15) відповідає лінія, що відповідає величині  $1 + 1/\gamma$ . Із графіка випливає, що усталена робота реактора досягається при наступних умовах:

$T_{1н} \text{ } ^\circ\text{C} > 450 \text{ } ^\circ\text{C}$  для  $t = 0,3 \text{ с}$ ;

$T_{1н} \text{ } ^\circ\text{C} > 430 \text{ } ^\circ\text{C}$  для  $t = 0,6 \text{ с}$ ;

$T_{1н} \text{ } ^\circ\text{C} > 415 \text{ } ^\circ\text{C}$  для  $t = 0,9 \text{ с}$ ;

Отже, чим більше запас каталізатора, тим при менших вхідних температурах можна працювати в стійкому режимі.

Реактор для очищення газових викидів від оксиду вуглецю являє собою типову просту схему - одношаровий реактор і зовнішній теплообмінник (рис.4.1). При визначенні умов усталеної роботи апарата необхідно було врахувати, що концентрація оксиду вуглецю мінялася в часі. На рис.4.5 приведені результати розрахунків при граничних і середніх значеннях концентрацій.

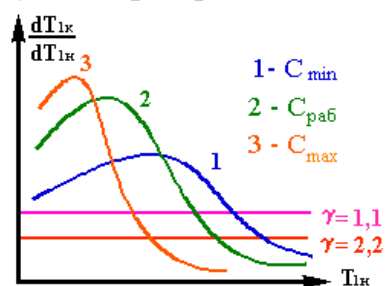


Рис. 4.5

На графіку відзначені області усталеної роботи для двох різних поверхонь теплообміну  $F_1$  і  $F_2$ , причому  $F_2 = 2F_1$ .

Видно, що зі збільшенням ступеня використання тепла зменшується область стійкості.



## 5. МЕТОДИ ОПТИМІЗАЦІЇ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

### 5.1. Постановка задачі оптимізації

Оптимізація в широкому **змісті** слова знаходить застосування в науці, техніці й у будь-якій іншій **області** людської діяльності.

Оптимізація - цілеспрямована діяльність, що **полягає** в **одержанні** найкращих результатів при відповідних умовах. Пошуки оптимальних **рішень** привели до створення спеціальних математичних методів і вже в 18 **столітті** були закладені **математичні** основи оптимізації - **варіаційне** числення, **чисельні** методи та інші.. Однак до другої половини 20 **століття** методи оптимізації в **багатьох галузях** науки і техніки застосовувалися дуже рідко, оскільки практичне використання математичних методів оптимізації вимагало величезної обчислювальної роботи, що без ЕОМ реалізувати було у край важко, а в ряді випадків - неможливо. Особливо **великі** труднощі виникали при **рішенні** **задач** оптимізації процесів у **хімічній** технології через велике число параметрів і їх **складної** взаємозв'язку між собою. При наявності ЕОМ **задача** помітно спрощується.

Постановка **задачі** оптимізації припускає існування конкуруючих властивостей процесу, наприклад:

- "кількість продукції - **витрата** сировини"
- "кількість продукції - **якість** продукції"

Вибір **компромісного** варіанту для **значених** властивостей і **представляє** собою процедуру **рішення** **оптимізаційної** задачі.

При постановці **задачі** оптимізації необхідно:

1. Наявність об'єкта оптимізації і **мети** оптимізації. При цьому **формулювання** кожної **задачі** оптимізації повинна вимагати **екстремального** значення лише **однієї величини**, тобто одночасно системі не повинне приписуватися два і більш критерії оптимізації, тому що практично завжди **екстремум** одного критерію не відповідає **екстремуму** іншого.

Типовий приклад неправильної постановки **задачі** оптимізації: "**Одержати** максимальну продуктивність при **мінімальній собівартості**". Помилка **полягає** в **тім**, що ставиться **задача** пошуку **оптимуму** 2-х **величин**, що суперечать один одному по своїй суті. Правильна постановка **задачі** могла бути наступна:

- а) одержати максимальну продуктивність при **заданій собівартості**;
- б) одержати мінімальну собівартість при **заданій** продуктивності.

У першому випадку критерій оптимізації - продуктивність, а в **другому** - собівартість.

2. Наявність ресурсів оптимізації, під якими розуміють можливість вибору значень деяких параметрів **оптимізуемого** об'єкта. Об'єкт **повинний** мати **визначені** ступені волі - керуючими впливами.

3. Можливість кількісної оцінки **оптимізуємої** величини, оскільки тільки в цьому випадку можна порівнювати ефекти від вибору тих **чи** інших керуючих впливів.

4. Облік обмежень.



Звичайно **оптимізуема величина** зв'язана з економічністю роботи розглянутого об'єкта ~ апарат, цех, завод. **Оптимізуемий варіант** роботи об'єкта **повинний** оцінюватися **якийсь** кількісний **мірою** - критерієм оптимальності.

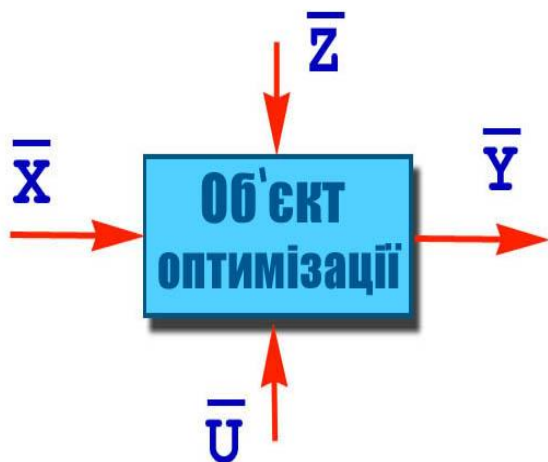
Критерієм оптимальності називається кількісна оцінка **оптимізуемого** якості об'єкта. На **підставі** обраного критерію оптимальності складається цільова функція, що **представляє** собою залежність критерію оптимальності від параметрів, що впливають на її значення. **Вид** критерію **чи** оптимальності **цільової** функції **визначається** конкретною **задачею** оптимізації.

Таким чином, **задача** оптимізації зводиться до перебування **екстремума** **цільової** функції.

Найбільш **загальною** постановкою оптимальної **задачі** є **вираження** критерію оптимальності у **виді** економічної оцінки - продуктивність, собівартість продукції, прибуток, рентабельність. **Однак** в **приватних** **задачах** оптимізації, коли об'єкт є частиною технологічного процесу, не завжди **чи** вдається не завжди **доцільно** виділяти **прямий** економічний показник, який би повні**стю** характеризував ефективність роботи розглянутого об'єкта. У таких випадках критерієм оптимальності може служити **технологічна** характеристика, що побічно оцінює економічність роботи **агрегату** – час контакту, вихід продукту, ступінь перетворення, температуру. Наприклад встановлюється оптимальний температурний профіль, тривалість циклу - "реакція - регенерація". Але в будь-якому випадку **любой** критерій оптимальності має економічну природу. **Розглянемо** більш докладно вимоги, що повинні пред'являтися до критерію оптимальності.

1. Критерій оптимальності **повинний** виражатися кількісно.
2. Критерій оптимальності **повинний** бути **єдиним**.
3. Критерій оптимальності **повинний** **відбивати** найбільш істотні **сторони** процесу.
4. Бажано щоб критерій оптимальності мав **ясний** **фізичний зміст** і легко розраховувався.

Кожний **оптимізуемий** об'єкт схематично можна представити **слідуючи** чином (рис.5.1)



- Y- виходи об'єкта
- X- **контрольовані** вхідні параметри
- U- **регульовані** вхідні параметри (керуючі параметри)
- Z- **неконтрольовані впливи**

Рис.5.1

При постановці конкретних **задач** оптимізації критерій **оптимальності** **повинний** бути записаний у **виді** аналітичного **вираження**. У **тім** **випадку**, коли випадкові **збурювання** невеликі і їхній вплив на об'єкт можна не враховувати, критерій оптимальності може бути **представлен** як функція вхідних, вихідних і керуючих параметрів:

$$R=R(X_1, X_2, \dots, X_N, Y_1, Y_2, \dots, Y_N, U_1, U_2, \dots, U_N) \quad (5.1)$$

Тому що  $Y=f(U)$ , те при фіксованих  $X$  можна записати:

$$R = R(\overline{U}_j) \quad (5.2)$$

При цьому всяка зміна значень керуючих параметрів подвійно позначається на величині  $R$ :

- прямо, тому що керуючі параметри безпосередньо входять у вираз критерію оптимізації;
- побічно - через зміну вихідних параметрів процесу, які залежать від керуючих. Якщо ж випадкові збурювання досить великі і їх необхідно враховувати, то варто застосовувати експериментально - статистичні методи, що дозволять одержати модель об'єкта у виді функції

$$Y = \varphi(X_i, U_i) \quad (5.3)$$

яка справедлива тільки для вивченої локальної області. Тоді критерій оптимальності прийме наступний вид:

$$R = R(\overline{X}, \overline{U}) \quad (5.4)$$

У принципі, для оптимізації замість математичної моделі можна використовувати і сам об'єкт, однак оптимізація таким шляхом має ряд істотних недоліків:

- а) необхідний реальний об'єкт;
- б) необхідно змінювати технологічний режим у значних межах, що не завжди можливо;
- в) тривалість іспитів і складність обробки даних.

Наявність математичної моделі (при умові, що вона досить надійно описує процес) дозволяє значно простіше вирішити задачу оптимізації аналітичним або чисельним методами.

У задачах оптимізації розрізняють прості і складні критерії оптимізації. Критерій оптимальності називається простим, якщо вимагається визначити екстремум цільової функції без завдання умов на які-небудь інші величини. Такі критерії звичайно використовуються при рішенні приватних задач оптимізації (наприклад, визначення максимальної концентрації цільового продукту, оптимального часу перебування реакційної суміші в апараті і т.п.).

Критерій оптимальності називається складним, якщо необхідно відновити екстремум цільової функції при деяких умовах, що накладаються на ряд інших величин (наприклад, визначення максимальної продуктивності при заданій собівартості, визначення оптимальної температури при обмеженнях по термостійкості каталізатору й ін.).

Процедура рішення задачі оптимізації обов'язково включає, поповз вибір керуючих параметрів, ще і встановлення обмежень на ці параметри ~ термостійкість, вибухобезпечність, потужність перекачувальних пристроїв. Обмеження можуть накладатися як по технологічним, так і по економічних розуміннях.

Отже, для рішення задачі оптимізації необхідно:

- а) скласти математичну модель об'єкта оптимізації:

$$Y = f(X, U) \quad (5.5)$$

- б) вибрати критерій оптимальності і скласти цільову функцію:

$$R = \varphi(Y) = F(\overline{X}, \overline{U}) \quad (5.6)$$

- в) установити можливі обмеження, що повинні накладатися на перемінні:

$\psi_i(\bar{X}, \bar{U}) = 0$ (5.7a)
$\psi_i(\bar{X}, \bar{U}) < 0$ (5.7б)

г) вибрати метод оптимізації, що дозволить знайти **екстремальні** значення шуканих величин.

Прийнято розрізняти **задачі** статичної оптимізації для **процесів**, що протікають у сталих режимах, і **задачі динамічної** оптимізації. У першому випадку зважаються питання створення і реалізації **оптимальної** моделі процесу, у **другому** - **задачі** створення і **реалізації** системи оптимального **керування** процесом при несталих режимах експлуатації.

## 5.2. Цільова функція і її властивості

### 5.2.1. Нормалізація незалежних перемінних

При **рішенні** конкретних **задач** незалежні **перемінні** (керуючі впливи) можуть мати різний фізичний **зміст** (Т, Р, τ, С) і, відповідно, різні одиниці виміру. При **рішенні** задач оптимізації чисельними методами доцільно оперувати з їх безрозмірними нормалізованими значеннями.

Звичайно для нормалізації застосовується можливий діапазон зміни значень незалежних перемінних, **котрий** завжди може бути установлений виходячи з фізичної сутності розв'язуваної **задачі**.

Наприклад, нехай деякий фізичний параметр вихідної **задачі** може змінювати своє значення а в межах:

$$a_{Jmin} < a_J < a_{Jmax} \quad (5.8)$$

Тоді, позначаючи **величину** діапазону **зміна** значення  $a_J$  через

$$d_J = a_{Jmax} - a_{Jmin},$$

можна **ввести** безрозмірну перемінну  $U_J$  :

$$U_J = (a_J - a_{Jmin}) / d_J \quad (5.9)$$

Перемінна  $U_J$  при такому способі визначення буде змінюватися в межах:

$$0 < U_J < 1 \quad (5.10)$$

Нормалізація значно спрощує організацію алгоритмів **оптимізації** і дозволяє **будувати** уніфіковані алгоритми пошуку. **Необхідно** тільки передбачати

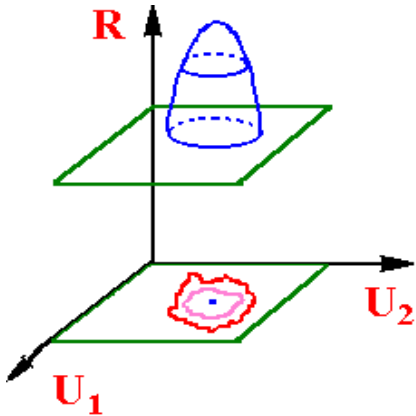
**пряме** і **зворотне** перерахування **фізичних** параметрів



Рис. 5.2

### 5.2.2. Геометрична інтерпретація цільової функції

Відповідно до співвідношення (5.6) значення критерію **оптимальності**  $R$  може розглядатися як функція, обумовлена в  $n$ -мірному просторі перемінних  $U_j$  ( $j=1,2,\dots,n$ ). Оскільки наочне графічне зображення  $n$ -мірного простору **відсутнє**, використовується наступний метод **представлення** функції  $R(U)$  на **плоскому кресленні** (рис.5.3).



Використовуємо наступний підхід. **Допустимо**, що **задача** оптимізації **виречена** і **екстремум** знайдений. Проведемо через **крапку**  $U_{\text{опт}}$  у  $n$ -мірному просторі двовимірну площину  $P$ . Тоді при видаленні від **крапки**  $U_{\text{опт}}$  у **будь-якому** напрямку  $R(U)$  буде змінюватися. Якщо  $R(U)$  є **безупинної** функцією від  $U$ , те навколо **крапки**  $U_{\text{опт}}$  завжди можна провести в **даній** площини замкнуту лінію, на якій значення  $R(U)$  буде постійним. Таких замкнутих ліній, називаних

**Рис. 5.3** лініями постійного рівня, що відповідають різних значень  $R(U)=C_k$ , можна провести **площини**  $P$  навколо **крапки**  $U_{\text{опт}}$  скільки завгодно, причим кожна з цих ліній (**наприклад**, для випадку пошуку мінімуму) **буде** цілком охоплювати будь-яку лінію постійного рівня, для якої значення  $R(U)$  менше. Форма ліній постійного рівня, відповідаю**чим** різним значенням  $C_k$  може при цьому бути дуже **різної**.

При наявності обмежень типу (5.7а), **розглянутий** **прийом** **зображення** **цільової** функції також можна використовувати, якщо прийняти до **уваги**, що кожне з рівнянь (5.7а) **визначає** в  $n$ -мірному просторі  $(n-1)$ -мірну поверхню, перетинання якої з **двовимірної** площиною  $P$  має **вид** деякої лінії  $L$  (рис.5.4).

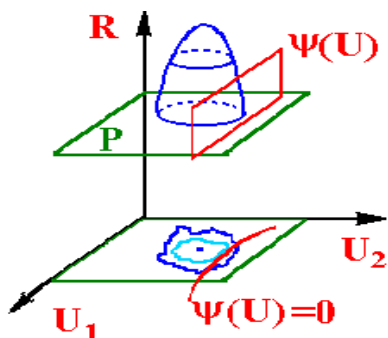


Рис.5.4

Обмеження типу нерівностей (5.7б) незалежно від їхнього числа **також** представляються описаним способом (рис.5.5).

Розглянутий спосіб не є **єдиним** і **однозначної**, так як. форма ліній постійного рівня функції  $R(U)$  і обмежень **може** істотно змінюватися в залежності від орієнтації **двовимірної** **площини**  $P$  в  $n$ -мірному просторі. Однак цей спосіб найбільше простий і дозволяє наочно представити різні алгоритми **рішення** **задач** нелінійного програмування.

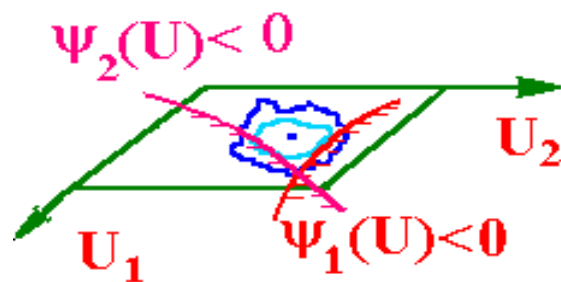


Рис.5.5

### 5.2.3. Особливі *крапки* і лінії *цільової* функції

Нагадаємо, що необхідною умовою існування **екстремуму** функції багатьох перемінних є виконання системи **рівнянь**

$$dR/dU_j=0, j=1,2,\dots,n \quad (5.11)$$

Оскільки **умова** (5.11) **необхідне**, але ще **недостатнє**, можуть представитися випадки, коли при його виконанні в деякій **крапці**  $U_s$  **екстремуму** функції  $R(U)$  у ній не буде – так звані "**сідлови**" **крапки** (рис.5.6).

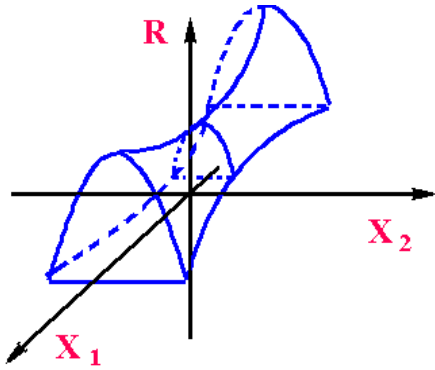
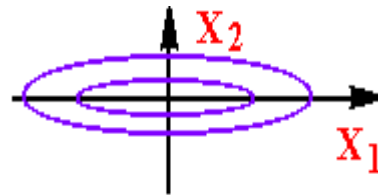


Рис.5.6

Іншим типом особливостей **цільової** функції є так **називані** "**яри**", при наявності яких уздовж **визначених** напрямків **величина** **цільової** функції змінюється дуже слабо. Як приклад можна **привести** рівняння еліпса,  $\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1$ , коли  $a > b$  (рис.5.7):



У **загальному** випадку лінія "**дна яру**" може не збігатися по **напрямку** Рис.5.7

з осями координат і, крім того, істотно

відрізняється від **прямої**, тобто можливі також "**криволінійні яри**" (рис.5.8).

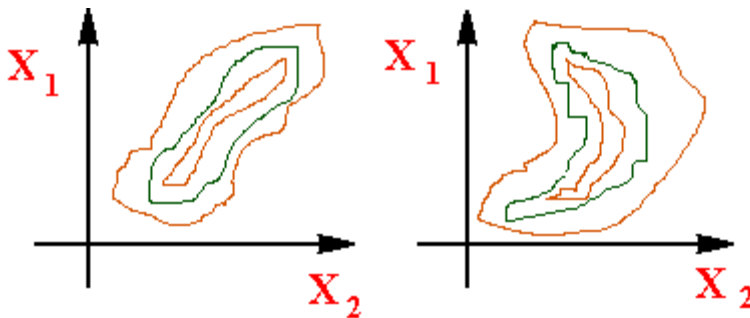


Рис.5.8

### 5.2.4. Глобальний і локальний *оптимуми*

При відшуванні **оптимуму** **цільової** функції  $R(U)$  **задачею**, як **правило**, є визначення сукупності значень незалежних **змінних**  $U_j$ , що відповідає не **якому-небудь екстремуму** функції  $R(U)$ , а **найбільшому чи найменшому значенню**  $R(U_j)$  у **припустимій області**  $V_{доп}$ . Якщо шукається, наприклад, мінімум, то **рішення задачі** оптимізації повинне задовольняти умові:

$$R(U_{опт}) < R(U) \quad (5.12)$$

причому  $U \in V$ .

Умова (5.12) повинна виконуватися для будь-яких припустимих значень  $U$ .

Оптимум, для якого справедливо умова (5.12), звичайно називається **глобальним**. Крім нього функція  $R(U)$  може мати один чи трохи локальних **екстремумів** (рис.5.9). У цьому випадку складність задачі пошуку **екстремума** для функції багатьох перемінних **значно** збільшується.

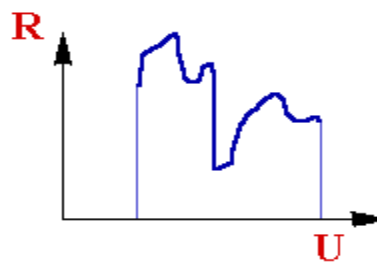


Рис.5.9

### 5.3. Методи рішення задач оптимізації

Вибір методу **рішення** - один з найважливіших етапів оптимізації.

Можна виділити наступні групи методів:

- аналітичні методи;
- методи математичного програмування.

**Розглянемо** більш докладно групи цих методів і деякі з них.

Група аналітичних методів оптимізації **поєднує** **аналітичний** пошук **екстремуму** функції, метод множників **Лагранжа**, **вариційні** методи і принцип максимуму.

Аналітичний пошук **екстремуму** функції, заданих без **обмежень** на незалежні перемінні, застосовується до **задач**, у яких **оптимізуема** функція має аналітичне **вираження**, що **диференцується** у всьому діапазоні дослідження, а число перемінних невелике. Це один з найбільш простих методів.

Група методів математичного програмування включає **динамічне** програмування, **лінійне** програмування і **нелінійне** програмування.

Динамічне програмування - ефективний метод **рішення** задач оптимізації **багатостадійних** процесів. Метод припускає **розбивку** аналізованого процесу на стадії (**в часі** чи в просторі)- наприклад, реактор у каскаді **чи** тарілка в колоні. Розгляд **задачі** починається з останньої стадії процесу й оптимальний режим **визначається** **постадійно**.

Лінійне програмування - метод для **рішення** задач **оптимізації** з лінійними **вираженнями** для критерію оптимальності і лінійними обмеженнями на **область** зміни перемінних. Подібні **задачі** зважуються ітераційними способами. Ці методи використовуються при оптимальному **плануванні виробництва** при обмеженій кількості **ресурсів**, для транспортних **задач** і ін.

Методи нелінійного програмування- **поєднують** **різні** способи **рішення** оптимальних **задач**: **градієнтні**, **безградієнтні** і **випадкового** пошуку. **Загальним** для методів нелінійного програмування є те, що **їх** використовують при **рішенні** задач з нелінійними критеріями оптимальності. Усі методи нелінійного програмування - це чисельні методи пошукового типу. Суть **їх** - у визначенні набору незалежних перемінних, що дають найбільше **збільшення** **оптимізуємої** функції. Дана група методів застосовується як для **детермінованих**, так і **стохастичних** процесів.

## 5.4. Аналітичні засоби

Аналітичні засоби засновані на класичних засобах математичного аналізу. Задача оптимізації формулюється наступним чином. Існує процес, відома його математична модель та встановлений критерій оптимізації  $R$  у вигляді функції:

$$R = R(\bar{X}, \bar{U}) \quad (5.13)$$

або функціонала:

$$R = \int_0^t R(\bar{X}, \bar{U}), \quad (5.14)$$

де  $\bar{U} = f(t)$ .

Задані обмеження:

$$\bar{X} \in \bar{X}_{\text{доп}} \text{ та } \bar{U} \in \bar{U}_{\text{доп}}. \quad (5.15)$$

Необхідно при заданих обмеженнях знайти такі значення  $\bar{U}$ , при яких  $R$  досягає екстремуму. У випадку функціонала  $R$  необхідно знайти вид функції  $\bar{U} = f(t)$ , при якій  $R$  досягає екстремуму.

Аналітичні засоби пошуку екстремуму критерію оптимальності застосовуються до задач, у яких оптимізуєма функція має аналітичний вираз, а число перемінних невелике.

У вигляді прикладу розглянемо визначення оптимального часу перебування суміші у РІВ.

Для двох послідовних реакцій  $A \xrightarrow{w_1} B \xrightarrow{w_2} D$  необхідно визначити оптимальний час перебування  $t$ , при якому вихід целевого продукту  $B$  буде досягати максимуму.

Нехай  $a$  - початкова концентрація компоненту  $A$ . В початковий момент часу концентрації компонентів  $B$  та  $D$  дорівнюють нулю: при  $t = 0$  :  $C_B = C_D = 0$ .

Критерій оптимізації: вихід цільового продукту  $R = C_B/a$ . Керуючий вплив - час перебування  $t$ . Характер зміни концентрацій компонентів в часу приведений на рис 5. 10.

Нехай реакції протікають по першому порядку.

Швидкість реакцій

$$W_1 = K_1 \cdot C_A \quad (5.16)$$

$$W_2 = K_2 \cdot C_B \quad (5.17)$$

$$dC_B/dt = W_1 - W_2 \quad (5.18)$$

Із (5.16) знайдемо вираз для поточної концентрації  $C_A$ .

$$-\frac{dC_A}{dt} = K_1 C_A; \quad \frac{dC_A}{C_A} = -K_1 dt$$

Проінтегрував, одержимо:

$$\ln \frac{C_A}{a} = -k_1 t \quad (5.19).$$

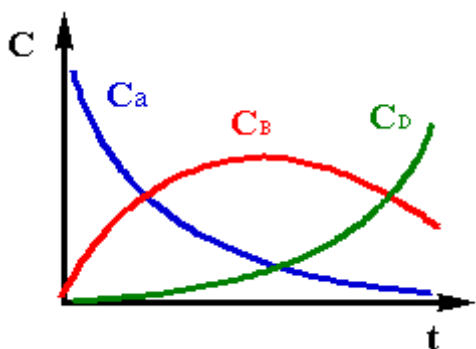


Рис. 5. 10

Підставимо (5.19) та (5.17) в (5.18):

$$\frac{dC_B}{dt} = K_1 a e^{-K_1 t} - K_2 C_B,$$

або

$$\frac{dC_B}{dt} + K_2 \cdot C_B = K_1 \cdot a \cdot e^{-K_1 t}. \quad (5.20)$$

Розв'язав одержане рівняння, знайдемо вираз для визначення поточної концентрації компонента В:

$$C_B = a \frac{K_1}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}). \quad (5.21)$$

$$\text{Вихід цільового продукту } R = C_B / a = \frac{K_1}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}). \quad (5.22)$$

Дослідимо екстремум одержаної цільової функції (5.22). Умови існування максимуму:  $dR/dt = 0$ ;  $d^2R/dt^2 < 0$ .

Знайдемо першу похідну і прирівняємо її нулю:

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{K_1}{K_2 - K_1} (-K_1 e^{-K_1 t} - K_2 e^{-K_2 t}) = 0. \quad (5.23)$$

Вирішив одержане рівняння, визначимо оптимальний час перебування :

$$t_{opt} = \frac{1}{K_2 - K_1} \ln \frac{K_2}{K_1}. \quad (5.24)$$

Для перевірки виконання достатньої умови існування максимуму обчислюємо другу похідну:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial t^2} = \frac{K_1}{K_2 - K_1} (K_1^2 e^{-K_1 t} - K_2^2 e^{-K_2 t}) < 0$$

Так як друга похідна менш 0, отже у наданій точці існує максимум цільової функції R.

Підставив (5.24) у (5.21), одержимо вираз для визначення максимальної концентрації компонента В:

$$C_{Bopt} = a^2 \left( \frac{K_1}{K_2} \right)^{\frac{K_1}{K_2 - K_1}}. \quad (5.25)$$

### 5.5. Загальна характеристика засобів рішення задач нелінійного програмування

Коли цільова функція (5.6) і обмеження (5.7) нелінійні та для пошуку точки екстремуму не можна або дуже складно використовувати аналітичні засоби рішення, тоді для рішення задач оптимізації застосовуються засоби нелінійного програмування. Як правило, при рішенні задач засобами нелінійного програмування використовуються численні засоби з застосуванням ЕОМ.

В основному засоби нелінійного програмування можуть бути охарактеризовані як багатокрокові засоби чи засоби наступного поліпшення вихідного рішення. У цих задачах звичайно заздалегідь не можна сказати, яке число кроків гарантує знаходження оптимального значення з заданою мірою точності. Крім того, у задачах нелінійного програмування вибір величини кроку



представляє серйозну проблему, від успішного рішення якої залежить ефективність застосування того чи іншого засобу. Розмаїтість засобів рішення задач нелінійного програмування якраз і пояснює прагнення знайти оптимальне рішення за найменше число кроків.

Більшість засобів нелінійного програмування використовують ідею руху у  $n$ -мірному просторі в напрямку оптимуму. При цьому із деякого вихідного чи проміжного стану  $U^k$  здійснюється перехід в наступний стан  $U^{k+1}$  зміною вектору  $U^k$  на величину  $\Delta U^k$ , що називається кроком, тобто:

$$U^{k+1} = U^k + \Delta U^k \quad (5.26).$$

В ряді засобів крок, тобто його величина і напрямок визначається як деяка функція стану  $U^k$ :

$$\Delta U^k = f(U^k) \quad (5.27)$$

Отже, згідно з (5.26) новий стан  $U^k$ , що одержується внаслідок виконання кроку (5.27) може розглядатися як функція вихідного стану

$$U^{k+1} = U^k + f(U^k). \quad (5.28)$$

У деяких засобах  $\Delta U^k$  зумовлено не тільки станом  $U^k$ , але і рядом попередніх станів:

$$\Delta U^k = f(U^k, U^{k-1}, \dots, U^{k-2}) \quad (5.29)$$

$$U^{k+1} = U^k + f(U^k, U^{k-1}, \dots, U^{k-2}). \quad (5.30)$$

Природно, що алгоритми пошуку типу (5.30) є більш загальними і принципово спромагаються забезпечити більш високу сходимість до оптимуму, тому що використовують більший обсяг інформації про характер поведінки оптимальної функції.

У теперішній час для рішення подібних задач розроблено значне число засобів, проте не можна віддати перевагу якому-небудь одному. Вибір засобу визначається складністю об'єкту і задачею оптимізації, що вирішується. Засоби нелінійного програмування відповідно до засобу визначення кроку пошуку  $R(\bar{U})$  можна віднести до одного із 3-х типів: безградієнтні засоби; градієнтні засоби; засоби випадкового пошуку.

Всі ці засоби можна назвати прямими ітеративними засобами.

## 5.6. Градієнтні методи рішення задач оптимізації

### 5.6.1. Градієнт цільової функції

Серед засобів, що застосовуються для рішення задач нелінійного програмування, чимале місце займають засоби пошуку рішення, засновані на аналізі похідної оптимізуємої функції. Припускаємо надалі, що аналізується тільки диференційовані функції  $R(U)$ . Розглянемо властивості цих функцій, які можна використовувати для аналізу їх поведінки.

В просторі  $n$  перемінних  $U_j$ , де визначена функція  $R(U)$  проводимо лінію у довільному напрямі  $L$



Розглянемо значення функції  $R(U)$  у 2-х крапках  $U$  та  $U^*$ , розміщених на цій прямій. Якщо скласти відношення

$$\frac{R(U^*) - R(U)}{U^* - U}$$

**Рис. 5.11**

та направити довжину відтинку  $U^* - U$  до нуля, то у межі одержимо величину, становлячи похідною від функції  $R(U)$  по напрямку  $L$ , тобто

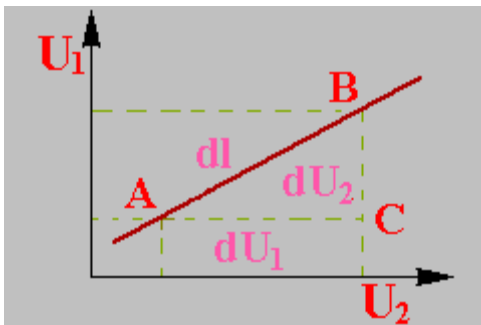
$$\frac{\partial R(U)}{\partial L} = \lim_{U^* \rightarrow U} \frac{R(U^*) - R(U)}{U^* - U} \quad (5.31)$$

Знайдена похідна характеризує швидкість зміни функції  $R(U)$  у точці  $U$  за напрямком  $L$ . Оскільки через точку  $U$  можна провести нескінченну множину прямих по різноманітним напрямкам, отже, у кожній точці для функції  $R(U)$  можна визначити незчисленну множину похідних за різними напрямками.

Неважко показати, що всі ці похідні можуть бути виражені через похідні за координатами, число яких вже буде кінцевим і рівним розмірності  $n$ . За правилом диференціювання складних функцій:

$$\frac{\partial R(\bar{U})}{\partial L} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial R(\bar{U})}{\partial U_j} \frac{\partial U_j}{\partial L} \quad (5.32)$$

Розрахунок величин  $dU_j/dL$  розглянемо на слідуючому прикладі. В просторі 2-х перемінних  $U_1$  та  $U_2$  проведена пряма  $L$  (рис. 5.12).



**Рис.5.12**

Елемент довжини  $d\ell$  в даному випадку можна виразити через диференціали перемінних

$$d\ell = \sqrt{(dU_1)^2 + (dU_2)^2} \quad (5.33)$$

При цьому, з прямокутного трикутника  $ABC$  можна записати

$$dU_1/d\ell = \cos a = \cos(U_1 \wedge L) \quad (5.34)$$

$$dU_2/d\ell = \cos b = \cos(U_2 \wedge L)$$

Аналогічно, для багатомірного випадку  $dU/d\ell$  є ані що інше, як направляючі косинуси обраного напрямку  $L$  по відношенню до осей координат

$$dU_j/d\ell = \cos(U_j \wedge L) \quad (5.35)$$

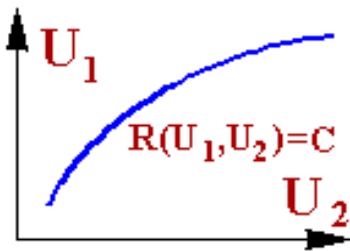
Тоді, рівняння (5.32) можна записати

$$\frac{\partial R(\bar{U})}{\partial L} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial R(\bar{U})}{\partial U_j} \cos(U_j \wedge L) \quad (5.36)$$

Розглянемо одну з поверхней постійного рівня функції  $R(\bar{U})$ . Ця поверхня характеризується тим, що у будь-якій її точці цільова функція  $R(\bar{U})$  має одне й теж саме постійне значення  $C$ . Рівняння наданої поверхні може бути одержано з виразу для цільової функції (5.6) порівнюванням його до постійної величині  $C$ :

$$R(U_1, U_2, \dots, U_n) = C \quad (5.37)$$

Вирішуючи рівняння (5.37) щодо будь-якої з перемінних, можна збудувати зазначену поверхню, задаючись різноманітними значеннями інших перемінних.



Оскільки поверхня постійного рівня (5.37) має  $n-1$  незалежних параметрів, очевидно, її можна представити як поверхню з  $n-1$  вимірами. Так, наприклад, у просторі 2-х перемінних, тобто на площині, ця поверхня вироджується у деяку лінію, що має тільки один вимір - довжину (рис. 5.13).

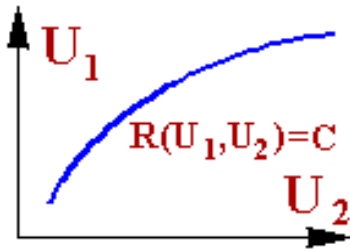


Рис.5.13

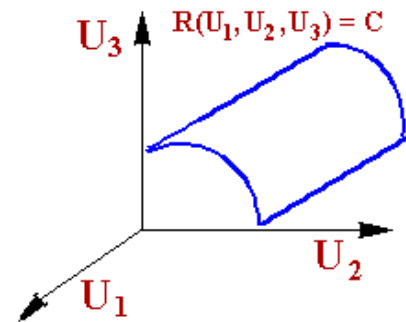


Рис.5.14

В просторі трьох перемінних поверхня постійного рівня, визначена для функції  $R(U_1, U_2, U_3)$ , має вже два виміру - довжину та ширину (рис. 5.14). Аналогічно у  $n$ -мірному просторі поверхня постійного рівня функції  $R(\bar{U})$ , що описується рівнянням (5.37), має  $n-1$  вимір.

Таким чином, у кожній точці поверхні у  $n$ -мірному просторі можна провести  $n-1$

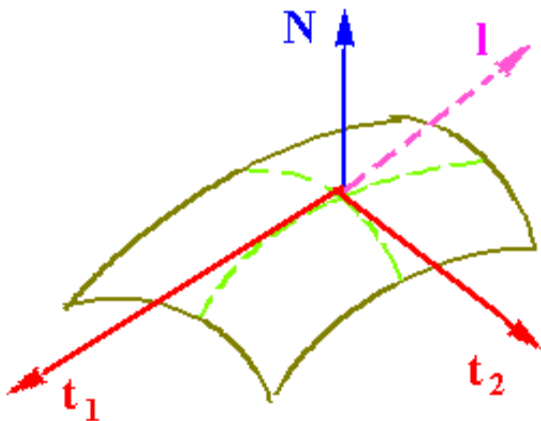


Рис. 5.15

взаємоперпендикулярних дотичних у відповідності з числом вимірів цієї поверхні. Крім отого, в цій точці можна провести вісь, перпендикулярну всім дотичним та, отже, спрямовану по нормалі до поверхні. У вигляді зразку розглянемо випадок, коли число керуючих впливів  $n=3$  (рис. 5.15).

Дотичні та нормаль можуть розглядатися як система координат з початком у обраній точці поверхні.

Надана система координат володіє однією важливою властивістю.

Часткові похідні від функції  $R(U)$  за напрямками осей, що є дотичними до поверхні, дорівнюють нулю, тому що вдовж цих напрямків функція  $R(U)$  зберігає постійне значення, оскільки розглядається поверхня постійного рівня функції  $R(U)$ .

Якщо взяти довільний напрямок  $L$ , то похідна по ньому, на підставі сказаного, буде мати вигляд:

$$\frac{\partial R(\bar{U})}{\partial L} = \frac{\partial R(U)}{\partial N} \cos(N \wedge L) \quad (5.38)$$

Це слідує з рівняння (5.36), де похідні по всім осям, за винятком нормалі  $N$ , дорівнюють 0. Оскільки  $\cos(\alpha)$  є функція, що не перевищує по абсолютній величині 1 та приймає максимальне значення при  $\alpha=0$ , отже очевидно, що напрямок, за яким похідна  $dR/dL$  має максимальне значення, співпадає з напрямком нормалі до поверхні постійного рівня функції  $R(U)$ .

Якщо відкласти на напрямку нормалі вектор з алгебраїчною величиною, рівною похідній  $dR(U)/dL$ , то отримаємо вектор, що називається градієнтом скалярної функції  $R(U)$  в точці  $U$ .

Основною властивістю градієнту функції  $R(U)$ , що позначається як  $\text{grad } R(U)$  або  $DR(U)$ , є те, що вектор  $DR(U)$  в кожній точці області визначення функції  $R(U)$  спрямований за напрямком нормалі до поверхні рівня, проведеної крізь цю точку, та за алгебраїчною величиною дорівнює похідній від зазначеної функції за напрямком нормалі.

### 5.6.2. Обчислення похідних цільової функції

В основу градієнтних засобів пошуку оптимуму покладені обчислення та аналіз похідних цільової функції  $R(U)$ . Якщо аналітичний вигляд  $R(U)$  відомий, то обчислення похідних  $dR/dU_j$  частіше всього не складає особливих труднощів. Інакше єдиним засобом визначення похідних є чисельні засоби.

Значення похідної може бути обчислено за формулою:

$$\frac{\partial R}{\partial U_j} = \frac{\Delta R}{\Delta U_j} = \frac{R(U_1, \dots, U_j + \Delta U_j, \dots, U_n) - R(U_1, \dots, U_j, \dots, U_n)}{\Delta U_j} \quad (5.39)$$

де  $\Delta U_j$  – величина приросту незалежної перемінної  $U_j$ .

Формула (5.39) дає лише наближене значення похідної. Точність наближення залежить від величини припущення  $\Delta U_j$ .

Методів провіщання найкращого значення  $\Delta U_j$  не існує. Практично для визначення прийнятної величини припущення (особливо на початку пошуку, коли похідні ще не знаходились) використовується метод дробіння  $\Delta U_j$ . Наприклад, розраховується значення похідної з припущенням, рівним  $\Delta U_j$ . Після цього розрахунок повторюється з  $\Delta U_j/2$ . Якщо отримані значення похідних розрізняються істотно, то розрахунок повторюється з  $\Delta U_j/4$  і т.д., поки не буде знайдено прийнятне значення припущення. На наступних кроках пошуку це значення припущення може уточнюватися.

### 5.6.3. Засіб релаксації.

Алгоритм засобу являє собою пошук осьового напрямку, вдовж якого цільова функція зменшується найбільш сильно. Для цього в початковій точці пошуку визначають похідні оптимізуємої функції по всім незалежним перемінним. Осьовому напрямку з найшвидшим спаданням цільової функції, очевидно, відповідає найвелика за модулем похідна. Якщо знак похідної від'ємний, то цільова функція зменшується у напрямку осі, якщо позитивний - то у протилежному напрямку.

За напрямком спадання цільової функції виконуються кроки до тих пір, поки не буде отримане мінімальне значення за обраним осьовим напрямком. Тоді знов визначають похідні по всім напрямкам, за винятком того, по якому здійснюється спуск. Знову знаходять осьовий напрямок найшвидшого спадання цільової функції, по якому виконуються подальші кроки і т.д.

Критерієм закінчення пошуку оптимуму є досягнення такої точки, при руху з якої по будь-якому осьовому напрямку подальшого спадання функції не походить.

На практиці, для признаку оптимуму часто застосовують умову:

$$\sum_{j=1}^n \frac{\partial R}{\partial U_j} < \delta \quad (5.40)$$

Умова (5.40) може бути використана у отому випадку, коли оптимум лежить всередині допустимої області зміни незалежних перемінних. Якщо ж оптимум припадає на межу області допустимої зміни перемінних  $V$ , тоді критерій (5.40) не придатний та замість нього треба застосовувати умову позитивності всіх похідних за допустимими осьовими напрямками. При цьому допустимим осевим буде напрямком всередині області  $V$ .

Алгоритм спуску для обраного осьового напрямку може бути записаний у вигляді:

$$U_j^{k+1} = U_j^k - h^k \text{sign} \frac{\partial R(U^p)}{\partial U_j} \quad (5.41)$$

Причому:

$U_j^k$  - значення змінюємої перемінної на  $k$ -ом кроку спуску;

$h^k$  - величина  $k$ -го кроку, що може змінювати своє значення залежно від номеру крока;

sign - функція знаку ("сігнум");

$$Y = \text{sign } X \left\{ \begin{array}{ll} -1 & X < 0 \\ 0 & X = 0 \\ 1 & X > 0 \end{array} \right\}$$

$U^p$  - вектор точки, у якій останній раз виконувалось обчислення похідних цільової функції.

Очевидно, що швидкість руху до мінімуму залежить від отого, наскільки вдало обрано крок  $h^k$  зміни незалежних перемінних.

Графічне зображення руху від вихідного стану до оптимального показано на рис. 5.16.

При занадто малій величині кроку число кроків, що необхідно зробити, щоб досягнути оптимума, буде великим та, отже, буде потрібний великий обсяг розрахунків. Якщо ж величина кроку обрана великою, то поблизу оптимуму може відбуватися "нишпорення", тому що при великій величині кроку мала імовірність попадання в околицю оптимуму, в якій виконується умова (5.40).



Рис.5.16

Найпростіший алгоритм використання перемінного кроку пошуку складається в наступному. На початку спуску по одному з осьових напрямків задається деякий крок  $h$ . З цим кроком виконується спуск по обраному осьовому напрямку до отих пір, поки для двох наступних обчислювань значення цільової функції виконується умова (при пошуку мінімуму)

$$R(U^{k+1}) < R(U^k)$$

При порушенні умови на будь-якому кроці напрямок спуску по осі змінюється на протилежний, та спуск продовжується з останньої розрахованої

точки зі зменшеною вдвічі величиною кроку. Цей алгоритм може бути записаний наступним чином:

$$h^k = \begin{cases} h^k & R(U^k) < R(U^{k-1}) \\ \frac{h^k}{2} & R(U^k) \geq R(U^{k-1}) \end{cases} \quad (5.42)$$

Внаслідок використання такої стратегії крок спуску по осьовому напрямку буде зменшуватися в районі мінімуму цільової функції по цьому напрямку та пошук мінімуму можна припинити, коли величина кроку  $h^k$  стане менше заданої точності визначення мінімуму  $\epsilon$  у осьовому напрямку.

Після цього знаходиться новий осьовий напрямок, в якому функція змінюється найбільш сильно. Початковий крок по новому напрямку вже можна обрати з урахуванням величини кроку по попередньому напрямку. Це дозволяє автоматично зменшувати початковий крок по мірі наближення до оптимуму, у районі якого спуск по кожній осі проходить на невелику віддаль.

Істотною особливістю метода релаксації є залежність часу пошуку від орієнтації системи координат (рис. 5.17 та

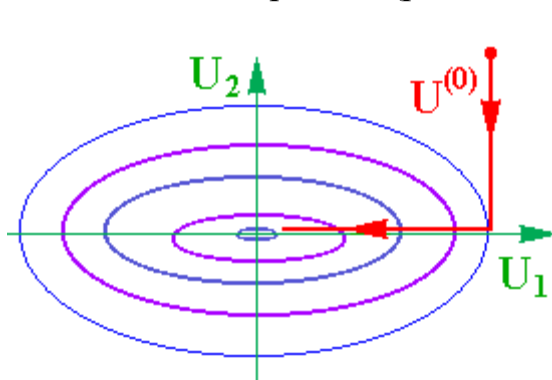


Рис.5.17

5.18)

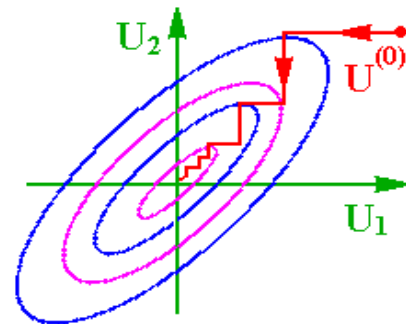


Рис.5.18

У першому випадку для досягнення мінімуму цільової функції необхідно тільки два циклу руху уздовж осьових напрямків, в другому число таких циклів зростає надто істотно. При використанні метода релаксації інколи виникають чималі труднощі :

а) при наявності обмежень пошук оптимуму може "застрягати" в будь-якій точці межі (рис. 5.19).

б) при наявності "байраків", напрями яких не співпадають з осями (рис. 5.20).

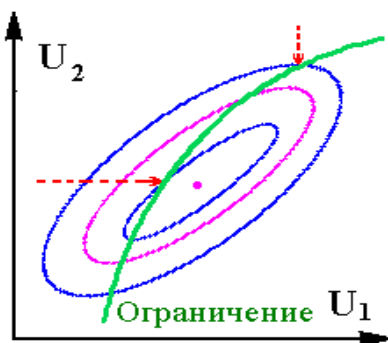


Рис.5.19

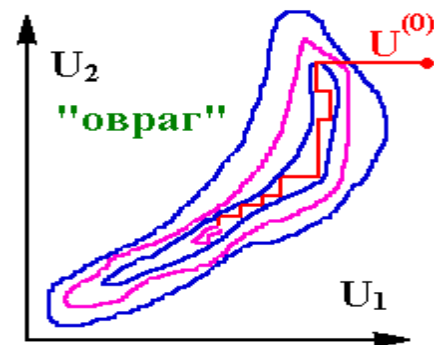


Рис.5.20

#### 5.6.4. Метод градієнту

У даному засобі використовується градієнт цільової функції.

На відміну від засобу релаксації в даному засобі кроки учиняються на напрямку найшвидшого зменшення цільової функції, а не по осевим напрямкам. Такий підхід, природно, прискорює процес пошуку оптимуму.

Процес пошуку оптимуму у засобі градієнту також здійснюється в два етапу. На першому знаходяться значення приватних похідних по всім незалежним перемінним, що і визначає напрямок градієнту в точці, що розглядається. На другому етапі здійснюється крок в напрямку, зворотному напрямку градієнту, тобто у напрямку найшвидшого спадання цільової функції.

При виконанні кроку одночасно змінюються значення всіх незалежних перемінних. Кожна з них отримує припущення, пропорційне відповідної що складає градієнт по наданій осі. По суті в засобі градієнту застосовує ота ж інформація про цільову функцію, що і в засобі релаксації при виборі осевого напрямку, але спуск виробляється по оптимальному шляху.

Алгоритм градієнтного пошуку може бути записаний наступним образом :

$$U_j^{k+1} = U_j^k - h^k \frac{\frac{\partial R(U^k)}{\partial U_j}}{\sqrt{\sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial R(U^k)}{\partial U_j}\right)^2}} \quad (5.43)$$

В алгоритмі (5. 43) для градієнтного пошуку застосовується нормалізований вектор градієнту, зазначаючий лише напрямок найшвидшого зміну цільової функції, але він не зазначає швидкості зміни по цьому напрямку. При цьому крок пошуку визначається величиною  $h^k$ , стратегію зміни якої можна будувати незалежно від абсолютної величини градієнту.

Можна використовувати інший алгоритм градієнтного засобу у виді:

$$U_j^{k+1} = U_j^k - h^0 dR(U^k)/dU_j \quad (5.44)$$

В цьому випадку величина кроку  $\Delta U_j^k = -h^0 dR(U^k)/dU_j$  при постійному значенні параметра  $h$  змінюється автоматично відповідно до зміною абсолютної величини градієнту. Алгоритм (5.44) володіє отим достоїнством, що при наближенні до оптимуму величина кроку  $\Delta U_j^k$  автоматично зменшується. Взагалі, задача вибору стратегії зміни величини кроку у градієнтнім пошуку більш важна, чим в засобі релаксації, тому що після кожного кроку тут необхідно знаходити похідні цільової функції, розрахунок яких пов'язаний з обчисленням  $n$  значень цільової функції. Дрібний крок вимагає великого обсягу вичислень, при великому кроці - можливо " рисканіє " в районі оптимуму.

Момент закінчення пошуку визначається по заздалегідь заданим умовам. Один з можливих варіантів - виконання нерівняння (5. 40). Інший варіант після кожної серії з заданим числом кроків  $S$  запам'ятується значення цільової функції. Число кроків  $S$  у серії вибирається таким, щоб на початкових етапах пошуку діялося помітна зміна значення цільової функції ( $R$ ). Якщо наступна серія кроків дає менше значення  $R$ , отже пошук продовжується. Якщо ж при виконанні слідкуючої серії менше значення  $R$  не знаходиться, отже пошук припиняється таі одержане найменше значення роздивляється як іскомий оптимум.

Браком градієнтного засобу є отже, що при його використанні можна виявити тільки локальний мінімум. Для отого, щоб знайти у функції інші локальні мінімуми, необхідно проводити пошук з інших початкових точок.

Таким чином, за допомогою засобу градієнту кожний локальний мінімум цільової функції можна охарактеризувати деякою областю "притяжіння", що володіє отією властивістю, що при завданні початкового стану  $U$  в кордонах цієї області засіб градієнту завжди приводить в один і отой же локальний мінімум.

Розглянемо один з простіших алгоритмів реалізації засобу градієнту. Вибираємо координати початкової точки  $U_{1n}$   $U_{2n}$ , величину кроку  $H_1$  та  $H_2$ , припущення  $\epsilon_1$  та  $\epsilon_2$ .

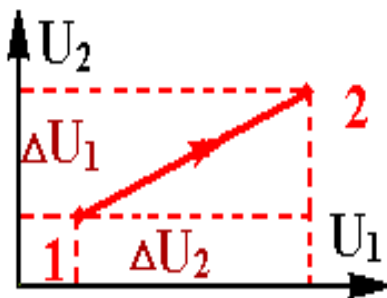
Визначимо градієнт цільової функції

$$\vec{\text{grad}} R = \nabla R(U_1, U_2) = \frac{\partial R}{\partial U_1} H_1 + \frac{\partial R}{\partial U_2} H_2 \quad (5.45)$$

Для розрахунку  $\Delta R$  необхідно обчислити величини похідних  $dR/dU_i$ .

Визначимо їх численними засобами. Біля початкової крапки **1** з координатами  $(U_{1n}, U_{2n})$  ставляться дві допоміжні крапки: **1'** - на відстані  $\epsilon_1$  уздовж осі  $U_1$  і **1''** - на відстані  $\epsilon_2$  уздовж осі  $U_2$  (рис. 5.21)

У цих крапках розраховуються значення цільової функції  $R(X_1, X_2)$ . Похідні знаходяться по наступним формулах:



$$\frac{\partial R}{\partial U_1} = \frac{R(U_1 + \epsilon_1, U_2) - R(U_1, U_2)}{\epsilon_1} \quad (5.46)$$

$$\frac{\partial R}{\partial U_2} = \frac{R(U_1, U_2 + \epsilon_2) - R(U_1, U_2)}{\epsilon_2} \quad (5.47)$$

Рис 5.21

Після цього роблять крок в точку **2** для наступного розрахунку  $R(X_1, X_2)$ . Координати цієї точки визначаються по формулі:

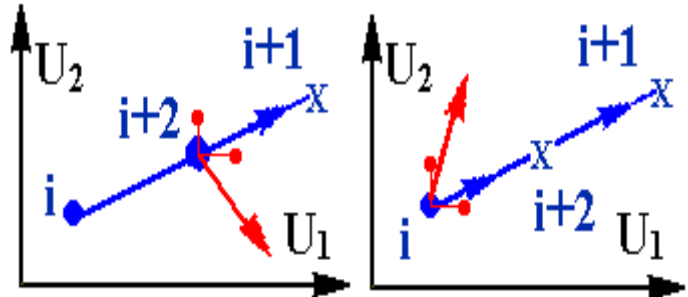
$$U_{i+1,j} = U_{i,j} + \Delta U_{i,j} \quad (5.48)$$

где  $\Delta U_{i,j} = \frac{\partial R}{\partial U_j} H_j$



Подальший алгоритм розрахунків будують по-різному. В простому варіанті можна просто повторювати описану вище процедуру. Однак, частіше роблять інакше. Якщо крок опинився вдалим, отже роблять ще крок в тому ж напрямку, використовуючи знайдені значення похідних на попереднім кроці. Практично це вже не буде напрямком градієнту, але якщо наступний крок дає потрібне припущення  $R(X_1, X_2)$ , отже це дозволить "зеконотити" на розрахунку похідних. Якщо  $i$  цей крок удалий, отже можна зробити крок ще раз і так далі.

Якщо ж крок невдалий - в цьому випадку крок зменшують вдвічі та розраховують точку  $i+2$ . Тепер, якщо зменшений крок був удалий, отже рухатися по тому ж напрямку немає змісту, тому що прийдемо в "погану" точку  $i+1$ .



В цьому випадку біля точки  $i+2$  ставляться допоміжні точки, розраховуються похідні та визначається нове направлення градієнту. Якщо ж  $i$  зменшений крок не приведе в "гарну" точку, отже повертаємося в точку  $i$  та будемо шукати новий напрямок градієнту в неї

### 5. 6. 5. Засіб найшвидшого спуску

При використанні засобу градієнту на кожному кроці треба визначати значення всіх приватних похідних функції, що оптимізується, по всім незалежним перемінним, що вимагає великого обсягу обчислювань.

Засіб релаксації володіє в цьому змісті визначеними перевагами, тому що при спускові вдовж обраного осьового напрямку не вимагає обчислення похідних. Але рух походить не у оптимальному напрямку.

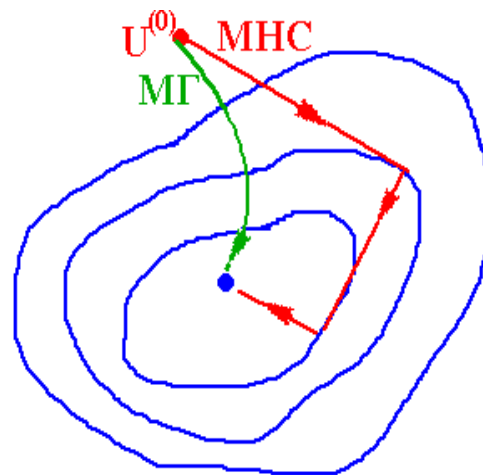
Поєднання основних ідей засобу релаксації та градієнту дає засіб найшвидшого спуску, суть якого укладається у слідкуючому.

Після того, як в початковій точці знайдений градієнт функції, що оптимізується, та отим самим визначено напрямок її найшвидшого спадання, отже в разі пошуку мінімуму цільової функції в наданому напрямку робиться крок спуска.

Якщо значення цільової функції в результаті кроку зменшилося, отже виробляється черговий крок в цьому напрямі, та так до отих пор, поки у цьому напрямку не буде знайдений мінімум цільової функції. Після цього обчислюється градієнт та визначається новий напрямок найшвидшого спадання цільової функції.

В зіставленні з засобом градієнту засіб найшвидшого спуску виявляється більш вигідним із-за скорочування обсягу обчислювань. По суті, засіб найшвидшого спуску по обчислювальним витратам еквівалентен засобу релаксації, але вигідно відрізняється від нього отим, що принаймні перші кроки після визначення градієнту виробляються у оптимальному напрямку.

Очевидно, що менш різко змінюється напрямок градієнту цільової функції, отим краще використати засіб найшвидшого спуску у рівнянні з засобом градієнту тобто вдалині від точки оптимуму. Поблизу оптимуму напрямок градієнту змінюється різко, тому засіб найшвидшого спуску автоматично переходить у засіб градієнту, тому що мінімум по кожному напрямку знаходиться за невелика кількість кроків (рис.5.22).



Важливою особливістю засобу найшвидшого спуску є отже, що при його застосуванні **Рис. 5.22**

кожний новий напрямок ортогонален попередньому. Це пояснюється отим, що рух в одному напрямку виробляється до тих пор, поки напрямок руху не опиниться дотичною до якої-або лінії постійного рівня так же як і у засобі релаксації. Але на відміну від засобу релаксації швидкість сходимості до точки оптимуму не залежить від орієнтації системи координат.

У вигляді критерію закінчення пошуку можуть використовуватися ті ж умови, що і у засобах релаксації та градієнту. Крім отого, можна використовувати наступне співвідношення :

$$\sqrt{\sum_{j=1}^n (U_j^{(A)} - U_j^{(B)})^2} < \epsilon \quad (5.49)$$

де  $U_j^A, U_j^B$  - координати початкової та кінцевої точок останнього відтинку спуску.

Цей же критерій може використовуватися у поєднанні з контролем значень цільової функції у точках  $U^A$  та  $U^B$ :

$$| \mathbf{R}(U^A) - \mathbf{R}(U^B) | \quad (5.50)$$

## 5.7. Безградієнтні методи рішення задач оптимізації

При використанні градієнтних методів для визначення величини та напрямку кроку пошуку вимагав попередній аналіз похильних функції, що оптимізується, по всім незалежним перемінним. Для складної цільової функції це пов'язане з виконанням великого обсягу обчислювань, особливо при великому числі перемінних.

*Безградієнтні методи засновані на використанні у процесі пошуку інформації, що одержується від порівняльної оцінки значень цільової функції внаслідок виконання чергового кроку.*

З використанням безградієнтних методів може бути реалізований як одномірний пошук для випадку, коли цільова функція залежить від однієї незалежної перемінної, так і багатомірний пошук. При одномірному пошуку використовуються наступні методи : одномірного сканування, локалізації екстремуму функції, " золотого перетину " та ін.

Методи багатовимірного пошуку - по координатного спуску, багатовимірного сканування, Хука-Джівса, симплексний можуть використовувати методи одновимірного пошуку як допоміжні.

Спершу розглянемо методи одновимірного пошуку. Для всіх методів постановка завдання наступна - визначити стан екстремуму на інтервалі  $[U_{\min}, U_{\max}]$ .

### 5. 7. 1. Метод сканування

Алгоритм методу слідує наступний. Інтервал пошуку  $[U_{\min}, U_{\max}]$  розбивається на  $N$  рівних ділянок, кожній з яких рівен кроку пошуку  $h$ . Далі послідовно визначається  $R(U_j)$  значення цільової функції у всіх точках розбивки, включаючи граничні точки та запам'ятується максимальне чи мінімальне значення цільової функції (рис.5.23).

Екстремальне значення функції може бути знайдено з точністю до величини кроку пошуку. Основним достоїнством наданого методу є його простота та можливість знаходження глобального екстремуму. До недоліків треба віднести великий обсяг обчислювань, що необхідно виконати для знаходження екстремуму, особливо з високою точністю.

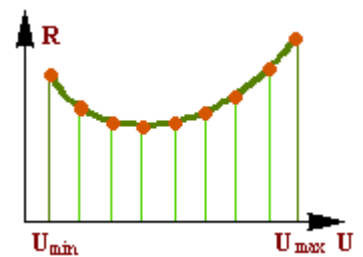


Рис. 5. 23

### 5. 7. 2. Метод локалізації екстремума

Інтервал пошуку  $[U_{\min}, U_{\max}]$  розбивається на 4 рівні частини та у точках розбивки та на кордонах інтервалу вираховуються значення цільової функції - у точках 0, 1, 2, 3 та 4 (рис. 5.24). Неважко помітити, що розбивка інтервалу на 4 - найбільш зручний варіант, так як на кожному наступному кроці необхідно обчислювати тільки 2 нових значення цільової функції. У наданому випадку

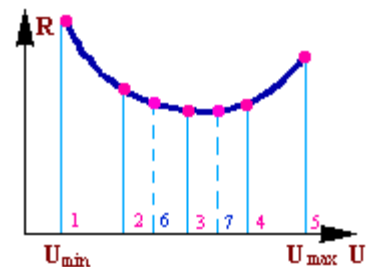


Рис 5.24

у точках 5 та 6.

Локалізація екстремуму продовжується до тих пор, доки не буде досягнута задана точність. Абсолютна помилка у знаходженні стану екстремуму визначається по формулі :

$$\Delta = (U_{\max} - U_{\min}) * 2^{-(S-1)/2} \quad (5.51)$$

де  $S$  - кількість обчислювань значень цільової функції завжди непарне число.

Так, наприклад, при  $S=21$  відносна помилка у знаходженні стану екстремуму складе:

$$\Delta = (U_{\max} - U_{\min}) * 2^{-10} \approx 0.001$$

### 5. 7. 3. Метод "золотого перетину"

Результати пошуку можуть бути краще, якщо ділення інтервала  $[U_{\min}, U_{\max}]$ , у якому знаходиться екстремум, виробляти не на ціле число, а у певному ірраціональному відношенні.

$$(a / b) = (b / c) \text{ або } a \cdot c = b^2 \quad (5.52)$$

В основі цього методу лежить закон геометричного відношення чи "золотого перетину". Нехай даний відтінок  $a$ , що поділений на дві нерівні частини  $b$  та  $c$  так, що виконується. Відповідно до цього закону визначаються точки досліджуваного інтервалу, у яких необхідно виробляти обчислення цільової функції.

Оскільки  $c = a - b$ , отой підставив вираз для  $c$  в (5.52) та запровадивши нову перемінну  $k = b / a$ , після перетворень одержимо:

$$k^2 + k - 1 = 0 \quad (5.53)$$

Вирішив (5.53), одержимо близьке значення  $k \sim 0.62$ .

Порядок пошуку екстремуму методом "золотого перетину" наступний . На досліджуванім інтервалі визначаються дві точки  $U_{\min}$  та  $U_{\max}$ :

$$\begin{aligned} U_1 &= U_{\min} + (1-k) \cdot a \\ U_2 &= U_{\min} + k \cdot a \end{aligned} \quad (5.54)$$

де  $a$  - довжина інтервалу  $U_{\min} - U_{\max}$ .

У точках  $U_1$  і  $U_2$  розраховується цільова функція. За знайденим значенням  $R(U_1)$  і  $R(U_2)$  з обліком  $R(U_{\min})$  і  $R(U_{\max})$  визначається підінтервал, у якому локалізований екстремум. У даному випадку це  $[U_{\min}, U_2]$  (рис. 5.25).

Далі усередині великого підінтервалу  $[U_{\min}, U_1]$  знаходиться крапка, що відстоїть від загального кінця підінтервалу на відстані

$$(1-k) \cdot b = k^2 \cdot b,$$

де  $b$  - довжина підінтервалу  $[U_{\min}, U_2]$ , у якому локалізований екстремум, причому  $b = k \cdot a$ . Тоді:

$$U_3 = U_{\min} + k^2 \cdot b = U_{\min} + k^2 \cdot (k \cdot a) = U_{\min} + k^3 \cdot a \quad (5.55)$$

Неважко показати, що в інтервалі  $[U_{\min}, U_2]$  також дотримується "золотий перетин". Далі обчислюється значення цільової функції  $R(U_3)$  і порівнюються значення  $R(U_2)$ ,  $R(U_1)$ ,  $R(U_3)$ . Знаходиться мінімальне значення (у даному випадку  $R(U_3)$ ) і процедура продовжується - визначається аналогічно крапка  $R(U_4)$  і т.д., поки не буде знайдений екстремум із заданою точністю. Абсолютна помилка у визначенні положення екстремуму після  $S$  обчислень складе

$$\Delta = \frac{U_{\max} - U_{\min}}{2} \left( \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \right)^{S-3} \quad (5.56)$$

При  $S=21$  відносна помилка :  $\Delta / (U_{\max} - U_{\min}) = 0,5 \cdot 0,62^{18} \approx 0,9 \cdot 10^{-4}$  Отже, точність розрахунку по методу "золотого перетину" практично на порядок перевершує точність розрахунку по методу локалізації екстремуму при тому самому кількості обчислень.

Розглянемо тепер деякі з методів багатомірного пошуку.

#### **5. 7. 4. Метод покоординатного спуска Гаусса - Зейделя**

Наданий спосіб по суті аналогічен методу релаксації. Відміна укладається лише в тому, що у наданому методі не визначається осьовий напрям, вдовж якої цільова функція змінюється найбільш сильно, а по черзі змінюються всі незалежні перемінні так, щоб по кожній з них досягалося екстремальне значення цільової функції. Як і у методі релаксації, кожна уточнюва перемінна варіюється до тих пор, поки на наданому осьовому напрямі не буде знайдений екстремум. Після цього починається кроковий пошук по наступному осьовому напрямку. Стратегія пошуку точки екстремуму по напрямку може бути будь-якою, в тому числі можна використовувати будь-який з методів одномірного пошуку.

Очевидно, що оскільки варіювання незалежних перемінних діється у встановленому порядку, метод покоординатного спуска приводить до оптимуму більш довгим шляхом. Проте, загальний обсяг обчислювань у рівнянні з методом релаксації може опинитися меншим, так як при переході до уточнення значення наступної перемінної похильні цільової функції не обчислюються.

Основним достоїнством наданого методу є його простота.

До недоліків треба віднести труднощі пошуку точки екстремуму при наявності обмежень та " байраків ", а також, аналогічно методу релаксації, неможливість визначення глобального екстремуму.

При використанні методу покоординатного спуска для визначення екстремуму по напрямку звичайно застосовує один з наступних алгоритмів – пошук з постійним кроком або пошук з перемінним кроком. Суть першого алгоритму укладається у сліdkуючому. Кроки у обраному напрямку здійснюються до отих пор, поки цільова функція буде змінюватися у необхідну сторону, наприклад, зменшуватися в разі пошуку мінімуму. Як тільки ця умова порушується, т. є. точка екстремуму по напрямку пройдена, робиться один крок у зворотному напрямку. І ця точка вважається точкою екстремуму по наданому напрямку.

Найкращі результати дає використання другого алгоритму. Він відрізняється від першого отим, що після переходу через точку екстремуму змінюється не тільки знак кроку пошуку, але і його величина - наприклад, зменшується в два рази. Наданий алгоритм дозволяє точніше визначати стан екстремуму по напрямку, що у кінцевому підсумку дозволяє скоротити загальне число обчислювань для знаходження екстремуму цільової функції.

#### **5. 7. 5. Метод Хука - Джівса**

Наданий метод пошуку точки екстремуму цільової функції є більш ефективним у рівнянні з методом покоординатного спуска. Пошук складається з послідовності кроків пошуку, що досліджується навколо базисної точки, за яким в разі успіху треба пошук по зразку .

Алгоритм методу наступний .

1. Вибирається початкова базисна точка  $B_1$  і крок  $h_j$  для кожної

перемінної  $X_j$  ( $j=1, 2, \dots, n$ ). Можна використовувати й однаковий крок  $h$  для всіх перемінних.

2. Пошук, що досліджує, проводиться з метою одержання зведень про локальне поведження цільової функції в окрузі базисної точки. Ці зведення надалі будуть використані для перебування напрямку пошуку за зразком.

2.1. Обчислюється значення цільової функції  $R(B_1)$  у базисній точці.

2.2. Кожну незалежну перемінну по черзі змінюємо на розмір кроку. Таким чином, обчислюється значення цільової функції  $R(B_1 + h_1 e_1)$ , де  $e_1$  - одиничний вектор у напрямку осі  $x_1$ . Якщо це призводить до зменшення значення цільової функції (в випадку пошуку мінімуму), то  $B_1$  змінюють на  $B_1 + h_1 e_1$ . У протилежному випадку обчислюється значення функції  $R(B_1 - h_1 e_1)$  і якщо її значення зменшилося, те  $B_1$  заміняють на  $B_1 - h_1 e_1$ . Якщо жодний із пророблених кроків не призводить до зменшення значення цільової функції, то точка  $B_1$  залишається незмінною і розглядаються зміни в напрямку осі  $x_2$ , тобто знаходять значення функції  $R(B_1 + h_2 e_2)$  і т.д. Коли будуть розглянуті усе  $n$  перемінних, то одержимо нову базисну точку  $B_2$ .

2.3. Якщо  $B_2 = B_1$ , тобто зменшення функції не було досягнуто, те дослідження повторюється навколо тієї ж базисної точки  $B_1$ , але зі зменшеним розміром кроку. На практику задовільним рахується зменшення розміру кроку (кроків) у десять разів від початкової довжини.

2.4. Якщо  $B_2 \neq B_1$ , те провадиться пошук за зразком.

3. При пошуку за зразком використовується інформація, отримана в процесі дослідження, і мінімізація функції завершується пошуком у напрямку, заданому зразком.

3.1. Розумно рухатися з базисної точки  $B_2$  у напрямку  $B_2 - B_1$ , оскільки пошук у цьому напрямку вже призвів до зменшення значення цільової функції. Точка зразка може бути обчислена в такий спосіб:

$$P_1 = B_1 + 2*(B_2 - B_1) \quad (5.57)$$

У загальному випадку:

$$P_i = B_i + 2*(B_{i+1} - B_i) \quad (5.58)$$

3.2. Проводиться дослідження в округах точки  $P_1(P_i)$ .

3.3. Якщо найменше значення на кроку 3.2 менше значення в базисній точці  $B_2$  (у загальному випадку  $B_{i+1}$ ), те одержують нову базисну точку  $B_3$  ( $B_{i+2}$ ), після чого варто повторити крок 3.1. У протилежному випадку не провадиться пошук за зразком, а заміняється базисна точка. У якості нової базисної точки вибирається та точка, у якому на попередньому кроку значення цільової функції було мінімальним. Потім виконується дослідження навколо нової базисної точки.

4. Процес пошуку завершується, коли довжина кроку (довжини кроків) стануть менше заданого малого значення.

### 5. 7. 6. Метод сканірованія

Наданий метод укладає у послідовному перегляді значень цільової функції у ряді точок, що належать до області зміни незалежних перемінних, та знаходженні серед цих точок такої, у якій цільова функція має екстремум.

Точність методу, природно, визначається отим, наскільки густо розташуються обрані точки у галузі пошуку. Основним достоїнством методу сканірування є те, що при його використанні з достатньо "густим" розміщенням точок завжди гарантується відшукування глобального екстремуму. Проте, для цього у наданому методі вимагається чималий обсяг обчислювань.

Метод сканірування не пов'язаний з наявністю локальних екстремумів на відміну від практично всіх інших методів нелінійного програмування. Тому його можна використовувати для грубої оцінки "областей притягіння" локальних екстремумів, після чого можуть застосовуватися методами градієнтного пошуку для точного визначення координат кожного екстремуму.

Найбільш простий алгоритм пошуку екстремуму методом сканірування "пошук на сітці перемінних" укладається в тому, що по кожній незалежній перемінній задаються припущення у відповідному порядку, що забезпечує "заповнення" всієї досліджуваної області рівномірною та достатньо густою сіткою. Так, наприклад, для пошуку екстремуму функції двох перемінних спершу при фіксованому значенні  $U_2^k$  розраховуються значення  $R(U_j)$  при  $U_1^k = U_1^{k-1}$  для всього діапазону зміни незалежної перемінної  $U_j$  та фіксує значення екстремуму. Після цього друга перемінна змінюється на крок  $\Delta U_2$   $U_2^k = U_2^{k-1} + \Delta U_2$  і розрахунки повторюються при варіюванні перемінної  $U_j$ .

Для довільного числа перемінних крок по наступній перемінній виробляється після отого, як повністю завершений цикл по попередній.

Обсяг обчислювань при використанні методу сканірування можна оцінити по наступній формулі :

$$S = \left(\frac{1}{\Delta}\right)^n \quad (5.59)$$

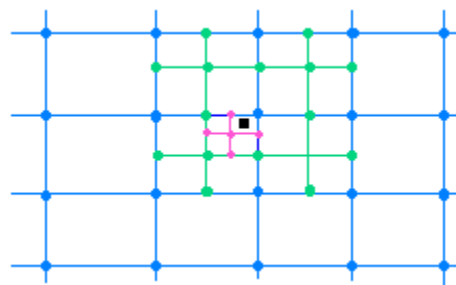
де  $\Delta$  - точність визначення екстремума

$n$  - кількість незалежних перемінних.

При  $n = 2$  та  $\Delta = 10^{-6}$  кількість обчислювань  $S = 10^6$ , а при тому ж значенні точності  $n = 3$   $S = 10^6$ .

Тому метод сканірування ефективно використовується при числі перемінних не більш трьох.

Існують різноманітні модифікації методу сканірування, що застосовуються в основному для скорочування обсягу обчислювань. Розглянемо одну з них - сканірування з перемінним кроком. Спершу задається достатньо великий крок ( $\Delta U > \square$ ) та виконується "грубий" пошук, що локалізує область існування глобального екстремуму (Р) (рис. 5.26).



**Рис 5.26**

Після отого, як область визначена, виробляється пошук з меншим кроком тільки в межах знайденої області. Можна організувати ряд таких процедур послідовного уточнення по положення оптимуму

При використанні наданого алгоритму обсяг обчислювань істотно але скорочує і може бути визначений по наступній формулі :

$$S = K^{-r \cdot n} \left( \frac{1}{\Delta} \right)^n + r \cdot (2 \cdot K)^n \quad (5.60)$$

де  $r$  - число етапів уточнення пошуку, на якому крок зменшувався в  $K$  раз  
 $n$  - число незалежних перемінних;

$\Delta$  - точність визначення екстремуму.

Початковий крок сітки перемінних в даному випадку визначається формулою :

$$\Delta_0 = K^r \Delta \quad (5.59)$$

При  $n = 2$ ,  $\Delta = 10^{-3}$ ,  $r = 2$ ,  $K = 10$  и  $\Delta_0 = 0,1$  кількість обчислювань  $S=900$ .

При постійному кроці сканірування для отих же умов вимагалось  $10^6$  обчислювань, т. є. обсяг обчислювань скоротився більш ніж у 1000 раз. Ще більш чималий вигреш спостерігається при більшому числі незалежних перемінних. Так, для отих же наданих, але при  $n = 3$  число обчислювань з перемінним кроком сканірування складе  $S = 17000$ , а для постійного кроку  $S = 10^9$ .

### 5. 7. 7. Симплексний метод

Основна ідея цього методу укладається в тому, що по відомим значенням цільової функції у вершинах опуклого многогранника, що називається симплексом, знаходиться напрямок, у якому вимагається зробити наступний крок, щоб одержати найбільше зменшення (збільшення) значення цільової функції. При цьому під симплексом в  $n$ -мірним просторі розуміється многогранник, що має  $n+1$  вершину. Прикладом симплекса в двомірному просторі, т. є. на площині, є трикутник. В трьохмірному просторі - тетраедр. Симплекс володіє наступною властивістю - проти будь-який з його вершин  $S_j$  розміщена тільки одна грань, на якій можна збудувати новий симплекс, що відрізняється від колишнього розміщенням нової вершини  $S_j$  тоді як інші вершини обох симплексів співпадають. Вершина нового симплекса  $S$ , взагалі кажучи, може знаходитися і по іншу сторону грані від вершини  $S_j$ .

Ця властивість симплекса і обумовлювала можливість його застосування при рішенні задач оптимізації.

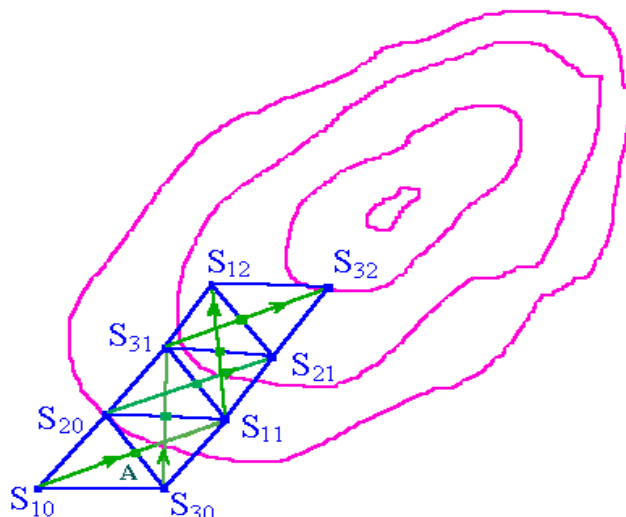
Розглянемо найпростіший випадок - пошук мінімуму цільової функції двох перемінних  $R(U_1, U_2)$ .

*Алгоритм пошуку наступний:*

1. Розраховуються значення цільової функції у вершинах обраного вами симплекса  $S_{10}, S_{20}, S_{30}$  (рис.5.27).

2. Вибирається вершина, де значення  $R(U_1, U_2)$  найбільше -  $S_{10}$ .

3. Новий симплекс  $S_{11}, S_{20}, S_{30}$  будується таким засібом: - знаходиться середина грані  $S_{20}, S_{30}$ , яка розташована проти вершини  $S_{10}$  - **крапка А**. Через крапки  $S_{10}$  і **А** проводиться пряма. На цій прямій від крапки **А** відкладається відрізок  $AS_{11}$ , рівний по величині відрізку  $S_{10}A$ .





4. У новій вершині обчислюється значення цільової функції.

5. З вершин нового симплекса  $S_{11}, S_{20}, S_{30}$  вибирається та, де значення цільової функції максимальна. **Рис.5.27**

6. Аналогічно п.3 будується новий симплекс  $S_{11}, S_{20}, S_{31}$ , тобто

виключається вершина  $S_{30}$ , що мала найбільше значення цільової функції і т.д.

У результаті застосування розглянутої процедури виключення вершин симплексів з найбільшим значенням цільової функції процес пошуку сходиться до мінімального значення  $R(U_1, U_2)$ . При виникненні зациклення в околицях крапки екстремуму необхідно зменшувати розміри симплекса.

Критерієм закінчення пошуку можуть служити розміри симплекса. Наприклад, якщо всі ребра симплекса стануть менше  $\delta$ , то пошук можна припиняти.

Розглянемо алгоритм симплексного методу для задач довільної розмірності.

Нехай вершинам вихідного симплекса  $S_i$  ( $i=1,2,\dots,n+1$ ) відповідають координати

$U^{(i)} = (U^{(i)}_1, U^{(i)}_2, \dots, U^{(i)}_n)$ , ( $i=1,2,\dots,n+1$ ). І нехай найбільше значення цільової функції відповідає вершині  $S_j$ . Визначимо координати вершини  $\hat{S}_j$  нового симплекса.

Вершина  $\hat{S}_j$  розташовується симетрично вершині  $S_j$  щодо середини грані, що знаходиться проти вершини  $S_j$ . Координати центра цієї грані  $U^{(i)}$  визначаються по формулі: (5.62) причому підсумовування ведеться тільки по тим векторам  $U^{(i)}$ , що відповідають вершинам  $S_i$ , що утворюють цю грань. Вектор, що характеризує відстань від вершини  $S_j$  до центра грані, яка розташована проти цієї вершини, буде:

$$\bar{L} = \bar{U}^{(A)} - \bar{U}^{(j)} \quad (5.63)$$

Координати вершини  $S_j$  визначаються по формулі

$$\tilde{U}^{(j)} = \bar{U}^{(A)} + \bar{L} = 2 * \bar{U}^{(A)} - U^{(j)} \quad (5.64)$$

Підставивши в (5.64) вираження для  $U$  з (5.62), одержимо:

$$\tilde{U}^{(j)} = -\frac{2}{n} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n+1} \bar{U}^{(i)} - \left(1 + \frac{2}{n}\right) \bar{U}^{(j)} \quad (5.65)$$

Формула (5.65) визначає координати вершини  $S_j$  нового симплекса.

При необхідності зменшити розміри симплекса (у випадку зациклення в околиці крапки оптимуму) замість формули (5.63) можна користатися наступним вираженням:

$$\bar{L} = \bar{U}^{(A)} - \frac{1}{2} \bar{L} = \frac{3}{2} \bar{U}^{(A)} - \frac{1}{2} \bar{U}^{(j)} \quad (5.66)$$

Найбільше ефективно симплексний метод сходиться при використанні правильних симплексів - рівностороннього чи трикутника тетраедра, утвореного рівносторонніми трикутниками. У цьому випадку напрямок пошуку збігається з напрямком градієнта (якщо симплекс досить малий).

Симплексний метод володіє ще одним важливим достоїнством - при збільшенні розмірності задачі обчислювальні витрати зростають незначно, тому що на кожному кроці вважається тільки одне значення цільової функції.

### 5.7.8. Метод Нелдера-Мида

Метод Нелдера-Мида є розвитком симплексного методу Спендли, Хекста і Химсворта. Ідея методу складається в рівнянні значень функції в  $n+1$  вершинах симплекса і переміщенні симплекса в напрямку оптимальної крапки за допомогою ітераційної процедури.

У даному методі симплекс переміщається за допомогою трьох операцій: **відображення, розтягання і стиски**. Зміст цих операцій стане зрозумілим при розгляді кроків процедури.

**А.** Знайдемо значення функції у вершинах симплекса.

$$f_1 = f(x_1); f_2 = f(x_2); \dots; f_{n+1} = f(x_{n+1})$$

**Б.** Серед обчислених значень знайдемо **найбільше** значення функції  $f_{MAX}$ , що впливає за найбільшим значенням функції  $f_{CP}$ , **найменше** значення функції  $f_{MIN}$  і відповідні їм крапки  $X_{MAX}$ ,  $X_{CP}$ , і  $X_{MIN}$ .

**В.** Знайдемо центр ваги всіх крапок, за винятком крапки  $X_{MAX}$  (тобто середину грані, яка розташована проти крапки  $X_{MAX}$ ).

$$X_o = \frac{1}{n} \sum_{i \neq \max} X_i$$

Обчислимо  $f(X_o) = f$ .

**Г.** Зручніше за все почати переміщення від крапки  $X_{MAX}$ . **Відбивши** крапку  $X_{MAX}$  щодо крапки  $X_o$ , одержимо крапку  $X_R$  і знайдемо  $f(X_R) = f$ . Якщо  $\alpha$  - коефіцієнт відображення, то положення крапки  $X_R$  визначається в такий спосіб:

$$X_R - X_o = \alpha \cdot (X_o - X_{MAX})$$

чи

$$X_R = (1 + \alpha) X_o - \alpha \cdot X_{MAX},$$

$$\text{де } \alpha = \left| \frac{X_R - X_o}{X_o - X_{MAX}} \right|$$

**Д.** Порівнюємо значення функцій  $f$  і  $f_{MIN}$ .

**1.** Якщо  $f < f_{MIN}$ , то в знайденій крапці одержали найменше значення функції.

Напрямок із крапки  $X_o$  в крапку  $X_R$  найбільше доцільно для переміщення. Тому, ми робимо **розтягання** в цьому напрямку і знаходимо крапку  $X_E$  і значення функції  $f = f(X_E)$ . Коефіцієнт розтягання  $\gamma > 1$  можна знайти з наступних співвідношень:

$$X_E - X_o = \gamma (X_R - X_o),$$

тобто

$$X_E = \gamma \cdot X_R + (1 - \gamma) X_o,$$

$$\text{де } \gamma = \left| \frac{X_E - X_o}{X_R - X_o} \right|.$$

а) Якщо  $f < f_{MIN}$ , те заміняємо крапку  $X_{MAX}$  на крапку  $X_E$  і перевіряємо  $(n + 1)$ - ую крапку симплекса на збіжність до мінімуму (див. крок **З**). Якщо збіжність досягнута, то процес зупиняється; у противному випадку повертаємося на крок **Б**.

б) Якщо  $f > f_{MIN}$ , те відкидаємо крапку  $X_E$ . Очевидно, ми перемістилися занадто далеко від крапки  $X_o$  до крапки  $X_R$ . Тому варто замінити крапку  $X_{MAX}$  на крапку  $X_R$ , у якій було отримане поліпшення (крок **Д**, 1), перевірити збіжність і, якщо вона не досягнута, повернутися на крок **В**.

**2.** Якщо  $f > f_{MIN}$ , але  $f \leq f_{CP}$ , те  $X_R$  є кращою крапкою в рівнянні з іншими двома крапками симплекса і ми заміняємо крапку  $X_{MAX}$  на крапку  $X_R$  і, якщо збіжність не досягнута, повертаємося на крок **Б**.

**3.** Якщо  $f > f_{\text{MIN}}$ , і  $f > f_{\text{CP}}$ , то перейдемо на крок **Е**.

**Е.** Порівняємо значення функцій  $f$  і  $f_{\text{MAX}}$ .

1. Якщо  $f > f_{\text{MAX}}$ , то переходимо безпосередньо до кроку стиску **Е,2**.

Якщо  $f < f_{\text{MAX}}$ , то заміняємо крапку  $X_{\text{MAX}}$  на крапку  $X_R$  і значення функції  $f_{\text{MAX}}$  на значення функції  $f$ . Запам'ятовуємо значення

$f > f_{\text{CP}}$  із кроку **Д.2**, приведеного вище. Потім переходимо на крок **Е, 2**.

2. Так як у цьому випадку  $f > f_{\text{MAX}}$ , тому ясно, що ми перемістилися занадто далеко від крапки  $X_{\text{MAX}}$  до крапки  $X_O$ . Спробуємо виправити це, знайшовши крапку  $X_C$  (а потім  $f$ ) з допомогою кроку *стиску*.

Якщо  $f > f_{\text{MAX}}$ , то відразу переходимо до кроку стиску і знаходимо крапку  $X_C$  зі співвідношення

$$X_C - X_O = \beta (X_{\text{MAX}} - X_O),$$

де  $(0 < \beta < 1)$  - коефіцієнт стиску.

Тоді

$$X_C = \beta \cdot X_{\text{MAX}} + (1 - \beta) X_O.$$

Якщо  $f < f_{\text{MAX}}$ , то спочатку замінимо крапку  $X_{\text{MAX}}$  на крапку  $X_R$ , потім зробимо стиск. Тоді крапку  $X_C$  знайдемо зі співвідношення

$$X_C - X_O = \beta (X_R - X_O),$$

тобто

$$X_C = \beta X_R + (1 - \beta) X_O \text{ (Рис. 4).}$$

**Ж.** Порівняємо значення функцій  $f$  і  $f_{\text{MAX}}$ .

1. Якщо  $f < f_{\text{MAX}}$ , то заміняємо крапку  $X_{\text{MAX}}$  на  $X_C$ , і якщо збіжність не досягнута, то повертаємося на крок **Б**.

2. Якщо  $f > f_{\text{MAX}}$ , то очевидно, що всі наші спроби знайти значення менше  $f_{\text{MAX}}$  закінчилися невдачею, тому ми переходимо на крок **З**.

**З.** На цьому кроці ми зменшуємо розмірність симплекса розподілом навпіл відстані від кожної крапки симплекса до  $X_{\text{MIN}}$  - крапки визначальної найменше значення функції.

Таким чином, крапка  $X_i$  заміняється на крапку  $X_i + 1/2(X_i - X_{\text{MIN}})$ , тобто заміняємо крапку  $X_i$  крапкою  $1/2(X_i - X_{\text{MIN}})$ .

Потім обчислюємо  $f_i$  для  $i = 1, 2, \dots, (n + 1)$ , перевіряємо збіжність  $i$ , якщо вона не досягнута, повертаємося на крок **В**.

**И.** Перевірка збіжності заснована на тім, щоб стандартне відхилення  $(n + 1)$  -го значення функції було менше деякого заданого малого значення  $\varepsilon$ . У цьому випадку обчислюється

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^{n+1} (f_i - \bar{f})^2 / (n+1)$$

де  $\bar{f} = \sum f_i / (n+1)$ .

Якщо  $\sigma < \varepsilon$ , то всі значення функції дуже близький друг до друга і тому вони, можливо, лежать поблизу крапки мінімуму функції  $X_{\text{MIN}}$ . Тому такий критерій збіжності є розумним.

Коефіцієнти  $\alpha$ ,  $\beta$  і  $\gamma$  є відповідно коефіцієнтами *відображення*, *стиски* і *розтягання*. Автори рекомендують брати  $\alpha=1$ ;  $\beta = 0.5$ ;  $\gamma = 2$ . Початковий симплекс вибирається довільно.

## 5.8. Методи випадкового пошуку

Основна ідея методів випадкового пошуку полягає в тому, що перебором випадкових сукупностей значень незалежних перемінних знайти оптимум цільової чи функції напрямом руху до нього.

Існує значна кількість методів випадкового пошуку, з яких будуть розглянуті лише найбільш розповсюджені.

Загальним для всіх методів випадкового пошуку є застосування випадкових чисел у процесі пошуку. Розглянемо лише основні поняття про випадкові числа.

**Під випадковою величиною** розуміють величину, що приймає в результаті іспитів значення, що принципово не можна пророчити, виходячи з умов досвіду. Випадкова величина має цілий набір припустимих значень, але в результаті кожного окремого досвіду приймає лише якесь одне з них.

**Випадковий вектор**, визначений у  $n$ -мірному просторі

$$\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$$

може з рівною імовірністю приймати будь-як напрямок у  $n$ -мірному просторі і має довжину, рівну 1. Такий вектор може бути отриманий з послідовності випадкових чисел  $\beta_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ), рівномірно розподілених на інтервалі  $[-b, b]$ .

Для перебування випадкового вектора  $\alpha$  за допомогою послідовності випадкових чисел  $\beta_j$ , виразимо компоненти випадкового вектора  $\alpha_j$  наступними співвідношеннями:

$$(5.67)$$

Вектор  $\alpha$ , компоненти якого розраховуються по (5.67), характеризує випадковий напрямок у  $n$ -мірному просторі.

**Випадкова крапка.** Під випадковим вибором деякої крапки в заданій області простору розуміється випадковий вибір з імовірністю влучення в задану околицю будь-якої крапки зазначеної області, рівної відношенню обсягу околиці крапки до обсягу всієї області. Координати випадкової крапки знаходяться за допомогою випадкових чисел  $\beta_j$ , заданих на інтервалі  $[-b, b]$ .

Нехай область простору нормованих перемінних

$U_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) задана умовами:

$$0 < U_j < 1 \quad (j = 1, 2, \dots, n) \quad (5.68)$$

Для визначення координат випадкової крапки можна використовувати наступні співвідношення:

$$X_j = (b_j + b) / (2 \cdot b) \quad (j = 1, 2, \dots, n) \quad (5.69)$$

Деякі способи одержання випадкових чисел будуть розглянуті нижче.

До числа найбільш розповсюджених методів випадкового пошуку відносяться метод сліпого пошуку, метод випадкових напрямків і його модифікації.

### 5.8.1. Метод сліпого пошуку

При використанні сліпого пошуку в припустимій області зміни незалежних перемінних випадковим образом вибирається крапка, у якій обчислюється значення

цільової функції. Далі, аналогічно вибирається інша випадкова крапка, де також розраховується значення цільової функції і порівнюється з отриманим раніше. Якщо значення цільової функції в новій крапці виявляється меншим, чим у попередній крапці (у випадку пошуку мінімуму), то нове значення запам'ятовується разом з координатами крапки, для якої воно було обчислено.

Потім продовжується вибірка випадкових крапок і рівняння значень цільової функції в цих крапках із уже знайденим. Щораз, коли знаходиться менше значення цільової функції, воно запам'ятовується з відповідними значеннями координат, після чого продовжується пошук кращого наближення до крапки екстремуму.

Пошук закінчується, якщо після виконання наступної серії з  $S$  кроків менше значення цільової функції знайти не удалось.

Теоретично при застосуванні такої стратегії і досить великому числі іспитів можна досягти як завгодно високого ступеня точності у визначенні положення крапки оптимуму. Але на практиці використання методу сліпого пошуку істотно обмежується розмірністю розв'язуваної задачі і складністю обчислення цільової функції.

Так, наприклад, навіть при  $n=2$  і з імовірністю  $P=0.5$  для того, щоб положення крапки оптимуму визначити з точністю  $\epsilon=0,001$  необхідно виконати не менш  $S$  виборів випадкових крапок. Число виборів  $S$  можна оцінити по формулі

$$(5.70)$$

З (5.70) видно, що число необхідних обчислень різко збільшується зі зростанням розмірності розв'язуваної задачі.

Аналогічно методу сканування, можна після грубого наближення до крапки оптимуму проводити пошук вже в більш вузькій області, що приведе до скорочення обсягу обчислень.

### 5.8.2. Метод випадкових напрямків

Алгоритм цього методу полягає в тому, що з крапки  $n$ -мірного простору, для якої цільова функція розрахована, виробляється крок у випадковому напрямку, обумовленому випадковим вектором  $\alpha^{(k)}$ . Величина кроку задається параметром  $h$ . У результаті знаходиться наступна крапка

$$U^{(k+1)} = U^{(k)} + h \cdot \alpha^{(k)} \quad (5.71)$$

У новій крапці обчислюється значення цільової функції. Якщо при виконанні випадкового кроку  $h \cdot \alpha^{(k)}$ , що приводить у крапку  $U^{(k+1)}$ , виходить менше значення цільової функції, то крок вважається вдалим (у випадку пошуку мінімуму) і нове значення цільової

функції запам'ятовується разом з координатами крапки  $U^{(k+1)}$ . Потім робиться новий  $h \cdot \alpha^{(k+1)}$  у випадковому напрямку і т.д.

Якщо випадковий крок  $h \cdot \alpha^{(k)}$  виявляється невдалим, то продовжується вибірка наступного випадкового вектора  $\alpha$  і з крапки  $U^{(k)}$  знову виконується крок. Спробні кроки з крапки  $U^{(k)}$  робляться доти, поки не буде знайдена крапка  $U^{(k+1)}$ , у якій цільова функція буде мати менше значення. Потім спробні кроки виконуються з крапки  $U^{(k+1)}$ .

Пошук закінчується, якщо після виконання серії з  $S$  кроків

меншого значення цільової функції знайти не удалось.

Можна використовувати цей алгоритм, застосовуючи крок  $h^{(k)}$  змінної величини. При цьому ефективність методу трохи зростає за рахунок застосування більш великого кроку удалині від крапки оптимуму. У цьому випадку після виконання серії з  $S$  невдалих кроків пошук не закінчують, а зменшують величину кроку  $h^{(k)}$  і проводять нову серію обчислень.

Критерієм закінчення пошуку служить мінімальний розмір кроку  $h_{\min}$ , яким і задається точність визначення екстремуму.

### **5.8.3. Метод випадкових напрямків зі зворотним кроком**

Цей метод випадкового пошуку власне кажучи являє собою поліпшення алгоритму випадкових напрямків. Відмітною його особливістю є те, що при невдалому кроці  $h \cdot \alpha^{(k)}$  із крапки  $U^{(k)}$  відразу ж виробляється крок у зворотному напрямку  $-h \cdot \alpha^{(k)}$ . При достатнім видаленні від крапки оптимуму така стратегія пошуку виявляється дуже ефективною.

Якщо і зворотному кроці виявляється неефективним, то робиться новий випадковий крок із кроком  $h$ , або зі зменшеним значенням величини кроку.

### **5.8.4. Одержання випадкових чисел**

Послідовність випадкових чисел можна одержати одним з наступних способів:

- шляхом вибірки зі спеціальних таблиць;
- використовуючи датчики випадкових чисел;
- програмними методами.

Саме останній спосіб і знайшов найбільше поширення при рішенні різних задач методами випадкового пошуку з використанням засобів обчислювальної техніки, оскільки перший спосіб важко використовувати при необхідності роботи з великим масивом значень, а при другому можуть виникати складності зчленування самого датчика з ЕОМ.

Послідовності випадкових чисел, знайдені алгоритмічно, насправді не є випадковими, тому що не задовольняють необхідним статистичним оцінкам. Однак при рішенні практичних задач програмно одержувану послідовність часто все-таки можна розглядати як випадкову за умови, що обсяг вибірки випадкових чисел не занадто великий. У зв'язку з цим, для випадкових чисел, знайдених програмним шляхом, часто застосовують назва псевдовипадкові числа.

Звичайно для програмних способів одержання випадкових чисел використовується рекурентне співвідношення, за допомогою якого кожне наступне число утвориться з попереднього відповідно до правила, що задається у виді набір арифметичних і логічних операція, виконуваних ЕОМ.

Основний недолік цих методів полягає в тім, що одержувана послідовність випадкових чисел є періодичної. Однак при рішенні практичних задач її період часто виявляється достатнім, щоб це істотно не позначилося на результатах обчислень. Разом з тим, програмні способи одержання випадкових чисел володіють тим достоїнством у рівнянні з використанням спеціальних датчиків, що дозволяють

при необхідності відтворити рішення задачі (що особливо важливо при великих обсягах витрат машинного часу у випадку збоїв у роботі ЕОМ).

Розглянемо деякі алгоритми одержання послідовності випадкових чисел, які можна використовувати при рішенні оптимізаційних задач методами випадкового пошуку.

#### 5.8.4.1. Метод добутків

Довільно вибираються два числа  $\beta_0$  і  $\beta_1$ , що мають однакове число значущих цифр  $m$ . Знаходиться їхній добуток

$q_2 = \beta_0 * \beta_1$ . Якщо  $m > 1$ , то число значущих цифр у  $q_2$  буде більше, ніж  $m$ . Тоді з усіх значущих цифр добутку  $q_2$  вибирається  $m$  цифр, розташованих у середині числа  $q_2$ , і ці цифри використовують як випадкове  $\beta_2$ . Наступне випадкове число  $\beta_3$  виходить аналогічно з добутку  $\beta_1 * \beta_2$  і т.д.

Недоліком цього методу є можливість виродження послідовності випадкових чисел, що знаходяться, тобто можливість одержання на деякому етапі випадкового числа, рівного 0, після чого всі інші числа, обумовлені за допомогою даного методу, виявляються рівними 0.

#### 5.8.4.2. Метод відрахувань

Застосування методу відрахувань засноване на тім, що кожне наступне випадкове число  $\beta_{k+1}$  утвориться з попереднього  $\beta_k$  згідно рекурентному співвідношенню:

$$\beta_{k+1} = \lambda * \beta_k \pmod{N} \quad (5.72)$$

яке означає, що число  $\beta_{k+1}$  дорівнює залишку від розподілу на  $N$  числа  $\beta_k$  на постійний множник  $\lambda$ .

Очевидно, що залишок від розподілу на  $N$  у загальному випадку має ту же розрядність, що і число  $N$ , тобто вибором числа  $N$  власне кажучи визначається розрядність одержуваних випадкових чисел.

З використанням цього алгоритму була, наприклад, знайдена

Залежність для одержання послідовності псевдовипадкових чисел  $d_k$  рівномірно розташованих на інтервалі  $[0;1]$ :

$$d_{k+1} = 5^{17} * d_k \pmod{2^{42}}; d_0 = 1; \quad (5.73)$$

$$\beta_k = 2^{-42} * d_k \quad (5.74)$$

Рівняння (5.73) є записом алгоритму (5.72), а (5.74) застосовується для того, щоб привести випадкові числа до інтервалу  $[0;1]$ .

Період послідовності, одержуваний по (5.73) приблизно дорівнює  $10^{12}$

Інша послідовність псевдовипадкових чисел може бути отримана при використанні рекурентного співвідношення (5.72), якщо прийняти

$$\lambda = 5^{13}; N = 2^{36} \quad (5.75)$$

Одержувана при цих значеннях послідовність має період, оцінюваний числом  $22 \cdot 10^{10}$ .

З цих оцінок величини періоду випливає справедливість раніше

зробленого допущення про те, що для багатьох практичних розрахунків можливо користатися такими послідовностями випадкових чисел, отриманих за допомогою програмних способів.

#### 5.8.4.3. Одержання псевдовипадкових послідовностей з

#### іраціональних чисел

Цей спосіб заснований на властивості іраціональних чисел утворювати неупорядковану послідовність цифр дробової частини при обчисленні іраціонального числа з досить високим ступенем точності. У найбільш простій формі даний спосіб реалізується при розрахунку дробової частини добутку іраціонального числа  $Z$  на послідовність натуральних чисел. При цьому алгоритм може бути записаний у наступному виді:

$$V_k = \{K.Z\} \quad K=1; 2; 3; \dots \quad (5.76)$$

Фігурні дужки в (5.76) означають, що з добутку  $K.Z$  береться тільки дробова частина, що повинна обчислюватися з необхідним ступенем точності, що характеризує розрядність що знаходяться псевдовипадкових чисел.

Необхідно також відзначити, що використання послідовностей псевдовипадкових чисел, що відрізняються по вероятностним оцінках від ідеальної послідовності рівномірно розташованих випадкових чисел, у деяких випадках може помітно збільшити час рішення оптимізаційної задачі методами випадкового пошуку.

### 5.9. Рівняння різних методів рішення задач

#### оптимізації методами нелінійного програмування

Велике число методів рішення оптимізаційних задач методами нелінійного програмування вказує, по-перше, на складність проблеми пошуку, по-друге, на труднощі, зв'язані з оцінкою ефективності використання того чи іншого методу для рішення конкретної задачі. Проте дуже важливо хоча б з визначеним ступенем ідеалізації оцінити практичну ефективність можливостей різних методів. Такі оцінки приводяться в літературі для методів різних груп, що дозволяє намітити границі застосовності тихнун методів.

Одним із критеріїв, що мають чисто практичне значення, є так називані втрати на пошук, під якими звичайно розуміють середнє число значень цільової функції, яких необхідно при розрахунках для досягнення крапки оптимуму.

а) При рівнянні методу градієнта, методу найшвидшого спуска і методу Гаусса-Зейделя показано, що середні втрати на пошук для всіх цих методів приблизно однакові, якщо прийняти, що в методі градієнта й у методі Гаусса-Зейделя використовується той самий крок спуска. Це рівняння було зроблено на прикладі цільової функції квадратичної форми.

б) Метод найшвидшого спуска удалині від крапки екстремума виявляється більш вигідним, чим метод градієнта.



в) Рівняння градієнтних методів і методів випадкового пошуку було проведено для випадку, коли цільова функція виражалася квадратичною залежністю, а для пошуку крапки оптимуму використовувалися метод градієнта і метод випадкових напрямків з однаковими величинами кроків пошуку. Виявилось, що ці методи в змісті обчислювальних витрат мають приблизно однакову ефективність при розмірності задачі рівної 3 і досить великому видаленні від крапки оптимуму. При збільшенні розмірності задачі більш вигідним виявляється метод випадкових напрямків, однак у міру наближення до крапки оптимуму доцільніше переходити до методу градієнта.

г) Якщо порівнювати симплексний метод з методом випадкових напрямків зі зворотним кроком, то перший з них більш ефективний, причому чим вище розмірність задачі, тим більше вигідним виявляється симплексний метод.

Варто мати на увазі, що ці оцінки відносяться до тих випадкам, коли зіставлення проводилося в ідентичних умовах при рівних кроках спуска. При практичній реалізації будь-якого методу можливі поліпшення за рахунок використання особливостей цільової функції, стратегії вибору кроку, сполучення різних методів і т.п. Тому приведені оцінки тільки дозволяють приблизно установити границі областей застосовності різних методів.

## ЛІТЕРАТУРА

1. Царьова З.М., ТОВАЖНЯНСЬКИЙ Л.Л., Орлова Е.І. Основи теорії хімічних реакторів (комп'ютерний курс). - Харків: НТУ ХП, 2002. - 615 с.
2. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. - М.: Химия, 1993. - 288 с.
3. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств: Учеб. пособие для вузов. –М.: Высш. шк.,1991.–400 с.
4. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии - М.: Химия , 1992. – 576 с.
5. Смирнов Н.Н., Волжинский А.И., Плесовских В.А. Химические реакторы в примерах и задачах: Учеб. пособие для вузов. –СПб: Химия, 1994. – 280 с.
6. Бесков В.С., Сафронов В.С. Общая химическая технология и основы промышленной экологии: Учебник для вузов. – М.:Химия, 1999. – 472 с.

## ЗМІСТ

.....	
<b>1. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ</b> .....	<b>1</b>
<b>ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ</b> .....	<b>2</b>
1.1. Загальні поняття .....	2
1.2. Класифікація моделей .....	3
1.3. Фізичне моделювання .....	5
1.4. Математичне моделювання .....	7
1.5. Засоби складання математичних моделей .....	8
1.5.1. Емпіричний засіб .....	9
1.5.2. Експериментально - аналітичний засіб .....	48
1.5.3. Теоретичний засіб .....	49
1.5.4. Зіставлення засобів побудови математичних моделей .....	50
1.5.5. Вірогідність та простота моделі .....	50
1.5.6. Рішення рівнянь математичного опису .....	51
1.5.7. Перевірка адекватності та ідентифікація моделі .....	51
1.5.8. Вибір математичної моделі .....	51
<b>2. МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІЧНИХ РЕАКТОРІВ</b> .....	<b>52</b>
2.1. Модель реактора ідеального змішування .....	52
2.1.1. Модель РІЗ для опису стаціонарного режиму .....	54
2.1.2. Модель РІЗ при протечі деяких реакцій .....	54
2.1.3. Дослідження моделі РІЗ .....	55
2.1.4. Побудова $Q - T$ -діаграми і дослідження стійкості .....	56
стаціонарних режимів РІЗ .....	56
2.1.5. Умова стійкості .....	60
2.1.6. Вплив вхідних параметрів на стаціонарні режими. .....	60
Побудова статичних характеристик РІЗ .....	60
2.2. Реактор ідеального витиснення (РІВ) .....	64
2.2.1. Математична модель РІВ .....	64
2.2.2. Дослідження РІВ .....	65
2.2.3. Зіставлення РІЗ та РІВ .....	66
2.3.5. Ячеєчна модель .....	68
2.4. Дифузійна модель з подовжнім переносом речовини та тепла .....	71
<b>3. ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ КАТАЛІТИЧНОГО РЕАКТОРА</b> .....	<b>76</b>
3.1. Етапи побудови математичної моделі .....	76
3.2. Структурний аналіз .....	79
3.3. Моделювання процесу на одному зерні каталізатора .....	81
3.4. Теоретична оптимізація .....	84
3.5. Попередній вибір типу реактора .....	87
3.6. Моделювання процесу в шару каталізатора .....	87
<b>4. УСТАЛЕНІСТЬ РЕАКТОРНИХ СХЕМ</b> .....	<b>90</b>
4.1. Методи дослідження усталеності .....	90
4.2. Усталеність простих схем .....	91
4.3. Усталеність промислових реакторів .....	93
<b>5. МЕТОДИ ОПТИМІЗАЦІЇ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ</b> .....	<b>96</b>

5.1. Постановка <b>задачі</b> оптимізації.....	96
5.2. Цільова функція і її властивості .....	99
5.2.1. <i>Нормалізація незалежних перемінних</i> .....	99
5.2.2. <i>Геометрична інтерпретація цільової функції</i> .....	100
5.2.3. <i>Особливі <b>крапки</b> і лінії цільової функції</i> .....	101
5.2.4. <i>Глобальний і локальний оптимуми</i> .....	101
5.3. Методи рішення задач оптимізації .....	102
5.4. Аналітичні засоби.....	103
5.5. Загальна характеристика засобів рішення задач .....	104
нелінійного програмування .....	104
5.6. Градієнтні методи рішення задач оптимізації.....	105
5.6.1. <i>Градiєнт цільової функції</i> .....	105
5.6.2. <i>Обчислення похідних цільової функції</i> .....	108
5.6.3. <i>Засіб релаксації.</i> .....	108
5.6.4. <i>Метод градієнту</i> .....	111
5.6.5. <i>Засіб найшвидшого спуска</i> .....	113
5.7. Безградієнтні методи рішення задач оптимізації.....	114
5.7.1. <i>Метод сканірування</i> .....	115
5.7.2. <i>Метод локалізації екстремума</i> .....	115
5.7.3. <i>Метод "золотого перетину"</i> .....	116
5.7.4. <i>Метод покоординатного спуска Гаусса - Зейделя</i> .....	117
5.7.5. <i>Метод Хука - Девіса</i> .....	117
5.7.6. <i>Метод сканірування</i> .....	118
5.7.7. <i>Симплексний метод</i> .....	120
5.7.8. <i>Метод Нелдера-Мида</i> .....	122
5.8. Методи випадкового пошуку .....	124
5.8.1. <i>Метод сліпого пошуку</i> .....	124
5.8.2. <i>Метод випадкових напрямків</i> .....	125
5.8.3. <i>Метод випадкових напрямків зі зворотним кроком</i> .....	126
5.8.4. <i>Одержання випадкових чисел</i> .....	126
5.8.4.1. <i>Метод добутків</i> .....	127
5.8.4.2. <i>Метод відрахувань</i> .....	127
5.8.4.3. <i>Одержання псевдовипадкових послідовностей з</i> .....	128
<i>іраціональних чисел</i> .....	128
5.9. Рівняння різних методів рішення задач .....	128
оптимізації методами нелінійного програмування .....	128
ЛІТЕРАТУРА.....	130
ЗМІСТ .....	131