

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
З ОРГАНІЗАЦІЇ САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ З ДИСЦИПЛІНИ
«Методи дослідження та аналіз результатів експериментів в хімії та
хімічних технологіях»

для аспірантів денної та заочної форм навчання
спеціальностей «102 Хімія» та «161 – Хімічні технології та
інженерія»

ВСТУП

Мета навчальної дисципліни – вдосконалити теоретичні і практичні знання аспірантів спеціальностей «102 Хімія» та «161 Хімічні технології та інженерія» про методи досліджень та аналіз результатів експериментальних досліджень в хімії та хімічних технологіях.

Для досягнення поставленої мети аспіранту необхідно ознайомитись з загальними вимогами до експерименту, математичного і комп'ютерного моделювання, як методів досліджень в хімії та хімічній технології; опанувати методи математичного планування експерименту, а також методи дисперсійного кореляційного та регресійного аналізів.

Результатом опанування дисципліною є нові знання, призначені для створення нових або вдосконалення існуючих матеріалів, продуктів, пристроїв, методів, технологій тощо.

Передумови для вивчення дисципліни:

Викладання дисципліни «Методи дослідження та аналіз результатів експериментів в хімії та хімічних технологіях» здійснюється після опанування аспірантами таких дисциплін як «Інформаційні технології в наукових дослідженнях» і «Теоретичні та практичні проблеми сучасних хімічних технологій та інженерії».

Програма навчальної дисципліни.

Модуль 1. – Методи дослідження та аналіз результатів експериментів в хімії та хімічних технологіях (60 год.)

Змістовий модуль 1 – Методологія досліджень в хімії та хімічній технології із застосуванням лабораторних і промислових експериментів (30 год.).

Тема 1.1 – Експеримент як метод дослідження в хімії та хімічній технології. (Загальні відомості про експериментальні дослідження хімічних процесів та ХТП. Математична теорія експерименту. Поняття випадкових величин та їх характеристик. Залежні і незалежні випадкові величини. Поняття рандомізації експериментів. Відтворюваність експериментів. Статистична обробка результатів експериментів. Стандартні процедури перевірки

результатів експериментів. Пасивний та активний експеримент)

Тема 1.2 – Математичне моделювання як метод дослідження в хімії та хімічній технології. (Класифікація моделей хімічних процесів. Детерміновані і статистичні моделі ХТП. Етапи математичного моделювання ХТП. Ієрархічні моделі та їх призначення).

Змістовий модуль 2 – Аналіз результатів експериментів в хімії та хімічних технологіях (30 год.).

Тема 2.1 – Використання дисперсійного і кореляційного аналізу для оптимізації ХТП. (Дисперсійний аналіз, його суть і завдання. Однофакторний дисперсійний аналіз. Планування експерименту при дисперсійному аналізі. Основні поняття та визначення кореляційного аналізу. Вибіркові коефіцієнти кореляції. Частинні коефіцієнти кореляції).

Тема 2.2 – Використання регресійного аналізу для оптимізації ХТП. (Вибір рівняння наближеної регресії. Статистичний аналіз рівняння регресії. Оцінка міцності нелінійного зв'язку. Метод множинної кореляції. Поняття про непараметричні методи обробки даних).

Теми лекційних занять.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1.	Загальні відомості про методи досліджень в хімії та хімічній технології. Хімічне виробництво, його структура, склад і компоненти. Поняття ХТП і ХТС як моделей хімічного виробництва. Методи вивчення закономірностей ХТП. Системний аналіз в хімічній технології. Показники ефективності хімічного виробництва та його моделей.	2
2.	Експеримент як базовий метод дослідження в хімії та хімічній технології. Загальні відомості про експериментальні дослідження. Математична теорія експерименту. Поняття випадкових величин та їх характеристик. Залежні і незалежні випадкові величини. Поняття рандомізації експериментів. Відтворюваність експериментів. Статистична обробка результатів експериментів. Стандартні процедури перевірки результатів експериментів.	2
3.	Метод математичного планування експерименту в хімії і хімічній технології. Пасивний та активний експеримент. Математичний опис та планування багатофакторного експерименту. Дробовий факторний експеримент. Інтерпретація рівнянь регресії.	2
4.	Математичне моделювання як метод досліджень в хімії та хімічній технології. Класифікація моделей хімічних процесів. Детерміновані і статистичні моделі ХТП. Етапи математичного моделювання ХТП. Ієрархічні моделі та їх призначення.	2
5.	Способи аналізу результатів експериментів в хімії та хімічних технологіях. Дисперсійний аналіз, його суть і завдання. Однофакторний дисперсійний аналіз. Планування експерименту при дисперсійному аналізі.	2
6.	Використання кореляційного аналізу для оптимізації	2

	хімічних процесів та ХТП. Основні поняття та визначення кореляційного аналізу. Вибіркові коефіцієнти кореляції. Частинні коефіцієнти кореляції.	
7.	Використання регресійного аналізу для оптимізації хімічних процесів та ХТП. Вибір рівняння наближеної регресії. Статистичний аналіз рівняння регресії. Оцінка міцності нелінійного зв'язку. Метод множинної кореляції.	2
8.	Застосування непараметричних методів і критеріїв. Поняття про непараметричні методи обробки даних. Критерії відбраковування промахів. Критерії відмінності вибірок. Непараметричні аналоги дисперсійного аналізу. Перевірка взаємозв'язку результатів вимірювання двох величин.	2

ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ ТА ПОЛОЖЕННЯ ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ

Поняття хіміко-технологічного процесу (ХТП)

Хіміко-технологічний процес – це сукупність фізичних, хімічних та фізико-хімічних стадій переробки сировини в цільовий продукт.

В ХТП послідовно реалізуються стадії підготовки сировини, її хімічної (або частіше фізико-хімічної) переробки та виділення готової хімічної продукції. Від досконалості кожної з цих операцій залежать як технологічні, так і техніко-економічні показники виробництва. Не применшуючи значення стадій підготовки сировини та обробки готової продукції, відзначимо, що з позицій хімічної технології найбільше значення має процес власне хімічної переробки сировини в продукт виробництва.

Сумарна швидкість ХТП визначається швидкістю перерахованих елементарних стадій. Як правило, ці елементарні процеси протікають з різною швидкістю і послідовно. Тому загальна (сумарна) швидкість процесу лімітується швидкістю найбільш повільної стадії. Якщо найбільш повільно відбувається сама хімічна реакція, і вона лімітує сумарну швидкість, то процес протікає в кінетичній області. Для прискорення таких процесів технології змінюють ті чинники, які найбільше впливають на швидкість хімічної реакції, збільшуючи, наприклад, концентрацію вихідних компонентів, температуру, тиск, застосовуючи каталізатори. Якщо загальну швидкість процесу лімітує підведення реагуючих компонентів або відведення продуктів реакції, то процес протікає в дифузійній області. Для прискорення таких процесів прагнуть збільшити швидкість дифузії посиленням перемішування, диспергуванням фаз, підвищенням температури, концентрації і т.п.

Знання основних закономірностей хімічної технології дає можливість встановити оптимальні умови процесу, проводити його найбільш ефективно з максимальним виходом, забезпечити одержання продуктів високої якості. Технолог користується основними закономірностями при аналізі існуючого виробництва для його поліпшення і особливо при організації нового процесу.

Поняття хіміко-технологічної системи (ХТС)

Хіміко-технологічна система – це сукупність апаратів, зв'язаних між собою потоками і функціонуючих як єдине ціле. У кожному апараті (елементі по термінології теорії систем) відбувається перетворення потоку (змішування, поділ, подрібнення, нагрівання, перетворення енергії, стиск, розширення, хімічне перетворення, випаровування тощо). Потоки (або зв'язки за термінологією систем) забезпечують передачу речовини або енергії між апаратами (елементами системи) і можуть бути матеріальними, тепловими, енергетичними та інформаційними. Вивчення систем (у тому числі ХТС) проводиться методами теорії систем.

Типові задачі синтезу, аналізу і керування ХТС

Синтез ХТС представляє собою завдання вибору способу отримання заданого хімічного продукту з різних видів сировини, енергії, технологічного обладнання і з різних шляхів хімічних перетворень. Через великі розміри такого завдання необхідно проводити декомпозицію загальної проблеми. Завдання синтезу не можуть бути повністю формалізовані. Вони потребують творчої участі інженера. Досвід інженерів-проектувальників узагальнено і формалізовано у вигляді евристик – сукупності правил, алгоритмів і концепцій створення ХТС. Основні етапи синтезу ХТС:

1. Синтез структури і вибір головних елементів системи. Кінцева мета цього етапу – складання технологічної схеми.
2. Складання матеріальних і енергетичних балансів і попередній розрахунок ХТС. Мета цього етапу – специфікація підсистем, визначення їх параметрів і розмірів основних елементів.
3. Розрахунок і оптимізація ХТС. Визначають остаточні значення всіх потоків і головних розмірів елементів ХТС.
4. Модифікація ХТС для поліпшення ряду її властивостей, які не були враховані раніше.
5. Синтез системи автоматизованого управління.

Після стадії синтезу ХТС слідує етап її аналізу. Задачі **аналізу ХТС** полягають в одержанні відомостей про функціонування системи в залежності від прийнятої хімічної схеми, структури технологічних зв'язків між елементами і підсистемами, а так само від конструкційних і технологічних параметрів, виходячи з заданих властивостей і показників функціонування, що мають оптимальне значення. Для цього необхідні:

а) *технологічний аналіз ХТС* – одержання технологічних показників: температури, тиску, розмірів потоків, виходу селективності, кількості відходів тощо;

б) *техніко-економічний аналіз ХТС* – одержання економічних критеріїв оцінки ефективності системи – видаткових коефіцієнтів, витрат на виробництво продуктів і, у кінцевому рахунку, одержання відомостей про собівартість продукції;

в) *аналіз функціонування системи* (наприклад, визначення таких параметрів, як сталість, надійність, безпека роботи ХТС тощо).

Аналіз ХТС здійснюється при розробці і проектуванні системи для визначення її ефективності, а також для порівняння різних варіантів реалізації процесу з метою вибору з них оптимального. Аналіз використовується і при модернізації і реконструкції діючих ХТС. Показники роботи ХТС визначаються в результаті рішення систем рівнянь матеріальних і теплових балансів.

Завдання **управління ХТС** розглядають як на стадії проектування ХТС, так і в період її експлуатації. До завдань управління в період експлуатації ХТС відносять в першу чергу аналіз збурень системи. В залежності від частоти прояви цих збурень, розрізняють різні рівні управління. Наприклад, якщо час збору інформації про вплив збурення занадто великий, щоб своєчасно запобігти негативному ефекту такого збурення, то використовують оперативне управління ХТС.

Технологічні розрахунки

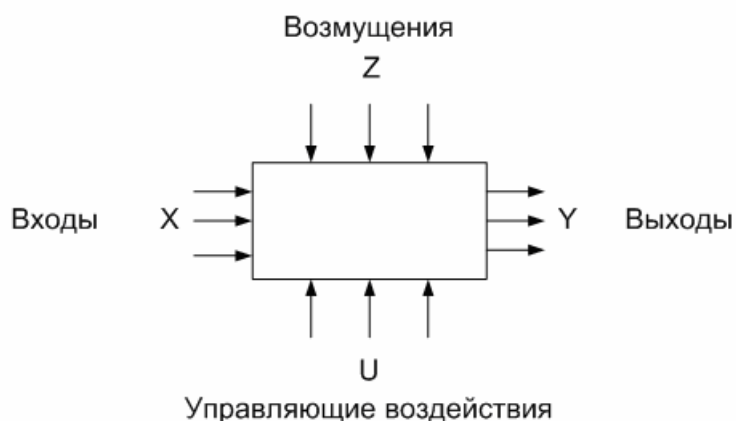
Склавши технологічну схему виробництва та визначивши основні напрямки потоків сировини, напівпродуктів або напівфабрикатів, а також готової продукції, приступають до складання **матеріального та енергетичного балансів**. Складання матеріального і енергетичного балансів роблять при проектуванні нових виробництв, а також для аналізу роботи існуючих. Матеріальний баланс відображає закон збереження маси речовини: у всякій замкнутій системі маса речовин, що вступили в реакцію, дорівнює масі речовин, що вийшли в результаті реакції. Матеріальний баланс – дзеркало технологічного процесу. Чим докладніше вивчений процес, тим більш повно можна скласти матеріальний баланс. Матеріальний баланс складають за рівнянням основний сумарної реакції з урахуванням паралельних і побічних реакцій. Оскільки на практиці доводиться мати справу не з чистими речовинами, а з сировиною складного хімічного і механічного складу, для складання матеріального балансу доводиться враховувати масу всіх компонентів. Для цього користуються даними аналізів.

Енергетичний баланс складають па основі закону збереження енергії: в замкнутій системі сума всіх видів енергії постійна. Зазвичай у хіміко-технологічних процесах складається тепловий баланс. Стосовно до теплового балансу закон збереження енергії може бути сформульовано таким чином: прихід теплоти в даному циклі виробництва повинен бути точно дорівнює витраті її в цьому ж циклі. При цьому повинна бути врахована вся теплота, що підводиться в апарат і виділяється (поглинається) в результаті хімічної реакції або фізичного перетворення; теплота, що вноситься кожним компонентом, як входять у процес або апарат, так і виходять з нього, а також теплообмін з навколишнім середовищем. Тепловий баланс, як і матеріальний баланс, виражають у вигляді формул, таблиць і діаграм.

Математичний опис елементів ХТС

Будь-який елемент ХТС може бути описаний математично функцією від ряду параметрів. Зазвичай виділяють наступні групи параметрів:

1) **Вхідні параметри X.** Вхідними називають параметри, значення яких можуть бути виміряні, але можливість впливу на них відсутня. Передбачається також, що значення цих параметрів не залежать від режиму процесу. Для хімічного реактора це може бути, наприклад, контрольований склад вихідної сировини, який не піддається регулюванню в процесі експлуатації. Сюди ж можна віднести і фіксовані геометричні характеристики апарату.



2) **Керуючі параметри U.** Під керуючими розуміють параметри, які можна змінювати і тим самим управляти процесом. Такими параметрами для хімічного реактора можуть бути, наприклад, регульоване кількість вихідної суміші, яка подається в реактор, регульоване тиск в реакторі, температура теплоносія тощо.

3) **Збурювальні параметри Z.** Це параметри, значення яких випадковим чином змінюються з плином часу і які не доступні для вимірювання. Це можуть бути, наприклад, різні домішки у вихідній сировині для хімічної реакції, поступова зміна активності каталізатора тощо.

4) **Вихідні параметри Y.** Під вихідними розуміють параметри, величини яких визначаються режимом процесу і які характеризують його стан, що виникає в результаті сумарної дії вхідних, керуючих і збурюючих параметрів. Іноді вихідні параметри називають також параметрами або змінними стану, підкреслюючи тим самим їх призначення описувати стан пропроцесу.

Процеси, в яких вплив випадкових збурюючих параметрів великий, зазвичай називають **стохастичними** на відміну від **детермінованих**, для яких передбачається, що параметри стану однозначно визначаються заданими вхідними і керуючими параметрами.

Для вивчення стохастичних процесів зазвичай використовують математичний апарат теорії ймовірностей, за допомогою якого параметри стану оцінюються в термінах математичного очікування.

Математичний опис кожного процесу задається системою кінцевих або диференціальних рівнянь, що відображають взаємний вплив різних параметрів, причому присутність в математичному описі рівнянь одного виду (наприклад, кінцевих) не виключає можливості присутності і рівнянь іншого виду (диференціальних).

Оптимізація хіміко-технологічних процесів: постановка задач оптимізації, критерії і методи оптимізації

Метою моделювання ХТП є його найкраща реалізація в результаті його оптимізації. Сучасний етап розвитку хімічної технології, як взагалі усіх технічних наук, характеризується принципово новою постановкою задачі оптимізації. Людина завжди намагалася організувати свою діяльність так, щоб її результати були найкращими. Але в колишні часи, ще два-три десятка років тому, задачі оптимізації окремих виробництв та окремих етапів виробництва вирішувались ізольовано одна від одної. При цьому у більшості випадків при вирішенні питання, який варіант і який режим є оптимальним, велику і часто вирішальну роль грали досвід та інтуїція дослідника, проектувальника та експлуатаційника.

Пояснювалося це складністю технологічних процесів, надзвичайною кількістю та різноманітністю взаємозв'язків всередині кожного процесу. Для ефективного рішення задач оптимізації необхідно оцінити вплив усіх цих взаємозв'язків і порівняти колосальне число можливих варіантів організації технології. Можливість такої оцінки та такого порівняння на основі традиційних методів була відсутня. Тому така велика роль відводилась інтуїції людини. Як наслідок, оптимізація ХТП здійснювалася неефективно. Дуже часто на стадії розробки вибирався далеко не кращий варіант, і після пуску виробництва починалися численні переробки: навпомацки шукали шляхи покращення процесу. Нерідко ці переробки розтягувалися на 10-15 років.

Розвиток кібернетики – науки про управління складними системами, широке поширення швидкодіючої обчислювальної техніки привели до формування оптимізації як цілісного наукового напрямку з єдиними методами, застосовними до самих різноманітних областей техніки. Розробка сучасного хіміко-технологічного процесу включає оптимізацію як абсолютно необхідний етап.

Формулювання задачі оптимізації

Для сучасного підходу до оптимізації характерна формалізація задачі. Задача формулюється стандартним чином, після чого подальше її рішення проводиться на основі чіткого однозначного рецепту – *алгоритму*.

Формалізація, по-перше, дозволяє одноманітно вирішувати задачі з самих різноманітних областей. По-друге, формалізовані задачі пристосовані для комп'ютерного вирішення. Застосування обчислювальної техніки забезпечує можливість перебору великого числа варіантів та вибору з них найкращого. Тому формалізація призводить до різкого підвищення ефективності процедури вирішення задачі.

При формалізації задачі оптимізації виникає важливе діалектичне протиріччя. Задача розпадається на три основних етапи: 1) формулювання задачі, приведення її до однієї зі стандартних форм; 2) знаходження оптимальних умов на основі алгоритму оптимізації; 3) реалізація оптимальних умов на практиці. Так ось, методи вирішення на першому та другому етапах взаємно протилежні: другий етап, як правило, цілком формалізовано на основі алгоритму вирішення, а

перший не формальний. Тут не допоможе ніяка математика. Перший етап вирішення задачі зв'язує конкретні особливості об'єкта з загальним методом вирішення.

Якщо задача оптимізації погано сформульована, то абсолютно правильне рішення дасть абсурдний для практики результат. Іноді саме добре формулювання задачі визначає успіх оптимізації в цілому.

Деякі проблеми, які виникають при формулюванні задачі оптимізації, проілюструємо прикладами.

Таким чином, на етапі формулювання задачі доводиться враховувати особливості процесу, його економічність, загальний розвиток промисловості, ринкову кон'юнктуру та безліч інших обставин. Як правило, **формулювання задачі оптимізації включає:**

- *вибір критерію оптимальності,*
- *установлення обмежень,*
- *вибір оптимізуючих факторів,*
- *запис цільової функції.*

Критерій оптимальності – це головна ознака, по якій судять про те, наскільки добре функціонує дана система, працює даний процес, наскільки добре вирішена задача оптимізації. Про роботу судять по її результатам. Тому критерій оптимальності являється одним із результатів, одним із виходів системи. Щоб обраний критерій оптимальності можна було ефективно використовувати на наступному етапі, він повинен задовольняти трьома основним вимогам.

По-перше, **критерій оптимальності повинен бути єдиним.** Це найважча вимога. Справа у тому, що, як правило, нас цікавить ряд виходів системи, і ми хочемо, щоб по усім ним система була найкращою.

Іноді кажуть так: оптимальним є таке ведення технологічного процесу, при якому продуктивність установки та якість продукту максимальні, а витрати і втрати мінімальні. При зовнішній привабливості, така постановка задачі утопічна і тому об'єктивно шкідлива. так вести процес неможливо.

На даний час вживається низка спроб розробки процедури оптимізації по кільком критеріям, але методики пригідної для широкого використання, поки немає. ми вміємо як слід оптимізувати лише за одним критерієм.

Тому так важливо добре вибирати критерій оптимальності.

Зазвичай найбільш обґрунтовані, найбільш добре працюють економічні критерії – такі як, прибуток, норма прибутку, приведений дохід, собівартість. Однак частіше за все характер залежності цих критеріїв від вхідних параметрів системи складний. Для спрощення задачі найчастіше користуються технологічними критеріями – наприклад, продуктивністю, чистотою продукту, виходом продукту і т.п. Кожен технологічний критерій в кінцевому рахунку пов'язаний з економікою: чим більша продуктивність, тим вищий буде прибуток; чим вище чистота, тим менші затрати будуть на наступних стадіях, і т.п.

При оптимізації виробництва в цілому або його крупних підрозділів природньо застосовувати економічні критерії. Технологічні критерії зручні при

оптимізації дрібніших об'єктів: окремого вузла, апарату, невеликого ланцюжка апаратів, тобто при локальній оптимізації. При їх застосуванні слід особливо ретельно враховувати особливості процесу: критерій, придатний в одних умовах, може зовсім не годитися в іншому.

Друга вимога: **критерій оптимальності повинен виражатися числом.** В іншому випадку зіставлення різних варіантів стає у край скрутним.

Приклад оптимізації за критерієм. Завод розробив зразки сувенірів. Для впровадження необхідно вибрати з них п'ять краших. Очевидно, критерієм вибору буде краса, привабливість сувенірів. Здавалося б, цей критерій важко висловити числом, та і без чисельної оцінки можна вибрати, що красивіше, а що гірше. Але такий вибір «без числа» можливий лише, якщо зразків мало. Якщо ж їх, наприклад, 100, то при виборі напевно доведеться застосувати числа: наприклад, оцінку у балах. Така оцінка вельми недосконала, але все ж таки неминуча.

Третя обов'язкова вимога: **величина критерію оптимальності повинна змінюватися монотонно при поліпшенні якості функціонування системи.** Це значить, що оцінювати об'єкт можна по принципу: «чим більший критерій, тим краще», або «чим менше критерій, тим краще», але ні в якому разі не по принципу: «ось це значення критерію оптимальне, а відклоняться від нього не слід». Наприклад, в лікарській суміші вміст того чи іншого інгредієнта не може бути критерієм оптимальності: інакше ми би отримали не суміш заданого складу, а максимальну концентрацію однієї речовини.

Якщо для якогось параметру, який характеризує систему, існує оптимальне значення, то цей параметр – не критерій оптимальності, а оптимізуючий фактор (див. нижче).

Як би добре не було обрано критерій оптимальності, цього у більшості задач недостатньо, щоб врахувати усі умови, в яких повинен проходити процес. З одного боку, як вже зазначалося, нас завжди цікавить не один результат процесу, а багато. З другого – ніколи не вдається реалізувати усі значення вхідних параметрів, які бажані. Умови, які необхідно дотримуватися незалежно від того, як їх дотримання вплине на величину критерію оптимальності, називають **обмеженнями.**

Частіше за все обмеження виникають по наступним причинам:

- *за кількістю і якістю сировини та продукції* (склад сировини, як правило, задається не нами, та змінювати його не можна; кількість сировини також може бути обмежена; випуск продукції не повинен бути менше планового та більше того, що можна реалізувати; якість продукту не повинна бути нижче вимог ДСТУ);
- *за умовами технології* (витрата повітря не може перевищувати продуктивність вентилятора; температура не може бути вище межі, при якій псується матеріал апарату або каталізатору; розмір апаратів ми змінювати не можемо тощо);
- *за економічними та кон'юнктурними міркуванням* (капітальні витрати не повинні перевищувати виділеної суми; строк вводу нового виробництва не повинен бути пізніше запланованого; неможна застосовувати методи і пристрої, захищені іноземними патентами);

- за міркуваннями охорони праці та навколишнього середовища (це надзвичайно важлива група обмежень, значення якої постійно зростає).

Окрім цієї класифікації, обмеження можна розрізнити за формально-математичними ознаками. Так, виділяють *обмеження типу рівності і типу нерівності*.

Оптимізуючі фактори – ті із входів системи, які у процесі оптимізації відносять до управляючих. Це ті дії, які ми приймаємо для оптимізації процесу. Інші чинники при цьому не регулюються, хоча їх значення, зрозуміло, враховують при визначенні оптимальних умов: ці фактори фігурують у задачі в якості обмежень типу рівності.

Число оптимізуючих факторів залежить від того, на якій стадії розробки виробництва здійснюється оптимізація. Якщо виробництво ще проектується (оптимальне проектування), то до числа оптимізуючих доцільно віднести як можна більше факторів. Дійсно, на цій стадії регулювати фактори легше за все: регулювання (змінення значень) здійснюється не в дійсності, а на математичній моделі. Тому тут бажано знайти оптимальне значення максимального числа факторів.

Але задача оптимізації виникає і після запуску виробництва (оптимальне управління). При цьому число оптимізуючих впливів стає істотно меншим. Частина факторів ми вже не можемо змінювати: такі, як наприклад, розмір апаратів. Але і не усі інші фактори доцільно тепер регулювати. Справа у тому, що чим більше управляючих факторів, тим складніша система управління, складніша її математична модель.

При великому числі факторів вона може стати настільки складною, що комп'ютер, на якому розраховують оптимальні режими, перестане встигати за зміною умов протікання процесу: рекомендації по оптимізації надійдуть, коли їх реалізація вже запізниться. Все це змушує використовувати для оптимального управління порівняно невелике число факторів.

Цільова функція – це теж саме, що і критерій оптимальності, але цей критерій розглядають як функцію входних факторів: $F = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Чим більше (або чим менше) значення F , тим краще. Тому можна дати таке визначення оптимуму: *оптимум* – це екстремум (або максимум, або мінімум) цільової функції. Ті значення факторів x_j , при яких досягається оптимум, називають оптимальними значеннями. Таким чином, математична задача оптимізації формулюється як задача відшукування екстремуму. При цьому в точці екстремуму повинні дотримуватися всі обмеження. Тому у багатьох випадках оптимум доводиться шукати на краю області допустимих значень, за границі якої неможна вийти внаслідок наявності обмежень.

Оптимізація процесів методом Бокса-Вільсона

Для визначення дійсного екстремуму функції відгуку розроблено велику кількість різних математико-статистичних прийомів. Одним з них, що дає непогані результати, є метод Бокса-Вільсона, званий також методом крутого сходження (або спуску, якщо екстремум функції – це мінімум). Цей метод

дозволяє проводити оптимізацію процесу, використовуючи факторне планування, регресійний аналіз і рух по градієнту. Він дозволяє істотно скоротити число експериментів при знаходженні екстремуму функції відгуку.

Топологічні моделі ХТС і топологічний метод їх аналізу

При вирішенні задач синтезу, аналізу і оптимізації ХТС з причин складності технологічної топології ХТС, їх багатовимірності (як за кількістю складових елементів, так і за кількістю виконуваних функцій) та високої ступені параметричного взаємовпливу елементів виникають принципові труднощі методологічного та обчислювального характеру. Ці труднощі в значній мірі можна подолати застосуванням **топологічних моделей (графів) ХТС**.

Для вирішення завдань математичного моделювання, аналізу та оптимізації ХТС застосовують: *потоківі графи, інформаційно-потоківі графи, сигнальні графи та структурні графи*.

Потокові графи відображають особливості технологічної топології системи і дозволяють встановлювати взаємозв'язок між змінами технологічної топології і кількісними характеристиками стану ХТС при певних вхідних впливах на систему. Їх поділяють на: *параметричні, матеріальні, теплові та ексергетичні*. Параметричні потоківі графи застосовують для розробки алгоритмів оптимальної стратегії розрахунку та аналізу складних багатоконтурних ХТС. Матеріальні, теплові та ексергетичні потоківі графи застосовують, відповідно, для автоматизованого складання систем матеріальних балансів ХТС, систем рівнянь теплового і ексергетичного балансів ХТС.

Інформаційно-потоківі графи відображають особливості інформаційної структури систем рівнянь математичних моделей ХТС. Їх застосовують для розробки алгоритмів оптимальної стратегії вирішення інформаційно-розріджених спільно замкнених систем рівнянь.

Сигнальні графи відображають причинно-наслідкові зв'язки між змінними і параметрами лінійних систем рівнянь математичних моделей ХТС, застосовують для розробки швидкодіючих алгоритмів і рішення багатовимірних систем лінійних рівнянь, для розрахунку показників стійкості, чутливості і надійності ХТС.

Структурні графи відображають особливості фізико-хімічних явищ і процесів, що протікають в елементах ХТС. Часто використовують гідравлічні і теплові структурні графи.

Теорія графів – це область дискретної математики, яка досліджує довільні дискретні структури або об'єкти, різновидом яких є граф.

Алгоритми керування ХТС

Поняття алгоритм (від лат. *algorithmus*) трактується як сукупність дій (правил) для вирішення поставленого завдання. Цьому терміну дав життя узбецький математик Мухамед-ібн-Сус(арабською – аль Хорезмі).

У сучасній хімічній технології очевидна тенденція до підвищення швидкостей ХТП за рахунок зростання температури, тиску і концентрації. Результатом цього є не тільки зростання виходу цільових продуктів, але і підвищення чутливості ХТС до збурень. Очевидно, що підвищуються вимоги також і до якості систем автоматизованого управління, стабілізації і захисту. Також очевидно і зворотнє: з підвищенням рівня автоматизації хіміко-технологічних установок можна істотно підвищити ефективність хімічних виробництв. Таким чином, існує тісний взаємозв'язок між автоматизацією і технологією.

Завдання управління визначаються динамічними і статичними властивостями об'єктів управління і збурення, що діє на об'єкт управління. Формулювання завдань управління відноситься до найскладніших питань при проектуванні АСУТП. В наш час АСУТП є, по суті, частиною сучасних ХТС. Тому завданнями першорядної важливості для сучасних хіміко-технологічних установок вважають: автоматичну оптимізацію, автоматичну стабілізацію і автоматичний захист виробництва від аварійних ситуацій (тобто захист від впливу тих збурень, які не піддаються компенсації штатною системою стабілізації).

При розробці алгоритмів керування ХТС властивості збурень, що діють на об'єкт, як правило, в повному обсязі невідомі. Якщо природа збурень відома і сформульовано завдання автоматизації, то вдається побудувати математичну модель об'єкта управління. На жаль, такі моделі настільки складні, що їх не вдається вирішити в реальному масштабі часу. Тому завдання управління доводиться спрощувати і поділяти на кілька відносно незалежних підзадач. При цьому такі завдання необхідно конкретизувати під кожну ХТС.

Рекомендована джерела інформації.

Основна література:

1. Бондарь А.Г., Статюха Г.А., Потяженко И.А. Планирование эксперимента при оптимизации процессов химической технологии. – Киев: Вища школа, 1980. – 264 с.
2. Акулич И.Л. Математическое программирование в примерах и задачах. – М.: Высш. шк., 1986. – 319 с.
3. Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа. – Л.: Химия, 1984. – 167 с.
4. Румшинский А.З. Математическая обработка результатов эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 192 с.
5. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии: 4-е изд. – М.: Химия, 1985. – 448 с.
6. Вершинин В.И., Перцев Н.В. Планирование и математическая обработка результатов химического эксперимента: учебное пособие. – Омск: Изд-во ОмГУ, 2005. – 217 с.

7. Рузинов Л.П., Слободчикова Р.И. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. – М.: Химия, 1980. – 280 с.
8. Ликеш И., Ляга И. Основные таблицы математической статистики. – М.: Финансы и статистика, 1985. – 356 с.
9. Холлендер М., Вульф Д. Непараметрические методы статистики. – М.: Финансы и статистика, 1983. – 518 с.
10. Богачов Г.Н. Математическое моделирование и планирование эксперимента. - Л.: Химия, 1971. – 187 с.
11. Ермаков С.М., Жиглявский А.А. Математическая теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1987. – 320 с.
12. Володарский Е.Т., Мамоговский В.Н., Туз Ю.М. Планирование и организация измерительного эксперимента. – Киев.: Вища шк., 1987. – 280 с.
13. Химко-технологические системы: Синтез, оптимизация, управление / Под ред. И.П. Мухленова – Л.: Химия, 1986. – 424 с.
14. Рузинов Л.П., Слободникова Р.И. Планирование эксперимента в химической технологии. – М.: Химия, 1980. – 280 с.
15. Царева З.М., Орлова Е.И. Теоретические основы химической технологии. Учебное пособие. – Киев: Выща шк., 1986. – 260 с.

Додаткова література:

1. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии. – М.: Химия, 1975. – 575 с.
2. Кафаров В.В., Дорохов И.Н., Кольцова Э.М. Системный анализ процессов химической технологии. Энтропийный и вариационный методы неравновесной термодинамики в задачах химической технологии. – М.: Наука, 1988. – 367 с.
3. Кафаров В.В. Принципы создания безотходных химических производств. – М.: Химия, 1985. – 288 с.
4. Ягодин Г.А., Раков Э.Г., Третьякова Л.Г. Химия и химическая технология в решении глобальных проблем. – М.: Химия, 1988. – 176 с.
5. Лейтес И.Л., Сосна М.Х., Семенов В.П. Теория и практика химической энерготехнологии. – М.: Химия, 1988. – 280 с.
6. Бесков В.С., Флокк В. Моделирование каталитических процессов и реакторов. – М.: Химия, 1991. – 253 с.
7. Кафаров В.В., Макаров В.В. Гибкие автоматизированные производственные системы в химической промышленности. – М.: Химия, 1990. – 320 с.
8. Методи розрахунків у технології неорганічних виробництв. Навчальний посібник у 2-х частинах / За ред. О.Я. Лобойко і Л.Л. Товаржнянського. – Харків: Вид-во НТУ “ХП”. – 2001. – 480 с.
9. Статюха Г.А. Автоматизированное проектирование химико-технологических систем. – К.: Выща школа, 1989. – 400 с.
10. Смирнов Н.И., Вожжинский А.И., Плесовских В.Л. Химические реакторы в примерах и задачах. – СПб.: Химия, 1994. – 276 с.