

ლექციების მოკლე კურსი საგანში:

“ტექნოლოგიური პროცესების მოდელირება”

შემდგენელი: მაღხაზ ბერეჟიანი, 2011 წ.

ლიტერატურა:

1. А.Ю. Закгейм – Введение в моделирование химико-технологических процессов.. 2-е изд. М.: “Химия”, 1982, 288 с.
2. В.В. кафаров – Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: изд. “Химия”, 1985, 448 с.
3. ი. თავართქილაძე – ქიმიური ტექნოლოგიური პროცესების მათემატიკური მოდელირება. დამხმარე სახელმძღვანელო, თბილისი, სპი, 1989, 136 გვ.
4. К.Кроу, А.Гамилец, Т.Хоффман, А.Джонсон, Д.Вудс, П.Шеннон – Математическое моделирование химических производств. Перевод с английского, М.: изд. “Мир”, 1973, 392 с.
5. А.Г. Касаткин – Основные процессы и аппараты химической технологии. изд. 9-ое, М.: “Химия”, 1973, 753 с.
6. მ. ბერეჟიანი, ი.თავართქილაძე – ქიმიური ტექნოლოგიის ძირითადი პროცესები და აპარატები. ლექციების კონსპექტი, საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი, 2008, 76 გვ. ინტერნეტში: www.gtu.ge/books/qtpa.pdf
7. Павлов К.Ф., Романков П.Г., Носков А.А. – Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии, Л.: Химия, 1987, 576 с.
8. А.С. Урмаев – Основы моделирования на АВМ. М.: “Наука”, 1978, 272 с.
9. Бережани М.Г., Таварткиладзе Я.Н., Эристави М.К.- Моделирование оптимального температурного режима для обратимых химических реакций. Известия АН Груз. ССР, сер. химическая, 1985, т.11, N 2, с.142-145.
10. Бережани М.Г., Таварткиладзе Я.Н.- Метод идентификации структуры потоков в аппаратах различной конструкции. Теоретические основы хим. технологии, 1986, т.20, N 2, с.272-273.
11. მ. ბერეჟიანი, ი. თავართქილაძე – ქიმიური და ფაზური გარდაქმნის პროცესების მაკროკინეტიკის მათემატიკური მოდელირება. საერთაშორისო სამეცნიერო კონფერენციის “ინფორმაციული ტექნოლოგიები მართვაში ИТС’07 “ მოხსენებათა კრებული, თბილისი, 10.10.2007-12.10.2007, ტ. 1, გვ. 143-148.
12. მ. ბერეჟიანი, მ. თავართქილაძე, ა. ბერეჟიანი – თბოცვლის პროცესების კომპიუტერული მოდელირება. საერთაშორისო სამეცნიერო კონფერენციის “ინფორმაციული ტექნოლოგიები 2008“ მოხსენებათა კრებული, თბილისი, 27-28.08.2008, გვ. 158-161.
13. Бережани М.Г, Дудаури Т.В , Каландадзе Н.К, Парцхаладзе Г.Ш, Таварткиладзе Я.Н , Угрехелидзе В.Д. Компьютерный расчет насадочной колонны для ректификации этилового спирта. Химический Журнал Грузии, No 5(1), 2005, с. 60-64.
14. ბერეჟიანი მ.გ., ბერეჟიანი ა.მ., დუდაური თ.ბ., რუხაძე თ.კ. - საწვავი ეთანოლის დისტილაციის კომპიუტერული მოდელირება, საერთაშორისო სამეცნიერო-ტექნიკური კონფერენციის “ახალი ტექნოლოგიები თანამედროვე მრეწველობაში” შრომები, თბილისი, საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი, 2010 წ. 29-30 აპრილი, გვ. 116-118.
15. Berezhiani M.G. – Mathematical Modelling of Phase Transition Processes. Articles for International Scientific-Technical Conference “New Technologies in Modern Industry”, Tbilisi, Georgian Technical University, April 29-30, 2010, pp. 146-149.
16. Berezhiani M. – Simulation of Melt Crystallization Kinetics. International Journal of Material Forming, 2011, No. 4, pp. 421-428; <http://dx.doi.org/10.1007/s12289-010-1016-5> ; <http://www.springerlink.com/content/u55655185h7u3683>

1. მოდელის და მოდელირების ცნება

სამეცნიერო-ტექნიკური კვლევების დროს ხშირად წარმოიქმნება სიტუაცია, როდესაც ჩვენ გვაინტერესებს რომელიღაც ობიექტი – ორიგინალი, მაგრამ უშუალოდ მისი შესწავლის ნაცვლად შევისწავლით სხვა ობიექტს – მოდელს. მოდელის შექმნის, მისი კვლევისა და შედეგების ორიგინალზე განვრცობის პროცესს ეწოდება მოდელირება. მოდელის დამახასიათებელი ნიშნებია:

1. მოდელი არის მატერიალურად ან აზრობრივად ან მათემატიკურად განხორციელებული სისტემა. 2. იგი ასახავს და წარმოაჩენს კვლევის ობიექტს. 3. მას შეუძლია შეცვალოს ობიექტი. 4. მისი შესწავლა გვაძლევს საჭირო ინფორმაციას ობიექტის შესახებ.

მოდელი უნდა იყოს ტრადუქტიული (ლათ. traductio-გადატანა) და ეკონომიური.

მატერიალური (ფიზიკური) მოდელი ორიგინალის მსგავსია ფიზიკური ბუნებით და გეომეტრიული ფორმით და განსხვავდება მასშტაბური პარამეტრებით. ასეთებია თბომცვლელების, სადისტილაციო სვეტების, კრისტალიზატორების, რეაქტორების და სხვა აპარატების მოქმედი ექსპერიმენტალური დანადგარები და მაკეტები. მოდელის მსგავსება ობიექტთან არ უნდა იყოს აბსოლუტური, ანუ მსგავსება არ უნდა გადაიქცეს იგივეობად.

აზრობრივი მოდელები არამატერიალურია, არამედ ორიგინალების აზრობრივი სქემებია, რომლებიც მათ არსებით მხარეებს ასახავენ, მაგ.: ბორის ატომის მოდელი, ბუტლეროვის ქიმიური აგებულების მოდელები.

აზრობრივი მოდელი შეიძლება წარმოადგენდეს ფიზიკური წარმოდგენების ერთობლიობას, სხვა შესაძლებლობაა – გამოისახოს იგი მათემატიკის ენით. ორიგინალის მათემატიკური ასახვა წარმოადგენს მის სქემას, ჩაწერილს მათემატიკური განტოლებების (მათ შორის დიფერენციალური), უტოლობების, მატრიცებისა და სხვა მათემატიკური სტრუქტურების საშუალებით. ამასთან დაკავშირებით, ობიექტის მათემატიკურ აღწერას ხშირად ეწოდებენ მათემატიკურ მოდელს. მათემატიკური მოდელირების შესატყვისად ინგლისურ ენაში გამოიყენება როგორც ტერმინი Mathematical Modelling ასევე Simulation. მათემატიკური მოდელირების არსი ემყარება ანალოგიის პრინციპს ან იზომორფულობის თვისებას – ერთტიპური მათემატიკური სისტემებით შეიძლება აღიწეროს ფიზიკური არსით განსხვავებული მოვლენები. მაგალითის სახით ქვემოთ მოყვანილია მათემატიკური გამოსახულებანი ზოგადად ელემენტარულ F ფართში გადატანის მოვლენებისათვის: ძაღის T იმპულსის, სითბოს Q , მასისა m და ელექტრული მუხტის q , შესაბამისად სიჩქარის, ტემპერატურის, კონცენტრაციისა და ძაბვის გრადიენტებზე დამოკიდებულებით:

ნიუტონის შინაგანი ხახუნის (სიბლანტის) კანონი:

$$T = \frac{d(Mw)}{d\tau} = -F \cdot \mu \frac{dw}{dx} \tag{1.1}$$

სითბოს გამტარობის ფურიეს კანონი:

$$\frac{dQ}{d\tau} = \frac{d(M \cdot c \cdot t)}{d\tau} = -F \cdot \lambda \frac{dt}{dx} \tag{1.2}$$

მასის გადატანის (დიფუზიის) ფიკის კანონი:

$$\frac{dm}{d\tau} = \frac{d(V \cdot c)}{d\tau} = -F \cdot D \frac{dc}{dx} \tag{1.3}$$

ელექტრული მუხტის გადატანის ომის კანონი:

$$I = \frac{dq}{d\tau} = \frac{d(U \cdot C)}{d\tau} = -F \cdot \chi \frac{dU}{dx} \tag{1.4}$$

მოცემულ განტოლებათა იზომორფულობის პრინციპი საშუალებას იძლევა ელექტრობის გადატანის შესწავლის შედეგად მიღებული შედეგები გამოყენებული იქნას გადატანის სხვა მოვლენათა ანალიზისა და გამოთვლებისათვის. გამოიყენება პირდაპირი ანალოგიის ელექტრული მოდელები (მაგ.: ჭურჭლის ავსება-დაცლის პროცესის მოდელირება შესაძლებელია კონდენსატორის დამუხტვა-განმუხტვის პროცესის საშუალებით, მექანიკური რხევის ნაცვლად ელექტრული რხევითი კონტურის გამოყენება), ასევე არაპირდაპირი ანალოგიის მათემატიკური მანქანები, როგორცაა ელექტრული

ანალოგიური გამომთვლელი მანქანები. ამჟამად ფართოდ გამოიყენება ციფრული კომპიუტერული მოდელირების მეთოდები.

ტექნოლოგიური პროცესის, როგორც სისტემის მათემატიკური აღწერის (მოდელის) შექმნა შესაძლებელია ორი სხვადასხვა მიდგომის გამოყენებით:

პირველს შეიძლება ეწოდოს სტრუქტურული. ამ დროს პირველ რიგში შეისწავლება მისი სტრუქტურა – სისტემის შემადგენელი ელემენტები და მათი ურთიერთქმედება. ტექნოლოგიური პროცესისთვის ეს ნიშნავს მისი მექანიზმის გაშიფვრას. შედეგად მიიღება პროცესის სქემა – მისი აზრობრივი მოდელი (წარმოდგენები ქიმიზმის, ჰიდრაულიკისა და სითბო- და მასაგადაცემის მოვლენებისა და მათი ურთიერთგავლენის შესახებ). ასეთი სქემის მათემატიკის ენაზე ჩაწერის შედეგად ვღებულობთ პროცესის აღმწერ განტოლებათა სისტემას ზოგადი სახით. მათში შედიან რიგი კოეფიციენტებისა (რეაქციის სინქარის მუდმივები, სითბო- და მასაგადაცემის კოეფიციენტები და სხვა). მათ უწოდებენ მოდელის პარამეტრებს. პარამეტრების განსაზღვრა ხდება ექსპერიმენტების გზით მოდელზე ან ზოგჯერ ორიგინალზეც. სტრუქტურული მიდგომის დროს უმნიშვნელოვანეს კანონებს წარმოადგენენ მასისა და ენერჯიის შენახვის კანონები, რომელთა საფუძველზე დგებიან მასებისა და სითბური ბალანსების განტოლებები.

სტრუქტურული მიდგომით მიღებული მოდელების მთავარი ღირსებაა მათი პროზნოსტიკური სიმძლავრე – რაიმე პროცესის მექანიზმის შესახებ საკმარისი ცოდნის შემთხვევაში მაღალი საიმედოობით შესაძლებელია ვიწინასწარმეტყველოთ მისი ქცევა სხვადასხვა პირობებში. მიდგომის სუსტი მხარეა კარგი თეორიის შექმნის სიძნელე რთული პროცესებისთვის, როდესაც საჭიროა პროცესის სხვადასხვა მოვლენებისა და მათი ურთიერთგავლენის გათვალისწინება.

მეორე მიდგომა წარმოადგენს ემპირიულს. სხვა გავრცელებული სახელწოდებაა “შავი ყუთის” მეთოდი. თუ დაგუშვებთ, რომ ჩვენთვის საინტერესო სისტემა დაფარულია ჩვენგან, მისი ანალიზისთვის და მართვისთვის უნდა გამოვიყენოთ სისტემასთან არსებული შემაჯალი და გამომავალი კავშირები. ექსპერიმენტულად შეისწავლება, თუ როგორ გამოძახილს იძლევიან გამოშავალი პარამეტრები შემაჯალთა ცვლილებისას და ექსპერიმენტების შედეგები შეგვიძლია აღწეროთ ემპირიული განტოლებებით (სისტემებით). სწორედ ეს განტოლებები წარმოადგენენ მათემატიკურ მოდელს. ემპირიული განტოლებების შედგენისას სარგებლობენ იმით, რომ ფუნქციათა უმრავლესობა შეიძლება გაშლილი იქნას ტეილორის (ხარისხოვან) მწკრივში. თუ შემოვიფარგლებით რამდენიმე პირველი წევრით, ვღებულობთ პოლინომს.

ემპირიული მიდგომის მთავარი ღირსებაა მისი სიმარტივე, განსაკუთრებით ძლიერ რთული სისტემების შესწავლის დროს. მთავარი სისუსტე კი ექსტრაპოლაციის დაბალი საიმედოობაა პროცესის პარამეტრების შესწავლილი ზღვრების გარეთ (ინტერპოლაციის საკმარისი სიზუსტისათვის ცდისეულ ინტერვალებში). მოდელირების ერთ-ერთ მნიშვნელოვან ამოცანას წარმოადგენს სწორედ მასშტაბური გადასვლა. ემპირიული დამოკიდებულებების გამოყენებით ეს ამოცანა როგორც წესი, ცუდად იჭრება.

აუცილებელია ხაზი გაესვას, რომ ამ ორ საპირისპირო მიდგომაში რეალურად ვხვდებით როგორც ერთი, ასევე მეორე მეთოდის ელემენტებს. აბსოლუტურად სტრუქტურული ან აბსოლუტურად ემპირიული აღწერა პრაქტიკულად შეუძლებელია. საუკეთესო თეორიული აღწერაც კი მოითხოვს ზოგიერთი პარამეტრის ცდისეულ განსაზღვრას-იდენტიფიკაციას და ასევე მოდელის ადექვატურობის (ორიგინალისადმი შესაბამისობასა და საკმარისი სიზუსტეს) ექსპერიმენტულ შემოწმებას. ასევე, როგორც “შავიც” არ უნდა იყოს ყუთი, ჩვენ აუცილებლად გვაქვს რაიმე წარმოდგენა ან მოსაზრება მისი სტრუქტურის შესახებ, წინააღმდეგ შემთხვევაში ჩვენ ვერც კი შევძლებთ “შესასვლელების” და მოსალოდნელი “გამოძახილების” შერჩევას. ზოგჯერ სასარგებლოა პროცესის შესწავლის დაყოფა ეტაპებად: პირველ ეტაპზე შესწავლილ იქნას ემპირიულად, მეორეზე კი გამოკვლეული იქნას მისი მექანიზმი ადრე მიღებული შედეგების გასაუმჯობესებლად.

უნდა გამოვყოთ მათემატიკური მოდელირების პირდაპირი და შებრუნებული ამოცანები, ასევე პროექტირებისა და შემოწმებითი გამოთვლები.

2. მსგავსების თეორიის საფუძვლები.

პროცესების შესწავლა საანგარიშო დამოკიდებულებათა მისაღებად შესაძლებელია წმინდა თეორიული გზით. ეს ყველაზე სასურველი გზა იქნებოდა.

რეალურად დიფერენციალური განტოლებები აღწერენ ერთგვაროვანი მოვლენების მთელ კლასს და კონკრეტული მოვლენის გამოსაყოფად განტოლებები უნდა შეიზღუდოს დამატებითი პირობებით (ცალსახობის პირობებით), რომლებშიც იგულისხმობიან: სისტემის გეომეტრიული ფორმა და ზომები, პროცესისთვის არსებითი ნივთიერებათა ფიზიკური კონსტანტები, საწყისი პირობები (სიჩქარე, ტემპერატურა, კონცენტრაცია), სასახლვრო პირობები (მაგ. კედელთან სიჩქარის 0-ის ტოლობა). მაგრამ ქიმიური ტექნოლოგიის მრავალი პროცესი ხასიათდებიან მრავალი ცვლადით და იმდენად რთულია, რომ ხშირად ხერხდება მხოლოდ მათემატიკური ამოცანის ჩამოყალიბება და ცალსახობის პირობების დადგენა, მაგ. ჰიდროდინამიკაში - ნავიე-სტოქსის განტოლება, რომლის ამონახსნის არსებობის დამტკიცებაც კი შეყვანილია ე.წ. "ათასწლეულის პრემიების" კლეის მათემატიკის ინსტიტუტის (აშშ) ფონდის მიერ გამოცხადებულ 7 მათემატიკურ პრობლემათა ჩამონათვალში (1 მლნ აშშ დოლარის პრემიით თითოეულზე):

$$\rho \cdot dw_x/dt = -\partial p/\partial x + \mu[\nabla^2 w_x + (\partial\theta/\partial x)/3] \quad (2.0.1)$$

$$\rho \cdot dw_y/dt = -\partial p/\partial y + \mu[\nabla^2 w_y + (\partial\theta/\partial y)/3]$$

$$\rho \cdot dw_z/dt = -\rho g - \partial p/\partial z + \mu[\nabla^2 w_z + (\partial\theta/\partial z)/3]$$

სადაც $\theta = \partial w_x/\partial x + \partial w_y/\partial y + \partial w_z/\partial z = \text{div}(\mathbf{w})$

კვლევის ექსპერიმენტალური ხერხის დროს ცდის შედეგად ხშირად მიიღება ემპირიული განტოლებები, რომლებიც უნდა გაურცელდნენ სხვა პირობებისთვისაც და გამოყენებულნი იქნან საინჟინრო პრაქტიკაში. ნაყოფიერია ისეთი ცდების ჩატარება, რომლებიც იძლევა ცდების შედეგების განზოგადოებისა და შესწავლილის მსგავს პროცესებზე გაურცელების საშუალებას. მსგავსების თეორია წარმოადგენს მოძღვრებას ცდების სამეცნიერო განზოგადოების შესახებ. ამ დროს ცდები ტარდება მოდელზე, განსხვავებული (არასაშიში) ნივთიერებების გამოყენებით, არა ექსტრემალურ რეჟიმებში. ბეკელანდის თქმით, შეგვიძლია შეცდომები დავეშვათ მცირე მასშტაბში, ხოლო მოგება მივიღოთ დიდში.

მსგავსების თეორიის მეთოდები წარმოადგენენ პროცესების მასშტაბირებისა და მოდელირების საფუძველს.

2.1. მსგავსების პირობები და თეორემები.

1) გეომეტრიული მსგავსება. უგანზომილებო მასშტაბურ მამრავლებს, რომლებიც გამოხატავენ მსგავსი გეომეტრიული სისტემების შესაბამის სიდიდეების ფარდობას, ეწოდებათ მსგავსების მუდმივები:

$$a'/a'' = b'/b'' = k_l = \text{const} \quad (2.1.1)$$

მსგავსებათა ინვარიანტები კი გამოხატავენ ერთი და იგივე სისტემის რაიმე ორი სიდიდის ფარდობას:

$$a'/b' = a''/b'' = i_l = \text{const} = \text{inv} = \text{idem} \quad (2.1.2)$$

2) დროითი მსგავსება ხასიათდება იმით, რომ გეომეტრიულად მსგავს სისტემაში შესაბამისი ნაწილაკები მსგავს ტრაექტორიებს გაივლიან მსგავს დროში.

$$T'/T'' = \tau'/\tau'' = k_\tau = \text{const} \quad (2.1.3)$$

ამ დროს დაცული იქნება:

3) სიჩქარეთა მსგავსებაც:

$$w_0'/w_0'' = w_1'/w_1'' = k_w = \text{const} \quad (2.1.4)$$

4) ფიზიკურ სიდიდეთა მსგავსება. ნატურისა და მოდელის ორი ნებისმიერი შესაბამისი წერტილისთვის:

$$\rho_0'/\rho_0'' = \rho_1'/\rho_1'' = k_\rho = \text{const} \quad (2.1.5)$$

$$\dots \dots \dots \mu_0'/\mu_0'' = \mu_1'/\mu_1'' = k_\mu = \text{const} \quad (2.1.6)$$

4) საწყისი და სასახლვრო პირობების მსგავსება გულისხმობს, რომ ძირითადი პარამეტრების მნიშვნელობათა ფარდობები ნატურისა და მოდელისთვის დასაწყისში და სახლვრებზე მუდმივი სიდიდეა.

მსგავსება შეიძლება დაეახასიათოთ აგრეთვე მსგავსების ინვარიანტებით. ორი ერთგვაროვანი ფიზიკური სიდიდის ფარდობით გამოსახული მსგავსების ინვარიანტები წარმოადგენენ პარამეტრულ კრიტერიუმებს, ანუ სიმპლექსებს. მაგრამ მსგავსების ინვარიანტები შეიძლება წარმოადგენდნენ სხვადასხვაგვარ ფიზიკურ სიდიდეთა ფარდობას ანუ უგანზომილებო კომპლექსს, მაგალითად რეინოლდსის კრიტერიუმი:

$$Re = w \cdot d \cdot r / \mu = idem \quad (2.1.7)$$

თუ მსგავსების ინვარიანტები მიღებულია პროცესის აღმწერი დიფ. განტოლების გარდაქმნით, მათ უწოდებენ მსგავსების კრიტერიუმებს. მათ ყოველთვის გააჩნიათ ფიზიკური აზრი და წარმოადგენენ რაიმე ეფექტების თანაფარდობათა ზომას. მსგავსების კრიტერიუმებს უწოდებენ აგრეთვე განზოგადოებულ ცვლადებს.

მსგავსების თეორემები.

- 1) ნიუტონის თეორემა: მსგავსი მოვლენები ხასიათდებიან რიცხობრივად ტოლი მსგავსების კრიტერიუმებით.
- 2) (ბეკინგემი, ფედერმანი, აფანასიევ-ერენფესტი): ნებისმიერი დიფერენციალური განტოლებების ამოხსნა, რომლებიც აკავშირებენ პროცესზე მოქმედ ცვლადებს, შეიძლება წარმოდგენილი იქნას მსგავსების კრიტერიუმებს შორის დამოკიდებულებით, რომლებსაც უწოდებენ განზოგადოებულ კრიტერიულ განტოლებებს. მსგავსების კრიტერიუმებს, რომლებიც შედგებიან მხოლოდ ცალსახობის პირობის სიდიდეებით, უწოდებენ განმსახლვრელს, ხოლო თუ ისინი მოიცავენ პროცესის ცალსახობისათვის არააუცილებელ სიდიდეებსაც, წარმოადგენენ განსახლვრელს.
- 3) (კირპიჩევი, გუხმანი): მსგავსები არიან მოვლენები, რომლებიც აღიწერებიან ერთი და იგივე დიფერენციალურ განტოლებათა სისტემით და დაცულია ცალსახობის პირობათა მსგავსება, ანუ მოვლენები მსგავსია, თუ მათი განმსახლვრელი კრიტერიუმები ტოლია.

განზომილებათა ანალიზის მეთოდის ძირითადი პრინციპები. მრავალი პროცესი იმდენად რთულია, რომ არ ხერხდება სრული მათემატიკური აღწერა, მხოლოდ ზოგადად შეიძლება წარმოვიდგინოთ დამოკიდებულება პროცესის სიდიდეებს შორის. თუ სიდიდე α დამოკიდებულია პარამეტრებზე $\alpha = f(\beta, \gamma, \delta, \theta)$, ამ დამოკიდებულების კონკრეტული სახის მოსაძებნად შეიძლება განზომილებათა ანალიზის მეთოდის გამოყენება. ამის საფუძველს წარმოადგენს ბეკინგემის π - თეორემა: - n რაოდენობის ცვლადთა დამაკავშირებელი ზოგადი ფუნქციონალური დამოკიდებულება შეიძლება წარმოვიდგინოთ $n-m$ უგანზომილებო კომპლექსის საშუალებით, სადაც m - განზომილების ძირითად ერთეულთა რაოდენობაა.

2.2. ჰიდროდინამიკური მსგავსება.

მსგავსების თეორიის დახმარებით შეგვიძლია გარდავიქმნათ ნავიე-სტოქსის განტოლება და მივიღოთ ზოგადი ფუნქციონალური დამოკიდებულება ბლანტი სითხის მოძრაობის დამახასიათებელი კრიტერიუმებისათვის:

$$\rho \cdot \partial w_z / \partial \tau + \rho \cdot (w_x \cdot \partial w_z / \partial x + w_y \cdot \partial w_z / \partial y + w_z \cdot \partial w_z / \partial z) = -\rho g - \partial p / \partial z + \mu \cdot (\partial^2 w_z / \partial x^2 + \partial^2 w_z / \partial y^2 + \partial^2 w_z / \partial z^2) \quad (2.2.1)$$

ამ განტოლების მსგავსი გარდაქმნისთვის გამოვიყენოთ წესი: მსგავსების კრიტერიუმების მიღება შეიძლება დიფერენციალური განტოლების ერთი ნაწილის გაყოფით მეორეზე და მათემატიკური ოპერატორების ნიშნების მოშორებით.

განტოლების მარცხენა ნაწილის პირველი შესაკრები გარდაიქმნება:

$$\rho \cdot \partial w / \partial \tau \sim \rho w / \tau \quad (2.2.2)$$

განტოლების მარცხენა ნაწილის მეორე შესაკრები გარდაიქმნება:

$$\rho \cdot w \cdot \partial w / \partial l \sim \rho \cdot w \cdot w / l = \rho w^2 / l \quad (2.2.3)$$

განტოლების მარჯვენა ნაწილის მეორე შესაკრებიდან მივიღებთ:

$$\partial p / \partial z \sim \rho l \quad (2.2.4)$$

განტოლების მარჯვენა ნაწილის მესამე შესაკრებიდან მივიღებთ:

$$\mu \cdot \partial^2 w / \partial l^2 \sim \mu w / l^2 \quad (2.2.5)$$

განტოლების თითოეული წევრი გავეყოთ $\rho w^2 / l$ -ზე:

$\rho g / (\rho w^2 / l) = gl / w^2$, მის შებრუნებულ სიდიდეს (რათა რიცხვი არ იყოს ერთზე ნაკლები):

$$w^2 / gl = Fr \quad (2.2.6)$$

ეწოდება ფრუდის კრიტერიუმი. იგი ასახავს სიმძიმის ძალის გავლენას სითხის მოძრაობაზე (ინერციის ძალასთან შეფარდებით).

$$(\rho / l) / (\rho w^2 / l) = \rho / \rho w^2 \sim \Delta p / \rho w^2 = Eu \quad (2.2.7)$$

ეილერის კრიტერიუმი ასახავს ჰიდროსტატიკური წნევის ვარდნის გავლენას სითხის მოძრაობაზე.

$(\mu w / l^2) / (\rho w^2 / l) = \mu / (\rho w l)$, მისი შებრუნებული სიდიდეა:

$$w l \rho / \mu = Re \quad (2.2.8)$$

რეინოლდსის კრიტერიუმი, ასახავს ხახუნის ძალის გავლენას სითხის მოძრაობაზე.

$(\rho w / \tau) / (\rho w^2 / l) = l / (w \tau)$, მისი შებრუნებული სიდიდეა:

$$w \tau / l = Ho \quad (2.2.9)$$

ჰომოქრონობის კრიტერიუმი დაუმყარებელი მოძრაობისათვის.

მსგავსების II თეორემის თანახმად ნავიე-სტოქსის განტოლება შეიძლება გამოისახოს დამოკიდებულებით მსგავსების კრიტერიუმებს შორის (მათ შორის გეომეტრიული მსგავსების სიმპლექსით, მაგალითად l/d_0):

$$\phi(Ho, Fr, Eu, Re, l/d_0) = 0 \quad (2.2.10)$$

ჩვეულებრივ, განსასაზღვრელ კრიტერიუმს წარმოადგენს Eu :

$$Eu = f(Ho, Fr, Re, l/d_0) \quad (2.2.11)$$

ჰიდროდინამიკის განზოგადებული, ანუ კრიტერიალური განტოლება.

ხშირად მის აპროქსიმაციას ახდენენ ხარისხოვანი ფორმულებით:

$$Eu = A \cdot Re^m \cdot Fr^n \cdot Ho^p \cdot (l/d_0)^q \quad (2.2.12)$$

დამყარებული რეჟიმისათვის Ho გამოირიცხება.

ჩვეულებრივ, მიახლოებითი მოდელირებისათვის შესაძლებელია არაგანმსაზღვრელი კრიტერიუმის უგულებელყოფა. მაგალითად, სითხეების გადაადგილებისას ტუმბოებით სიმძიმის ძალის გავლენა სიჩქარეთა განაწილებაზე და წნევის ვარდნაზე უმნიშვნელოა:

$$Eu = f(Re, l/d_0) \quad (2.2.13)$$

თუ რომელიმე პარამეტრი პრაქტიკულად გავლენას არ ახდენს პროცესის მსვლელობაზე, პროცესს უწოდებენ ავტომოდელურს ამ პარამეტრის მიმართ. ავტომოდელური პარამეტრის ცდის შედეგად დადგენილი ხარისხის მაჩვენებელი აღმოჩნდება ნულის ტოლი ან მასთან ახლო სიდიდე.

ხშირად რაიმე სიდიდის გამოსარიცხად მიიღება წარმოებული კრიტერიუმები: მაგ. კონვექციური ნაკადების სიჩქარის განსაზღვრის სირთულის გამო მას გამოირიცხავენ:

$$Re^2 / Fr = (w l \rho / \mu)^2 / (w^2 / gl) = l^3 \rho^2 g / \mu^2 = Ga \quad (2.2.14)$$

Ga გალილეის კრიტერიუმი. მისი ნამრავლი სიმკვრივის ფარდობით განსხვავებაზე სითხის სხვადასხვა წერტილებში (რაც წარმოადგენს კონვექციური ნაკადების მიზეზს) გვაძლევს:

$$Ga \cdot (\rho_0 - \rho) / \rho = Ar \quad (2.2.14)$$

Ar არქიმედის კრიტერიუმი.

2.3. სითბური მსგავსება.

კონვექციური თბოცვლას აღწერს ფურიე-კირხჰოფის განტოლება:

$$dt/dt = \partial t / \partial t + w_x \cdot \partial t / \partial x + w_y \cdot \partial t / \partial y + w_z \cdot \partial t / \partial z = \nabla^2 t \cdot \lambda / (c \cdot \rho) = a \cdot \nabla^2 t \quad (2.3.1)$$

სადაც dt/dt გამოსახავს ტემპერატურის სუბსტანციურ წარმოებულს.

ფურიე-კირხჰოფის განტოლების თანახმად ტემპერატურული ველი მოძრავ სითხეში არის მრავალი ცვლადის ფუნქცია. პრაქტიკული გამოყენებისათვის განტოლებას გარდაქმნიან მსგავსების კრიტერიუმების ფუნქციის სახით.

სასაზღვრო პირობების მსგავსება განვიხილოთ ფურიეს და ნიუტონის კანონების თანახმად სასაზღვრო ფენაში:

$$-λ \cdot \partial t / \partial l = \alpha \cdot (t_{\text{კელ.}} - t_{\text{სითხ.}}) \quad (2.3.2)$$

მარჯვენა მხარის მარცხენაზე გაყოფით და მათემატიკური ოპერატორების უგულებელყოფით ვღებულობთ უგანზომილებო სიდიდეს:

$$\alpha / \lambda = Nu \quad (2.3.3)$$

ეწოდება ნუსელტის კრიტერიუმი, ახასიათებს სითხოს გადატანას კედელსა და სითხის ნაკადს შორის. იგი წარმოადგენს სასაზღვრო ფენის სისქისა და განმსაზღვრელი გეომეტრიული ზომის თანაფარდობის საზომს.

ფურიე კირხჰოფის განტოლების მსგავსი გარდაქმნისათვის მისი წევრები წარმოვადგინოთ:

$$(w_x \cdot \partial t / \partial x + w_y \cdot \partial t / \partial y + w_z \cdot \partial t / \partial z) \sim t \cdot w / l \quad (2.3.4)$$

ასახავს ნაკადის სიჩქარის გავლენას თბოცვლაზე.

$$a \cdot \nabla^2 t \sim a \cdot t / l^2 \quad (2.3.5)$$

ასახავს სითხოს გადატანას თბოგამტარობით.

$$dt / d\tau \sim t / \tau \quad (2.3.6)$$

ასახავს თბოცვლის დაუმყარებელ რეჟიმს. მისი $a \cdot t / l^2$ -ზე ფარდობის შებრუნებული სიდიდეა:

$$a \tau / l^2 = Fo \quad (2.3.7)$$

ფურიეს კრიტერიუმი. იგი დროითი მსგავსების კრიტერიუმია, კომოქრონობის Ho კრიტერიუმის ანალოგი.

კონვექციური წევრის (2.3.4) ფარდობით (2.3.5)-ზე მიიღება:

$$w l / a = Pe \quad (2.3.8)$$

პეკლეს კრიტერიუმი, რომელიც წარმოადგენს კონვექციითა და თბოგამტარობით გადატანილ სითხოთა ფარდობის ზომას.

სითბოგადაცემის პროცესების მსგავსების აუცილებელ პირობებს წარმოადგენენ აგრეთვე ჰიდროდინამიკური და გეომეტრიული მსგავსება, კრიტერიუმების Ho , Re , Fr და გეომეტრიული სიმკვლეკსების L_1/L_0 , L_2/L_0 ... L_n/L_0 მსგავსება (L_0 რაიმე განმსაზღვრელი გეომეტრიული ზომაა).

კრიტერიუმი Pe შეიძლება წარმოდგენილი იქნას ორი უგანზომილებო კომპლექსის ნამრავლის სახით:

$$Pe = (w l / \nu) \cdot (\nu / a) = Re \cdot Pr \quad (2.3.9)$$

$$Pr = \nu / a = \mu c_p / \lambda \quad (2.3.10)$$

პრანდტლის კრიტერიუმი Pr მთლიანად შედგება სითხის ფიზიკური თვისებების დამახასიათებელი სიდიდეებისგან და ახასიათებს თბომატარებლების ფიზიკური თვისებების მსგავსებას. იგი წარმოადგენს ტემპერატურული და სიჩქარეთა ველების მსგავსების ზომას.

კონვექციური თბოცვლის განზოგადოებული განტოლება განსასაზღვრელი კრიტერიუმის Nu მიმართ ჩაიწერება:

$$Nu = f(Fo, Pr, Ho, Re, Fr, L_1/L_0, L_2/L_0 \dots L_n/L_0) \quad (2.3.11)$$

დამყარებული პროცესებისათვის გამოირიცხებიან დროითი მსგავსების კრიტერიუმები Ho , Fo . იძულებითი მოძრაობისას, როდესაც სიმძიმის ძალის გავლენა სითხის ნაკადის ჰიდროდინამიკაზე უმნიშვნელოა, Fr შეგვიძლია უგულებელვყოთ:

$$Nu = f(Re, Pr, L_1/L_0, L_2/L_0 \dots L_n/L_0) \quad (2.3.12)$$

ხშირად კრიტერიალურ განტოლებას გამოსახავენ ხარისხოვანი ფუნქციით. მაგ. d დიამეტრის და l სიგრძის მიღში ნაკადის მოძრაობისას მას გამოსახავენ:

$$Nu = \alpha / \lambda = c \cdot Re^m \cdot Pr^n \cdot (l/d)^p \quad (2.3.13)$$

ბუნებრივი კონვექციის პირობებში განმსაზღვრელ კრიტერიუმებს უნდა დაემატოს Fr, მაგრამ ბუნებრივი კონვექციური ნაკადების სიჩქარეთა განსაზღვრის სიძნელეების გამო მიზანშეწონილია წარმოებული არქიმედის კრიტერიუმის გამოყენება (2.2.14):

$$Ar = (g\beta/\nu^2) \cdot (\Delta\rho/\rho_0) \quad (2.3.15)$$

როდესაც კონვექციის გამომწვევი სიმკვრივეთა სხვაობა განპირობებულია ტემპერატურათა სხვაობით, იგი შეიძლება გამოვსახოთ სითხის მოცულობითი ტემპერატურული გაფართოების კოეფიციენტით β :

$$\Delta\rho = \rho_0 \cdot \beta \cdot \Delta t \quad (2.3.15)$$

მისი ჩასმით ვღებულობთ გრასჰოფის კრიტერიუმს:

$$Gr = g \cdot l^3 \cdot \beta \cdot \Delta t / \nu^2 \quad (2.3.16)$$

იგი წარმოადგენს მსგავსების კრიტერიუმს ბუნებრივი კონვექციისათვის, როდესაც სითხის მოძრაობა მთლიანად განპირობებულია თვით თბოცვლის პროცესით. ამ დროს თბოგაცემის განზოგადოებული განტოლება შეიძლება გამოისახოს:

$$Nu = f(Gr, Pr, l/d) \quad (2.3.17)$$

2.4. მასაგადატანის პროცესების მსგავსება

კონვექციური მასაცვლის დიფერენციალური განტოლებას აქვს კონვექციური თბოცვლის განტოლების (2.3.1) მსგავსი სახე:

$$\partial c/\partial \tau + w_x \cdot \partial c/\partial x + w_y \cdot \partial c/\partial y + w_z \cdot \partial c/\partial z = D(\partial^2 c/\partial x^2 + \partial^2 c/\partial y^2 + \partial^2 c/\partial z^2) \quad (2.4.1)$$

$$\text{ანუ } dc/d\tau = \partial c/\partial \tau + \mathbf{w} \cdot \text{grad } c = D\nabla^2 c \quad (2.4.2)$$

უძრავი არისათვის იგი გამოსახავს მოლეკულური დიფუზიის განტოლებას (ფიკის მეორე კანონს):

$$\partial c/\partial \tau = D\nabla^2 c$$

მასაგაცემის განტოლებებში პროცესის სიჩქარის მამოძრავებელ ძალად მიღებულია ფაზის ბირთვში და გამყოფ ზედაპირზე კონცენტრაციათა სხვაობა:

$$\Phi_x \text{ ფაზისათვის: } M = \beta_x F(x'-x) \quad (2.4.3)$$

$$\Phi_y \text{ ფაზისათვის: } M = \beta_y F(y'-y') \quad (2.4.4)$$

მასაგაცემის კოეფიციენტი β წარმოადგენს კინეტიკურ მახასიათებელს და დამოკიდებულია ფაზის ფიზიკურ თვისებებსა და ჰიდროდინამიკურ პირობებზე. მისი განზომილება დამოკიდებულია ერთეულთა სისტემის შერჩევასა და კონცენტრაციების გამოსახვის ხერხზე:

$$[\beta] = [კგ/(მ^2 \cdot წმ \cdot მამოძრ.ძალის ერთ.)] \quad (2.4.5)$$

შესაბამისი მსგავსების კრიტერიუმები მიიღებიან ფიკის კანონების (1.3), (2.4.3), მასაგაცემის განტოლების (2.4.3), (2.4.4) და კონვექციური მასაცვლის დიფერენციალური განტოლების (2.4.1) მსგავსი გარდაქმნების საფუძველზე, თბოგაცემის პროცესების ანალიზის ანალოგიურად (თავი 2.3.)

$$Nu' = \beta l/D \quad (2.4.6)$$

წარმოადგენს ნუსელტის დიფუზიურ კრიტერიუმს (ხშირად უწოდებენ შერვუდის კრიტერიუმს Sh).

$$\text{ფურიეს დიფუზიური კრიტერიუმი } Fo' = \tau l/D \quad (2.4.7)$$

$$\text{პეკლეს დიფუზიური კრიტერიუმი } Pe' = w l/D \quad (2.4.8)$$

$$\text{პრანდტლის დიფუზიური კრიტერიუმი } Pr' = \mu/(\rho D) \quad (2.4.9)$$

განზოგადოებული კრიტერიალური განტოლება ჩაიწერება:

$$Nu' = f(Fo', Pe', Re, Fr, \Gamma_1, \Gamma_2 \dots) \quad (2.4.10)$$

$$\text{ან } Nu' = f_1(Fo', Re, Pr', Ga, \Gamma_1, \Gamma_2 \dots) \quad (2.4.11)$$

დამყარებული რეჟიმისათვის გამოირიცხება Fo' , ხოლო სიმძიმის ძალის უგულვებელყოფისას Ga .

3. ექსპერიმენტის თეორიის საფუძვლები

ექსპერიმენტის მათემატიკური თეორია მოიცავს ზოგად მეთოდებს ექსპერიმენტის ეფექტურობის ასამაღლებლად. ეს თეორია ეფუძნება ორ ძირითად კონცეფციას – შემთხვევითი სიდიდისა და მოდელის კონცეფციებს. შემთხვევითი შეცდომების როლი ექსპერიმენტის თეორიაში მოითხოვს ალბათობის თეორიისა და მათემატიკური სტატისტიკის მეთოდების გამოყენებას.

3.1. შემთხვევითი სიდიდეების მახასიათებლები

უწყვეტი შემთხვევითი U სიდიდის ალბათობის სიმკვრივე ანუ განაწილების დიფერენციალური ფუნქცია $f(u)$ გამოსახავს ალბათობას იმისა, რომ სიდიდის მნიშვნელობა მოთავსდება ელემენტარულ ინტერვალში $u \dots u+du$:

$$P(u \leq U \leq u + du) = f(u)du \quad (3.1.1)$$

შესაბამისად, იმის ალბათობა, რომ სიდიდე მიიღებს მნიშვნელობას რაიმე სასრულ ინტერვალში u_1 -დან u_2 -მდე ტოლია:

$$P(u_1 \leq U \leq u_2) = \int_{u_1}^{u_2} f(u)du \quad (3.1.2)$$

ალბათობა იმისა, რომ სიდიდე მიიღებს მნიშვნელობას განსაზღვრის არის ქვედა ზღვრიდან (ზოგად შემთხვევაში $-\infty$) u -მდე გამოისახება განაწილების ინტეგრალური ფუნქციით $F(u)$:

$$F(u) = \int_{-\infty}^u f(u)du \quad (3.1.3)$$

შესაბამისად, ალბათობის სიმკვრივე $f(u)$ წარმოადგენს განაწილების ფუნქციის წარმოებულს $f(u)=F(u)'$.

სიდიდის მთელი განსაზღვრის არისთვის (მაგ. $-\infty, +\infty$):

$$F(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(u)du = 1 \quad (3.1.4)$$

შემთხვევითი სიდიდის საშუალო მნიშვნელობა ტოლია განაწილების ფუნქციის პირველი საწყისი მომენტის ანუ მათემატიკური ლოდინის:

$$M(U) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(u) \cdot u \cdot du \quad (3.1.5)$$

სხვა მნიშვნელოვანი მახასიათებელი - დისპერსია გვიჩვენებს შემთხვევითი სიდიდის საშუალო გაბნევას (უფრო ზუსტად, გაბნევის კვადრატს) საშუალო მნიშვნელობიდან და გამოისახება განაწილების ფუნქციის მეორე ცენტრალური მომენტით:

$$D(U) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(u)[u - M(U)]^2 du \quad (3.1.6)$$

კვადრატული ფესვი დისპერსიიდან არის საშუალო კვადრატული გადახრა.

შემთხვევითი სიდიდეები ხშირად ხასიათდებიან განაწილების ნორმალური კანონით:

$$f(u) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(u-a)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (3.1.7)$$

ნორმალურად განაწილებული შემთხვევითი სიდიდისთვის მათემატიკური ლოდინი $M(U)=a$, ხოლო დისპერსია $D(U)=\sigma^2$.

შემთხვევითი სიდიდეები შეიძლება იყვნენ დამოუკიდებელი ან დამოკიდებული. ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი ფაქტორი, რომლის ზედდებაც იწვევს სიდიდეთა დამოკიდებულების გამოვლენას, შეიძლება იყოს დრეიფი დროში - არაკონტროლირებადი ფაქტორების სისტემატური ცვლილება დროის განმავლობაში. კარგად ორგანიზებული ექსპერიმენტის დროს საჭიროა ზომების მიღება გაზომვის ცდომილებათა დამოუკიდებლობის უზრუნველსაყოფად. ერთ-ერთი უმნიშვნელოვანესი ზომია რანდომიზაცია (ინგლ. Random)

- მაგ. დაგეგმილი ცდები ჩაიწერება ლოგიკური კანონზომიერებით, ხოლო შემდეგ მათი ნომრები შემთხვევითად აირევა და ჩატარდება მიღებული თანმიმდევრობით.

შემთხვევითი სიდიდეების ურთიერთდამოკიდებულების უმნიშვნელოვანეს ტიპს წარმოადგენს კორელაცია. კორელაციური კავშირების ზომა განისაზღვრება კორელაციის კოეფიციენტით ρ , რომლის მნიშვნელობა იცვლება ზღვრებში $-1 \dots +1$, სიდიდეებისთვის, რომლებიც ხასიათდებიან ნორმალური განაწილებით $\rho \approx 0$ ნიშნავს მათ დამოუკიდებლობას, ხოლო -1 ან $+1$ კი მათ შორის წრფივი ხაზოვანი დამოკიდებულების არსებობას (შესაბამისად კლებადი ან ზრდადი).

შემთხვევითი სიდიდეების მახასიათებლების ცდისეული განსაზღვრა წარმოადგენს მათემატიკური სტატისტიკის ამოცანას. გასათვალისწინებელია, რომ ობიექტთა გენერალური ერთობლიობის პრაქტიკულად უსასრულო რიცხვის ნაცვლად ხდება მხოლოდ მცირე რაოდენობის შერჩევის შესწავლა. შერჩევითი მახასიათებლები წარმოადგენენ გენერალური ერთობლიობის მახასიათებელი ჭეშმარიტი მნიშვნელობების შეფასებებს. მოდელის ტრადუქციის (რაც ნიშნავს, რომ მიღებული შედეგები შეიძლება გავრცელდეს ორიგინალზე) სისწორისთვის და იმისთვის, რომ სწორად ვიმსჯელოთ გენერალური ერთობლიობის თვისებებზე, გამოთვლილი შეფასებები უნდა იყვნენ: ა) შემდგარები - ანუ შერჩევის მოცულობის გაზრდისას უნდა მიისწრაფოდნენ გენერალური მნიშვნელობებისკენ ნებისმიერი სიზუსტით. ბ) წაუნაცვლებლები, ანუ სისტემატურად არ უნდა ავლენდნენ გაზრდილ ან შემცირებულ მნიშვნელობებს. გ) ეფექტურები, ანუ იმავე შერჩევიდან სხვა მეთოდით გამოთვლილ მნიშვნელობებზე უფრო ზუსტი.

შემთხვევითი სიდიდის X მათემატიკური ლოდინის $M(X)$ შეფასებას წარმოადგენს საშუალო არითმეტიკული:

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n} \quad (3.1.8)$$

დისპერსიის შეფასება:

$$\sigma^2 = \frac{(x_1 - \bar{x})^2 + (x_2 - \bar{x})^2 + \dots + (x_n - \bar{x})^2}{n} \quad (3.1.9)$$

მცირე შერჩევებისთვის წანაცვლდება შემცირების მხარეს.

წაუნაცვლებელი დისპერსიის შეფასება, ე.წ. შერჩევითი დისპერსია s^2 იანგარიშება:

$$s^2 = \frac{(x_1 - \bar{x})^2 + (x_2 - \bar{x})^2 + \dots + (x_n - \bar{x})^2}{n-1} \quad (3.1.10)$$

აქ თავისუფლების ხარისხი $f=n-1$ გულისხმობს უკვე გამოთვლილ და მოცემულ ფორმულაში გამოყენებულ შეფასებათა (3.1.8) რიცხვის გამოკლებას.

კორელაციის შერჩევითი კოეფიციენტი r იანგარიშება ფორმულით:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n [(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})]}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (3.1.11)$$

ხშირად ექსპერიმენტის შედეგების ინტერპრეტაცია შესაძლებელია ჰიპოთეზების შემოწმების ხერხებით. ერთმანეთს შედარდება ორი შერჩევა ან ერთი შერჩევა გენერალურ ერთობლიობას. ფორმულირდება ნულ-ჰიპოთეზა: შერჩევათა შორის არ არის არსებითი განსხვავება და ორივე მიეკუთვნებიან ერთსა და იმავე გენერალურ ერთობლიობას, განსხვავება განპირობებულია შერჩევათა შემთხვევითი ხასიათით და ხშირად აზრი აქვს მათ გაერთიანებას. ალტერნატიული ჰიპოთეზა: განსხვავება განპირობებულია არსობრივად და შერჩევები მიეკუთვნებიან სხვადასხვა გენერალურ ერთობლიობებს. პრაქტიკულად ყველაზე ხშირად გამოცდის სიმკაცრეს განსაზღვრავენ იმ ალბათობის მიხედვით, რომ ჩვენ უარყოფთ სწორ ნულ-ჰიპოთეზას (ე.წ. პირველი გვარის შეცდომა), ამ ალბათობას უწოდებენ მნიშვნელობის დონეს α . ჰიპოთეზათა შემოწმების პროცედურა ჩვეულებრივ ითვალისწინებს შემოწმების კრიტერიუმების

გამოთვლას. მიღებული შედეგები დარდება ცხრილურ კრიტიკულ მნიშვნელობებს. სწორად გამოიყენება შემდეგი კრიტერიუმები:

უხეში შეცდომის გამორიცხვის კრიტერიუმი (ნულ-ჰიპოთეზა გულისხმობს, რომ საექვო შედეგი მიეკუთვნება იმავე გენერალურ ერთობლიობას, რასაც სხვები):

$$r = \frac{|x_{susp} - \bar{x}|}{s \sqrt{\frac{n-1}{n}}} \quad (3.1.12)$$

გამოყენებული მნიშვნელობები იანგარიშება ფორმულებით (3.1.8), (3.1.10) "საექვო" შედეგების ჩართვით.

ფიშერის კრიტერიუმი ითვალისწინებს დისპერსიების შედარებას გაზომვის ორი სერიისათვის:

$$F = \frac{s_1^2}{s_2^2} \quad (3.1.13)$$

კოკრენის კრიტერიუმი გამოიყენება ორზე მეტი N დისპერსიათა რიგის შედარებისას, მაგრამ იგი მოითხოვს, რათა ყველა დისპერსია გამოთვლილი იქნას ერთი და იმავე თავისუფლების ხარისხისთვის (გაზომვათა რიცხვისათვის):

$$G = \frac{s_{\max}^2}{\sum_{i=1}^N s_i^2} \quad (3.1.14)$$

თუ ფიშერის ან კოკრენის კრიტერიუმები დისპერსიათა შეფასებებისთვის აჩვენებს, რომ მიღებულია ნულ-ჰიპოთეზა, შეფასებები ითვლება ერთგვაროვნად და შეიძლება მათი გასაშუალოება:

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (f_i s_i^2)}{\sum_{i=1}^N f_i} \quad (3.1.15)$$

ერთნაირ თავისუფლების ხარისხთა შემთხვევაში ფორმულა გარდაიქმნება საშუალო არითმეტიკულის გამოთვლად.

სტიუდენტის კრიტერიუმი გამოიყენება საშუალოთა შესადარებლად. ნულ-ჰიპოთეზაა: გაზომვის ორი სერიის საშუალო მნიშვნელობანი წარმოადგენენ ერთი და იგივე გენერალური მნიშვნელობის (ჭეშმარიტი, მათემატიკური ლოდინის) შეფასებებს. თუ ამ დროს დისპერსიებიც ერთგვაროვანია და მოქმედებია საერთო შეფასება (3.1.15), სტიუდენტის კრიტერიუმი იანგარიშება:

$$t = \frac{|\bar{x}_1 - \bar{x}_2|}{s \sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}}} \quad (3.1.16)$$

3.2 უმცირეს კვადრატთა მეთოდი

უმცირეს კვადრატთა მეთოდი მნიშვნელოვან როლს თამაშობს მოდელირების შებრუნებული ამოცანებისთვის: მოცემულია მათემატიკური აღწერის განტოლებათა სახე, იგი შეიძლება გამომდინარეობდეს ობიექტის სტრუქტურულიდან ან ემპირიული მიდგომით შეესაბამებოდეს m ხარისხის მრავალწევრს, უნდა განისაზღვროს ამ განტოლებების კოეფიციენტები. ზოგადი სახით განტოლება ჩაიწერება:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k, b_0, b_1, \dots, b_p) \quad (3.2.1)$$

აქ x_k წარმოადგენს კონტროლირებადი ფაქტორების ვექტორს, b_p -პარამეტრების ვექტორს. ამოცანა მოითხოვს, რათა ცდისეული მონაცემების მიხედვით განისაზღვროს პარამეტრების საუკეთესო მნიშვნელობანი. ჩვეულებრივ დაიშვება, რომ ფაქტორები x_i

განსაზღვრულია პრაქტიკულად ზუსტად, ხოლო გამოძახილი y მიღებულია შემთხვევითი ერთგვაროვანი შეცდომებით. უმცირეს კვადრატთა მეთოდის მიხედვით საუკეთესონი იქნებიან პარამეტრების b ის მნიშვნელობები, რომლებისთვისაც გამოთვლილ სიდიდეთა y ცდისუფლისგან განსხვავებების კვადრატების ჯამი მინიმალურია.

ყველა ცდების პირობების შესაბამისი ექსპერიმენტის გეგმის მატრიცა ჩავწეროთ:

$$\underline{X} = \begin{pmatrix} x_{11}x_{21}\dots x_{k1} \\ x_{12}x_{22}\dots x_{k2} \\ \dots \\ x_{1n}x_{2n}\dots x_{kn} \end{pmatrix} \quad (3.2.2)$$

თითოეული სტრიქონი შეესაბამება ერთი ცდის შედეგებს, სვეტი - ერთი და იგივე ფაქტორს სხვადასხვა ცდებში (ექსპერიმენტების თეორიაში, წრფივი ალგებრისგან განსხვავებით პირველი ინდექსით აღნიშნავენ სვეტის და არა სტრიქონის ნომერს).

განვიხილოთ ექსპერიმენტების შედეგების ვექტორ-სვეტი:

$$\underline{Y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{pmatrix} \quad (3.2.3)$$

უმცირეს კვადრატთა მეთოდის განსაზღვრება გამოისახება ფორმულით:

$$S = \sum_{j=1}^n (y_j - y_j^c)^2 = \min \quad (3.2.4)$$

როგორც ცნობილია, ფუნქციის მინიმუმის მასაძებნად საჭიროა მისი ყველა არგუმენტით კერძო წარმოებულების ნულთან ტოლობა:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial b_0} = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial b_1} = 0 \\ \dots \\ \frac{\partial S}{\partial b_p} = 0 \end{cases} \quad (3.2.5)$$

განტოლებას (3.2.5) ეწოდება ნორმალური განტოლება. მისი ამოხსნა მარტივდება, როდესაც განტოლება (3.2.1) წრფივია კოეფიციენტების b მიმართ:

$$y = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_px_p \quad (3.2.6)$$

სადაც ნებისმიერი $x_i = \varphi(u_1, \dots, u_k)$ შეიძლება იყოს სრულიად ცნობილი ფუნქცია (არ უნდა შეიცავდეს შესაფასებელ პარამეტრებს). ფორმულაში (3.2.6) სიმეტრიისთვის შეყვანილია სიდიდე $x_0 \equiv 1$ ანუ ფიქტიური პარამეტრი. მატრიცა \underline{X} მიიღებს სახეს:

$$\underline{X} = \begin{pmatrix} x_{01}x_{11}x_{21}\dots x_{p1} \\ x_{02}x_{12}x_{22}\dots x_{p2} \\ \dots \\ x_{0n}x_{1n}x_{2n}\dots x_{pn} \end{pmatrix} \quad (3.2.7)$$

ჯამის წარმოებულის თეორემის გამოყენებით, (3.2.4) და (3.2.5) -დან წრფივი ალგებრის მეთოდებით ნორმალურ განტოლებათა სისტემის ამონახსნი მატრიცული აღნიშვნებით ჩაიწერება (ამოხსნისთვის მოსახერხებელია კომპიუტერული პროგრამების გამოყენება):

$$\underline{B} = (\underline{X}^T \underline{X})^{-1} \underline{X}^T \underline{Y} \quad (3.2.8)$$

\underline{B} საძიებელ პარამეტრების ვექტორია, ზედა ინდექსი -1 აღნიშნავს შებრუნებულ მატრიცას. ტრანსპონირებულ \underline{X}^T მატრიცაზე ნამრავლები $\underline{X}^T \underline{X}$ და $\underline{X}^T \underline{Y}$ შესაბამისად გამოისახებიან:

$$\underline{X}^T \underline{X} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^n x_{0j}^2 & \sum_{j=1}^n x_{0j} x_{1j} & \sum_{j=1}^n x_{0j} x_{2j} & \cdots & \sum_{j=1}^n x_{0j} x_{pj} \\ \sum_{j=1}^n x_{0j} x_{1j} & \sum_{j=1}^n x_{1j}^2 & \sum_{j=1}^n x_{1j} x_{2j} & \cdots & \sum_{j=1}^n x_{1j} x_{pj} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{j=1}^n x_{0j} x_{pj} & \sum_{j=1}^n x_{1j} x_{pj} & \sum_{j=1}^n x_{2j} x_{pj} & \cdots & \sum_{j=1}^n x_{pj}^2 \end{bmatrix} \quad (3.2.9)$$

$$\underline{X}^T \underline{Y} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^n x_{0j} y_j \\ \sum_{j=1}^n x_{1j} y_j \\ \dots \\ \sum_{j=1}^n x_{pj} y_j \end{bmatrix} \quad (3.2.10)$$

მატრიცა (3.2.9) კვადრატულია. თუ მისი განმსაზღვრელი (დეტერმინანტი) ნულის ტოლი არ არის, სისტემას გააჩნია ერთადერთი ამონახსნი. წინააღმდეგ შემთხვევაში მატრიცა გადაგვარებულია, სისტემას გააჩნია უსასრულოდ ბევრი ამონახსნი და მოცემული ექსპერიმენტალური შედეგებით შეუძლებელია მოდელის პარამეტრების ცალსახა განსაზღვრა.

უმცირეს კვადრატთა მეთოდით მიღებულ განტოლებებს უწოდებენ რეგრესიის განტოლებებს. მათი მიღების შემდეგ მკვლევარებს მოეთხოვებათ შედეგების ინტერპრეტაცია - არსის დადგენა. ძირითადად საჭიროა ორი ჰიპოთეზის შემოწმება: განტოლების ადეკვატურობისა და კოეფიციენტების მნიშვნელობების. პირველი ნიშნავს გამოკვლევას, თუ რამდენად ზუსტად აღწერს მიღებული განტოლება ობიექტს, მეორე ჰიპოთეზა კი საჭიროა იმის გამოსარკვევად, ხომ არ არის ზოგიერთი ფაქტორის გავლენა ობიექტზე იმდენად უმნიშვნელო (შესაბამისი კოეფიციენტი მცირეა), რომ შეიძლება უგულებელყოფილი იქნას.

ადეკვატურობის ჰიპოთეზის შემოწმება ხორციელდება ექსპერიმენტული შედეგების რეგრესიის განტოლების მიმართ გაბნევის შედარებით ექსპერიმენტის შემთხვევითი ცდომილების სიდიდესთან. რეგრესიის განტოლების მიმართ გაბნევის ზომას გამოსახავს ნარჩენი დისპერსია s_r , რომელიც განისაზღვრება კვადრატული გადახრების მინიმალური ჯამის (3.2.4) ფარდობით თავისუფლების ხარისხთან (ექსპერიმენტული მონაცემების n რიცხვისა და შეფასებული პარამეტრების რიცხვის $p+1$ სხვაობა):

$$s_r^2 = \frac{S}{n - p - 1} \quad (3.2.11)$$

შემთხვევითი ცდომილების შესაფასებლად ანგარიშობენ განმეორებადობის დისპერსიას c , რისთვისაც ატარებენ პარალელური ცდების ერთ ან რამდენიმე სერიას კონტროლირებადი ფაქტორების იგივე მნიშვნელობებისთვის. $s^2(y)$ ანგარიშობენ ფორმულით (3.1.10), n გამოსახავს სერიაში ცდათა რიცხვს. რამდენიმე სერიის შემთხვევაში თვითოეულისთვის გამოთვლიან დისპერსიას, ამოწმებენ მათ ერთგვაროვნებას და ფორმულით (3.1.15) განსაზღვრავენ $s^2(y)$. ადეკვატურობას ამოწმებენ ფიშერის კრიტერიუმით (3.1.13):

$$F = s_r^2 / s^2(y) \quad (3.2.12)$$

3.3. ექსპერიმენტის დაგეგმვა

უმცირეს კვადრატთა მეთოდით შესაძლებელია ობიექტის აღწერის მიღება ნებისმიერ მონაცემებზე დაყრდნობით. კომპიუტერების გამოჩენასთან ერთად დაიბადა იდეა – ტექნოლოგიურ პროცესების აღწერა მიღებული იქნას პროცესის ნორმალური ექსპლუატაციის დროს მიღებული მონაცემების საფუძველზე. ასეთ მიდგომას ეწოდა პასიური ექსპერიმენტი. მასზე დაფუძნებული იმედები ზოგჯერ არ მართლდება რამდენიმე მიზეზის გამო: ა) ნორმალური ექსპლუატაციის დროს რეჟიმების გადახრები მცირეა და არც არის სასურველი დიდი დარღვევები, ამ დროს რთულია გამოიყოს ფაქტორების არსებითი ცვლილება ხმაურისგან. ბ) პასიური ექსპერიმენტის დროს ადგილი აქვს ფაქტორების ძლიერ კორელაციას. გ) საწარმოო პირობებში ფაქტორები ხშირად იზომებიან საგრძნობი შეცდომებით, რაც არაკორექტულს ხდის უმცირეს კვადრატთა მეთოდის გამოყენებას. ყოველივე ამის გამო პასიურ ექსპერიმენტს უპირისპირებენ აქტიურ ექსპერიმენტს, რომელიც ეფუძნება ექსპერიმენტის დაგეგმვას.

ჩვეულებრივ ქიმიური და მონათესავე ტექნოლოგიურ პროცესებზე გავლენას ახდენენ რამდენიმე ფაქტორები. ასეთი მრავალფაქტორიანი სისტემის შესწავლის პირველი გზა გულისხმობს ფაქტორების სათითაოდ შეცვლას: ექსპერიმენტები იყოფა სერიებად, თვითოეულში იცვლება ერთი ფაქტორი, სხვები კი მუდმივია. მეორე მიდგომის იდეა მდგომარეობს ექსპერიმენტის მრავალფაქტორიანი გეგმის აგებაში. პირველი მიდგომის უპირატესობაა თვალსაჩინოება, მაგრამ მეორე მიდგომა საგრძნობლად უფრო ეფექტური იმავე ექსპერიმენტის მოცულობისა და ცდების იმავე სიზუსტის პირობებში მიიღწევა შედეგების მეტი სიზუსტე.

ექსპერიმენტის გეგმა ჩვეულებრივ აიგება (3.2.2) ტიპის მატრიცის სახით. გეგმას მოეთხოვება ოპტიმალური თვისებები: 1) მოცემული ცდების რიცხვისა და სიზუსტისთვის შედეგი უნდა იყოს ყველაზე ზუსტი. სიზუსტე აქ შეიძლება სხვადასხვა აზრით იყოს გაგებული – ზოგი ამოცანისთვის მინიმალური უნდა იყოს რეგრესიის განტოლებით გამოთვლილი შედეგი, სხვა შემთხვევაში მნიშვნელოვანია პარამეტრების შეფასების სიზუსტე, განსაკუთრებით თუ მათ გააჩნიათ ფიზიკური აზრი, მაგ. აქტივაციის ენერჯია, დიფუზიის კოეფიციენტი და სხვა. 2) არ უნდა ჰქონდეს ადგილი ან მინიმალური უნდა იყოს ფაქტორების კორელაცია.

I რიგის გეგმები გამოიყენება მათემატიკური აღწერის ასაგებად 1 ხარისხის პოლინომების (რეგრესიის წრფივი განტოლებების) (3.2.6) სახით. გავრცელებულია გეგმების აგების შემდეგი თანმიმდევრობა: შეირჩევა საკვლევი არის ცენტრი (ცენტრის ცენტრი). შეირჩევა ცვლილების ინტერვალი δ_i ყოველი ცვლადისთვის (მანძილი მოცემული ღერძის მიხედვით ცენტრიდან ექსპერიმენტულ წერტილამდე). ოპტიმალური თვისებებით ხასიათდებიან I რიგის გეგმები, რომლებშიც თვითოეული ფაქტორი ღებულობს მხოლოდ ორ მნიშვნელობას – იცვლება ორ დონეზე, მაღალზე და დაბალზე. შემდეგ ეტაპზე ახდენენ ცვლადების მიყვანას (კოდირებას): გეგმის ცენტრში ყველა კოორდინატი უტოლდება ნულს, ხოლო ცვლილების ინტერვალი – 1-ს. ნატურალური ცვლადების u_i კოდირებულზე x_i გადათვლა ხდება ფორმულით:

$$x_i = \frac{u_i - u_{i0}}{\delta_i} \quad (3.3.1)$$

ორი მიყვანილი ფაქტორისთვის I რიგის გეგმა კოორდინატთა $x_1 - x_2$ სისტემაში გამოისახება კვადრატით, რომლის ცენტრი ემთხვევა გეგმის ცენტრს, ხოლო ექსპერიმენტული წერტილები თავსდება წვეროებზე კოორდინატების კომბინაციებით -1, +1. პრაქტიკულად, გეგმის ჩანაწერს ხშირად ამოკლებენ -, +:

| | | |
|-------|-------|--|
| x_1 | x_2 | |
| - | - | |
| + | - | |
| - | + | |
| + | + | |

(3.3.2)

თვითოეული ფაქტორი იცვლება ორ ღონეზე, სხვა კომბინაციები გეგმაში არ გამოიყენება. ასეთ გეგმას ეწოდება ორღონიანი სრულფაქტორიანი ექსპერიმენტის გეგმა, შემოკლებით ს.ფ.ე.^{2²}.

ადვილად აიგება ორღონიანი სრულფაქტორული ექსპერიმენტის გეგმა k ფაქტორისთვის ს.ფ.ე.^{2^k}. ამ დროს გეგმა მოიცავს 2^k სტრიქონს (ამდენივე ცდას). მაგ. გეგმა 2^3 :

| | | | |
|-------|-------|-------|---------|
| x_1 | x_2 | x_3 | |
| - | - | - | |
| + | - | - | (3.3.3) |
| - | + | - | |
| + | + | - | |
| - | - | + | |
| + | - | + | |
| - | + | - | |
| + | + | + | |

ცდების რეალური თანმიმდევრობა არ უნდა ემთხვეოდეს გეგმის ჩანაწერს, არამედ საჭიროა რანდომიზაცია. ხშირად თვითოეული ცდა მეორდება რამდენჯერმე განმეორებადობის დისპერსიის შეფასებისთვის, ამასთან გამეორებათა რიცხვი უნდა იყოს ერთნაირი გეგმის ყოველი სტრიქონისთვის, ამასთან რანდომიზაცია საჭიროა ყველა ცდისთვის, მათ შორის პარალელური ცდებისთვისაც, რათა არ დაირღვეს ცდების დამოუკიდებლობა.

ზოგჯერ სასურველია პარალელური ცდების სერიის ჩატარება გეგმის ცენტრში. რეგრესიის კოეფიციენტების განსაზღვრისთვის ეს შედეგები არ გამოიყენება. ამ დროს ადექვატურობის ჰიპოთეზა უფრო საიმედოდ მოწმდება.

სრული ფაქტორული ექსპერიმენტის საშუალებით შეიძლება გამოითვალოს არა მარტო წრფივი პოლინომის კოეფიციენტები, არამედ ფაქტორების ნამრავლების კოეფიციენტები. ექსპერიმენტის დაგეგმვაში მათ უწოდებენ ურთიერთქმედებებს. თუმცა ამ დროს ასეთი გეგმა არ იძლევა წევრების x^2 , x^3 და ა.შ. კოეფიციენტების შეფასების საშუალებას – მატრიცა აღმოჩნდება გადაგვარებული.

გეგმის მატრიცის გამოძახილის მნიშვნელობათა სვეტის დამატებით მიიღება ე.წ. გაფართოებული მატრიცა. მაგ:

| | | | | | |
|-------|-------|-------|----------|-------|---------|
| x_0 | x_1 | x_2 | x_1x_2 | y | |
| + | - | - | + | y_1 | |
| + | + | - | - | y_2 | (3.3.4) |
| + | - | + | - | y_3 | |
| + | + | + | + | y_4 | |

ნორმალურ განტოლებათა სისტემის ამონახსნი ს.ფ.ე. ს.ფ.ე.^{2^k}-სთვის წარმოადგენს მარტივ გამოსახულებას:

$$b_i = \frac{\sum_{j=1}^{2^k} x_{ij} y_j}{2^k} \tag{3.3.5}$$

იმის გათვალისწინებით, რომ ექსპერიმენტის გეგმაში ნებისმიერი x_{ij} ღებულობს მნიშვნელობას -1 ან +1, ფორმულით (3.3.5) სარგებლობა ძლიერ მარტივდება. ამჟამად, კომპიუტერების გამოყენების პირობებში ეს არც თუ ისე არსებითია, უფრო მნიშვნელოვანია ის, რომ ს.ფ.ე. გეგმის მატრიცით განსაზღვრული პარამეტრები არაკორელირებულია, ანუ ცალკეული ფაქტორების გავლენა შეფასდება დამოუკიდებლად, ასევე ადვილია მოდელის გავამარტივება, თუ რომელიმე წევრი აღმოჩნდება უმნიშვნელო – ასეთი წევრი უბრალოდ გამოირიცხება განტოლებიდან.

II რიგის გეგმების აგება. ცენტრალური კომპოზიციური გეგმის გამოყენებისას, თუ წრფივი განტოლება ცუდად აღწერს ობიექტს, არ არის აუცილებელი ყველა ცდის ხელახლა ჩატარება, საკმარისია I რიგის გეგმას დაემატოს რამდენიმე წერტილი.

როგორც წესი, ემატება წერტილები გეგმის ცენტრში (ერთი ან რამდენიმე პარალელური) და წერტილები ყველა კოორდინატთა ღერძებზე ცენტრიდან ერთნაირ $\pm \alpha$ მანძილზე (ვარსკვლავური წერტილები). სიდიდეს α ეწოდება ვარსკვლავის მხარი. ორ ფაქტორიანი გეგმა ღებულობს სახეს:

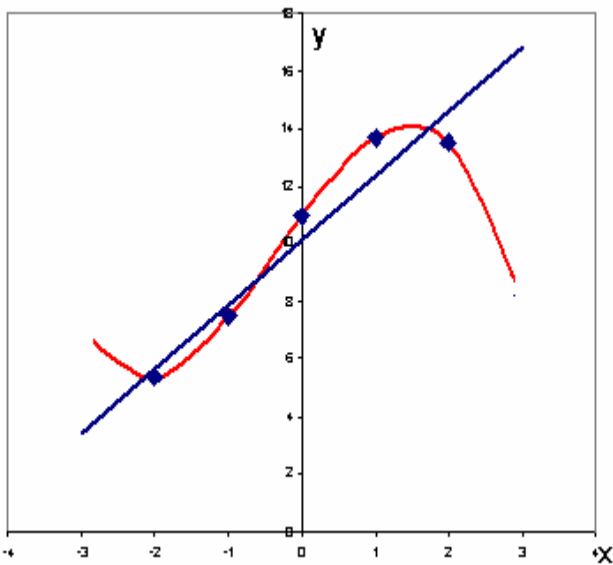
| | | | |
|-------------------------|------------|------------|---------|
| | x_1 | x_2 | |
| გეგმის ცენტრი: | -1 | -1 | |
| | +1 | -1 | |
| | -1 | +1 | |
| | +1 | +1 | (3.3.6) |
| ვარსკვლავური წერტილები: | - α | 0 | |
| | + α | 0 | |
| | 0 | - α | |
| | 0 | + α | |
| ცენტრალური წერტილი: | 0 | 0 | |

II ხარისხის პოლინომის პარამეტრების გამოთვლა შესაძლებელია უმცირეს კვადრატთა მეთოდის ზოგადი ალგორითმებით ან სპეციალურად გამოყვანილი ფორმულებით.

ჰიპოთეზათა შემოწმება ექსპერიმენტის დაგეგმვის დროს ხშირად გულისხმობს:

1. ჰიპოთეზას დისპერსიების შეფასებათა ერთგვაროვნებაზე.
2. ჰიპოთეზას რეგრესიის კოეფიციენტთა მნიშვნელოვნებაზე.
3. ჰიპოთეზას განტოლებათა ადეკვატურობაზე.

რეგრესიის განტოლებათა ინტერპრეტაცია წარმოადგენს პროცესების მოდელირების უმნიშვნელოვანეს ეტაპს. პირველ რიგში იგი გულისხმობს ცალკეული ფაქტორების გავლენისა და მათი ურთიერთქმედების ანალიზს, შემდგომ – გამოძახილის ფუნქციის ყოფაქცევის თავისებურებებს ფაქტორული სივრცის სხვადასხვა არეებში. ფაქტორების გავლენის ანალიზი ყველაზე მარტივია I ხარისხის განტოლების მიხედვით. აქ პირველ რიგში კოეფიციენტის ნიშანი მიუთითებს, თუ რომელ მხარეს - მატების თუ კლების ზემოქმედებს მოცემული ფაქტორი. ექსპერიმენტის დაგეგმვისას ასევე შესაძლებელია ცალკეული ფაქტორების გავლენის შედარება, ვინაიდან ფაქტორები რეგრესიის განტოლებებში წარმოდგენილია უგანზომილებო კოდირებული სახით.



რეგრესიის განტოლების შერჩევას არ არის საკმარისი წმინდა ფორმალური მიდგომა. დიდი მნიშვნელობა ენიჭება თვით მკვლევარის კომპეტენციას და ინტუიციას. მაგალითის სახით ნახაზზე მოყვანილია წარუმატებელი ექსტრაპოლაციის შედეგი, როდესაც “გულუბრყვილო” მკვლევარმა, რომელიც არ დაკმაყოფილდა საკმარის დიდი ცდომილების მქონე ექსპერიმენტალური მონაცემების წრფივი რეგრესიის განტოლების სიზუსტით, გადაწყვიტა მე-4 ხარისხის პოლინომის გამოყენება. ამ დროს გამოკვლეულ არეში რეგრესიის განტოლება ზუსტად გადის ყველა ექსპერიმენტალურ წერტილზე, მაგრამ ამ ზღვრებიდან უახლეს მნიშვნელობებისათვის განტოლება უკვე უხეშ შეცდომებს იწვევს (თვით პროცესისთვის დამახასიათებელია

დამოკიდებულების მონოტონური ზრდა, წერტილების გაბნევა კი გამოწვეული იყო მხოლოდ ექსპერიმენტული მონაცემების დაბალი სიზუსტით). ამ დროს წრფივი რეგრესიის განტოლება უზრუნველყოფდა საესეებით მისაღებ აპროქსიმაციას (ყოველ შემთხვევაში არა უარესს, ვიდრე თვით ექსპერიმენტის გაზომვების სიზუსტეა).

4. ჰიდროდინამიკური ნაკადების სტრუქტურის მოდელები

მრავალ ქიმიურ-ტექნოლოგიურ პროცესზე დიდ გავლენას ახდენს ნაკადების სტრუქტურა აპარატებში. ნაკადის ნაწილაკების აპარატში შესვლისას თანაბარი განაწილების დროსაც კი მათი მოძრაობა აპარატში საკმაოდ რთულია, ნაკადის სიჩქარე არათანაბარია აპარატის კვეთში, სიჩქარეთა პროფილი აგრეთვე იცვლება აპარატის სიგრძეზეც, ნაკადის ნაწილაკები აღწერენ განსხვავებულ ტრაექტორიებს – ზოგი ნაწილაკი სწრაფად “გაირბენს” აპარატში (არხწარმოქმნა და ბაიპასირება), სხვა ნაწილაკები კი ყოვნდებიან აპარატში, ზოგჯერ წარმოიქმნება ჰიდრაობის ზონებიც.

ლამინარული მოძრაობის დროს ნაწილაკების დაყოვნების დროთა განსხვავებას განაპირობებს სიჩქარეთა პროფილი აპარატის კვეთში. ტურბულენტურ რეჟიმში ხდება საშუალო სიჩქარეთა გათანაბრება, მაგრამ ნაწილაკების დაყოვნების არათანაბრობაზე გავლენას ახდენს ტურბულენტური პულსაციები, ანუ ტურბულენტური დიფუზია, როგორც დერძის გასწვრივ, ასევე რადიალური (ეს უკანასკნელი ათანაბრებს სიჩქარეთა პროფილს).

ნაწილაკების აპარატში არათანაბარი დაყოვნების იგნორირება და ნაკადების სტრუქტურაზე გამარტივებული წარმოდგენა საწარმოო აპარატების გაანგარიშებისას ხშირად იწვევს არსებით შეცდომებს. ამიტომ მასშტაბური გადასვლის დროს მიზანშეწონილია ჰიდრაულიკური მოდელების ჩატარება “ცივ” მოდელებზე.

4.1 სითხის ნაწილაკების დაყოვნების დროის განაწილება აპარატში

ხშირად ნაკადების სტრუქტურის შესწავლის ერთადერთი საშუალებაა მათი შესწავლა არაპირდაპირი გზით – ნაკადის ცალკეული ნაწილაკების აპარატში დაყოვნების დროს შესწავლის გზით. ამისათვის, მაგალითად, შემავალ ნაკადში შეჰყავთ რაიმე ნივთიერების (ინდიკატორის ანუ ტრასერის) მინარევი და აპარატის გამოსასვლელზე იზომება მისი კონცენტრაცია. აპარატის გამოსასვლელზე ტრასერის კონცენტრაციის დროში ცვლილების გამომავალი მრუდები მიუთითებენ ნაკადის ცალკეული ნაწილაკების აპარატში გარკვეული დროით დაყოვნების ალბათობაზე (ალბათობის სიმკვრივეზე).

იდეალური გამოდევნის აპარატში იმპულსურად შეყვანილი ინდიკატორი ასევე ერთი ვიწრო იმპულსის სახით გამოვა (მათემატიკურად ასეთი იმპულსი აღიწერება დირაკის δ -ფუნქციით). ნაკადის ასეთ რეჟიმს უწოდებენ დჰუშურსაც. იდეალური გამოდევნის რეჟიმიდან ნებისმიერი გადახრა გამოვლინდება სხვადასხვა ნაწილაკების დაყოვნების დროთა არათანაბრობით. ასეთ გადახრას პირობითად უწოდებენ შერევას ან ჰუკუშერევას. იდეალური გამოდევნის იდეალიზირებული მოდელის საპირისპირო იდეალიზირებულ მოდელს წარმოადგენს იდეალური შერევის მოდელი. იდეალური შერევის აპარატის გამომავალი მრუდი გამოისახება ექსპონენციალურად კლებადი კონცენტრაციით:

$$c = c_0 \cdot \exp(-\tau/\tau_0) \quad (4.1.1)$$

$$c_0 = M_0/V \quad (4.1.2)$$

M_0 ინდიკატორის პორციის მასაა, ხოლო τ_0 წარმოადგენს დაყოვნების საშუალო დროს:

$$\tau_0 = V/Q \quad (4.1.3)$$

ეს დამოკიდებულება ხშირად გამოიყენება აპარატებში სითხის მიერ დაკავებული V მოცულობის დასადგენად (არა მხოლოდ იდეალური შერევის აპარატებისათვის).

გამომავალ მრუდებს ხშირად აკებენ უგანზომილებო კოორდინატებში:

$$C = c/c_0; \quad \theta = \tau/\tau_0 \quad (4.1.4)$$

C გამოსახავს ნაწილაკის დაყოვნების დროის განაწილების ალბათობის სიმკვრივეს:

$$\int_0^\infty C \cdot d\theta = 1 \quad (4.1.5)$$

$\int_0^\infty C \cdot d\theta$ წარმოადგენს განაწილების ინტეგრალურ ფუნქციას.

დაყოვნების საშუალო დრო წარმოადგენს განაწილების ფუნქციის პირველ საწყის მომენტს ანუ მათემატიკურ ლოდინს:

$$\tau_0 = M[\tau] = \int_0^\infty c \cdot \tau \cdot d\tau / \int_0^\infty c \cdot d\tau \quad (4.1.6)$$

ხშირად რეალურ აპარატში ნაკადების სტრუქტურას განიხილავენ რაიმე გამარტივებული მოდელის ანუ ფიზიკური სქემის სახით, რომელიც მეტ-ნაკლები სიზუსტით აღწერს ნაკადების სტრუქტურას. ექსპერიმენტალური გზით მიღებული გამომავალი მრუდის საშუალებით ადგენენ ამ სქემის შესაბამისი მათემატიკური მოდელის ობიექტთან ადეკვატურობას და პოულობენ მოდელის პარამეტრების მნიშვნელობებს. მონაცემების განზოგადოების საშუალებით განსაზღვრავენ მოდელის პარამეტრებს სხვადასხვა ჰიდროდინამიკური პირობებისა და მოცემული ტიპის აპარატის სხვადასხვა გეომეტრიული ზომებისათვის. აპარატებში ნაკადების სტრუქტურის აღწერისათვის ფართოდ იყენებენ უჯრედოვან და დიფუზიურ მოდელებს.

უჯრედოვანი მოდელის მიხედვით აპარატს წარმოიდგენენ, როგორც იდეალური შერევის n რაოდენობის აპარატების თანმიმდევრობას. ასეთი წარმოდგენა ხშირად მისაღებია სხვადასხვა ტიპის თევშებიან და სექციონირებულ აპარატებში ნაკადების სტრუქტურის აღწერისათვის. გამომავალი მრუდი გამოისახება განტოლებით:

$$C = \theta^{n-1} \exp(-n\theta) \cdot n^n / (n-1)! \quad (4.1.7)$$

$n=1$ შეესაბამება იდეალური შერევის, ხოლო $n \rightarrow \infty$ იდეალური გამოდენის მოდელებს.

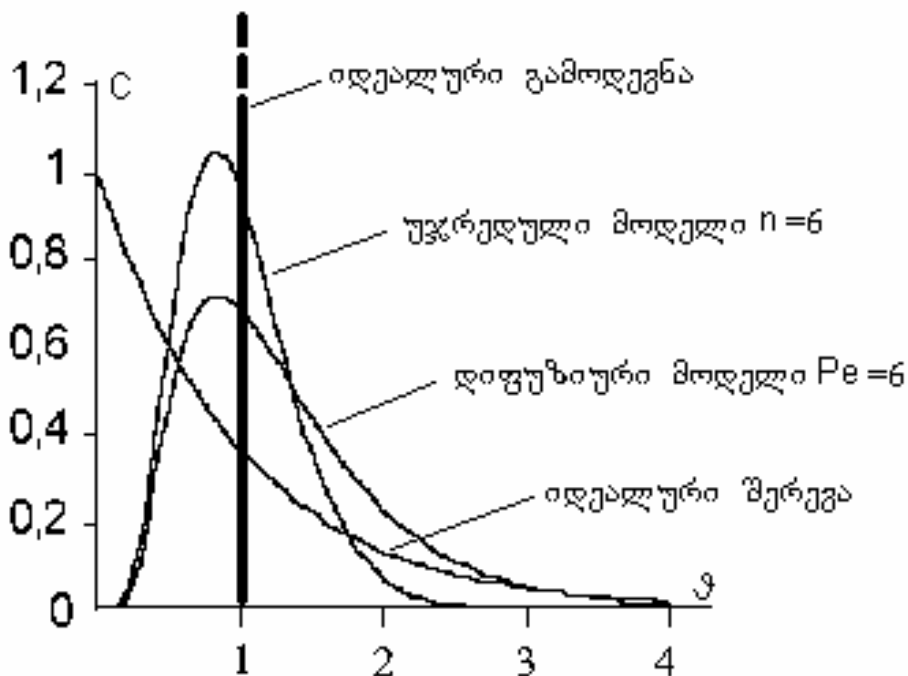
დიფუზიური მოდელის საფუძვლად მიღებულია დაშვება ფიქტიური დიფუზიის შესახებ ნაკადის სიგრძის გასწვრივ. ამ დროს დიფუზიის ფიქტიურ კოეფიციენტს, რომლითაც აღიწერება როგორც ჭეშმარიტი დიფუზიით, აგრეთვე ტურბულენტური პულსაციებით და სიჩქარეთა პროფილის არათანაბრობით გამოწვეული უკუშერევა, უწოდებენ გრძივი შერევის კოეფიციენტს E .

$$dc/d\tau = -w \cdot dc/dx + E \cdot d^2c/dx^2 \quad (4.1.8)$$

დიფუზიური მოდელის თანახმად ინდიკატორის იმპულსურ შეყვანაზე გამომავალი მრუდი აღიწერება განტოლებით:

$$C = \sqrt{(Pe/4\pi\theta)} \cdot \exp[-Pe \cdot (\theta-1)^2/4\theta] \quad (4.1.9)$$

სადაც $Pe = w/E$ პეკლეს კრიტერიუმია (ზოგჯერ უწოდებენ ბოდენშტეინის კრიტერიუმს Bo). $Pe \rightarrow \infty$ უახლოვდება იდეალური გამოდენის მოდელს, $Pe = 0$ კი იდეალური შერევის მოდელს.



ნახაზზე 4.1.1 მოყვანილია ნაკადების სტრუქტურის სხვადასხვა მოდელებისათვის დამახასიათებელი გამომავალი მრუდები.

4.2 ნაკადების სტრუქტურის იდენტიფიკაცია და ნაწილაკების დაყოვნების დროის განაწილების ფუნქციის განსაზღვრა სპეციალური განაწილების ფუნქციის გამოყენებით

ნაკადების სტრუქტურის იდენტიფიკაცია ეფუძნება დაყოვნების დროის განაწილების (დღგ) ფუნქციის სიმკვრივის $f(\tau)$ გამომავალი მრუდების ანალიზს. ცნობილი განტოლებები, რომლებიც ხშირად გამოიყენება გამომავალი მრუდების აღწერისთვის საკმაოდ მოუხეშავია და მოუხერხებელია პრაქტიკული გამოთვლებისთვის. მოცემულ თავში გადმოცემულია ნაკადების სტრუქტურის იდენტიფიკაციის შედარებით უნივერსალური მეთოდი, რომელიც ემყარება განაწილების სპეციალური ფუნქციის (გსფ) გამოყენებას.

$$f(\tau) = H \cdot \exp[-A(\tau - \tau_0)] \{1 - b \cdot \exp[-A(\tau - \tau_0)]\}^{m-1} \quad (4.2.1)$$

სადაც H ნორმირების კოეფიციენტი:

$$H = \frac{m \cdot A \cdot b}{1 - (1 - b)^m} \quad (4.2.2)$$

b - კოეფიციენტი, რომელიც განსაზღვრავს საწყის მნიშვნელობას f_0 , A - განაწილების ფუნქციის კოეფიციენტი, $m=1,2,3...$ პარამეტრია, რომელიც წარმოადგენს ნაკადების სტრუქტურის სივრცული განვითარების რიგს, τ_0 - დროით წანაცვლებას.

ფორმულის (4.2.1) პარამეტრების მნიშვნელობათა განსაზღვრა ხდება შემდეგი თანმიმდევრობით: გამომავალი მრუდის გრაფიკზე (ნახ. 2) განისაზღვრება განაწილების ფუნქციის $f(\tau)$ მაქსიმალური მნიშვნელობის f_{max} შესაბამისი დრო τ_m და იანგარიშება შეფასების კრიტერიუმები s და a :

$$s = \tau_m \cdot f_{max} \quad (4.2.3)$$

$$a = \frac{f_0}{f_{max}} \quad (4.2.4)$$

შეფასების კრიტერიუმების s და a მიხედვით თეორიული ნომოგრამის (ნახ.4.2.2) დახმარებით განვსაზღვრავთ პარამეტრებს m და b . განაწილების ფუნქციის კოეფიციენტი A იანგარიშება ფორმულით:

$$A = \frac{\ln(mb)}{\tau_m} \quad (4.2.5)$$

პარამეტრების A , b , m , H მნიშვნელობათა დადგენის შემდეგ ვაგებთ თეორიული აპროქსიმაციის მრუდებს და განაწილების ფუნქციის (4.2.1) მიხედვით განვსაზღვრავთ ძირითად სტატისტიკურ მახასიათებლებს:

მათემატიკური ლოდინი $M[\tau]$ და საშუალო კვადრატული გადახრა σ_τ გამოისახება შემდეგი თანაფარდობებით:

$$M[\tau] = \frac{C_1}{A} \quad (4.2.6)$$

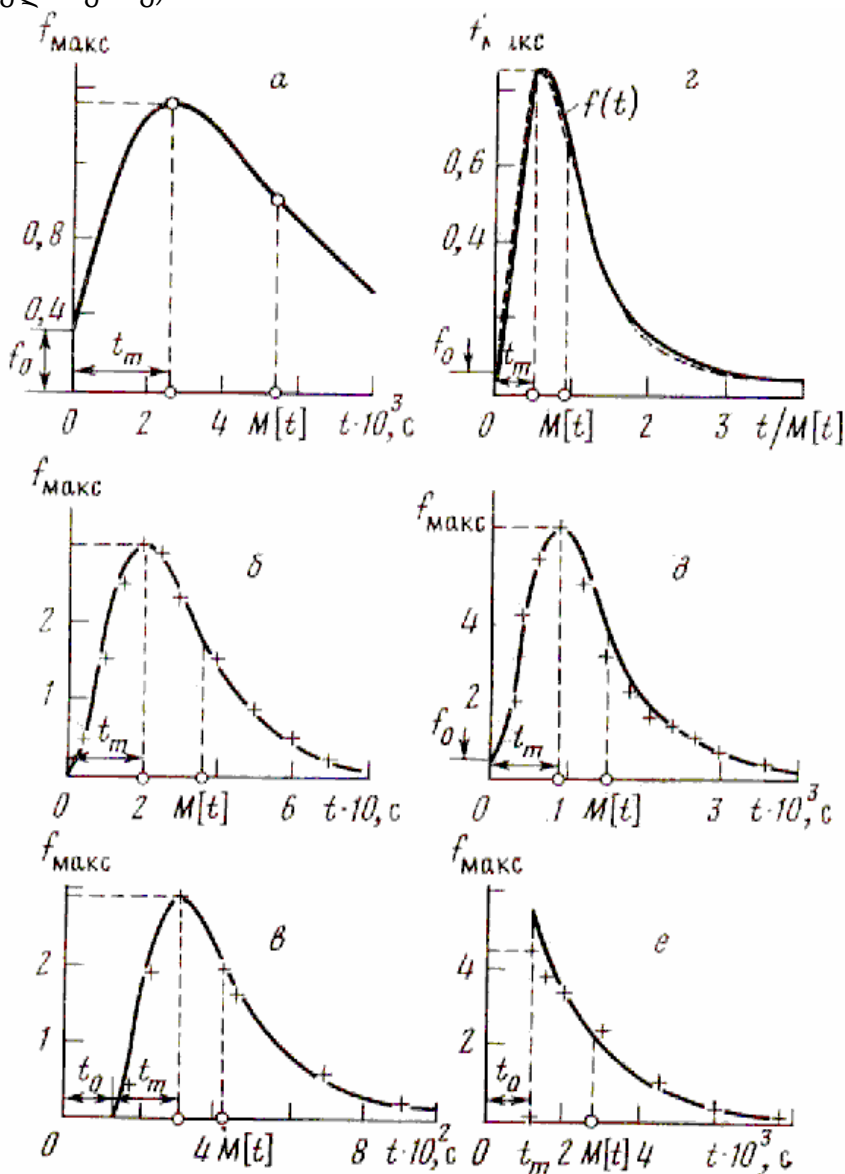
$$\sigma_\tau = \frac{C_2}{A} \quad (4.2.7)$$

სტატისტიკური კოეფიციენტების მნიშვნელობები მოყვანილია ცხრილში 4.2.1.

წარმოდგენილი მეთოდიკით ჩატარდა რამდენიმე დამახასიათებელი გამომავალი მრუდის ანალიზი სხვადასხვა კონსტრუქციის და დანიშნულების აპარატებისთვის. ანალიზის შედეგები წარმოდგენილია ნახაზზე 4.2.1 და ცხრილში 4.2.2.

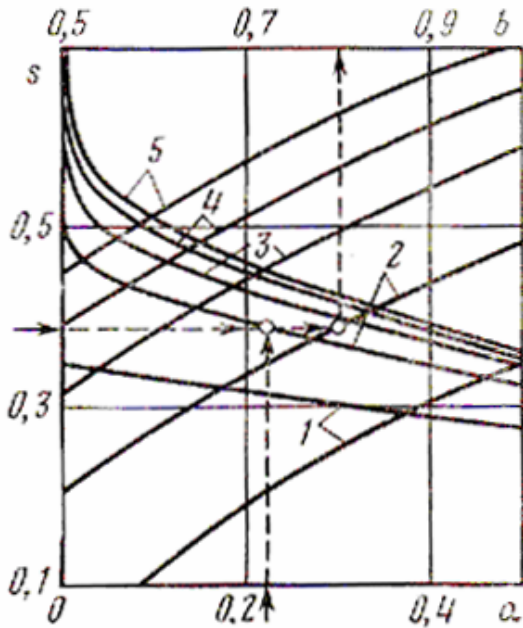
ნახაზზე 4.2.3 წარმოდგენილია ნაკადების სტრუქტურის სხვადასხვა მოდელებისთვის დამახასიათებელი გამომავალი მრუდები. განტოლების (4.2.1) საშუალებით წარმატებით შეიძლება სხვა სახის მოდელების მონაცემების აპროქსიმაცია, პარამეტრის $m=1$ მნიშვნელობისთვის იგი ავტომოდელურად ასახავს იდეალური შერევის მოდელს (4.1.1).

პარამეტრის A მნიშვნელობისთვის $A \rightarrow \infty$ ფუნქცია (4.2.1) ასიმპტოტურად უახლოვდება იდეალური გამოდევნის აპარატის მახასიათებელ დირაკის δ -ფუნქციას. ნებისმიერი შუალედური შერევის რეჟიმებისთვის ფორმულის (4.2.1) გამოყენება გაცილებით მოსახერხებელია უჯრედულ (4.1.7) და დიფუზიურ (4.1.9) მოდელებთან შედარებით (არ მოითხოვს ფაქტორიალების გამოთვლას, განსაზღვრის არე არ ვრცელდება დროის უარყოფით მნიშვნელობებზე).



ნახ. 4.2.1 ნაკადების სტრუქტურის მახასიათებელი ექსპერიმენტული გამომავალი მრუდების იდენტიფიკაცია.

ჩატარებულია ექსპერიმენტები ნაკადების სტრუქტურის შესასწავლად მილოვან აპარატში (სვეტში) იმპულსურად შეყვანილი ტრასერის გამომავალი მრუდის ანალიზის მეთოდით ნაკადის სხვადასხვა სიდიდისთვის. ექსპერიმენტების შედეგები წარმოდგენილია ნახაზზე 4.2.4 და ცხრილში 4.2.3. განაწილების ფუნქციის სტატისტიკური მახასიათებლები - მათემატიკური ლოდინი და დისპერსია განსაზღვრულია ექსპერიმენტული მრუდების პირდაპირი ანალიზის შედეგად.



ნახ. 4.2.2 ნომოგრამა ნაკადების სტრუქტურის მახასიათებელი პარამეტრების იდენტიფიკაციისათვის.

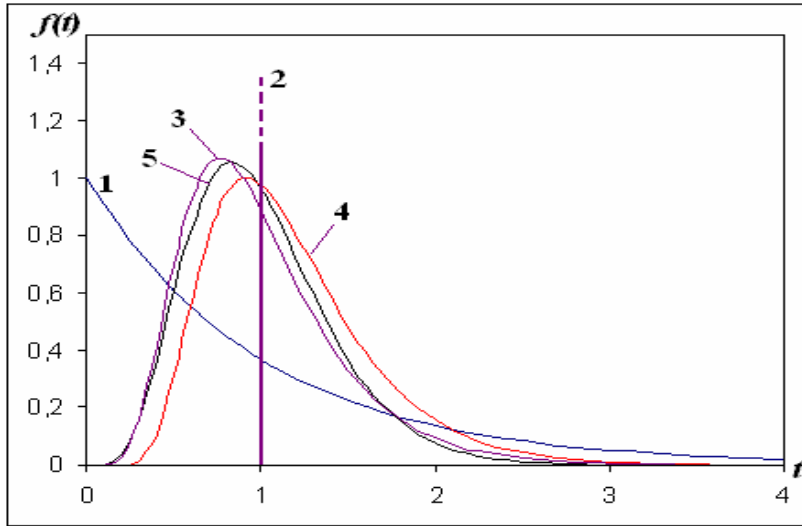
ცხრილი 4.2.1 განაწილების ფუნქციის სტატისტიკური მახასიათებლების განმსაზღვრელი კოეფიციენტები.

| m | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|----------------|---|------|------|------|------|------|
| C ₁ | 1 | 1.5 | 1.83 | 2.08 | 2.28 | 2.45 |
| C ₂ | 1 | 1.12 | 1.17 | 1.2 | 1.21 | 1.22 |

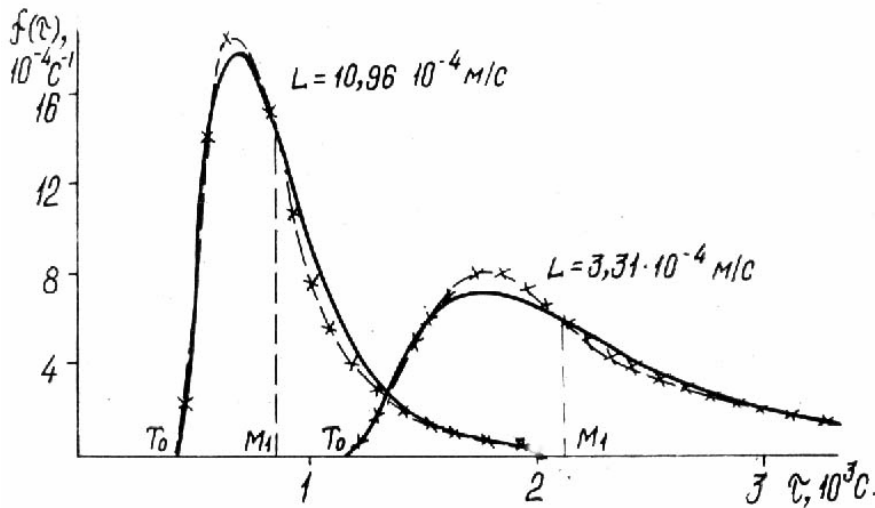
ცხრილი 4.2.2 ნაკადების სტრუქტურის იდენტიფიკაციის შედეგები სხვადასხვა კონსტრუქციის აპარატებში.

| დასახელება | საწყისი მონაცემები, ნორმირებული 1 ტოლ მრუდის ფართობზე. | | | მოდელის პარამეტრები | | | მომენტები | |
|--------------------------------------|--|--------------------------|------------------------------|---------------------|------------------------|------|-----------------|--------------------|
| | τ_m , წმ | f_0 , წმ ⁻¹ | f_{max} , წმ ⁻¹ | m | A, წმ ⁻¹ | b | M[τ], წმ | σ_τ , წმ |
| მოდელური ობიექტი (ნახ. a) | 2550 | 0.32x 10 ⁻⁴ | 1.52x 10 ⁻⁴ | 3 | 3.4x 10 ⁻⁴ | 0.8 | 5400 | 3400 |
| ჭავჭავი მასაცვლის თევზი (ნახ. ბ) | 20 | 0 | 2.96x 10 ⁻² | 4 | 5.82x 10 ⁻² | 1 | 36 | 21 |
| წყობურიანი სვეტი (ნახ. ვ) | 170* | 0 | 2.88x 10 ⁻³ | 3 | 6.47x 10 ⁻³ | 1 | 283* | 180 |
| უჯრედული მოდელი (ნახ. რ) | 0.5 | 0.08 | 0.85 | 3 | 1.92 | 0.87 | 0.95 | 0.61 |
| სვეტური ელექტრო-კოაგულატორი (ნახ. დ) | 960 | 0.5x 10 ⁻⁴ | 6.63x 10 ⁻⁴ | 6 | 1.63x 10 ⁻³ | 0.65 | 1503 | 749 |
| პულსაციური სვეტი (ნახ. ე) | 0* | 0 | 4.43x 10 ⁻⁴ | 1 | 5.45x 10 ⁻⁴ | 1 | 1835* | 1835 |

* მნიშვნელობები მოცემულია წანაცვლების დროის τ_0 გარეშე.



ნახ. 4.2.3 ნაკადების სტრუქტურის სხვადასხვა მოდელებისთვის დამახასიათებელი გამომავალი მრუდები: 1-იდეალური შერევა, 2-იდეალური გამოდევნა (დირაკის δ -ფუნქცია), 3-უჯრედული მოდელი ($n=6$), დიფუზიური მოდელი ($Pe=12$), 4-განაწილების სპეციალური ფუნქცია (4.2.1, $m=8$).



ნახ. 4.2.4 ექსპერიმენტული განაწილების მრუდები და მათი თეორიული აპროქსიმაციის მაგალითები. ცხრილი 4.2.3 ნაკადების სტრუქტურის ექსპერიმენტული კვლევის მონაცემების იდენტიფიკაცია.

| ნაკადის სიმკვრივე, 10^{-4} მ/წმ | დაყოფნ. დრო τ_0 , წმ | მათემატიკური ლოდინი* $M[\tau]$, წმ | საშ. კვ. გადახრა σ_{τ} , წმ | რიგი m | განაწ. კოეფ. A , 10^{-3} წმ | საშ. ცდომილება, % |
|-----------------------------------|---------------------------|-------------------------------------|---------------------------------------|----------|---------------------------------|-------------------|
| 3.31 | 1120 | 2226 | 672 | 3 | 1.66 | 3.5 |
| 4.08 | 931 | 1820 | 606 | 3 | 2.06 | 3.9 |
| 5.24 | 798 | 1527 | 478 | 3 | 2.51 | 3.8 |
| 9.56 | 456 | 977 | 325 | 3 | 3.52 | 2.7 |
| 10.96 | 418 | 873 | 304 | 3 | 4.02 | 2.3 |

* სრული მათემატიკური ლოდინი $M[\tau]$ განსაზღვრულია დაყოფნების დროის τ_0 გათვალისწინებით:
 $M[\tau] = \tau_0 + M[\tau]$

ექსპერიმენტული და თეორიული მონაცემების დამაკმაყოფილებელი დამთხვევა საშუალებას იძლევა გამოვიყენოთ ნაკადების სტრუქტურის იდენტიფიკაციის წარმოდგენილი მეთოდიკა საინჟინრო და კვლევით პრაქტიკაში, მათ შორის კრისტალური სუსპენზიის ნაწილაკების აპარატში დაყოფნების დროის მოდელირებისათვის.

5. ქიმიური და ფაზური გარდაქმნის პროცესების მაკროკინეტიკის მათემატიკური მოდელირება

5.1. ნაკადების სტრუქტურის გავლენა გარდაქმნის პროცესების მაკროკინეტიკაზე აპარატებში

საწარმოო აპარატებში გარდაქმნის პროცესების განხორციელება ქიმიური და ფაზური გარდაქმნების მიკროკინეტიკის მონაცემებთან ერთად მოითხოვს რიგი ფაქტორების გათვალისწინებას, როგორცაა კონსტრუქციული პარამეტრები, ნაკადების სტრუქტურა და სხვა. ამ პროცესების ერთობლიობა განსაზღვრავს ე.წ. პროცესების მაკროკინეტიკას.

გარდაქმნის პროცესების კინეტიკის მათემატიკური მოდელის სახით გამოყენებულია შემდეგი ფორმულა:

$$X(\tau) = G / G_{\max} = [1 - \exp(-K\tau)]^n \quad (5.1.1)$$

სადაც X გარდაქმნის ხარისხია τ დროის მომენტში, G , G_{\max} - მიმდინარე და მაქსიმალური გარდაქმნილი მასებია, K - სიჩქარის მუდმივაა, n - ინტენსივობის ფაქტორი, რომელიც ახასიათებს პროცესის კინეტიკის ფორმალურ რიგს.

მოცემული ფორმულით აღიწერება ქიმიური რეაქციების, ფაზური გარდაქმნების, რიგი მასაცვლის პროცესების (როგორცაა შრობა, მყარფაზური ექსტრაქცია), ბიოტექნოლოგიური პროცესების კინეტიკა, მათ შორის ისეთი პროცესებისა, რომლებიც ხასიათდებიან გარკვეული ინდუქციური პერიოდით და მათი მსვლელობა აისახება n -მაგვარი მრუდებით.

როგორც უკვე აღვნიშნეთ, ხშირად ნაკადების სტრუქტურას იდენტიფიკაციას ახდენენ ნაკადის ცალკეული ნაწილაკების აპარატში დაყოვნების დროის თეორიული ან ექსპერიმენტული შესწავლის გზით, მაგალითად, შემავალ ნაკადში იმპულსურად შეყვანილი რაიმე ნივთიერების (ინდიკატორის ანუ ტრასერის) მინარევის კონცენტრაციის დროში ცვლილების გამომავალი მრუდები აპარატის გამოსასვლელზე მიუთითებენ ნაკადის ცალკეული ნაწილაკების აპარატში გარკვეული დროით დაყოვნების ალბათობაზე (ალბათობის სიმკვრივეზე). ნაკადების სტრუქტურის მათემატიკური მოდელირებისა და იდენტიფიკაციისათვის სხვადასხვა კონსტრუქციის აპარატებში შეგვიძლია გამოვიყენოთ განაწილების ფუნქცია (4.2.1):

$$f(t) = mA \exp[-A(t - T_0)] \{1 - \exp[-A(t - T_0)]\}^{m-1} \quad (5.1.2)$$

სადაც A წარმოადგენს განაწილების ფუნქციის კოეფიციენტს, m განაწილების ფუნქციის განზომილების რიგს, T_0 წანაცვლების (დაგვიანების) დროს.

წინა თავში მოყვანილი იყო ნაკადების სტრუქტურის გამარტივებული მოდელების: იდეალური გამოდევნის $\delta(\tau)$ - ფუნქცია, იდეალური შერევის (4.1.1), უჯრედოვანი (4.1.7), გრძივი დიფუზიური (4.1.9) - შესაბამისი განაწილების ფუნქციები.

განაწილების ფუნქციის (5.1.2) გამოიყენებით დიდი სიზუსტით შეიძლება შესრულდეს თეორიული და ექსპერიმენტული მრუდების აპროქსიმაცია, ამასთან პარამეტრების ზღვრული მნიშვნელობებისთვის ავტომოდელურად შეესაბამება იდეალიზირებული მოდელებს ($m=1$, $T_0=0$ შეესაბამება იდეალური შერევის, $A \rightarrow 0$ კი იდეალური გამოდევნის მოდელს). განსაკუთრებით მოხერხებულია მისი გამოყენება იდეალურ გამოდევნასთან მიახლოებული ნაკადების სტრუქტურის რიცხვითი მოდელირებისათვის (მაშინ, როდესაც ფორმულის (4.1.7) გამოყენება გაძნელებულია).

გარდაქმნის პროცესების მაკროკინეტიკა შეიძლება გამოისახოს ინტეგრალური გარდაქმნის ხარისხით:

$$\bar{X} = \int_0^{\infty} f(\tau) X(\tau) d\tau \quad (5.1.3)$$

მოცემული ინტეგრალი წარმოადგენს ფიზიკურად მკაცრ მათემატიკურ მოდელს წრფივი (მაგ. პირველი რიგის რეაქციებისა და დიფუზიური) პროცესებისათვის, აგრეთვე სარეაქციო ფაზის სრული სეგრეგაციის შემთხვევაში ჰეტეროგენული სისტემებისათვის.

ზემოთმოყვანილი მათემატიკური მოდელების საფუძველზე ჩატარებულია სხვადასხვა პროცესების – მრავალსტადიანი ქიმიური რეაქციების, შრობის, მყარფაზური ექსტრაქციის, ანაერობული მიკრობიოლოგიური ფერმენტაციის, მასური კრისტალიზაციის მაკროკინეტიკის მათემატიკური მოდელირება. მიღებულია რიცხვითი და ანალიზური უნიფიცირებული საანგარიშო დამოკიდებულებანი გარდაქმნის ინტეგრალური ხარისხის საანგარიშოდ, ასევე მასური კრისტალიზაციის პროდუქტის გრანულომეტრიული შემადგენლობის პროგნოზირებისათვის. გამოყენებული მათემატიკური მოდელების მოქნილი სტრუქტურა უზრუნველყოფს მათემატიკური მოდელების თვისობრივ და რაოდენობრივ ადექვატურობას რეალურ პროცესებთან.

ქვემოთ მოყვანილია რიგი პროცესების მაკროკინეტიკის მათემატიკური მოდელირების მაგალითები.

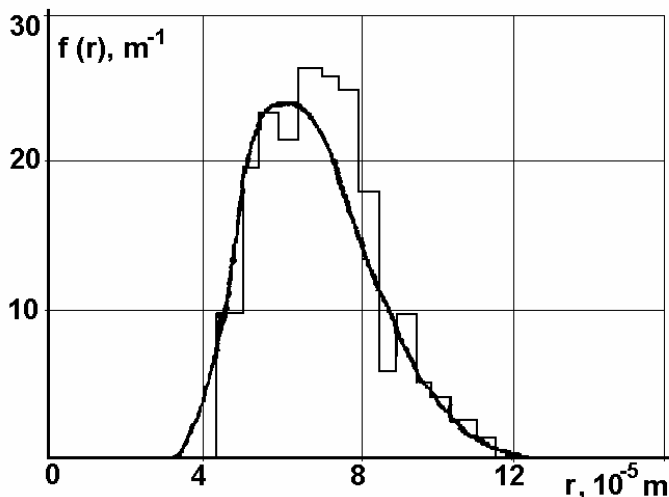
5.2 მასური კრისტალიზაცია.

კრისტალების ზრდის კინეტიკის განტოლებისა და განაწილების ფუნქციის (5.1.2) ერთობლიობა იძლევა კრისტალების ზომების მიხედვით განაწილების ფუნქციას:

$$f(x) = ma \exp(-A\tau)(1-x)^{a-1} [1 - (1-x)^a \exp(-A\tau)]^{m-1} \quad (5.2.1)$$

სადაც: $x = r/r_{\max}$; $a = A/K$; $\tau = t - M[t]$

ნახაზზე 5.2.1 მაგალითის სახით წარმოდგენილია მათემატიკური მოდელირებით გამოთვლილი კრისტალების ზომების მიხედვით განაწილების თეორიული ფუნქცია და შესაბამისი ექსპერიმენტული ჰისტოგრამა ლლობილის წინააღმდეგობით კრისტალიზაციის პროცესში.



ნახ. 5.2.1 მათემატიკური მოდელირებით გამოთვლილი კრისტალების ზომების მიხედვით განაწილების თეორიული ფუნქცია და შესაბამისი ექსპერიმენტული ჰისტოგრამა

თეორიული ფორმულის საფუძველზე გამოითვლება კრისტალების ზომების მიხედვით განაწილების ფუნქციის მომენტები, პროცესის ზოგადი კინეტიკა და გრანულომეტრიული შემადგენლობის დამახასიათებელი პარამეტრები.

კრისტალური მასის ზოგიერთი ინტეგრალური მახასიათებელი შეიძლება გამოისახოს განაწილების ფუნქციის საწყისი მომენტების M_i საშუალებით:

$$M_i = \int_0^{\infty} n(r)r^i dr; \quad (5.2.2)$$

$$\text{კრისტალების რიცხვი } N = M_0; \quad (5.2.3)$$

$$\text{კრისტალის საშუალო ზომა } \bar{r} = M_1 / N; \quad (5.2.4)$$

$$\text{კრისტალების წამური ზედაპირი } F = k_F M_2; \quad (5.2.5)$$

$$\text{კრისტალების წამური მასა } F = \rho k_V M_3. \quad (5.2.6)$$

საწარმოო პირობებში კრისტალური პროდუქტის გრანულომეტრულ შემადგენლობას ხშირად გამოსახავენ საცრული ანალიზის მრუდით, რომელიც ახასიათებს საცრის r ზომის ნასვრეტებში გასულ კრისტალების მასურ წილს:

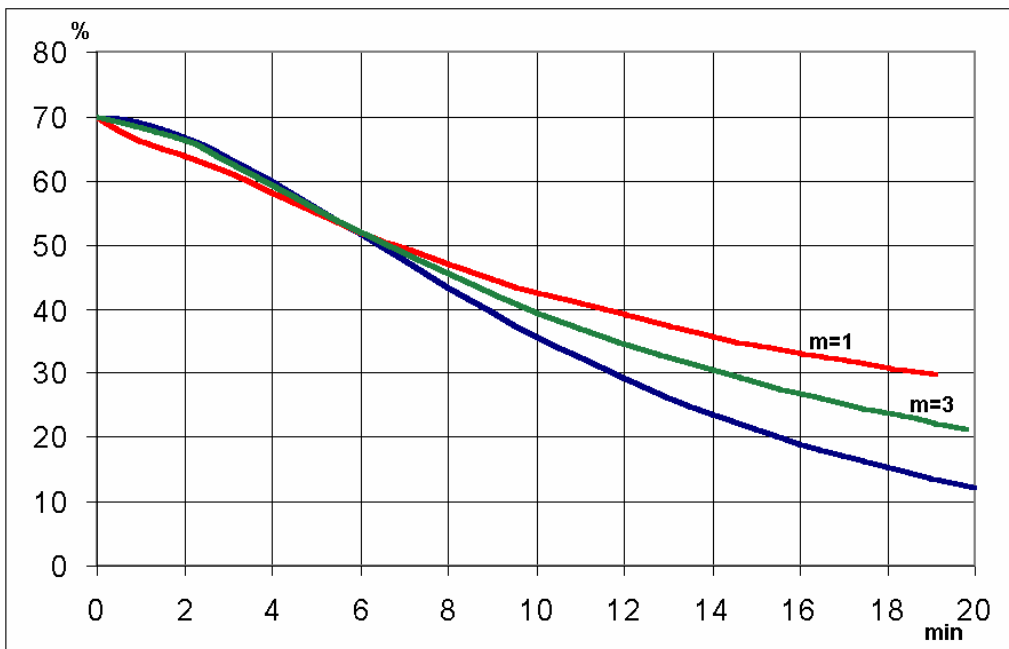
$$W(r) = 100\% \int_0^r n(r)r^3 dr / M_3 \quad (5.2.7)$$

კრისტალური პროდუქტის საშუალო მასურ ზომას ახასიათებს $r_{50\%}$ სიდიდე, ხოლო კრისტალების ზომების არათანაბრობას გამოსახავენ ვარიაციის კოეფიციენტით:

$$C.V. = 100\%(r_{84} - r_{16}) / 2r_{50} \quad (5.2.8)$$

5.3 მყარფაზური დიფუზია.

ნახაზზე 5.3.1 წარმოდგენილია მყარ ფაზაში დიფუზიური მასაცვლის პროცესის კინეტიკური მოდელი (შრობა, მყარფაზური ექსტრაქცია). ამ კლასის პროცესები მიმდინარეობენ სრული სეგრეგაციის რეჟიმში და გარდაქმნის ინტეგრალური მაკროკინეტიკა უწყვეტი ქმედების საწარმოო აპარატში გამოითვლება (5.1.3) განტოლებით. პროცესის კინეტიკური მათემატიკური მოდელის შესაბამისი მრუდი და უწყვეტი ქმედების იდეალური შერევის აპარატში განხორციელების მაკროკინეტიკის კომპიუტერული გაანგარიშების შედეგები მოყვანილია გრაფიკზე (უწყვეტი პროცესისათვის აბსცისა შეესაბამება აპარატში დაყოვნების საშუალო დროს, რომელიც განისაზღვრება აპარატის მუშა მოცულობით). ნაკადების სტრუქტურის მოდელად გამოყენებულია განაწილების ფუნქცია (5.1.2).



ნახ. 5.3.1 მყარფაზური დიფუზიური პროცესის მათემატიკური მოდელირება.

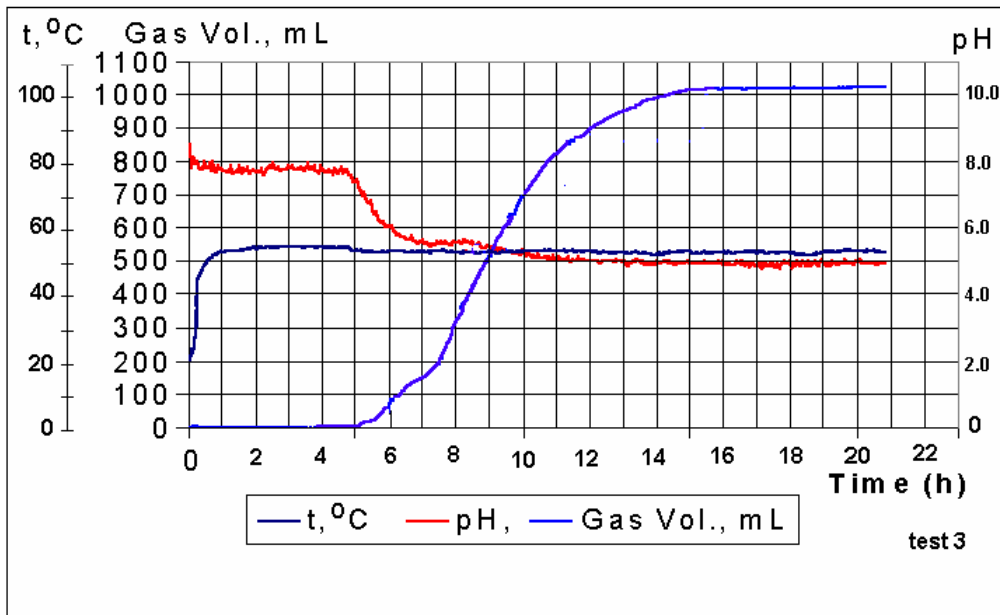
მოდელირების შედეგები გვიჩვენებენ ინტეგრალური გარდაქმნის ხარისხის შემცირებას იდეალური ($m=1$) და ნაწილობრივი ($m=3$) შერევის პირობებში.

5.4 ბიოტექნოლოგიური პროცესები.

მიკრობიოლოგიური ფერმენტაციის საწარმოო განხორციელებისა და მასშტაბური გადასვლის დროს პროცესის მიკროკინეტიკასთან ერთად დიდი მნიშვნელობა აქვს

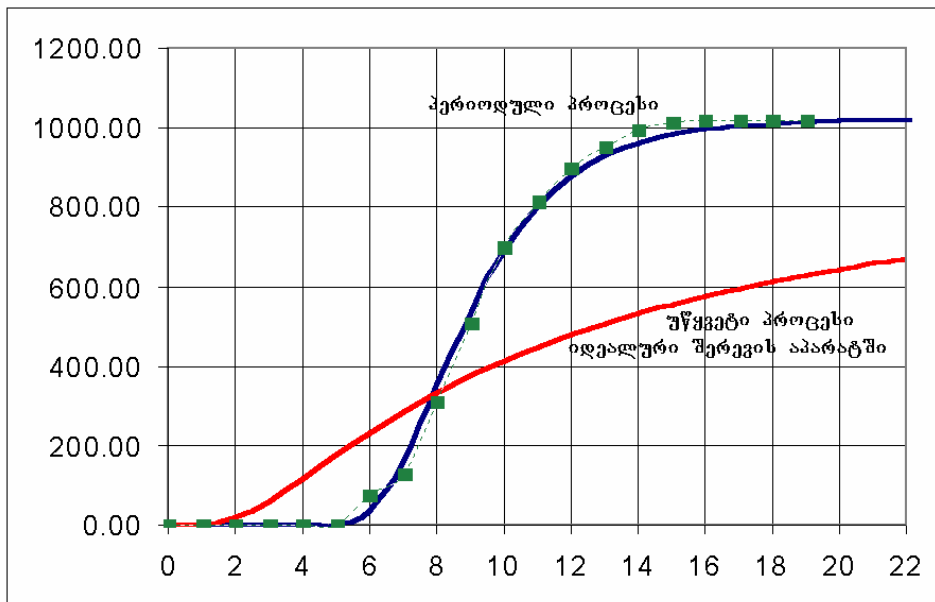
მაკროკინეტიკის გათვალისწინებას, პირველ რიგში ნაკადების ჰიდროდინამიკური სტრუქტურის გავლენის გათვალისწინებას უწყვეტი პროცესებისათვის.

ნახაზზე 5.4.1 მოყვანილია ბიომასის ანაერობული ფერმენტაციის ექსპერიმენტის კინეტიკის კომპიუტერული ჩანაწერი, რომელიც ასახავს პროცესის ტემპერატურის, pH ცვლილების და წყალბადშემცველი ბიოგაზის გამოყოფის კინეტიკას.



ნახ. 5.4.1 ბიომასის ანაერობული ფერმენტაციის ექსპერიმენტული კინეტიკა.

იმავე პროცესის კინეტიკური მათემატიკური მოდელის შესაბამისი მრუდი და უწყვეტი ქმედების იდეალური შერევის აპარატში განხორციელების მაკროკინეტიკის კომპიუტერული გაანგარიშების შედეგი მოყვანილია მე-5.4.2 ნახაზზე.



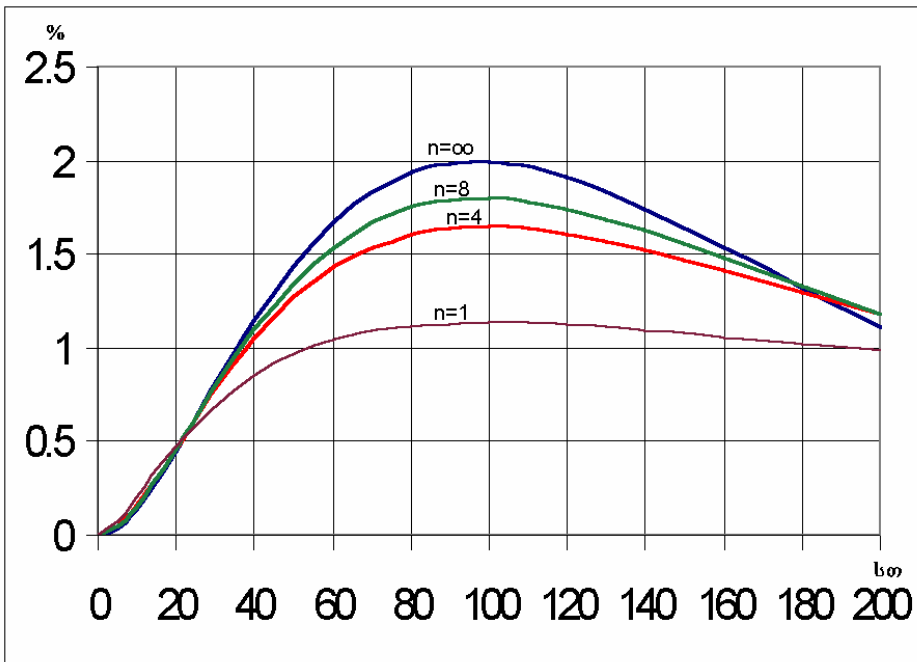
ნახ. 5.4.2 ბიოწყალბადის გამოყოფის მაკროკინეტიკის მათემატიკური მოდელირება

როგორც ვხედავთ, პროცესის ინტეგრალური გამოსავალი საგრძნობლად მცირდება პროცესის უწყვეტი განხორციელებისას შერევის აპარატში, თუმცა მხედველობაშია მისაღები პროცესის აჩქარება პროცესის დასაწყისში. ამ ეფექტით მართლაც სარგებლობენ ბიოტექნოლოგიური პროცესების ინტენსიფიკაციისათვის საწყის სტადიებზე, როდესაც მიკრობიოლოგიური პროცესების კინეტიკა ხასიათდება საგრძნობი

ინდუქციური პერიოდით, მაგალითად სპირტული დუდილის დროს საფუარის სათესი მასალის მომზადებისას.

კიდევ უფრო მნიშვნელოვანია შერევის ეფექტი უწყვეტი ქმედების აპარატებში ისეთი პროცესების მსვლელობისას, როდესაც მიზნობრივი პროდუქტის გამოსავალი ხასიათდება მაქსიმუმით დროში, რის შედეგაც ხდება მისი დეგრადაცია და კონცენტრაციის შემდგომი შემცირება. ასეთი ეფექტით ხასიათდება ეთანოლის მიღება კონსოლიდირებული ანაერობული ფერმენტაციის მეთოდით.

ნახაზზე 5.4.3. წარმოდგენილია აღნიშნული პროცესის სააპროქსიმაციო ფორმალური კინეტიკური მოდელის შესაბამისი კომპიუტერული გაანგარიშების შედეგები უჯრედული მოდელის თანახმად.



ნახ. 5.4.3. კონსოლიდირებული ანაერობული ფერმენტაციის მეთოდით ეთანოლის მიღების მაკროკინეტიკის მათემატიკური მოდელირება

მრუდი $n=\infty$ შეესაბამება იდეალური გამოდევნის აპარატს ან პერიოდულ პროცესს, როდესაც 4 დღეში მიიღწევა ეთანოლის მაქსიმალური კონცენტრაცია 2%. როგორც ვხედავთ, 8 შერევის აპარატისგან შედგენილი კასკადის გამოყენების შემთხვევაშიც კი საგრძნობლად მცირდება ეთანოლის გამოსავალი.

მოდელირების შედეგები უჩვენებენ ნაკადების სტრუქტურის ადეკვატური მოდელის გამოყენების მნიშვნელობას და აუცილებლობას რეალური ტექნოლოგიური პროცესების მაკროკინეტიკის ანალიზისა და გაანგარიშებისათვის.

მათემატიკური მოდელირების მოცემული მეთოდი შეიძლება გამოყენებული იქნას საინჟინრო პრაქტიკაში ქიმიური, მასაცვლის, ფაზური გარდაქმნის, მიკრობიოლოგიური პროცესების ანალიზისთვის, მასშტაბური გადასვლებისათვის საწარმოო მასშტაბის აპარატების გაანგარიშებისა და პროექტირებისას. აპარატში ნაკადების სტრუქტურის შესწავლა და გათვალისწინება მნიშვნელოვანია ტექნოლოგიური პროცესების მართვისათვის. მართვის სისტემების დამუშავებისათვის განსაკუთრებით გასათვალისწინებელია ის, რომ გამოყენებული მათემატიკური მოდელის საშუალებას იძლევიან განისაზღვროს როგორც შესასწავლი ობიექტის სტატიკური (სტაციონარული) მახასიათებლები, ასევე დინამიური გარდამავალი მახასიათებლები შემომავალი სარეაქციო ფაზის ნაკადის შემფოთებაზე.

6. სითბოგადაცემის პროცესების კომპიუტერული მოდელირება

6.1 სითბოგადაცემის საფუძვლები.

სხვადასხვა ტემპერატურის სხეულებს შორის ენერგიის გადატანას სითბოს ფორმით ეწოდება თბოცვლა, თბოცვლაში მონაწილე სხეულებს კი თბომატარებლები.

სითბოგადაცემა მეცნიერებაა სითბოს გავრცელების პროცესების შესახებ. ცნობილია სითბოს გავრცელების სამი ძირითადი ელემენტარული გზა:

თბოგამტარობა წარმოადგენს სითბოს გადატანას უშუალო შეხებაში მყოფი მიკრონაწილაკების თბური მოძრაობის (მათ შორის რხევითი) შედეგად.

კონვექციის დროს სითბო გადაეცემა სითხეების მაკროსკოპული მოცულობების მოძრაობის ან შერევის შედეგად.

თბური გამოსხივებისას სითბოს გადაცემა ხდება ელექტრომაგნიტური ტალღების გამოსხივებისა და შთანთქმის გზით.

რეალურად სითბო გადაეცემა კომბინირებული გზით.

სითბოს ცვლას კედელსა და არეს შორის უწოდებენ თბოგადაცემას, ხოლო ორ არეს შორის გამყოფი კედლის გავლით – თბოგადაცემას.

თბომცვლელი აპარატურის გაანგარიშება მოიცავს:

1) სითბური ნაკადის განსაზღვრას თბური ბალანსის შედგენისა და ამოხსნის გზით.

თბური ბალანსის განტოლება ჩაიწერება თბომატარებლების მასური ხარჯებისა და ენტალპიების (თბომცვლელობების) მიხედვით. თუ უგულებელვყოფთ თბურ დანაკარგებს (რომლებიც თბოიზოლირებული აპარატებისათვის არ აღემატება 3-5%), შეიძლება ჩავწეროთ:

$$Q = G_1(I_{10} - I_{1K}) = G_2(I_{2K} - I_{20}) \quad (6.1.1)$$

ინდექსით 1 აღნიშნულია უფრო თბილი, ხოლო 2-ით უფრო ცივი თბომატარებლების მხარე. 0 და K შესაბამისად აღნიშნავენ საწყის და საბოლოო მნიშვნელობებს.

თუ თბოცვლა მიმდინარეობს ნივთიერებათა აგრეგატულ მდგომარეობათა ცვლილების გარეშე, თბური ბალანსის განტოლებაში ენთალპიები გამოისახება საშუალო თბოტევადობებისა და ტემპერატურების საშუალებით:

$$Q = G_1 c_1 (t_{10} - t_{1K}) = G_2 c_2 (t_{2K} - t_{20}) \quad (6.1.2)$$

თუ სითბოგადაცემის პროცესში ხდება აგრეგატული მდგომარეობის ცვლილება ან რაიმე სითბური ეფექტი, ხდება მათი გათვალისწინება. მაგ. გადახურებული ორთქლის ენთალპიის ცვლილება უნდა გამოისახოს ორთქლის გაცივების, ორთქლადქცევის r სითბოსა და კონდენსატის გაცივების სითბოებით:

$$Q = G \cdot c_{\text{ორთ.}} (t_0 - t_{\text{ნაჯ.}}) + G \cdot r + G \cdot c_{\text{კონდ.}} (t_{\text{ნაჯ.}} - t_K) \quad (6.1.3)$$

2) თბოცვლის ფართის გამოთვლას, რომელიც დამოკიდებულია თბოგადაცემის სინქარეზე და იანგარიშება სითბოგადაცემის ძირითადი განტოლებიდან.

$$Q = K \cdot F \cdot \Delta T_{\text{საშ.}} \cdot \tau \quad (6.1.4)$$

K - თბოგადაცემის კოეფიციენტია [კვ/მ²·°C], F -თბოცვლის ფართია [მ²], $\Delta T_{\text{საშ.}}$ - თბომატარებლებს შორის ტემპერატურათა საშუალო სხვაობაა.

შესაფერისი თბომცვლელი აპარატების გაანგარიშება და კონსტრუირება წარმოადგენს ენერგოეფექტურობის ერთ-ერთ მთავარ ამოცანას.

6.2. კომპიუტერული მოდელი

დამუშავებულია კომპიუტერული მოდელი, რომელიც იძლევა თბომცვლელ აპარატში თბოცვლის პროცესის გაანგარიშების საშუალებას.

გამოყენებული მათემატიკური მოდელი ეფუძნება ორფაზა სისტემაში სტაციონარული თბო-მასაცვლის დიფერენციალურ განტოლებათა სისტემას თითოეული ნაკადის იდეალური გამოდევნის რეჟიმისათვის:

$$-w_m \frac{dU_m}{dt} = K_m (U_m - U_s) \quad (6.2.1)$$

$$w_s \frac{dU_s}{dt} = K_s (U_m - U_s)$$

$$\text{სადაც: } K_m = \frac{LK}{\rho_m c_m S_m}, \quad K_s = \frac{LK}{\rho_s c_s S_s};$$

U აღნიშნავს ზოგადად პოტენციალებს (თბოცვლის პროცესებისათვის ტემპერატურებს t), w_m, w_s - ნაკადების სიჩქარეებს, m, s ინდექსები შესაბამისად აღნიშნავენ მაღალი და დაბალი პოტენციალების ფაზებს. ρ წარმოადგენს შესაბამისი ფაზის სიმკვრივეს, c - თბოტევადობას, K - სითბოგადაცემის კოეფიციენტს, L - აღნიშნავს ფაზათა შორის კონტაქტის პერიმეტრს, S - შესაბამისი ფაზის განივი კვეთის ფართს.

კომპიუტერული მოდელი რეალიზებულია ელექტრონული ცხრილის სახით, რომელიც ინტუიტიურად გასაგებია შესაბამისი დარგის ინჟინერისთვის. საწყისი მონაცემების შეყვანილი მნიშვნელობებისათვის ხდება ყველა აუცილებელი გაანგარიშების განხორციელება. ელექტრონულ ცხრილში ხდება გეომეტრიული, ჰიდროდინამიკური, თბური პარამეტრების, გაანგარიშება, როგორებიცაა თითოეული ნაკადის განივი კვეთის ფართობი მილოვანი და მილთაშორის სივრცეებისათვის, კონტაქტის საშუალო პერიმეტრი, მილთაშორის სივრცის ექვივალენტური დიამეტრი d_e . თითოეული ფაზისათვის იანგარიშება ნაკადების სიჩქარეთა მნიშვნელობები w და ხორციელდება განმსაზღვრელი კრიტერიუმების (რეინოლდსის Re , პრანდტლის Pr , გრასჰოფის Gr) და განსასაზღვრელი ნუსელების კრიტერიუმის Nu გამოთვლა:

$$Re = \frac{wd\rho}{\mu} \quad (6.2.2)$$

$$Pr = \frac{\mu \cdot c}{\lambda} \quad (6.2.3)$$

$$Gr = \frac{gl^3 \rho^2 \beta \cdot \Delta t}{\mu^2} \quad (6.2.4)$$

$$Nu = \frac{\alpha \cdot l}{\lambda} \quad (6.2.5)$$

ნუსელების კრიტერიუმის გამოსათვლელად ორივე ფაზისათვის ჰიდროდინამიკური რეჟიმის მიხედვით ავტომატურად შეირჩევა საანგარიშო კრიტერიალური განტოლებები:

$$\text{(ტურბულენტური რეჟიმი, } Re > 1000) - \quad Nu = 0.023 Re^{0.8} Pr^{0.4} \quad (6.2.6.1)$$

$$\text{(გარდამავალი რეჟიმი, } 2320 < Re < 1000) - \quad Nu = 0.008 Re^{0.9} Pr^{0.43} \quad (6.2.6.2)$$

$$\text{(ლამინარული რეჟიმი, } Re < 2320) - \quad Nu = 0.17 Re^{0.33} Pr^{0.43} Gr^{0.1} \quad (6.2.6.3)$$

ნაჯერი ორთქლის კონდენსაციისას თბოგადაცემის კოეფიციენტის გამოსათვლელად გამოიყენება ფორმულა:

$$\alpha = 1.15 \cdot \sqrt[4]{\frac{\lambda^3 \rho^2 g \cdot r}{\mu \cdot \Delta t \cdot H}} \quad (6.2.7)$$

მიღებში დუდილის დროს თბოგადაცემის კოეფიციენტის საანგარიშოდ გამოიყენებულია ფორმულა:

$$\alpha = 2000 \left[\left(\frac{\rho}{\rho_w} \right)^2 \cdot \frac{c}{c_w} \cdot \frac{\mu_w}{\mu} \right]^{0.435} \cdot \left(\frac{\lambda}{\lambda_w} \right)^{0.536} \quad (6.2.8)$$

შესაბამისად გამოითვლება თბოგადაცემის კოეფიციენტები ორივე ფაზისათვის და იანგარიშება თბოგადაცემის კოეფიციენტი:

$$K = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2} + \frac{\delta}{\lambda_k}} \quad (6.2.9)$$

ფორმულებით, რომლებიც წარმოადგენენ სისტემის (1) ანალიზურ ამონახსნს, ხდება აპარატის სიგრძეზე ტემპერატურული პროფილის გაანგარიშება და მისი წარმოდგენა ცხრილებისა და შესაბამისი მრუდების სახით. ქვემოთ მოყვანილი

ფორმულები გამოსახვენ ტემპერატურების t_m , t_s განაწილებას მთობი მიღების გასწვრივ x კოორდინატის მიხედვით.

პარალელური ნაკადისათვის:

$$t_m = \frac{t_m^0 [\exp(A \cdot x) + p] + t_s^0 [\exp(A \cdot x) - 1]}{(p + 1) \exp(A \cdot x)} \quad (6.2.10.1)$$

$$t_s = \frac{t_m^0 [\exp(A \cdot x) - 1] + t_s^0 [p \cdot \exp(A \cdot x) + 1]}{(p + 1) \exp(A \cdot x)} \quad (6.2.10.2)$$

წინაღი ნაკადისთვის:

$$t_m = \frac{t_m^0 \{p \cdot \exp[B(H - x)] - 1\} + t_s^0 p \{\exp(B \cdot H) - \exp[B(H - x)]\}}{p \cdot \exp(B \cdot H) - 1} \quad (6.2.11.1)$$

$$t_s = \frac{t_m^0 \{\exp[B(H - x)] - p\} + t_s^0 \{p \cdot \exp(B \cdot H) - \exp[B(H - x)]\}}{p \cdot \exp(B \cdot H) - 1} \quad (6.2.11.2)$$

იზოთერმული "თბილი" თბომატარებლის შემთხვევისათვის:

$$t_m = t_m^0 = const$$

$$t_s = \frac{t_m^0 [\exp(C \cdot x) - 1] + t_s^0}{\exp(C \cdot x)} \quad (6.2.12)$$

სადაც: $A = \frac{K_m}{w_m} + \frac{K_s}{w_s}$, $B = \frac{K_m}{w_m} - \frac{K_s}{w_s}$, $C = \frac{K_s}{w_s}$, ხოლო $p = \frac{\rho_s c_s S_s w_s}{\rho_m c_m S_m w_m}$ წარმოადგენს

ფაზათა ფარდობის კოეფიციენტს.

თბომატარებელი ფაზების ფიზიკურ-ქიმიური პარამეტრების გამოთვლა, როგორებიცაა სიმკვრივე ρ , სიბლანტე μ , თბოტევადობის კოეფიციენტი c , თბოგამტარობის კოეფიციენტი λ , მოცულობითი გაფართოების კოეფიციენტი β , აორთქლების სითბო r ხორციელდება წინასწარ შეყვანილი საინტერპოლაციო ფორმულებით შესაბამისი ფაზის საშუალო ტემპერატურის მიხედვით. ვინაიდან თვით საშუალო ტემპერატურა განისაზღვრება გაანგარიშების შედეგად, ამ დროს რეალიზდება იტერაციული გამოთვლების ციკლი, რომელიც იყენებს ელექტრონული ცხრილის რეკურსიული გამოთვლების შესაძლებლობას, ვინაიდან თვით გამოთვლების თანმიმდევრობა წარმოდგენილი კრებადი ალგორითმით.

საწყისი მონაცემების შეყვანა ხდება მწვანე ფერით მონიშნულ (ნებადართულ) უჯრედებში, ხოლო შუალედური და მიზნობრივი ანგარიშის შედეგები განთავსებულია ღია წითელი ფერის (აკრძალულ) უჯრედებში. თბილი და ცივი ფაზების შესაბამისი პარამეტრები აღინიშნება წითელი და ლურჯი ფერის ტექსტით და ციფრებით.

საწყის მონაცემებს გამოთვლებისთვის წარმოადგენენ: თბომცველი აპარატის გეომეტრიულ-კონსტრუქციული პარამეტრები – თბომცველი მიღების სიგრძე H , მიღების გარე დიამეტრი d და კედლის სისქე δ , მიღების რიცხვი n , გარსაცმის შიდა დიამეტრი D , მილოვან სივცეში სვლათა რიცხვი, მიღების მასალის შესაბამისი თბოგამტარობის კოეფიციენტი λ_k აგრეთვე თბომატარებელი ფაზების საწყისი ტემპერატურები და ნაკადების ხარჯები.

ელექტრონული ცხრილი შედგება ოთხი სხვადასხვა ვარიანტის შესაბამისი ფურცლისგან, რომლებიც შეესაბამებიან ქვემოთაღმოთვლილ პროცესებს:

1. თბოცვლა გარსაცმშილოვან თბომცველში ორ თბომატარებელს შორის ფაზური მდგომარეობის ცვლილების გარეშე, პარალელური და წინაღი ნაკადების შემთხვევებში.

2. ცივი თბომატარებლის გათბობა გარსაცმშილოვან თბომცველის მილოვან სივცეში, მეორე ფაზის ნაჯერი ორთქლის კონდენსაციის პირობებში მილთაშორის სივცეში.

3. თბოცვლა გარსაცმშილოვან თბომცვლელში, როდესაც მილოვან სივრცეში მიმდინარეობს ერთი ფაზის ბუშტოვანი დუღილი, ხოლო მილთაშორის სივრცეში მეორე ფაზის ნაჯერი ორთქლის კონდენსაცია.

4. თბოცვლა კლანკილიან თბომცვლელში ორ თბომატარებელს შორის ფაზური მდგომარეობის ცვლილების გარეშე, პარალელური და წინაღი ნაკადების შემთხვევებში.

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M |
|----|---|---------|----------|----------|--------------|--------------|----------|----------|---------------|--------------|------------|------------|---|
| 1 | Моделирование процесса теплообмена в кожухотрубном теплообменнике | | | | | | | | | | | | |
| 2 | | | | | t ref. | Фаза | t нач. | μ, па.с | λ, Вт/м.К | β, 1/К | dz, м | | |
| 3 | Диаметр кожуха D | 0,6 | м | 82 | 1 | 100 | 0,000343 | 0,671 | 0,000678 | 0,021 | | | |
| 4 | Диаметр труб d | 0,025 | м | 47 | 2 | 20 | 0,000569 | 0,640 | 0,000451 | 0,028 | | | |
| 5 | Толщ. Стенки | 0,002 | м | | | | | | | | | | |
| 6 | Длина труб, Н | 6 | м | | 1 | Ходов | 63 | | | | | | |
| 7 | Число труб, n | 261 | Шаг: | 0,032 | м | 75 | | | | | | | |
| 8 | λ стенки, | 46,5 | Вт/(м.К) | F, м2 | 113,154 | | | | | | | | |
| 9 | Локализ. | фаза | Вещество | ρ, кг/м3 | с, Дж/(кг.К) | Расход, кг/с | L ср, м | S, м2 | Скорость, м/с | α, Вт/(м2.К) | Km, Кs 1/с | K1, K2 1/м | |
| 10 | | | | | | | | | | | | | |
| 11 | Тр.прост | 1 | Вода | 968 | 4190 | 4,50 | 18,859 | 0,090354 | 0,051 | 485 | 0,00933 | 0,18138 | |
| 12 | Мехтр. | 2 | Вода | 999 | 4190 | 3,00 | 18,859 | 0,1545 | 0,020 | 293 | 0,00534 | 0,27206 | |
| 13 | | | | | | | | | | | | | |
| 14 | Противоток | | | | | | Прямоток | | | | | | |
| 15 | | | | | | | | | | | | | |
| 16 | x, м | Lambda | T1 | T2 | | Lambda | T1 | T2 | | Re | Pr | Gr | |
| 17 | 0 | -0,5441 | 100,0 | 74,8 | | 0 | 100,0 | 20,0 | | 3045 | 2,14 | 4901557 | |
| 18 | 0,6 | -0,4897 | 97,2 | 70,5 | | 0,27206 | 92,4 | 31,4 | | 942 | 3,73 | 2811143 | |
| 19 | 1,2 | -0,4353 | 94,2 | 66,1 | | 0,54413 | 86,6 | 40,1 | | | | | |
| 20 | 1,8 | -0,3809 | 91,0 | 61,3 | | 0,81619 | 82,1 | 46,8 | | | | | |
| 21 | 2,4 | -0,3265 | 87,7 | 56,3 | | 1,08825 | 78,8 | 51,8 | | | | | |
| 22 | 3 | -0,2721 | 84,2 | 51,1 | | 1,36031 | 76,2 | 55,7 | | | | | |
| 23 | 3,6 | -0,2177 | 80,5 | 45,5 | | 1,63238 | 74,3 | 58,6 | | | | | |
| 24 | 4,2 | -0,1632 | 76,6 | 39,7 | | 1,90444 | 72,8 | 60,9 | | | | | |
| 25 | 4,8 | -0,1088 | 72,5 | 33,5 | | 2,1765 | 71,6 | 62,6 | | | | | |
| 26 | 5,4 | -0,0544 | 68,1 | 26,9 | | 2,44856 | 70,8 | 63,9 | | | | | |
| 27 | 6 | 0 | 63,5 | 20,0 | | 2,72063 | 70,1 | 64,8 | | | | | |
| 28 | | | 688306 | 688306 | Вт | | 563639 | 563639 | Вт | | | | |
| 29 | | | | | | | | | | | | | |
| 30 | | | | | | | | | | | | | |
| 31 | | | | | | | | | | | | | |
| 32 | | | | | | | | | | | | | |
| 33 | | | | | | | | | | | | | |
| 34 | | | | | | | | | | | | | |
| 35 | | | | | | | | | | | | | |
| 36 | | | | | | | | | | | | | |
| 37 | | | | | | | | | | | | | |
| 38 | | | | | | | | | | | | | |
| 39 | | | | | | | | | | | | | |
| 40 | | | | | | | | | | | | | |
| 41 | | | | | | | | | | | | | |
| 42 | | | | | | | | | | | | | |

ნახაზზე წარმოდგენილია ანგარიშის შედეგის საილუსტრაციო მაგალითი, რომელზეც მოყვანილია ელექტრონული ცხრილისა და შესაბამისი ტემპერატურული პროფილის კომპიუტერული ამონაბეჭდი გარსაცმშილოვან თბომცვლელში თბოცვლის პროცესის მოდელირების შედეგებით წინაღი და პარალელური ნაკადებისათვის.

ჩვეულებრივ, მოდელირების მიზანს წარმოადგენს აპარატის კონსტრუქციული პარამეტრებისა და რეჟიმების შერჩევა, რომლებიც უზრუნველყოფენ მიზნობრივ საბოლოო ტემპერატურათა და/ან თბური დატვირთვის მიღწევას.

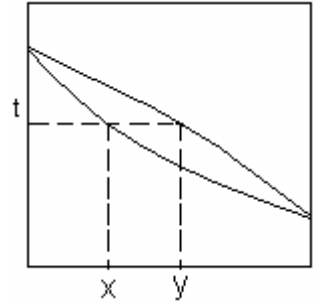
წარმოდგენილი კომპიუტერული მოდელი საშუალებას იძლევა განხორციელდეს თბომცვლელი აპარატების ჩვეულებრივ შრომატევადი საინჟინრო გაანგარიშება, შესაბამისი აპარატურულ-ეკონომიკური ოპტიმიზაცია ენერგოდამზოვი ტექნოლოგიური სქემების დამუშავებისას, მაგ. საწარმოო და საყოფაცხოვრებო ჩანადენი წყლების გაწმენდის ტექნოლოგიებში ფიზიკური სითბოს რეკუპერაციისა და უტილიზაციის განხორციელებისათვის საჭირო თბომცვლელი აპარატების გაანგარიშებისა და პროექტირებისათვის.

7. ეთილის სპირტის დისტილაციის მათემატიკური მოდელირება.

7.1 გამოხდის პროცესის საფუძვლები

სითხეების გამოხდა ზოგადად წარმოადგენს გასაყოფი ნარევის ნაწილობრივი აორთქლება-კონდენსაციის პროცესს, რომლის შედეგადაც იცვლება სითხის შემადგენლობა. ორთქლში გადადის შედარებით მეტი ადვილად აქროლადი კომპონენტი (დუღილის ნაკლები ტემპერატურით), დარჩენილი სითხე კი მდიდრდება ძნელად აქროლადი კომპონენტით (დუღილის მაღალი ტემპერატურით). ამ სითხეს ეწოდება ნარჩენი, ხოლო ორთქლის კონდენსატს – დისტილატი ან რექტიფიკატი. მარტივი გამოხდის დროს ხდება თხევადი ნარევის ერთჯერადი ნაწილობრივი აორთქლება-კონდენსაცია. რექტიფიკაცია კი აქროლადი სითხეების ნარევის გაყოფის პროცესია არაწონასწორულ თხევად და ორთქლის ფაზებს შორის ორმხრივი მასა- და თბოცვლის გზით. იგი ჩვეულებრივ ხორციელდება სვეტურ აპარატებში ფაზათა კონტაქტის გზით. სვეტის ზედა ნაწილიდან გამომავალი ორთქლის კონდენსატი იყოფა პროდუქტად (დისტილატად) და ფლეეგმად, რომელიც ბრუნდება სვეტის მოსარწყავად. სვეტის ძირიდან ჩამონადენი სითხის ნაწილი ორთქლდება ორთქლის აღმავალი ნაკადის მისაღებად.

ფაზათა წესის თანახმად ორკომპონენტიანი სისტემის თავისუფლების ხარისხია 2, ე.ი. 3 დამოუკიდებელი ცვლადიდან: t , p და ერთ-ერთი ფაზის კონცენტრაცია, შეიძლება შევარჩიოთ ნებისმიერი ორი, ამ დროს მესამე პარამეტრი განისაზღვრება ცალსახად. ასეთ დამოკიდებულებას გამოსახავენ ფაზური დიაგრამებით.



ერთმანეთში შეუზღუდავად ხსნადი სითხეების იდეალური ხსნარები ემორჩილებიან რაულის კანონს – თვითოეული კომპონენტის პარციალური წნევა პროპორციულია სითხეში ამ კომპონენტის მოლური წილის, ამასთან პროპორციულობის კოეფიციენტი ტოლია ამ კომპონენტის ნაჯერი ორთქლის წნევისა მოცემულ ტემპერატურაზე.

$$p_A = P_A x_A \tag{7.1.1}$$

$$p_B = P_B (1-x_A) \tag{7.1.2}$$

$$p_A + p_B = P \tag{7.1.3}$$

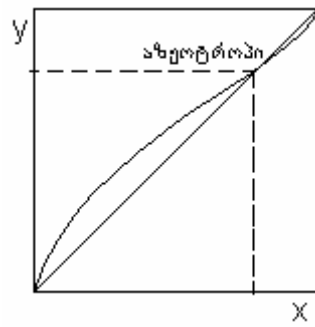
$$p_A = P y_A \tag{7.1.4}$$

$$y_A^* = (P_A/P) x_A \tag{7.1.5}$$

ნახაზზე გამოსახულია t - x - y დიაგრამა. იდეალური ხსნარებისთვის:

$$y_A^* = \alpha x_A / [1 + (\alpha - 1) x_A] \tag{7.1.6}$$

$\alpha = P_A/P_B$ ნარევის კომპონენტების ფარდობითი აქროლადობაა.



რეალური ხსნარები არ ემორჩილებიან რაულის კანონს. გადახრა შეიძლება იყოს დადებითი და უარყოფითი. ზოგი ნარევისთვის გამოვლინდება თვისობრივად ახალი მოვლენაც, მაგ. ნარევის ზოგიერთ შემადგენლობას შეესაბამება იმავე შემადგენლობის ორთქლი. ასეთ ნარეებს ეწოდებათ ახეოტროპული (მაგ. ეთილის სპირტი – წყალი).

ერთმანეთში უხსნად სითხეებს გააჩნიათ თავისუფლების ერთი ხარისხი. ე.ი. თვითოეული კომპონენტის პარციალური წნევა არ არის დამოკიდებული მის შემცველობაზე ნარევი და ტოლია მისი ნაჯერი ორთქლის წნევისა მოცემულ ტემპერატურაზე.

ნარევის დუღილის მუდმივი ტემპერატურა ყოველთვის ნაკლებია სუფთა კომპონენტების დუღილის ტემპერატურებზე. ეს ეფექტი გამოიყენება წყალში უხსნადი ნივთიერებების გამოხდისას წყლის ორთქლით.

$$y_A = P_A/P; y_B = P_B/P \tag{7.1.7}$$

ერთმანეთში ნაწილობრივ ხსნადი სითხეების ნარევებში კონცენტრაციების გარკვეულ ზღვრებში ისინი წარმოქმნიან ერთმანეთში უხსნადი სითხეების ორ ფენას და იქცევიან როგორც ერთმანეთში უხსნადი სითხეები.

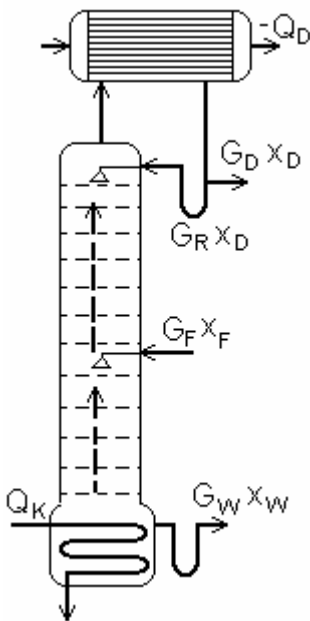
მარტივი გამოხდის განტოლებას აქვს სახე:

$$\ln(F/W) = \int_{x_w}^{x_f} dx/(y^*-x) \quad (7.1.8)$$

F საწყისი ნარევის, ხოლო W – კუბური ნარჩენის რაოდენობებია, x_w , x_f ადვილაქროლადი კომპონენტის კონცენტრაციებია.

დისტილატის საშუალო შემადგენლობა ტოლია:

$$x_D = (F \cdot x_f - W \cdot x_w)/(F - W) \quad (7.1.9)$$



უწყვეტი ქმედების სარექტიფიკაციო სვეტის მატერიალური

ბალანსი ჩაიწერება:

$$G_F = G_D + G_W \quad (7.1.10)$$

$$G_F \cdot x_f = G_D \cdot x_D + G_W \cdot x_w \quad (7.1.11)$$

ინდექსებით F, D, W აღნიშნავენ შესაბამისად კვების, დისტილატის და კუბური ნარჩენის ნაკადებს. თუ გამოვსახავთ ფარდობით ხარჯებს დისტილატის მიმართ:

$$F = G_F/G_D \quad (7.1.11)$$

$$W = G_W/G_D \quad (7.1.12)$$

$$R = G_R/G_D \text{ (ე.წ. ფლეგმის რიცხვი)} \quad (7.1.13)$$

შესაბამისად მატერიალური ბალანსი შეიძლება ჩაიწეროს:

$$F = 1 + W \quad (7.1.14)$$

$$F \cdot x_f = x_D + W \cdot x_w \quad (7.1.15)$$

სამუშაო ხაზის განტოლება სვეტის ზედა (გამამაგრებელი)

ნაწილისათვის:

$$y = x \cdot R/(R+1) + x_D/(R+1) \quad (7.1.16)$$

სვეტის ქვედა (ამომწურავი) ნაწილისათვის:

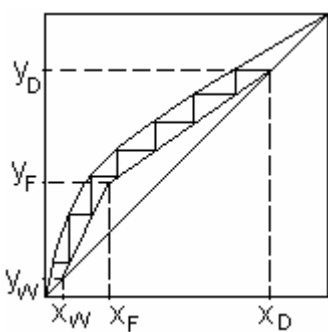
$$y = x \cdot (R+F)/(R+1) + x_w(F-1)/(R+1) \quad (7.1.17)$$

ფლეგმის მინიმალური რიცხვი R_{min} განისაზღვრება სამუშაო ხაზით, რომელიც შეეხება წონასწორობის მრუდს. ფლეგმის მუშა რიცხვს განსაზღვრავენ ფლეგმის სიჭარბის კოეფიციენტის ϕ მიხედვით:

$$R = \phi \cdot R_{min} \quad (7.1.18)$$

ხშირად იყენებენ საორიენტაციო ფორმულას:

$$R = 1.3 \cdot R_{min} + 0.3 \quad (7.1.19)$$



ეკონომიკურად ოპტიმალური ფლეგმის რიცხვის დასადგენად ითვალისწინებენ შესაბამისი აპარატების ზომებს, ენერჯისა და საექსპლუატაციო ხარჯებს.

პერიოდული რექტიფიკაციის დროს ხდება საწყისი ნარევის ჩატვირთვა კუბში და მისი გამოხდა. თუ პროცესი ტარდება ფლეგმის მუდმივი რიცხვისას, დისტილატის კონცენტრაცია თანდათან მცირდება (სამუშაო ხაზი პარალელურად გადაინაცვლებს ქვევით). პროდუქტის მუდმივი შემადგენლობის შესანარჩუნებლად თანდათანობით ზრდიან ფლეგმის რიცხვს (ამცირებენ პროდუქტის ართმევას). დიაგრამაზე სამუშაო ხაზი

მოხრუნდება x_D, y_D წერტილის გარშემო.

თბური ბალანსის საფუძველზე იანგარიშებიან დეფლეგმატორში ართმეული სითბოს რაოდენობა Q_D და კუბ-ამაორთქლებელში მიწოდებული სითბოს ხარჯი Q_K :

$$Q_D = G_D (1+R) r_D \quad (7.1.20)$$

$$Q_K = Q_D + G_D c_D t_D + G_W c_W t_W - G_F c_F t_F + Q_{დან} \quad (7.1.21)$$

სვეტის დიამეტრი იანგარიშება ორთქლის ფიქტიური სიჩქარის მიხედვით:

$$D = \sqrt{(4Q/\pi w_0)} \quad (7.1.22)$$

თეფშებიანი სვეტებისთვის ორთქლის სიჩქარის გაანგარიშება შეიძლება ფორმულით:

$$w = C \sqrt{[(\rho_L - \rho_G)/\rho_G]} \quad (7.1.23)$$

კოეფიციენტი C განისაზღვრება სპეციალური დიაგრამიდან თეფშებს შორის მანძილის h მიხედვით.

თეფშებიანი სვეტის სიმაღლის განსაზღვრა ხდება თეფშების რიცხვის მიხედვით, რისთვისაც გრაფიკული მეთოდით უნდა განისაზღვროს თეორიული თეფშების რიცხვი n_T სვეტის ორივე ნაწილისათვის ცალ-ცალკე (ე.წ. თეფშის მ.ქ.კ. η მიიღება 0.3...0.8):

$$H = h(n-1) = h(n_T/\eta - 1) \quad (7.1.24)$$

წყობურიან სვეტში წყობურის ფენის სიმაღლე ავსკური რეჟიმისათვის განისაზღვრება სვეტის ორივე ნაწილისათვის ცალ-ცალკე მასაგადაცემის კოეფიციენტის K_y ან ე.წ. გადატანის ერთეულთა n_{oy} რიცხვისა და გადატანის ერთეულის ექვივალენტური სიმაღლის h_{oy} მიხედვით. შედარებით მარტივად შეიძლება წყობურის ფენების სიმაღლეების განსაზღვრა თეორიული თეფშის ექვივალენტური სიმაღლის h_e და გრაფიკული მეთოდით განსაზღვრული თეორიული თეფშების რიცხვების მიხედვით სვეტის ცალკეული ნაწილებისათვის:

$$H = h_e \cdot n_T \quad (7.1.25)$$

წყობურის ექვივალენტური სიმაღლე ემულგირების რეჟიმში შეიძლება გამოითვალოს ფორმულით:

$$h_e/d_3 = 5.2 \cdot Re_G^{0.2} \cdot (G/L)^{0.35} \cdot (\rho_L/\rho_G)^{0.2} \cdot \lg(L/mG)/(1-mG/L) \quad (7.1.26)$$

გამოხდის სპეციალური ხერხები გამოირჩევიან რიგ სპეციფიკით:

ახეოტროპული რექტიფიკაციის დროს გასაყოფ ნარევს ემატება დამატებითი კომპონენტი (გამყოფი აგენტი), რომელიც საწყისი ნარევის ერთ ან რამდენიმე კომპონენტთან ქმნის ახეოტროპულ ნარევს, რომელიც სვეტიდან გამოიხდება. მაგ. ნარევს ეთილის სპირტი-წყალი უმატებენ ბენზოლს, ახეოტროპული ნარევის გამოხდის შემდეგ კუბში რჩება სუფთა ეთილის სპირტი.

ექსტრაქციული რექტიფიკაციისას გამყოფი აგენტი უნდა იყოს საწყისი ნარევის კომპონენტებზე უფრო ძნელადაქროლადი და არ უნდა წარმოქმნიდეს მათთან ახეოტროპებს. გამყოფი აგენტი სვეტიდან გაიყვანება კუბურ ნარჩენთან ერთად. მაგ. ბენზოლისა და ციკლოჰექსანის ნარევის გასაყოფად მას ემატება ფენოლი.

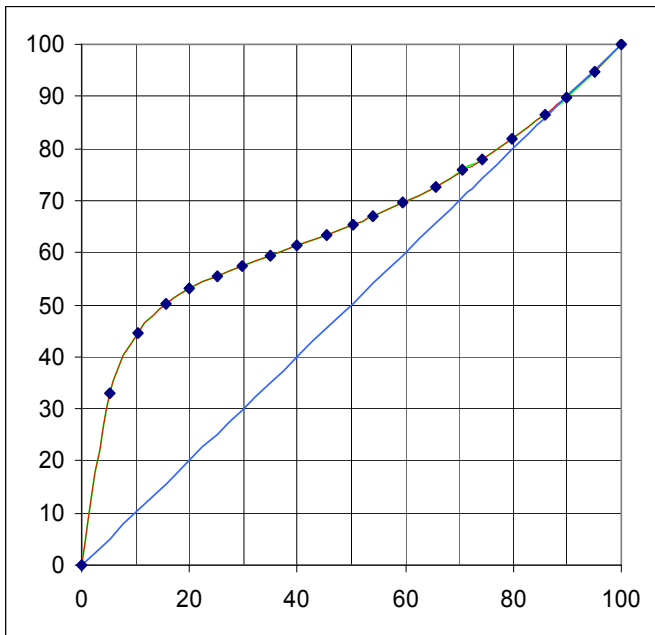
მოლეკულური დისტილაცია ხორციელდება ვაკუუმის ქვეშ, ამასთან აორთქლებისა და კონდენსაციის ზედაპირებს შორის მანძილი უნდა იყოს მოლეკულათა საშუალო განარბენის რიგის. გაყოფის ეფექტი განპირობებულია არა ფარდობითი აქროლადობით α (7.1.6) წონასწორობის პირობებში, არამედ ნარევის კომპონენტების აორთქლების სიჩქარეთა ფარდობით, რომელიც $\sqrt{(M_2/M_1)}$ –ჯერ მეტია. ეს ხერხი გამოიყენება ზოგიერთი ძვირფასი პროდუქტების (ძირითადად ბიოქიმიური) გამოსაყოფად, რომლებიც დუღილის დროს შეიძლება დაიშალონ.

დაბალტემპერატურული რექტიფიკაცია ხორციელდება გათხევადებული აირების (მაგ. ჰაერის) გასაყოფად დაბალი ტემპერატურისა და მაღალი წნევის პირობებში. პროცესის ძირითადი კანონზომიერებანი მსგავსია ზოგადად რექტიფიკაციისა. გაყოფა ხორციელდება ან ერთსვეტიან, ან ორსვეტიან აპარატებში, რომლებშიც ერთი სვეტი მუშაობს უფრო მაღალი წნევის პირობებში.

7.2. ეთილის სპირტის დისტილაციის კომპიუტერული მოდელირება

ეთილის სპირტის რექტიფიკაციის სვეტის გაანგარიშების რუტინული და შრომატევადი პროცესის გასაადვილებლად შედგენილია სპეციალური კომპიუტერულ პროგრამა, რომელიც საწყისი მონაცემების შეყვანის შემდეგ დიალოგურ რეჟიმში ატარებს საჭირო გაანგარიშებებს, მათ შორის გამოითვლის სპირტის წყალხსნარების ფიზიკურ თვისებებს და წონასწორობის მრუდს. სისტემაში ეთილის სპირტი-წყალი წონასწორობის კონცენტრაციის (მოლურ პროცენტებში) გამოსათვლელად გამოყენებულია ცხრილური მონაცემების შემდეგი სააპროქსიმაციო ფორმულა:

$$y = \frac{100 \cdot x}{x + \frac{100 - x}{\exp\left[\frac{2.543(89.41 - x)}{89.41 + 1.384}\right]}} \quad (7.2.1)$$



ნახაზზე წარმოდგენილია ეთილის სპირტის წონასწორული მრუდი, გამოთვლილი (7.2.1) ფორმულით და ცხრილური მონაცემები. სააპროქსიმაციო ფორმულა უზრუნველყოფს ზუსტ მნიშვნელობებს დიაგრამის საწყის და საბოლოო წერტილებში და აზეოტროპული შემადგენლობისათვის ($x=y=89.41\%$ მოლ.). საშუალო ცდომილება მთელს სამუშაო ინტერვალზე შეადგენს 0.06%, მაქსიმალური – 0.24%.

კონცენტრაციის ცვლილების საფეხურების რიცხვი იანგარიშება ანალიზურად და საილუსტრაციოდ აიგება შესაბამისი გრაფიკი. პროგრამა ანგარიშობს დავალებული პროცესის ჩასატარებლად შერჩეული წყობურიანი სვეტის თეორიული თეფშის ექვივალენტურ სიმაღლეს და ძირითად კონსტრუქციულ ზომებს.

პროგრამა სვეტის ძირითადი ზომების გარდა ანგარიშობს ენერჯისა და გამაცივებელი წყლის ხარჯებს, აგრეთვე დეფლექტატორისა და ამორთქლებლის თბოცვლის ფართობებს და სვეტის ჰიდრაულიკურ წინააღმდეგობას.

პროგრამის გაშვებისას საწყისი დიალოგის რეჟიმში მოითხოვება დისტილატის, კვებისა და კუბური ნარჩენის შესაბამისი კონცენტრაციების შეყვანას (წონით %-ში). პროგრამა გადაითვლის და გამოიყვანს მოლური და მოცულობითი კონცენტრაციებს. შემდგომ მოითხოვს ფლეგმის რიცხვის R მნიშვნელობის შეყვანას. მონიტორზე გრაფიკულად აისახება სპირტის ორთქლ-სითხის წონასწორული მრუდი, აგრეთვე სვეტის ზედა (გამამაგრებელი) და ქვედა (ამომწურავი) ნაწილების შესაბამისი მუშა ხაზები. თუ სამუშაო ხაზი კვეთავს ან ეხება წონასწორულს, პროგრამა გვაცნობებს, რომ შერჩეული ფლეგმის რიცხვი მინიმალურზე ნაკლებია და მოითხოვს ახალ მიშვნელობას. შემდეგ პროგრამულად განისაზღვრება კონცენტრაციის ცვლილების საფეხურები და აიგება ე.წ. მაკ-კეიბის დიაგრამა. გამოიყვანება საფეხურების რიცხვი ზედა და ქვედა ნაწილებისთვის. პროგრამა ციკლურად მოითხოვს ფლეგმის რიცხვის ახალი და ახალი მნიშვნელობების შეყვანას. სასურველი სიდიდის შერჩევის შემდეგ უნდა შევიყვანოთ 0 ან პირდაპირ დავაჭიროთ კლავიშას “Enter”.

დიალოგის შემდგომ ეტაპზე პროგრამა მოითხოვს დისტილატის მწარმოებლობას შეყვანას (ლ/დღ) და გვთავაზობს სტანდარტული ზომების რაშიგის რგოლების შერჩევას. თუ გვსურს სხვა ტიპის წყობურის გამოყენება, ვაჭერთ კლავიშას “Enter” და შეგვყავს მისი მახასიათებლები, გამოყოფილი მძიმეებით.

შემდგომ ეტაპზე პროგრამა გამოთვლის სვეტის ზედა და ქვედა ნაწილებში საშუალო შემადგენლობათა შესაბამისი ნარევის ფიზიკურ მახასიათებლებს და ფიქტიურ სიჩქარეთა რეკომენდირებულ მნიშვნელობებს, უმცირესი მნიშვნელობის მიხედვით გამოითვლება სვეტის დიამეტრი და პროგრამა გვთავაზობს დიამეტრის სტანდარტული მნიშვნელობის შეყვანას. შესაბამისი ფორმულით გამოითვლება თეორიული საფეხურების სიმაღლეები, ორივე ნაწილის და სვეტის სრული სიმაღლე.

შემდგომ იანგარიშება სვეტის ჰიდრაულიკური წინააღმდეგობა. თბური დატვირთვის მიხედვით მიახლოებით შეფასდება დეფლექტატორის თბოცვლის ფართიც.

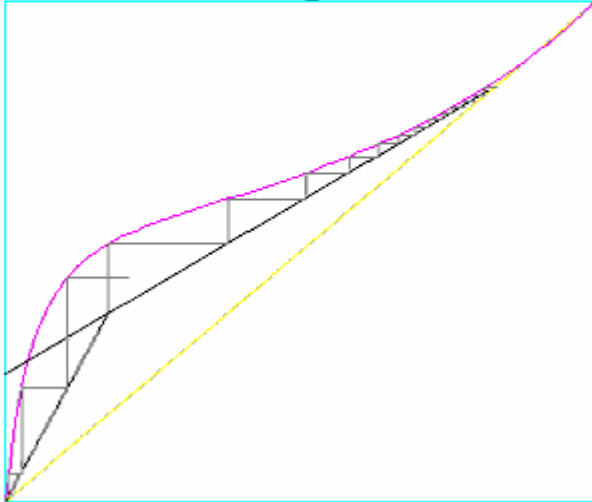
მუშაობის ბოლოს პროგრამა მოითხოვს დამთავრების ან მუშაობის გაგრძელების დადასტურებას.

პროგრამის გამოყენება მოხერხებულია ინჟინერ ტექნოლოგებისთვისაც, თუნდაც მათ არ გააჩნდეთ კომპიუტერთან მუშაობის განსაკუთრებული უნარები და გამოცდილება.

Computer engineering of Installation
for ethanol (wine spirit) distillation

Input concentrations of product, feed and waste (weight.%)
Cd,Cf,Cw - W%? 92,35,0.2

Xf=0.174 Xd=0.818 Xw=0.0008
Cf=35.0% Cd=92.0% Cw= 0.20%
Af=41.9%U Ad=94.7%U Aw= 0.25%U
R= 2.20 N1= 12.3 N2= 3.7 N= 16.0 Vef= 31.8
Reflux value R= [if 0 - quit]



Input productivity Vd, l/d? 5000

Choice Type of packung

| | | | |
|-----------|-------|-----|-----|
| 1 8X8X1.5 | 0.640 | 570 | 600 |
| 2 15X15X2 | 0.700 | 330 | 690 |
| 3 25X25X3 | 0.740 | 204 | 532 |
| 4 35X35X4 | 0.780 | 140 | 505 |
| 5 50X50X5 | 0.785 | 88 | 530 |

If Enter - another type!?

Density of product= 813 kg/m³

Product= 5000 l/d = 0.058 l/s = 0.047 kg/s = 1.15 mol/s

density of feed= 945 kg/m³

Feed= 11690 l/d = 0.135 l/s = 0.128 kg/s = 5.59 mol/s

Xf=0.174 Xd=0.818 Xw=0.0008

Cf=0.350 Cd=0.920

Stage number top = 16.0 Stage number bottom = 4.0 R= 2.20 F= 4.72

Mol masses: Md= 40.9 g Mf= 22.9 g

Heating Power= 149.0 kW Water = 0.067 kG/s

15X15X2 Free volume=0.700 Surface= 330.0 Rel Weight= 690

Velocity of vapor Wu=0.935 m/s Wd= 1.000 m/s W= 0.935

Column diameter D= 0.392 m? 0.4

VEP top=0.276 m VEP bottom=0.190 m

VETS top=0.303 m VETS bottom=0.170 m

Height top= 4.8 m Height bottom= 1.2 m H= 6.1 m

Volume Vcol= 0.8 m³ Packung mass= 525 kg

Re top= 1436 Re bottom= 648

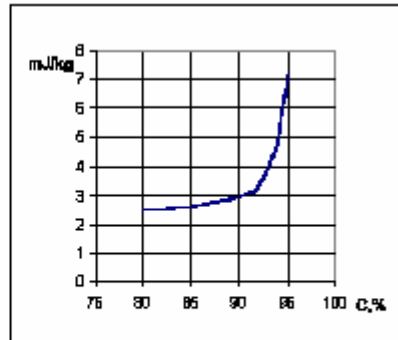
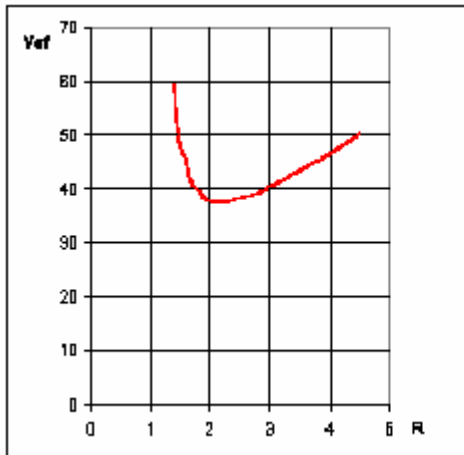
Hidr (Pa): top= 6566 bottom= 1257 all= 7823

Exgange surface of condenser= 11.0 m²

Continue (1=yes, 0=no)?

ზემოთ მოყვანილია კომპიუტერული ამონაბეჭდი შემდეგი მაგალითისთვის: უნდა გამოვთვალოთ ეთილის სპირტის სარექტიფიკაციო წყობურაიანი სვეტის ძირითადი ზომები. სვეტი განკუთვნილია 500 დლ/დღ 92%(წონ) პროდუქტის მისაღებად 35%(წონ) ხსნარიდან. სპირტის შემცველობა კუბურ ნარჩენში არ უნდა აღემატებოდეს 0.2%(წონ). წყობურად გამოყენებული უნდა იყოს კერამიკული რაშივის რგოლები ზომებით 15X15X2 მმ.

მოცემული პროგრამის გამოყენებით შესაძლებელია ეთილის სპირტის რექტიფიკაციის პროცესის გაანგარიშების, ანალიზისა და პროექტირების მეტად შრომატევადი სამუშაოების ოპერატიული ჩატარება და შესაბამისად ოპტიმიზაციის მთელი რიგი ამოცანების გადაჭრა.



ნახაზებზე მოყვანილია ხსენებული ოპტიმიზაციის ამოცანების საილუსტრაციო მაგალითები.

ერთ-ერთ ამოცანას ჩვეულებრივ წარმოადგენს ე.წ. ოპტიმალური ფლეგმის რიცხვის გამოთვლა (მარცხენა გრაფიკი). გამოყენებული კომპიუტერული პროგრამა ანგარიშობს აგრეთვე კრიტერიუმს **Vef**, რომელიც წარმოადგენს სვეტის სამუშაო მოცულობის პროპორციულ სიდიდეს და მისი შესაბამისი ფლეგმის რიცხვი შეესაბამება მინიმალური მოცულობის (ღირებულების) აპარატს. საინჟინრო პრაქტიკაში მიღებული ე.წ. ოპტიმალური ფლეგმის რიცხვი, რომელიც ითვალისწინებს აგრეთვე საექსპლუატაციო და ენერგოდანახარჯებს, პრაქტიკულად ემთხვევა მრუდის მინიმუმის მარცხენა არეს, რაც განპირობებულია მრუდის მარცხენა ტოტის ძლიერი ასიმპტოტური შეზღუდვით ფლეგმის მინიმალური რიცხვით.

მეორე ამოცანის მაგალითად წარმოდგენილია ენერგიის ეკონომიური ხარჯის გამოთვლა რექტიფიკაციის პროცესში. მაგალითად, დისტილატის დასაშვები კონცენტრაცია, რომლის მისაღებად არ არის საჭირო ენერგიის უმიზნო გადახარჯვა, პროდუქტის საბოლოო გაუწყლოების აპარატურული და ენერგო დანახარჯები კი პროპორციულია ნარჩენი წყლის შემცველობაზე.

პროცესის მატერიალური და ენერგეტიკული ბალანსებისა და კომპიუტერული მოდელირების საფუძველზე ჩატარებულია გამოთვლები ენერგიის თეორიული ხარჯის დასადგენად, სხვადასხვა შემცველობის საწყისი ხსნარების გამოყენების შემთხვევაში. ანაგარიშის შედეგები მოყვანილია ცხრილში.

ენერგიის ხარჯი 50%-იანი ნედლი სპირტის დისტილაციისთვის

| სპირტის ნარჩენი შემცველობა ბუეში: | % | 0,2 | | | |
|-------------------------------------|-------|-------------|------------|------------|------------|
| სპირტის შემცველობა ნაღულში | % | 2 | 4 | 6 | 8 |
| ენერგიის მინ. ხარჯი შეთბობით | მჯ/კგ | 27,8 | 13,8 | 9,4 | 7,1 |
| ენერგიის ოპტ. ხარჯი შეთბობით | მჯ/კგ | 30,3 | 15,1 | 9,9 | 7,2 |
| ენერგიის მინ. ხარჯი შეთბობის გარეშე | მჯ/კგ | 10,7 | 5,9 | 4,3 | 3,5 |
| ენერგიის ოპტ. ხარჯი შეთბობის გარეშე | მჯ/კგ | 13,3 | 7,2 | 4,8 | 3,7 |

როგორც ცხრილიდან მოჩანს, ფერმენტაციის პროცესში მიღწეული ეთილის სპირტის კონცენტრაციის გაზრდა განაპირობებს ენერგეტიკული დანახარჯების საგრძნობლად შემცირებას რექტიფიკაციის პროცესში.

8. ლღობილების კრისტალიზაციის მათემატიკური მოდელირება

ლღობილებიდან კრისტალიზაციის მათემატიკური მოდელის ჩამოყალიბებისას მნიშვნელოვან თავისებურებად მიჩნეულია ტოპოქიმიური ფაქტორების გავლენა, კერძოდ კრისტალების წარმოქმნისა და ზრდის პროცესში მათი ურთიერთშეზღუდვა სივრცეში.

8.1. შეზღუდულ სისტემებში კრისტალიზაციის კინეტიკის მათემატიკური მოდელის ჩამოყალიბება.

შეზღუდული სისტემების, კერძოდ ლღობილების კრისტალიზაციის კინეტიკას აღწერისათვის ხშირად სარგებლობენ განტოლებით რომელიც გამოსახავს კრისტალიზაციის ხარისხის M ცვლილებას დროში τ :

$$M(\tau) = 1 - \exp(-B\tau^k) \quad (8.1.1)$$

ან ლოგარითმული სახით:

$$\ln\{-\ln[1 - M(\tau)]\} = \ln(B) + k \ln(\tau) \quad (8.1.2)$$

განტოლება (8.1.1) წარმოადგენს ტრივიალურ ამონახსნს კოლმოგოროვის განტოლებისა, რომელიც ზოგადი სახით შეიძლება ჩაიწეროს:

$$M(\tau) = 1 - \exp\left\{-\int_0^\tau J(t) C_{F,V} \left[\int_t^\tau V(\theta) d\theta\right]^n dt\right\} \quad (8.1.3)$$

J წარმოადგენს კრისტალიზაციის ცენტრების წარმოქმნის (ნუკლეაციის) ინტენსივობას, V - კრისტალების ხაზოვანი ზრდის სიჩქარე, $C_{F,V}$ - კრისტალების ფორმის კოეფიციენტები, $n=1,2,3$ - სივრცის განზომილება.

დაშვებისას, რომ $J=\text{const}$, $V=\text{const}$, განისაზღვრება პარამეტრი B და ხარისხის მაჩვენებელი k (ანუ დახრილობა წრფივ დამოკიდებულებისთვის განტოლებიდან (8.1.2):

$$B = \frac{C_V J V^n}{n+1} \quad (8.1.4)$$

$$k = n+1 \quad (8.1.5)$$

ხოლო თუ ყველა N_m კვ ერთდროულად წარმოიქმნება პროცესის დასაწყისში, ნუკლეაციის ინტენსივობა გამოისახება დირაკის δ -ფუნქციით:

$$J = N_m \delta(\tau) \quad (8.1.6)$$

ხოლო $V=\text{const}$, გვექნება:

$$B = C_V N_m V^n \quad (8.1.7)$$

$$k = n \quad (8.1.8)$$

პრაქტიკაში, კოლმოგოროვის გამარტივებული განტოლების გამოყენებით ექსპერიმენტული მონაცემების თვისობრივი და რაოდენობრივი აპროქსიმაციის მცდელობა ხშირად წარმატებას ვერ აღწევს, მათ შორის არაიზოთერმული პროცესებისთვის, აგრეთვე მრავალკომპონენტურ სისტემებში, რომლებიც მგრძნობიარეა ზოგადად შემადგენლობის ცვლილებისადმი. ზოგადი სახის მოდელი (8.1.3) წარმოდგენილია ნახვევის ინტეგრალის სახით, მისი ამოხსნა მოითხოვს შემავალი პარამეტრების - ნუკლეაციის ინტენსივობისა J და კრისტალების ზრდის სიჩქარის V დროის ცხადი ფუნქციის სახით გამოსახვას.

შეზღუდული სისტემების კრისტალიზაციის პროცესის მათემატიკური მოდელი, რომელიც თავისი ფიზიკური არსით იდენტურია კოლმოგოროვის მოდელის, ჩამოყალიბებულია დიფერენციალურ განტოლებათა სისტემის სახით:

$$\frac{dN_U}{d\tau} = J \quad (8.1.9-1)$$

$$\frac{dL_U}{d\tau} = N_U \cdot V \quad (8.1.9-2)$$

$$\frac{dF_U}{d\tau} = 2C_F L_U \cdot V \quad (8.1.9-3)$$

$$\frac{dM}{d\tau} = 3 \frac{C_V}{C_F} F_U \cdot V(1-M) \quad (8.1.9-4)$$

სისტემის (8.1.9) ამოხსნისთვის საკმარისია კინეტიკური პარამეტრების, როგორც სისტემის რეალური ფიზიკური მდგომარეობის დამახასიათებელი პარამეტრების (ტემპერატურა, კონცენტრაცია, წნევა) ფუნქციების სახით გამოსახვა და შესაბამისი ბალანსური და სითბო- და მასაცვლის კინეტიკის მახასიათებელი განტოლებების შემოყვანა. ამასთან გამარტივებულია ანალიზური ამოხსნა ზოგიერთი შემთხვევისათვის.

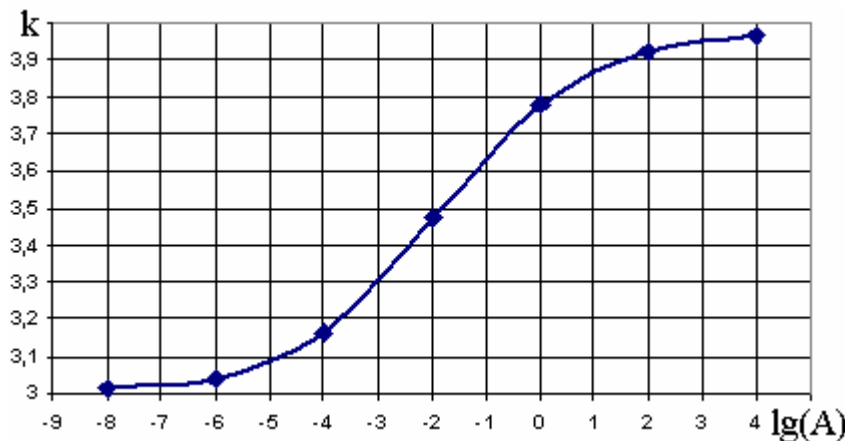
თუ დავუშვებთ, რომ ჰეტეროგენული ნუკლეაცია გარეშე ჩანართებზე ხდება არა ერთდროულად, არამედ წარმოადგენს პუასონის შემთხვევითი მოვლენების ნაკადს ალბათობით ν და კრისტალების ზრდის მუდმივი სიჩქარისთვის სისტემიდან (8.1.9) ვღებულობთ განტოლებას:

$$M(\tau) = 1 - \exp\left\{-C_V N_m V^n \left[\sum_{i=0}^{n-1} \frac{(-1)^i}{(n-i)! \nu^i} \tau^{n-i} + (-1)^n \frac{n!}{\nu^n} (1 - \exp(-\nu\tau)) \right]\right\} \quad (8.1.10)$$

განტოლების (8.1.10) მიხედვით შესრულებული გამოთვლების შედეგების ანალიზი გვიჩვენებს, რომ მათი წრფივი აპროქსიმაცია საკმაოდ სიზუსტით შესაძლებელია (8.1.2) ტიპის დამოკიდებულებით, ამ დროს დახრის კუთხის მახასიათებელი ემპირიული კოეფიციენტი k არ ემთხვევა სივრცის განზომილებას n . ნახაზზე 8.1.1 სამგანზომილებიანი სისტემისთვის წარმოდგენილია დახრილობის დამოკიდებულება პარამეტრზე A , რომელიც ახასიათებს კრისტალების ნუკლეაციის ინტენსივობისა და ზრდის სიჩქარის ფარდობას:

$$A = \frac{C_V N_m V^n}{\nu^n} \quad (8.1.11)$$

ნახაზზე 8.1.1 მოჩანს, რომ A პარამეტრის ზღვრული მნიშვნელობებისთვის k დახრილობა ასიმპტოტურად უახლოვდება მნიშვნელობებს 3 და 4 შესაბამისად.



ნახ. 8.1.1. წრფივი აპროქსიმაციის დახრილობის k დამოკიდებულება კრისტალების ნუკლეაციის ინტენსივობისა და ზრდის სიჩქარის ფარდობის მახასიათებელ A პარამეტრზე.

8.2. მრავალკომპონენტიანი სისტემების არაიზოთერმული კრისტალიზაციის კინეტიკის მათემატიკური მოდელირება.

სისტემის (8.1.9) საფუძველზე არაიზოთერმული მრავალკომპონენტიანი სისტემის კრისტალიზაციის კინეტიკის მათემატიკური მოდელი სამგანზომილებიანი სისტემისთვის ჩამოყალიბებულია დიფერენციალურ განტოლებათა სისტემის სახით:

$$\frac{dN_U}{d\tau} = J \quad (8.2.1-1)$$

$$\frac{dL_U}{d\tau} = N_U \cdot V \quad (8.2.1-2)$$

$$\frac{dF_U}{d\tau} = 2C_F L_U \cdot V \quad (8.2.1-3)$$

$$\frac{dM}{d\tau} = 3 \frac{C_V}{C_F} F_U \cdot V (1-M) \quad (8.2.1-4)$$

$$\frac{dT}{d\tau} = -K_m (T - T_s) + \frac{q}{c} \frac{dM}{d\tau} \quad (8.2.1-5)$$

$$\frac{dX_i}{d\tau} = \frac{1 - \alpha_i}{1 - M} X_i \frac{dM}{d\tau} \quad (8.2.1-6)$$

$$\frac{dN}{d\tau} = J \cdot (1 - M) \quad (8.2.1-7)$$

$$\frac{dL}{d\tau} = N \cdot V \cdot (1 - M) \quad (8.2.1-8)$$

$$\frac{dF}{d\tau} = 2C_F L \cdot V \cdot (1 - M) \quad (8.2.1-9)$$

F_U, L_U, N_U გამოსახვენ შესაბამისად კრისტალების ჯამურ ზედაპირს, სიგრძესა და რიცხვს შეუზღუდავი ზრდის პირობებში, F, L, N - შესაბამისად კრისტალების რეალური ზედაპირი, სიგრძე და რიცხვია, T, T_s - შესაბამისად სისტემისა და თბოცვლის არის (თერმოსტატის) ტემპერატურებია, K_m - თბოცვლის კოეფიციენტი ნიუტონის გაცივების კანონის შესაბამისად, q - ფაზური გარდაქმნის ხვედრითი სითბოა, c - სისტემის თბოტევადობაა, X_i, α_i - შესაბამისად i -ური კომპონენტის კონცენტრაცია და ფაზათა შორის განაწილების კოეფიციენტი. ნუკლეაციის ინტენსივობა $J(T, X_i)$ და კრისტალების ხაზოვან ზრდის სიჩქარე $V(T, X_i)$ შეიძლება გამოისახოს ნებისმიერი ცნობილი სახის ან ჰიპოთეტური ფუნქციებით.

მათემატიკური მოდელი მრავალკომპონენტური სისტემის კრისტალიზაციის კინეტიკის აღსაწერად, რომელიც ხასიათდება კრისტალიზებადი კომპონენტების შეზღუდული M_m რაოდენობით, ჰეტეროგენული ნუკლეაციის შემთხვევაში გამოისახება:

$$N = const \quad (8.2.2-1)$$

$$\frac{dL_U}{d\tau} = N_U \cdot K \frac{M_m - M}{1 - M} \quad (8.2.2-2)$$

$$\frac{dF_U}{d\tau} = 2C_F L_U \cdot K \frac{M_m - M}{1 - M} \quad (8.2.2-3)$$

$$\frac{dM}{d\tau} = 3 \frac{C_V}{C_F} F_U \cdot K (M_m - M) \quad (8.2.2-4)$$

აღნიშნული ამოცანის ზღვრულ შემთხვევას, როდესაც კრისტალიზებადი კომპონენტების შემცველობა იმდენად მცირეა, რომ, გეომეტრიულ-ალბათობრივი შეზღუდვა შესაძლებელია არ გავითვალისწინოთ, გამოსახავს კინეტიკური განტოლება:

$$0.5 \ln \left(\frac{1 + M^{1/3} + M^{2/3}}{(1 - M^{1/3})^2} \right) + \sqrt{3} \left[\arctan \left(\frac{2M^{1/3} + 1}{\sqrt{3}} \right) - \frac{\pi}{6} \right] = K_3 \sqrt{\frac{C_F^3}{C_V^2}} N \cdot \tau \quad (8.2.2.3)$$

აქ: $M = G/G_{\max}$.

ზოგადი სახის მათემატიკური მოდელის (8.2.1) გამოყენებისათვის საჭიროა დიფ. განტოლებათა სისტემაში რეალური პარამეტრებისა და ფუნქციონალური დამოკიდებულებათა გათვალისწინება.

ნახაზებზე 8.2.1-8.2.3 წარმოდგენილია მათემატიკური მოდელირების შედეგები ნუკლეაციისა და კრისტალების ზრდის კინეტიკის სხვადასხვა მექანიზმების შემთხვევაში.

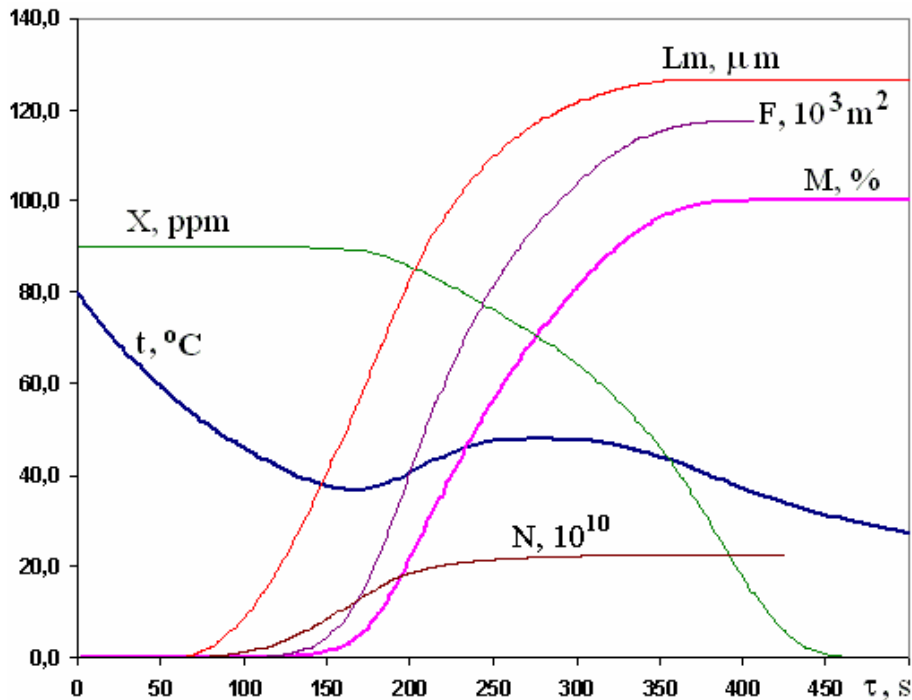
ნახაზზე 8.2.1 წარმოდგენილია არაიზოთერმული კრისტალიზაციის მოდელირების შედეგები, როდესაც ნუკლეაციის ინტენსივობა და კრისტალების ზრდის სიჩქარე გამოსახულია გავრცელებული დამოკიდებულებებით: $J \sim \Delta T^2$, $V \sim \Delta T$.

ნახაზზე 8.2.2 წარმოდგენილია მოდელირების შედეგები იგივე პირობებისთვის, დამატებითი დაშვებით, რომ ნუკლეაციის ინტენსივობა და კრისტალების ზრდის სიჩქარე ამავე დროს პროპორციულია ადვილად კრისტალიზებად კომპონენტის X კონცენტრაციისა: $J \sim \Delta T^2 \cdot X$, $V \sim \Delta T \cdot X$.

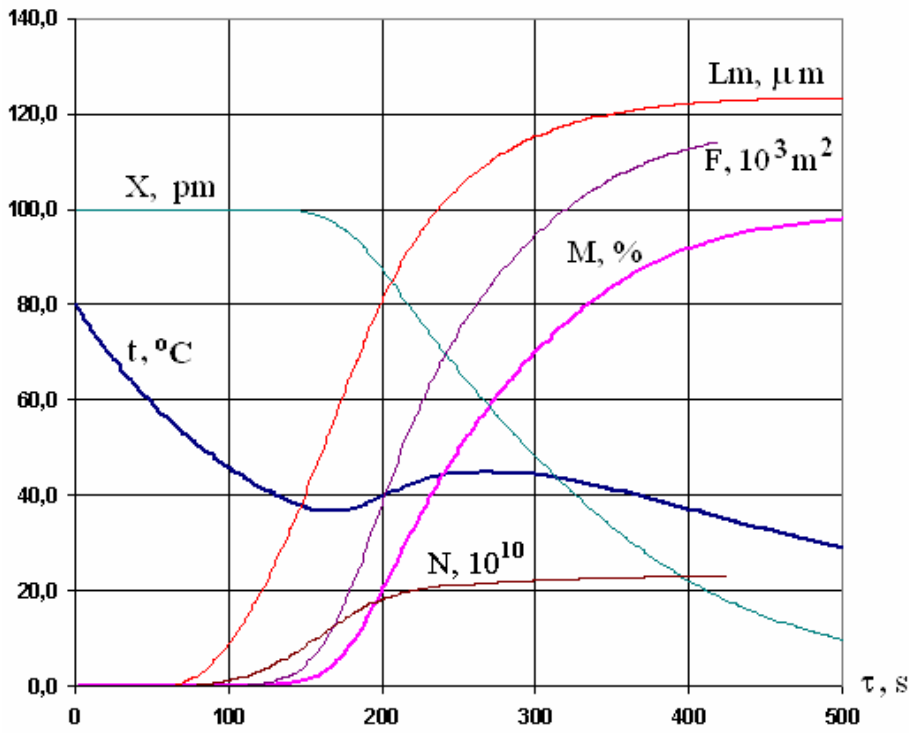
ნახაზზე 8.2.3 წარმოდგენილია მოდელირების შედეგები იგივე პირობებისთვის რაც ნახაზზე 8.2.1, დამატებითი დაშვებით, რომ ნუკლეაციის ინტენსივობა და კრისტალების ზრდის სიჩქარე ამავე დროს უკუპროპორციულად არის დამოკიდებული მინარევი კომპონენტის X კონცენტრაციაზე: $J \sim \Delta T^2 / X$, $V \sim \Delta T / X$.

ნახაზზე 8.2.4 ერთად არიან წარმოდგენილი ლოგარითმული კოორდინატებით გამოსახული კრისტალიზაციის კინეტიკის მრუდები სხვადასხვა შემთხვევებისთვის.

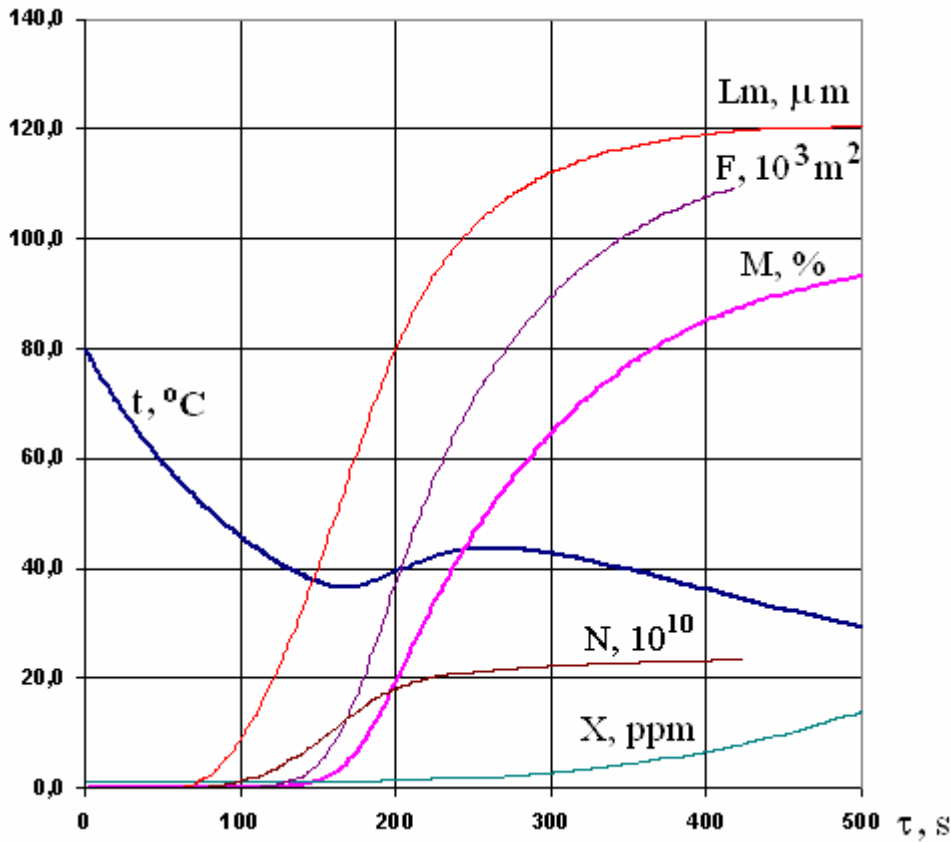
წარმოდგენილი მოდელი აღწერს კრისტალიზაციის პროცესის კინეტიკას, ტემპერატურის ცვლილებას თბოცვლის კინეტიკისა და პროცესის თბური ეფექტის გათვალისწინებით, აგრეთვე სისტემის კომპონენტების ფაზათა შორის გადანაწილებას კრისტალიზაციის პროცესში.



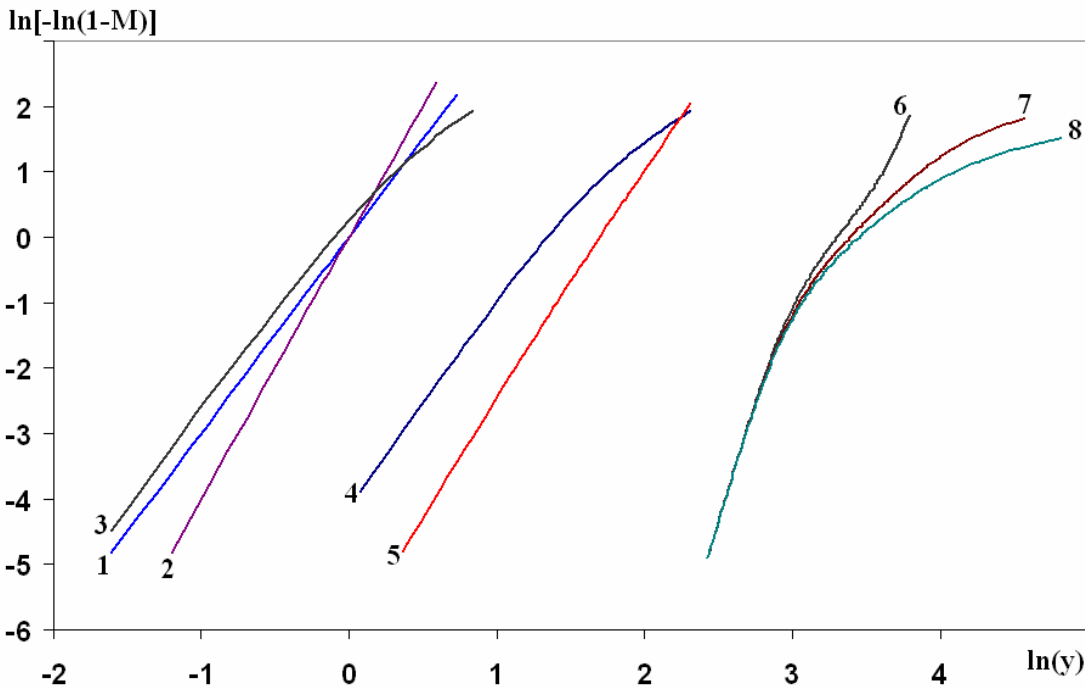
ნახ. 8.2.1. არაიზოთერმული კრისტალიზაციის მათემატიკური მოდელირების შედეგები დაშვებისას: $J \sim \Delta T^2$, $V \sim \Delta T$.



ნახ. 8.2.2. არაიზოთერმული კრისტალიზაციის მათემატიკური მოდელირების შედეგები დაშვებისას: $J \sim \Delta T^2 \cdot X$, $V \sim \Delta T \cdot X$.



ნახ. 8.2.3. არაიზოთერმული კრისტალიზაციის მათემატიკური მოდელირების შედეგები დაშვებისას: $J \sim \Delta T^2 / X$, $V \sim \Delta T / X$.



ნახ. 8.2.4. კრისტალიზაციის მათემატიკური მოდელირების შედეგები: 1,2-განტოლება (8.1.2); 3-სისტემა (8.2.2); 4-განტოლება (8.2.3); 5-განტოლება (8.1.10); 6,7,8-სისტემა (8.2.1)

კრისტალიზაციის პროცესის კინეტიკის სიმულაცია ადვილად ხორციელდება პრაქტიკულად ნებისმიერი დაშვებისათვის ნუკლეაციისა და კრისტალების ზრდის მექანიზმების შესახებ. ზოგიერთი გამარტივებული ანალიზური ამონახსნის მიხედვით ჩატარებული გამოთვლები განსაზღვრავენ მათი გამოყენების საზღვრებს, კერძოდ: განტოლებები (8.1.2) და (8.2.3) წარმოადგენენ სისტემის (8.2.2) ზღვრულ ამონახსნებს შესაბამისად $M_m=1$ და $M_m \rightarrow 0$ -თვის. M_m -ს სხვა მნიშვნელობისთვის, როგორცა $M_m=0.6$ (ნახ. 8.2.4, მრუდი 3) გრაფიკებს ექნებათ მათ შორის შუალედური ფორმა.

შესაძლებელია განტოლების (8.1.10) გამოყენებით მიღებული გამოთვლების შედეგების წრფივი აპროქსიმაცია, დახრილობის კუთხით, რომელიც იცვლება n -დან $n+1$ -მდე. კონცეფცია, რომელიც წარმოადგენს განტოლების (8.1.10) გამოყენების საფუძველს შეიძლება წარმოადგენდეს ექსპერიმენტული კინეტიკური მრუდების დახრილობის მთელი მნიშვნელობისგან განსხვავების ერთ-ერთ ახსნას.

მათემატიკური მოდელირების შედეგად ხდება სისტემის პარამეტრების ცვლილების კინეტიკის სრული აღწერა. მათ შორის ისეთი პარამეტრები, როგორებიცაა კრისტალების საერთო რიცხვი, ზედაპირის ფართობი, კრისტალების საშუალო ხაზოვან ზომა და მოცულობა ახასიათებენ პოლიკრისტალურ სტრუქტურას და ტექსტურას, რომელიც ფორმირდება სამგანზომილებიანი სისტემების ან ფირების კრისტალიზაციის პროცესში. მოდელი იძლევა მიზნობრივი მახასიათებლების მისაღწევად კრისტალიზაციის მსვლელობის ოპტიმალური თერმული რეჟიმის განსაზღვრისა და მართვის საშუალებას, ზოგადად გარდაქმნის პროცესებისათვის დამუშავებული მეთოდების ანალოგიურად.

მათემატიკური მოდელის გამოყენება შესაძლებელია როგორც ლლობილების, ასევე ხსნარებიდან კრისტალიზაციის პროცესების კინეტიკის აღწერისთვის, როდესაც არ ხდება ზრდადი კრისტალების ურთიერთშეზღუდვის გათვალისწინება. ამ შემთხვევაში კრისტალების სიმრავლის მახასიათებელ პარამეტრები ავტომოდელურად განისაზღვრებიან შესაბამისი სიდიდებით, რომლებიც დიფ. განტოლებათა სისტემაში წარმოადგენენ კრისტალების სიმრავლის ჯამურ მახასიათებლებს შეუზღუდავი ზრდის პირობებში.

9. ქიმიური რეაქციების მათემატიკური აღწერა

ქიმიური რეაქციების მათემატიკური აღწერა ეფუძნება სტექიომეტრიას, ქიმიურ წონასწორობას და კინეტიკას.

ოპტიმალური ტემპერატურული რეჟიმის მოდელირება შექცევადი ქიმიური რეაქციისთვის.
 აღნიშნული ამოცანის მიზანს წარმოადგენს ქიმიური რეაქციის მსვლელობისას ტემპერატურის ისეთი ცვლილების კანონზომიერების დადგენა, რომელიც უზრუნველყოფს გარდაქმნის მაქსიმალური სიჩქარეს მთელი პროცესის განმავლობაში. ასეთი მათემატიკური ამოცანის დასმა მიზანშეწონილია შექცევადი ეგზოთერმული ქიმიური რეაქციებისთვის, როდესაც ტემპერატურის გაზრდა ერთი მხრივ ზრდის რეაქციის სიჩქარეს, ხოლო მეორე მხრივ იწვევს წონასწორობის წანაცვლებას უკუ მიმართულებით. შექცევადი რეაქციის სიჩქარე შეიძლება აღვწეროთ განტოლებით:

$$v = \frac{dx}{d\tau} = C_0^{m-1} k_1(T) \left[(1-x)^m - \frac{1}{K_e(T)} C_0^{n-m} x^n \right] \tag{9.1}$$

სადაც C_0 საწყისი კონცენტრაციაა, $x=(C_0-C)/C_0$ - გარდაქმნის ხარისხია m, n - პირდაპირი და შექცევადი რეაქციების რიგებია, $K_e=k_1/k_2$ - წონასწორობის მუდმივაა, k_1, k_2 - პირდაპირი და შექცევადი რეაქციების სიჩქარეთა მუდმივებია.

ტემპერატურის ცვლილების კანონზომიერება, რომელიც უზრუნველყოფს ჯამური რეაქციის მაქსიმალურ სიჩქარეს, განისაზღვრება პირობიდან:

$$\frac{\partial[v(x,T)]}{\partial T} = 0 \tag{9.2}$$

რეაქციის სიჩქარის მუდმივასა და წონასწორობის მუდმივას ტემპერატურული დამოკიდებულებანი გამოისახებიან შესაბამისად არენიუსისა (9.3) და ვანტ-ჰოფის (9.4) განტოლებებით:

$$k_1(T) = k_0 \exp(-E_1/RT) \tag{9.3}$$

$$\ln(K_e) = -\frac{A(T)}{RT} \tag{9.4}$$

რეაქციის პოტენციალის ცვლილება A გამოისახება ენთალპიის ცვლილების ΔH (თბური ეფექტის) და ენტროპიის ცვლილების ΔS საშუალებით: $A=-\Delta H+T \Delta S$.

პირველი მიახლოებით, თუ მივიღებთ $\Delta H=const, \Delta S=const$ შეგვიძლია ჩავწეროთ:

$$K_e = \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT} + \frac{\Delta S}{R}\right) \tag{9.5}$$

შესაბამისად, კინეტიკური განტოლება (9.1) ჩავწეროთ შემდეგი სახით:

$$v = \frac{dx}{dy} = \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right) \left[(1-x)^m - \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT} + \frac{\Delta S}{R}\right) C_0^{n-m} x^n \right] \tag{9.6}$$

აქ $y=k_0 C_0^{m-1} \tau$

განტოლებიდან (9.2) განისაზღვრება T_m :

$$T_m(x) = \frac{-\Delta H}{R \ln \left[\frac{E_2 C_0^{n-m} x^n}{E_1 (1-x)^m} \right] - \Delta S} \tag{9.7}$$

აქ $E_2=E_1-\Delta H$ წარმოადგენს შექცევადი რეაქციის აქტივაციის ენერგიას.

გამოსახულების (9.6) ანალიზი გვიჩვენებს, რომ რეაქციის დასაწყისში ($x=0$) რეაქციის სიჩქარე მაქსიმალურია, თუ $T_m \rightarrow \infty$. პრაქტიკულად მაქსიმალურად დასაშვები ტემპერატურა $T_{max}=T_0$ რაიმე პირობით ყოველთვის შეზღუდულია, ანუ ოპტიმალური ტემპერატურის მნიშვნელობები უნდა განისაზღვროს:

$$\begin{aligned} T_m &= \{T_0, IF : T_m \geq T_0 \\ T_m &= \{T_m, IF : T_m \leq T_0 \end{aligned} \tag{9.8}$$

გამოყვანილი განტოლებების საფუძველზე მაგალითის სახით განვიხილოთ ეთილენის ჰიდრირების რეაქციის კინეტიკის მოდელირება, რომელიც მიმდინარეობს შემდეგი განტოლების მიხედვით:



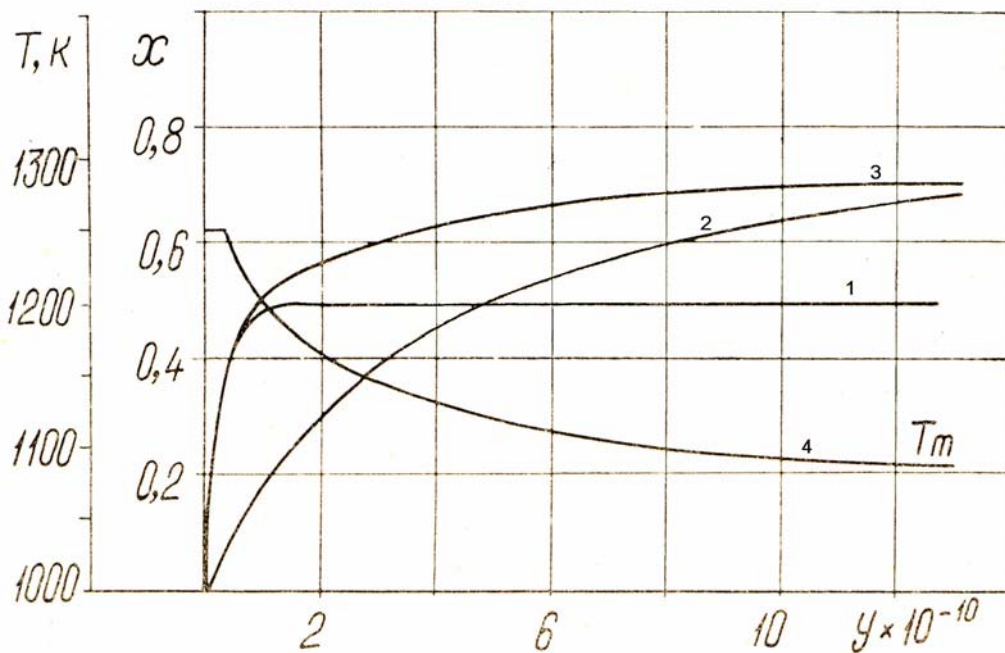
ცხრილში მოყვანილია გამოთვლებისთვის აუცილებელი კინეტიკური და თერმოდინამიკური სიდიდეები.

| m | n | E_1 | ΔH | ΔH | E_2 |
|-----|-----|--------|------------|------------|--------|
| | | კჯ/მოლ | კჯ/მოლ | ჯ/მოლ.K | კჯ/მოლ |
| 2 | 1 | 182.26 | -138.9 | -120.43 | 321.16 |

მოვიღოთ, რომ $C_0=6\text{მოლ/მ}^3$, $T_{max}=T_0=1250\text{K}$.

მონაცემების ჩასმით (9.7)-ში ვლებულობთ ფორმულას:

$$T_m(x) = \frac{16707}{\ln\left[\frac{x}{(1-x)^m}\right] + 13.26} \quad (9.10)$$



ნახაზზე წარმოდგენილია განხილული რეაქციის კინეტიკური მრუდები, რომლებიც გამოთვლილია სხვადასხვა ტემპერატურული რეჟიმებისთვის: 1 - იზოთერმული პროცესი, როდესაც $T=T_0=1250\text{K}$; 2 - იზოთერმული პროცესი, როდესაც $T=1100\text{K}$; 3 - პროცესის კინეტიკა გამოთვლილ ოპტიმალურ რეჟიმში; 4 - ტემპერატურის ოპტიმალური ცვლილება. პროცესის კინეტიკა იანგარიშება განტოლებით:

$$y = \int_0^x \frac{dx}{v(x, T)} \quad (9.11)$$

იზოთერმული რეაქციის კინეტიკა იანგარიშება განტოლებით:

$$y = \frac{1}{a(p-q)} \left[\ln\left|\frac{x-p}{x-q}\right| - \ln\left(\frac{p}{q}\right) \right] \quad (9.12)$$

აქ $a = \exp(-E_1/RT)$, $b = K_e$, წარმოადგენენ შემდეგი განტოლების ფესვებს:

$$a(1-x)^2 - bx = 0 \quad (9.13)$$

როდესაც $T=1100\text{K}$: $a=2.42 \cdot 10^{-8}$, $p=2.014$, $q=0.496$

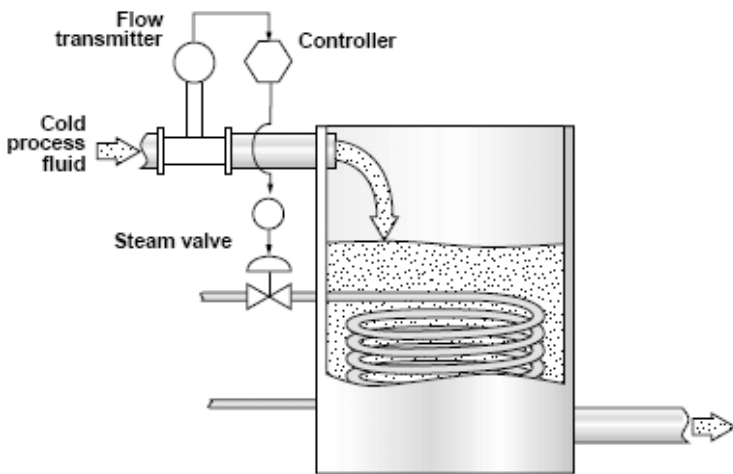
როდესაც $T=1250\text{K}$: $a=2.21 \cdot 10^{-9}$, $p=1.329$, $q=0.752$

ოპტიმალური პირობებისთვის რეაქციის კინეტიკის მოდელირება ჩატარებულია რიცხვითი მეთოდით (9.11) განტოლების მიხედვით. მოდელირების შედეგები ადასტურებს ამ რეჟიმის ეფექტურობას ქიმიური გარდაქმნის ხარისხის მიმართებაში.

10. მათემატიკური მოდელების გამოყენება ტექნოლოგიური პროცესების მართვისათვის

მათემატიკური მოდელების მეთოდებს უდიდესი მნიშვნელობა აქვს ტექნოლოგიური პროცესების მართვის სისტემების დამუშავების, ოპტიმიზაციისა და ექსპლუატაციის დროს. ქვემოთ მოყვანილია შედარებით მარტივი მაგალითები.

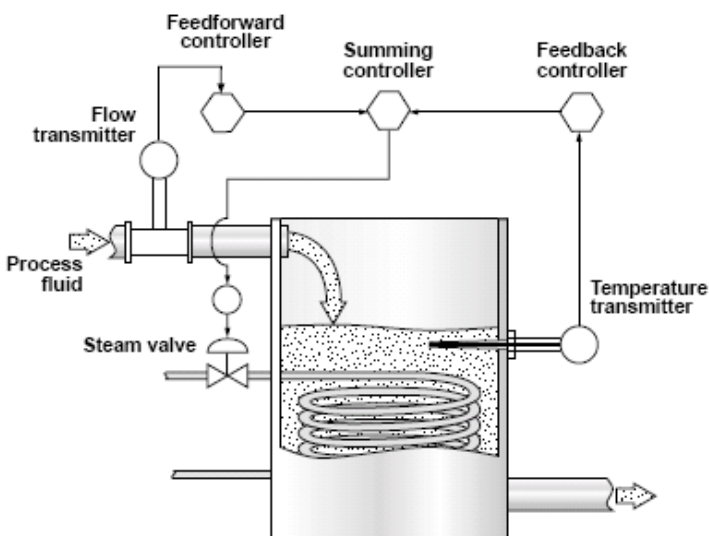
წინმსწრები მართვა. წინმსწრები მართვის დროს მართვის სიტემა ეწინააღმდეგება შეშფოთებებს და არეგულირებს მათ, ვიდრე ისინი გავლენას მოახდენენ პროცესის პარამეტრზე. ამისათვის მომხმარებელს უნდა ჰქონდეს მათემატიკური დამოკიდებულება (მოდელი) თუ როგორ მოქმედებს მარეგულირებელი პარამეტრი პროცესის სარეგულირო პარამეტრზე. ნახაზზე 10.1 წარმოდგენილია წინმსწრები მართვის კონტური, რომელშიც ცივი ნაკადის ტრანსმიტერის სიგნალის მიხედვით ხდება მთბობი ორთქლის ვენტილის მართვა.



წინმსწრები მართვის უპირატესობა მდგომარეობს იმაში, რომ ხდება არა განთანხმების გამოსწორება, არამედ თავიდან აცილება. თუმცა საკმაოდ ძნელია ყველა შესაძლო შეშფოთების პროცესზე გავლენის გათვალისწინება. ისეთი ფაქტორები, როგორებიცაა გარემოს ტემპერატურა, მიღების განლაგება, ნედლეულის ტენიანობა, შემადგენლობა, შეიძლება გადაიქცნენ შეშფოთების წყაროდ და ყოველთვის არ ხერხდება წინმსწრები მართვის სისტემის მიერ მათი ეფექტური

გათვალისწინება. ზოგადად, წინმსწრები სისტემები გამოყენებული უნდა იქნას იმ შემთხვევებში, როდესაც მართვადი პარამეტრი შეიძლება ჩაითვალოს ძირითადი შეშფოთების წყაროდ პროცესის საბოლოო მიზნობრივი პარამეტრისათვის. სხვა პარამეტრებისათვის, რომლებიც იწვევენ უმნიშვნელო შეშფოთებებს, წინმსწრები სისტემების გართულება და დამატებითი ხარჯები შეიძლება არ იყოს გამართლებული მიღწეულ ეფექტთან შედარებით.

წინსწრება უკუკავშირთან ერთად



ყველა შესაძლო შეშფოთების გათვალისწინების სიძნელის გამო წინმსწრები სისტემებს ხშირად აერთიანებენ უკუკავშირის სისტემებთან. ასეთ კომბინირებულ სისტემებში გამოიყენება ამჯამავე კონტროლერები, რომლებიც აერთიანებენ წინმსწრები და უკუკავშირის კონტურების სიგნალებს და ერთიან სიგნალს აწვდიან საბოლოო მარეგულირებელ მოწყობილობას. ნახაზზე 10.2 წარმოდგენილია წინმსწრები + უკუკავშირის კონტური, რომელშიც მთბობი ორთქლის ვენტილის მართვას ემსახურება ინფორმაცია ნაკადისა და ტემპერატურის ტრანსმიტერებიდან.