

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ АППРОКСИМАЦИИ РАВНОВЕСНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ С УЧЕТОМ СОВОКУПНЫХ ОШИБОК В ИЗМЕРЕНИЯХ ПЕРЕМЕННЫХ.

Мухитдинов Джалолитдин Паҳритдинович

доктор технических наук, профессор кафедры автоматизация
производственных процессов, Ташкентского государственного
технического университета, Узбекистан.

Каримбаев Жасурбек Давлатбаевич

магистрант, кафедры автоматизация производственных процессов,
Ташкентского государственного технического университета, Узбекистан.

Аннотация: Рассматривается проблема математического моделирования фазового равновесия в многокомпонентных смесях. Особое внимание уделено тому, что современные программные и информационные средства, реализующие математические модели, оперируют исходными данными, не учитывая разброса параметров и физико-химических свойств компонентов смесей, получаемых в различных условиях, что в конечном итоге отражается на качестве готового продукта.

Дальнейшее социально-экономическое развитие страны может быть достигнуто только на базе ускорения научно-технического прогресса, перевода народного хозяйства на путь интенсификации, обеспечения всемерной экономии и рационального использования сырьевых, материальных и топливно-энергетических ресурсов, создания безотходных хималоэнергоемких производств.

Эффективное решение этой задачи возможно с применением методов математического моделирования. При математическом моделировании процесса ректификации необходимо решать задачи расчета фазового равновесия

В предлагаемой работе особое внимание уделено тому, что современные программные и информационные средства, реализующие математические модели, оперируют исходными данными, не учитывая разброса параметров и физико-химических свойств компонентов смесей, получаемых в различных условиях и на различных предприятиях, что в конечном итоге отражается на качестве готового продукта.

Решение задач аппроксимации физико-химических свойств функциональными зависимостями часто сводится к выводу эмпирических формул, обоснованных методом максимального правдоподобия.

Составляется функция правдоподобия по параметру γ

$$L(x_1, \dots, x_n, \gamma) = f(x_1, \gamma)f(x_2, \gamma)\dots f(x_n, \gamma) \quad (1)$$

где x_1, \dots, x_n - выборка объема n из генеральной совокупности X ;

γ - параметр, который следует оценить по выборке, содержащейся в плоскости вероятности $f(x, \gamma)$.

В качестве оценки параметра γ берется значение, при котором функция правдоподобия достигает своего максимального значения.

В работе производилась минимизация функции правдоподобия вида

$$Z(b_1, b_2, \dots, b_n) = \prod_{i=1}^m \left(\frac{1}{2\pi\sigma x_i \sigma y_i} \right) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^m \min \left[\left(\frac{Uy_i}{Gy_i} \right)^2 + \left(\frac{Ux_i}{Gx_i} \right)^2 \right] \right\} \quad (2)$$

по критерию близости

$$R(b_1, b_2, \dots, b_n) = \sum_{i=1}^m \min \left\{ \beta y_i [y_{li} - f(x_{li}, b_1, b_2, \dots, b_n)] + \beta x_i (x_{li} - x_i)^2 \right\} \rightarrow \min \quad (3)$$

$$\beta y_i = \frac{1}{Gy_i^2}; \quad \beta x_i = \frac{1}{Gx_i^2};$$

где $b_1 - b_n$ - неизвестные параметры модели;

Gx_i , Gy_i - оценки дисперсии независимых переменных x и y ;

Ux_i , Uy_i - ошибки измерения независимых переменных x и y ;

x_i , y_i - исходные данные по фазовому равновесию компонентов.

Данный критерий дает возможность решать задачу аппроксимации равновесных зависимостей с учетом совокупных ошибок в измерениях переменных.

Основное достоинство такого подхода состоит в том, что учитываются ошибки измерения по обоим переменным. Изложенный принцип использовался в данной работе для конструирования алгоритмов и разработки методов моделирования применительно к описанию параметров моделей фазового равновесия многокомпонентных систем.

Для корреляции коэффициентов активности с составом смеси и температурой использовано модифицированное уравнение Вильсона.

Состав паровой фазы рассчитывается как:

$$y_{pi} = \exp \left[x_2 \left(\left(\frac{\lambda_{21}}{x_1 + x_2 \lambda_{21}} \right) - \left(\frac{\lambda_{12}}{x_1 + x_2 \lambda_{12}} \right) - \left(\frac{\rho_{21}}{x_1 + x_2 \rho_{21}} \right) + \left(\frac{\rho_{12}}{x_1 + x_2 \rho_{12}} \right) \right) \right] * \\ * x_1 P_i^0 \frac{x_1 + x_2 \rho_{21}}{P(x_1 + x_2 \lambda_{21})}, \quad (4)$$

$$\text{где } \rho_{12} = \frac{V_1}{V_2}; \quad \rho_{21} = \frac{V_2}{V_1}.$$

Зависимость мольного объёма от температуры аппроксимировалась полиномом второй степени:

$$V = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 \quad (5)$$

Для расчёта коэффициентов активности необходимо определить параметры модифицированного уравнения Вильсона - $\lambda_{12}, \lambda_{21}$. Согласно Дж. Праузнику, идеальным является раствор, для которого $\lambda_{12} = \lambda_{21} = 1$. Таким образом, отклонение этих параметров от единицы указывает на неидеальность раствора. Если λ_{12} и λ_{21} больше единицы, то раствор проявляет отрицательные отклонения от идеальности ($g^E < 0$) и, наоборот, если λ_{12} и λ_{21} меньше единицы, раствор даёт положительные отклонения ($g^E > 0$).

Вычисление параметров модифицированного уравнения Вильсона осуществляется при помощи метода наименьших квадратов. Минимизируемая функция имеет вид:

$$R(\lambda_{12}, \lambda_{21}) = \sum_{i=1}^n (y_{\text{эксп}_i} - y_{pi})^2 \longrightarrow \min. \quad (6)$$

Исходными данными для вычисления параметров уравнения Вильсона являются:

- Значения коэффициентов уравнения Риделя для каждого взаимодействующего компонента и параметры уравнения (5) для определения мольного объёма.
- данные по бинарному равновесию.

Список литературы

1. Мухитдинов Д.П. Моделирование парожидкостного равновесия в многокомпонентных смесях Ж. Химическая технология Контроль и управление №2, 2005, с.10-13