Лекция № 3

Объект = «черный ящик» или «black box» - эмпирическая модель

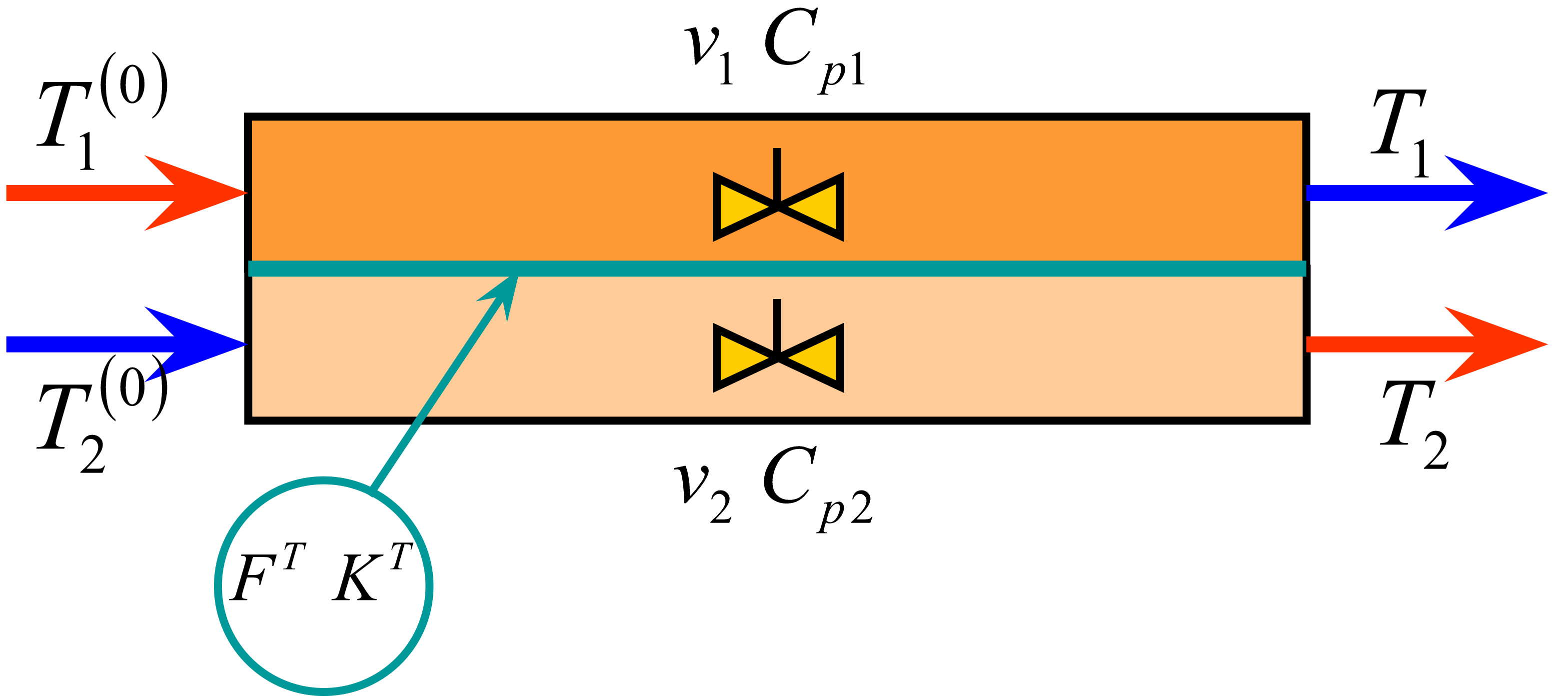
Объект ≠ «черный ящик» или «black box» - физико-химическая модель

$$\bar{y} = \bar{f}(\bar{x})$$

I.Принципы построения теоретических физико-химических моделей

Последовательные этапы

- Изучается теория процесса
- Составляется система уравнения математического описания (МО)
- Выбирается алгоритм решения системы уравнений МО, т.н. моделирующий алгоритм (МА)
- МА реализуется на компьютере и получается математическая модель (ММ)
- Проверяется адекватность модели путем сравнения расчетных результатов с экспериментальными
- В случае отсутствия адекватности модели решается задача идентификации,



Для упрощения построения математического описания рассматриваемого процесса принимаются следующие допущения

- рассматривается стационарный режим теплопередачи
- оба потока теплоносителей описываются моделью идеального смешения
- происходит только процесс теплопередачи

1. $v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 + F^T \Delta q_1^T = 0$

2. $\Delta q_1^T = K^T \left(T_2 - T_1 \right)$

3. $v_2^{(0)} C_{p2}^{(0)} T_2^{(0)} - v_2 C_{p2} T_2 + F^T \Delta q_2^T = 0$

4. $\Delta q_2^T = K^T \left(T_1 - T_2 \right)$

$$\Delta q^T = \Delta q_1^T = -\Delta q_2^T$$

$$1.\quad v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 + F^T \Delta q^T = 0$$

$$2.\quad v_2^{(0)} C_{p2}^{(0)} T_2^{(0)} - v_2 C_{p2} T_2 + F^T \left(-\Delta q^T\right) = 0$$

$$3.\quad \Delta q^T = K^T \left(T_2 - T_1\right)$$

Принимается **допущение** о том, что константа теплопередачи через поверхность теплообмена постоянна (K^T = const)

Это означает, что теплоёмкости потоков постоянны и не зависят от температуры

В качестве определяемых переменных выбираем температуры потоков на выходе из теплообменника T_1 и T_2 и локальную интенсивность теплопередачи Δq^T

Преобразуем систему путём подстановки в уравнения 1 и 2 выражения для локальной интенсивности теплопередачи Δq^T:

$$1.\quad \underbrace{\left(\nu_1 C_{p1} T_1 + F^T K^T\right)}_{a_{11}} T_1 + \underbrace{\left(-F^T K^T\right)}_{a_{12}} T_2 = \underbrace{\nu_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)}}_{b_1}$$

$$2.\quad \underbrace{\left(-F^T K^T\right)}_{a_{21}} T_1 + \underbrace{\left(\nu_2 C_{p2} + F^T K^T\right)}_{a_{22}} T_2 = \underbrace{\nu_2^{(0)} C_{p2}^{(0)} T_2^{(0)}}_{b_2}$$

$$\overline{\overline{A}} \cdot \overline{x} = \overline{b};$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

Методом обратной матрицы находим значения температур потоков на выходе из теплообменника:

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

Таким образом определяются температуры потоков T_1 и T_2 на выходе из теплообменника.

Схематическое представление теплообменника при построении эмпирической модели

Принимаются допущения:

$$v_1 = v_1^{(0)}$$

$$v_2 = v_2^{(0)}$$

Основная задача при построении эмпирической модели теплообменника

На основании обработки экспериментальных данных о функционировании теплообменника получить две функциональные зависимости следующего вида:

$$T_1 = f_1(T_1^{(0)}, v_1, T_2^{(0)}, v_2, \bar{a}_1)$$

$$T_2 = f_2(T_1^{(0)}, v_1, T_2^{(0)}, v_2, \bar{a}_2)$$

Где $\bar{a}_1$, $\bar{a}_2$ - коэффициенты функциональных зависимостей

Таблица результатов экспериментальных исследований при построении эмпирической модели теплообменника

№ эксп.	$T_1^{(0)}$	$v_1^{(0)}$	$T_2^{(0)}$	$v_2^{(0)}$		$T_1^{эксп.}$	$T_2^{эксп.}$
1	$T_{11}^{(0)}$	$v_{11}^{(0)}$	$T_{21}^{(0)}$	$v_{21}^{(0)}$		$T_{11}^{эксп.}$	$T_{21}^{эксп.}$
2	$T_{12}^{(0)}$	$v_{12}^{(0)}$	$T_{22}^{(0)}$	$v_{22}^{(0)}$		$T_{12}^{эксп.}$	$T_{22}^{эксп.}$
…	…	…	…	…		…	…
n	$T_{1n}^{(0)}$	$v_{1n}^{(0)}$	$T_{2n}^{(0)}$	$v_{2n}^{(0)}$		$T_{1n}^{эксп.}$	$T_{2n}^{эксп.}$

В общем случае:

$$\bar{y} = \bar{f}(\bar{x}, \bar{a})$$

$$\bar{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \end{bmatrix}$$

$$\bar{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_1^{(0)} \\ v_1 \\ T_2^{(0)} \\ v_2 \end{bmatrix}$$

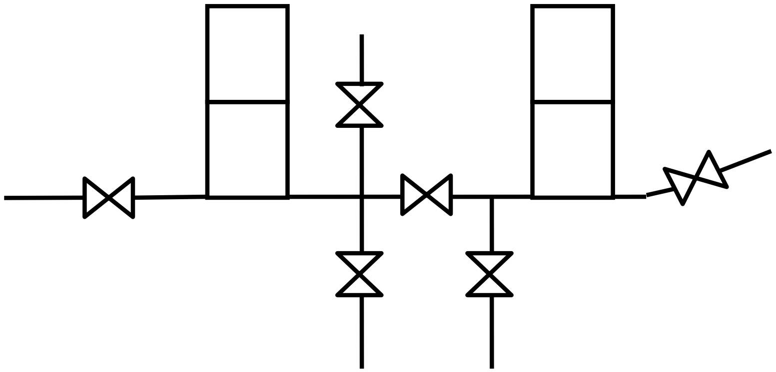
где $\bar{a}$ - коэффициенты функциональных зависимостей:

$$y_1 = f_1(\bar{x}, \bar{a}_1)$$

$$y_2 = f_2(\bar{x}, \bar{a}_2)$$

Пример решения задачи по теме «Моделирование простой гидравлической системы»

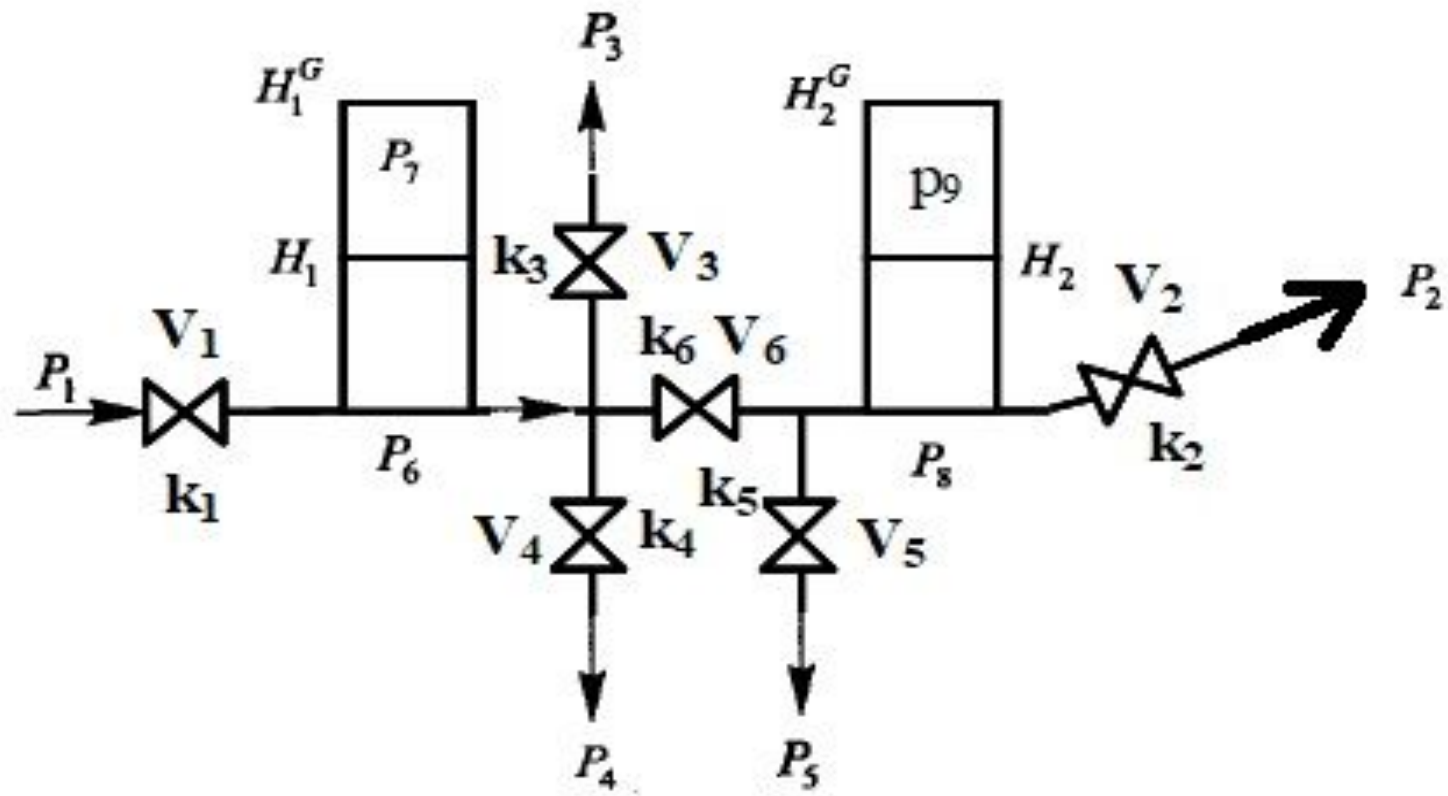
Дана простая гидравлическая система



2. Для простой гидравлической системы построить:

- Математическое описание процесса движения жидкости в стационарном режиме;
- Информационную матрицу системы уравнений для выбора декомпозиционного алгоритма решения;
- Блок-схему алгоритма решения прямой задачи, включающей стандартные численные методы вычислительной математики

Далее мы показываем направление движения жидкости, а затем «разукрашиваем схему»



Основные допущения при моделировании простой гидравлической системы:

- во всех трубах протекает однофазный поток жидкости, температура которого одинакова на всех участках;
- все трубы располагаются на одном уровне, в системе нет рециклических (обратных) потоков, или рециклов, не учитываются местные сопротивления и перепады давлений в трубах, т.е. рассматриваются, так называемые короткие трубопроводы;
- системы включают только клапаны (вентили) с постоянными, не изменяющимися коэффициентами пропускной способности и закрытые емкости (аккумуляторы), давление газа в которых подчиняется идеальным законам.

<u>Стационарный режим:</u>

Уравнения математического описания простой гидравлической системы:

Уравнения для определения объёмного расхода жидкости через вентили:

$$v = k\sqrt{P_{\text{вх}} - P_{\text{вых}}}$$

$$v = k\,\mathrm{sgn}(P_{\text{вх}} - P_{\text{вых}})\sqrt{|\,P_{\text{вх}} - P_{\text{вых}}\,|}$$

$$\mathbf{1}.\, V_1 = k_1 \operatorname{sgn}(p_1 - p_6)\sqrt{(p_1 - p_6)};$$

$$\mathbf{2.}\, V_2 = k_2 \operatorname{sgn}(p_8 - p_2)\sqrt{(p_8 - p_2)};$$

$$\mathbf{3.}\, V_3 = k_3 \operatorname{sgn}(p_6 - p_3)\sqrt{(p_6 - p_3)};$$

$$\mathbf{4.}\ V_4 = k_4 \operatorname{sgn}(p_6 - p_4)\sqrt{(p_6 - p_4)};$$

$$5.\, V_5 = k_5 \,\mathrm{sgn}(p_8 - p_5)\sqrt{(p_8 - p_5)};$$

$$6.\, V_6 = k_6 \operatorname{sgn}(p_6 - p_8)\sqrt{(p_6 - p_8)};$$

Балансовые уравнения

Кол-во балансовых ур.= кол-во емк.

$$\mathbf{7}.\ V_1 = V_3 + V_4 + V_6; \textit{или} \quad V_1 - V_3 - V_4 - V_6 = 0$$

Приход Расход

$$\mathbf{8.}\, V_6 - V_5 = V_2; или \quad V_6 - V_5 - V_2 = 0$$

Приход Расход

9. $p_6 = p_7 + \rho g H_1;$

10. $p_7 = p_N \dfrac{H_1^G}{H_1^G - H_1}$

11. $p_8 = p_9 + \rho g H_2;$

12. $p_9 = p_N \dfrac{H_2^G}{H_2^G - H_2}$

Информационная матрица для решения системы уравнений математического описания

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№
1	+						+						
2		+							+				
3			+				+						
4				+			+						
5					+				+				
6						+	+		+				
7	+		+	+		+							
8		+			+	+							
9							+	+			+		
10								+			+		
11									+	+		+	
12										+		+	

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№
1	+						+						
2		+							+				
3			+				+						
4				+			+						
5					+				+				
6						+	+		+				
7	+		+	+		+							
8		+			+	+							
9							+	+			+		
10								+			$\boxed{+}$		1
11									+	+		+	
12										+		+	

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№
1	+						+						
2		+							+				
3			+				+						
4				+			+						
5					+				+				
6						+	+		+				
7	+		+	+		+							
8		+			+	+							
9							+	+			+		2
10								+			$\boxed{+}$		1
11									+	+		+	
12										+		+	

p / n	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№
1	+						+						
2		+							+				
3			+				+						
4				+			+						
5					+				+				
6						+	+		+				
7	+		+	+		+							
8		+			+	+							
9							+	+			+		2
10								+			+		1
11									+	+		+	
12										+		+	

p / n	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№
1	+						+						3
2		+							+				
3			+				+						
4				+			+						
5					+				+				
6						+	+		+				
7	+		+	+		+							
8		+			+	+							
9							+	+			+		2
10								+			$\boxed{+}$		1
11									+	+		+	
12										+		+	

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№
1	+						+						3
2		+							+				
3			+				+						4
4				+			+						
5					+				+				
6						+	+		+				
7	+		+	+		+							
8		+			+	+							
9							+	+			+		2
10								+			$\boxed{+}$		1
11									+	+		+	
12										+		+	

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№
1	+						+						3
2		+							+				
3			+				+						4
4				+			+						5
5					+				+				
6						+	+		+				
7	+		+	+		+							
8		+			+	+							
9							+	+			+		2
10								+			$\boxed{+}$		1
11									+	+		+	
12										+		+	

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№
1	+						+						3
2		+							+				
3			+				+						4
4				+			+						5
5					+				+				
6						+	+		+				
7	+		+	+		+							6
8		+			+	+							
9							+	+			+		2
10								+			$\boxed{+}$		1
11									+	+		+	
12										+		+	

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№
1	+						+						3
2		+							+				
3			+				+						4
4				+			+						5
5					+				+				
6						+	+		+				7
7	+		+	+		+							6
8		+			+	+							
9							+	+			+		2
10								+			$\boxed{+}$		1
11									+	+		+	
12										+		+	

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№
1	+						+						3
2		+							+				8
3			+				+						4
4				+			+						5
5					+				+				
6						+	+		+				7
7	+		+	+		+							6
8		+			+	+							
9							+	+			+		2
10								+			$\boxed{+}$		1
11									+	+		+	
12										+		+	

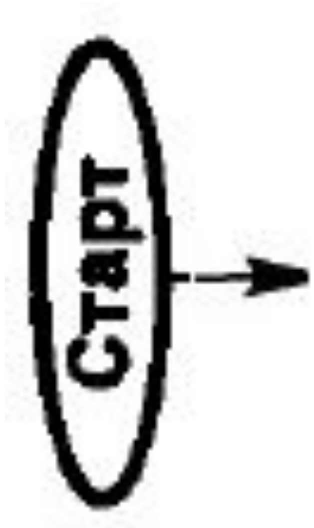
n \ p	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№
1	+						+						3
2		+							+				8
3			+				+						4
4				+			+						5
5					+				+				9
6						+	+		+				7
7	+		+	+		+							6
8		+			+	+							
9							+	+			+		2
10								+			$\boxed{+}$		1
11									+	+		+	
12										+		+	

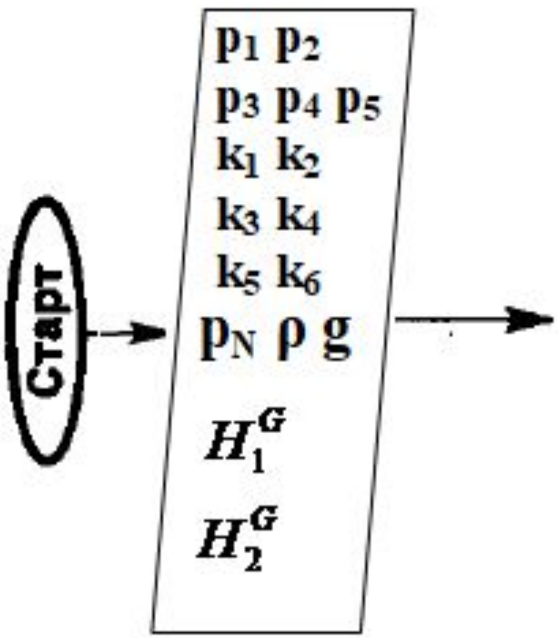
n \ p	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№	
1	◇+						⊕						3	
2		◇+							⊕				8	
3			◇+				⊕						4	
4				◇+			⊕						5	
5					◇+				⊕				9	
6						⊕	⊕		◇+				7	
7	⊕		⊕	⊕		◇+							6	
8		⊕			⊕	⊕					◇		10	Корр. ур.
9							◇+	⊕			⊕		2	
10								◇+			$\boxed{+}$		1	
11									⊕	+		+		
12										+		+		

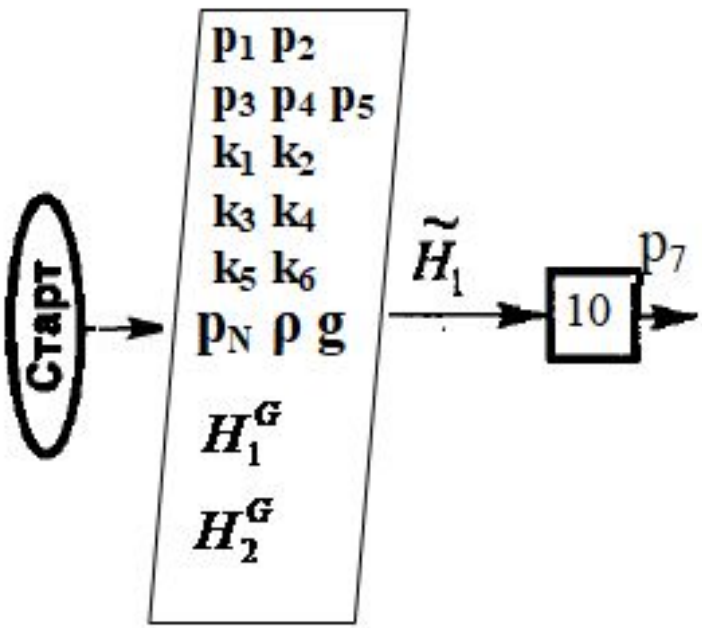
$$V_6 - V_5 - V_2 = 0 \equiv f(H_1)$$

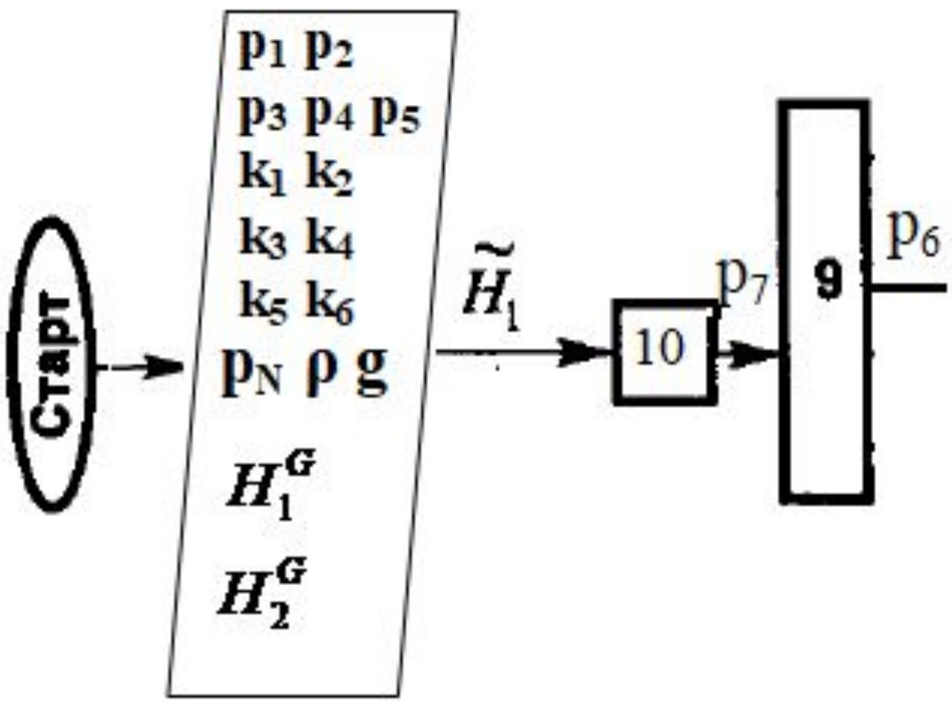
$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	H_1	H_2	№	
1	◇+						⊕						3	
2		◇+							⊕				8	
3			◇+				⊕						4	
4				◇+			⊕						5	
5					◇+				⊕				9	
6						⊕	⊕		◇+				7	
7	⊕		⊕	⊕		◇+							6	
8		⊕			⊕	⊕					◇		10	Корр. ур.
9							◇+	⊕			⊕		2	
10								◇+			⊞		1	
11									⊕	◇+		◇+	11,12	
12										◇+		◇+	11,12	

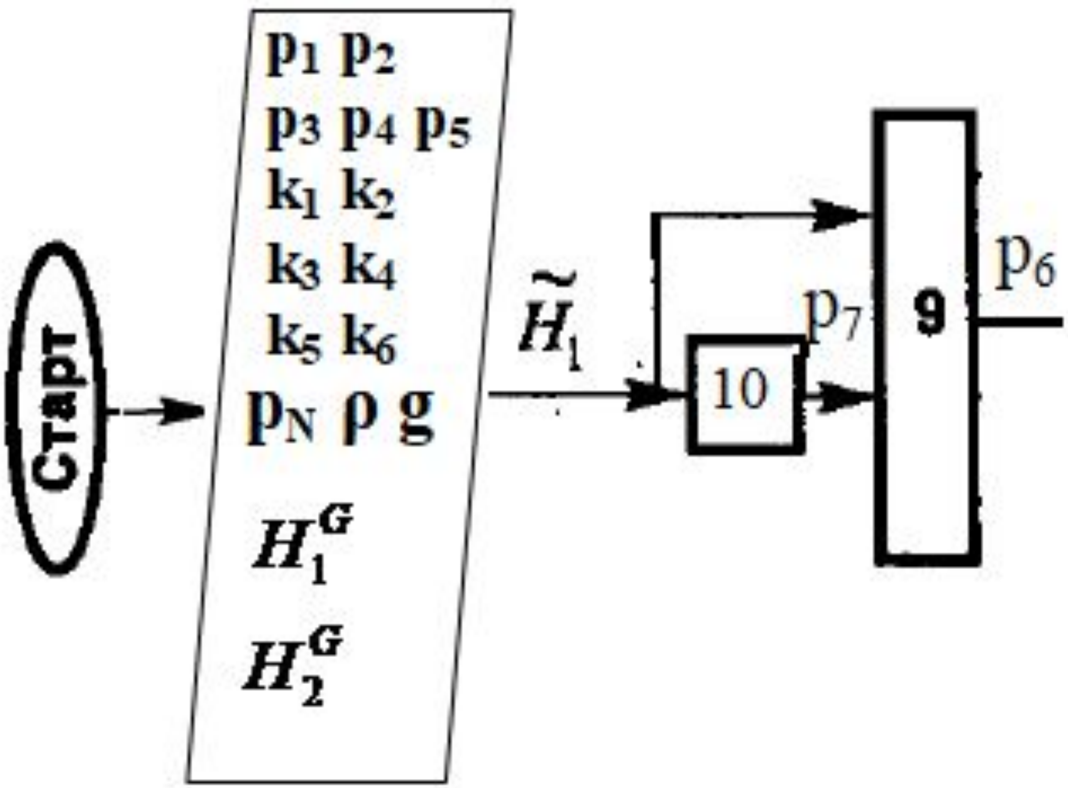
Блок-схема алгоритма

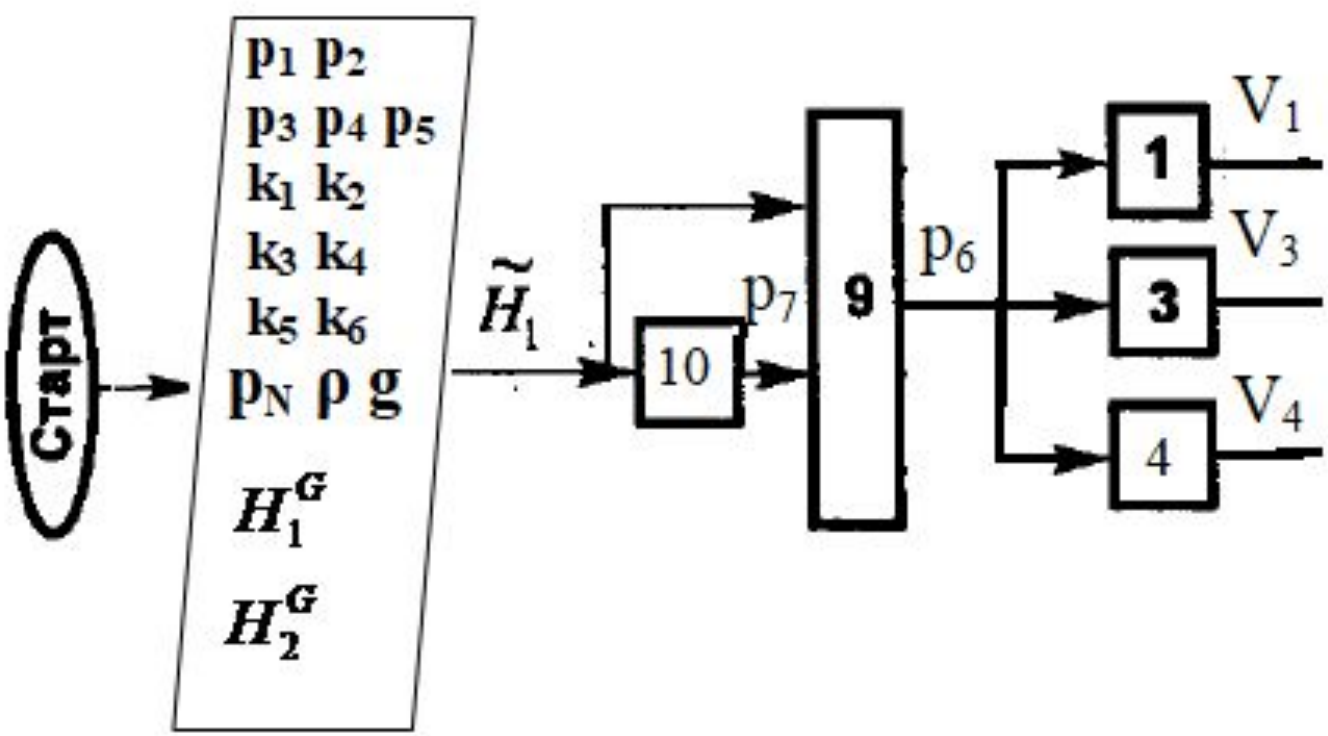


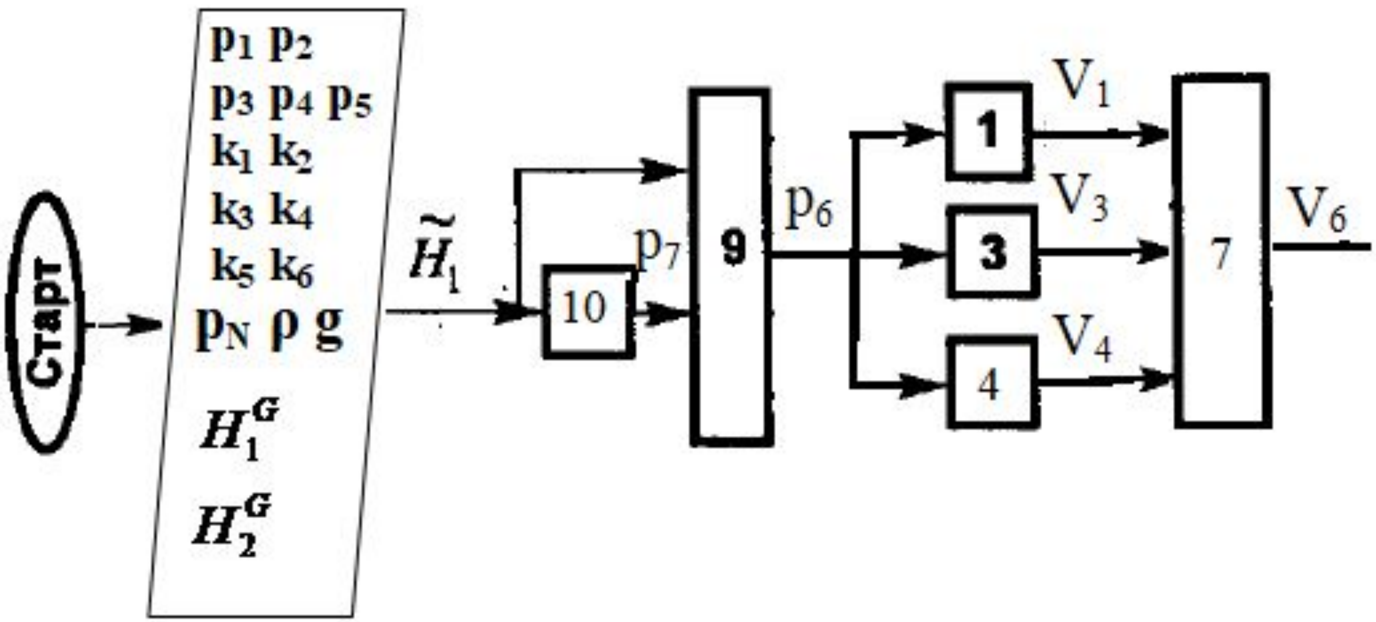

Старт
p_1 p_2
p_3 p_4 p_5
k_1 k_2
k_3 k_4
k_5 k_6
p_N ρ g
H_1^G
H_2^G


Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H_1^G
H_2^G
$\widetilde{H}_1$
10
p7

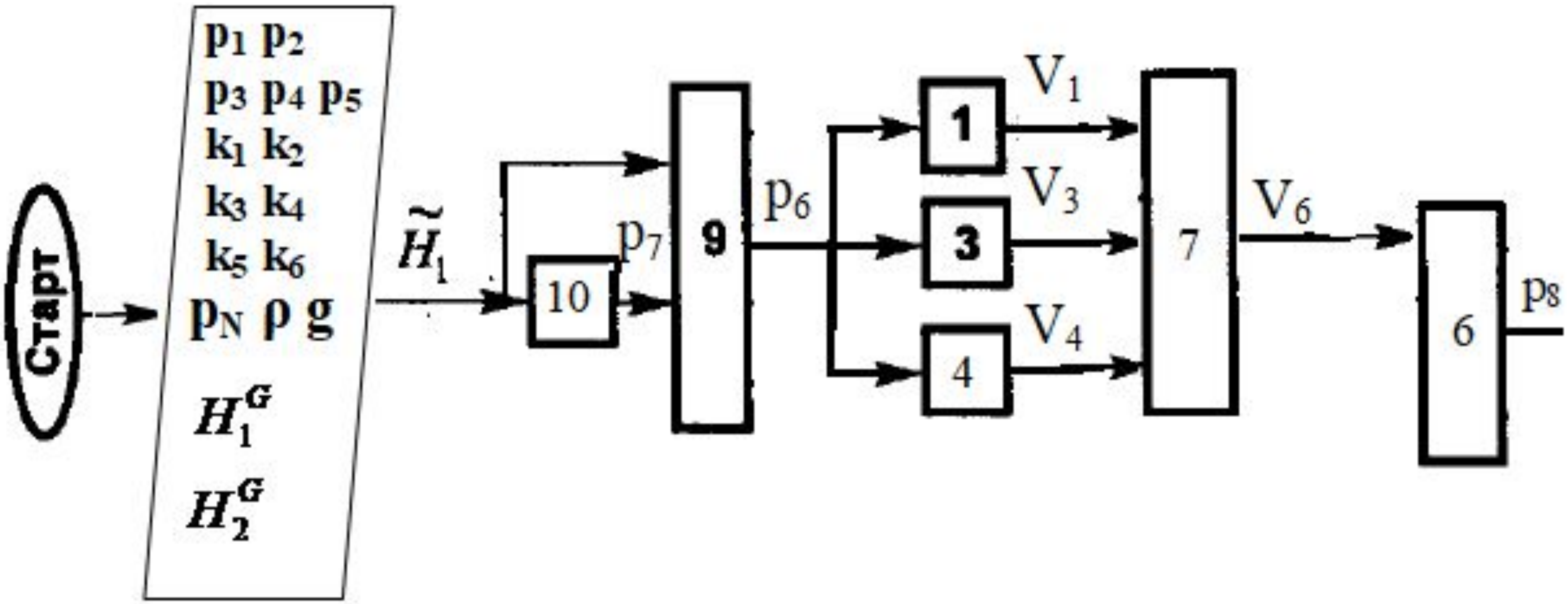

Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H_1^G
H_2^G
$\widetilde{H}_1$
10
p7
9
p6


Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H_1^G
H_2^G
$\tilde{H}_1$
10
p7
9
p6

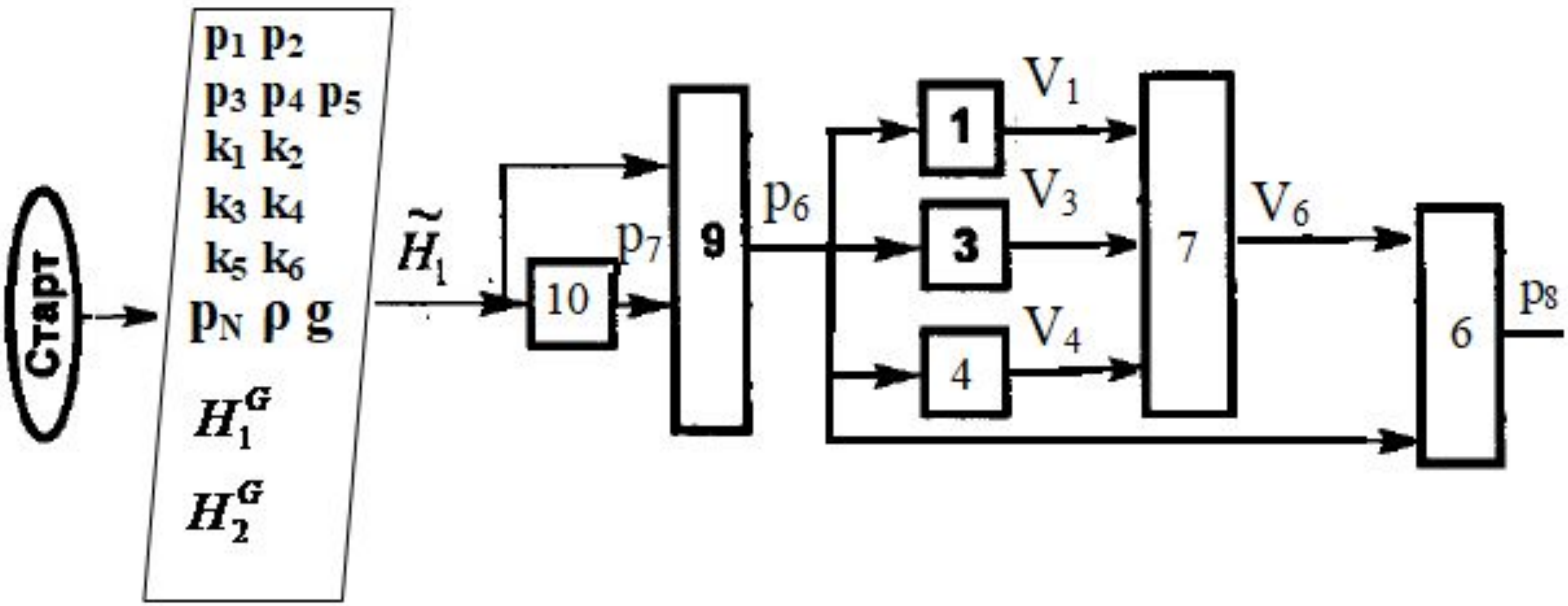

Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H_1^G
H_2^G
$\widetilde{H}_1$
10
p7
9
p6
1
3
4
V1
V3
V4

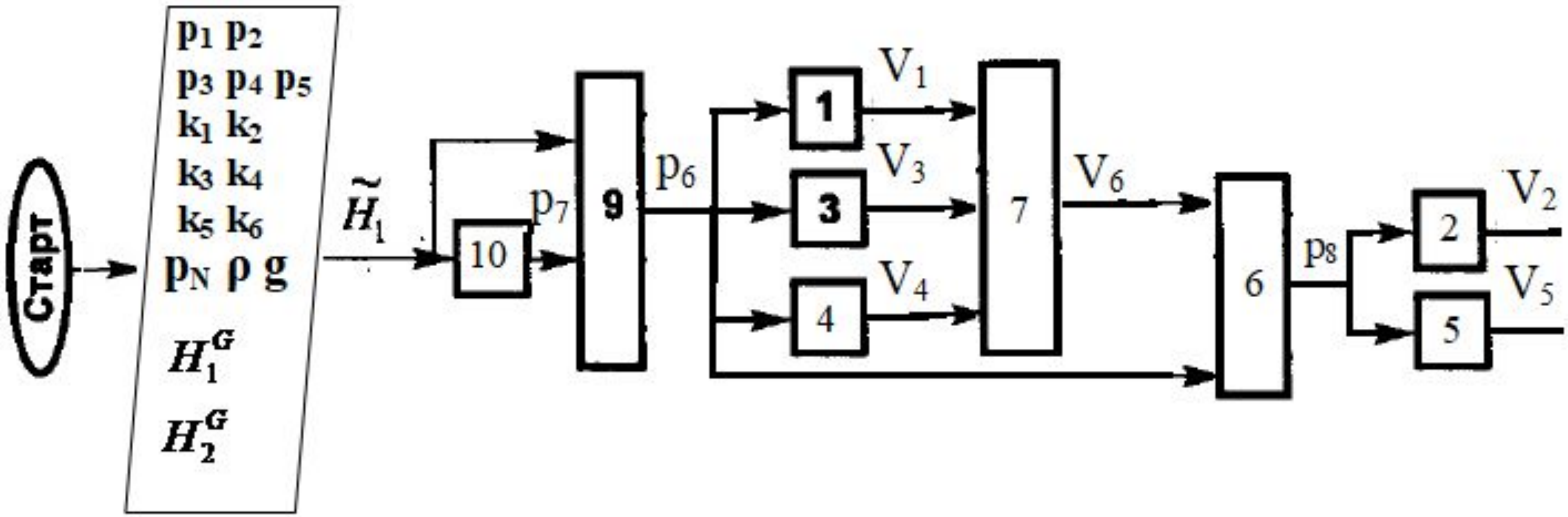


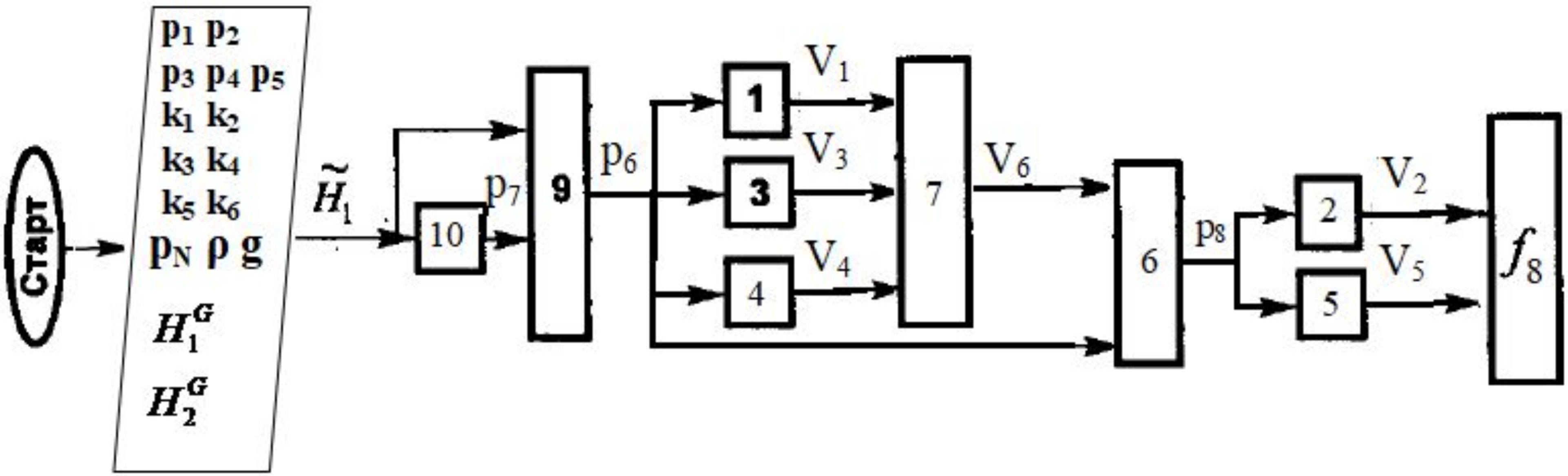
Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H_1^G
H_2^G
$\widetilde{H}_1$
10
p7
9
p6
1
3
4
V1
V3
V4
7
V6

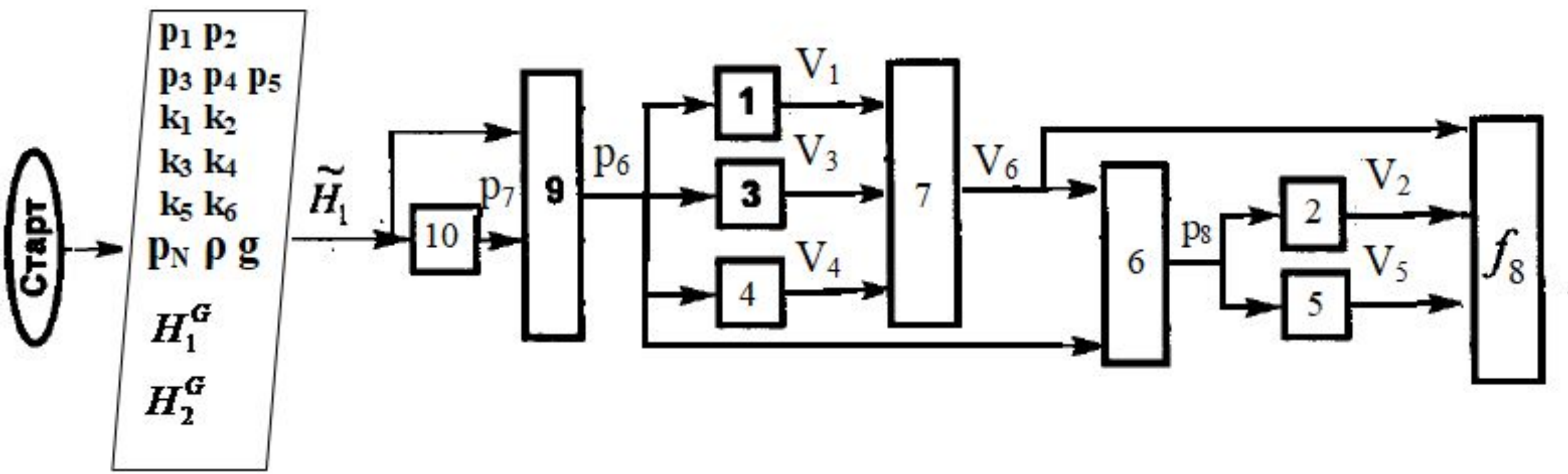


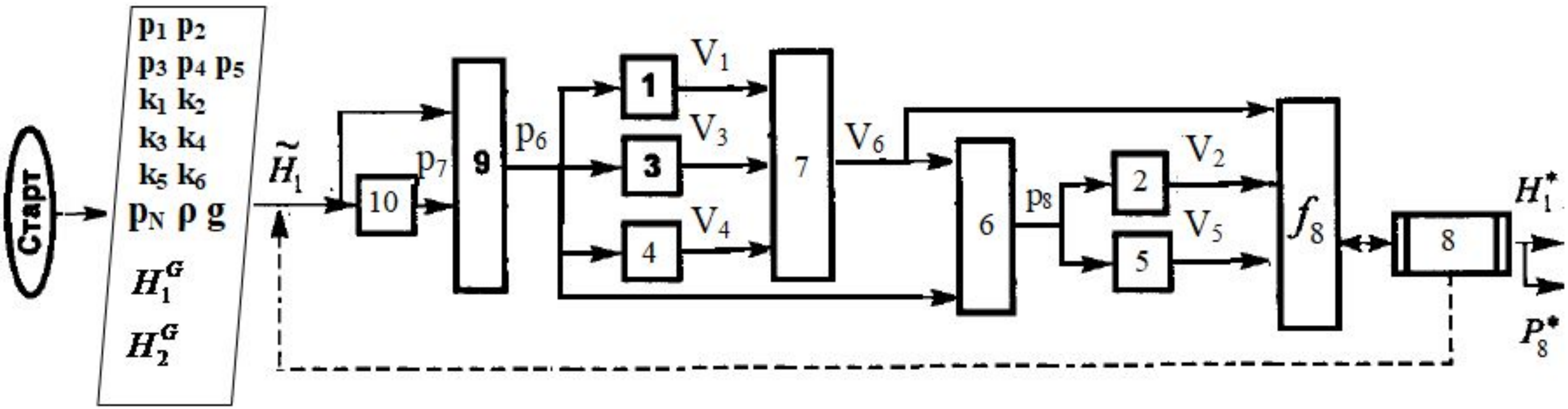
Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H_1^G
H_2^G
$\tilde{H}_1$
10
p7
9
p6
1
3
4
V1
V3
V4
7
V6
6
p8

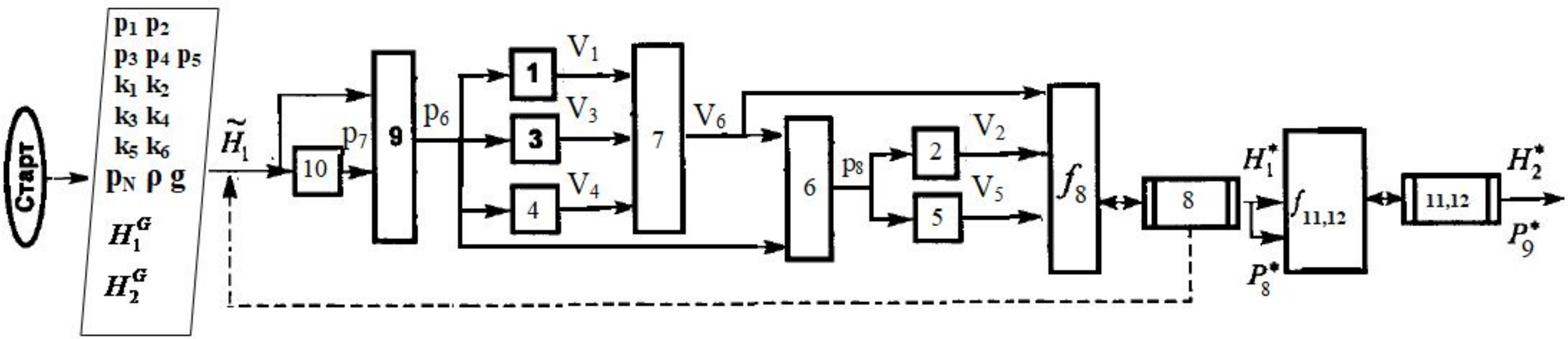

Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H1G
H2G
H̃1
10
p7
9
p6
1
3
4
V1
V3
V4
7
V6
6
p8


Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H_1^G
H_2^G
$\tilde{H}_1$
10
p7
9
p6
1
3
4
V1
V3
V4
7
V6
6
p8
2
5
V2
V5

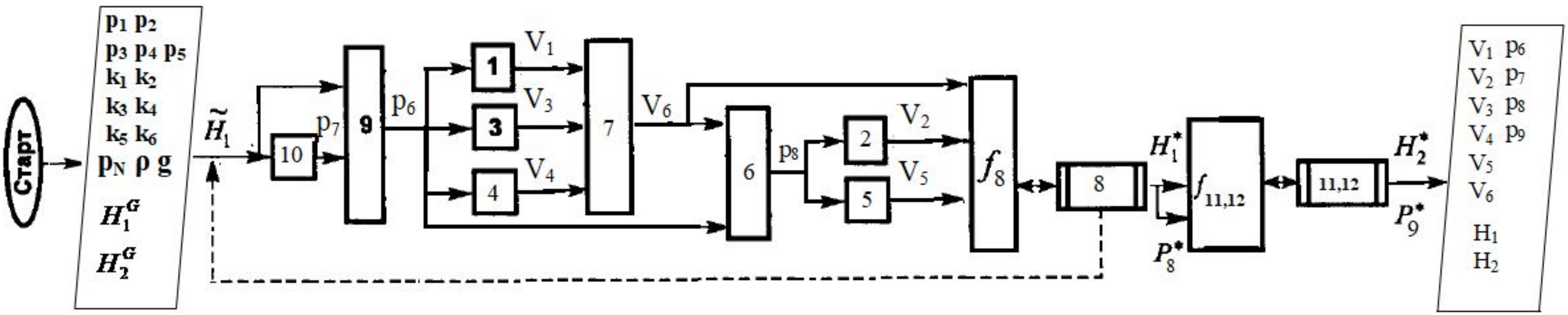

Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H_1^G
H_2^G
$\widetilde{H}_1$
10
p7
9
p6
1
3
4
V1
V3
V4
7
V6
6
p8
2
5
V2
V5
f_8

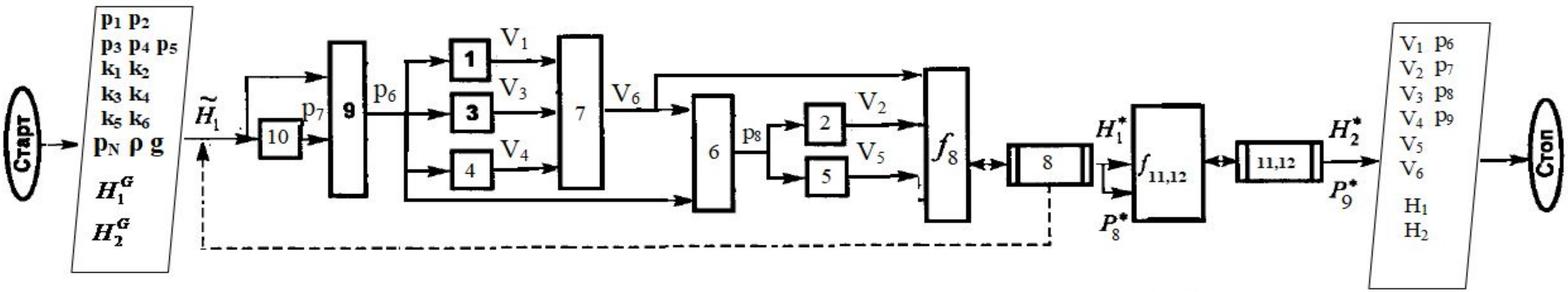

Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H1G
H2G
H̃1
10
p7
9
p6
1
3
4
V1
V3
V4
7
V6
6
p8
2
5
V2
V5
f8


Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H1G
H2G
H̃1
10
p7
9
p6
1
3
4
V1
V3
V4
7
V6
6
p8
2
5
V2
V5
f8
8
H1*
P8*



Старт
p_1 p_2
p_3 p_4 p_5
k_1 k_2
k_3 k_4
k_5 k_6
p_N ρ g
H_1^G
H_2^G
$\tilde{H}_1$
10
p_7
9
p_6
1
3
4
V_1
V_3
V_4
7
V_6
6
p_8
2
5
V_2
V_5
f_8
8
H_1^*
P_8^*
$f_{11,12}$
11,12
H_2^*
P_9^*


Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H1G
H2G
H̃1
10
p7
9
p6
1
3
4
V1
V3
V4
7
V6
6
p8
2
5
V2
V5
f8
8
H1*
P8*
f11,12
11,12
H2*
P9*
V1 p6
V2 p7
V3 p8
V4 p9
V5
V6
H1
H2


Старт
p1 p2
p3 p4 p5
k1 k2
k3 k4
k5 k6
pN ρ g
H1G
H2G
H̃1
10
p7
9
p6
1
3
4
V1
V3
V4
7
V6
6
p8
2
5
V2
V5
f8
8
H1*
P8*
f11,12
11,12
H2*
P9*
V1 p6
V2 p7
V3 p8
V4 p9
V5
V6
H1
H2
Стоп

Нестационарный (динамический) режим

$$\textbf{7.}\ \frac{dH_1}{dt} = \frac{1}{S_1}(V_1 - V_3 - V_4 - V_6) \equiv f_7;$$

$$\textbf{8.}\ \frac{dH_2}{dt} = \frac{1}{S_2}(V_6 - V_5 - V_2) \equiv f_9;$$

$$\textbf{7'.}\ H_1(t^{(0)}) = H_1^{(0)};$$

$$\textbf{8'.}\ H_2(t^{(0)}) = H_2^{(0)};$$

Дифференциальные уравнения записываются в конечно-разностной форме

$$\mathbf{7^*.}\ \frac{H_1(t^{(k)}) - H_1(t^{(0)})}{\Delta t} = \frac{1}{S_1}(V_1 - V_3 - V_4 - V_6) \equiv f_7;$$

$$\mathbf{8^*.}\ \frac{H_2(t^{(k)}) - H_2(t^{(0)})}{\Delta t} = \frac{1}{S_2}(V_6 - V_5 - V_2) \equiv f_9;$$

$$\mathbf{7'.}\ H_1(t^{(0)}) = H_1^{(0)};$$

$$\mathbf{8'.}\ H_2(t^{(0)}) = H_2^{(0)};$$

Информационная матрица для решения системы уравнений математического описания

n \ p	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t^{(0)})$	$H_1(t^{(k)})$	$H_2(t^{(0)})$	$H_2(t^{(k)})$	№
1	+						+								
2		+							+						
3			+				+								
4				+			+								
5					+				+						
6						+	+		+						
7*	+		+	+		+					+	+			
8*		+			+	+							+	+	
9							+	+			+				
10								+			+				
11									+	+			+		
12										+			+		
7'											+				
8'													+		

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t^{(0)})$	$H_1(t^{(k)})$	$H_2(t^{(0)})$	$H_2(t^{(k)})$	№
1	+						+								
2		+							+						
3			+				+								
4				+			+								
5					+				+						
6						+	+		+						
7*	+		+	+		+					+	+			
8*		+			+	+							+	+	
9							+	+			+				
10								+			+				
11									+	+			+		
12										+			+		
7'											$\boxed{+}$				1
8'													+		

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t_1^{(0)})$	$H_1(t_1^{(k)})$	$H_2(t_2^{(0)})$	$H_2(t_2^{(k)})$	№
1	+						+								
2		+							+						
3			+				+								
4				+			+								
5					+				+						
6						+	+		+						
7*	+		+	+		+					+	+			
8*		+			+	+							+	+	
9							+	+			+				
10								+			+				
11									+	+			+		
12										+			+		
7'											+				1
8'													+		

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t_1^{(0)})$	$H_1(t_1^{(k)})$	$H_2(t_2^{(0)})$	$H_2(t_2^{(k)})$	№
1	+						+								
2		+							+						
3			+				+								
4				+			+								
5					+				+						
6						+	+		+						
7*	+		+	+		+					+	+			
8*		+			+	+							+	+	
9							+	+			+				
10								+			+				2
11									+	+			+		
12										+			+		
7'											+				1
8'													+		

p / n	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t^{(0)})$	$H_1(t^{(k)})$	$H_2(t^{(0)})$	$H_2(t^{(k)})$	№
1	+						+								
2		+							+						
3			+				+								
4				+			+								
5					+				+						
6						+	+		+						
7*	+		+	+		+					+	+			
8*		+			+	+							+	+	
9							+	+			+				3
10								+			+				2
11									+	+			+		
12										+			+		
7'											+				1
8'													+		

n \ p	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t^{(0)})$	$H_1(t^{(k)})$	$H_2(t^{(0)})$	$H_2(t^{(k)})$	№
1	+						+								4
2		+							+						
3			+				+								
4				+			+								
5					+				+						
6						+	+		+						
7*	+		+	+		+					+	+			
8*		+			+	+							+	+	
9							+	+			+				3
10								+			+				2
11									+	+			+		
12										+			+		
7'											+				1
8'													+		

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t_1^{(0)})$	$H_1(t_1^{(k)})$	$H_2(t_2^{(0)})$	$H_2(t_2^{(k)})$	№
1	◈						⊕								4
2		+							+						
3			◈				⊕								5
4				+			⊕								
5					+				+						
6						+	⊕		+						
7*	⊕		⊕	+		+					⊕	+			
8*		+			+	+							+	+	
9							◈	⊕			⊕				3
10								◈			⊕				2
11									+	+			+		
12										+			+		
7'											◈				1
8'													+		

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t^{(0)})$	$H_1(t^{(k)})$	$H_2(t^{(0)})$	$H_2(t^{(k)})$	№
1	◈						⊕								4
2		+							+						
3			◈				⊕								5
4				◈			⊕								6
5					+				+						
6						+	⊕		+						
7*	⊕		⊕	⊕		+					⊕	+			
8*		+			+	+							+	+	
9							◈	⊕			⊕				3
10								◈			⊕				2
11									+	+			+		
12										+			+		
7'											◈				1
8'													+		

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t_1^{(0)})$	$H_1(t_1^{(k)})$	$H_2(t_2^{(0)})$	$H_2(t_2^{(k)})$	№
1	◈						⊕								4
2		+							+						
3			◈				⊕								5
4				◈			⊕								6
5					+				+						
6						+	⊕		+						
7*	⊕		⊕	⊕		+					⊕	+			
8*		+			+	+							⊕	+	
9							◈	⊕			⊕				3
10								◈			⊕				2
11									+	+			⊕		
12										+			⊕		
7'											◈				1
8'													◈		7

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t_1^{(0)})$	$H_1(t_1^{(k)})$	$H_2(t_2^{(0)})$	$H_2(t_2^{(k)})$	№
1	⟐						⊕								4
2		+							+						
3			⟐				⊕								5
4				⟐			⊕								6
5					+				+						
6						+	⊕		+						
7*	⊕		⊕	⊕		+					⊕	+			
8*		+			+	+							⊕	+	
9							⟐	⊕			⊕				3
10								⟐			⊕				2
11									+	⊕			⊕		
12										⟐			⊕		8
7'											⟐				1
8'													⟐		7

$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t^{(0)})$	$H_1(t^{(k)})$	$H_2(t^{(0)})$	$H_2(t^{(k)})$	№
1	◈						⊕								4
2		+							⊕						
3			◈				⊕								5
4				◈			⊕								6
5					+				⊕						
6						+	⊕		⊕						
7*	⊕		⊕	⊕		+					⊕	+			
8*		+			+	+							⊕	+	
9							◈	⊕			⊕				3
10								◈			⊕				2
11									◈	⊕			⊕		9
12										◈			⊕		8
7'											◈				1
8'													◈		7

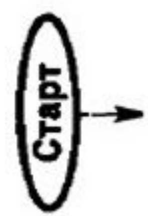
$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t^{(0)})$	$H_1(t^{(k)})$	$H_2(t^{(0)})$	$H_2(t^{(k)})$	№
1	◈						⊕								4
2		◈							⊕						10
3			◈				⊕								5
4				◈			⊕								6
5					◈				⊕						11
6						+	⊕		⊕						
7*	⊕		⊕	⊕		+					⊕	+			
8*		⊕			⊕	+							⊕	+	
9							◈	⊕			⊕				3
10								◈			⊕				2
11									◈	⊕			⊕		9
12										◈			⊕		8
7'											◈				1
8'													◈		7

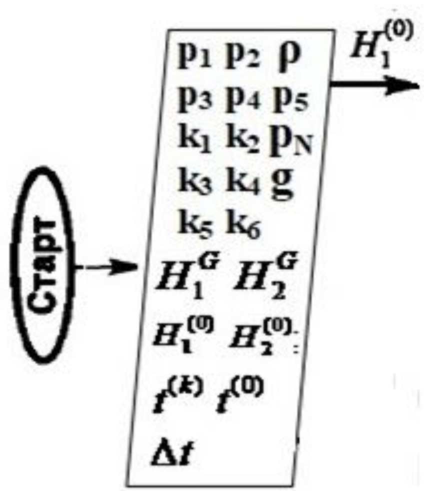
$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t_1^{(0)})$	$H_1(t_1^{(k)})$	$H_2(t_2^{(0)})$	$H_2(t_2^{(k)})$	№
1	⟐						⊕								4
2		⟐							⊕						10
3			⟐				⊕								5
4				⟐			⊕								6
5					⟐				⊕						11
6						⟐	⊕		⊕						12
7*	⊕		⊕	⊕		⊕					⊕	+			
8*		⊕			⊕	⊕							⊕	+	
9							⟐	⊕			⊕				3
10								⟐			⊕				2
11									⟐	⊕			⊕		9
12										⟐			⊕		8
7'											⟐				1
8'													⟐		7

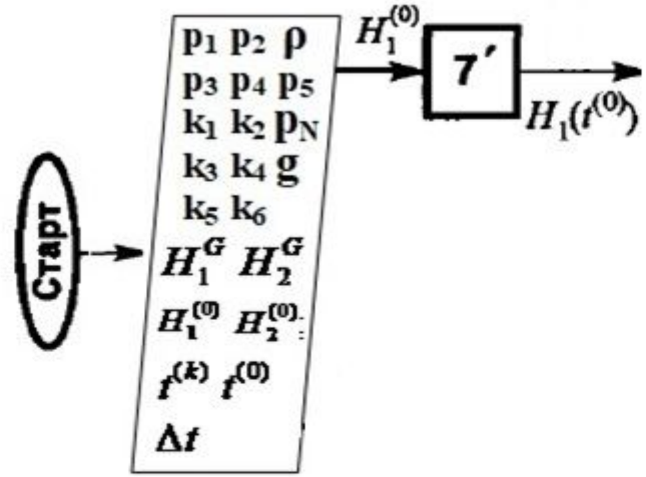
$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t^{(0)})$	$H_1(t^{(k)})$	$H_2(t^{(0)})$	$H_2(t^{(k)})$	№
1	◈						$\oplus$								4
2		◈							$\oplus$						10
3			◈				$\oplus$								5
4				◈			$\oplus$								6
5					◈				$\oplus$						11
6						◈	$\oplus$		$\oplus$						12
7*	$\oplus$		$\oplus$	$\oplus$		$\oplus$					$\oplus$	◈			13
8*		$\oplus$			$\oplus$	$\oplus$							$\oplus$	+	
9							◈	$\oplus$			$\oplus$				3
10								◈			$\oplus$				2
11									◈	$\oplus$			$\oplus$		9
12										◈			$\oplus$		8
7'											◈				1
8'													◈		7

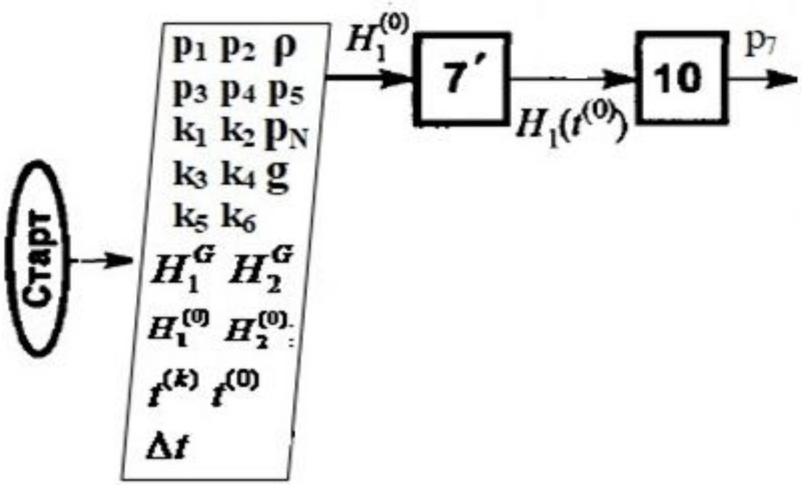
$n \backslash p$	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	p_6	p_7	p_8	p_9	$H_1(t^{(0)})$	$H_1(t^{(k)})$	$H_2(t^{(0)})$	$H_2(t^{(k)})$	№
1	◈						⊕								4
2		◈							⊕						10
3			◈				⊕								5
4				◈			⊕								6
5					◈				⊕						11
6						◈	⊕		⊕						12
7*	⊕		⊕	⊕		⊕					⊕	◈			13
8*		⊕			⊕	⊕							⊕	◈	14
9							◈	⊕			⊕				3
10								◈			⊕				2
11									◈	⊕			⊕		9
12										◈			⊕		8
7'											◈				1
8'													◈		7

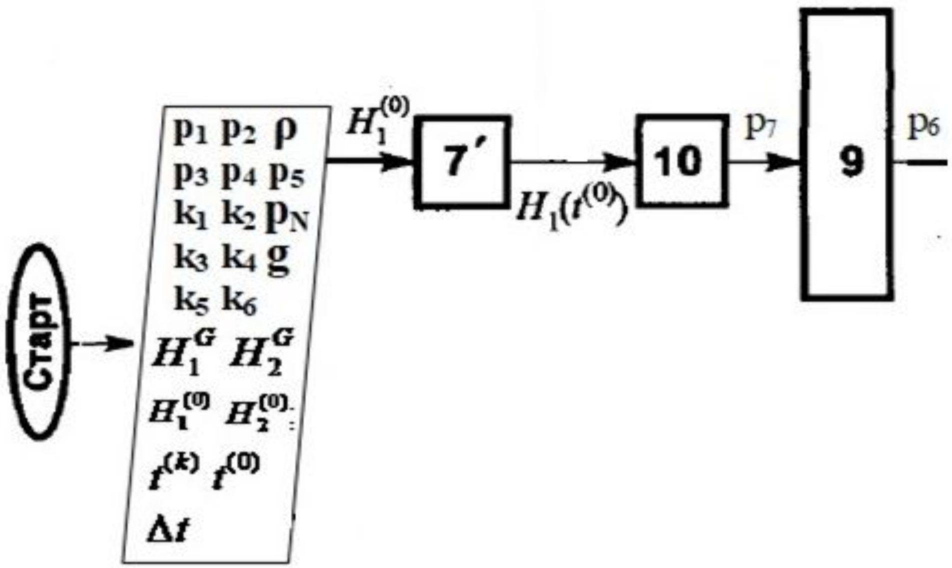
Блок-схема алгоритма

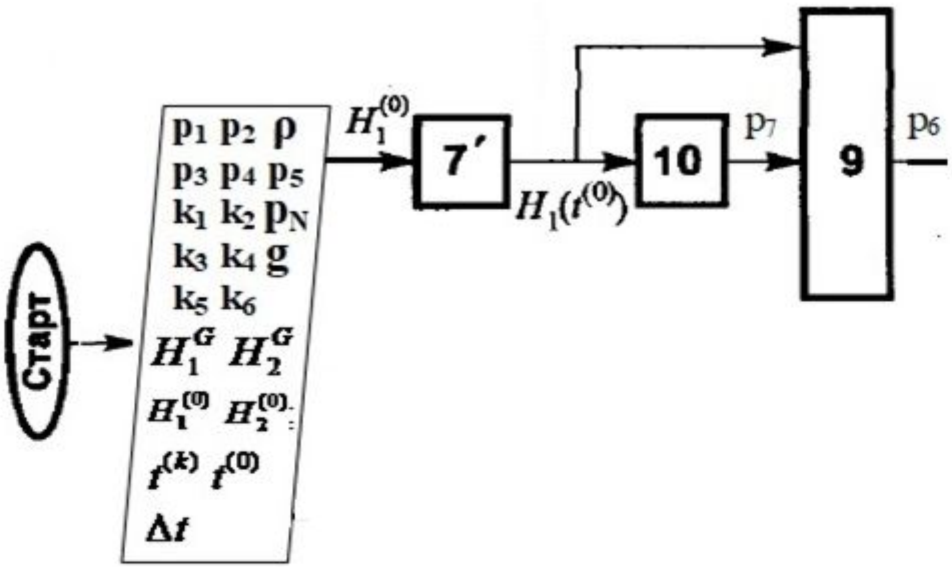


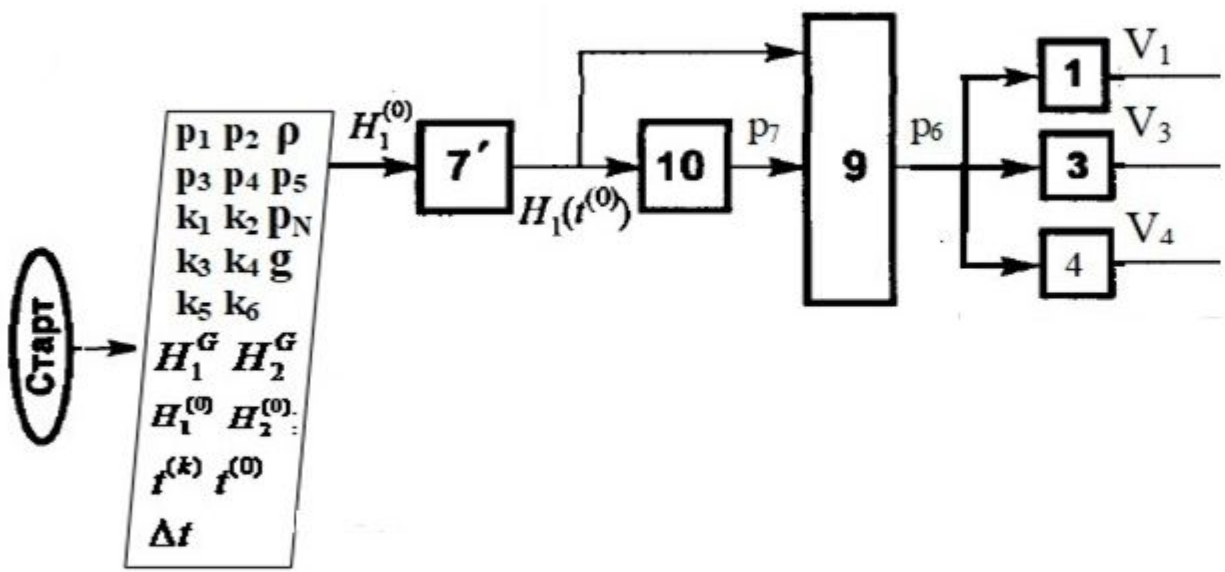

Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$

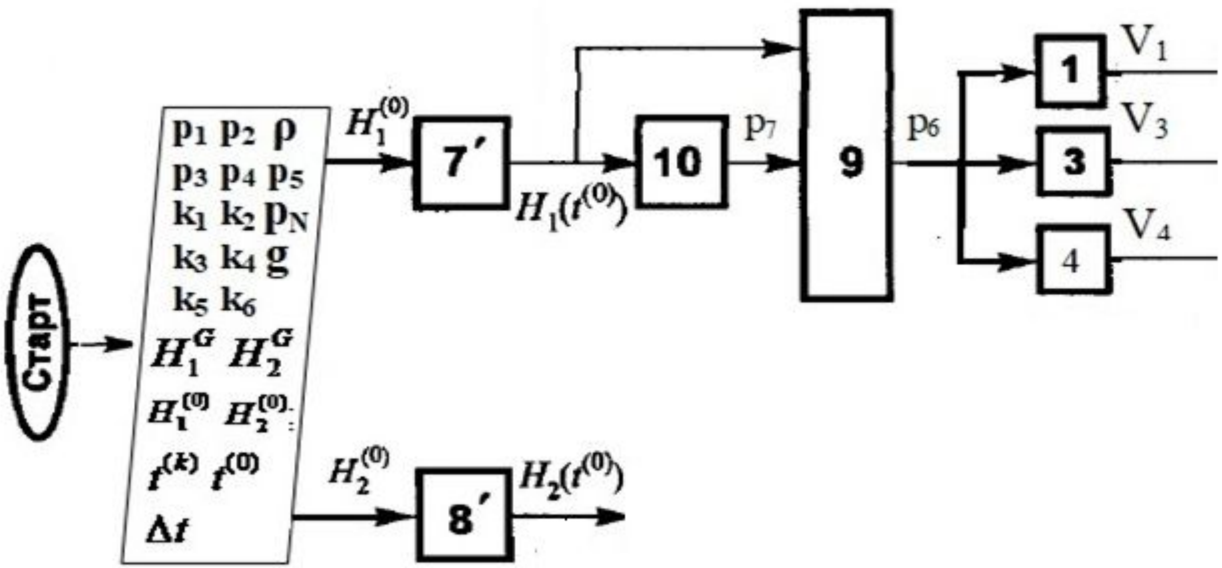

Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
7′
$H_1(t^{(0)})$

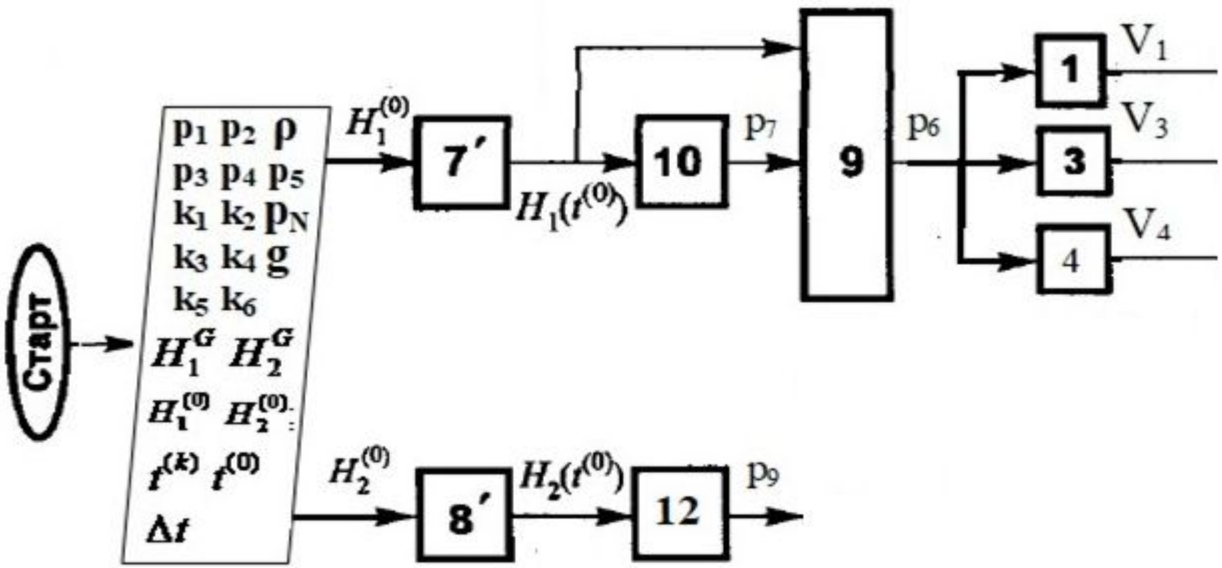

Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
7′
$H_1(t^{(0)})$
10
p7

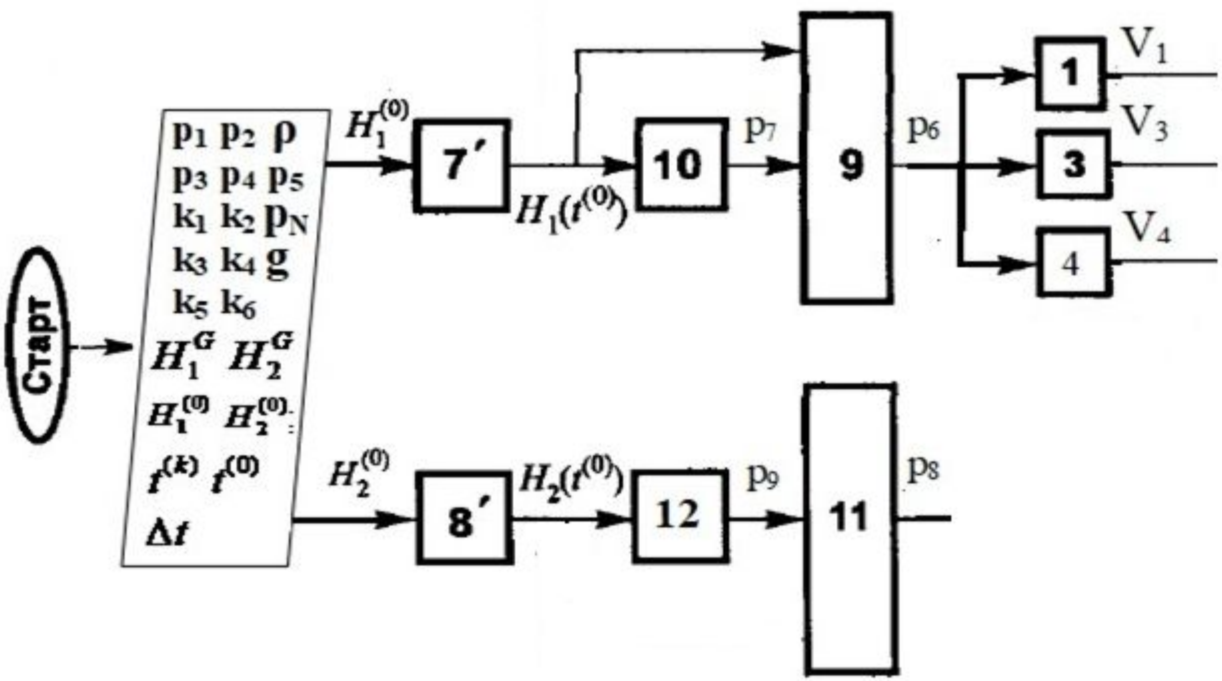

Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
7′
$H_1(t^{(0)})$
10
p7
9
p6

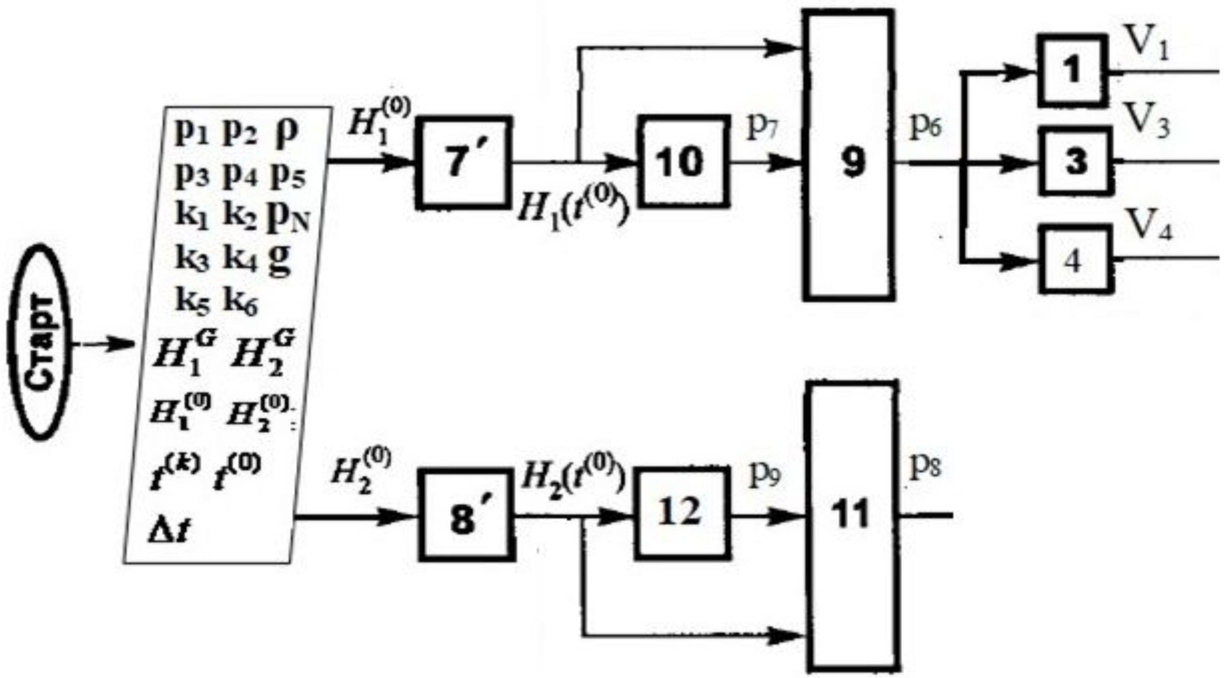

Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
7′
$H_1(t^{(0)})$
10
p7
9
p6

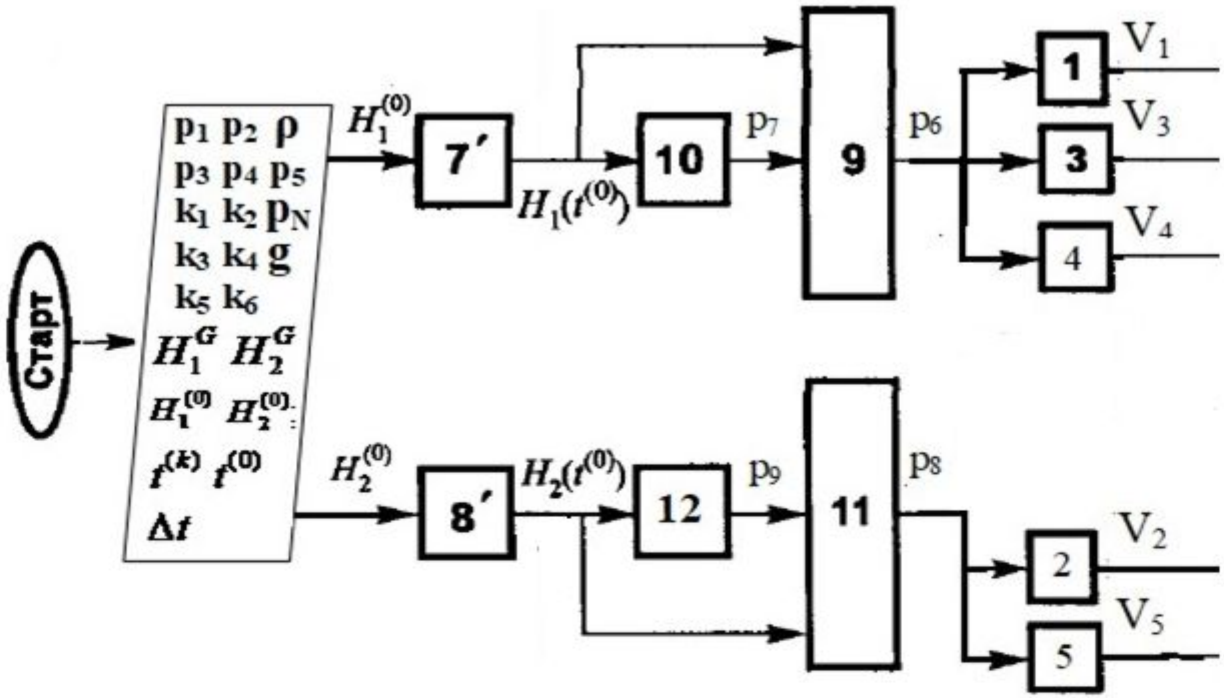

Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
7′
$H_1(t^{(0)})$
10
p7
9
p6
1
3
4
V1
V3
V4


Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H1G H2G
H1(0) H2(0)
t(k) t(0)
Δt
H1(0)
7′
H1(t(0))
10
p7
9
p6
1
V1
3
V3
4
V4
H2(0)
8′
H2(t(0))

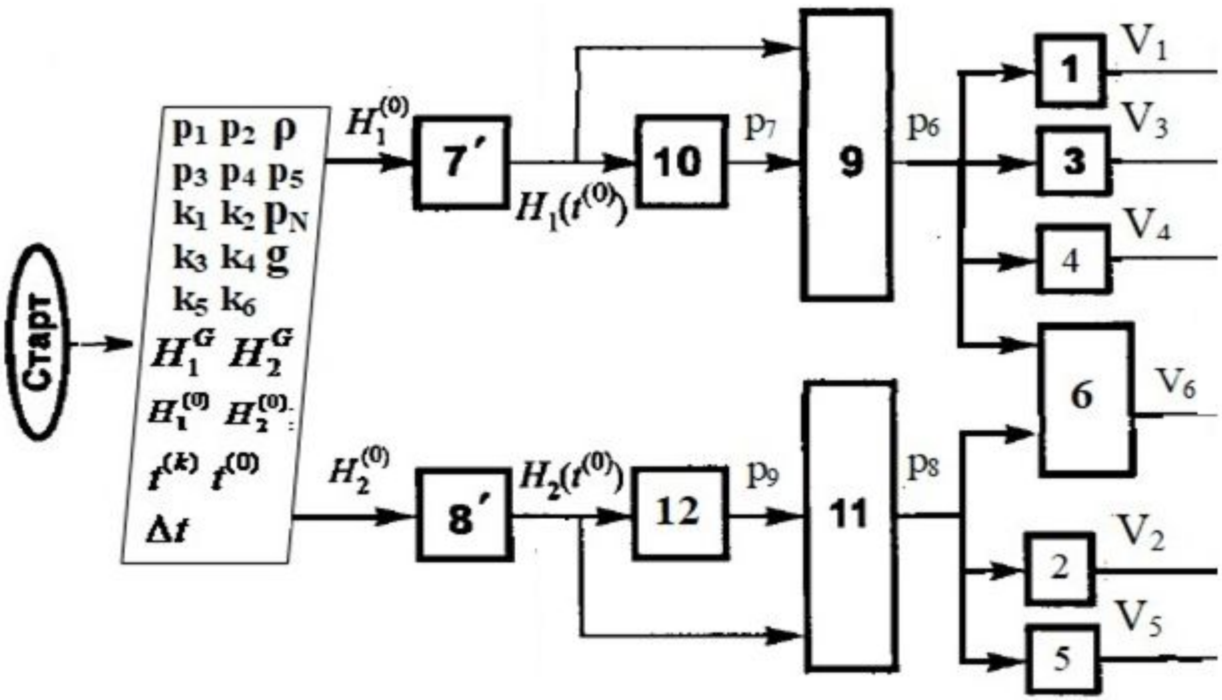

Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
7′
$H_1(t^{(0)})$
10
p7
9
p6
1
V1
3
V3
4
V4
$H_2^{(0)}$
8′
$H_2(t^{(0)})$
12
p9


Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$;
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
7′
$H_1(t^{(0)})$
10
p7
9
p6
1
V1
3
V3
4
V4
$H_2^{(0)}$
8′
$H_2(t^{(0)})$
12
p9
11
p8

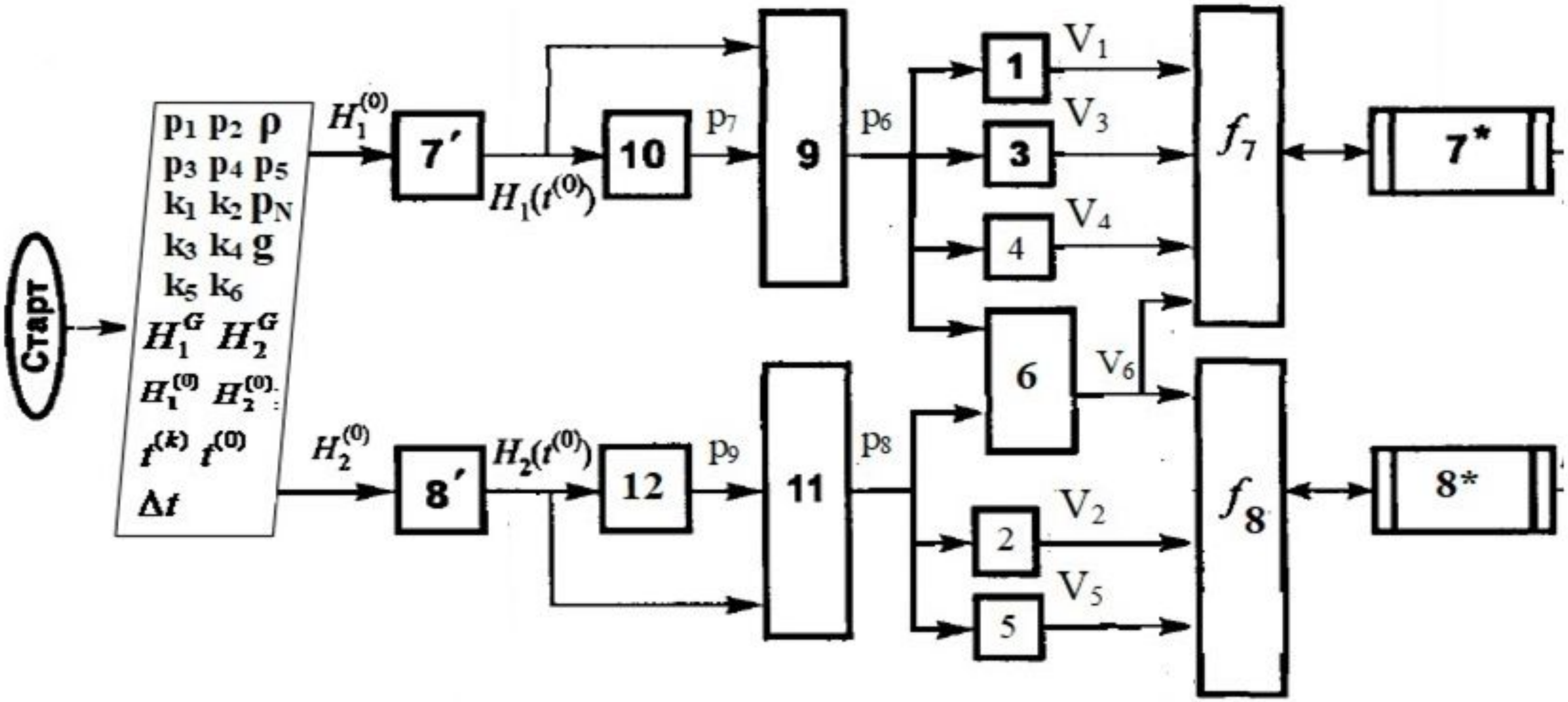

Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H1G H2G
H1(0) H2(0)
t(k) t(0)
Δt
H1(0)
7′
H1(t(0))
10
p7
9
p6
1
V1
3
V3
4
V4
H2(0)
8′
H2(t(0))
12
p9
11
p8



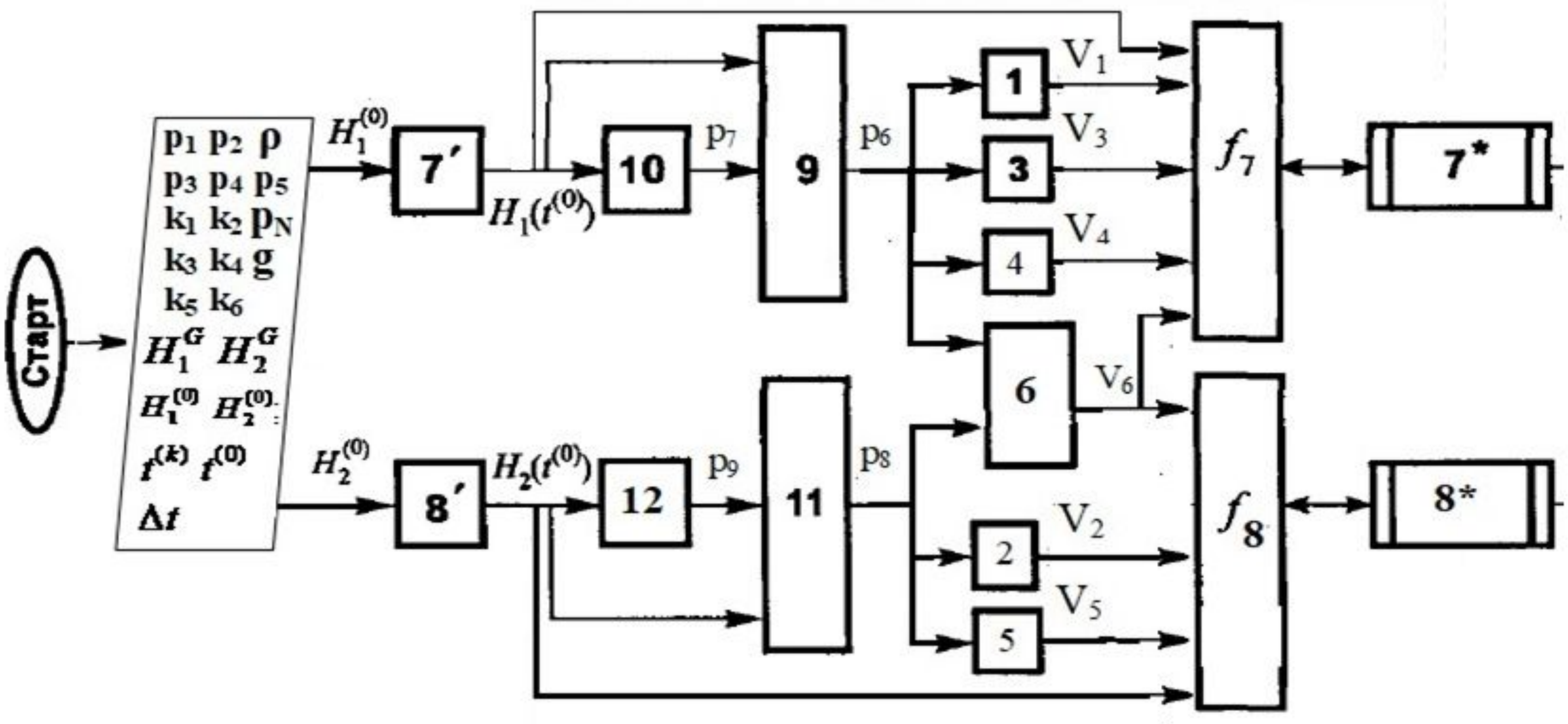
Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
7′
$H_1(t^{(0)})$
10
p7
9
p6
1
3
4
V1
V3
V4
$H_2^{(0)}$
8′
$H_2(t^{(0)})$
12
p9
11
p8
2
5
V2
V5

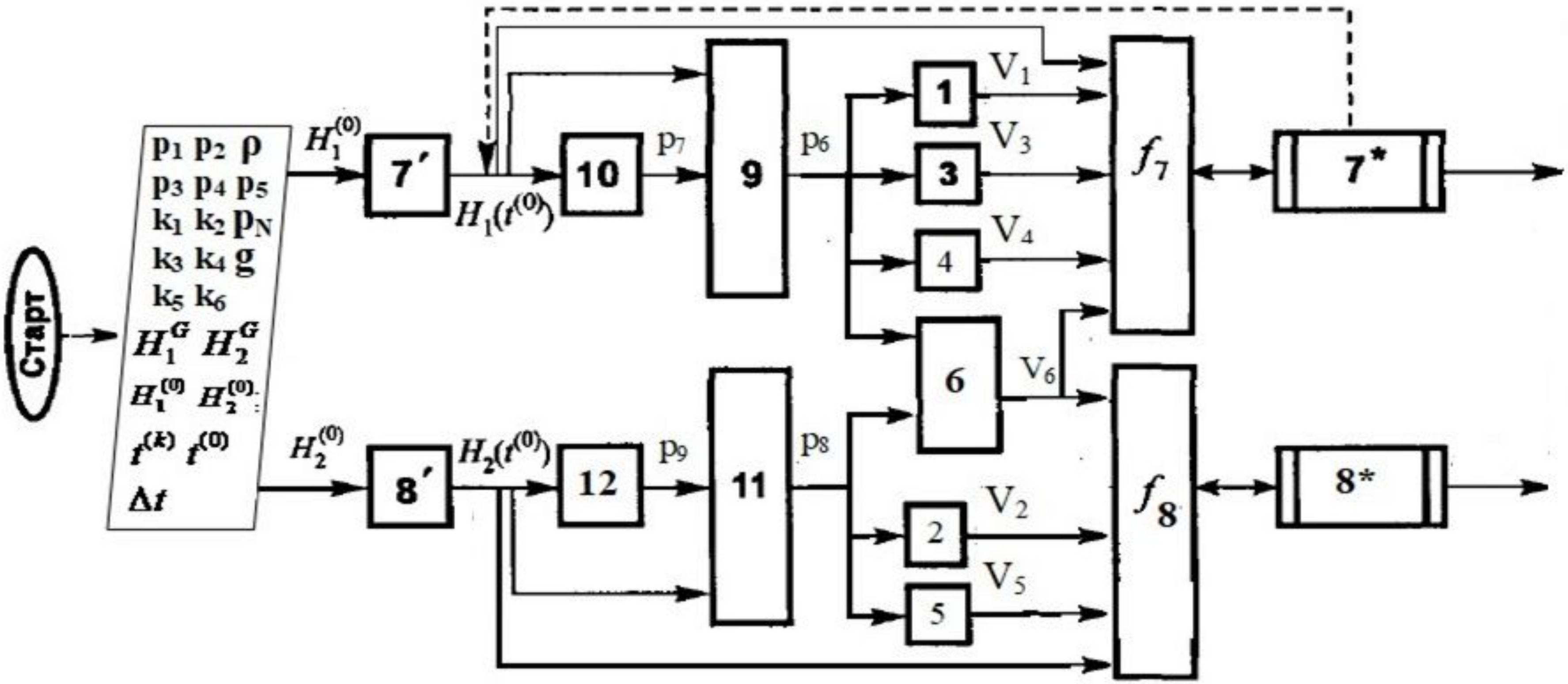


Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$;
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
7′
$H_1(t^{(0)})$
10
p7
9
p6
$H_2^{(0)}$
8′
$H_2(t^{(0)})$
12
p9
11
p8
1
V1
3
V3
4
V4
6
V6
2
V2
5
V5

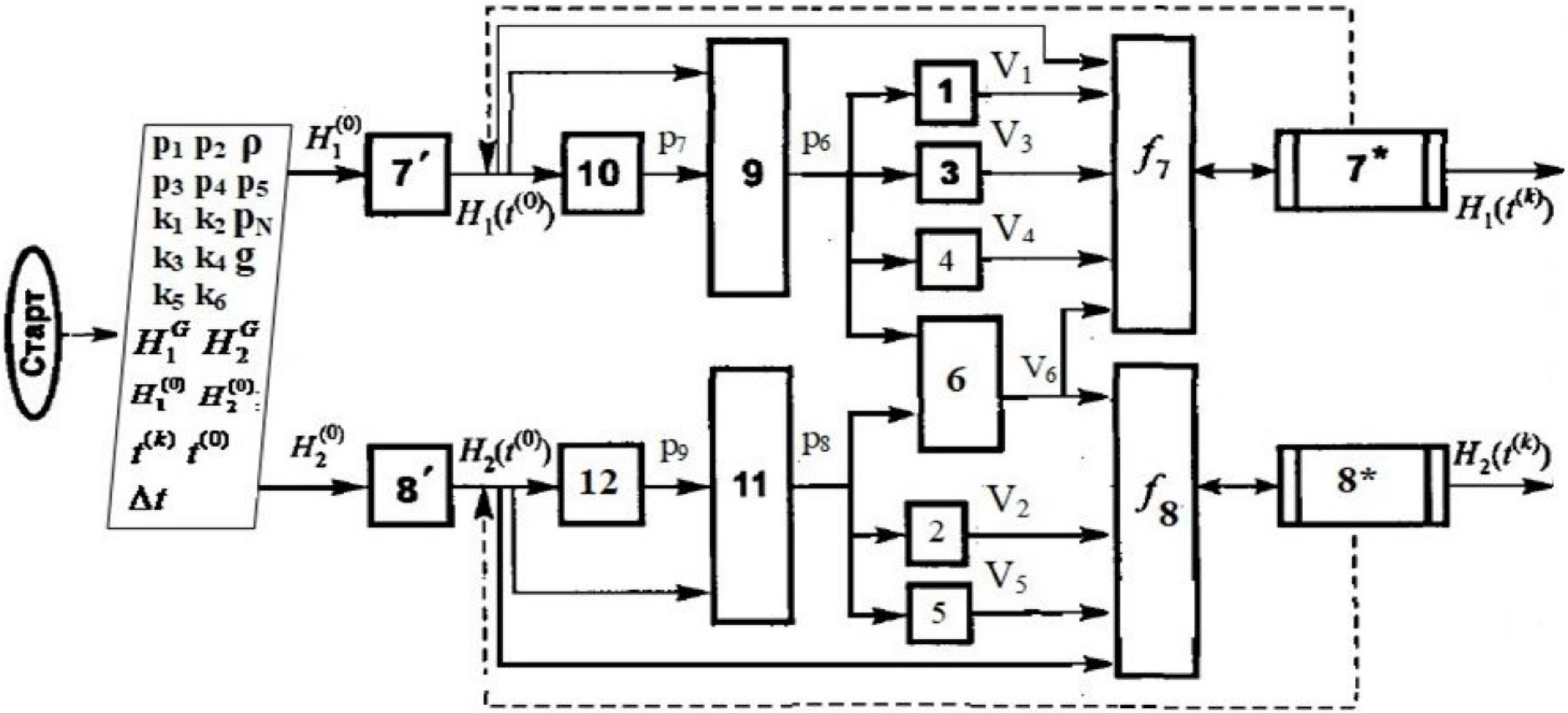


Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
7′
$H_1(t^{(0)})$
10
p7
9
p6
$H_2^{(0)}$
8′
$H_2(t^{(0)})$
12
p9
11
p8
1
3
4
6
2
5
V_1
V_3
V_4
V_6
V_2
V_5
f_7
f_8
7*
8*

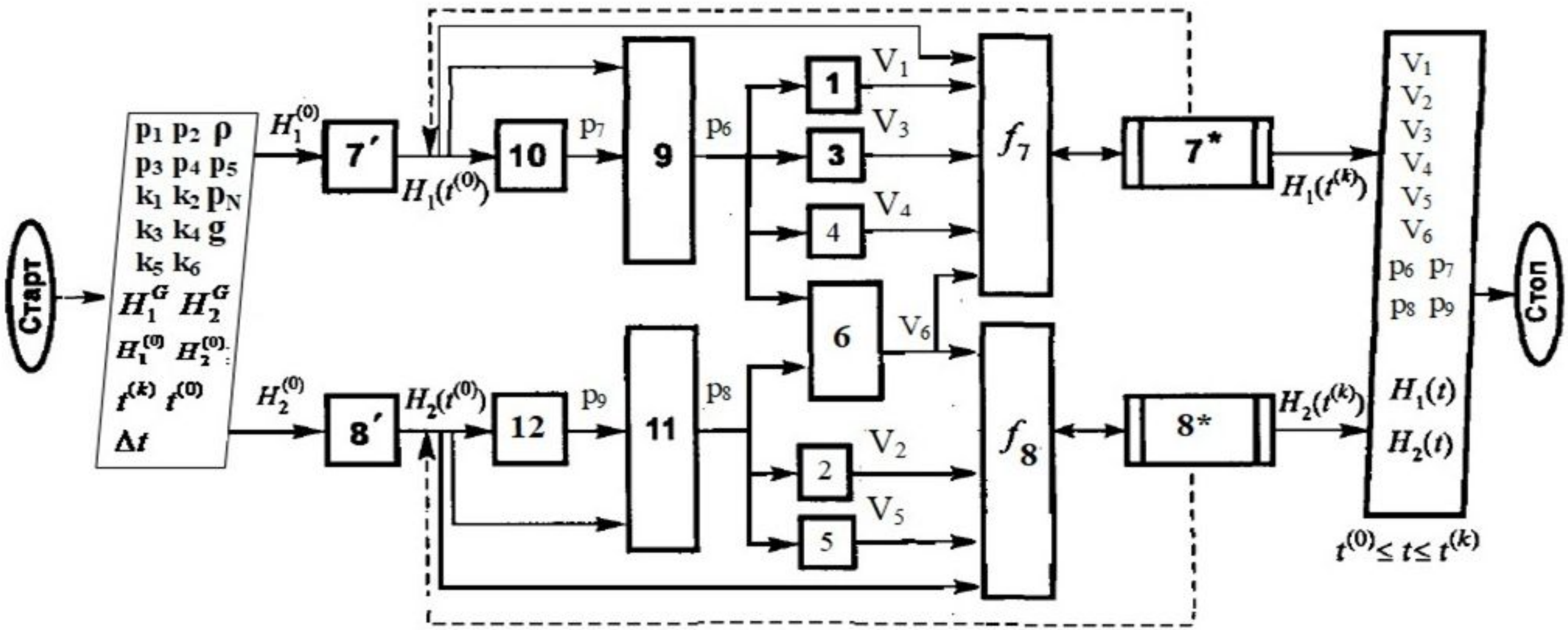

Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
7′
$H_1(t^{(0)})$
10
p7
9
p6
1
V1
3
V3
4
V4
6
V6
f_7
7*
$H_2^{(0)}$
8′
$H_2(t^{(0)})$
12
p9
11
p8
2
V2
5
V5
f_8
8*



Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
7′
$H_1(t^{(0)})$
10
p7
9
p6
1
3
4
6
V1
V3
V4
V6
f_7
7*
$H_2^{(0)}$
8′
$H_2(t^{(0)})$
12
p9
11
p8
2
5
V2
V5
f_8
8*



Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H_1^G H_2^G
$H_1^{(0)}$ $H_2^{(0)}$;
$t^{(k)}$ $t^{(0)}$
Δt
$H_1^{(0)}$
$H_2^{(0)}$
7′
8′
$H_1(t^{(0)})$
$H_2(t^{(0)})$
10
12
p7
p9
9
11
p6
p8
1
3
4
6
2
5
V1
V3
V4
V6
V2
V5
f_7
f_8
7*
8*
$H_1(t^{(k)})$
$H_2(t^{(k)})$


Старт
p1 p2 ρ
p3 p4 p5
k1 k2 pN
k3 k4 g
k5 k6
H1G H2G
H1(0) H2(0);
t(k) t(0)
Δt
H1(0)
H2(0)
7′
8′
H1(t(0))
H2(t(0))
10
12
p7
p9
9
11
p6
p8
1
3
4
6
2
5
V1
V3
V4
V6
V2
V5
f7
f8
7*
8*
H1(t(k))
H2(t(k))
V1
V2
V3
V4
V5
V6
p6 p7
p8 p9
H1(t)
H2(t)
t(0)≤ t≤ t(k)
Стоп

Построение эмпирических моделей химико-технологических процессов

Принципы построения эмпирических моделей по данным пассивных экспериментов

Последовательные этапы:

Проведение экспериментальных исследований

↓

Выбор вида зависимостей выходных переменных Y от вектора входных переменных X

↓

Определение коэффициентов уравнений, описывающих зависимости каждой выходной переменной от всех входных переменных X

↓

Регрессионный и корреляционный анализ экспериментальных данных, по которым были построены эмпирические модели

Проведение экспериментальных исследований

Различают **пассивный** и **активный** эксперимент

Теория активного эксперимента позволяет оптимизировать экспериментальные исследования и установить:

- количество экспериментальных измерений
- при каких значениях входных переменных надо проводить опыты
- реализовать эффективную методику обработки экспериментальных даных
- сократить число экспериментальных исследований
- обеспечивать достижение требуемых целей экспериментальных исследований

В **пассивном эксперименте** указанные параметры экспериментальных исследований определяются опытом, эрудицией и интуицией исследователя.

При этом различают:

- *лабораторный пассивный эксперимент* – планируемый и целенаправленный
- *промышленный пассивный эксперимент* – наблюдаемый при протекании технологических процессов

Результаты исследований при *пассивном эксперименте* представляются в виде **таблицы экспериментов**:

№ \ число x, y	x_1	x_2	…	x_r	$y_1^э$	$y_2^э$	…	$y_{\square}^э$
1	x_{11}	x_{12}	…	x_{1r}	$y_{11}^э$	$y_{12}^э$	…	$y_{1\square}^э$
2	x_{21}	x_{22}	…	x_{2r}	$y_{21}^э$	$y_{22}^э$	…	$y_{2\square}^э$
…	…	…	…	…	…	…	…	…
n	x_{n1}	x_{n2}	…	x_{nr}	$y_{n1}^э$	$y_{n2}^э$	…	$y_{n\square}^э$

где n – число экспериментов

Таблица проведения экспериментальных исследований для **одной выходной переменной** $y^э$ имеет вид:

n \ p	x_1	x_2	$\ldots$	x_r	$y^э$
1	x_{11}	x_{12}	$\ldots$	x_{1r}	$y_1^э$
2	x_{21}	x_{22}	$\ldots$	x_{2r}	$y_2^э$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
n	x_{n1}	x_{n2}	$\ldots$	x_{nr}	$y_n^э$

Выбор вида зависимости выходной переменной y от входной переменной x

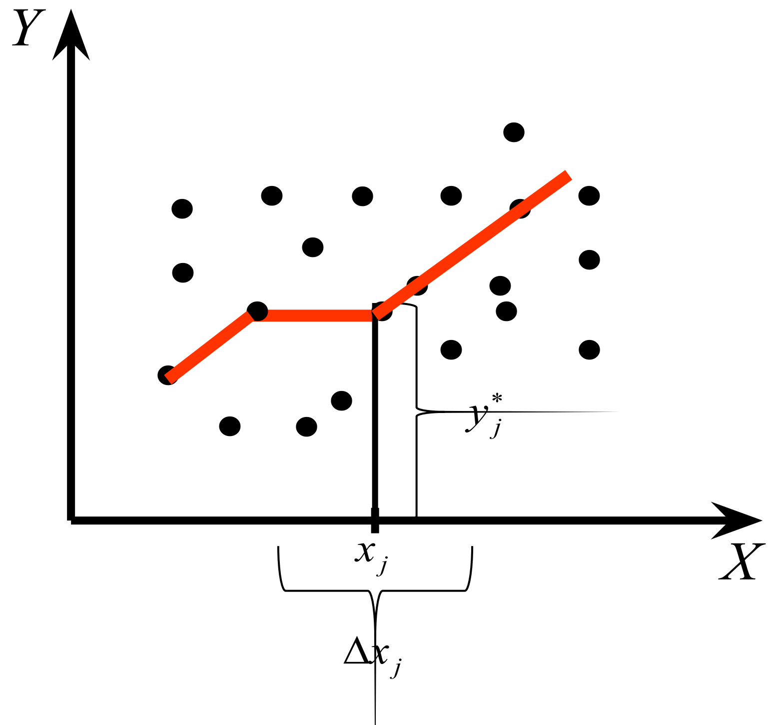
Для этой цели анализируется следующая таблица экспериментов:

№	x	$y^{\text{э}}$
1	x_1	$y_1^{\text{э}}$
2	x_2	$y_2^{\text{э}}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
n	x_n	$y_n^{\text{э}}$

II.2.1. Определение вида приближённого уравнения регрессии

В общем случае необходимо анализировать графики зависимостей экспериментальных данных выходных переменных y от входных x и по их виду выбирать конкретную форму приближенного уравнения регрессии.

Для случая одной входной переменной x по опытным данным рекомендуется построить ***эмпирическую линию регрессии*** и с её помощью выбирать вид приближенного уравнения регрессии.



При этом весь диапазон изменения x разбивается на s равных интервалов Δx.
Все точки, попавшие в данный интервал Δx_j, относят к его середине x_j^*.
После этого подсчитывают частные средние y_j^* для каждого интервала:

$$y_j^* = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} y_{ji}}{n_j}, j = 1,\ldots s$$

$n_j -$ число точек в интервале Δx_j.

В результате объём выборки определяется по формуле:

$$\sum_{j=1}^{s} n_j = n$$

Эмпирическая линия регрессии y от x получается в виде ломанной линии путём последовательного соединения отрезками прямой линии точек:

$$\left(x_j^*, y_j^*\right), \quad j = 1, \dots s$$

При выборе вида приближенного уравнения регрессии для случая нескольких входных переменных

$$\bar{x} = \left[x_1, \dots x_m\right]^T$$

может быть применён метод Брандона, который здесь не рассматривается.

Определение коэффициентов уравнения регрессии – параметров эмпирических моделей методом наименьших квадратов

В соответствии с методологией регрессионного анализа в этом случае решается задача аппроксимации экспериментальных данных методом наименьших квадратов (МНК)

При этом предполагается, что вид уравнения регрессии или уравнение эмпирической модели известно, т.е. решена **задача структурной идентификации модели**.

Задача параметрической идентификации модели, т.е. определения коэффициентов модели решается по МНК

Задачи структурной и параметрической идентификации моделей связаны между собой и неудовлетворительное решение одной из них может приводить к необходимости пересмотра результатов решения другой.

В общем случае возможны два варианта:

а) нелинейная относительно коэффициентов $\overline{a}$ модель – нелинейная регрессия

$$\hat{y} = f(\overline{x}, \overline{a})$$

б) линейная относительно коэффициентов $\overline{a}$ модель – линейная регрессия

$$\hat{y} = \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(\overline{x}) = a_0 \varphi_0(\overline{x}) + a_1 \varphi_1(\overline{x}) + ... + a_m \varphi_m(\overline{x})$$

$\varphi_j(\overline{x})$ - линейные или нелинейные функции входных переменных

$\overline{a} = a_0, a_1, \ldots a_m$ - определяемые по МНК коэффициенты модели

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

$$\varphi_0(x) = 1; \varphi_1(x) = x; \varphi_2(x) = x^2$$

Преимущества линейных моделей

1. Относительно несложная методика выбора вида модели

2. Простая процедура определения коэффициентов модели

3. Эффективная методика регрессионного и корреляционного анализа

Поэтому нелинейные модели, по возможности, стараются линеаризовать, т. е. привести к линейному виду.

Линеаризация уравнения Аррениуса

$$k = Ae^{-E/RT}$$

$$\ln k = \ln A + \left(-\frac{E}{R}\right)\frac{1}{T}$$

$$\hat{y} = a_0\varphi_0(\bar{x}) + a_1\varphi_1(\bar{x}), \quad \tilde{a}\ddot{a}\mathring{a}m = 1$$

При этом:

$$\hat{y} = \ln k \qquad a_0 = \ln A \qquad a_1 = \left(-\frac{E}{R}\right)$$

$$\varphi_0(\bar{x}) = 1 \qquad \varphi_1(\bar{x}) = \left(\frac{1}{T}\right)$$

Разновидности линейных уравнений регрессии

•**полиномиальное уравнение регрессия**, когда

$$\varphi_j(\bar{x}) = x^j \qquad j = 0,1,\ldots m$$

и её разновидности:
линейное уравнение регрессии от одной переменной (m = 1):

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x$$

параболическое уравнение регрессии (m = 2):

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

•**трансцендентные уравнения регрессии** и их разновидности в виде зависимостей:

показательного типа: $$\hat{y} = a_0 a_1^{\,x}$$

которая линеаризуется логарифмированием: $$\ln \hat{y} = \ln a_0 + x \ln a_1$$

дробно-показательного типа: $$\hat{y} = a_0 x^{a_1}$$

которая также линеаризуется логарифмированием:

$$\ln \hat{y} = \ln a_0 + a_1 \ln x$$

•**множественное уравнение регрессии**, когда число входных переменных больше 1:

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x_1 + \ldots + a_m x_m$$

$$x_0 \equiv 1$$

Для линейных и нелинейных моделей минимизируется критерий рассогласования расчетных и экспериментальных данных следующего вида:

$$Cr = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i^p - y_i^э \right)^2$$

где y_i^p и $y_i^э$ определяются при одном и том же значении элементов вектора

$$\bar{x}_i \ (i = 1,...n)$$

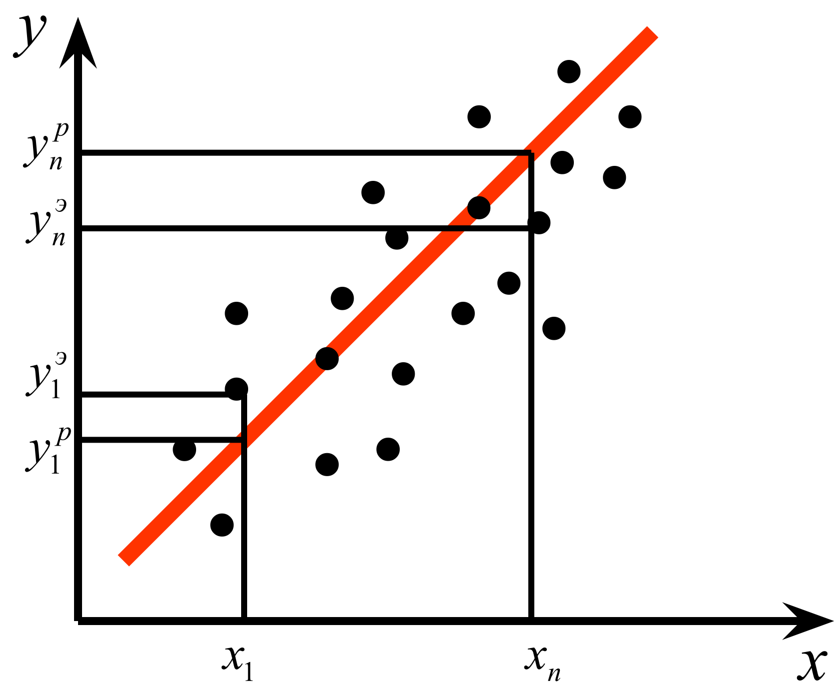
n – общее число опытов (объём выборки).

При этом определяются оптимальные значения коэффициентов $\bar{a}$, которые обеспечивают наименьшее (в частном случае – минимальное) значение критерия Cr

Графическая иллюстрация метода наименьших квадратов (МНК)

Для случая регрессии одной переменной y от x и уравнения линейной регрессии с двумя коэффициентами:

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x$$



Для линейных и нелинейных уравнений регрессии с $m + 1$ коэффициентами:

$$\overline{a} = \left[a_0, a_1, \ldots a_m\right]^T$$

критерий МНК также является функцией многих переменных от параметров $\overline{a}$

$$Cr = Cr\left(a_0, a_1, \ldots a_m\right)$$

Для определения (подгонки) коэффициентов (параметров) модели необходимо, чтобы критерий МНК стал наименьшим.

Задача определения коэффициентов **нелинейных моделей** сводится к реализации одного из алгоритмов оптимизации для определения минимума критерия МНК:

$$\min_{\bar{a} \in \bar{a}^{\text{доп}}} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i^p - y_i^э \right)^2$$

$\bar{a}^{\text{доп}}$ - допустимая область изменения параметров $\bar{a}$ - ограничения первого рода.

В этом случае для определения коэффициентов необходимо реализовать алгоритм оптимизации, позволяющий найти наименьшее значение критерия:

$$Cr(a_0, a_1, \ldots a_m) = \sum_{i=1}^{n} (y_i^p - y_i^э)^2$$

Задача определения коэффициентов **линейных моделей** сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), исходя из необходимого условия экстремума функции многих переменных

$$Cr\left(a_0, a_1, \ldots a_m\right) = \sum_{i=1}^{n} (y_i^p - y_i^э)^2$$

то есть СЛАУ, решаемая относительно коэффициентов:

$$\overline{a} = \left[a_0, a_1, \ldots a_m\right]^T$$

имеет вид:

$$\frac{\partial Cr}{\partial a_0} = 0; \quad \frac{\partial Cr}{\partial a_1} = 0; \quad \ldots \frac{\partial Cr}{\partial a_m} = 0$$

Вывод формулы для определения коэффициентов линейных и линеаризованных моделей

Матричная формула определения коэффициентов имеет вид:

$$\hat{\bar{a}} = \left(\overline{\overline{\Phi}}^T \overline{\overline{\Phi}} \right)^{-1} \overline{\overline{\Phi}}^T \bar{y}^{э}$$

где матрица $\overline{\overline{\Phi}}$ - это матрица вида

$$\underset{n\times(m+1)}{\overline{\overline{\Phi}}} = \begin{bmatrix} \varphi_0(\overline{x}_1) & \varphi_1(\overline{x}_1) & \dots & \varphi_m(\overline{x}_1) \\ \varphi_0(\overline{x}_2) & \varphi_1(\overline{x}_2) & \dots & \varphi_m(\overline{x}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_0(\overline{x}_n) & \varphi_1(\overline{x}_n) & \dots & \varphi_m(\overline{x}_n) \end{bmatrix}$$

элементы которой зависят от **экспериментальных значений входных переменных** и **вида функций** $\overline{\varphi}(\overline{x})$;

вектор $\overline{y}^э$ - это вектор наблюдений **экспериментальных значений выходной переменной**

В случае линеаризации моделей элементы **матрицы** $\overline{\overline{\Phi}}$ и **вектора** $\overline{y}^э$ определяются из выражений, соответствующих выбору способа линеаризации.

Для **вывода этой формулы** критерий МНК необходимо представить в виде:

$$Cr = \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j\left(\bar{x}_i\right) - y_i^{э}\right)^2$$

и, воспользовавшись необходимым условием экстремума функции многих переменных, решать полученную систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ):

$$\frac{\partial Cr}{\partial a_0} = 2\sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j\left(\bar{x}_i\right) - y_i^{э}\right)\varphi_0\left(\bar{x}_i\right) = 0$$

$$\frac{\partial Cr}{\partial a_1} = 2\sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j\left(\bar{x}_i\right) - y_i^{э}\right)\varphi_1\left(\bar{x}_i\right) = 0$$

....

$$\frac{\partial Cr}{\partial a_m} = 2\sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j\left(\bar{x}_i\right) - y_i^{э}\right)\varphi_m\left(\bar{x}_i\right) = 0$$

Перегруппировав члены в последней системе уравнений, можно записать СЛАУ в виде:

$$\sum_{j=0}^{m} a_j \sum_{i=1}^{n} \varphi_j(\bar{x}_i)\varphi_u(\bar{x}_i) = \sum_{i=1}^{n} \varphi_u(\bar{x}_i) y_i^{э} \quad (j, u = 0,1,\ldots m)$$

И, если ввести в рассмотрение информационную матрицу

$$\mathrm{I}_{uj} \quad \left(j = 0,1,\ldots m;\ u = 0,1,\ldots m\right):$$

$$\mathrm{I}_{uj} = \sum_{i=1}^{n} \varphi_u(\bar{x}_i)\varphi_j(\bar{x}_i) \quad j = 0,1,\ldots m; u = 0,1,\ldots m$$

то она окажется квадратной, симметричной и значения её элементов зависят только от входных переменных и конкретного вида функций $\varphi_j(\bar{x})$

В матричном виде информационную матрицу $\overline{\overline{\mathrm{I}}}$ можно представить в виде произведения транспонированной и исходной матрицы входных переменных $\overline{\overline{\Phi}}$:

$$\overline{\overline{\mathrm{I}}} = \overline{\overline{\Phi}}^{T} \overline{\overline{\Phi}}$$

Матрица, зависящая от входных переменных, имеет вид:

$$\underset{n\times(m+1)}{\overline{\overline{\Phi}}} = \begin{bmatrix} \varphi_0(\overline{x}_1) & \varphi_1(\overline{x}_1) & \dots & \varphi_m(\overline{x}_1) \\ \varphi_0(\overline{x}_2) & \varphi_1(\overline{x}_2) & \dots & \varphi_m(\overline{x}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_0(\overline{x}_n) & \varphi_1(\overline{x}_n) & \dots & \varphi_m(\overline{x}_n) \end{bmatrix}$$

Соответственно правую часть рассматриваемой СЛАУ можно записать:

$$b_u = \sum_{i=1}^{n} \varphi_u\left(\bar{x}_i\right) y_i^{э} \quad (u = 0,1,\ldots m)$$

или в матричном виде:

$$\bar{b} = \bar{\bar{\Phi}}^{T} \, \bar{y}^{э}$$

В результате СЛАУ, решаемая для определения коэффициентов эмпирической модели, может быть представлена:

$$\sum_{j=0}^{m} \mathrm{I}_{uj} a_j = b_u \quad (u = 0,1,\ldots m)$$

или в матричном виде:

$$\bar{\bar{\mathrm{I}}} \cdot \bar{a} = \bar{b}$$

Если для определения коэффициентов использовать метод обратной матрицы, то получится:

$$\overline{\overline{\mathrm{I}}}^{-1} \cdot \overline{\overline{\mathrm{I}}} \cdot \overline{\overline{a}} = \overline{\overline{\mathrm{I}}}^{-1} \cdot \overline{b}$$

$$\overline{\overline{\mathrm{E}}} = \overline{\overline{\mathrm{I}}}^{-1} \overline{\overline{\mathrm{I}}},$$

$$\overline{\overline{\mathrm{E}}} \cdot \overline{a} = \overline{\overline{\mathrm{I}}}^{-1} \overline{b},$$

$$\overline{a} = \overline{\overline{\mathrm{I}}}^{-1} \overline{b}$$

Матричная формула для определения коэффициентов линейной регрессии (параметров эмпирической модели):

$$\hat{\bar{a}} = \left(\overline{\overline{\Phi}}^{T} \overline{\overline{\Phi}} \right)^{-1} \overline{\overline{\Phi}}^{T} \bar{y}^{э}$$

Таким образом, для определения коэффициентов линейной или линеаризованной регрессионной модели необходимо выполнить следующую последовательность действий:

- сформировать вектор наблюдений $\bar{y}^{э}$ и вычислить его компоненты (только для линеаризованных моделей);

- сформировать и рассчитать компоненты матрицы, зависящей от входных переменных $\overline{\overline{\Phi}}$;

- транспонировать матрицу $\overline{\overline{\Phi}} \Rightarrow \overline{\overline{\Phi}}^{T}$;

- перемножить транспонированную матрицу $\overline{\overline{\Phi}}^{T}$ на исходную матрицу $\overline{\overline{\Phi}}$:

$$\overline{\overline{\Phi}}^{T}\overline{\overline{\Phi}};$$

- выполнить обращение информационной матрицы - $\left(\overline{\overline{\Phi}}^{T}\overline{\overline{\Phi}}\right)^{-1}$;

- умножить полученную обратную матрицу на матрицу $\overline{\overline{\Phi}}^{T}$;

- умножить полученный результат на вектор наблюдений $\overline{y}^{э}$ и получить выборочные коэффициенты регрессии $\hat{\overline{a}}$

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x + a_2 x^2;$$

$$\bar{\bar{\varphi}} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial a_0} \qquad \frac{\partial \hat{y}}{\partial a_1} \qquad \frac{\partial \hat{y}}{\partial a_2}$$

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2;$$

$$\bar{\bar{\varphi}} = \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \frac{\partial \hat{y}}{\partial a_0} & \frac{\partial \hat{y}}{\partial a_1} & \frac{\partial \hat{y}}{\partial a_2} \end{array} \\ \left[\begin{array}{ccc} 1 & x_{11} & x_{21} \\ 1 & x_{12} & x_{22} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} \end{array}\right] \end{array}$$

Вывести матричную формулу для определения коэффициентов регрессии *A*, *B*, *C* *D* в уравнении, связывающего давление насыщенного пара индивидуального вещества (*p*) с температурой (*T*) с помощью функции:

$$p = \exp(A + BT + CT^2 + DT^3)$$

Построить таблицу пассивного эксперимента. При обработке результатов пассивного эксперимента линеаризовать регрессионную модель, и реализовать аналитический и алгоритмический подходы для получения решения.

Таблица пассивного эксперимента:

№ эксперимента	T_i		$p_i^э$
1	T_1		$p_1^э$
2	T_2		$p_2^э$
….	….		….
n	T_n		$p_n^э$

Линеаризация уравнения регрессии:

$$\ln p = A + BT + CT^2 + DT^3$$

$$a_0 = A; a_1 = B; a_2 = C; a_3 = D;$$

Аналитический подход:

Критерий рассогласования расчётных и экспериментальных данных:

$$R = \sum_{i=1}^{n} (y_i^p - y_i^э)^2;$$

$$y_i^p = a_0 + a_1 T_i + a_2 T_i^2 + a_3 T_i^3;$$

$$y_i^э = \ln p_i^э;$$

$$R = \sum_{i=1}^{n} (a_0 + a_1 T_i + a_2 T_i^2 + a_3 T_i^3 - \ln p_i^э)^2 \rightarrow MIN$$

Нахождение минимума критерия МНК по необходимому условию функции многих
переменных:

$$\frac{\partial R}{\partial a_0}=0;\quad 2\sum_{i=1}^{n}(a_0+a_1T_i+a_2T_i^2+a_3T_i^3-\ln p_i^{э})\cdot 1=0;$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_1}=0;\quad 2\sum_{i=1}^{n}(a_0+a_1T_i+a_2T_i^2+a_3T_i^3-\ln p_i^{э})\cdot T_i=0;$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_2}=0;\quad 2\sum_{i=1}^{n}(a_0+a_1T_i+a_2T_i^2+a_3T_i^3-\ln p_i^{э})\cdot T_i^2=0;$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_3}=0;\quad 2\sum_{i=1}^{n}(a_0+a_1T_i+a_2T_i^2+a_3T_i^3-\ln p_i^{э})\cdot T_i^3=0;$$

Приведение СЛАУ к стандартному виду:

$$a_0\sum_{i=1}^{n}1+a_1\sum_{i=1}^{n}T_i+a_2\sum_{i=1}^{n}T_i^2+a_3\sum_{i=1}^{n}T_i^3=\sum_{i=1}^{n}\ln p_i^{э};$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}T_i+a_1\sum_{i=1}^{n}T_i^2+a_2\sum_{i=1}^{n}T_i^3+a_3\sum_{i=1}^{n}T_i^4=\sum_{i=1}^{n}T_i\ln p_i^{э};$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}T_i^2+a_1\sum_{i=1}^{n}T_i^3+a_2\sum_{i=1}^{n}T_i^4+a_3\sum_{i=1}^{n}T_i^5=\sum_{i=1}^{n}T_i^2\ln p_i^{э};$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}T_i^3+a_1\sum_{i=1}^{n}T_i^4+a_2\sum_{i=1}^{n}T_i^5+a_3\sum_{i=1}^{n}T_i^6=\sum_{i=1}^{n}T_i^3\ln p_i^{э};$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} T_i & \sum_{i=1}^{n} T_i^2 & \sum_{i=1}^{n} T_i^3 \\ \sum_{i=1}^{n} T_i & \sum_{i=1}^{n} T_i^2 & \sum_{i=1}^{n} T_i^3 & \sum_{i=1}^{n} T_i^4 \\ \sum_{i=1}^{n} T_i^2 & \sum_{i=1}^{n} T_i^3 & \sum_{i=1}^{n} T_i^4 & \sum_{i=1}^{n} T_i^5 \\ \sum_{i=1}^{n} T_i^3 & \sum_{i=1}^{n} T_i^4 & \sum_{i=1}^{n} T_i^5 & \sum_{i=1}^{n} T_i^6 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} \ln p_i^{э} \\ \sum_{i=1}^{n} T_i \ln p_i^{э} \\ \sum_{i=1}^{n} T_i^2 \ln p_i^{э} \\ \sum_{i=1}^{n} T_i^3 \ln p_i^{э} \end{bmatrix}$$

$$\bar{\bar{A}} \cdot \bar{a} = \bar{b} \quad \Rightarrow \quad \bar{a} = \bar{\bar{A}}^{-1} \cdot \bar{b}$$

Алгоритмический подход:

Выбор стандартного типа уравнения регрессии:

Матрица, элементы которой зависят от вида уравнения регрессии и значений входных переменных, при которых проведены опыты и вектор $\underline{y}^{э}$

$$\overset{a_0}{\ln p = A} + \underset{a_1}{B}T + \underset{a_2}{C}T^2 + \overset{a_3}{D}T^3; \quad \hat{y} = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$$

$$x - T$$

$$\begin{array}{ccccc} & \frac{\partial \hat y}{\partial a_0} & \frac{\partial \hat y}{\partial a_1} & \frac{\partial \hat y}{\partial a_2} & \frac{\partial \hat y}{\partial a_3} \\ \bar{\bar{\varphi}} = & \left[\begin{matrix} 1 & x & x^2 & x^3 \\ 1 & x & x^2 & x^3 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x & x^2 & x^3 \end{matrix}\right. & & & \left.\right] \end{array} = \begin{bmatrix} 1 & T_1 & T_1^2 & T_1^3 \\ 1 & T_2 & T_2^2 & T_2^3 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & T_n & T_n^2 & T_n^3 \end{bmatrix}$$

$$\bar{y}^{э} = \begin{bmatrix} \ln p_1^{э} \\ \ln p_2^{э} \\ \cdots \\ \ln p_n^{э} \end{bmatrix}$$

$$\overset{==}{I}_{4\mathrm{x}4} = \overset{=}{\Phi}{}^{T}_{4\mathrm{x}n}\, \overset{=}{\Phi}_{n\mathrm{x}4};$$

$$\bar{b}_{4\mathrm{x}1} = \overset{=}{\Phi}{}^{T}_{4\mathrm{x}n}\, \bar{y}^{\,э};$$

$$\bar{a}_{4\mathrm{x}1} = \overset{=}{I}{}^{-1}_{4\mathrm{x}4}\, \bar{b}_{4\mathrm{x}1};$$

$$\bar{a} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}$$

$$A = a_0; B = a_1; C = a_2; D = a_3;$$

Вывести матричную формулу для определения коэффициентов регрессии *A*, *B*, *C* *D* в уравнении, связывающего давление насыщенного пара индивидуального вещества (*p*) с температурой (*T*) с помощью функции:

$$p = \exp\left(A + \frac{B}{T} + CT + D\ln T\right)$$

Построить таблицу пассивного эксперимента. При обработке результатов пассивного эксперимента линеаризовать регрессионную модель, и реализовать аналитический и алгоритмический подходы для получения решения.

Таблица пассивного эксперимента:

№ эксперимента	T_i		$p_i^э$
1	T_1		$p_1^э$
2	T_2		$p_2^э$
….	….		….
n	T_n		$p_n^э$

Линеаризация уравнения регрессии:

$$\ln p = A + \frac{B}{T} + CT + D\ln T$$

$$a_0 = A; a_1 = B; a_2 = C; a_3 = D;$$

Аналитический подход:

Критерий рассогласования расчётных и экспериментальных данных:

$$R = \sum_{i=1}^{n} (y_i^p - y_i^э)^2;$$

$$y_i^p = a_0 + a_1 \frac{1}{T_i} + a_2 T_i + a_3 \ln T_i;$$

$$y_i^э = \ln p_i^э;$$

$$R = \sum_{i=1}^{n} (a_0 + a_1 \frac{1}{T_i} + a_2 T_i + a_3 \ln T_i - \ln p_i^э)^2 \rightarrow MIN$$

Нахождение минимума критерия МНК по необходимому условию функции многих
переменных:

$$\frac{\partial R}{\partial a_0}=0; \quad 2\sum_{i=1}^{n}\left(a_0+a_1\frac{1}{T_i}+a_2T_i+a_3\ln T_i-\ln p_i^{э}\right)\cdot 1=0;$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_1}=0; \quad 2\sum_{i=1}^{n}\left(a_0+a_1\frac{1}{T_i}+a_2T_i+a_3\ln T_i-\ln p_i^{э}\right)\cdot \frac{1}{T_i}=0;$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_2}=0; \quad 2\sum_{i=1}^{n}\left(a_0+a_1\frac{1}{T_i}+a_2T_i+a_3\ln T_i-\ln p_i^{э}\right)\cdot T_i=0;$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_3}=0; \quad 2\sum_{i=1}^{n}\left(a_0+a_1\frac{1}{T_i}+a_2T_i+a_3\ln T_i-\ln p_i^{э}\right)\cdot \ln T_i=0;$$

Приведение СЛАУ к стандартному виду:

$$a_0\sum_{i=1}^{n}1+a_1\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{T_i}+a_2\sum_{i=1}^{n}T_i+a_3\sum_{i=1}^{n}\ln T_i=\sum_{i=1}^{n}\ln p_i^{э};$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{T_i}+a_1\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{T_i^2}+a_2\sum_{i=1}^{n}1+a_3\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{T_i}\ln T_i=\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{T_i}\ln p_i^{э};$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}T_i+a_1\sum_{i=1}^{n}1+a_2\sum_{i=1}^{n}T_i^2+a_3\sum_{i=1}^{n}T_i\ln T_i=\sum_{i=1}^{n}T_i\ln p_i^{э};$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}\ln T_i+a_1\sum_{i=1}^{n}\frac{\ln T_i}{T_i}+a_2\sum_{i=1}^{n}T_i\ln T_i+a_3\sum_{i=1}^{n}\ln^2 T_i=\sum_{i=1}^{n}\ln T_i\ln p_i^{э}$$

$$
\begin{bmatrix}
n & \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{T_i} & \sum_{i=1}^{n}T_i & \sum_{i=1}^{n}\ln T_i \\
\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{T_i} & \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{T_i^2} & n & \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{T_i}\ln T \\
\sum_{i=1}^{n}T_i & n & \sum_{i=1}^{n}T_i^2 & \sum_{i=1}^{n}T_i\ln T_i \\
\sum_{i=1}^{n}\ln T_i & \sum_{i=1}^{n}\frac{\ln T_i}{T_i} & \sum_{i=1}^{n}T_i\ln T_i & \sum_{i=1}^{n}\ln^2 T_i
\end{bmatrix}
\cdot
\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\sum_{i=1}^{n}\ln p_i^э \\
\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{T_i}\ln p_i^э \\
\sum_{i=1}^{n}T_i\ln p_i^э \\
\sum_{i=1}^{n}\ln T_i\,\ln p_i^э
\end{bmatrix}
$$

$$
\overline{\overline{A}}\cdot\overline{a}=\overline{b} \quad\Rightarrow\quad \overline{a}=\overline{\overline{A}}^{-1}\cdot\overline{b}
$$

<u>Алгоритмический подход:</u>

Выбор стандартного типа уравнения регрессии:

Матрица, элементы которой зависят от вида уравнения регрессии и значений входных переменных, при которых проведены опыты и вектор $\underline{y}^{э}$

$$\ln p = \underset{a_0}{A} + \frac{\overset{B=a_1}{B}}{T} + \underset{a_2}{C}\,T + \underset{a_3}{D}\ln T; \quad \hat{y} = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3$$

$$y_i^{\text{э}} = \ln p_i^{\text{э}}$$

$$x_1 - \frac{1}{T}; \quad x_2 - T; \quad x_3 - \ln T;$$

$$\bar{\bar{\varphi}} = \begin{array}{cccc} \frac{\partial \hat{y}}{\partial a_0} & \frac{\partial \hat{y}}{\partial a_1} & \frac{\partial \hat{y}}{\partial a_2} & \frac{\partial \hat{y}}{\partial a_3} \\ \end{array}$$

$$\bar{\bar{\varphi}} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & x_{31} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & x_{32} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & x_{3n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{T_1} & T_1 & \ln T_1 \\ 1 & \frac{1}{T_2} & T_2 & \ln T_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \frac{1}{T_n} & T_n & \ln T_n \end{bmatrix}$$

$$\bar{y}^{\text{э}} = \begin{bmatrix} \ln p_1^{\text{э}} \\ \ln p_2^{\text{э}} \\ \dots \\ \ln p_n^{\text{э}} \end{bmatrix}$$

$$\bar{\bar{I}}_{4x4} = \bar{\Phi}^{T}_{4xn}\,\bar{\Phi}_{nx4};$$

$$\bar{b}_{4x1} = \bar{\Phi}^{T}_{4xn}\,\bar{y}^{э};$$

$$\bar{a}_{4x1} = \bar{I}^{-1}_{4x4}\,\bar{b}_{4x1};$$

$$\bar{a} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}$$

$$A = a_0; B = a_1; C = a_2; D = a_3;$$

Вывести матричную формулу для определения коэффициентов регрессии α, β_1 и β_2 в уравнении:

$$y = \alpha \cdot x_1^{\beta_1} \cdot x_2^{\beta_2}$$

Построить таблицу пассивного эксперимента. При обработке результатов пассивного эксперимента линеаризовать регрессионную модель, и реализовать аналитический и алгоритмический подходы для получения решения.

Таблица пассивного эксперимента:

№ эксперимента	x_{1i}	x_{2i}		$y_i^э$
1	x_{11}	X_{21}		$y_1^э$
2	x_{12}	X_{22}		$y_2^э$
….	....	....		….
n	x_{1n}	x_{2n}		$y_n^э$

Линеаризация уравнения регрессии:

$$\ln y = \ln \alpha + \beta_1 \ln x_1 + \beta_2 \ln x_2;$$

$$a_0 = \ln \alpha; a_1 = \beta_1; a_2 = \beta_2;$$

<u>Аналитический подход:</u>

Критерий рассогласования расчётных и экспериментальных данных:

$$R = \sum_{i=1}^{n} (f_i^{p} - f_i^{э})^2;$$

$$f_i^{p} = a_0 + a_1 \ln x_{1i} + a_2 \ln x_{2i};$$

$$f_i^{э} = \ln y_i^{э};$$

$$R = \sum_{i=1}^{n} (a_0 + a_1 \ln x_{1i} + a_2 \ln x_{2i} - \ln y_i^{э})^2 \rightarrow MIN$$

Нахождение минимума критерия МНК по необходимому условию функции многих
переменных:

$$\frac{\partial R}{\partial a_0} = 0; \qquad 2\sum_{i=1}^{n}(a_0 + a_1 \ln x_{1i} + a_2 \ln x_{2i} - \ln y_i^э)\cdot 1 = 0;$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_1} = 0; \qquad 2\sum_{i=1}^{n}(a_0 + a_1 \ln x_{1i} + a_2 \ln x_{2i} - \ln y_i^э)\cdot \ln x_{1i} = 0;$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_2} = 0; \qquad 2\sum_{i=1}^{n}(a_0 + a_1 \ln x_{1i} + a_2 \ln x_{2i} - \ln y_i^э)\cdot \ln x_{2i} = 0;$$

Приведение СЛАУ к стандартному
виду:

$$a_0\sum_{i=1}^{n}1+a_1\sum_{i=1}^{n}\ln x_{1i}+a_2\sum_{i=1}^{n}\ln x_{2i}=a_3\sum_{i=1}^{n}\ln y_i^{э};$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}\ln x_{1i}+a_1\sum_{i=1}^{n}\ln^2 x_{1i}+a_2\sum_{i=1}^{n}\ln x_{1i}\ln x_{2i}=a_3\sum_{i=1}^{n}\ln x_{1i}\ln y_i^{э};$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}\ln x_{2i}+a_1\sum_{i=1}^{n}\ln x_{2i}\ln x_{1i}+a_2\sum_{i=1}^{n}\ln^2 x_{2i}=a_3\sum_{i=1}^{n}\ln x_{2i}\ln y_i^{э};$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n}\ln x_{1i} & \sum_{i=1}^{n}\ln x_{2i} \\ \sum_{i=1}^{n}\ln x_{1i} & \sum_{i=1}^{n}\ln^2 x_{1i} & \sum_{i=1}^{n}\ln x_{1i}\ln x_{2i} \\ \sum_{i=1}^{n}\ln x_{2i} & \sum_{i=1}^{n}\ln x_{2i}\ln x_{1i} & \sum_{i=1}^{n}\ln^2 x_{2i} \end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n}\ln y_i^{э} \\ \sum_{i=1}^{n}\ln x_{1i}\ln y_i^{э} \\ \sum_{i=1}^{n}\ln x_{2i}\ln y_i^{э} \end{bmatrix}$$

$$\bar{\bar{A}} \cdot \bar{a} = \bar{b} \quad \Rightarrow \quad \bar{a} = \bar{\bar{A}}^{-1} \cdot \bar{b}$$

Алгоритмический подход:

Выбор стандартного типа уравнения регрессии:

Матрица, элементы которой зависят от вида уравнения регрессии и значений входных переменных, при которых проведены опыты и вектор $\bar{f}^{э}$

$$f = a_0 + a_1 z_1 + a_2 z_2; z_1 - \ln x_1; z_2 - \ln x_2;$$

$$\Phi = \begin{bmatrix} 1 & z_{11} & z_{21} \\ 1 & z_{12} & z_{21} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & z_{1n} & z_{2n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \ln x_{1} & \ln x_{21} \\ 1 & \ln x_{12} & \ln x_{22} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & \ln x_{1n} & \ln x_{2n} \end{bmatrix} \qquad \bar{f}^{э} = \begin{bmatrix} \ln y_1^{э} \\ \ln y_2^{э} \\ \cdots \\ \ln y_n^{э} \end{bmatrix}$$

$$\overline{\overline{I}}_{3\text{x}3} = \overline{\overline{\Phi}}_{3\text{x}n}^{T} \overline{\overline{\Phi}}_{n\text{x}3};$$

$$\overline{b}_{3\text{x}1} = \overline{\overline{\Phi}}_{4\text{x}n}^{T} \overline{f}_{n\text{x}1}^{\text{э}};$$

$$\overline{a}_{3\text{x}1} = \overline{\overline{I}}_{3\text{x}3}^{-1} \overline{b}_{3\text{x}1};$$

$$\overline{a} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}$$

$$\alpha = \exp(a_0); \beta_1 = a_1; \beta_2 = a_2;$$

Вывести матричную формулу для определения коэффициентов регрессии k_1 и k_2 в уравнении, связывающем скорость газа в барботажном слое (ω) с давлением (p)

$$\omega = \frac{k_1 p}{k_2 + p}$$

Построить таблицу пассивного эксперимента. При обработке результатов пассивного эксперимента линеаризовать регрессионную модель, и реализовать аналитический и алгоритмический подходы для получения решения.

Таблица пассивного эксперимента:

№ эксперимента	p_i		$\omega_i^э$
1	p_1		$\omega_1^э$
2	p_2		$\omega_2^э$
….	….		….
n	p_n		$\omega_n^э$

Линеаризация уравнения регрессии:

$$\frac{1}{\omega} = \frac{k_2 + p}{k_1 p}; \frac{1}{\omega} = \frac{1}{k_1} + \frac{k_2}{k_1}\frac{1}{p};$$

$$a_0 = \frac{1}{k_1}; a_1 = \frac{k_2}{k_1};$$

Аналитический подход:

Критерий рассогласования расчётных и экспериментальных данных:

$$R = \sum_{i=1}^{n} (y_i^p - y_i^э)^2;$$

$$y_i^p = a_0 + a_1 \frac{1}{p_i};$$

$$y_i^э = \frac{1}{\omega_i^э};$$

$$R = \sum_{i=1}^{n} (a_0 + a_1 \frac{1}{p_i} - \frac{1}{\omega_i^э})^2 \rightarrow MIN$$

Нахождение минимума критерия МНК по необходимому условию функции многих
переменных:

$$\frac{\partial R}{\partial a_0} = 0; \quad 2\sum_{i=1}^{n}(a_0 + a_1\frac{1}{p_i} - \frac{1}{\omega_i^э})\cdot 1 = 0;$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_1} = 0; \quad 2\sum_{i=1}^{n}(a_0 + a_1\frac{1}{p_i} - \frac{1}{\omega_i^э})\cdot \frac{1}{p_i} = 0;$$

Приведение СЛАУ к стандартному
виду:

$$a_0\sum_{i=1}^{n}1 + a_1\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{p_i} = \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\omega_i^э}$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{p_i} + a_1\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{p_i^2} = \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{p_i}\frac{1}{\omega_i^э}$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{p_i} \\ \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{p_i} & \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{p_i^2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\omega_i^э} \\ \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{p_i}\frac{1}{\omega_i^э} \end{bmatrix} \qquad \overset{=}{A}\cdot\bar{a} = \bar{b} \Rightarrow \bar{a} = \overset{=}{A}^{-1}\cdot\bar{b}$$

Алгоритмический подход:

Выбор стандартного типа уравнения регрессии:

Матрица, элементы которой зависят от вида уравнения регрессии и значений входных переменных, при которых проведены опыты и вектор $\bar{y}^э$

$$y = a_0 + a_1 x; \quad x - \frac{1}{p}; \Phi = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \cdots & \cdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{p_1} \\ 1 & \frac{1}{p_2} \\ \cdots & \cdots \\ 1 & \frac{1}{p_n} \end{bmatrix} \quad \bar{y}^э = \begin{bmatrix} \frac{1}{\omega_1^э} \\ \frac{1}{\omega_2^э} \\ \cdots \\ \frac{1}{\omega_n^э} \end{bmatrix}$$

$$\overline{\overline{I}}_{2\text{x}2} = \overline{\overline{\Phi}}^{T}_{2\text{x}n}\,\overline{\overline{\Phi}}_{n\text{x}2};$$

$$\overline{b}_{2\text{x}1} = \overline{\overline{\Phi}}^{T}_{2\text{x}n}\,\overline{y}^{\,\text{э}}_{n\text{x}1};$$

$$\overline{a}_{2\text{x}1} = \overline{\overline{I}}^{-1}_{2\text{x}2}\,\overline{b}_{2\text{x}1};$$

$$\overline{a} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}$$

$$k_1 = \frac{1}{a_0}; k_2 = a_1 \frac{1}{a_0};$$