Література

1. Перепелкин К. Е. Современные химические волокна и перспективы их применения в текстильной промышленности [Текст] / К. Е. Перепелкин // Рос. хим. ж. – 2002. – Т. XLVI, № 1. – С. 31–48.
2. Перепелкин К. Е. Модификация волокон и текстиля [Електронний ресурс] / К. Е. Перепелкин. – Режим доступу: \www/ URL: http://www.textile-press.ru – 10.01.2011 р. – Назва з екрана.
3. Кричевский Г. Е. Роль химии в производстве текстиля. Эволюция и революция в текстильной химии [Текст] / К. Е. Кричевский // Рос. хим. ж. – 2002. – Т. XLVI, № 1. – С. 5–8.
4. Волков В. А. Поверхностно-активные вещества. Применение для производства и модификации текстильных материалов: [Електронна книга eBook] / В. А. Волков. – Режим доступу: \www/ URL: http://e-science.sources.ru – 15.07.2010 р. – Назва з екрана.
5. Курамшина О.И. Изучение процесса мицеллообразования по результатам физико-химических исследований и методом молекулярной динамики [Текст] / О. И. Курамшина, И. Б. Широбоков, П. С. Фахретдинов, И. Ю. Голубев // Вестник Удмуртского университета. – 2010. – Вып. 2. – С. 28–42.
6. Шенфельд Н. Поверхностно-активные вещества на основе оксида этилена [Текст] : пер. с нем. / Под ред. Н. Н. Лебедева. – М. : Химия, 1982. – 752 с.
7. Холмберг К. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах [Текст] : пер с англ. / К. Холмберг, Б. Йенссон, Б. Кронберг, Б. Линдман. – М. : БИНОМ, Лаб. знаний, 2007. – 528 с.
8. Адсорбция из растворов на поверхностях твердых тел [Текст] : пер. с англ. / Под ред. Г. Парфита, К. Рочестера. – М. : Мир, 1986. – 488 с.
9. Фізико-хімічні основи технології очищення стічних вод [Текст] : підручник / А. К. Запольський, Н. А. Мішкова-Клименко, І. А. Астрелін та ін. ; за заг. ред. А. К. Запольського. – К. : Лібра, 2000. – 522 с.
10. Rui Zhang. Advances in adsorption of surfactants and their mixtures at solid [Текст] / Rui Zhang, P. Somasundaran // Advances in Colloid and Interface Science. – 2006. – 123–126. – P. 213–229.

УДК 536.24.083

МЕТОДИКА ВИЗНАЧЕННЯ СЕРЕДНІХ ЗНАЧЕНЬ КІНЕТИЧНИХ ЗАЛЕЖНОСТЕЙ

М.І. Погожих
Доктор технічних наук, завідуючий кафедрою*

І.М. Павлюк
Асистент*
*Кафедра енергетики та фізики
Харківський державний університет харчування та торгівлі
вул. Клочківська, 333, м. Харків, 61051
Контактний тел.: (057) 34-94-00

Розглянуто питання обробки експериментальних даних, та розроблена методика, яка дозоляє в автоматичному режимі визначити середні значення будь-яких кінетичних залежностей та центри плоских фігур, утворених цими залежностями

Ключові слова: середнє значення, термограма, апроксимація

Рассмотрен вопрос обработки экспериментальных данных и разработана методика, позволяющая в автоматическом режиме определить средние значения любых кинетических зависимостей и центры плоских фигур, образованных этими зависимостями

Ключевые слова: среднее значение, термограмма, аппроксимация

The problem of data processing is considered and developed a technique that allows to automatically determine the average value of any kinetic relations and the centers of flat shapes formed by these dependencies

Keywords: mean value, the thermogram, the approximation

Актуальність

Жодна фізична теорія не може бути підтверджена або спростована без наявності оброблених експериментальних даних. Фактично без експериментів сучасна наука просто стояла б на місці. Тому перед експериментатором стоїть складне комплексне завдання: йому необхідно зрозуміти суть висунутої теорії, організувати і поставити відповідний експеримент, провести вимірювання і вірно їх проаналізувати. Особливо важливий останній аспект, тому що на його основі робиться висновок про те, підтверджується або спростовується дана фізична теорія. Але, на жаль, на етапі аналізу отриманих даних експериментатор стикається з великими масивами даних, при математичній обробці яких виникають труднощі не лише з розрахунком, але й з похибками, викликаними цим розрахунком. Особливо це добре видно при дослідженні процесів переносу, коли дослідник отримує велику кількість даних у вигляді графічної залежності, яку потрібно буде обробити за допомогою математичного апарату. Звичайно, в даний час є безліч різних програм, які допомагають в обчисленні і математичному аналізі фізичних даних, проте часто вбудовані функції для користувача програм не можуть допомогти через свою вузьконаправленість, а деякі з них дають результат, некорреліруючийся з самим експериментом, оскільки користувачеві невідомий алгоритм, за яким програма здійснює автоматичний розрахунок. У зв'язку з цим все більшої актуальності набирають розробка і застосування методів автоматичного аналізу даних з використанням розроблених алгоритмів розрахунку.

Мета

Автоматизація розрахунків середніх значень кінетичних залежностей у фізичному експерименті. У ході дослідження процесів переносу (зокрема сушіння), при роботі в різних режимах отримують термограми в цілому схожі за характером і формою, тому для кореляції даних між експериментами та отримання додаткової інформації про протікання самого процесу треба знаходити середні значення для кожної з залежностей. Цей процес викликав певні труднощі і був витратним за часом, адже доводилося обробляти не малу кількість термограм, що складаються з великого числа даних. Щоб уникнути втрат часу було розроблено програму (використовувалася оболонка Mathcad 2001 Professional), яка автоматично розраховувала середні величини, користувачеві залишалося лише вказати шлях до файлу, який містить вихідні дані.

Постановка завдання

У загальному випадку будь-яка залежність може бути відкладена на графіку, після чого її, якщо потрібно, апроксимують, знаходять площу плоскої фігури (утвореної експериментальною кривою і віссю координат, або 2 експериментальними кривими, залежить від поставленої задачі) і обчислюють координати x і y центру мас, застосовуючи формули математичного аналізу [1].

Опис методики

Хай у нас є набір даних, для початку проводимо апроксимацію методом найменших квадратів, в якості апроксимуючої функції виступає поліном n-го ступеня (програма дозволяє вибрати поліном будь-якого ступеня).

Прочитуємо дані:

$$data\_term := READPRN("KPT\_all.txt")$$

Задаємо осі x і y:

$$x := data\_term^{\langle 0 \rangle}$$

$$y := data\_term^{\langle 1 \rangle}$$

Визначаємо кількість прочитаних даних (число експериментальних точок):

$$n := last(x) \quad i := 0..n$$

Задаємо ступені поліномів:

$$l := 2 \quad k3 := 3$$

Виконаємо поліноміальну регресію, для цього використовуємо вбудовану в Mathcad функцію regress:

$$vs2 := regress(x, y, l) \quad vs3 := regress(x, y, k3)$$

Після цієї процедури вектора vs будуть містити коефіцієнти шуканого полінома. Тепер використовуємо функцію interp, яка дозволить нам знайти значення полінома в будь-якій точці:

$$f2(z) := int\,erp(vs2, x, y, z) \quad f3(z) := int\,erp(vs3, x, y, z)$$

Нарешті знайдемо коефіцієнти при різних ступенях полінома:

$$coeffs3 := submatrix(vs3, 3, length(vs2) - 0, 0, 0)$$

$$(coeffs3)^{T} := (31.974 \;\; 0.062 \;\; \text{-}1.394 \times 10^{-3} \quad 8.439 \times 10^{-6})$$

Може виникнути резонне питання: наскільки припустиме застосування вбудованих функцій Mathcad? Для відповіді на нього розпишемо алгоритми, за якими проводиться розрахунок у функціях regress і interp [2].

Задамо ступеня апроксимуючого полінома і кількість точок:

$$m := 2 \quad t := 0.. \quad mj := 0..m$$

$$m1 := 3 \quad t1 := 0.. \quad m1j1 := 0..m1$$

Обчислюємо елементи матриці коефіцієнтів нормальної системи

$$p_{t,j} := \sum_{i} (x_i)^{t+j} p1_{t1,j1} := \sum_{i} (x_i)^{t1+j1} \tag{1}$$

і стовпець вільних членів

$$b_j := \sum_{i} y_i (x_i)^{j} b1_{j1} := \sum_{i} y_i (x_i)^{j1} \tag{2}$$

Знаходимо коефіцієнти полінома, вирішуючи систему матричним методом,

$$a := p^{-1} \cdot b \quad (3)$$

$$a1 := p1^{-1} \cdot b1 \quad (4)$$

Визначаємо апроксимуючі функції

$$f2(z) := \sum_t a_t z^t \quad (5)$$

$$f3(z) := \sum_{t1} a1_{t1} z^{t1} \quad (6)$$

Коефіцієнти полінома наступні:

$$a_0 := 31.974$$
$$a_1 := 0.062$$
$$a_2 := -1.394 \times 10^{-3}$$
$$a_3 := 8.349 \times 10^{-6}$$

Як ми бачимо алгоритм, повністю відповідає методу найменших квадратів [3], і результати обох способів зійшлися. Тепер знайдемо площу фігури:

$$S = \iint_S dS \quad (7)$$

підставивши, знайдений поліном у формулу (7) і взявши подвійний інтеграл, одержимо:

$$S = (a_0 - b_0)(x_{max} - x_{max}) + \frac{1}{2}(a_1 - b_1)(x^2_{max} - x^2_{min}) + \\ + \frac{1}{3}(a_2 - b_2)(x^3_{max} - x^3_{min}) + \frac{1}{4}(a_3 - b_3)(x^4_{max} - x^4_{min}) \quad (8)$$

Як бачимо з формули (8) при зміні ступеня полінома буде змінюватися лише кількість доданків, відповідно площу можна знайти за формулою:

$$S := \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i} \cdot (a_{i-1} - b_{i-1}) \cdot (j^i - h^i)\,, \quad (9)$$

де a - коеф. апроксимуючого полінома, b - коеф. другого апроксимуючого полінома (він необхідний, коли ми знаходимо центр мас фігури утвореної двома залежностями, в іншому випадку усі b рівні 0)

j і h - максимальне і мінімальне значення по осі x.

Далі знайдемо координату x:

$$x = \frac{1}{S} \iint_S x ds \quad (10)$$

взявши інтеграл, одержимо:

$$x = \frac{1}{S}\left[\frac{1}{2}(a_0 - b_0)(x^2_{max} - x^2_{min}) + \frac{1}{3}(a_1 - b_1)(x^3_{max} - x^3_{min}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{4}(a_2 - b_2)(x^4_{max} - x^4_{min}) + \frac{1}{5}(a_3 - b_3)(x^5_{max} - x^5_{min})\right]$$

Як і в попередньому випадку (8,9), цей запис можна замінити такою формулою:

$$v := \frac{1}{S} \cdot \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i+1} \cdot (a_{i-1} - b_{i-1}) \cdot (j^{i+1} - h^{i+1}) \quad (11)$$

Прим.: значення символів аналогічні попередній формулі, ми лише замінили v на x.

Ну і, нарешті, визначимо координату y,

$$y = \frac{1}{S} \iint_S y dS = \frac{1}{2S} \int_{x_{min}}^{x_{max}} (f_2(x) - f_1(x))(f_2(x) + f_1(x)) \quad (12)$$

Проведемо заміну:

$$f_2 - f_1 = g\,,\ f_2 + f_1 = d$$

Далі визначимо додаткові коефіцієнти:

$$g := a - b \quad d := a + b$$

$$g_1 := 31.974 \qquad d_1 := 31.974$$
$$g_2 := 0.062 \qquad d_2 := 0.062$$
$$g_3 := -1.394 \times 10^{-3} \quad d_3 := -1.394 \times 10^{-3}$$
$$g_4 := 8.349 \times 10^{-6} \quad d_4 := 8.439 \times 10^{-6}$$

Прим. Коефіцієнти g і d будуть рівними лише у випадку коли шукають центр фігури утвореної експериментальною кривою і віссю координат.

Підставивши ці коефіцієнти і, взявши інтеграл, одержимо:

$$y = \frac{1}{2S}\left[d_0(x_{max} - x_{min}) + \frac{d_1}{2}(x^2_{max} - x^2_{min}) + \ldots\right] \quad (13)$$

Аналогічно формулі (13) можна записати:

$$w := \frac{1}{2S} \cdot \int_{u_1}^{u_2} \sum_{i=1}^{n} g_{i-1} \cdot u^{i-1} \cdot \sum_{i=1}^{n} d_{i-1} \cdot u^{i-1} du\,, \quad (14)$$

де g и d – відповідні. коеф.

u_1, u_2 - максимальне і мінімальне значення по осі абсцис

w у цій формулі виступає як y

Таким чином, ми можемо знайти координати центру плоскої фігури.

Приклад: Для прикладу розрахуємо центри двох термограмм, отриманих при різних режимах. Апроксимувати будемо поліномом третього ступеня.

$$data\_term := READPRN("KPT\_all.txt")$$

$$n := last(x) \quad i := 0..n$$

$$l := 2 \quad k3 := 3$$

Проведемо апроксимацію даних, для обох термограм:

$$p := data\_term^{\langle 4 \rangle}$$
$$r := data\_term^{\langle 5 \rangle}$$
$$vs2 := regress(p, r, l)$$
$$vs3 := regress(p, r, k3)$$
$$f2(z) := interp(vs2, p, r, z)$$
$$f3(z) := interp(vs3, p, r, z)$$
$$coeffs32 := submatrix(vs3, 3, length(vs2) - 0, 0, 0)$$

$P := data\_term^{\langle 6 \rangle}$
$R := data\_term^{\langle 7 \rangle}$
$vs2 := regress(P,R,1)$
$vs3 = regress(P,R,k3)$
$f2(z) := interp(vs2,P,R,z)$
$f3(z) := interp(vs3,P,R,z)$
$coeffs33 := submatrix(vs3,3,length(vs2)-0,0,0)$

Визначимо коефіцієнти апроксимуючого поліному, та знайдемо площу, та координати центру кривих:

$$(coeffs32)^T = (39.884 \quad 0.31 \quad -9.776 \times 10^{-3} \quad 9.097 \times 10^{-5})$$

$j := 83.2235 \quad h := 6.6706$

$$S := \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i} \cdot (a_{i-1} - b_{i-1}) \cdot (j^i - h^i)$$

$S = 3.333 \times 10^3$

$$c := \frac{1}{S} \cdot \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i+1} \cdot (a_{i-1} - b_{i-1}) \cdot (j^{i+1} - h^{i+1})$$

$c = 45.648$

$g := a - b \quad d := a + b$

$$w := \frac{1}{2S} \cdot \int_{u_1}^{u_2} \sum_{i=1}^{n} g_{i-1} \cdot u^{i-1} \cdot \sum_{i=1}^{n} d_{i-1} \cdot u^{i-1} du$$

$w = 21.815$

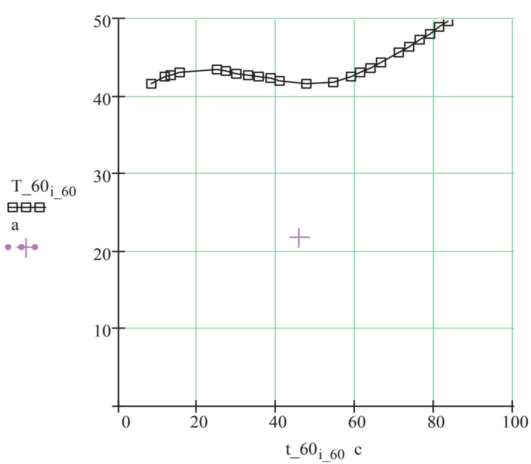

Рис. 1. Результати обробки першої термограми з визначеним для неї центром

Повторюємо процедуру знаходження центру для другої термограми:

$$(coeffs33)^T = (39.523 \quad 0.798 \quad -0.03 \quad 3.33 \times 10^{-4})$$

$j := 60.1813 \quad h := 2.9003$

$$S := \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i} \cdot (a_{i-1} - b_{i-1}) \cdot (j^i - h^i)$$

$S = 2.618 \times 10^3$

$$C := \frac{1}{S} \cdot \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i+1} \cdot (a_{i-1} - b_{i-1}) \cdot (j^{i+1} - h^{i+1})$$

$C = 31.919$

$g := a - b \quad d := a + b$

$$A := \frac{1}{2S} \cdot \int_{u_1}^{u_2} \sum_{i=1}^{n} g_{i-1} \cdot u^{i-1} \cdot \sum_{i=1}^{n} d_{i-1} \cdot u^{i-1} du$$

$A = 22.883$

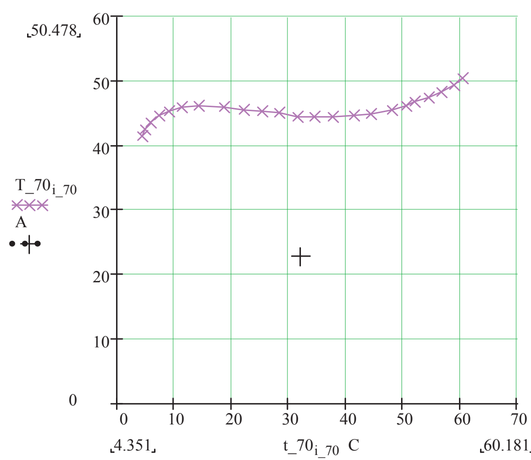

Рис. 2. Результати обробки другої термограми з визначеним для неї центром

Висновки

1. Розроблена методика, яка дозволяє за експериментальними даними знаходити середні величини для різноманітних експериментальних залежностей.

2. Визначено середні значення температури, які дозволяють керувати процесом сушіння і допомагають при аналізі самого процесу.

Література

1. Данко П. Е., Высшая математика в упражнениях и задачах [Текст] / Попов А. Г., Кожевникова Т. Я.,П. Е. Данко // Высшая школа. – 1986. - Ч.1. – 4-е изд. испр. и доп. – С. 260-262.
2. Тарасевич Ю. Ю., Численные методы на Mathcad'е [Текст] / Тарасевич Ю. Ю. // Астраханский гос.пед. ун-т. - 2000. – С. 27-33.
3. Шор. Я. Б., Статистические методы анализа и контроля качества и надежности [Текст] / Я.Б.Шор // Госэнергоиздат. – 1962. - С. 552, С. 92-98.