

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«СЕВАСТОПОЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГИИ И ПРОМЫШЛЕННОСТИ

С.А. Федорова

**МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ РЕЗУЛЬТАТОВ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ:
СБОРНИК ПРАКТИЧЕСКИХ РАБОТ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Учебное пособие

Севастополь
СевГУ
2019

УДК 66.01:001.891:004.428
Ф33

Р е ц е н з е н т:
А.М. Акимов - д.т.н., профессор

Федорова С.А.
Ф33 Методы обработки результатов химико-технологических исследований: сборник практических работ по дисциплине: учеб. пособие / С.А. Федорова. – Севастополь: СевГУ, 2019. – 37 с.: ил.

Рассмотрено решение задач обработки данных химического эксперимента методами выравнивания и МНК на примерах химической технологии.

Учебное пособие предназначено для студентов 3-го курса очной формы обучения по специальности 18.05.02 - Химическая технология материалов современной энергетики.

УДК 66.01:001.891:004.428

Учебное пособие рассмотрено и утверждено на заседании кафедры "Химические технологии и новые материалы", протокол № 1 от 30 августа 2018 г.

Рекомендованы к изданию на заседании ученого совета Института ядерной энергии и промышленности, протокол № 1 от 24 сентября 2018 г.

© ФГАОУ ВО «Севастопольский
государственный университет», 2019

1. МЕТОД ВЫРАВНИВАНИЯ

Под структурой модели мы понимаем вид математической зависимости – экспонента, парабола и т.п., то есть структуру записи уравнения в общем виде (табл. 1.1).

Т а б л и ц а 1.1

Структуры математических моделей

Название функции	Структура математической модели
Линейная	$y = a_0 + a_1 \cdot x$
Степенная	$y = a_0 \cdot x^{a_1}$
Экспоненциальная	$y = a_0 \cdot e^{a_1 x}$

При выборе структуры математической модели мы руководствуемся близостью вычисленных значений к полученным экспериментальным данным.

Задачу выбора структуры математической модели можно решать:

- 1) на основе анализа физической природы объекта;
- 2) путем сравнения кривой, построенной по экспериментальным данным, с графиками типовых функций, приведенными в справочниках;
- 3) если информация о структуре отсутствует, то делается допущение о непрерывности функций, что позволяет разложить ее в многочлен любой степени.

Независимо от способа выбора структуры математической модели, прежде чем оценить численные значения параметров a_0 и a_1 , необходимо методом выравнивания проверить возможность использования выбранной структуры.

Метод выравнивания заключается в преобразовании структуры математической модели заданного вида в линейную функцию. Достигается это путем замены переменных x и y новыми переменными $X = f(x)$ и $Y = \psi(y)$. Эти функции получаются путем математических преобразований заданной структуры к уравнению прямой линии $Y = A_0 + A_1 X$.

Например, «выравниваем» экспоненциальную структуру. Иными словами, используя математические преобразования, попробуем получить из $y = a_0 \cdot e^{a_1 x}$ уравнение вида $Y = A_0 + A_1 X$. Линейное уравнение отличается наличием отдельно стоящего члена A_0 – константы, знаком суммы и переменной x без степени, при котором находится коэффициент A_1 . Привести экспоненциальную структуру к линейному виду можно используя логарифмирование. Удобно брать натуральный логарифм, т.к. основание e .

$$y = a_0 \cdot e^{a_1 x}$$

$$\ln y = \ln(a_0 \cdot e^{a_1 x}) ; \quad (1.1)$$

$$\ln y = \ln a_0 + a_1 \cdot x . \quad (1.2)$$

Таким образом, мы привели экспоненциальную структуру к линейному виду по признакам: отдельно стоящую константу $A_0 = \ln a_0$, знак суммы и переменную x без степени.

Вычисленные значения $Y = \ln y$ и $X = x$ наносим на диаграмму с прямоугольными координатами (X, Y) . Если построенные таким образом точки располагаются ближе к прямой линии, чем точки, построенные на диаграмме с прямоугольными координатами (x, y) , то выбранная структура может быть применена для характеристики исследуемого процесса.

1.1. Алгоритм метода выравнивания

1. Записать уравнение предполагаемой структуры (см. табл. 1.1).
2. Привести вид предполагаемой структуры к линейному виду (табл. 1.2).

Для удобства мы будем обозначать исходные данные малыми буквами (y, x, a_0, a_1), а те величины, над которыми выполнено преобразование для приведения к линейному виду заглавными буквами (Y, X, A_0, A_1).

Т а б л и ц а 1.2

Приведение структуры математической модели к линейному виду

Структура ММ	Приведение к виду $Y = A_0 + A_1 X$				
	Y	A_0	A_1	X	Преобразованная форма
Линейная	y	a_0	a_1	x	$y = a_0 + a_1 \cdot x$
Степенная	$\lg y$	$\lg a_0$	a_1	$\lg x$	$Y = A_0 + a_1 \cdot X$
Экспоненциальная	$\ln y$	$\ln a_0$	a_1	x	$Y = A_0 + a_1 \cdot x$

3. Построить графики функций. Первый в координатах (x, y) . Второй - в координатах (X, Y) для степенной структуры или (x, Y) для экспоненциальной структуры.

4. Сделать вывод о применимости исследуемой структуры для описания исследуемого химического процесса.

1.2. Пример 1. Выбор структуры модели для описания химического процесса

Задание. При изучении порядка химической реакции по одному из компонентов получены данные, приведенные в табл. 1.3, где x - время реакции, мин, y - концентрация исследуемого компонента, моль/л.

Т а б л и ц а 1.3

Экспериментальные данные изменения концентрации
исследуемого компонента во времени

x	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20
y	0,6	0,8	1,2	1,6	1,8	2	2,2	2,3	2,6	2,7

Проверить возможность применения для характеристики данного процесса степенной структуры.

Решение

1. Запишем уравнение исследуемой структуры:

$$y = a_0 \cdot x^{a_1} \quad (1.3)$$

2. Приведем вид исследуемой структуры к линейному виду. Для этого прологарифмируем выражение (1.3).

$$\lg y = \lg(a_0 \cdot x^{a_1}) ; \quad (1.4)$$

$$\lg y = \lg a_0 + a_1 \cdot \lg x . \quad (1.5)$$

Таким образом мы привели степенную структуру к линейному виду, где $Y = \lg y$, $X = \lg x$, $A_0 = \lg a_0$, $a_1 = a_1$.

Такой же результат получим, воспользовавшись табл. 1.2.

Расчеты и построение проводим в Excel.

1. Формирование файла исходных данных.

Открываем Microsoft Excel.

На открывшейся странице в ячейку A1 записываем номер класса и фамилию.

В ячейку A2 записываем номер задачи, в данном случае «пример 1».

В ячейки A3-K4 заносим исходные данные.

Двойным кликом левой клавиши мыши на «Лист 1», размещенной внизу, изменяем текст на «Выравнивание». (Эту же операцию можно сделать по иному: подвести курсор мыши к «Лист 1», одним кликом правой

клавиши мыши вызвать меню, выбрать «Переименовать», записать «Выравнивание».)

Результат этих действий приведен на рис. 1.1.

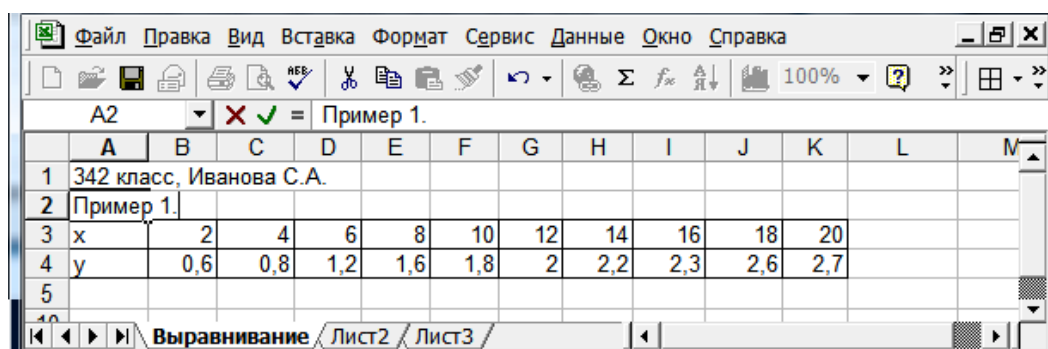


Рис. 1.1. Формирование файла исходных данных

2. Расчеты по приведению к линейному виду исследуемой функции.

Для построения графиков в координатах (x, y) и (X, Y) для степенной зависимости нам необходимы:

- для (x, y) значения x и y , которые мы уже ввели;
- для (X, Y) значения $Y = \lg y$ и $X = \lg x$, которые следует рассчитать.

Вносим в ячейки A5 и A6 названия производимых расчетов: $X = \lg x$ и $Y = \lg y$ соответственно.

В ячейку B5 заносим расчетную формулу. (На панели инструментов Excel щелчком мыши выбираем «Вставка функции» - рис. 1.2.)

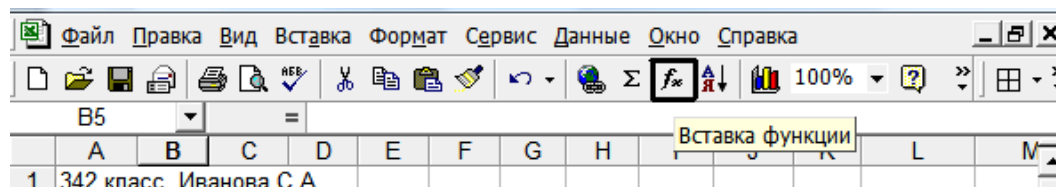


Рис. 1.2. Вставка функции

В открывшемся окне Мастера функций выбираем категорию «Математические», функцию «LOG10» - рис. 1.3 и нажимаем «ОК».

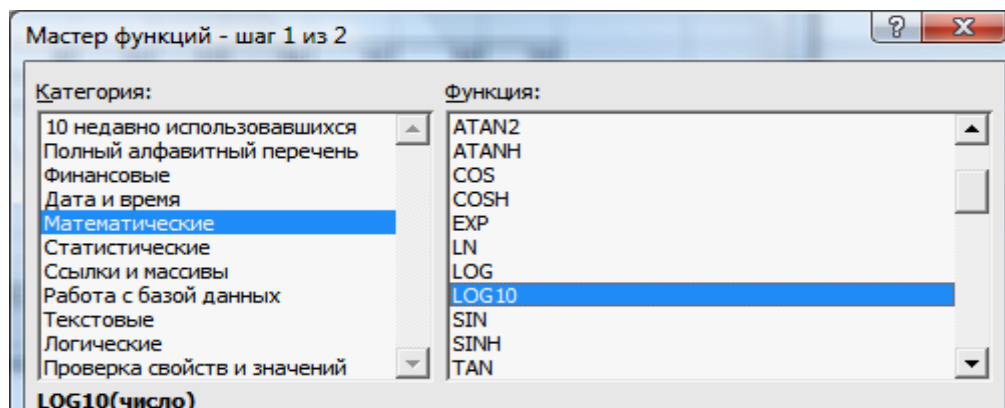


Рис. 1.3. Выбор категории в Мастере функций

В открывшемся окне в поле «Число» кликом мыши на ячейке B3 указываем, что значение для расчета следует взять из ячейки B3 (рис. 1.4). Нажимаем «ОК».

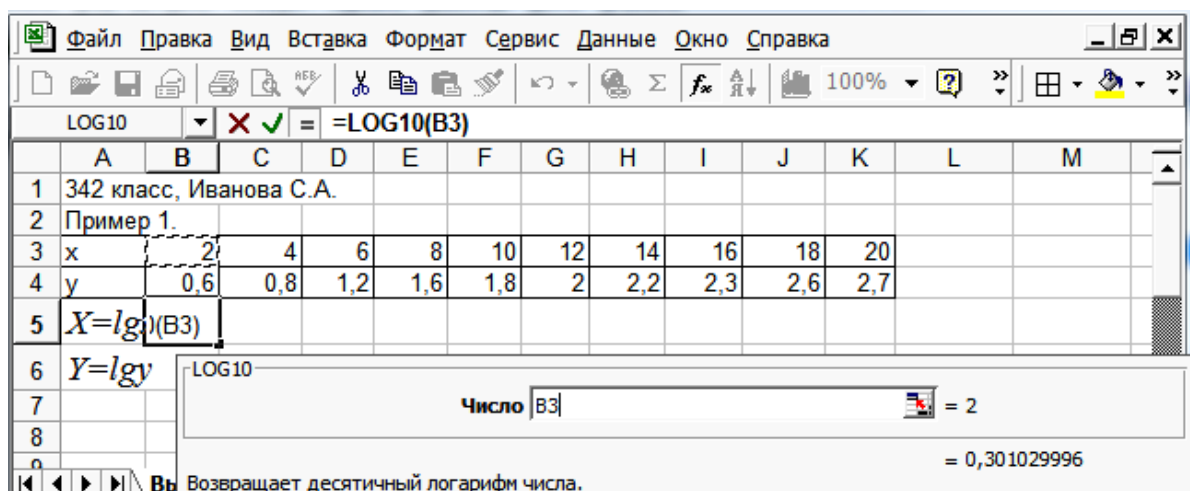


Рис. 1.4. Использование значений, помещенных в ячейки, Мастером функций

В ячейку B5 заносится результат расчета. Поскольку расчеты в ячейках B6 - K6 аналогичны, то дублируем их. Для этого подводим курсор вниз ячейки B5 до появления крестика , нажимаем левую клавишу мыши, не отпуская ее, протягиваем до ячейки K6. Отпускаем клавишу мыши. Таким образом, в строке 5 (B5 - K5) мы получили значения десятичных логарифмов чисел, расположенных в строке 3 (B3 - K3).

Для расчета $\lg y$ можно провести аналогичную процедуру, только в поле «Число» (см. рис. 1.4) следует указать ячейку B4.

Результаты вычислений представлены на рис. 1.5.

The screenshot shows the Excel spreadsheet with the results of the calculations. The formula bar shows '=LOG10(B3)'.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	342 класс, Иванова С.А.												
2	Пример 1.												
3	x	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20		
4	y	0,6	0,8	1,2	1,6	1,8	2	2,2	2,3	2,6	2,7		
5	$X=\lg x$	0,301	0,602	0,78	0,903	1	1,08	1,146	1,204	1,255	1,3		
6	$Y=\lg y$	-0,22	-0,097	0,08	0,204	0,255	0,3	0,342	0,362	0,415	0,43		
7													
8													

Рис. 1.5. Результаты вычислений по исходным данным

3. Построение диаграмм.

Для построения диаграмм воспользуемся Мастером диаграмм, как правило, пиктограмма располагается на панели инструментов (рис. 1.6).

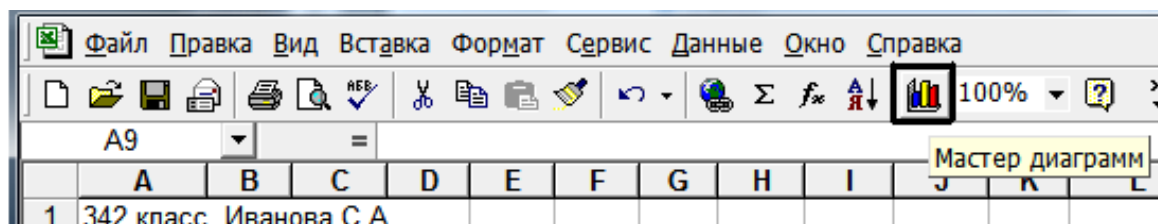


Рис. 1.6. Расположение пиктограммы Мастера диаграмм

Одним кликом левой клавиши мыши открываем Мастера диаграмм, на Стандартной панели выбираем Точечную диаграмму, позволяющую сравнивать пары значений, как указано на рис. 1.7.

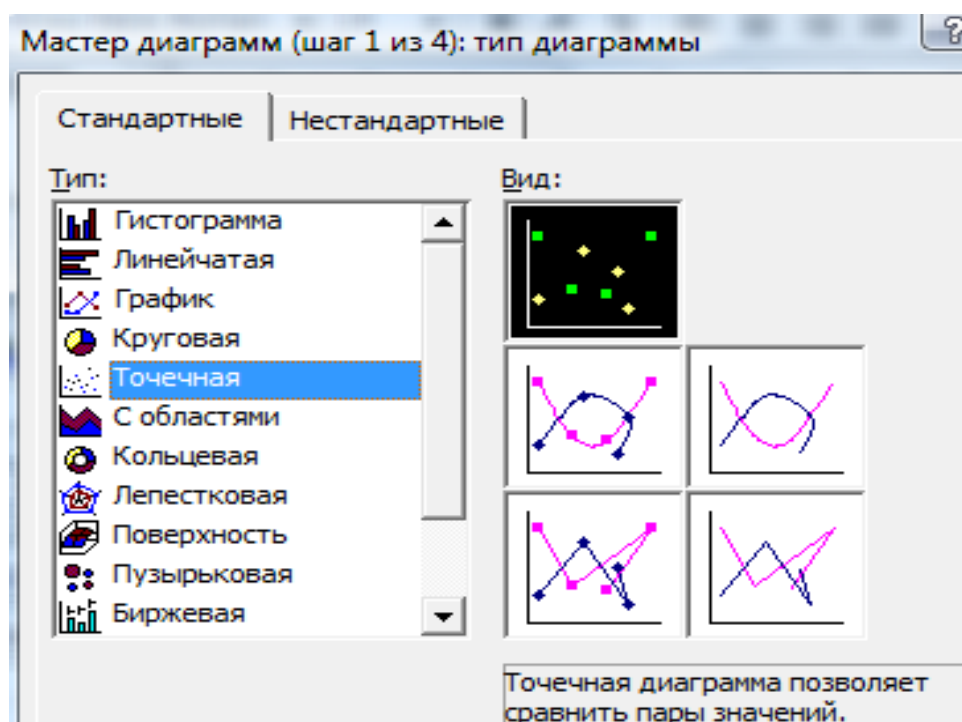


Рис. 1.7. Расположение Точечной диаграммы, позволяющей сравнивать пары значений

Нажимаем кнопку «Далее».

В открывшемся окне в поле Диапазон вводим значения x и y . Для этого подводим курсор мыши к ячейке В3, нажимаем правую клавишу мыши и, не отпуская клавишу, захватываем весь интервал чисел до ячейки К4. Отпускаем клавишу мыши. Указанный нами интервал значений заносится автоматически в поле Диапазона. При этом указывается и имя страницы Excel, на которой расположены наши данные (рис. 1.8).

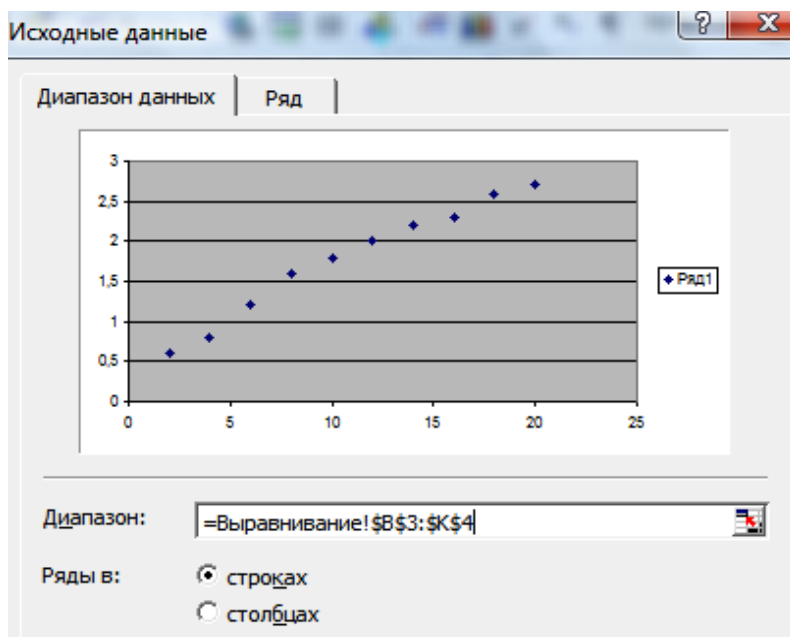


Рис. 1.8. Занесение данных для построения графика

Нажимаем кнопку «Готово».

Полученный график перемещаем в позицию A8. Для этого щелчком левой клавиши мыши выделяем объект, о чем свидетельствуют появившиеся по углам и сторонам объекта черные квадраты. Нажать на объекте левой клавишу мыши и, удерживая ее, перемещать объект в нужное место. Перемещение объекта сопровождается появлением крестика со стрелками (✚).

Наводим мышь на точки графика, кликом левой клавиши мыши выделяем все точки, затем кликом правой клавишей мыши вызываем меню, как показано на рис. 1.9.

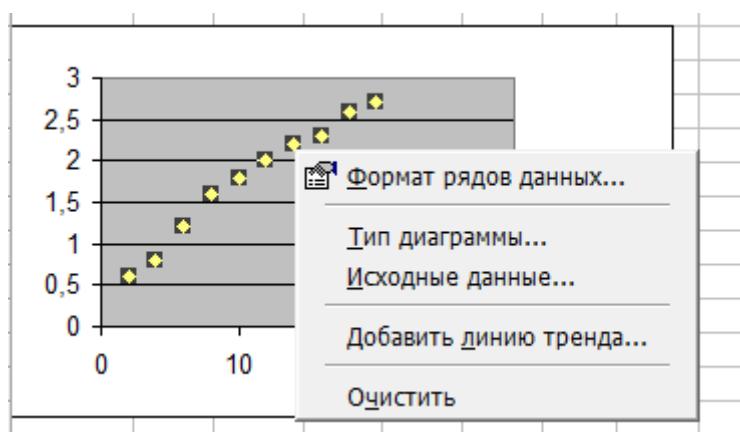


Рис. 1.9. Добавление линии тренда

Выбираем «Добавить линию тренда». Раскрывается окно (рис. 1.10), в котором выбираем в Типе Линейную линию тренда и нажимаем «ОК».

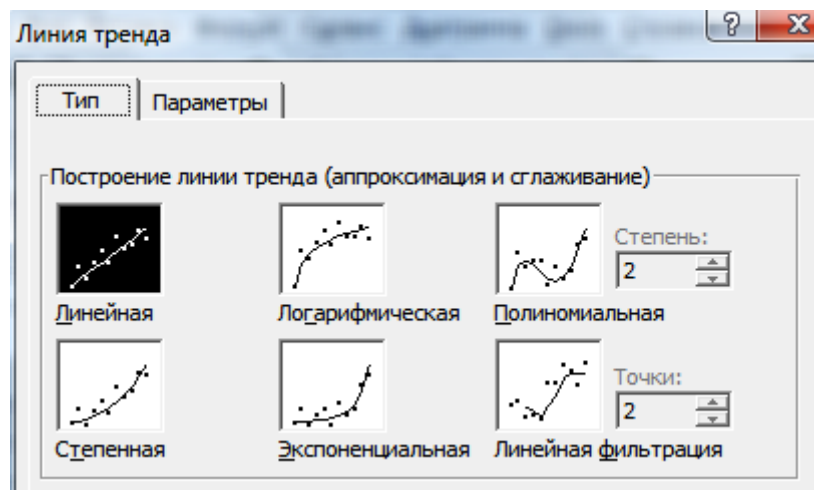


Рис. 1.10. Выбор линейной линии тренда

График в прямоугольных координатах (x, y) готов.

Для построения графика в координатах (X, Y) выполняем те же действия п. 3, только вместо чисел, расположенных в ячейках В2 - К4, указываем ячейки В5 - К7.

4. Сравнение графиков.

Сравнивать мы можем графики, выполненные в одинаковом масштабе. Поэтому, если построенная диаграмма имеет поле шире или длиннее первой диаграммы, то ее сжимаем или растягиваем: выделяем щелчком мыши объект, размеры которого изменяем до появления стрелочки ($\updownarrow$). Затем нажимаем левую клавишу мыши и, не отпуская ее, растягиваем или сжимаем объект до нужного размера.

В результате получаем два графика, как представлено на рис. 1.11.

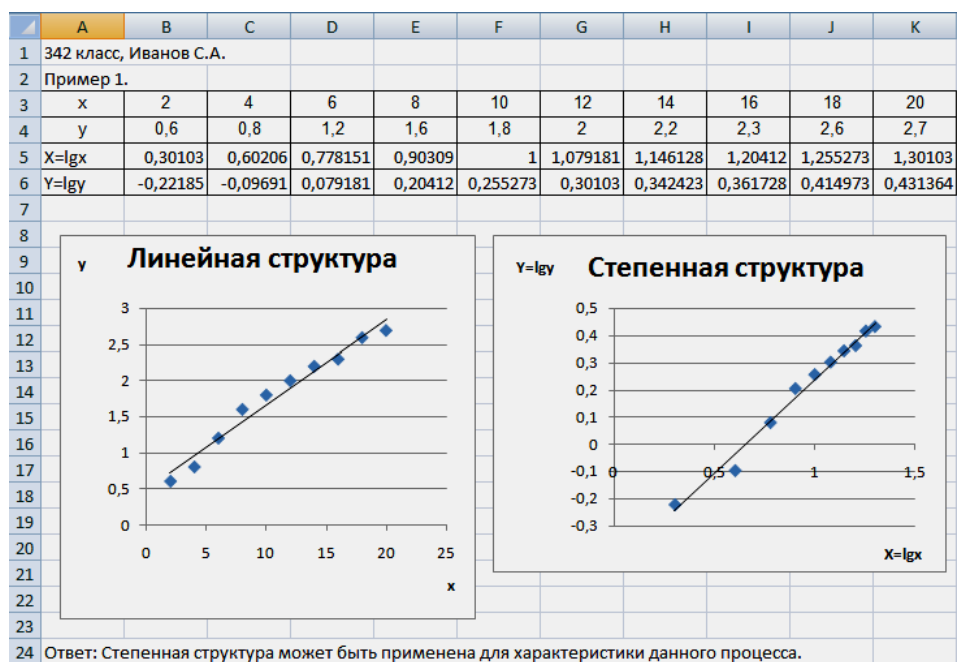


Рис. 1.11. Итоговый вид выполненной работы

Ответ. В рассмотренном примере степенная структура может быть применена для характеристики процесса, так как точки, построенные в координатах (X, Y) , расположены ближе к прямой линии, чем точки в координатах (x, y) . Координаты (X, Y) соответствуют степенной структуре, преобразованной к линейному виду. Координаты (x, y) соответствуют линейной структуре.

Сравнение исследуемой структуры всегда проводится по отношению к прямой линии, которая строится по данным, указанным в условии задачи.

В задачах этого типа возможность применения оценивается визуально. Для количественной оценки используются другие методы. Мы рассмотрим метод наименьших квадратов.

Контрольные вопросы

1. Что понимают под структурой математической модели?
2. Основные типы структур математической модели, используемые в химико-технологических процессах.
3. Чем руководствуются при выборе математического описания химического процесса?
4. Как можно решать задачу выбора структуры математической модели?
5. В чем заключается метод выравнивания?
6. Какой прием используют для приведения экспоненциальной структуры к линейному виду?
7. Какой прием используют для приведения степенной структуры к линейному виду?
8. Алгоритм метода выравнивания.
9. Почему сравнение исследуемой структуры в методе выравнивания всегда проводится по отношению к прямой линии?
10. Можно ли в методе выравнивания использовать количественную оценку при выборе структуры?

Индивидуальные задания к занятию № 1

«Использование метода выравнивания в задачах химической технологии»

1. В ходе проведения химического анализа получены данные по изменению концентрации с течением времени на выходе. Проверить возможность применения для характеристики данного процесса степенной структуры математической модели.

t , мин C , %	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20	22	24	26	28	30	32	34	36	38	40
B1	12,56	14,84	16,36	19,11	20,58	23,84	25,35	26,31	28,42	30,05	32,47	34,73	36,52	38,95	40,79	42,58	44,84	46,89	48,73	50,68
B2	14,99	15,74	17,81	21,56	23,56	28,01	30,07	31,38	34,25	36,48	39,77	42,86	45,3	48,61	51,12	53,56	56,65	59,45	61,95	64,61
B3	15,57	16,96	19,78	24,9	27,63	33,69	36,5	38,29	42,21	45,25	49,74	53,95	57,27	61,79	65,22	68,54	72,75	76,56	79,98	83,6
B4	12,32	15,07	18,33	24,23	27,38	34,37	37,62	39,68	44,2	47,71	52,89	57,75	61,58	66,79	70,75	74,58	79,44	83,84	87,78	91,97
B5	11,45	12,89	16,65	23,46	27,09	35,16	38,91	41,28	46,5	50,55	56,53	62,13	66,56	72,57	77,13	81,56	87,16	92,24	96,79	96,9
B6	11,71	13,38	17,71	25,57	29,76	39,07	43,39	46,13	52,15	56,83	63,72	70,19	75,29	82,23	87,5	92,6	93,1	93,2	94,4	95,2
B7	16,36	18,34	20,67	24,9	27,16	32,17	34,5	35,98	39,22	41,74	45,45	48,93	51,68	55,42	58,26	61	64,49	67,65	70,47	73,47
B8	17,02	19,72	22,9	28,67	31,75	38,59	41,76	43,77	48,19	51,63	56,69	61,44	65,19	70,28	74,15	77,9	82,65	86,96	90,81	94,9
B9	11,36	13,34	15,67	19,9	22,16	27,17	29,5	30,98	34,22	36,74	40,45	43,93	46,68	50,42	53,26	56	59,49	62,65	65,47	68,47
B10	12,02	14,72	17,9	23,67	26,75	33,59	36,76	38,77	43,19	46,63	51,69	56,44	60,19	65,28	69,15	72,9	77,65	81,96	85,81	89,9
B11	12,92	16,6	20,94	28,81	33,01	42,33	46,66	49,4	55,43	60,11	67,02	73,49	78,61	85,55	90,83	82,62	93,1	93,2	94,4	95,2
B12	14,76	16,04	17,56	20,31	21,78	25,04	26,55	27,51	29,62	31,25	33,67	35,93	37,72	40,15	41,99	43,78	46,04	48,09	49,93	51,88
B13	26,31	26,72	28,24	31,43	32,46	36,6	37,8	38,19	40,3	41,1	44,35	46,61	48,4	50,83	52,67	54,46	56,72	58,77	60,61	62,56
B14	26,74	27,62	29,69	33,44	35,44	40,76	42,56	43,26	46,13	47,53	50,83	54,74	57,18	60,49	63	64,61	68,53	71,33	73,83	76,49
B15	27,28	28,99	31,29	37,18	39,35	46,69	49,02	49,75	53,75	56,47	61,32	65,82	68,91	73,9	77,17	80,2	84,78	88,62	91,9	95,48
B16	22,23	24,72	28,13	33,96	37,19	44,17	47,38	49,4	54,09	57,39	62,86	67,61	71,52	76,58	80,46	84,79	89,09	93,61	97,36	101,5
B17	16,66	18,05	19,7	22,64	24,19	27,63	29,21	30,21	32,41	34,1	36,61	38,95	40,79	43,29	45,18	47,02	49,33	51,43	53,31	55,3
B18	16,8	18,63	20,79	24,68	26,75	31,33	33,44	34,78	37,73	40,01	43,38	46,52	49,01	52,38	54,94	57,41	60,55	63,39	65,93	68,62
B19	17,39	19,89	22,82	28,11	30,91	37,14	40,01	41,83	45,84	48,94	53,51	57,79	61,16	65,74	69,22	72,59	76,85	80,71	84,17	87,83
B20	15,17	18,06	21,45	27,57	30,81	37,99	41,31	43,41	48,02	51,6	56,87	61,8	65,69	70,98	74,99	78,87	83,78	88,23	92,22	96,44

Продолжение задания к занятию № 1

B21	14,17	15,79	19,71	26,78	30,52	38,8	42,63	45,05	50,37	54,49	60,57	66,25	70,74	76,83	81,45	89,5	93,1	93,2	94,4	95,2
B22	15,8	16,73	18,91	22,81	24,87	30,31	32,15	32,87	35,8	37,24	40,58	44,53	47	50,35	52,89	54,52	58,47	61,29	63,82	66,48
B23	16,34	18,12	20,54	26,59	28,82	36,29	38,66	39,42	43,47	46,22	51,13	55,66	58,79	63,81	67,11	70,16	74,74	78,59	81,88	85,46
B24	11,45	13,99	17,45	23,36	26,62	33,67	36,91	38,95	43,69	47,01	52,52	57,3	61,23	66,33	70,23	74,57	78,9	83,44	87,21	91,36
B25	12,89	14,35	16,06	19,1	20,7	24,21	25,83	26,85	29,09	30,82	33,36	35,73	37,6	40,13	42,05	43,91	46,25	48,37	50,27	52,28
B26	12,86	14,76	16,98	20,98	23,09	27,76	29,91	31,28	34,26	36,58	39,98	43,17	45,68	49,08	51,66	54,16	57,32	60,18	62,74	65,46
B27	13,47	16,06	19,07	24,48	27,34	33,66	36,58	38,42	42,47	45,61	50,22	54,54	57,94	62,56	66,06	69,45	73,74	77,63	81,1	84,79
B28	11,28	14,28	17,78	24,03	27,33	34,62	37,98	40,1	44,77	48,38	53,7	58,67	62,59	67,91	71,94	75,78	80,75	85,2	89,19	93,42
B29	10,33	11,99	15,96	23,09	26,86	35,2	39,05	41,49	46,84	50,99	57,1	62,81	67,32	73,43	78,07	86,14	89,76	89,88	91,1	91,91
B30	12,22	13,16	15,36	19,31	21,38	26,87	28,73	29,45	32,4	33,85	37,22	41,2	43,69	47,06	49,61	51,26	55,22	58,06	60,6	63,27
B31	12,77	14,56	17,01	23,11	25,37	32,9	35,29	36,05	40,13	42,9	47,83	52,4	55,55	60,59	63,91	66,97	71,58	75,45	78,75	82,35
B32	14,28	16,85	20,34	26,33	29,61	36,74	40	42,05	46,82	50,16	55,7	60,52	64,47	69,6	73,51	77,88	82,23	86,79	90,57	94,74
B33	15,64	17,14	18,91	22,03	23,67	27,26	28,91	29,94	32,22	33,97	36,56	38,96	40,86	43,42	45,35	47,24	49,6	51,74	53,66	55,68
B34	15,48	17,42	19,68	23,74	25,88	30,6	32,78	34,16	37,17	39,51	42,95	46,16	48,69	52,12	54,72	57,23	60,42	63,3	65,87	68,6
B35	16,1	18,73	21,79	27,28	30,17	36,56	39,5	41,36	45,45	48,61	53,26	57,61	61,03	65,68	69,2	72,61	76,93	80,83	84,32	88,02
B36	13,92	16,98	20,53	26,88	30,22	37,59	40,98	43,12	47,83	51,47	56,82	61,83	65,78	71,13	75,18	79,04	84,04	88,51	92,52	96,76
B37	12,92	14,65	18,69	25,93	29,75	38,18	42,07	44,53	49,92	54,1	60,25	66	70,53	76,68	81,35	89,44	93,09	93,23	94,46	95,3
B38	14,77	15,76	18,05	22,14	24,27	29,86	31,76	32,51	35,51	36,99	40,41	44,42	46,94	50,34	52,92	54,61	58,59	61,43	63,98	66,65
B39	15,37	17,18	19,69	25,87	28,17	35,78	38,19	38,97	43,08	45,87	50,84	55,45	58,62	63,7	67,04	70,11	74,75	78,64	81,95	85,57
B40	16,89	19,51	23,06	29,15	32,47	39,7	42,99	45,04	49,86	53,22	58,81	63,67	67,64	72,8	76,74	81,12	85,5	90,09	93,88	98,08
B41	18,1	19,68	21,55	24,79	26,49	30,19	31,87	32,93	35,26	37,05	39,68	42,12	44,04	46,64	48,6	50,51	52,9	55,07	57	59,04
B42	17,99	19,97	22,28	26,42	28,59	33,39	35,59	36,98	40,04	42,4	45,87	49,11	51,66	55,12	57,74	60,27	63,48	66,38	68,97	71,72
B43	11,61	14,3	17,42	23	25,93	32,4	35,38	37,26	41,38	44,57	49,26	53,64	57,09	61,77	65,31	68,74	73,08	77,01	80,52	84,24
B44	9,452	12,59	16,21	22,67	26,06	33,51	36,94	39,11	43,86	47,53	52,93	57,97	61,94	67,32	71,4	75,29	80,31	84,8	88,83	93,09
B45	8,368	10,2	14,34	21,71	25,58	34,12	38,05	40,53	45,98	50,18	56,38	62,17	66,73	72,92	77,61	85,72	89,39	89,56	90,81	91,67
B46	10,19	11,23	13,66	17,9	20,1	25,81	27,75	28,53	31,58	33,09	36,56	40,62	43,16	46,61	49,22	50,95	54,95	57,78	60,33	63,01
B47	10,86	12,7	15,28	21,56	23,9	31,61	34,05	34,84	38,99	41,8	46,81	51,47	54,66	59,77	63,13	66,22	70,89	74,8	78,13	81,77
B48	12,4	15,07	18,69	24,92	28,28	35,62	38,94	41	45,86	49,26	54,89	59,78	63,79	68,98	72,95	77,35	81,76	86,37	90,18	94,39

Продолжение задания к занятию № 1

B49	13,65	15,31	17,26	20,62	22,36	26,15	27,87	28,96	31,34	33,15	35,83	38,3	40,25	42,88	44,87	46,8	49,21	51,4	53,35	55,42
B50	13,58	15,61	17,96	22,16	24,37	29,22	31,45	32,86	35,95	38,33	41,83	45,1	47,67	51,16	53,8	56,35	59,58	62,49	65,1	67,86
B51	7,198	9,937	13,11	18,77	21,75	28,29	31,3	33,19	37,35	40,57	45,29	49,71	53,18	57,89	61,45	64,9	69,26	73,21	76,74	80,47
B52	5,059	8,261	11,95	18,5	21,94	29,48	32,94	35,13	39,92	43,61	49,05	54,13	58,13	63,54	67,64	71,55	76,59	81,11	85,15	89,44
B53	3,912	5,834	10,05	17,54	21,46	30,09	34,06	36,57	42,06	46,3	52,53	58,36	62,95	69,17	73,88	82,02	85,72	85,91	87,18	88,06
B54	5,699	6,801	9,329	13,72	15,97	21,79	23,77	24,57	27,68	29,23	32,74	36,84	39,41	42,89	45,53	47,3	51,31	54,15	56,71	59,39
B55	6,427	8,298	10,93	17,3	19,68	27,48	29,95	30,75	34,95	37,77	42,82	47,51	50,73	55,87	59,26	62,36	67,06	70,99	74,34	77,99
B56	7,988	10,7	14,38	20,73	24,13	31,57	34,92	36,99	41,89	45,32	51	55,93	59,95	65,19	69,17	73,6	78,03	82,66	86,49	90,72
B57	9,278	11	13,02	16,48	18,27	22,15	23,91	25,01	27,43	29,27	32	34,51	36,48	39,14	41,15	43,11	45,54	47,76	49,73	51,81
B58	9,239	11,3	13,69	17,95	20,19	25,1	27,36	28,78	31,89	34,3	37,83	41,12	43,72	47,23	49,88	52,45	55,7	58,64	61,26	64,04
B59	8,053	10,84	14,06	19,8	22,8	29,41	32,45	34,36	38,56	41,8	46,56	51	54,49	59,23	62,81	66,28	70,67	74,63	78,18	81,93
B60	5,724	9,016	12,79	19,47	22,95	30,59	34,09	36,3	41,13	44,86	50,34	55,46	59,48	64,93	69,06	72,98	78,06	82,6	86,66	90,96
B61	4,487	6,534	10,86	18,49	22,48	31,22	35,23	37,76	43,3	47,57	53,86	59,72	64,34	70,6	75,34	83,49	87,22	87,43	88,73	89,62
B62	6,222	7,409	10,09	14,65	16,98	22,92	24,95	25,78	28,94	30,53	34,09	38,23	40,84	44,36	47,02	48,83	52,87	55,71	58,27	60,96
B63	7,035	8,948	11,67	18,16	20,58	28,49	31	31,81	36,04	38,89	43,98	48,72	51,97	57,14	60,55	63,66	68,4	72,35	75,72	79,39
B64	8,623	11,41	15,17	21,66	25,11	32,67	36,05	38,13	43,09	46,54	52,27	57,24	61,29	66,56	70,57	75,02	79,48	84,13	87,99	92,24
B65	9,971	11,78	13,89	17,48	19,33	23,3	25,1	26,22	28,69	30,57	33,34	35,88	37,89	40,58	42,62	44,6	47,06	49,3	51,28	53,39
B66	9,974	12,08	14,53	18,87	21,14	26,12	28,4	29,84	32,99	35,42	38,98	42,31	44,92	48,46	51,14	53,72	56,99	59,95	62,58	65,38
B67	8,786	11,63	14,91	20,74	23,79	30,48	33,54	35,48	39,71	42,98	47,78	52,25	55,77	60,54	64,14	67,63	72,04	76,03	79,59	83,36
B68	6,181	9,614	13,51	20,34	23,89	31,64	35,18	37,42	42,3	46,07	51,6	56,75	60,81	66,29	70,45	74,4	79,5	84,06	88,14	92,47
B69	4,791	7,051	11,54	19,36	23,42	32,29	36,35	38,9	44,5	48,81	55,15	61,06	65,71	72	76,77	84,95	88,71	88,94	90,26	91,18
B70	6,414	7,775	10,69	15,5	17,91	24	26,08	26,94	30,16	31,79	35,41	39,6	42,24	45,79	48,49	50,34	54,4	57,24	59,81	62,5
B71	7,391	9,381	12,24	18,89	21,39	29,43	31,97	32,8	37,09	39,95	45,1	49,89	53,16	58,37	61,81	64,94	69,71	73,68	77,07	80,77
B72	9,031	11,93	15,81	22,5	26	33,71	37,13	39,22	44,23	47,72	53,5	58,52	62,6	67,91	71,95	76,41	80,91	85,59	89,46	93,73
B73	10,47	12,41	14,65	18,39	20,31	24,4	26,24	27,39	29,92	31,82	34,64	37,23	39,27	42	44,06	46,07	48,55	50,81	52,82	54,95
B74	10,54	12,73	15,24	19,69	22	27,06	29,38	30,84	34,03	36,48	40,09	43,45	46,08	49,65	52,35	54,96	58,25	61,23	63,88	66,69
B75	9,352	12,28	15,65	21,6	24,69	31,48	34,58	36,54	40,82	44,11	48,95	53,46	57,01	61,81	65,44	68,95	73,39	77,4	80,98	84,77

2. В ходе проведения химического анализа получены данные по изменению концентрации с течением времени на выходе. Проверить возможность применения для характеристики данного процесса экспоненциальной структуры математической модели.

$t, \text{мин}$																				
$C, \%$	3	6	9	12	15	18	21	24	27	30	33	36	39	42	45	48	51	54	57	60
B1	16,89	17,79	18,85	20,78	21,8	24,09	25,15	25,82	27,29	28,44	30,13	31,71	32,96	34,66	35,95	37,2	38,79	40,23	41,51	42,88
B2	17,19	18,42	19,87	22,49	23,89	27	28,45	29,36	31,38	32,94	35,24	37,4	39,11	41,43	43,19	44,89	47,05	49,01	50,77	52,63
B3	17,6	19,27	21,25	24,83	26,74	30,98	32,95	34,2	36,94	39,07	42,22	45,16	47,49	50,65	53,05	55,38	58,32	61	63,39	65,92
B4	16,02	17,95	20,23	24,36	26,57	31,46	33,73	35,17	38,34	40,8	44,42	47,82	50,51	54,15	56,92	59,61	63,01	66,09	68,85	71,78
B5	15,41	16,43	19,05	23,82	26,36	32,01	34,64	36,3	39,95	42,78	46,97	50,89	53,99	58,2	61,39	64,49	68,41	71,97	75,15	75,23
B6	15,59	16,76	19,8	25,3	28,23	34,75	37,78	39,69	43,91	47,18	52,01	56,53	60,11	64,96	68,65	72,22	72,57	72,64	73,48	74,04
B7	18,85	20,23	21,87	24,83	26,41	29,92	31,55	32,58	34,85	36,62	39,22	41,65	43,58	46,19	48,18	50,1	52,54	54,75	56,73	58,83
B8	19,31	21,2	23,43	27,47	29,62	34,41	36,63	38,04	41,14	43,54	47,08	50,41	53,03	56,6	59,31	61,93	65,26	68,27	70,97	73,83
B9	15,35	16,73	18,37	21,33	22,91	26,42	28,05	29,08	31,35	33,12	35,72	38,15	40,08	42,69	44,68	46,6	49,04	51,25	53,23	55,33
B10	15,81	17,7	19,93	23,97	26,12	30,91	33,13	34,54	37,64	40,04	43,58	46,91	49,53	53,1	55,81	58,43	61,76	64,77	67,47	70,33
B11	16,44	19,02	22,06	27,57	30,5	37,03	40,06	41,98	46,2	49,48	54,31	58,85	62,43	67,29	70,98	65,23	72,57	72,64	73,48	74,04
B12	17,73	18,63	19,69	21,62	22,64	24,93	25,99	26,66	28,13	29,28	30,97	32,55	33,8	35,5	36,79	38,04	39,63	41,07	42,35	43,72
B13	25,82	26,11	27,17	29,4	30,12	33,02	33,86	34,13	35,61	36,17	38,44	40,03	41,28	42,98	44,27	45,52	47,11	48,54	49,83	51,19
B14	26,12	26,73	28,18	30,81	32,21	35,93	37,19	37,68	39,69	40,67	42,98	45,72	47,42	49,74	51,5	52,63	55,37	57,33	59,08	60,94
B15	26,49	27,69	29,3	33,43	34,94	40,09	41,71	42,23	45,02	46,93	50,33	53,47	55,64	59,13	61,42	63,54	66,74	69,44	71,73	74,24
B16	22,96	24,71	27,09	31,17	33,43	38,32	40,56	41,98	45,27	47,57	51,4	54,73	57,46	61,01	63,72	66,75	69,76	72,93	75,55	78,45
B17	19,06	20,04	21,19	23,25	24,34	26,74	27,85	28,55	30,09	31,27	33,03	34,66	35,95	37,7	39,03	40,31	41,93	43,4	44,72	46,11
B18	19,16	20,44	21,95	24,68	26,12	29,33	30,81	31,75	33,81	35,41	37,76	39,97	41,7	44,06	45,85	47,59	49,78	51,77	53,55	55,44
B19	19,58	21,32	23,37	27,08	29,04	33,4	35,41	36,68	39,49	41,66	44,86	47,85	50,21	53,42	55,86	58,21	61,2	63,9	66,32	68,88
B20	18,02	20,05	22,42	26,7	28,97	33,99	36,32	37,79	41,02	43,52	47,21	50,66	53,39	57,08	59,89	62,61	66,05	69,16	71,95	74,91
B21	17,32	18,45	21,2	26,15	28,76	34,56	37,24	38,94	42,66	45,54	49,8	53,78	56,92	61,18	64,42	70,05	72,57	72,64	73,48	74,04
B22	18,46	19,11	20,64	23,37	24,81	28,62	29,9	30,41	32,46	33,47	35,8	38,57	40,3	42,65	44,42	45,57	48,33	50,3	52,07	53,93
B23	18,84	20,08	21,78	26,01	27,57	32,8	34,46	34,99	37,83	39,76	43,19	46,37	48,55	52,07	54,38	56,51	59,72	62,42	64,71	67,22
B24	15,41	17,19	19,61	23,75	26,03	30,97	33,24	34,67	37,98	40,3	44,16	47,51	50,26	53,83	56,56	59,6	62,63	65,81	68,45	71,36

Продолжение задания к занятию № 1

B25	16,42	17,44	18,64	20,77	21,89	24,35	25,48	26,2	27,76	28,97	30,75	32,41	33,72	35,49	36,83	38,14	39,77	41,26	42,59	43,99
B26	16,4	17,73	19,29	22,09	23,56	26,83	28,34	29,29	31,38	33	35,39	37,62	39,37	41,76	43,56	45,31	47,53	49,53	51,32	53,22
B27	16,83	18,64	20,75	24,54	26,54	30,96	33,01	34,3	37,13	39,32	42,56	45,58	47,96	51,19	53,64	56,02	59,02	61,74	64,17	66,75
B28	15,3	17,4	19,84	24,22	26,53	31,63	33,98	35,47	38,74	41,27	44,99	48,47	51,21	54,94	57,76	60,45	63,93	67,04	69,83	72,79
B29	14,63	15,79	18,57	23,56	26,2	32,04	34,74	36,44	40,19	43,09	47,37	51,37	54,52	58,8	62,05	67,7	70,23	70,32	71,17	71,74
B30	15,96	16,61	18,15	20,92	22,37	26,21	27,51	28,02	30,08	31,09	33,46	36,24	37,98	40,34	42,13	43,28	46,06	48,04	49,82	51,69
B31	16,34	17,59	19,31	23,58	25,16	30,43	32,1	32,64	35,49	37,43	40,88	44,08	46,28	49,82	52,14	54,28	57,51	60,21	62,52	65,04
B32	17,4	19,19	21,64	25,83	28,13	33,12	35,4	36,83	40,17	42,51	46,39	49,76	52,53	56,12	58,86	61,92	64,96	68,15	70,8	73,72
B33	18,35	19,4	20,63	22,82	23,97	26,48	27,63	28,36	29,96	31,18	32,99	34,67	36	37,79	39,15	40,47	42,12	43,62	44,96	46,38
B34	18,23	19,59	21,17	24,02	25,51	28,82	30,35	31,31	33,42	35,06	37,46	39,71	41,48	43,88	45,7	47,46	49,69	51,71	53,51	55,42
B35	18,67	20,51	22,65	26,49	28,52	32,99	35,05	36,36	39,21	41,43	44,68	47,72	50,12	53,37	55,84	58,23	61,25	63,98	66,42	69,02
B36	17,15	19,29	21,77	26,22	28,55	33,71	36,09	37,59	40,88	43,43	47,18	50,68	53,44	57,19	60,03	62,73	66,23	69,36	72,16	75,13
B37	16,44	17,65	20,48	25,55	28,22	34,13	36,85	38,57	42,35	45,27	49,58	53,6	56,77	61,08	64,34	70,01	72,56	72,66	73,52	74,11
B38	17,74	18,43	20,04	22,9	24,39	28,3	29,63	30,16	32,25	33,29	35,68	38,5	40,26	42,64	44,45	45,63	48,41	50,4	52,18	54,06
B39	18,16	19,43	21,18	25,51	27,12	32,44	34,14	34,68	37,56	39,51	42,99	46,22	48,43	51,99	54,33	56,48	59,72	62,44	64,77	67,3
B40	19,23	21,05	23,54	27,81	30,13	35,19	37,49	38,93	42,3	44,66	48,57	51,97	54,75	58,36	61,12	64,19	67,25	70,46	73,12	76,05
B41	20,07	21,18	22,48	24,76	25,94	28,53	29,71	30,45	32,09	33,33	35,18	36,89	38,23	40,05	41,42	42,76	44,43	45,95	47,3	48,73
B42	19,99	21,38	23	25,89	27,41	30,77	32,31	33,29	35,43	37,08	39,51	41,78	43,56	45,98	47,82	49,59	51,84	53,87	55,68	57,6
B43	15,53	17,41	19,59	23,5	25,55	30,08	32,17	33,48	36,37	38,6	41,88	44,95	47,36	50,64	53,12	55,52	58,56	61,31	63,76	66,37
B44	14,02	16,21	18,75	23,27	25,64	30,86	33,26	34,78	38,1	40,67	44,45	47,98	50,76	54,53	57,38	60,1	63,61	66,76	69,58	72,56
B45	13,26	14,54	17,44	22,6	25,31	31,28	34,03	35,77	39,58	42,53	46,87	50,92	54,11	58,44	61,72	67,4	69,98	70,09	70,97	71,57
B46	14,53	15,26	16,96	19,93	21,47	25,47	26,82	27,37	29,5	30,57	32,99	35,84	37,61	40,03	41,85	43,06	45,86	47,85	49,63	51,51
B47	15	16,29	18,09	22,49	24,13	29,52	31,24	31,79	34,7	36,66	40,17	43,43	45,66	49,24	51,59	53,75	57,02	59,76	62,09	64,64
B48	16,08	17,95	20,48	24,84	27,2	32,33	34,66	36,1	39,5	41,88	45,82	49,25	52,05	55,69	58,46	61,55	64,63	67,86	70,53	73,47
B49	16,95	18,12	19,48	21,83	23,05	25,71	26,91	27,67	29,33	30,6	32,48	34,21	35,58	37,42	38,81	40,16	41,85	43,38	44,75	46,19
B50	16,91	18,32	19,97	22,91	24,46	27,85	29,42	30,4	32,56	34,23	36,68	38,97	40,77	43,21	45,06	46,84	49,1	51,15	52,97	54,9
B51	12,44	14,36	16,58	20,54	22,62	27,2	29,31	30,64	33,55	35,8	39,11	42,19	44,63	47,92	50,42	52,83	55,89	58,65	61,12	63,73
B52	10,94	13,18	15,77	20,35	22,75	28,03	30,46	31,99	35,34	37,93	41,74	45,29	48,09	51,88	54,75	57,48	61,01	64,18	67,01	70,01
B53	10,14	11,48	14,44	19,68	22,42	28,47	31,24	33	36,84	39,81	44,17	48,25	51,46	55,82	59,12	64,81	67,4	67,53	68,43	69,04

Продолжение задания к занятию № 1

B54	11,39	12,16	13,93	17	18,58	22,65	24,04	24,6	26,77	27,86	30,32	33,19	34,99	37,42	39,27	40,51	43,32	45,31	47,1	48,97
B55	11,9	13,21	15,05	19,51	21,18	26,64	28,37	28,93	31,86	33,84	37,37	40,66	42,91	46,51	48,88	51,05	54,34	57,09	59,44	62
B56	12,99	14,89	17,47	21,91	24,29	29,5	31,84	33,29	36,73	39,12	43,1	46,55	49,37	53,03	55,82	58,92	62,02	65,26	67,95	70,91
B57	13,89	15,1	16,51	18,94	20,19	22,9	24,14	24,91	26,6	27,89	29,8	31,56	32,94	34,8	36,21	37,58	39,28	40,83	42,21	43,67
B58	13,87	15,31	16,99	19,97	21,53	24,97	26,55	27,54	29,73	31,41	33,88	36,19	38	40,46	42,32	44,12	46,39	48,44	50,28	52,22
B59	13,04	14,99	17,24	21,26	23,36	27,99	30,11	31,45	34,39	36,66	39,99	43,1	45,54	48,86	51,37	53,8	56,87	59,64	62,12	64,75
B60	11,41	13,71	16,36	21,03	23,46	28,81	31,26	32,81	36,19	38,8	42,64	46,22	49,04	52,85	55,74	58,49	62,04	65,22	68,06	71,07
B61	10,54	11,97	15	20,35	23,13	29,25	32,06	33,83	37,71	40,7	45,1	49,21	52,44	56,82	60,13	65,84	68,46	68,6	69,51	70,14
B62	11,76	12,59	14,46	17,66	19,29	23,45	24,87	25,45	27,66	28,77	31,27	34,16	35,99	38,45	40,31	41,58	44,41	46,39	48,19	50,07
B63	12,32	13,66	15,57	20,11	21,81	27,35	29,1	29,66	32,63	34,62	38,19	41,51	43,78	47,4	49,78	51,97	55,28	58,04	60,4	62,97
B64	13,44	15,39	18,02	22,56	24,97	30,27	32,64	34,09	37,56	39,98	43,99	47,47	50,3	53,99	56,8	59,91	63,04	66,29	68,99	71,97
B65	14,38	15,65	17,12	19,63	20,93	23,71	24,97	25,76	27,49	28,8	30,74	32,52	33,92	35,81	37,23	38,62	40,34	41,91	43,3	44,77
B66	14,38	15,86	17,57	20,61	22,2	25,68	27,28	28,29	30,49	32,19	34,69	37,02	38,85	41,32	43,19	45,01	47,29	49,36	51,21	53,17
B67	13,55	15,54	17,84	21,92	24,05	28,73	30,88	32,23	35,2	37,49	40,84	43,98	46,44	49,78	52,3	54,74	57,83	60,62	63,11	65,75
B68	11,73	14,13	16,86	21,64	24,12	29,55	32,03	33,59	37,01	39,65	43,52	47,13	49,97	53,81	56,71	59,48	63,05	66,24	69,1	72,13
B69	10,75	12,34	15,48	20,95	23,79	30	32,84	34,63	38,55	41,57	46	50,14	53,39	57,8	61,14	66,86	69,49	69,66	70,58	71,22
B70	11,89	12,84	14,88	18,25	19,94	24,2	25,66	26,26	28,51	29,66	32,19	35,12	36,97	39,46	41,34	42,64	45,48	47,47	49,27	51,15
B71	12,57	13,97	15,97	20,62	22,37	28	29,78	30,36	33,36	35,37	38,97	42,32	44,61	48,26	50,66	52,86	56,19	58,98	61,35	63,94
B72	13,72	15,75	18,46	23,15	25,6	31	33,39	34,86	38,36	40,8	44,85	48,36	51,22	54,94	57,76	60,89	64,03	67,31	70,02	73,01
B73	14,73	16,09	17,65	20,28	21,62	24,48	25,77	26,57	28,34	29,68	31,65	33,46	34,89	36,8	38,24	39,65	41,38	42,97	44,37	45,86
B74	14,78	16,31	18,07	21,18	22,8	26,34	27,97	28,99	31,22	32,94	35,46	37,81	39,66	42,16	44,04	45,87	48,18	50,26	52,12	54,09
B75	13,95	16	18,36	22,52	24,69	29,43	31,61	32,98	35,97	38,28	41,67	44,83	47,31	50,67	53,21	55,67	58,77	61,58	64,08	66,74

2. МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Основоположниками метода наименьших квадратов являются Лежандр, Р. Андре, Гаусс. Этот метод часто применяют в задачах выравнивания или сглаживания.

Пусть в результате наблюдений химического эксперимента получен ряд точек $(x_1; y_1)$, $(x_2; y_2)$, ..., $(x_n; y_n)$ (рис. 2.1).

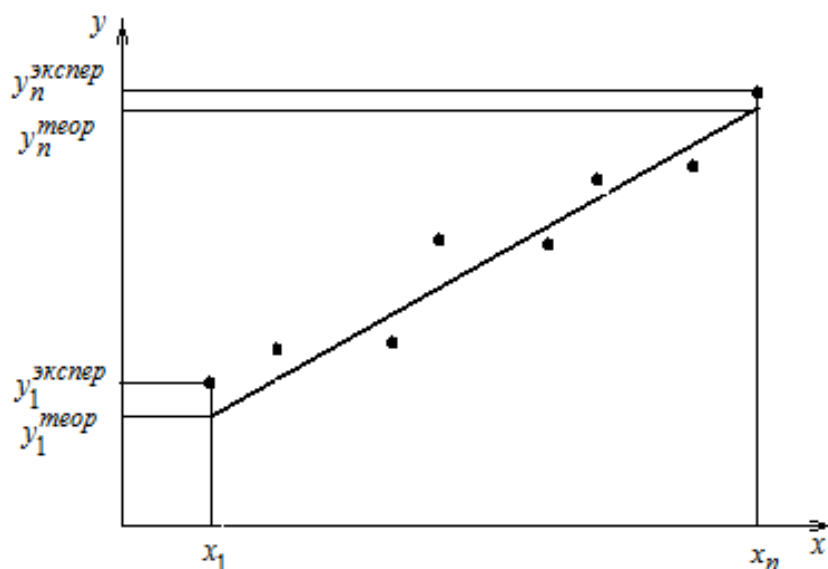


Рис. 2.1. Результат наблюдений химического эксперимента

Согласно методу наименьших квадратов, сумма квадратов отклонений опытных точек ($y_n^{экспер}$) от точек, рассчитанных по теоретической кривой ($y_n^{теор}$), должна быть минимальной.

$$S = \sum_{i=1}^n \left(y_i^{экспер} - y_i^{теор} \right)^2 = \min, \quad (2.1)$$

где $y_i^{экспер}$ - значения точек, полученные в ходе эксперимента;

$y_i^{теор}$ - точки, лежащие на прогнозируемой кривой.

Мы предполагаем линейную зависимость (линейную структуру) - $y_i = a_0 + a_1 \cdot x_i$. Поэтому записываем

$$S = \sum_{i=1}^n \left(y_i^{экспер} - (a_0 + a_1 \cdot x_i) \right)^2 = \min. \quad (2.2)$$

Функция S - функция двух независимых переменных a_0 и a_1 . Для определения экстремума функции нескольких переменных необходимо обращение в нуль ее частных производных первого порядка, что приводит к уравнениям:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a_0} = 2 \left[\sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i) \cdot (-1) \right] = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_1} = 2 \left[\sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i) \cdot (-x_i) \right] = 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

Сокращая все члены уравнения на 2 и группируя члены, содержащие a_0 и a_1 , получаем

$$\begin{cases} n \cdot a_0 + a_1 \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n y_i \cdot x_i \end{cases} \quad (2.4)$$

Для определения значений a_0 и a_1 следует решить систему двух уравнений с двумя неизвестными. Выразим a_0 из первого уравнения и подставим его выражение во второе уравнение, которое решим относительно a_1 .

$$a_0 = \frac{\sum_{i=1}^n y_i - a_1 \sum_{i=1}^n x_i}{n}; \quad (2.5)$$

$$\left(\frac{\sum_{i=1}^n y_i - a_1 \sum_{i=1}^n x_i}{n} \right) \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n y_i \cdot x_i; \quad (2.6)$$

$$a_1 = \frac{n \cdot \sum_{i=1}^n y_i \cdot x_i - \sum_{i=1}^n y_i \cdot \sum_{i=1}^n x_i}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \sum_{i=1}^n x_i \cdot \sum_{i=1}^n x_i}. \quad (2.7)$$

2.1. Алгоритм определения параметров математической модели химического процесса

1. Записать уравнение исследуемой структуры.
2. Привести к линейному виду (см. табл. 1.2).
3. Рассчитать $\sum_{i=1}^n X_i$, $\sum_{i=1}^n Y_i$, $\sum_{i=1}^n X_i^2$, $\sum_{i=1}^n X_i \cdot Y_i$ для зависимости, приведенной к линейному виду.
4. По формулам (2.5, 2.7) определить A_0 , A_1 .
5. Выполнить преобразования для определения a_0 и a_1 в исследуемой структуре.

2.2. Пример 2. Определение параметров математической модели

Задание. Изменение концентрации компонента A реакции $A + B \xrightarrow{k} C + D$ по времени составило:

x , с	1	3	6	9	12	15	16	17	18
y , г/моль	2,5	2,7	2,9	3,1	3,6	6,7	8,9	12,5	16,7

Определить параметры степенной структуры математической модели изменения концентрации компонента A .

Решение

1. Степенная структура - $y_i = a_0 + x_i^{a_1}$.
2. $Y = \lg y$, $X = \lg x$, $A_0 = \lg a_0$, $A_1 = a_1$.
3. Расчет проводим в Excel.
Открываем Microsoft Excel.
На открывшейся странице в ячейку A1 записываем номер класса и фамилию.
В ячейку A2 записываем номер задачи, в данном случае «Пример 2».
Для расчетов нам понадобится:
 - нумерация опытов n (ячейки A5 - A13);
 - исходные значения x (ячейки B5 - B13) и y (ячейки C5 - C13);
 - преобразованные величины $X = \lg x$ (ячейки D5 - D13) и $Y = \lg y$, (E5 - E13),
 а также величины X^2 (ячейки F5 - F13) и XY (ячейки G5 - G13), необходимые для расчетов параметров уравнения a_0 и a_1 .

Значения n , x , y - заносим, а $X = \lg x$ и $Y = \lg y$, X^2 и XY - вычисляем аналогично Примеру 1, п. 2.

Для расчета суммарных значений $\sum_{i=1}^n X_i$, $\sum_{i=1}^n Y_i$, $\sum_{i=1}^n X_i^2$, $\sum_{i=1}^n X_i \cdot Y_i$ воспользуемся пиктограммой Автосуммы (рис. 2.2).

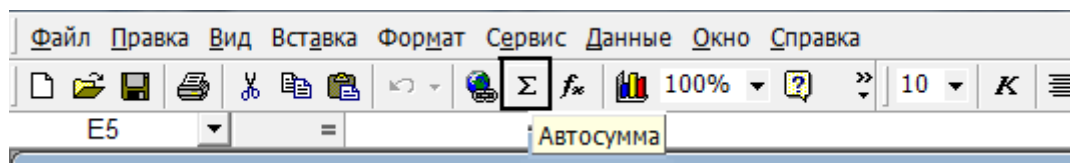


Рис. 2.2. Расположение пиктограммы Автосумма

Для расчета суммы выделяем левой клавишей мыши интервал В5 - G13, затем нажимаем Автосумма. В строке 14 получаем значения

$$\sum_{i=1}^n X_i, \sum_{i=1}^n Y_i, \sum_{i=1}^n X_i^2, \sum_{i=1}^n X_i \cdot Y_i.$$

Результат этих действий приведен на рис. 2.3.

	A	B	C	D	E	F	G
1	342 класс Голубенко А.В.						
2	Пример 2						
3		Исходные данные		Степенная структура			
4	n	x	y	X=lgx	Y=lgy	X ²	XY
5	1	2	2,5	0,30103	0,39794	0,090619	0,119792
6	2	4	2,7	0,60206	0,431364	0,362476	0,259707
7	3	6	2,9	0,778151	0,462398	0,605519	0,359816
8	4	8	3,1	0,90309	0,491362	0,815572	0,443744
9	5	10	3,6	1	0,556303	1	0,556303
10	6	12	6,7	1,079181	0,826075	1,164632	0,891484
11	7	14	8,9	1,146128	0,94939	1,313609	1,088123
12	8	16	12,5	1,20412	1,09691	1,449905	1,320811
13	9	18	16,7	1,255273	1,222716	1,575709	1,534842
14	Сумма			8,269033	6,434457	8,378042	6,574621
15							

Рис. 2.3. Подготовка к расчетам параметров модели в Excel

4. По формулам (2.5), (2.7) определяем значения параметров модели (a_0 и a_1)

Для этого в ячейке В16 записываем формулу расчета A_1 , с указанием ячеек, где находятся используемые в формуле величины (рис. 2.4). После ввода формулы нажимаем клавишу «Enter», и в ячейке появляется число.

Затем в ячейке B17 аналогично рассчитываем A_0 . Формула, по которой проводим расчет, прописывается и в ячейке, и в строке расчетов, расположенной ниже Панели Инструментов.

СРЗНАЧ		X ✓ f_x		=(A13*G14-D14*E14)/(A13*F14-D14*D14)				
	A	B	C	D	E	F	G	H
1	342 класс Голубенко А.В.							
2	Пример 2							
3		Исходные данные			Степенная структура			
4	n	x	y	X=lgx	Y=lg y	X ²	XY	
5	1	2	2,5	0,30103	0,39794	0,090619	0,119792	
6	2	4	2,7	0,60206	0,431364	0,362476	0,259707	
7	3	6	2,9	0,778151	0,462398	0,605519	0,359816	
8	4	8	3,1	0,90309	0,491362	0,815572	0,443744	
9	5	10	3,6	1	0,556303	1	0,556303	
10	6	12	6,7	1,079181	0,826075	1,164632	0,891484	
11	7	14	8,9	1,146128	0,94939	1,313609	1,088123	
12	8	16	12,5	1,20412	1,09691	1,449905	1,320811	
13	9	18	16,7	1,255273	1,222716	1,575709	1,534842	
14	Сумма			8,269033	6,434457	8,378042	6,574621	
15								
16	A ₁	=(A13*G14-D14*E14)/(A13*F14-D14*D14)						
17	A ₀	=(E14-B16*D14)/A13						

Рис. 2.4. Расчет параметров A_0 и A_1

5. Для расчета параметров модели a_0 и a_1 следует, при необходимости, сделать обратные преобразования с A_0 и A_1 . В нашем случае (см. п. 2) $A_0 = \lg a_0$. Следовательно, следует пересчитать только

$$A_0 = \lg a_0, \text{ т.е. } a_0 = 10^{A_0}. \quad (2.8)$$

По расчетам (см. рис. 2.4) мы получили $A_0 = -0,065$ и $A_1 = 0,85$. Тогда $a_0 = 10^{A_0} = 10^{-0,065} = 0,86$, $A_1 = a_1 = 0,85$.

Таким образом, в результате расчетов получили уравнение

$$y_i = 0,86 + x_i^{0,85}. \quad (2.9)$$

Ответ. Параметры модели $a_0 = 0,86$, $a_1 = 0,85$. Уравнение $y_i = 0,86 + x_i^{0,85}$.

Для того чтобы количественно определить, какая из структур адекватна исследуемым данным химического эксперимента, следует воспользоваться рассогласованием S (7). В нашем случае для $S = \min$ используем абсолютное отклонение:

$$\Delta = |\hat{y}_i - \bar{y}_i|, \quad (2.10)$$

где подсчет признаков структуры $\bar{y}_s$ и $\bar{x}_s$ проводим по формулам, приведенным в табл. 2.1, а аппроксимацию по данным эксперимента осуществляем по формуле

$$\hat{y}_i = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (\bar{x}_s - x_i), \quad (2.11)$$

где x_i и x_{i+1} - соседние значения выборки X , между которыми содержится численное значение признака $\bar{x}_s$, т.е.

$$x_i \leq \bar{x}_s \leq x_{i+1}. \quad (2.12)$$

Т а б л и ц а 2.1

Признаки структуры математической модели

Функция	Структура ММ	Признак $\bar{x}_s$	Признак $\bar{y}_s$
Линейная	$y_i = a_0 + a_1 \cdot x_i$	$\frac{x_1 + x_n}{2}$	$\frac{y_1 + y_n}{2}$
Гиперболическая	$y_i = a_0 + \frac{a_1}{x_i}$	$\frac{2 \cdot x_1 \cdot x_n}{x_1 + x_n}$	$\frac{y_1 + y_n}{2}$
Степенная	$y_i = a_0 + x_i^{a_1}$	$\sqrt{x_1 \cdot x_n}$	$\sqrt{y_1 \cdot y_n}$
Экспоненциальная	$y_i = a_0 \cdot e^{a_1 \cdot x_i}$	$\frac{x_1 + x_n}{2}$	$\sqrt{y_1 \cdot y_n}$

2.3. Алгоритм сравнения структур математических моделей для характеристики данных химического эксперимента

1. Записать сравниваемые структуры.
2. Линеаризовать структуры.
3. Записать и вычислить признаки структур по x и y , пользуясь табл. 2.1.
4. Определить интервал, в который попадает значение x , вычисленное в п. 3, определить x_i и x_{i+1} и соответствующие им y_i и y_{i+1} .
5. Рассчитать $\hat{y}_i$ по формуле (2.11).
6. Рассчитать абсолютное отклонение по формуле (2.10).
7. Сравнить значения абсолютных отклонений для обеих структур.
8. Сделать вывод о том, какая из структур адекватна, описывает исходные данные.

2.4. Пример 3. Выбор структуры математической модели по абсолютному отклонению

Задание. Изменение концентрации компонента С по времени для реакции $A + B \xrightarrow{k} C + 2D$ составило:

x, с	2	4	6	8	10	12	14	16	18
y, г/моль	2,5	2,7	2,9	3,1	3,6	6,7	8,9	12,5	16,7

Какая из структур математической модели: экспоненциальная или степенная адекватна предложенной зависимости?

Решение

1. <i>Сравниваемые структуры:</i>						
Степенная $y = a_0 \cdot x^{a_1}$				Экспоненциальная $y = a_0 \cdot e^{a_1 x}$		
2. <i>Линеаризация</i> согласно табл. 1.2, дает:						
$Y = A_0 + a_1 \cdot X$, где $Y = \lg y$, $A_0 = \lg a_0$, $X = \lg x$, $A_1 = a_1$. Рассчитываем $Y = \lg y$ и $X = \lg x$ (см. п. 2 Пример 1).				$Y = A_0 + a_1 \cdot x$, где $Y = \ln y$, $A_0 = \ln a_0$, $A_1 = a_1$, $X = x$. Рассчитываем $Y = \ln y$, (см. п. 2 Пример 1).		
	Исходные данные		Степенная структура		Экспоненциальная стр-ра	
n	x	y	X=lgx	Y=lg y	x	Y=ln y
1	2	2,5	0,30103	0,39794	2	0,916291
2	4	2,7	0,60206	0,431364	4	0,993252
3	6	2,9	0,778151	0,462398	6	1,064711
4	8	3,1	0,90309	0,491362	8	1,131402
5	10	3,6	1	0,556303	10	1,280934
6	12	6,7	1,079181	0,826075	12	1,902108
7	14	8,9	1,146128	0,94939	14	2,186051
8	16	12,5	1,20412	1,09691	14	2,525729
9	18	16,7	1,255273	1,222716	18	2,815409

Рис. 2.5. Результаты выполнения расчетов по линеаризации степенной и экспоненциальной структур

3. Определяем <i>признаки структур</i> по табл. 2.1.						
$\bar{x}_s = \sqrt{x_1 \cdot x_n} = \sqrt{0,30 \cdot 1,26} = 0,61$; $\bar{y}_s = \sqrt{y_1 \cdot y_n} = \sqrt{0,40 \cdot 1,22} = 0,70$.				$\bar{x}_s = \frac{x_1 + x_n}{2} = \frac{2 + 18}{2} = 10$; $\bar{y}_s = \sqrt{y_1 \cdot y_n} = \sqrt{0,92 \cdot 2,82} = 1,61$.		
4. Определяем <i>интервал</i> , в который попадает вычисленное значение по x , значения x_i и x_{i+1} и соответствующие им y_i и y_{i+1} .						

Значение $\bar{x}_s$ попадает в интервал значений шкалы $X = \lg x$ между $0,60 \leq 0,61 \leq 0,78$. Значит $x_i = 0,60$, а $x_{i+1} = 0,78$. Им соответствуют $y_i = 0,43$ и $y_{i+1} = 0,67$.	Значение $\bar{x}_s$ попадает в интервал значений шкалы x между $10 \leq 10 \leq 12$. Значит $x_i = 10$, а $x_{i+1} = 12$. Им соответствуют $y_i = 1,28$ и $y_{i+1} = 1,90$.
5. Определяем значение $\hat{y}_i$ по формуле $\hat{y}_i = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot \bar{x}_s - x_i$.	
$\hat{y}_i = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot \bar{x}_s - x_i =$ $= 0,43 + \frac{0,67 - 0,43}{0,78 - 0,60} \cdot (0,61 - 0,60) =$ $= 0,44$	$\hat{y}_i = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot \bar{x}_s - x_i =$ $= 1,28 + \frac{1,90 - 1,28}{12 - 10} \cdot (10 - 10) =$ $= 1,28$
6. Рассчитать абсолютное отклонение по формуле $\Delta = \hat{y}_i - \bar{y}_i $.	
$\Delta = [0,44 - 0,70] = 0,26$	$\Delta = [1,61 - 1,28] = 0,33$
7. Сравниваем значения абсолютных отклонений для обеих структур. $0,26 < 0,33$.	

Конечный вид расчетов в Excel представлен на рис. 2.5.

	A	B	C	D	E	F	G
1	342 класс Голубенко А.В.						
2	Пример 3						
3		Исходные данные		Степенная структура		Экспоненциальная структура	
4	n	x	y	X=lgx	Y=lg y	x	Y=ln y
5	1	2	2,5	0,30103	0,39794	2	0,916290732
6	2	4	2,7	0,60206	0,4313638	4	0,993251773
7	3	6	2,9	0,778151	0,462398	6	1,064710737
8	4	8	3,1	0,90309	0,4913617	8	1,131402111
9	5	10	3,6	1	0,5563025	10	1,280933845
10	6	12	6,7	1,079181	0,8260748	12	1,902107526
11	7	14	8,9	1,146128	0,94939	14	2,186051277
12	8	16	12,5	1,20412	1,09691	*	2,525728644
13	9	18	16,7	1,255273	1,2227165	18	2,815408719
14				$\bar{x}_s$	$\hat{y}_s$	$\bar{x}_s$	$\hat{y}_s$
15				0,614715	0,6975441	10	1,606154699
16			$\bar{y}_s$	0,433594		1,28093385	
17			Δ	0,26395		0,32522085	
18	Ответ: т.к. $0,26 < 0,33$, то степенная структура математической модели лучше описывает изменение концентрации C по времени по сравнению с экспоненциальной.						

Рис. 2.5. Конечный вид расчетов в Excel оценки адекватности по МНК

Ответ: т.к. $0,26 < 0,33$, то степенная структура математической модели лучше описывает изменение концентрации C по времени по сравнению с экспоненциальной.

Контрольные вопросы

1. Суть метода наименьших квадратов.
2. Что представляет собой «минимизация рассогласования»?
3. Что необходимо для определения экстремума функции нескольких переменных?
4. На основании чего вычисляются параметры модели?
5. Алгоритм определения параметров математической модели химического процесса.
6. Что используется в качестве критерия для определения лучшей структуры из нескольких?
7. По какой формуле проводится аппроксимация в исследуемом интервале?
8. Что представляют собой признаки структуры математической модели?
9. Алгоритм сравнения структур математических моделей для характеристики данных химического эксперимента.
10. Что представляет собой линеаризация?

Индивидуальные задания к занятию № 2

«Использование метода наименьших квадратов в задачах химической технологии»

1. В ходе проведения химического анализа получены данные по изменению концентрации с течением времени на выходе. Линейная или степенная структура адекватна этой зависимости? Ответ обосновать расчетами.

t , мин																				
C , %	2	2,5	3	3,5	4	4,5	5	5,5	6	6,5	7	7,5	8	8,5	9	9,5	10	10,5	11	11,5
B1	15,22	16,32	17,61	19,95	21,19	23,96	25,25	26,06	27,86	29,25	31,3	33,22	34,74	36,8	38,37	39,89	41,82	43,56	45,12	46,78
B2	15,59	17,08	18,84	22,03	23,73	27,51	29,26	30,37	32,81	34,71	37,51	40,13	42,2	45,02	47,16	49,23	51,85	54,23	56,36	58,62
B3	16,09	18,12	20,52	24,87	27,18	32,34	34,73	36,24	39,58	42,16	45,98	49,55	52,38	56,22	59,13	61,96	65,54	68,78	71,68	74,76
B4	14,17	16,51	19,28	24,3	26,97	32,92	35,68	37,42	41,27	44,25	48,66	52,78	56,04	60,47	63,84	67,09	71,23	74,97	78,32	81,87
B5	13,43	14,66	17,85	23,64	26,73	33,59	36,77	38,79	43,22	46,67	51,75	56,51	60,27	65,38	69,26	73,02	77,79	82,11	85,97	86,07
B6	13,65	15,07	18,75	25,44	29	36,91	40,58	42,91	48,03	52	57,87	63,36	67,7	73,6	78,07	82,41	82,84	82,92	83,94	84,62
B7	17,6	19,29	21,27	24,87	26,78	31,05	33,03	34,28	37,04	39,18	42,33	45,29	47,63	50,81	53,22	55,55	58,52	61,2	63,6	66,15
B8	18,17	20,46	23,16	28,07	30,69	36,5	39,2	40,91	44,67	47,58	51,89	55,92	59,11	63,44	66,73	69,92	73,96	77,61	80,89	84,36
B9	13,35	15,04	17,02	20,62	22,53	26,8	28,78	30,03	32,79	34,93	38,08	41,04	43,38	46,56	48,97	51,3	54,27	56,95	59,35	61,9
B10	13,92	16,21	18,91	23,82	26,44	32,25	34,95	36,66	40,42	43,33	47,64	51,67	54,86	59,19	62,48	65,67	69,71	73,36	76,64	80,11
B11	14,68	17,81	21,5	28,19	31,75	39,68	43,36	45,69	50,82	54,8	60,67	66,17	70,52	76,42	80,91	73,92	82,84	82,92	83,94	84,62
B12	16,24	17,34	18,63	20,97	22,21	24,98	26,27	27,08	28,88	30,27	32,32	34,24	35,76	37,82	39,39	40,91	42,84	44,58	46,14	47,8
B13	26,07	26,41	27,7	30,41	31,29	34,81	35,83	36,16	37,95	38,64	41,4	43,32	44,84	46,9	48,47	49,99	51,91	53,66	55,22	56,88
B14	26,43	27,18	28,93	32,13	33,82	38,35	39,87	40,47	42,91	44,1	46,9	50,23	52,3	55,12	57,25	58,62	61,95	64,33	66,46	68,72
B15	26,88	28,34	30,3	35,3	37,15	43,39	45,37	45,99	49,39	51,7	55,82	59,65	62,28	66,51	69,3	71,87	75,76	79,03	81,82	84,86
B16	22,6	24,71	27,61	32,57	35,31	41,24	43,97	45,69	49,68	52,48	57,13	61,17	64,49	68,8	72,09	75,77	79,43	83,27	86,46	89,97
B17	17,86	19,04	20,44	22,94	24,26	27,18	28,53	29,38	31,25	32,69	34,82	36,8	38,37	40,49	42,1	43,67	45,63	47,42	49,01	50,71
B18	17,98	19,54	21,37	24,68	26,43	30,33	32,13	33,27	35,77	37,71	40,57	43,24	45,36	48,22	50,39	52,5	55,17	57,58	59,74	62,03
B19	18,49	20,61	23,1	27,59	29,98	35,27	37,71	39,26	42,66	45,3	49,18	52,82	55,69	59,58	62,54	65,4	69,02	72,31	75,24	78,36
B20	16,6	19,05	21,94	27,14	29,89	35,99	38,81	40,6	44,52	47,56	52,04	56,23	59,54	64,03	67,44	70,74	74,92	78,7	82,08	85,67

Продолжение задания к занятию № 2.1

B21	15,74	17,12	20,46	26,46	29,64	36,68	39,93	41,99	46,52	50,02	55,18	60,02	63,83	69	72,93	79,77	82,84	82,92	83,94	84,62
B22	17,13	17,92	19,77	23,09	24,84	29,46	31,03	31,64	34,13	35,35	38,19	41,55	43,65	46,5	48,66	50,04	53,4	55,8	57,94	60,2
B23	17,59	19,1	21,16	26,3	28,2	34,54	36,56	37,2	40,65	42,99	47,16	51,01	53,67	57,94	60,75	63,34	67,23	70,51	73,3	76,34
B24	13,43	15,59	18,53	23,55	26,33	32,32	35,08	36,81	40,83	43,66	48,34	52,41	55,75	60,08	63,39	67,09	70,76	74,63	77,83	81,36
B25	14,66	15,89	17,35	19,93	21,29	24,28	25,66	26,52	28,43	29,89	32,06	34,07	35,66	37,81	39,44	41,02	43,01	44,82	46,43	48,14
B26	14,63	16,24	18,14	21,53	23,33	27,3	29,13	30,28	32,82	34,79	37,68	40,39	42,52	45,42	47,61	49,74	52,42	54,86	57,03	59,34
B27	15,15	17,35	19,91	24,51	26,94	32,31	34,79	36,36	39,8	42,46	46,39	50,06	52,95	56,87	59,85	62,73	66,38	69,68	72,64	75,77
B28	13,29	15,84	18,81	24,13	26,93	33,12	35,98	37,79	41,75	44,82	49,34	53,57	56,9	61,42	64,85	68,12	72,34	76,12	79,51	83,11
B29	12,48	13,89	17,26	23,32	26,53	33,62	36,9	38,97	43,52	47,04	52,23	57,09	60,92	66,12	70,06	76,92	80	80,1	81,13	81,83
B30	14,09	14,88	16,76	20,11	21,88	26,54	28,12	28,74	31,24	32,47	35,34	38,72	40,83	43,7	45,87	47,27	50,64	53,05	55,21	57,48
B31	14,56	16,07	18,16	23,35	25,26	31,66	33,69	34,35	37,81	40,17	44,36	48,24	50,92	55,21	58,03	60,63	64,54	67,83	70,63	73,69
B32	15,84	18,02	20,99	26,08	28,87	34,93	37,7	39,44	43,5	46,33	51,05	55,14	58,5	62,86	66,19	69,9	73,59	77,47	80,69	84,23
B33	16,99	18,27	19,77	22,42	23,82	26,87	28,27	29,15	31,09	32,58	34,78	36,82	38,43	40,6	42,25	43,85	45,86	47,68	49,31	51,03
B34	16,86	18,5	20,43	23,88	25,69	29,71	31,56	32,73	35,3	37,28	40,2	42,93	45,08	48	50,21	52,35	55,05	57,5	59,69	62,01
B35	17,38	19,62	22,22	26,88	29,34	34,77	37,28	38,86	42,33	45,02	48,97	52,66	55,58	59,53	62,52	65,42	69,09	72,41	75,37	78,52
B36	15,53	18,14	21,15	26,55	29,39	35,65	38,53	40,36	44,36	47,45	52	56,26	59,61	64,16	67,61	70,89	75,13	78,93	82,34	85,95
B37	14,68	16,15	19,59	25,74	28,98	36,15	39,46	41,55	46,14	49,69	54,91	59,8	63,65	68,88	72,85	79,72	82,82	82,94	83,99	84,7
B38	16,26	17,09	19,05	22,52	24,33	29,08	30,69	31,33	33,88	35,14	38,05	41,46	43,6	46,49	48,69	50,12	53,5	55,92	58,08	60,35
B39	16,76	18,3	20,44	25,69	27,64	34,11	36,16	36,82	40,32	42,69	46,92	50,83	53,53	57,84	60,68	63,29	67,23	70,54	73,36	76,43
B40	18,06	20,28	23,3	28,48	31,3	37,45	40,24	41,99	46,08	48,94	53,69	57,82	61,19	65,58	68,93	72,66	76,38	80,27	83,5	87,07
B41	19,08	20,43	22,01	24,78	26,22	29,36	30,79	31,69	33,68	35,19	37,43	39,5	41,14	43,34	45,01	46,63	48,66	50,51	52,15	53,89
B42	18,99	20,68	22,64	26,15	28	32,08	33,95	35,14	37,73	39,74	42,69	45,44	47,61	50,55	52,78	54,93	57,66	60,12	62,33	64,66
B43	13,57	15,85	18,51	23,25	25,74	31,24	33,77	35,37	38,88	41,59	45,57	49,29	52,23	56,2	59,22	62,13	65,82	69,16	72,14	75,3
B44	11,73	14,4	17,48	22,97	25,85	32,19	35,1	36,94	40,98	44,1	48,69	52,97	56,35	60,92	64,39	67,69	71,96	75,78	79,2	82,83
B45	10,81	12,37	15,89	22,15	25,44	32,7	36,04	38,15	42,78	46,36	51,62	56,54	60,42	65,68	69,66	76,56	79,68	79,82	80,89	81,62
B46	12,36	13,25	15,31	18,92	20,78	25,64	27,29	27,95	30,54	31,83	34,78	38,23	40,39	43,32	45,53	47	50,4	52,82	54,98	57,26
B47	12,93	14,5	16,69	22,02	24,01	30,57	32,64	33,31	36,85	39,23	43,49	47,45	50,16	54,5	57,36	59,99	63,96	67,28	70,11	73,2
B48	14,24	16,51	19,59	24,88	27,74	33,98	36,8	38,55	42,68	45,57	50,36	54,52	57,92	62,34	65,7	69,45	73,19	77,11	80,35	83,93
B49	15,3	16,71	18,37	21,22	22,71	25,93	27,39	28,31	30,34	31,88	34,15	36,26	37,92	40,15	41,84	43,48	45,53	47,39	49,05	50,81
B50	15,24	16,96	18,97	22,54	24,41	28,54	30,43	31,63	34,25	36,28	39,26	42,03	44,22	47,18	49,43	51,6	54,34	56,82	59,04	61,38

Продолжение задания к занятию № 2.1

B51	9,819	12,15	14,85	19,66	22,18	27,74	30,3	31,91	35,45	38,18	42,2	45,95	48,9	52,9	55,93	58,87	62,57	65,93	68,93	72,1
B52	8	10,72	13,86	19,43	22,35	28,75	31,7	33,56	37,63	40,77	45,39	49,71	53,11	57,71	61,2	64,52	68,8	72,64	76,08	79,72
B53	7,025	8,659	12,24	18,61	21,94	29,28	32,65	34,78	39,45	43,05	48,35	53,31	57,21	62,49	66,5	73,41	76,56	76,72	77,8	78,55
B54	8,544	9,481	11,63	15,36	17,28	22,22	23,91	24,59	27,22	28,54	31,53	35,02	37,2	40,16	42,4	43,9	47,32	49,73	51,9	54,18
B55	9,163	10,75	12,99	18,41	20,43	27,06	29,16	29,84	33,4	35,8	40,1	44,09	46,82	51,19	54,07	56,7	60,7	64,04	66,89	69,99
B56	10,49	12,8	15,93	21,32	24,21	30,54	33,38	35,14	39,31	42,22	47,05	51,24	54,66	59,11	62,5	66,26	70,02	73,96	77,22	80,82
B57	11,59	13,05	14,77	17,71	19,23	22,53	24,02	24,96	27,02	28,58	30,9	33,03	34,71	36,97	38,68	40,34	42,41	44,3	45,97	47,74
B58	11,55	13,3	15,34	18,96	20,86	25,04	26,95	28,16	30,81	32,85	35,86	38,66	40,86	43,84	46,1	48,28	51,04	53,54	55,77	58,13
B59	10,55	12,91	15,65	20,53	23,08	28,7	31,28	32,91	36,47	39,23	43,27	47,05	50,02	54,04	57,09	60,04	63,77	67,14	70,15	73,34
B60	8,565	11,36	14,57	20,25	23,21	29,7	32,68	34,55	38,66	41,83	46,49	50,84	54,26	58,89	62,4	65,74	70,05	73,91	77,36	81,02
B61	7,514	9,254	12,93	19,42	22,81	30,24	33,64	35,79	40,5	44,14	49,48	54,46	58,39	63,71	67,73	74,67	77,84	78,02	79,12	79,88
B62	8,989	9,998	12,27	16,15	18,13	23,19	24,91	25,61	28,3	29,65	32,68	36,2	38,41	41,4	43,66	45,21	48,64	51,05	53,23	55,51
B63	9,68	11,31	13,62	19,13	21,2	27,92	30,05	30,74	34,34	36,76	41,08	45,11	47,87	52,27	55,17	57,82	61,84	65,2	68,06	71,18
B64	11,03	13,4	16,59	22,11	25,04	31,47	34,35	36,11	40,32	43,26	48,13	52,35	55,8	60,28	63,69	67,47	71,26	75,21	78,49	82,1
B65	12,18	13,71	15,51	18,55	20,13	23,51	25,03	25,99	28,09	29,68	32,04	34,2	35,91	38,19	39,92	41,61	43,7	45,6	47,29	49,08
B66	12,18	13,97	16,05	19,74	21,67	25,9	27,84	29,06	31,74	33,81	36,84	39,66	41,88	44,89	47,17	49,36	52,14	54,65	56,9	59,27
B67	11,17	13,59	16,38	21,33	23,92	29,6	32,21	33,86	37,46	40,23	44,31	48,11	51,11	55,16	58,22	61,19	64,94	68,32	71,35	74,56
B68	8,954	11,87	15,18	20,99	24	30,59	33,61	35,51	39,66	42,86	47,56	51,94	55,39	60,05	63,58	66,94	71,27	75,15	78,62	82,3
B69	7,773	9,693	13,51	20,16	23,61	31,14	34,59	36,77	41,52	45,19	50,58	55,6	59,55	64,9	68,95	75,9	79,1	79,3	80,42	81,2
B70	9,152	10,31	12,78	16,87	18,92	24,1	25,87	26,6	29,34	30,72	33,8	37,36	39,6	42,63	44,91	46,49	49,94	52,35	54,54	56,82
B71	9,982	11,67	14,1	19,76	21,88	28,72	30,88	31,58	35,22	37,66	42,03	46,11	48,89	53,32	56,24	58,9	62,95	66,33	69,21	72,35
B72	11,38	13,84	17,13	22,83	25,8	32,36	35,26	37,04	41,29	44,26	49,18	53,44	56,91	61,42	64,85	68,65	72,47	76,45	79,74	83,37
B73	12,6	14,25	16,15	19,33	20,96	24,44	26,01	26,98	29,13	30,75	33,15	35,35	37,08	39,4	41,15	42,86	44,97	46,89	48,6	50,4
B74	12,66	14,52	16,66	20,43	22,4	26,7	28,67	29,91	32,62	34,71	37,78	40,63	42,87	45,9	48,2	50,41	53,21	55,74	58	60,39
B75	11,65	14,14	17	22,06	24,69	30,45	33,09	34,76	38,39	41,2	45,31	49,14	52,16	56,24	59,33	62,31	66,08	69,49	72,53	75,75

2. В ходе проведения химического анализа получены данные по изменению концентрации с течением времени на выходе. Линейная или экспоненциальная структура адекватна этой зависимости? Ответ обосновать расчетами.

t , мин																				
C, %	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
B1	9,601	10,55	11,7	13,83	14,99	17,63	18,88	19,68	21,47	22,87	24,96	26,96	28,55	30,74	32,42	34,06	36,16	38,08	39,81	41,66
B2	9,917	11,23	12,81	15,78	17,4	21,12	22,88	24,01	26,53	28,52	31,49	34,32	36,58	39,7	42,09	44,43	47,42	50,16	52,63	55,27
B3	10,35	12,16	14,36	18,51	20,8	26,04	28,54	30,14	33,72	36,54	40,77	44,8	48,03	52,47	55,88	59,22	63,49	67,4	70,93	74,71
B4	8,699	10,73	13,21	17,96	20,58	26,64	29,54	31,4	35,56	38,85	43,78	48,49	52,26	57,46	61,46	65,37	70,38	74,96	79,1	83,54
B5	8,079	9,117	11,92	17,32	20,34	27,34	30,7	32,86	37,71	41,54	47,3	52,81	57,22	63,31	67,99	72,57	78,45	83,83	88,69	88,81
B6	8,265	9,469	12,73	19,07	22,61	30,85	34,81	37,36	43,07	47,59	54,39	60,89	66,1	73,28	78,8	84,21	84,74	84,85	86,13	86,99
B7	11,69	13,22	15,06	18,51	20,4	24,71	26,75	28,06	30,99	33,28	36,73	40	42,62	46,22	48,99	51,69	55,15	58,32	61,17	64,23
B8	12,2	14,3	16,86	21,68	24,33	30,41	33,31	35,16	39,3	42,57	47,46	52,12	55,85	60,98	64,93	68,78	73,72	78,23	82,31	86,67
B9	8,016	9,439	11,17	14,45	16,26	20,41	22,39	23,66	26,5	28,74	32,11	35,31	37,88	41,41	44,13	46,79	50,2	53,32	56,14	59,15
B10	8,487	10,46	12,88	17,49	20,05	25,95	28,77	30,58	34,63	37,83	42,63	47,22	50,89	55,95	59,84	63,65	68,53	72,99	77,03	81,34
B11	9,136	11,88	15,27	21,8	25,43	33,83	37,86	40,45	46,24	50,81	57,69	64,25	69,51	76,76	82,33	73,68	84,74	84,85	86,13	86,99
B12	10,49	11,46	12,62	14,78	15,95	18,62	19,89	20,69	22,49	23,9	26,02	28,02	29,63	31,83	33,52	35,17	37,28	39,21	40,95	42,81
B13	19,69	20,03	21,31	24,05	24,95	28,62	29,7	30,05	31,97	32,7	35,7	37,81	39,5	41,8	43,57	45,29	47,49	49,5	51,31	53,23
B14	20,05	20,79	22,55	25,82	27,59	32,39	34,04	34,69	37,36	38,68	41,8	45,57	47,94	51,19	53,68	55,28	59,21	62,04	64,6	67,33
B15	20,5	21,95	23,94	29,14	31,1	37,89	40,09	40,78	44,61	47,24	52,01	56,48	59,6	64,66	68,03	71,16	75,94	79,99	83,47	87,29
B16	16,32	18,36	21,22	26,28	29,15	35,53	38,53	40,44	44,94	48,14	53,53	58,28	62,24	67,42	71,43	75,95	80,48	85,29	89,31	93,77
B17	11,92	13	14,29	16,65	17,92	20,79	22,14	23	24,91	26,4	28,63	30,74	32,42	34,71	36,47	38,2	40,38	42,38	44,19	46,11
B18	12,03	13,45	15,16	18,33	20,05	23,97	25,82	27	29,64	31,71	34,8	37,73	40,07	43,29	45,76	48,16	51,24	54,06	56,59	59,3
B19	12,49	14,44	16,8	21,2	23,61	29,1	31,71	33,37	37,09	40,01	44,38	48,53	51,85	56,41	59,91	63,33	67,7	71,7	75,3	79,15
B20	10,8	13,01	15,69	20,75	23,52	29,87	32,89	34,83	39,14	42,54	47,64	52,48	56,36	61,69	65,78	69,78	74,9	79,58	83,8	88,32
B21	10,05	11,26	14,3	20,08	23,27	30,6	34,11	36,35	41,37	45,33	51,26	56,92	61,45	67,67	72,46	80,92	84,74	84,85	86,13	86,99
B22	11,27	11,98	13,67	16,79	18,49	23,09	24,68	25,32	27,91	29,19	32,22	35,87	38,18	41,35	43,78	45,36	49,2	51,98	54,48	57,14
B23	11,68	13,05	14,96	19,92	21,81	28,34	30,48	31,16	34,88	37,45	42,09	46,46	49,51	54,48	57,78	60,86	65,53	69,5	72,91	76,66
B24	8,079	9,916	12,53	17,24	19,94	26,02	28,9	30,74	35,09	38,18	43,42	48,06	51,92	56,99	60,93	65,36	69,81	74,54	78,5	82,9

Продолжение задания к занятию № 2.2

B25	9,114	10,18	11,47	13,81	15,08	17,94	19,28	20,14	22,04	23,53	25,75	27,85	29,52	31,82	33,57	35,29	37,47	39,47	41,27	43,19
B26	9,089	10,49	12,17	15,31	17,02	20,91	22,75	23,92	26,54	28,6	31,68	34,6	36,94	40,14	42,6	45,01	48,08	50,88	53,42	56,12
B27	9,54	11,47	13,79	18,16	20,55	26,01	28,6	30,26	33,96	36,87	41,23	45,37	48,68	53,23	56,73	60,14	64,51	68,5	72,1	75,95
B28	7,964	10,14	12,78	17,79	20,54	26,85	29,86	31,79	36,09	39,48	44,56	49,39	53,26	58,58	62,67	66,6	71,74	76,39	80,59	85,08
B29	7,3	8,468	11,39	17,02	20,14	27,37	30,83	33,06	38,03	41,96	47,86	53,48	57,99	64,19	68,96	77,37	81,2	81,32	82,61	83,48
B30	8,633	9,309	10,94	13,98	15,63	20,16	21,73	22,35	24,91	26,18	29,18	32,79	35,08	38,23	40,65	42,22	46,04	48,8	51,29	53,94
B31	9,029	10,34	12,2	17,04	18,9	25,34	27,45	28,13	31,81	34,36	38,96	43,31	46,35	51,29	54,58	57,64	62,3	66,25	69,65	73,4
B32	10,13	12,07	14,8	19,7	22,49	28,75	31,7	33,57	38,01	41,17	46,5	51,21	55,14	60,29	64,27	68,76	73,27	78,06	82,05	86,5
B33	11,15	12,29	13,66	16,15	17,49	20,48	21,88	22,77	24,75	26,29	28,59	30,75	32,48	34,83	36,64	38,4	40,64	42,68	44,52	46,48
B34	11,03	12,51	14,27	17,55	19,32	23,34	25,24	26,45	29,14	31,25	34,4	37,39	39,77	43,04	45,54	47,99	51,11	53,96	56,54	59,28
B35	11,5	13,53	15,96	20,5	22,97	28,58	31,24	32,94	36,73	39,7	44,14	48,35	51,72	56,34	59,89	63,35	67,77	71,82	75,46	79,36
B36	9,87	12,17	14,95	20,16	23,01	29,51	32,59	34,56	38,96	42,42	47,59	52,51	56,44	61,84	65,98	69,96	75,17	79,87	84,12	88,66
B37	9,133	10,41	13,49	19,36	22,6	30,04	33,59	35,87	40,95	44,95	50,95	56,67	61,24	67,53	72,36	80,85	84,73	84,88	86,2	87,09
B38	10,5	11,24	13	16,24	17,99	22,7	24,34	25	27,65	28,97	32,07	35,77	38,12	41,34	43,81	45,44	49,32	52,12	54,64	57,32
B39	10,95	12,33	14,28	19,32	21,25	27,89	30,06	30,76	34,53	37,12	41,82	46,26	49,35	54,36	57,71	60,81	65,53	69,54	72,98	76,77
B40	12,11	14,14	16,99	22,09	24,97	31,43	34,44	36,35	40,88	44,1	49,54	54,33	58,31	63,54	67,58	72,12	76,7	81,54	85,58	90,08
B41	13,03	14,28	15,77	18,42	19,84	22,98	24,44	25,37	27,43	29,02	31,4	33,64	35,42	37,84	39,69	41,5	43,79	45,88	47,76	49,76
B42	12,95	14,51	16,36	19,77	21,61	25,77	27,72	28,97	31,73	33,89	37,12	40,17	42,6	45,93	48,49	50,97	54,15	57,05	59,66	62,44
B43	8,195	10,15	12,51	16,94	19,37	24,91	27,53	29,21	32,96	35,91	40,31	44,5	47,85	52,45	55,98	59,42	63,83	67,86	71,49	75,38
B44	6,693	8,897	11,59	16,67	19,47	25,88	28,93	30,88	35,24	38,68	43,82	48,71	52,62	57,99	62,12	66,09	71,27	75,97	80,2	84,73
B45	5,963	7,21	10,18	15,9	19,07	26,41	29,92	32,18	37,22	41,19	47,16	52,85	57,4	63,66	68,48	76,93	80,81	80,98	82,31	83,22
B46	7,199	7,93	9,675	12,88	14,61	19,26	20,9	21,56	24,19	25,51	28,59	32,26	34,6	37,81	40,27	41,92	45,77	48,53	51,03	53,68
B47	7,665	8,977	10,88	15,77	17,68	24,21	26,36	27,05	30,78	33,34	38	42,42	45,49	50,48	53,8	56,89	61,6	65,59	69,02	72,8
B48	8,761	10,72	13,49	18,52	21,35	27,75	30,73	32,61	37,11	40,31	45,71	50,49	54,45	59,67	63,69	68,21	72,78	77,61	81,64	86,12
B49	9,669	10,9	12,38	15,02	16,42	19,55	21	21,93	23,98	25,56	27,93	30,16	31,93	34,34	36,18	37,99	40,27	42,36	44,23	46,23
B50	9,619	11,12	12,93	16,26	18,07	22,15	24,08	25,31	28,04	30,18	33,37	36,4	38,81	42,12	44,66	47,13	50,29	53,17	55,77	58,54
B51	5,195	7,025	9,276	13,56	15,93	21,35	23,94	25,6	29,3	32,21	36,58	40,74	44,06	48,63	52,14	55,56	59,95	63,96	67,58	71,45
B52	3,853	5,891	8,44	13,35	16,08	22,37	25,38	27,31	31,62	35,02	40,12	44,97	48,86	54,21	58,32	62,27	67,43	72,11	76,33	80,85

Продолжение задания к занятию № 2.2

B53	3,172	4,329	7,104	12,6	15,7	22,9	26,36	28,59	33,58	37,52	43,44	49,09	53,62	59,85	64,65	73,05	76,93	77,12	78,47	79,39
B54	4,246	4,939	6,609	9,717	11,4	15,96	17,58	18,24	20,83	22,16	25,2	28,84	31,16	34,35	36,8	38,46	42,27	45	47,48	50,11
B55	4,701	5,916	7,718	12,42	14,28	20,67	22,78	23,47	27,15	29,67	34,28	38,66	41,71	46,66	49,97	53,03	57,73	61,7	65,12	68,88
B56	5,711	7,557	10,21	15,11	17,87	24,18	27,13	28,97	33,43	36,6	41,97	46,72	50,66	55,85	59,86	64,36	68,91	73,73	77,74	82,22
B57	6,574	7,765	9,208	11,79	13,17	16,25	17,69	18,6	20,63	22,2	24,55	26,76	28,52	30,92	32,75	34,55	36,81	38,89	40,76	42,75
B58	6,548	7,976	9,701	12,92	14,68	18,67	20,56	21,77	24,46	26,57	29,73	32,72	35,11	38,39	40,91	43,36	46,5	49,36	51,94	54,7
B59	5,754	7,651	9,971	14,37	16,78	22,31	24,94	26,63	30,38	33,34	37,76	41,97	45,33	49,94	53,49	56,95	61,37	65,42	69,07	72,96
B60	4,261	6,397	9,045	14,11	16,9	23,33	26,39	28,35	32,73	36,18	41,34	46,26	50,19	55,6	59,74	63,73	68,94	73,66	77,92	82,47
B61	3,51	4,769	7,667	13,34	16,52	23,87	27,4	29,66	34,72	38,72	44,71	50,43	55,01	61,3	66,14	74,59	78,51	78,73	80,1	81,05
B62	4,572	5,332	7,128	10,41	12,17	16,88	18,55	19,24	21,91	23,28	26,39	30,09	32,46	35,71	38,19	39,91	43,76	46,5	49	51,64
B63	5,09	6,351	8,237	13,08	14,99	21,53	23,68	24,39	28,13	30,68	35,36	39,8	42,89	47,9	51,24	54,33	59,08	63,08	66,53	70,33
B64	6,133	8,052	10,79	15,86	18,68	25,14	28,13	30	34,53	37,74	43,18	48	51,98	57,23	61,28	65,81	70,42	75,27	79,32	83,82
B65	7,049	8,316	9,846	12,55	14	17,19	18,67	19,61	21,7	23,31	25,72	27,98	29,78	32,23	34,09	35,93	38,23	40,35	42,24	44,26
B66	7,05	8,534	10,32	13,64	15,44	19,52	21,45	22,68	25,42	27,57	30,77	33,81	36,23	39,55	42,1	44,58	47,75	50,65	53,26	56,04
B67	6,242	8,211	10,61	15,12	17,59	23,23	25,91	27,62	31,43	34,43	38,91	43,17	46,57	51,23	54,81	58,3	62,77	66,85	70,53	74,46
B68	4,546	6,803	9,567	14,8	17,67	24,24	27,36	29,36	33,81	37,31	42,54	47,52	51,5	56,96	61,15	65,18	70,43	75,19	79,48	84,07
B69	3,692	5,1	8,145	14,02	17,29	24,81	28,4	30,7	35,84	39,89	45,96	51,75	56,37	62,73	67,61	76,12	80,08	80,33	81,72	82,7
B70	4,693	5,571	7,546	11,04	12,89	17,77	19,49	20,22	22,96	24,37	27,56	31,33	33,74	37,05	39,58	41,34	45,24	48	50,51	53,17
B71	5,32	6,644	8,644	13,65	15,64	22,33	24,53	25,25	29,06	31,65	36,4	40,91	44,04	49,1	52,49	55,6	60,4	64,45	67,93	71,75
B72	6,407	8,421	11,28	16,54	19,42	26,06	29,1	30,99	35,59	38,85	44,37	49,25	53,27	58,59	62,67	67,25	71,9	76,79	80,87	85,42
B73	7,397	8,767	10,41	13,26	14,77	18,09	19,63	20,6	22,75	24,4	26,88	29,19	31,03	33,52	35,43	37,3	39,64	41,79	43,71	45,77
B74	7,444	8,996	10,85	14,28	16,13	20,32	22,29	23,54	26,33	28,52	31,78	34,86	37,32	40,68	43,26	45,78	48,98	51,91	54,55	57,36
B75	6,625	8,677	11,16	15,8	18,34	24,1	26,82	28,57	32,44	35,48	40,02	44,33	47,77	52,49	56,11	59,64	64,14	68,26	71,97	75,93

3. В ходе проведения химического анализа получены данные по изменению концентрации с течением времени на выходе. Линейная или экспоненциальная структура адекватна этой зависимости? Ответ обосновать расчетами.

t , мин																				
C , %	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55	60	65	70	75	80	85	90	95	100
B1	20,21	21,47	22,93	25,57	26,95	30,01	31,42	32,3	34,25	35,75	37,96	40,02	41,64	43,84	45,5	47,11	49,14	50,97	52,62	54,35
B2	20,63	22,34	24,32	27,88	29,75	33,87	35,77	36,96	39,58	41,61	44,58	47,36	49,55	52,51	54,75	56,92	59,66	62,14	64,35	66,7
B3	21,2	23,51	26,2	31	33,52	39,07	41,63	43,24	46,77	49,5	53,51	57,26	60,21	64,21	67,24	70,16	73,87	77,22	80,22	83,39
B4	18,98	21,69	24,82	30,38	33,29	39,7	42,64	44,49	48,56	51,7	56,32	60,63	64,03	68,63	72,11	75,48	79,75	83,6	87,05	90,7
B5	18,12	19,55	23,21	29,66	33,03	40,41	43,8	45,94	50,62	54,24	59,55	64,51	68,42	73,71	77,72	81,6	86,51	90,94	94,91	95,01
B6	18,38	20,03	24,23	31,62	35,48	43,95	47,84	50,29	55,67	59,82	65,92	71,62	76,11	82,19	86,8	91,26	91,69	91,78	92,83	93,52
B7	22,93	24,83	27,04	31	33,09	37,69	39,81	41,15	44,08	46,35	49,68	52,79	55,25	58,57	61,08	63,52	66,6	69,38	71,87	74,5
B8	23,57	26,14	29,13	34,48	37,3	43,51	46,37	48,18	52,14	55,2	59,7	63,9	67,21	71,7	75,1	78,39	82,56	86,33	89,69	93,26
B9	18,03	19,99	22,27	26,32	28,44	33,1	35,24	36,6	39,55	41,84	45,19	48,32	50,78	54,12	56,65	59,09	62,18	64,97	67,46	70,1
B10	18,69	21,34	24,41	29,85	32,71	38,98	41,86	43,68	47,66	50,73	55,25	59,47	62,8	67,3	70,71	74	78,18	81,95	85,32	88,9
B11	19,58	23,16	27,29	34,61	38,45	46,89	50,76	53,21	58,58	62,73	68,83	74,53	79,01	85,1	89,71	82,53	91,69	91,78	92,83	93,52
B12	21,38	22,63	24,08	26,7	28,08	31,13	32,53	33,41	35,35	36,85	39,05	41,11	42,73	44,92	46,58	48,18	50,21	52,05	53,69	55,42
B13	32,31	32,69	34,08	37,01	37,95	41,71	42,8	43,15	45,05	45,78	48,69	50,72	52,32	54,48	56,13	57,71	59,72	61,54	63,17	64,89
B14	32,71	33,51	35,42	38,85	40,66	45,47	47,09	47,71	50,29	51,54	54,48	57,97	60,13	63,06	65,28	66,7	70,16	72,62	74,82	77,16
B15	33,2	34,77	36,89	42,24	44,2	50,79	52,87	53,53	57,08	59,5	63,8	67,77	70,5	74,88	77,75	80,41	84,42	87,78	90,65	93,77
B16	28,51	30,83	33,99	39,32	42,24	48,53	51,4	53,21	57,39	60,31	65,16	69,35	72,79	77,24	80,64	84,43	88,19	92,14	95,41	99,01
B17	23,22	24,55	26,12	28,89	30,34	33,52	34,98	35,89	37,9	39,45	41,72	43,83	45,5	47,74	49,44	51,08	53,15	55,02	56,69	58,46
B18	23,36	25,11	27,15	30,79	32,71	36,92	38,85	40,07	42,74	44,8	47,82	50,64	52,86	55,86	58,14	60,34	63,11	65,62	67,86	70,24
B19	23,93	26,3	29,06	33,96	36,54	42,2	44,8	46,44	50,03	52,8	56,87	60,67	63,66	67,7	70,77	73,73	77,47	80,86	83,89	87,09
B20	21,78	24,57	27,78	33,47	36,44	42,97	45,96	47,85	51,98	55,17	59,86	64,22	67,66	72,31	75,84	79,24	83,55	87,44	90,92	94,61
B21	20,8	22,38	26,13	32,74	36,18	43,7	47,15	49,32	54,08	57,74	63,13	68,15	72,1	77,45	81,51	88,55	91,69	91,78	92,83	93,52
B22	22,4	23,29	25,37	29,05	30,97	35,99	37,67	38,33	40,99	42,29	45,31	48,86	51,07	54,06	56,32	57,77	61,27	63,77	66	68,35
B23	22,92	24,62	26,92	32,56	34,62	41,43	43,57	44,26	47,9	50,37	54,75	58,79	61,56	66	68,91	71,6	75,62	79	81,88	85,02
B24	18,12	20,63	23,98	29,56	32,59	39,06	42	43,84	48,1	51,07	55,99	60,24	63,72	68,22	71,65	75,47	79,27	83,25	86,54	90,18

Продолжение задания к занятию № 2.3

B25	19,55	20,98	22,64	25,55	27,06	30,36	31,86	32,8	34,87	36,45	38,77	40,93	42,62	44,9	46,63	48,3	50,4	52,3	53,99	55,78
B26	19,52	21,38	23,53	27,33	29,31	33,64	35,62	36,87	39,59	41,69	44,77	47,63	49,88	52,93	55,23	57,45	60,26	62,79	65,05	67,45
B27	20,13	22,64	25,53	30,61	33,26	39,05	41,7	43,36	47,01	49,82	53,94	57,79	60,81	64,89	67,98	70,97	74,74	78,15	81,2	84,43
B28	17,95	20,92	24,29	30,19	33,25	39,91	42,96	44,88	49,07	52,3	57,04	61,45	64,92	69,61	73,16	76,54	80,89	84,79	88,28	91,97
B29	17	18,66	22,55	29,31	32,81	40,44	43,93	46,13	50,93	54,63	60,05	65,11	69,09	74,47	78,55	85,61	88,78	88,88	89,94	90,66
B30	18,89	19,82	21,97	25,75	27,71	32,82	34,53	35,2	37,9	39,22	42,28	45,87	48,1	51,12	53,4	54,87	58,39	60,91	63,16	65,52
B31	19,43	21,19	23,56	29,33	31,43	38,35	40,52	41,22	44,9	47,39	51,81	55,89	58,68	63,15	66,09	68,79	72,84	76,24	79,13	82,29
B32	20,92	23,4	26,73	32,32	35,35	41,84	44,79	46,63	50,91	53,89	58,82	63,09	66,58	71,1	74,54	78,37	82,19	86,18	89,48	93,13
B33	22,23	23,68	25,37	28,31	29,85	33,18	34,7	35,65	37,74	39,33	41,68	43,85	45,56	47,86	49,6	51,28	53,39	55,3	57	58,8
B34	22,08	23,95	26,1	29,91	31,9	36,25	38,24	39,5	42,23	44,34	47,44	50,31	52,58	55,63	57,94	60,18	63	65,54	67,81	70,22
B35	22,68	25,2	28,09	33,2	35,86	41,68	44,34	46,01	49,68	52,5	56,65	60,51	63,54	67,64	70,75	73,75	77,54	80,96	84,02	87,26
B36	20,57	23,53	26,91	32,83	35,9	42,61	45,67	47,6	51,81	55,06	59,82	64,25	67,73	72,44	76,01	79,4	83,77	87,68	91,18	94,89
B37	19,58	21,28	25,16	31,95	35,47	43,14	46,65	48,85	53,68	57,4	62,85	67,93	71,92	77,33	81,42	88,49	91,68	91,8	92,88	93,61
B38	21,4	22,35	24,56	28,42	30,41	35,58	37,31	37,99	40,72	42,06	45,15	48,76	51,01	54,05	56,35	57,85	61,38	63,89	66,14	68,5
B39	21,98	23,72	26,11	31,9	34,02	40,97	43,16	43,86	47,56	50,06	54,5	58,6	61,41	65,9	68,84	71,55	75,63	79,04	81,94	85,11
B40	23,45	25,94	29,28	34,92	37,96	44,52	47,48	49,32	53,62	56,62	61,58	65,87	69,37	73,92	77,38	81,22	85,05	89,06	92,38	96,03
B41	24,6	26,11	27,86	30,9	32,47	35,87	37,42	38,38	40,5	42,12	44,5	46,7	48,42	50,74	52,5	54,2	56,33	58,25	59,97	61,78
B42	24,49	26,38	28,56	32,4	34,41	38,79	40,8	42,06	44,82	46,94	50,06	52,95	55,23	58,3	60,63	62,87	65,7	68,26	70,55	72,96
B43	18,28	20,93	23,95	29,22	31,95	37,9	40,61	42,31	46,03	48,89	53,09	56,99	60,05	64,19	67,32	70,35	74,16	77,61	80,69	83,95
B44	16,1	19,25	22,79	28,92	32,07	38,91	42,03	43,98	48,25	51,54	56,35	60,83	64,34	69,09	72,69	76,1	80,5	84,44	87,96	91,68
B45	14,98	16,86	20,97	28,02	31,63	39,46	43,02	45,26	50,15	53,91	59,42	64,55	68,57	74,02	78,13	85,24	88,45	88,6	89,7	90,44
B46	16,85	17,9	20,31	24,41	26,5	31,84	33,63	34,35	37,15	38,53	41,68	45,35	47,63	50,72	53,05	54,59	58,15	60,67	62,92	65,29
B47	17,53	19,36	21,89	27,87	30,06	37,17	39,4	40,12	43,88	46,41	50,9	55,05	57,89	62,42	65,4	68,12	72,23	75,67	78,6	81,78
B48	19,07	21,68	25,16	31,01	34,12	40,83	43,83	45,69	50,05	53,08	58,1	62,44	65,97	70,56	74,04	77,91	81,77	85,81	89,14	92,82
B49	20,3	21,92	23,79	26,99	28,63	32,16	33,75	34,75	36,92	38,58	41,01	43,26	45,01	47,38	49,16	50,89	53,04	55	56,73	58,57
B50	20,23	22,21	24,47	28,44	30,5	34,99	37,03	38,32	41,12	43,28	46,43	49,37	51,67	54,78	57,13	59,39	62,25	64,83	67,14	69,57
B51	13,75	16,59	19,77	25,24	28,05	34,13	36,89	38,62	42,4	45,3	49,54	53,48	56,58	60,76	63,91	66,96	70,8	74,28	77,37	80,65
B52	11,43	14,87	18,62	24,99	28,23	35,22	38,39	40,38	44,71	48,04	52,9	57,42	60,97	65,76	69,38	72,81	77,25	81,21	84,75	88,49
B53	10,13	12,28	16,71	24,07	27,79	35,79	39,41	41,68	46,64	50,44	56	61,18	65,24	70,72	74,87	82	85,24	85,4	86,52	87,29
B54	12,14	13,33	15,97	20,36	22,56	28,09	29,95	30,69	33,56	34,99	38,21	41,93	44,26	47,39	49,75	51,33	54,92	57,44	59,71	62,09

Продолжение задания к занятию № 2.3

B55	12,93	14,91	17,6	23,84	26,1	33,39	35,66	36,39	40,21	42,77	47,32	51,53	54,4	58,97	61,97	64,71	68,86	72,32	75,27	78,47
B56	14,58	17,37	21,02	27,1	30,28	37,14	40,19	42,07	46,49	49,56	54,64	59,02	62,59	67,21	70,72	74,62	78,51	82,57	85,92	89,62
B57	15,92	17,67	19,68	23,05	24,77	28,43	30,07	31,1	33,34	35,04	37,53	39,82	41,61	44,01	45,82	47,58	49,77	51,75	53,5	55,36
B58	15,88	17,97	20,34	24,46	26,59	31,18	33,27	34,58	37,43	39,63	42,83	45,8	48,13	51,27	53,64	55,93	58,82	61,42	63,74	66,19
B59	14,65	17,5	20,7	26,21	29,04	35,16	37,94	39,68	43,48	46,4	50,67	54,63	57,74	61,94	65,12	68,18	72,04	75,53	78,64	81,93
B60	12,16	15,65	19,46	25,9	29,18	36,24	39,44	41,44	45,81	49,16	54,05	58,6	62,17	66,99	70,62	74,08	78,53	82,51	86,06	89,82
B61	10,79	13,04	17,53	24,98	28,74	36,82	40,47	42,76	47,75	51,58	57,18	62,38	66,46	71,98	76,14	83,29	86,56	86,74	87,87	88,66
B62	12,7	13,97	16,74	21,28	23,53	29,15	31,04	31,81	34,73	36,19	39,44	43,19	45,54	48,7	51,08	52,7	56,3	58,82	61,09	63,47
B63	13,58	15,58	18,34	24,65	26,96	34,32	36,61	37,35	41,21	43,78	48,37	52,61	55,5	60,09	63,11	65,87	70,04	73,52	76,48	79,7
B64	15,24	18,08	21,78	27,97	31,19	38,15	41,22	43,1	47,56	50,66	55,77	60,18	63,77	68,42	71,96	75,86	79,78	83,86	87,23	90,94
B65	16,63	18,45	20,53	24,01	25,77	29,51	31,18	32,22	34,5	36,22	38,75	41,07	42,88	45,31	47,14	48,92	51,12	53,12	54,89	56,76
B66	16,63	18,75	21,16	25,33	27,48	32,13	34,23	35,56	38,43	40,64	43,87	46,86	49,21	52,37	54,76	57,06	59,96	62,58	64,91	67,38
B67	15,41	18,3	21,53	27,11	29,96	36,14	38,94	40,7	44,53	47,47	51,76	55,75	58,88	63,1	66,29	69,37	73,25	76,75	79,87	83,18
B68	12,66	16,26	20,16	26,73	30,05	37,2	40,43	42,45	46,86	50,24	55,17	59,75	63,34	68,19	71,85	75,32	79,79	83,79	87,36	91,14
B69	11,13	13,59	18,21	25,8	29,62	37,79	41,48	43,8	48,83	52,69	58,33	63,56	67,67	73,21	77,4	84,57	87,85	88,06	89,21	90,01
B70	12,91	14,36	17,35	22,1	24,42	30,16	32,09	32,89	35,85	37,34	40,64	44,43	46,8	49,99	52,4	54,05	57,66	60,18	62,46	64,84
B71	13,95	16,02	18,91	25,36	27,71	35,18	37,51	38,26	42,15	44,74	49,37	53,65	56,56	61,19	64,23	66,99	71,19	74,69	77,67	80,91
B72	15,67	18,6	22,4	28,76	32,02	39,09	42,19	44,08	48,59	51,71	56,86	61,31	64,92	69,61	73,16	77,09	81,03	85,13	88,51	92,24
B73	17,14	19,07	21,27	24,88	26,7	30,53	32,24	33,3	35,63	37,37	39,94	42,29	44,12	46,58	48,43	50,23	52,45	54,47	56,26	58,15
B74	17,21	19,39	21,86	26,11	28,29	33	35,13	36,47	39,38	41,61	44,87	47,88	50,25	53,44	55,84	58,16	61,08	63,71	66,06	68,54
B75	16	18,95	22,25	27,91	30,81	37,05	39,88	41,66	45,52	48,48	52,81	56,83	59,98	64,23	67,44	70,53	74,43	77,95	81,09	84,41

ЛИТЕРАТУРА

1. Ахназарова С.Л. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии / С.Л. Ахназарова, В.В. Кафаров. – М.: Высшая школа, 1978. – 320 с.
2. Брановицкая С.В. Вычислительная математика в химии и химической технологии / С.В. Брановицкая, Р.Б. Медведев, Ю.Я. Фиалков. – К.: Вища школа, 1986. – 216 с.
3. Гартман Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2008. – 416 с.
4. Лапач С.Н. Статистические методы в медико-биологических исследованиях с использованием Excel / С.Н. Лапач, А.В. Чубенко, П.Н. Бабич. - К.: Морион, 2000. – 320 с.
5. Макарова Н.В., Трофимец В.Я. Статистика в Excel [Электронный ресурс]. – М.: Финансы и статистика, 2002. - Режим доступа: http://sinludmila.ru/news/statistika_v_excel_ucheb_posobie/2012-10-06-2997.
6. Федорова С.А. Практические основы организации НИР. - Ч.1. Работа с данными химического эксперимента в сред Excel: учеб. пособие - Севастополь: СевГУ, 2014. – 148 с.
7. Федорова С.А. Выбор структуры математических моделей для одномерных функций процессов химической технологии: учеб.-метод. пособие / С.А. Федорова. - Севастополь: СНИЯЭиП, 2003. – 12 с.
8. Федорова С.А. Статистические модели объектов химико-технологических систем на основе пассивного эксперимента / С.А. Федорова. - Севастополь: СНИЯЭиП, 2003. – 32 с.
9. Excel в математических и статистических расчетах. Практикум для самостоятельной работы студентов: метод. пособие. – Ч. 2 / Сост. М.А. Ильченко, Л.С. Струкова. - Мичуринск: Мичуринский гос. аграр. ун-т, 2007. – 134 с.
10. <http://lib.rushkolnik.ru/text/9438/index-1.html>
11. http://www.statsoft.ru/home/textbook/glossary/gloss_ae.html

О Г Л А В Л Е Н И Е

1. Метод выравнивания	3
1.1. Алгоритм метода выравнивания	4
1.2. Пример 1. Выбор структуры модели для описания химического процесса	5
Индивидуальные задания	10
2. Метод наименьших квадратов	18
2.1. Алгоритм определения параметров математической модели химического процесса	20
2.2. Пример 2. Определение параметров математической модели	20
2.3. Алгоритм сравнения структур математических моделей для характеристики данных химического эксперимента	23
2.4. Пример 3. Выбор структуры математической модели по абсолютному отклонению	24
Индивидуальные задания	27
Литература	36

Учебное издание

Федорова Светлана Александровна

**МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ РЕЗУЛЬТАТОВ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ:
СБОРНИК ПРАКТИЧЕСКИХ РАБОТ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Учебное пособие

Издается в авторской редакции

Изд. № 102/18. Объем 2,5 п.л.
РИИЦМ ФГАОУ ВО «Севастопольский государственный университет»