

## АППРОКСИМАЦИЯ ЗАВИСИМОСТИ ТЕМПЕРАТУРЫ И КОНЦЕНТРАЦИИ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ В ПРОЦЕССЕ РАСТВОРИМОСТИ

О. П. Чостковская

ФГБОУ ВПО «Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева (национальный исследовательский университет)»,  
chevolga@yandex.ru

Зависимость между температурой  $T$  и концентрацией химических веществ  $c$  для набора измерений  $(c_i, T_i)$ ,  $i = \overline{1, m}$  определяется кривой, заданной нелинейным алгебраическим уравнением в виде

$$\begin{aligned} & x_1 \left(1 - \frac{T}{T_k}\right) + x_2 \left(1 - \frac{T}{T_k}\right)^{0,89} + x_3 \left(1 - \frac{T}{T_k}\right)^{1,39} \pm \\ & \pm x_4 \left(1 - \frac{T}{T_k}\right)^{0,329} \pm x_5 \left(1 - \frac{T}{T_k}\right)^{0,829} \pm x_6 \left(1 - \frac{T}{T_k}\right)^{1,329} = c - c_k, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $T_k, c_k$  — критические значения температуры и концентрации веществ;  $x_i, i = \overline{1, m}$  — неизвестные параметры математической модели, позволяющие аппроксимировать зависимость  $T = T(c)$ . При этом в (1)  $T \leq T_k, 0 \leq c \leq 1$ ; знак «+» соответствует  $c > c_k$ , знак «-» —  $c < c_k$ .

Параметры  $x_i, i = \overline{1, m}$  выбираются из условия минимизации совокупности мер расхождения (невязок) между точками данных  $(c_i, T_i), i = \overline{1, m}$  и кривой (1) с помощью метода взвешенных полных наименьших квадратов (WTLS) [1]. Решение этой задачи сводится к решению приближенной системы линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} Ax & \approx b, \\ A & = [a_{ij}] \in R^{m \times n}, \quad m \geq n = 6, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \text{где } b_i & = c_i - c_k, \quad a_{i1} = \left(1 - \frac{T_i}{T_k}\right), \quad a_{i2} = \left(1 - \frac{T_i}{T_k}\right)^{0,89}, \quad a_{i3} = \left(1 - \frac{T_i}{T_k}\right)^{1,39}, \quad a_{i4} = \pm \left(1 - \frac{T_i}{T_k}\right)^{0,329}, \\ a_{i5} & = \pm \left(1 - \frac{T_i}{T_k}\right)^{0,829}, \quad a_{i6} = \pm \left(1 - \frac{T_i}{T_k}\right)^{1,329}, \quad i = \overline{1, m}. \end{aligned}$$

В качестве совокупной меры расхождения для решения системы (2) используется обобщенная сумма квадратов с весовыми коэффициентами, соответствующая WTLS-методу [2]. При этом элементы весовой матрицы  $V = [v_i], i = \overline{1, m}$  принимаются равными величинам, обратным степеням множителей при соответствующих коэффициентах  $x_i, i = \overline{1, m}$ :

$$v_1 = 1, \quad v_2 = 0,89^{-1}, \quad v_3 = 1,39^{-1}, \quad v_4 = 0,329^{-1}, \quad v_5 = 0,829^{-1}, \quad v_6 = 1,329^{-1}, \quad v_7 = 1.$$

Адекватность полученной математической модели оценивается формулой

$$\Delta = \sum_{i=1}^m \frac{T_i - \tilde{T}_i}{\tilde{T}_i} \cdot 100\%,$$

где  $T_i$  — экспериментальные значения температуры,  $\tilde{T}_i$  — значения температуры, соответствующие уравнению (1). При этом значение степени адекватности для исследуемых зависимостей не превосходит 5%.

Рассматриваемый метод определения параметров математической модели процесса растворимости химических веществ на основе WTLS-метода позволяет достаточно точно аппроксимировать экспериментальные данные.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Жданов А.И., Шевченко О.П.* Взвешенный метод полных наименьших квадратов и его применение // *Обозр. прикл. и промышл. матем.* 2001. Т. 8, №1. С. 169-170.
2. *Жданов А.И.* Об одном численно устойчивом алгоритме решения систем линейных алгебраических уравнений неполного ранга // *Вестник СамГТУ. Серия: Физ.-мат. науки.* 2008. № 1(16). С. 149-153.