

ОСОБЕННОСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ ОТХОДОВ

Бухкало С.И., Иглин С.П.

*Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт»,
г. Харьков*

В работе рассмотрены вопросы исследования химико-технологических задач, когда есть априорные сведения о поведении исследуемой величины, которые диктуют конкретный вид теоретической зависимости. Рассматривая конкретную задачу, следует отметить, что в каждой из них и аргумент x , и функция y положительные.

Пример 1. Неограниченное возрастание. При $x=0$ теоретическое значение $y=0$; при увеличении x функция y неограниченно возрастает, но нелинейно. Один из возможных вариантов теоретической зависимости – это моном с неизвестным показателем степени: $y=b_1 x^{b_2}$, (1), где b_1 и b_2 положительные.

Пример 2. Исчерпание. При $x=0$ функция $y>0$, а при возрастании x функция y убывает до нуля, оставаясь вогнутой. Теоретическую зависимость можно взять в следующем виде: $y=b_1 e^{-b_2 x}$, (2), где $b_1>0$ – начальное значение, $b_2>0$ – параметр, характеризующий скорость убывания.

Пример 3. Насыщение. При $x=0$ теоретическое значение $y=0$; при увеличении x функция y возрастает, но только до определённого предела, оставаясь выпуклой. Возможный вид такой зависимости: $y=b_1(1-e^{-b_2 x})$, (3), где $b_1>0$ – предельное значение, к которому стремится функция, $b_2>0$ – параметр скорости достижения предельного значения.

Подобными зависимостями можно описывать и концентрацию вещества в ходе химической реакции. Конечно, возможны и другие виды теоретических зависимостей. Для решения задачи нелинейной аппроксимации в MATLAB есть функция `nlinfit`. Аргументами для неё являются экспериментальные точки (x_i, y_i) , вид теоретической зависимости (1, 2, 3) или другой, начальные приближения для параметров b_j , а также параметры настройки процесса минимизации функции правдоподобия (суммы квадратов отклонений экспериментальных ординат от теоретических). Получена теоретическая кривая насыщения изменения количества гидроксильных (Hydroxyl) групп, в процессе эксплуатации полиэтиленовой пленки сельскохозяйственного назначения и ее аппроксимации по заданным экспериментальным точкам: $y(t)=0.8108262*(1-\exp(-0.0057121*t))$. Определены доверительные интервалы для 95% доверительной вероятности.

Таким образом, перспективным для данных исследований является направление аппроксимации экспериментальных зависимостей для всего спектра кислородсодержащих групп.