Электронный научно-производственный журнал
«АгроЭкоИнфо»
==========

УДК 51-7:664:001.891.5

Применение математических методов и моделей при обработке результатов реометрических измерений

Леонов А.А., Березина А.С.

Кузбасская государственная сельскохозяйственная академия

Аннотация

В статье рассмотрены математические методы, применяемые для обработки результатов реологических исследований. Приведены примеры распространенных модельных сред. Выявлены достоинства и недостатки рассмотренных методов. Рассмотрена возможность применения метода сплайн интерполяции в качестве нового аппарата моделирования, анализа и прогнозирования структурно-механических свойств исследуемых материалов

Ключевые слова*:* РЕОЛОГИЯ, МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, АПРОКСИМАЦИЯ, ИНТЕРПОЛЯЦИЯ, СПЛАЙН

В современной реологии широко используются различные математические методы и модели, как для решения практических задач, так и для теоретического моделирования процессов. Использование математического описания пищевых сред создает широкие возможности для теории и практики в пищевой промышленности. Применение математических методов и моделей позволяет лучше понимать причинно-следственные связи, осознавать закономерности развития процессов и правильно прогнозировать результаты возможных решений. Количественные и качественные математические методы являются наилучшим вспомогательным аппаратом для обработки результатов реологических исследований.

Наиболее частый подход к реологическим исследованиям заключается в выражении свойств пищевых материалов и сред в виде математических моделей, которые с определенной степенью точности описывают поведение реального тела. Особенностью

математического моделирования в реологии является необходимость соблюдения баланса между простотой и практичностью. Простые и понятные модели - не пригодны для практического применения, а пригодные для практики имеют сложную структуру. Например, для точного описания процессов течения и деформирования белковых пищевых продуктов необходимы многофазные комплексные модели теоретической реологии и сложные дифференциальные уравнения, описывающие динамику. Для практики обычно достаточно средних или суммарных характеристик. В теоретических и экспериментальных исследованиях в реологии используют методы анализа закономерностей и подобия, дифференциальные и интегральные методы анализа.

В реологии для разработки математических моделей используют в основном два метода: теоретический и экспериментально-статистический.

В основе теоретического метода лежит изучение реологических закономерностей исследуемой среды с использованием механических и математических моделей на основе уравнений, систем уравнений в алгебраической, дифференциальной и конечно-разностной форме. Главным недостатком теоретических математических моделей является то, что при их разработке принимается ряд допущений и упрощений, в результате чего практическое применение этих моделей ограничено. Главное достоинство моделей, получаемых на основе теоретического исследования, заключается в их большой прогностической мощности. Зная начальные условие и описание свойств объектов и процессов, можно с большей степенью достоверности предсказывать их поведение в самых разнообразных условиях.

Экспериментально-статистический подход основан на статистической обработке результатов экспериментов.

Для изучения структурно-механических свойств материалов и сред применяется графический метод обработки экспериментальных данных, который заключается в построении кривых на основе результатов эксперимента. Для получения экспериментальных данных проводят серии экспериментов с использованием различных приборов для измерения структурно-механических свойств. Данный метод помогает определить различные, независимые характеристики, объясняющие поведение исследуемой среды и описывающие структурно-механические свойства, а так же вывести эмпирическую формулу зависимости параметров.

Электронный научно-производственный журнал
«АгроЭкоИнфо»
==========

Основной метод построения эмпирических формул заключается в подборе математической зависимости, которая наилучшим образом описывает поведение исследуемой среды и выражает зависимость параметров. Подбор математической модели главное, что определяет результативность и точность эмпирической формулы.

Одним из методов определения математической модели является соотношение полученных результатов с известными эталонными механическими моделями сред. Используя принципы подобия и распознавания образов можно соотнести полученные модели с эталонными средами. Среди методов распознавания образов широко распространен параметрический метод [1] . Матрица измеренных параметров реологической среды сравнивается определенным статистическим методом с матрицей параметров модельной среды, на основании чего распознается образ исследуемой среды и ее относят к той или иной модельной среде.

В настоящее время существует достаточное число известных эмпирических формул, описывающих определенные эталонные среды. Например, для описания течения неньютоновских жидкостей известно более 20 математических моделей, однако практическое применение ограничено 4-5 моделями (табл. 1).

Таблица 1. Практические математические модели неньютоновских жидкостей

Среда	Модель	Примеры пищевых материалов
Среда Шведова-Бингама	$\tau = \tau_0 + k\dot{\gamma}$	Маргарин, шоколадные смеси, сырково-творожные массы
Среда Оствальда-де-Вале или степенная жидкость	$\tau = k\dot{\gamma}^n$	Томатные концентраты, сахарные растворы, фруктовые пюре, хлебопекарное тесто, конфетные массы
среда Гершеля-Балкли	$\tau = \tau_0 + k\dot{\gamma}^n$	Мучные кондитерские изделия, колбасный фарш
среда Кэссона	$\tau = (\mathrm{k}_0 + k_1\sqrt{\dot{\gamma}})^2$	Расплавленный шоколад, сливочное масло, сгущенное молоко, вафельное тесто

Для определения параметров в эмпирических моделях выбранного типа существует несколько методов: метод средних, метод проб, метод выровненных точек и метод

наименьших квадратов. В соответствии с методом наименьших квадратов, оценка параметров эмпирических моделей осуществляется на основе минимизации суммы:

$$S = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}(x_i))^2 ,$$

где y_i, x_i - значения опытных данных, $\hat{y}(x_i)$ - зависимость функции, взятая на эмпирической зависимости в точке x_i.

Метод средних сводится к линеаризации функций зависимости и решению относительно параметров системы уравнений, полученной при подстановке в линеаризованную эмпирическую функцию значений опытных данных y_i, x_i.

В описанных методах используются принципы так называемой физической аппроксимации. Недостатками физической аппроксимации являются:

- необходимость создания базы данных эталонных моделей
- сложность соблюдения баланса простота-точность (повышение точности аппроксимации, как правило, приводит к усложнению аппроксимирующего процесса).

Еще один широко используемый в реометрии метод аппроксимации — регрессия [2]. В основе метода регрессии лежит оценка параметров функции регрессии, которая описывает поведение условного среднего значения зависимой переменной Y при условии, что значения объясняющих переменных зафиксированы. Задачи регрессионного анализа состоят в том, чтобы по имеющимся статистическим данным, полученным в результате проведения серии экспериментов, подобрать формулу уравнения регрессии, получить наилучшие статистические оценки параметров уравнения, проверить статистические гипотезы о параметрах модели, проверить адекватность модели эмпирическим данным наблюдений.

В основе оценки параметров уравнения регрессии лежат метод наименьших квадратов, метод максимального правдоподобия или метод обобщенных квадратов. В результате регрессионного анализа получают теоритическую зависимость, при которой график функции регрессии проходит между экспериментальными точками, обеспечивая наименьшую среднеквадратичную погрешность их представления.

Недостатками регрессионной аппроксимации являются:

- применение метода наименьших квадратов требует достаточно громоздких и трудоемких вычислений;

- низкая точность аппроксимации экспериментальных кривых, как правило 5-10 %.

- при применении регрессионной аппроксимации с оценкой параметров по методу наименьших квадратов минимизируется сумма квадратов отклонений приближенных значений теоритических функции от точных значений в экспериментальных узловых точках, при этом отсутствует информация о поведении функции между этими точками, что на практике может привести к существенному отличию полученной модели от реального течения процесса.

Альтернативным подходом к аппроксимации экспериментальных данных является построение математической модели строгой математической аппроксимации с использованием интерполяционных методов. В качестве интерполяционных методов в реологии применяют интерполяционные многочлены Лагранжа, сплайн функции, ряды Фурье.

Интерполяция многочленами Лагранжа, Ньютона, Чебышева относится к глобальному способу интерполяции, при котором строится единый итерационный многочлен. Так при интерполяции методом Лагранжа используется многочлен

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) \cdot y_i ,$$

где

$$L_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$ - коэффициенты Лагранжа.

При приближении полиномом Лагранжа возникают проблемы, связанные с тем, что при большом числе узлов интерполяционный многочлен существенно проявляет свои колебательные свойства и его значения между узлами могут значительно отличаться от значений интерполируемой функции. При этом вид полученного графика довольно часто не соответствует поставленной задаче максимального приближения экспериментальной зависимости. Описанные проблемы стали причиной того, что полиномы Лагранжа, Ньютона, Чебышева мало используются на практике для обработки результатов экспериментов.

Недостатки описанных методов заставляют искать другие методы обработке результатов реометрии. Возникает необходимость использования нового аппарата моделирования, анализа и прогнозирования реологических процессов. В качестве примера

рассмотрим метод кусочно-полиномиальных функций или так называемых сплайн-функций или сплайнов. Для описания кривых течения любого вида обычно используются сплайны достаточно невысокой степени – параболические или кубические. На практике наиболее часто используются кубические сплайны:

$$S_3(x) = \frac{(x_{i+1}-x)^2(2(x-x_i)+\mathrm{h})}{h^3}y_i + \frac{(x-x_i)^2(2(x_{i+1}-x)+\mathrm{h})}{h^3}y_{i+1} + \frac{(x_{i+1}-x)^2(x-x_i)}{h^2}m_i +$$
$$+\frac{(x-x_i)^2(x-x_{i+1})}{h^2}m_{i+1}$$

где m_i - наклон сплайна в точке x_i [3].

Достоинством сплайн интерполяции является то, что при ее использовании на кривой приближения не появляется множественных, никак прямо не связанных со значениями координат соединяемых точек, экстремумов. Применение данного метода позволяет адекватно проводить аппроксимацию кривых реометрических экспериментов любого вида при высокой точности расчетов, а также проводить гладкое приближение семейства кривых с построением расчетных значений в любых промежуточных точках.

Подводя итоги, можно сделать вывод, что выбор способа обработки результатов реометрических исследований должен учитывать цели эксперимента и условия его проведения. Сплайн технология в настоящее время является инновационным, универсальным математическим методом обработки результатов реометрии, который позволяет описать экспериментальную кривую реометрических исследований с большой точностью на всех характерных участках. Применение сплайн технологий дает возможность более точно и наглядно моделировать, анализировать, прогнозировать и визуализировать поведение реологических характеристик исследуемых сред и материалов.

Список использованных источников

1. Арет В.А. Инженерная реология жиросодержащих пищевых продуктов / Арет В.А., Забровский Г.П., Николаев Б.Л., Николаев Л.К. Санкт-Петербургский государственный университет низкотемпературных и пищевых технологий, С.-Петербург, 2002 г.

2. Никитин В.А., Бойко С.В. Методы и средства измерений, испытаний и контроля: Учебное пособие - 2-е изд. перераб. и доп.- Оренбург ГОУ ОГУ, 2004. -462 с.

3. Ашкеназы В.О. Сплайн-поверхности: Основы теории и вычислительные алгоритмы: Учебное пособие. – Тверь: Тверской гос. ун-т, 2003. - 82 с.

==========

Цитирование:

Леонов А.А., Березина А.С. Применение математических методов и моделей при обработке результатов реометрических измерений // АгроЭкоИнфо. – 2020, №3. – http://agroecoinfo.narod.ru/journal/STATYI/2020/3/st_324.pdf