

## CUPRINS

I	Introducere	7
I.1	Modelul matematic : definitie, clasificare	7
I.2	Matlab: noțiuni de bază	10
	I.2.1 Variabilele în MATLAB.	11
	I.2.2 Operații matematice asupra scalarilor și funcții elementare	11
	I.2.3 Operații asupra vectorilor și matricilor.	12
	I.2.4 Comenzi pentru execuții secvențiale	17
	I.2.5 Funcții ale utilizatorului	20
	I.2.6 Grafica în MATLAB	21
I.3	Soluționarea sistemelor de ecuații algebrice neliniare	24
I.4	Soluționarea numerică a ecuațiilor diferențiale	29
	I.4.1 Ecuații diferențiale ordinare	29
	I.4.1.1 Metode explicite	29
	I.4.1.1 Metode implicite	39
	I.4.1.2.1 Metode predictor – corector	39
	I.4.2 Ecuații cu derivate parțiale	42
	I.4.2.2 Metoda diferențelor finite	44
	Bibliografie	52
II	Modele matematice analitice	53
II.1	Bazele formulării modelelor matematice analitice	53
	II.1.1 Exprimarea matematică a termenilor din ecuația de bilanț de materiale.	55
	II.1.2 Bilanțul energetic	58
II.2	Modele ale reactoarelor ideale	59
	II.2.1 Reactorul cu amestecare	59
	II.2.2 Reactorul tubular – curgere tip piston	63
II.3	Modele ale reactoarelor reale	65
	II.3.1 Reactoare cu amestecare reale.	66
	II.3.2 Reactoare tubulare reale. Curgerea tip piston cu dispersie axială.	67
	II.3.2.1 Ecuațiile reactorului piston cu dispersie axială	67
	II.3.2.2 Condiții la limită	69
	II.3.2.3 Utilizarea cascadei de reactoare cu amestecare perfectă pentru simularea reactorului piston cu dispersie axială	71

II.4	Exemple de modele matematice analitice	73
II.4.1	Rezervor hidraulic cu flux variabil.	73
II.4.2	Reactorul de tip șarjă.	77
II.4.3.	Reactor cu amestecare perfectă și debit variabil în care are loc o reacție reversibilă.	81
II.4.4.	Reactor de tip semi-șarjă ( semibatch reactor).	87
II.4.5.	Reactor tubular. Regim staționar neizoterm, reacție în fază lichidă	93
II.4.6.	Reactor tubular, regim staționar, izoterm, reacție în fază gazoasă	97
II.4.7.	Reactor continuu cu amestecare perfectă	101
II.4.8.	Absorber în contracurent	114
II.4.9.	Coloane de distilare	143
II.4.9.1	Modele bazate pe conceptul de "taler teoretic".	143
II.4.9.2	Exemplu numeric: coloana de distilare pentru un amestec binar ideal	146
	Bibliografie	162
III	Modele matematice experimentale	163
III.1	Modele statistice	163
III.1.1	Modele statistice pentru regim staționar	164
III.1.2	Identificarea proceselor dinamice	175
III.1.2.1	Liniarizarea modelelor neliniare	176
III.1.2.2	Modalități de organizare și realizare a experimentelor la identificarea proceselor	179
III.2	Modelarea și Simularea Proceselor. Modele Neurale	191
III.2.1	Inspirația din neurologie	191
III.2.1.1	Celula nervoasă	191
III.2.1.2	Sinapsa	192
III.2.1.3	Neuronul - unitate funcțională	192
III.2.1.4	Concluzii	193
III.2.2	Modele neurale artificiale	194
III.2.2.1	Modelul McCulloch & Pitts	194
III.2.2.2	Modelul Rosenblatt - Perceptronul	195
III.2.2.3	Regula Delta	197
III.2.2.4	Problema XOR	200
III.2.3	Rețele cu propagare înapoi	204
III.2.3.1	Generalizarea regulii delta	206

III.2.3.2	Modul de lucru cu back-propagation	208
III.2.3.3	Funcții de activare neliniare (prezente în MATLAB)	210
III.2.3.4	Rata de învățare și momentul	214
III.2.3.5	Învățarea unui tipar	214
III.2.3.6	Deficiențe ale algoritmului Back-propagation	215
III.2.3.7	Parametrii de antrenare a rețelei	217
III.2.3.8	Algoritmi de antrenare - MATLAB	218
III.2.4	Aplicații ale rețelelor neurale cu propagare înapoi în chimie și inginerie chimică	225
III.2.5	Utilizarea rețelelor neurale artificiale la modelarea și simularea unui proces electrochimic	227
III.2.5.1	Chimismul procesului	227
III.2.5.2	Descrierea instalației experimentale și selecția arametrilor de proces	228
III.2.5.3	Rezultate experimentale	229
III.2.5.4	Modelarea procesului	231
III.2.5.5	Decelarea influenței parametrilor de proces în vederea optimizării procesului	234
III.2.5.6	Concluzii	241
III.2.6	Modelarea dinamică a procesului de reținere a $\text{Sr}^{2+}$ prin schimb ionic	246
III.2.6.1	Noțiuni generale despre schimbul ionic	246
III.2.6.2	Determinări experimentale	247
III.2.6.3	Modelarea procesului	250
III.2.6.4	Testarea capacității de predicție a modelului	253
III.2.6.5	Concluzii	255
III.3	Logica Fuzzy	261
III.3.1	Fuzzificarea	261
III.3.2	Schema inferențială fuzzy	262
III.3.3	Defuzzyficarea	263
III.3.4	Aspecte privind reglarea fuzzy a temperaturii unei locuințe	264
	Bibliografie	267