

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УКРАЇНСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ»

КОНСПЕКТ ЛЕКЦІЙ
з дисципліни
«МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ОБ'ЄКТІВ
ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ»
ДЛЯ СТУДЕНТІВ НАПРЯМУ ПІДГОТОВКИ
6.051301 «ХІМІЧНА ТЕХНОЛОГІЯ» СПЕЦІАЛЬНОСТІ
«ХІМІЧНІ ТЕХНОЛОГІЇ ПЕРЕРОБКИ ДЕРЕВИНИ ТА РОСЛИННОЇ
СИРОВИНИ»

Затверджено на засіданні кафедри
хімічної технології
високомолекулярних сполук.
Протокол № 12 від 24.06.2015.

Дніпропетровськ ДВНЗ УДХТУ 2016

Конспект лекцій з дисципліни «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології» для студентів напряму підготовки 6.051301 «Хімічна технологія» спеціальності «Хімічні технології переробки деревини та рослинної сировини» / Укл.: О.В. Черваков, М.В. Андріянова. – Дніпропетровськ: ДВНЗ УДХТУ, 2016. – 33 с.

Укладачі: О.В. Черваков, д-р техн. наук
М.В. Андріянова, канд. хім. наук

Відповідальний за випуск О.В. Черваков, д-р техн. наук

Навчальне видання

Конспект лекцій з дисципліни «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології» для студентів напряму підготовки 6.051301 «Хімічна технологія» спеціальності «Хімічні технології переробки деревини та рослинної сировини»

Укладачі: ЧЕРВАКОВ Олег Вікторович
АНДРІЯНОВА Марина Володимирівна

Редактор Л.М. Тонкошкур
Редактор Л.Я. Гоцуцова

Підписано до друку 25.05.16. Формат 60×84¹/₁₆. Папір ксерокс. Друк різнограф. Ум.-друк. арк. 1,55. Обл.-вид. арк. 1,61. Тираж 100 прим. Зам. № 186. Свідоцтво ДК № 5026 від 16.12.2015.

ДВНЗ УДХТУ, 49005, м. Дніпропетровськ-5, просп.. Гагаріна, 8.

Видавничо-поліграфічний комплекс

ВСТУП

Хіміко-технологічні процеси (ХТП) здійснюють з метою перетворення вихідної сировини у товарні продукти. Зниження затрат на отримання готового продукту є першочерговою задачею хімічної промисловості. Це досягається оптимальним вибором устаткування та режимів його експлуатації, що потребує достатньо точних методів розрахунку ХТП і, таким чином, застосування сучасних засобів обчислювальної техніки. Дана задача дуже важлива як при вивченні існуючих ХТП, так і при керуванні діючими підприємствами та проектуванні нових об'єктів.

Для досягнення поставленої мети необхідні достовірні та надійні комп'ютерні моделі хіміко-технологічних процесів, серед яких можна виділити два типи: фізико-хімічні (детерміновані) моделі та емпіричні моделі, засновані на обробці експериментальних даних.

Складність розробки математичних моделей пов'язана з тим, що потоки речовини, як правило, є багатофазними та багатокомпонентними. Увесь процес в цілому протікає у апаратах з конкретними геометричними характеристиками, що впливають на характер цього процесу.

Детерміновані математичні моделі базуються на фундаментальних законах фізики та хімії, а саме, на знанні елементарних процесів фазових переходів. Необхідною умовою математичного моделювання ХТП є розподілення його на окремі блоки та встановлення виду та характеру зв'язку між ними та складення математичного опису окремим елементарних процесів.

Емпіричні математичні моделі застосовують, якщо закономірності елементарних процесів недостатньо вивчені, і для математичного опису використовується відомий принцип «чорного ящика» та аналізуються результати активного або пасивного експерименту методами кореляційного та регресійного аналізу.

Метою даного конспекту є вивчення принципів побудови математичних моделей ХТП як об'єктів проектування, керування та навчання. Конспект лекцій призначено для студентів напряму підготовки 0513 «Хімічна технологія» та формує у студентів наступні професійні навички:

- освоєння методик використання програмних засобів для вирішення практичних задач;
- розроблення моделі компонентів інформаційних систем, включаючи моделі баз даних;
- розроблення компонентів програмних комплексів та баз даних, використання сучасних інструментальних засобів та технологій програмування.

1 ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ ТЕОРІЇ МОДЕЛЮВАННЯ

1.1 Загальні відомості про моделювання

Моделюванням називають процес побудови моделі. Під «*моделлю*» розуміється матеріальний або ідеальний об'єкт, що відображує модельований об'єкт як якісно визначене ціле. Кількість і якість зв'язків або взаємодій елементів, що становлять модельований об'єкт, нескінченна. Тому відображення всіх зв'язків об'єкта можливо лише на самому об'єкті.

В той же час будь-який матеріальний об'єкт (матеріальна система) складається з елементів – підсистем, що розрізняються рівнями структурної організації матерії (масштабами і закономірностями взаємодій). При цьому внутрішні зв'язки (взаємодії) кожного рівня структурної організації матерії не впливають безпосередньо на взаємодії інших рівнів. Взаємодії кожного такого рівня структурної організації впливають на інші рівні структурної організації узагальнено, або сумарно, вплив. Це обумовлює можливість вивчення систем шляхом їх розподілу за рівнями структурної організації матерії та їх відображення за допомогою моделей.

Це ж дозволяє при моделюванні враховувати тільки ті взаємодії, які відповідають меті моделювання.

У випадку коли об'єктами моделювання є різні ХТП, процес моделювання можна розподілити на декілька *етапів*:

1. Постановка задачі, достатньо точно фіксуючі суттєві властивості оригіналу, і знаходження алгоритму, що дозволяє досліджувати модель.
2. Дослідження моделі.
3. Перенесення результатів дослідження моделі на оригінал.
4. Перевірка отриманих результатів та формулювання висновків за проведеними дослідженнями.

Застосовуються два типи моделей: фізичні та математичні.

Фізичні моделі застосовуються тоді, коли необхідно розглянути взаємодії одного рівня структурної організації матерії.

За допомогою математичного опису процесу в об'єкті і моделі знаходять безрозмірні комплекси змінних, що називають *критеріями подібності*, величини яких визначають форму і кількісні характеристики рішення відповідного опису. Обираючи співвідношення змінних так, щоб, з одного боку, було забезпечено «подібність» об'єкта і моделі, тобто рівність критеріїв для об'єкта і моделі, а з іншого боку – у реалізації моделі, створюють фізичну модель і досліджують її експериментально. Потім перераховують отримані результати на умови, об'єкта. Прикладом такого підходу є моделювання процесів гідродинаміки і теплообміну.

Розрізняють геометричні та фізичні критерії подібності:

- геометричні – це зміна розмірів об'єкта (довжина, висота, ширина та ін.);

– фізичні – це фізичні властивості матеріалів (густина, в'язкість, швидкість руху частинок у останньому об'єкті).

На практиці фізичне моделювання проводять за трьома стадіями:

- 1) лабораторне дослідження;
- 2) дослідження на «пілотних» установках;
- 3) масштабування на промислові установки.

При моделюванні хіміко-технологічних процесів необхідно враховувати взаємодію принаймні двох рівнів структурної організації матерії: мікрорівня – хімічне перетворення і макрорівня – процеси тепло- і масообміну. При цьому неможливо одночасно забезпечити рівність всіх критеріїв подібності для моделі та об'єкта (критерії виявляються «несумісними») і провести фізичне моделювання.

Питання для самоконтролю

1. Які завдання вирішуються на етапах фізичного моделювання?
2. Дайте визначення детермінованим і стохастичним процесам.
3. Дайте коротку характеристику активному та пасивному експериментам.
4. Основні вимоги до процесів, що моделюються.
5. Які основні етапи створення реального технологічного процесу отримання високомолекулярних сполук, або композиційних матеріалів на їх основі.
6. Завдання, які вирішуються при проведенні лабораторних досліджень.
7. Завдання, які вирішуються при дослідженнях на пілотних (напівпромислових) установках.
8. Основні завдання, які вирішуються при створенні промислової установки з синтезу високомолекулярних сполук.
9. Для чого використовують методи планування експерименту?

1.2 Сутність і стадії математичного моделювання

Для аналізу не детермінованих систем, наприклад двохфазних систем, які ускладнені хімічними реакціями, використання фізичного моделювання неможливе. У зв'язку з цим використовують математичне моделювання.

Математичне моделювання полягає в синтезі математичного опису складного об'єкта з математичним описом його елементів і в дослідженні отриманого математичного опису складного процесу.

Математичне моделювання проводять з *метою*:

- збільшення потужності виробництва, а саме, окремих технологічних агрегатів;
- вибір найкращих апаратних технічних рішень;
- Забезпечення ефективного керування агрегатами та виробництвом в цілому.

Здійснюється математичне моделювання за алгоритмом, що наданий на рис. 1.1.

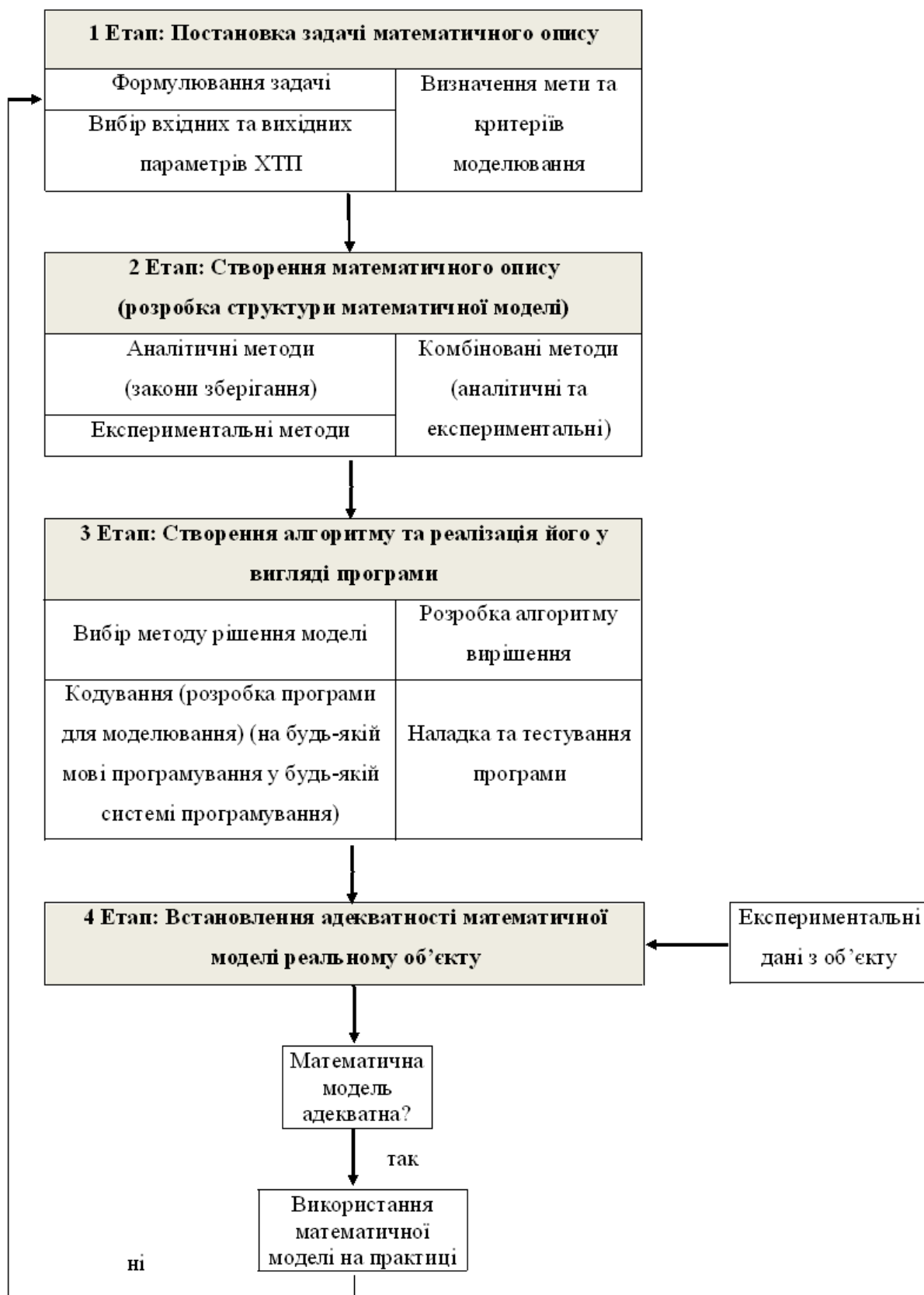


Рисунок 1.1 – Узагальнений алгоритм розробки математичних моделей хіміко-технологічних процесів

При отриманні математичних описів різних об'єктів зазвичай застосовують два принципово різних підходи: формально-статистичний і неформальний.

Формально-статистичний підхід полягає в тому, що, чи не враховуючи структури (механізму) взаємодій об'єкта, будують формальний опис зв'язку його входів і виходів. Такий опис необхідний для побудови, і він досить простий, якщо по суті процесів, що протікають в об'єкті, можна очікувати однозначності такого зв'язку. Ця умова часто виконується, якщо розглядати тільки один рівень структурної організації. Наприклад широко застосовується опис кінетики за допомогою брутто-констант швидкості і формальних порядків за реагентами. При отриманні математичних описів різних об'єктів зазвичай застосовують два принципово різних підходи: формально-статистичний і неформальний.

Застосування формально-статистичного підходу має два суттєвих недоліки:

- отриманий опис придатний тільки для тієї області умов, для якої було отримано опис, і екстраполяція (розповсюдження) опису для іншої, області може призвести до великих помилок;
- якщо процес досить складний (наприклад, якщо необхідно описати кінетику хімічного процесу, в якому бере участь більш двох вихідних реагентів), потрібний дуже великий обсяг експериментальних даних для отримання опису.

Неформальний підхід до математичного опису полягає в обліку взаємодій об'єкта. Цей облік проявляється насамперед у визначеності та фізичній обґрунтованості форми математичного опису. Для отримання неформальних описів необхідне знання глибинних закономірностей процесу.

Стан багатьох галузей науки, в тому числі хімії і хімічної технології полімерів, ще такий, що хоча відомі принципові закономірності процесів, але не відомі їх кількісні характеристики. Ці кількісні характеристики закономірностей процесів є параметрами моделей, які необхідно визначити за експериментальними даними.

При визначенні форми взаємодій при неформальному підході до побудови математичних описів потрібний менший обсяг експериментальних даних і з'являється можливість екстраполяції моделі за область експериментальних умов, в яких отримані її параметри, якщо форма закономірностей при цьому не змінюється.

На практиці в області математичного моделювання полімеризаційних процесів обидва ці способи широко застосовуються, доповнюючи один одного.

Дослідження математичного опису проводиться аналітично або чисельно, із застосуванням обчислювальної техніки. Тільки завдяки застосуванню обчислювальної техніки стала можливою практична реалізація математичного моделювання хіміко-технологічних процесів від обробки

великого обсягу експериментальної інформації при отриманні параметрів математичного опису до вирішення завдань, пов'язаних з розглядом варіантів реалізації хіміко-технологічних процесів і оптимізацією.

Питання для самоконтролю

1. Роль методів математичного моделювання при вивченні процесів хімічних технологій.
2. Основні поняття математичного моделювання: оригінал, модель, моделювання.
3. Мета побудови математичної моделі.
4. Об'єкти моделювання. Охарактеризуйте параметри об'єктів моделювання.
5. Етапи математичного моделювання.
6. Формальний підхід до вивчення хіміко-технологічних процесів.
7. Неформальний підхід до вивчення хіміко-технологічних процесів.
8. Фізичне моделювання. Його переваги та недоліки.

1.3 Ієрархічна структура сучасного хімічного підприємства

Хімічне виробництво, як правило, являє собою послідовність трьох основних операцій: підготовка сировини, безпосередньо хімічне перетворення і виділення цільових продуктів. Ця послідовність операцій втілюється в єдину складну хіміко-технологічну систему (ХТС). Сучасне хімічне підприємство як система великого масштабу складається з великого числа взаємопов'язаних підсистем, між ними існують взаємовідносини підпорядкованості, що мають ієрархічну структуру з трьома основними ступенями (рис. 1.2).



Рисунок 1.2 – Ієрархічна структура хімічного підприємства

Першу, нижчу ступінь ієрархічної структури хімічного підприємства утворюють типові процеси хімічної технології (механічні, гідродинамічні, теплові, масообмінні, хімічні і т.п.) в певному апаратурному оформленні та локальні системи управління ними. Завдання управління цією сходинкою зводиться до стабілізації технологічних параметрів типових процесів.

Оснoву другого ступеня ієрархії хімічного підприємства складають агрегати, комплекси і т.д. Під агрегатом розуміють взаємопов'язану сукупність окремих типових технологічних процесів і апаратів.

На даному ступені ієрархії при управлінні підсистемами виникають завдання оптимальної координації роботи апаратів і оптимального розподілу навантажень між ними.

Третій, найвищий ступінь ієрархії структури хімічного підприємства – це системи організації виробництва, планування запасів сировини і реалізації готових продуктів, а також оперативного управління сукупністю цехів (АСУП).

На цьому ступені ієрархії виникають завдання ситуаційного аналізу та оптимального управління всім підприємством.

1.4 Хіміко-технологічна система як велика система

Під хіміко-технологічною системою розуміється сукупність протікаючих фізико-хімічних процесів і засобів для їх реалізації. Таким чином, хіміко-технологічна система містить: власне хімічний процес, апарат, в якому він проводиться, засоби для контролю та управління процесами і зв'язку між ними.

Система взаємодіє з зовнішнім середовищем і може бути кількісно оцінена сукупністю вхідних змінних X і вихідних змінних Y (рис. 1.3).



Рисунок 1.3 – Найпростіша структура системи

В якості вхідних змінних можна прийняти кількість сировини, що переробляється, його склад, температуру і т.д.; виходами можуть бути кількість готового продукту, концентрація, температура та інші властивості. Для відповідності вихідних змінних заданим значенням на них впливають за допомогою керуючих змінних.

Прикладом системи може бути будь-який регульований хімічний процес, що відбувається в об'єкті (наприклад, у реакторі), що підлягає управлінню (рис. 1.4).

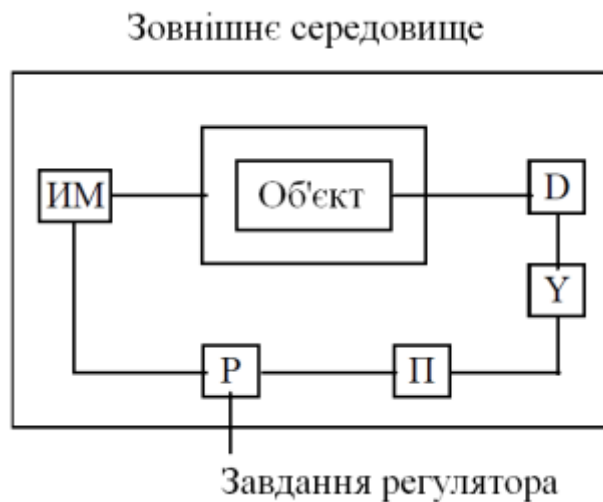


Рисунок 1.4 – Регульований хіміко-технологічний процес як система

Хід процесу реєструється датчиком D; надходять від нього сигнали й посилюються (підсилювач Y) і далі подаються в перетворювач сигналів П (наприклад, електричних у механічні). Перетворені сигнали впливають на установку регулятора Р, який видає сигнали на виконавчий механізм (наприклад, клапан на лінії введення сировини або теплоносія).

Таким чином, ХТС – це досить складний об'єкт, який можна розчленувати (провести декомпозицію), на складові підсистеми, або елементи. Ці підсистеми інформаційно пов'язані один з одним і, можливо, з навколишнім середовищем об'єкта.

1.5 Основні положення системного аналізу

Системний аналіз – це стратегія вивчення складних систем. Як метод дослідження в ньому використовується математичне моделювання, а основним принципом є декомпозиція складної системи на простіші підсистеми.

Математична модель будується за блоковим принципом: загальна модель підрозділяється на блоки, які можна порівняно просто описати математично. Необхідно відзначити, що всі підсистеми взаємодіють між собою.

В основі стратегії системного аналізу лежать такі загальні положення:

1. Формулювання мети дослідження.
2. Постановка завдання з реалізації цієї мети і визначення критерію ефективності виконання завдання.
3. Розробка плану дослідження.
4. Послідовне просування по всіх етапах.
5. Організація послідовних наближень на окремих етапах.
6. Принцип спадної ієрархії аналізу і вихідній ієрархії синтезу.

З позиції системного аналізу вирішуються завдання моделювання, оптимізації, управління та оптимального проектування ХТС.

Застосування стратегії системного аналізу для розрахунку складних процесів дозволяє використовувати блоковий принцип.

Так, при розгляді хімічного процесу, що протікає в реакторі, можна виділити п'ять блоків. Спочатку досліджують гідродинамічну структуру потоків, далі вивчають вплив перенесення тепла і речовини та, нарешті, хімічну кінетику й складають матеріальні і теплові баланси.

Застосування методів кібернетики в хімічній технології відкриває можливість здійснення системного аналізу при дослідженні або організації виробничого процесу як системи.

Питання для самоконтролю

1. Суть та стадії системного аналізу.
2. Ієрархічна структура сучасного хімічного підприємства.

2 ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ ПРО ЕКСПЕРИМЕНТ

2.1 Основні поняття та визначення

Незалежні змінні величини, що впливають на перебіг процесу, прийнято називати *факторами*. Так, факторами можуть бути температура, тиск, склад реакційної суміші і т.п. Ці величини позначають буквами $x_1, \dots, x_n$.

Перебіг процесу кількісно визначається однією або декількома величинами, наприклад, потужністю устаткування, собівартістю продукції та ін.. Такі величини називають *функціями відгуку* та позначають буквами $y_1, \dots, y_m$. Функції відгуку залежать від факторів, що впливають, тобто

$$y_j = y_j(x_1, \dots, x_n), \quad (2.1)$$

де $j = 1, 2, \dots, m$.

Геометричний образ, що відповідає функції відгуку, називають *поверхнею відгуку* (рис. 2.5). Координатний простір, за осями якого відкладені фактори, називають *факторним простором*.

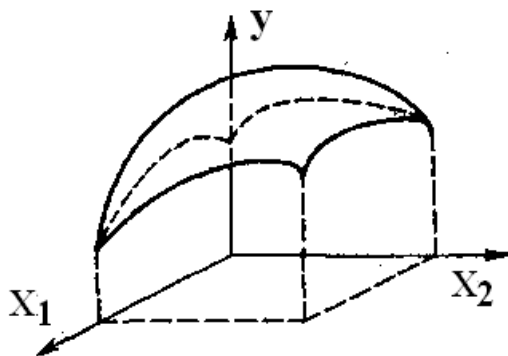


Рисунок 2.5 – Поверхня відгуку

Для зручності розгляду поверхня відгуку може надаватися на факторній площині (x_1 , x_2) лініями постійних значень функцій відгуку (аналогічно зображенню рельєфу місцевості на географічних картах). На рис. 2.6 зображені деякі типи поверхней відгуку, де в якості прикладу взятий ступінь чистоти продуктів реакції, виражений у процентах.

На рис. 2.6а поверхня відгуку має вид «вершини» та відповідає області значень факторів, де розташований максимум величини y . Очевидно, що аналогічний вигляд мають лінії постійного рівня та у випадку мінімуму функції y .

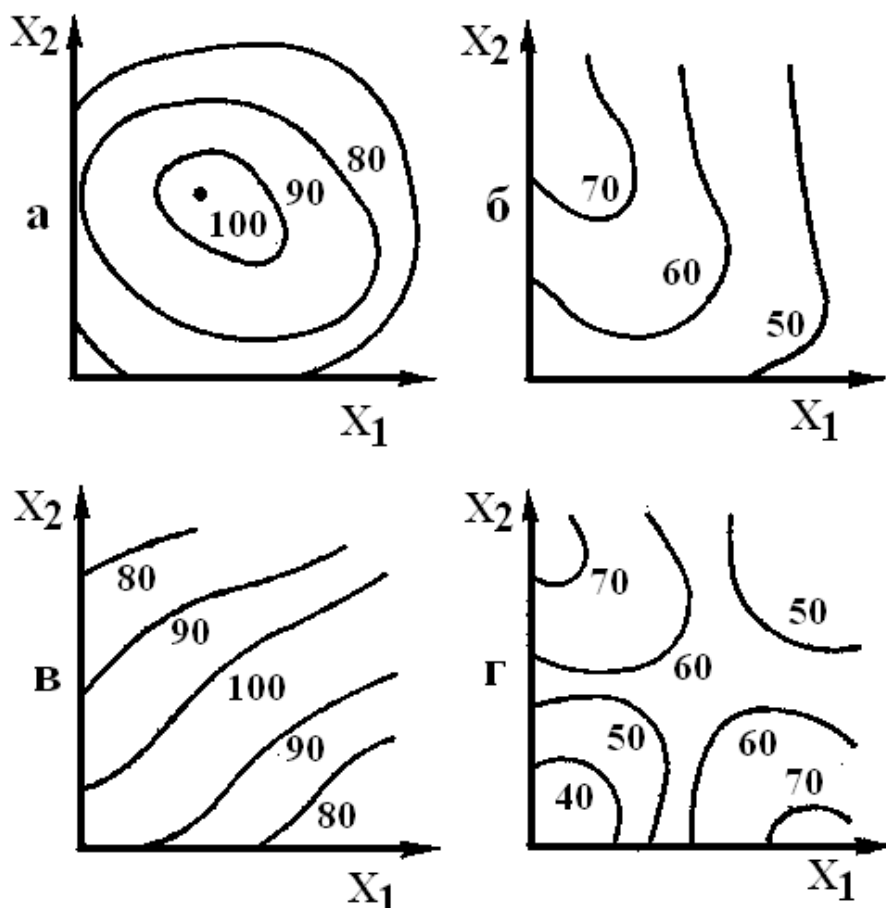


Рисунок 2.6 – Типи поверхонь відгуку

Поверхня, зображена на рис. 2.6б, характеризує плавне зростання функції відгуку зі зменшенням фактора x_1 та збільшенням x_2 . Таку поверхню прийнято називати «стаціонарним підвищенням».

Поверхня, показана на рис. 2.6в, називається «хребтом». Її вершина відповідає найбільшим значенням функції відгуку. Аналогічно розміщуються лінії постійних значень y та у випадку мінімальних значень «оврагу», дно якого відповідає мінімальним значенням функції відгуку.

На рис. 2.6г зображена поверхня, що називається «сідлом». На двох ділянках цієї поверхні спостерігається зростання функції відгуку, а на двох інших – спадання.

Слід зазначити, що на практиці зустрічаються поверхні відгуку та у більш складній конфігурації.

Якщо число факторів, що впливають, більше двох, зображення поверхні відгуку користуються її двовимірними перерізами. З цією метою кожний раз фіксують усі фактори, окрім двох.

2.2 Перевірка відтворюваності дослідів

Перед тим, як починають планувати експеримент, необхідно перевірити, чи відтворюються досліди. Для цього проводять декілька серій паралельних дослідів у даній області зміни факторів, що впливають. Результати цих дослідів зводять у таблицю 2.1.

Таблиця 2.1 – Експеримент для перевірки відтворюваності дослідів

Номер серії дослідів	Результати паралельних дослідів				$\bar{y}_j$	s_j^2
1	y_{11}	y_{12}	...	y_{1k}	$\bar{y}_1$	s_1^2
2	y_{21}	y_{22}	...	y_{2k}	$\bar{y}_2$	s_2^2
3	y_{31}	y_{32}	...	y_{3k}	$\bar{y}_3$	s_3^2
...	...	...	...	...	...	...
j	y_{j1}	y_{j2}	...	y_{jk}	$\bar{y}_j$	s_j^2
...	...	...	...	...	...	...
N	y_{N1}	y_{N2}	...	y_{Nk}	$\bar{y}_N$	s_N^2

Для кожної серії паралельних дослідів розраховують середнє арифметичне значення функції відгуку

$$\bar{y}_j = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k y_{ji} \quad (j = 1, 2, \dots, N), \quad (2.2)$$

де k – число паралельних дослідів, проведених при однакових умовах. Зазвичай N та k беруть від 2 до 4.

Потім розраховують оцінку дисперсії для кожної серії паралельних дослідів:

$$s_j^2 = \frac{1}{k-1} \sum_{i=1}^k (y_{ji} - \bar{y}_j)^2 \quad (2.3)$$

Для перевірки відтворюваності дослідів знаходять співвідношення найбільшої з оцінок дисперсії до суми сіх оцінок дисперсії:

$$G_p = \frac{\max s_j^2}{\sum_{j=1}^N s_j^2} \quad (2.4)$$

Ця величина називається розрахунковим критерієм Кохрену.

Значення критерію Кохрена G відповідають *довірчій ймовірності* $P = 0,95$, з якою приймається гіпотеза про відтворюваність дослідів.

Слід зазначити, що величина $p = 1 - P$ називається *рівнем значущості*.

Для знаходження G необхідно знати загальну кількість оцінок дисперсій N та *число ступенів свободи* f , що пов'язані з кожною з них, причому $f = k - 1$.

Якщо виконується умова

$$G_p \leq G, \quad (2.5)$$

то досліді вважаються відтворюваними, а оцінки дисперсії – *однорідними*.

Якщо досліді не відтворювані, що можна спробувати досягти відтворюваності і усуненням джерел нестабільності експерименту, а також використанням більш точних методів та засобів вимірювань.

Якщо ніякими засобами неможливо досягти відтворюваності, то математичні методи планування до такого експерименту застосовувати заборонено.

2.3 Обчислення похибки експерименту

Оцінки *однорідних* дисперсій декількох серій паралельних дослідів можна усереднити та знайти величину

$$s_y^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N s_j^2 \quad (2.6)$$

що називають *оцінкою дисперсії відтворюваності*. З нею пов'язано число ступенів свободи $f = N(k - 1)$.

Оцінку *дисперсії середнього значення* розраховують за формулою:

$$s_{\bar{y}}^2 = \frac{s_y^2}{k} \quad (2.7)$$

З нею також пов'язане число ступенів свободи $f = N(k - 1)$.

Якщо при проведенні експерименту досліді дублюються та користуються середніми значеннями функції відгуку y , то при обробці експериментальних даних слід використовувати $s_{\bar{y}}^2$. У тих випадках, коли з причини недостатчі часу, трудомісткості або високої вартості експерименту досліді не дублюються, при обробці даних використовують s_y^2 .

Питання для самоконтролю

1. Для чого використовують методи планування експерименту?
2. Як виглядає поверхня відгуку, називана “хребтом” і “сідлом”?

3. Що в плануванні експерименту називають факторами, а що функціями відгуку?
4. Як виглядає поверхня відгуку під назвами “вершина”?
5. Що в плануванні експерименту називають поверхнею відгуку?
6. Як виглядає поверхня відгуку, називана “стаціонарним підвищенням”?
7. Наведіть відомі Вам типи поверхонь відгуку.

3 ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧНІ МОДЕЛІ

3.1 Математичний опис

Під математичним описом процесу будемо розуміти систему рівнянь, що пов'язують функції відгуку з факторами, які впливають на процес. У найпростішому випадку це може бути одне рівняння. Часто математичний опис називають *математичною моделлю*.

За допомогою математичних методів оптимального планування експерименту можна отримати математичну модель процесу навіть при відсутності відомостей про його механізми. Це в ряді випадків буває дуже корисно.

Цінність математичного опису полягає в тому, що він:

- по-перше, дає інформацію про вплив факторів;
- по-друге, дозволяє кількісно визначити значення функцій відгуку при заданому режимі ведення процесу;
- по-третє, може служити основою для оптимізації.

Слід зазначити, що на основі методів планування експерименту можна кількісно описати також властивості таких продуктів, як сплави, пластмаси, гуми, кераміка, бетони і т. п.

Математичні моделі, що отримуються за допомогою методів планування експерименту, прийнято називати *експериментально-статистичними*.

3.2 Повний факторний експеримент

Метод повного факторного експерименту дає можливість отримати математичний опис досліджуваного процесу в деякій локальній області факторного простору, що лежить близько обраної точки з координатами $(x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0n})$.

Перенесемо початок координат факторного простору в цю точку (рис. 3.7). З цією метою введемо нові змінні

$$X_i = \frac{x_i - x_{0i}}{\Delta x_i} \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (3.1)$$

де Δx_i – масштаб по осі X_i .

Іноді величину X_i називають *кодованою* змінною.

Функцію відгуку в околиці нового початку координат розкладемо в ряд Тейлора:

$$y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_n X_n + \beta_{12} X_1 X_2 + \dots + \beta_{(n-1)n} X_{n-1} X_n + \\ + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \dots + \beta_{nn} X_n^2 + \dots, \quad (3.2)$$

де $\beta_0 = y(0, \dots, 0)$ – значення функції відгуку на початку координат

$$\beta_i = \frac{\partial y}{\partial X_i}$$

$$\beta_{ij} = \frac{\partial^2 y}{\partial X_i \partial X_j}$$

$$\beta_{ii} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial X_i^2}$$

і т.д.

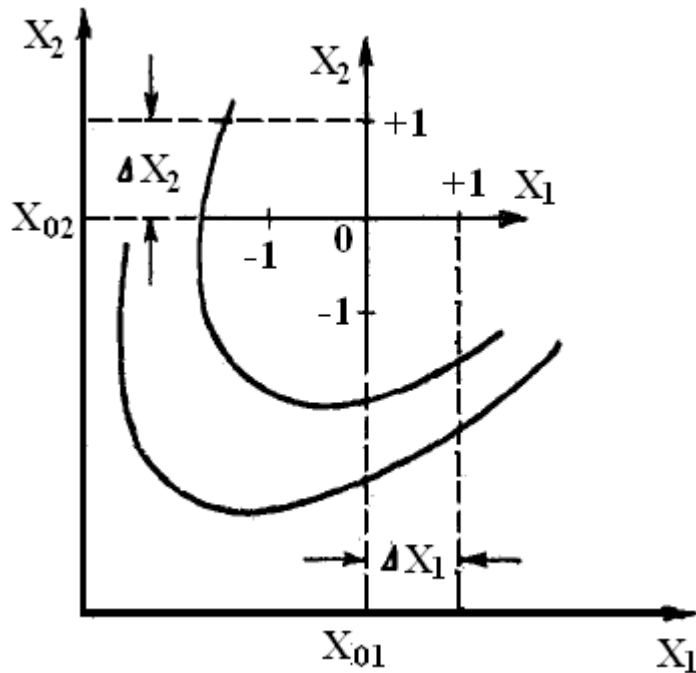


Рисунок 3.7 – Введення кодованих змінних

Метод повного факторного експерименту служить для отримання математичного опису процесу у вигляді відрізка ряду Тейлора (2.2). При цьому зазвичай обмежуються лінійною частиною розкладання і членами, що містять множення факторів у першій ступені. Таким чином, вдається знаходити рівняння *локальної* ділянки поверхні відгуку, якщо його кривизна не надто велика.

Слід зазначити, що коефіцієнти шуканого рівняння визначаються на основі експериментальних даних і, отже, несуть на собі відбиток похибок експерименту. Щоб підкреслити цю обставину, в рівнянні замість символів, β , що позначають істинні значення коефіцієнтів, пишуть b , маючи на увазі під цим відповідні вибіркові оцінки.

Отже, за допомогою повного факторного експерименту шукають математичний опис процесу у вигляді рівняння:

$$y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_n X_n + b_{12} X_1 X_2 + \dots + b_{(n-1)n} X_{n-1} X_n. \quad (3.3)$$

Його називають *рівнянням регресії*, а коефіцієнти, що входять до нього – *коефіцієнтами регресії*.

Для зручності обчислень коефіцієнтів регресії всі фактори в ході повного факторного експерименту варіюють на двох рівнях, що відповідають значенням кодованих змінних $+1$ і -1 .

Таким чином, повним факторним експериментом називається система дослідів, що містить всі можливі неповторювані комбінації рівнів варіювання факторів.

У табл. 3.2 наведені умови дослідів повного двофакторного експерименту. Частина таблиці, обведена пунктиром, називається *матрицею планування*.

Таблиця 3.2 – Повний двофакторний експеримент

Номер досліду	Фактори		Функція відгуку
	X_1	X_2	
1	-1	-1	y_1
2	+1	-1	y_2
3	-1	+1	y_3
4	+1	+1	y_4

Як видно з рис. 3.8, дослідів, наведені в табл. 3.2, відповідають на факторній площині вершинам квадрату з центром на початку координат.

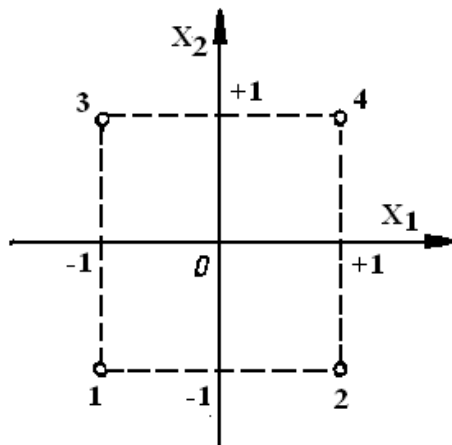


Рисунок 3.8 – Досліди повного двофакторного експерименту

У табл. 3.3 наведені умови дослідів повного трифакторного експерименту. Ці дослідів відповідають у факторному просторі вершинам куба з центром на початку координат.

З табл. 3.2 і 3.3 видно основні принципи побудови матриць планування повного факторного експерименту:

- рівні варіювання першого фактора чергуються від досліду до досліду;
- частота зміни рівнів варіювання кожного наступного фактора вдвічі менше, ніж у попереднього.

Таблиця 3.3 – Повний трифакторний експеримент

Номер досліджу	Фактори			Функція відгуку
	X_1	X_2	X_3	
1	-1	-1	-1	y_1
2	+1	-1	-1	y_2
3	-1	+1	-1	y_3
4	+1	+1	-1	y_4
5	-1	-1	+1	y_5
6	+1	-1	+1	y_6
7	-1	+1	+1	y_7
8	+1	+1	+1	y_8

Матриця планування повного факторного експерименту має такі властивості:

$$\sum_{j=1}^N X_{ji} = 0 \quad (3.4)$$

$$\sum_{j=1}^N X_{ji}^2 = N \quad (3.5)$$

$$\sum_{j=1}^N X_{jl} X_{jm} = 0 \quad (3.6)$$

(де $l \neq m$)

Тут N – число дослідів повного факторного експерименту;

j – номер досліджу;

i, l, m – номери факторів.

Властивість, виражена рівнянням (2.6), називається *ортогональністю*. Тому кажуть, що матриця повного факторного експерименту *ортогональна*. Це властивість дозволяє обчислювати коефіцієнти регресії за простими формулами незалежно один від одного.

Загальна кількість дослідів у матриці планування:

$$N = 2^n, \quad (3.7)$$

де n – число факторів.

На підставі повного факторного експерименту обчислюють коефіцієнти регресії, користуючись такими формулами:

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j \quad (3.8)$$

$$b_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_{ji} y_j \quad (3.9)$$

$$b_{im} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_{jl} X_{jm} y_j \quad (3.10)$$

(де $l \neq m$).

Деякі з коефіцієнтів регресії можуть виявитися зневажливо малими – *не значимими*. Щоб встановити, значущий коефіцієнт чи ні, необхідно, перш за все, обчислити оцінку дисперсії, з якої він визначається:

$$s_b^2 = \frac{s_y^2}{N} \quad (3.11)$$

Слід зазначити, що за допомогою повного факторного експерименту всі коефіцієнти визначаються з *однаковою* похибкою.

Прийнято вважати, що коефіцієнт регресії значимий, якщо виконана умова:

$$|b| = s_b t, \quad (3.12)$$

де t – значення критерію Стюдента.

В іншому випадку коефіцієнт регресії не значимий, і відповідний член можна виключити з рівняння.

Отримавши рівняння регресії, слід перевірити його адекватність, тобто здатність досить добре описувати поверхню відгуку. Цю перевірку здійснюють за допомогою критерію Фішера, який представляє собою наступне відношення:

$$F_p = \frac{\max(s_{ад}^2, s_y^2)}{\min(s_{ад}^2, s_y^2)} \quad (3.13)$$

де $s_{ад}^2$ – оцінка дисперсії адекватності.

У чисельнику співвідношення (3.13) знаходиться більша, а в знаменнику – менша із зазначених оцінок дисперсій.

Оцінку дисперсії адекватності обчислюють за формулою:

$$s_{ад}^2 = \frac{1}{N - B} \sum_{j=1}^N (y_j^e - y_j^p)^2 \quad (3.14)$$

де B – число коефіцієнтів регресії шуканого включно й вільний член;

y_j^e, y_j^p – експериментальне і розрахункове значення функції відгуку в j -м у досліді;

N – число дослідів повного факторного експерименту.

З оцінкою дисперсії адекватності пов'язане число ступенів свободи:

$$f_{ад} = N - B. \quad (3.15)$$

Рівняння регресії вважається адекватним, якщо виконується умова

$$F_p \leq F, \quad (3.16)$$

де F – значення критерію Фішера.

Питання для самоконтролю

1. Сутність проведення повного факторного експерименту.
2. Принципи побудування матриці планування.
3. Основні властивості матриці планування.
4. Процедура аналізу рівняння регресії.
5. Як визначається кількість дослідів при повному факторному експерименті?

4 ОПТИМІЗАЦІЯ

4.1 Метод крутого сходження

У попередньому розділі були розглянуті методи побудови експериментально-статистичних моделей у вигляді рівнянь регресії. В даному розділі ми розглянемо питання про те, як використовувати ці моделі для оптимізації процесів або властивостей багатокомпонентних систем.

Слід мати на увазі, що якість процесу зазвичай характеризується кількома функціями відгуку. Однак зазвичай неможливо знайти таке поєднання значень факторів, що впливають, при якому одночасно досягаються екстремуми всіх функцій відгуку, які цікавлять експериментатора. Наприклад, максимальна продуктивність обладнання і мінімальна собівартість продукції зазвичай досягаються при різних технологічних режимах.

Важливо відзначити, що як фактори, що впливають, так і функції відгуку можуть змінюватися тільки в певних межах. Так, концентрації реагентів не можуть бути негативними, температура і тиск в апараті не можуть перевищувати безпечних меж, собівартість продукції повинна бути не вище планової і т. д. Отже, оптимізацію процесів, як правило, здійснюють в умовах *обмежень* на фактори, що впливають, і функції відгуку.

Величина, що характеризує рівень оптимізації процесу, називається *критерієм оптимальності*. В окремому випадку критерієм оптимальності може бути одна з функцій відгуку, що характеризують процес.

Оптимізація процесу являє собою цілеспрямований пошук значень факторів, що впливають, при яких досягається екстремум критерію оптимальності (з урахуванням обмежень, накладених на все впливаючих чинників і функції відгуку).

Так було запропоновано використовувати для оптимізації результати повного факторного експерименту. Сутність такої оптимізації полягає у наступному.

Нехай, наприклад, критерієм оптимальності служить, функція відгуку y , надана у вигляді (3.3).

Один з факторів, що впливає, приймають за *базовий* і для нього обчислюють множення відповідного коефіцієнта регресії на крок варіювання. Наприклад, для першого фактора таке множення має вигляд $b_1 \Delta x_1$.

Потім для базового фактора вибирають крок руху Δx_1^* , з яким буде здійснюватися оптимізація. Зазвичай $\Delta x_1^* \leq \Delta x_1$.

Після цього обчислюють співвідношення:

$$\gamma = \frac{\Delta x_1^*}{b_1 \Delta x_1} \quad (4.1)$$

Для всіх інших факторів кроки руху до оптимальних значень розраховують за формулою:

$$\Delta x_i^* = \gamma b_i \Delta x_i. \quad (4.2)$$

Рух до оптимуму починають з *центра* плану, який використовувався для отримання математичного опису функції відгуку. Значення факторів на кожному новому кроці знаходять шляхом додавання Δx_i^* до відповідних попередніх значень. Так здійснюється оптимізація за методом *крутого сходження* (рис. 4.8).

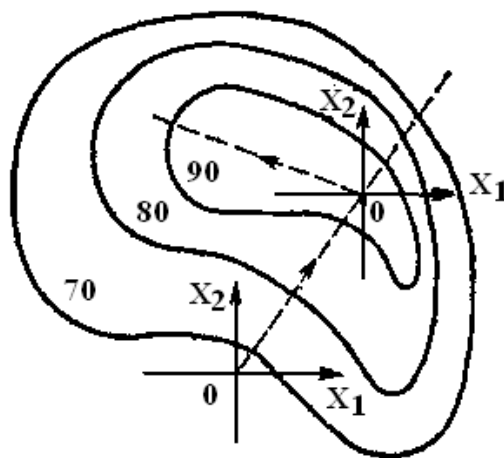


Рисунок 4.8 – Оптимізація за методом крутого сходження

Якщо ж шукається мінімум функції y , то нові значення факторів знаходять з попередніх шляхом вирахування Δx_1^* . Такий спосіб оптимізації називають методом *найшвидшого спуску*.

Рух до оптимуму припиняють у наступних випадках:

1. Значення (одного або декількох) факторів або функцій відгуку вийшли на межі допустимих значень.
2. Досягнуто екстремум критерію оптимальності y .

У першому випадку на цьому оптимізація закінчується, а в другому в області екстремуму функції y , шукають її *новий* математичний опис, використовуючи повний факторний експеримент або метод дробових реплік. Якщо вдається отримати адекватний опис цієї функції y вигляді (3.3), то продовжують оптимізацію методом крутого сходження (рис. 4.8). Очевидно, оптимум знайдений у результаті першого крутого сходження, був локальним.

Якщо ж в області оптимуму не вдається отримати адекватного рівняння регресії виду (3.3), то переходять до планування експерименту для отримання математичного опису функції y у вигляді многочлена другого ступеня. Методика проведення таких експериментів описана в наступному розділі.

Питання для самоконтролю

1. Сутність процесу оптимізації методом крутого сходження.
2. Що є критерієм оптимальності.

4.2 Симплексний метод

Симплексом називається правильний багатогранник, який має $n+1$ вершину, де n – число факторів, що впливають на процес. Так, якщо факторів два, то симплексом є правильний трикутник. Сутність симплексного методу оптимізації ілюструє рис. 4.9.

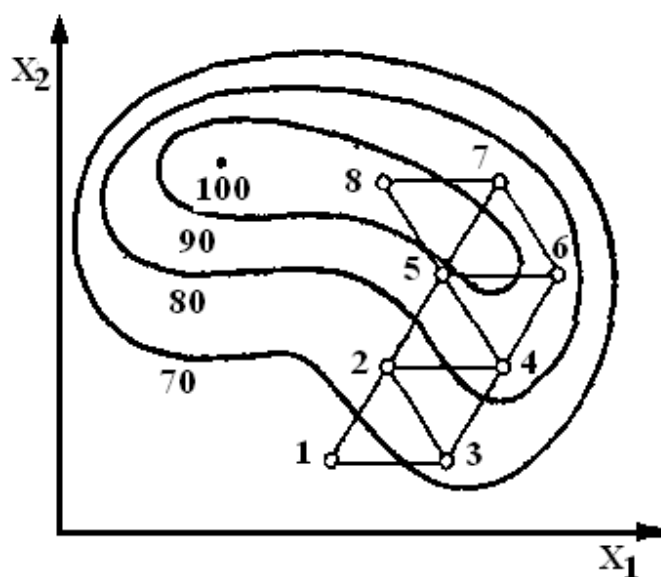


Рисунок 4.9 – Оптимізація по симплексному методу

Початкова серія дослідів відповідає вершинам вихідного симплексу (точки 1, 2 і 3). Умови цих перших дослідів беруться з області значень факторів, відповідних найбільш сприятливим з відомих режимів процесу, що оптимізується.

Порівнюючи між собою результати дослідів у точках 1, 2 і 3, знаходять «найгірший» з точки зору обраного критерію оптимальності. Нехай, наприклад, «найневдалішим» виявився дослід у точці 1. Цей дослід виключають з розгляду, а замість нього до складу симплекса вводять дослід у точці 4, яка симетрична точці 1 щодо протилежної сторони трикутника, який з'єднує точки 2 і 3.

Далі порівнюють між собою результати дослідів у вершинах нового симплекса, відкидають «найневдаліший» з них і переносять відповідну вершину симплекса в точку 5. Потім розглянута процедура повторюється протягом всього процесу оптимізації.

У випадку досягнення екстремуму критерію оптимальності, то подальший рух симплекса припиняється. Це означає, що новий крок повертає дослідника в попередню точку факторного простору.

Слід мати на увазі, що симплексний метод, так само як і метод крутого сходження, є *локальним* методом пошуку екстремуму. Якщо існує декілька екстремумів критерію оптимальності, то цей метод дозволяє знайти той з них, який розташований ближче до точок вихідного симплекса. Тому, якщо є підозра про існування кількох екстремумів критерію оптимальності, то потрібно здійснити їх пошук, кожен раз починаючи оптимізацію з нової області факторного простору. Потім слід порівняти між собою знайдені оптимальні умови і з усіх варіантів вибрати найкращий.

При оптимізації необхідно брати до уваги обмеження, накладені на фактори, що впливають, і функції відгуку.

Важливо відзначити, що при користуванні симплексним методом не обов'язково дублювати досліді. Справа в тому, що помилка в окремому досліді може тільки трохи сповільнити оптимізацію. Якщо ж наступні досліді виконуються бездоганно, то рух до оптимуму триває.

Матриця дослідів вихідного симплекса в кодованих змінних наведена в табл. 4.4. Символом «0» позначені координати центра плану, тобто основний рівень.

Таблиця 4.4 – Матриця вихідного симплексу

Номер дослідів	X_1	X_2	...	X_{n-1}	X_n	Функція відгуку
1	k_1	k_2	...	k_{n-1}	k_n	y_1
2	$-R_1$	k_2	...	k_{n-1}	k_n	y_2
3	0	$-R_2$	...	k_{n-1}	k_n	y_3
...	...	...	...	...	...	...
$n-1$	0	0	...	k_{n-1}	k_n	y_{n-1}
n	0	0	...	$-R_{n-1}$	k_n	y_n
$n+1$	0	0	...	0	$-R_n$	y_{n+1}

Величини, що входять у цю таблицю, розраховуються за такими формулами:

$$k_i = \sqrt{\frac{1}{2i(i+1)}} \quad (4.3)$$

$$R_i = ik_i. \quad (4.4)$$

Тут i – номер фактора в матриці планування.

Досліди, надані в табл. 4.4, відповідають вершинам симплекса, сторона якого дорівнює одиниці, а центр збігається з початком координат (в кодованих змінних).

Результати розрахунків, виконаних на підставі табл. 4.4 і формул (4.3) і (4.4), наведені в табл. 4.5.

Таблиця 4.5 – Умови початкової серії дослідів

Номер дослідів	X_1	X_2	X_3	X_4
1	0,5	0,289	0,204	0,158
2	–0,5	0,289	0,204	0,158
3	0	–0,578	0,204	0,158
4	0	0	–0,612	0,158
5	0	0	0	–0,632

Аналогічно можна розрахувати умови вихідної серії дослідів для більшої кількості факторів.

Очевидно, найбільшу кількість дослідів доводиться ставити на *початку* експерименту. Потім на кожному кроці оптимізації виконується тільки *один* дослід.

Пристаюючи до оптимізації, необхідно за допомогою табл. 4.4 або 4.5 розрахувати матрицю вихідної серії дослідів у *фізичних* змінних, користуючись формулою

$$x_i = x_{0i} + \Delta x_i X_i, \quad (4.5)$$

де використані ті ж позначення, що і у формулі (2.1). Надалі всі операції проводяться тільки з фізичними змінними.

Умови кожного нового дослідів розраховуються за формулою:

$$x_i = \frac{2}{n} \left(\sum_{j=1}^{n+1} x_{ji} - x_i^* \right) - x_i^* \quad (4.6)$$

де n – число факторів у матриці планування;

j – номер дослідів;

i – номер фактора;

x_i^* – значення 1-го фактора в самому «невдалому» досліді попереднього симплекса.

Слід зазначити, що на будь-якому етапі оптимізації, здійснюваної симплексним методом, можна додати в програму досліджень *новий фактор*, який до того часу не приймався до уваги, але залишався на сталому рівні. При цьому значення всіх раніше розглянутих факторів розраховуються за формулою:

$$x_i = \frac{1}{n+1} \sum_{j=1}^{n+1} x_{ji} \quad (4.7)$$

де $i = 1, 2, \dots, n$, тобто є середніми арифметичними значеннями відповідних координат попереднього симплекса.

Значення фактора, що знову вводиться, визначається за формулою:

$$x_{n+1} = x_{0(n+1)} + \Delta x_{n+1} (R_{n+1} + k_{n+1}), \quad (4.8)$$

де $x_{0(n+1)}$ – основний рівень цього фактора;

Δx_{n+1} – обраний крок варіювання для даного фактора;

R_{n+1}, k_{n+1} – величини, що розраховуються за формулами (4.3) і (4.4).

Відзначимо, що додавання нового фактора, до складу *повного факторного експерименту* супроводжується збільшенням кількості дослідів *вдвічі*. У цьому сенсі симплексний метод має очевидну *перевагу*.

В практику наукових досліджень симплексний метод був введений Ф. Хімсвортом у 1962 р.

Питання для самоконтролю

1. Сутність процесу оптимізації симплексним методом.
2. Переваги та недоліки симплексного методу оптимізації.

5 ДОСЛІДЖЕННЯ ОБЛАСТІ ОПТИМАЛЬНИХ УМОВ

5.1 Ортогональне центральне композиційне планування

Процес оптимізації приводить в область факторного простору, де кривизна поверхні відгуку велика і внаслідок цього поверхня не може бути описана многочленом виду (3.3). Для адекватного математичного опису тут потрібний многочлен *більш високого ступеня*, наприклад, відрізок ряду Тейлора (3.2), що містить члени з квадратами змінних. З цією метою використовують *центральне композиційне планування* експерименту (ЦКП). Розрізняють два види ЦКП – ортогональне і рототабельне.

Кількість дослідів при ортогональному ЦКП визначається за формулою:

$$N = 2^n + 2n + 1, \quad (5.1)$$

де 2^n – кількість дослідів, що утворюють повний факторний експеримент;

$2n$ – число так званих зоряних точок у факторному просторі, мають координати $(\pm\alpha, 0, 0, \dots, 0)$; $(0, \pm\alpha, 0, \dots, 0)$, ..., $(0, 0, \pm\alpha)$. Тут величина α називається зоряним плечем;

1 – дослід у центрі планування, тобто в точці факторного простору з координатами $(0, 0, \dots, 0)$.

Якщо за допомогою повного факторного експерименту не вдається отримати адекватного математичного опису в формі (2.3), то до нього додають дослід в «зіркових» точках і в центрі плану, а отриману при цьому композицію використовують для отримання математичного опису процесу у вигляді многочлена другого ступеня. Звідси і пішла назва методу – центральне композиційне планування.

Значення зоряного плеча α для ЦКП з різною кількістю факторів n наступні:

n		2	3	4	5
α		1,000	1,215	1,414	1,547

Ці значення α обрані з умови ортогональності матриці планування.

Рівняння регресії при ортогональному ЦКП шукають у наступному вигляді:

$$y = b_0^* + b_1X_1 + b_2X_2 + \dots + b_nX_n + b_{12}X_1X_2 + \dots + b_{(n-1)}X_{n-1}X_n + \\ + b_{11}X_1^* + \dots + b_{nn}X_n^*. \quad (5.2)$$

Змінні величини

$$X_{ji}^* = X_{ji}^2 - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_{ji}^2 \quad (5.3)$$

(j – номер дослідів; i – номер фактора)

введені для того, щоб матриця планування була ортогональна і коефіцієнти регресії визначалися незалежно один від одного за результатами дослідів.

Для того щоб отримати рівняння регресії в звичайній формі

$$y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + \dots + b_nX_n + b_{12}X_1X_2 + \dots + b_{(n-1)}X_{n-1}X_n + \\ + b_{11}X_1^2 + b_{22}X_2^2 + \dots + b_{nn}X_n^2 \quad (5.4)$$

знаходять величину

$$b_0 = b_0^* - \frac{b_{11}}{N} \sum_{j=1}^N X_{ji}^2 - \dots - \frac{b_{nn}}{N} \sum_{j=1}^N X_{jn}^2 \quad (5.5)$$

У табл. 5.6 наведена як приклад матриця ортогонального ЦКП для двох факторів, а на рис. 5.10 зображена схема цих дослідів.

Таблиця 5.6 – Ортогональне ЦКП для двох факторів

Системи дослідів	Номер дослідів	X_1	X_2	$X_1 X_2$	X_1^*	X_2^*
Повний факторний експеримент	1	-1	-1	+1	+0,33	+0,33
	2	+1	-1	-1	+0,33	+0,33
	3	-1	+1	-1	+0,33	+0,33
	4	+1	+1	+1	+0,33	+0,33
Досліди у зіркових точках	5	+1	0	0	+0,33	-0,67
	6	-1	0	0	+0,33	-0,67
	7	0	+1	0	-0,67	+0,33
	8	0	-1	0	-0,67	+0,33
Дослід у центрі плану	9	0	0	0	-0,67	-0,67

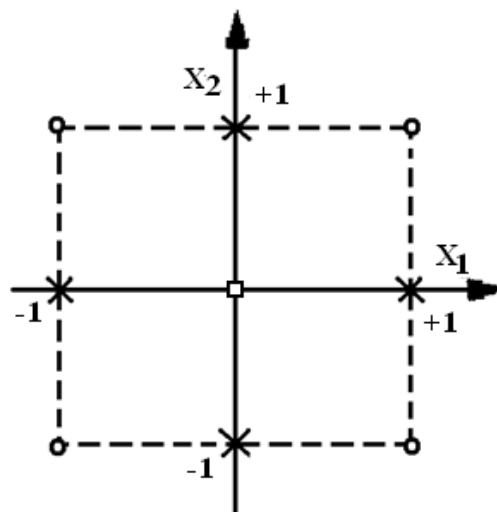


Рисунок 5.10 – Схема дослідів ортогональних ЦКП для двох факторів

Коефіцієнти регресії при ортогональному ЦКП розраховуються за такими формулами:

$$b_0^* = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j \quad (5.6)$$

$$b_i = \frac{\sum_{j=1}^N X_{ji} y_j}{\sum_{j=1}^N (X_{ji})^2} \quad (\text{де } i \neq 0); \quad (5.7)$$

$$b_{ik} = \frac{\sum_{j=1}^N X_{jl} X_{jk} y_j}{\sum_{j=1}^N (X_{jl} X_{jk})^2} \quad (\text{де } l \neq k); \quad (5.8)$$

$$b_{ii} = \frac{\sum_{j=1}^N X_{ji}^* y_j}{\sum_{j=1}^N (X_{ji}^*)^2} \quad (5.9)$$

Для розрахунку оцінок дисперсій у визначенні коефіцієнтів регресії використовують такі вирази:

$$s_{b_0^*}^2 = \frac{s_y^2}{N} \quad (5.10a)$$

$$s_{b_0}^2 = s_{b_0^*}^2 + \frac{n s_{b_{ii}}^2}{N} \sum_{j=1}^N X_{ji}^2 \quad (5.10б)$$

$$s_{b_i}^2 = \frac{s_y^2}{\sum_{j=1}^N (X_{ji})^2} \quad (\text{де } i \neq 0); \quad (5.10в)$$

$$s_{b_{ik}}^2 = \frac{s_y^2}{\sum_{j=1}^N (X_{jl} X_{jk})^2} \quad (\text{де } l \neq k); \quad (5.11)$$

$$s_{b_{ii}}^2 = \frac{s_y^2}{\sum_{j=1}^N (X_{ji}^*)^2} \quad (5.12)$$

Коефіцієнт b_i вважається значущим, якщо $|b_i| > s_{b_i} t$. Аналогічно перевіряється значимість інших коефіцієнтів регресії. Перевірка адекватності рівняння регресії здійснюється допомогою критерію Фішера (3.16).

Питання для самоконтролю

1. Переваги методу ортогонального центрального композиційного планування.

2. Як визначається кількість дослідів при ортогональному центральному композиційному плануванні?
3. Що є величиною „зоряного плеча”?

5.2 Рототабельне планування

Цей метод планування експерименту дозволяє отримувати *більш точний* математичний опис поверхні відгуку в порівнянні з ортогональним ЦКП, що досягається завдяки збільшенню числа дослідів у центрі плану та спеціальному вибору величини зоряного плеча α . У табл. 5.7 наведені основні характеристики матриць рототабельного планування.

Таблиця 5.7 – Характеристики рототабельного ЦКП

Число факторів	Число дослідів факторного планування	Число дослідів у зоряних точках	Число дослідів у центрі плану	Загальна кількість дослідів	α
2	4	4	5	13	1,414
3	8	6	6	20	1,680
4	16	8	7	31	2,000
5	32	10	10	52	2,378

При рототабельному ЦКП для обчислення коефіцієнтів регресії і відповідних оцінок дисперсій знаходять такі константи:

$$A = \frac{1}{2B[(n+2)B - n]} \quad (5.13)$$

$$B = \frac{nN}{(n+2)(N - N_0)} \quad (5.14)$$

$$C = \frac{N}{N - N_0} \quad (5.15)$$

де n – число факторів;

N – загальне число дослідів рототабельного ЦКП;

N_0 – число дослідів у центрі плану.

На підставі результатів експерименту обчислюють такі суми:

$$S_0 = \sum_{j=1}^N y_j \quad (5.16)$$

$$S_i = \sum_{j=1}^N X_{ji} y_j \quad (5.17)$$

(де $i = 1, 2, \dots, n$);

$$S_{ik} = \sum_{j=1}^N X_{ji} X_{jk} y_j \quad (5.18)$$

(де $i \neq k$);

$$S_{ii} = \sum_{j=1}^N X_{ji}^2 y_j \quad (5.19)$$

(де $i = 1, \dots, n$).

Формули для розрахунку коефіцієнтів регресії мають вигляд:

$$b_0 = \frac{2AB}{N} \left[S_0 B(n+2) - C \sum_{i=1}^n S_{ii} \right] \quad (5.20)$$

$$b_i = \frac{CS_i}{N} \quad (5.21)$$

$$b_{ik} = \frac{C^2 S_{ik}}{BN} \quad (5.22)$$

(де $i \neq k$);

$$b_{ii} = \frac{AC}{N} \left\{ S_{ii} C[B(n+2) - n] + C(1-B) \sum_{i=1}^n S_{ii} - 2BS_0 \right\}. \quad (5.23)$$

Оцінки дисперсій у визначенні коефіцієнтів регресії обчислюють за такими формулами:

$$s_{b_0}^2 = \frac{2AB(n+2)}{N} s_y^2 \quad (5.24)$$

$$s_{b_i}^2 = \frac{s_y^2}{N - N_0} \quad (5.25)$$

(де $i = 1, 2, \dots, n$);

$$s_{b_{ik}}^2 = \frac{C^2 s_y^2}{N} \quad (5.26)$$

(де $i \neq k$);

$$s_{b_{ii}}^2 = \frac{AC^2 s_y^2}{N} [B(n+1) - (n-1)] \quad (5.27)$$

У рототабельному ЦКП прийнято вважати, що коефіцієнт b_i значущий, якщо $|b_i| > s_{b_i} t$. Аналогічні умови значущості справедливі і для інших коефіцієнтів регресії.

Оцінку дисперсії адекватності розраховують за формулою:

$$s_{ад}^2 = \frac{\sum_j^N (y_j^e - y_j^p)^2 - s_y^2 (N_0 - 1)}{N - \frac{(n+2)(n+1)}{2} - (N_0 - 1)} \quad (5.28)$$

З нею пов'язано число ступенів свободи:

$$f_{ад} = N - \frac{(n+2)(n+1)}{2} - (N_0 - 1) \quad (5.29)$$

Перевірку адекватності рівняння регресії здійснюють за допомогою критерію Фішера.

Питання для самоконтролю

1. Як визначається кількість дослідів при рототабельному центральному композиційному плануванні?
2. Переваги та недоліки методу рототабельного центрального композиційного планування.

5.3 Контурно-графічний аналіз

При вивченні форми поверхні відгуку дослідники в ряді випадків обходяться без складання математичного опису функції відгуку, використовуючи прийоми *контурно-графічного аналізу*. Сутність його полягає в певному розташуванні дослідів у факторному просторі, отриманні додаткової інформації шляхом лінійної інтерполяції експериментальних даних і побудови на факторній площині (або на двовимірних перетинах) ліній постійного рівня функції відгуку.

Експериментальні точки розташовують таким чином, щоб вони охоплювали всю область факторного простору, що представляє інтерес для дослідника. Схема, запропонована П. Берча, передбачає постановку шести дослідів (рис. 5.11). Один з них проводиться в центрі досліджуваної області, а решта – на вершинах п'ятикутника. Схема В. Клеймана (рис. 5.12) вимагає постановки чотирьох дослідів на вершинах прямокутника і двох дослідів на його осі симетрії.

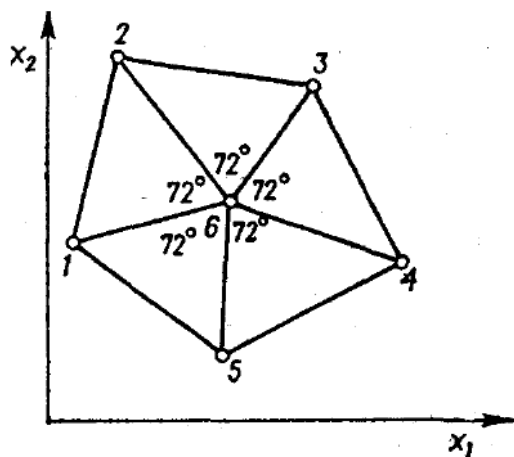


Рисунок 5.11 – Схема П. Берча

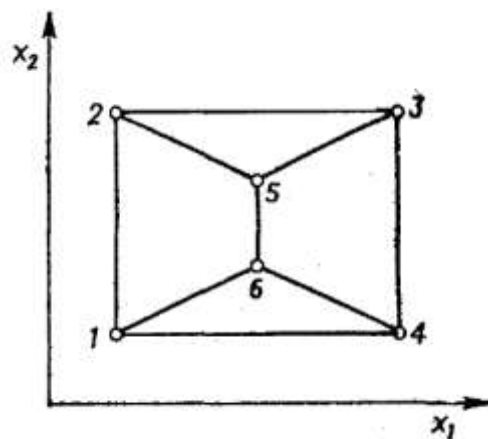


Рисунок 5.12 – Схема В. Клеймана

Зрозуміло, схеми П. Берча і В. Клеймана не вичерпують всіх можливих варіантів розташування експериментальних точок у факторному просторі. Однак слід мати на увазі, що відстані між цими точками не повинні бути занадто великі. В іншому випадку при великій кривизні і складній формі поверхні відгуку похибки лінійної інтерполяції накладуть помітний відбиток на результати досліджень.

На рис. 5.13 показано, як здійснюється контурно-графічний аналіз за схемою В. Клеймана. Спочатку проводять намічену серію дослідів. Потім з'єднують лінійними відрізками сусідні точки і знаходять методом лінійної інтерполяції значення функції відгуку в середині цих відрізків (як середнє арифметичне значення результатів дослідів в експериментальних точках, що з'єднуються). Нарешті, проводять лінії через точки з однаковими значеннями функції відгуку.

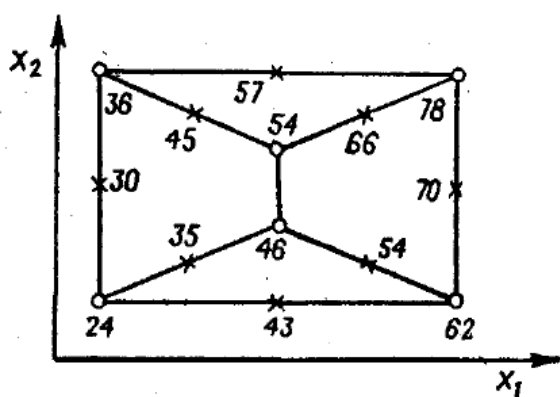
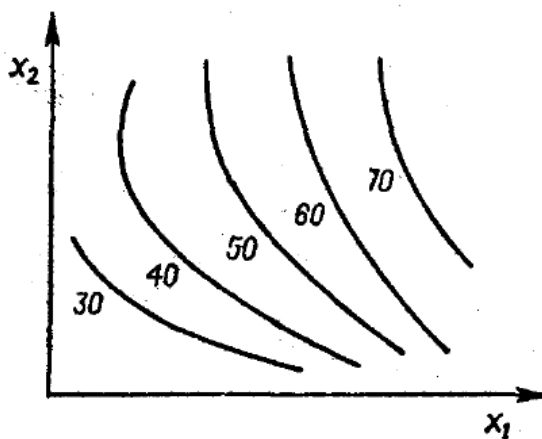


Рисунок 5.13 – Контурно-графічний аналіз за схемою Клеймана



Контурно-графічний аналіз за схемою П. Берча проводиться аналогічно.

Розглянутою методикою можна користуватися і при побудові двовимірних перерізів поверхні відгуку.

Методом контурно-графічного аналізу можна побудувати контурні лінії різних функцій відгуку, що характеризують процес. Поєднуючи

координатні осі цих графіків, можна досить швидко вибирати оптимальні умови ведення процесу.

Питання для самоконтролю

1. Наведіть відомі Вам схеми контурно-графічного аналізу.
2. Наведіть схему П. Берча для контурно-графічного аналізу.
3. Як здійснюється контурно-графічний аналіз за схемою В. Клеймана? Наведіть приклад.
4. У чому полягає сутність контурно-графічного аналізу?

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

Базова література

1. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высш. шк., 1991. – 399 с.
2. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учебное пособие для вузов. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 416 с.
3. Натарева С.В. Системный анализ и математическое моделирование процессов химической технологии: Учебное пособие. – Иваново, 2007. – 80 с.
4. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. – М.: Высш. шк., 1978. – 319 с.
5. Кафаров В.В. Кибернетика в химической технологии. – М.: Химия, 1984. – 369 с.
6. Саутин С.Н. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. – Л.: Химия, 1975. – 48 с.
7. Островский Г.М., Волик Ю.М. Моделирование сложных химико-технологических систем. – М.: Наука, 1985. – 351 с.
8. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. – М.: Химия, 1982. – 254 с.

Допоміжна література

1. Гумеров Ас. М. Математическое моделирование химико-технологических процессов: Учебное пособие / Ас. М. Гумеров, Н. Н. Валеев, Аз. М. Гумеров, В. М. ; Казан. гос. технол. ун-т. – Казань, 2006. – 216 с.
2. Саутин С.Н., Пунин А.Е. Мир компьютеров и химическая технология. – Л.: Химия, 1991. – 141 с.
3. Кларк Т. Компьютерная химия. – М.: Мир, 1990. – 383 с.
4. Кравцов А.В., Новиков А.А., Коваль П.И. Компьютерный анализ технологических процессов. – Новосибирск: Наука, 1998. – 212 с.
5. Кравцов А.В., Новиков А.А., Коваль П.И. Методы анализа химико-технологических процессов / Учебное пособие. – Томск.: ТПУ, 1994. – 210 с.

