

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ДО ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ
«Експериментально-статистичне моделювання та оптимізація об'єктів
хімії та хімічних технологій»

для аспірантів

спеціальностей «102 Хімія» та «161 Хімічні технології та інженерія»

денної і заочної форми навчання

ВСТУП

Мета навчальної дисципліни «Експериментально-статистичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічних технологій» є вдосконалення теоретичних і практичних знань аспірантів спеціальностей «102 Хімія» та «161 Хімічні технології та інженерія» про статистичні моделі хімічних і хіміко-технологічних процесів та їх використання для оптимізації об'єктів хімії та хімічних технологій.

Для досягнення поставленої мети аспіранту необхідно ознайомитись з загальними вимогами до експерименту і математичного моделювання, як методів досліджень в хімії та хімічній технології; опанувати методи повного і дробного факторного експерименту і їх застосування для оптимізації хімічних та хіміко-технологічних процесів; опанувати способи оптимізації методами крутого сходження та спуску, Монте-Карло, симплекса та контурно-графічного аналізу; опанувати процедуру інтерпретації статистичних моделей ХТП.

Лабораторні заняття з даної дисципліни – важливий етап підготовки студентів до самостійного рішення інженерних задач. Її виконання дозволить студентам закріпити і поглибити отримані в процесі навчання теоретичні і практичні знання про методологію експерименту, сформувані вміння та навички планування експерименту у хімії та хімічній технології та вирішення питань оптимізації хімічних процесів або складу багатокомпонентних продуктів.

Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Розробка математичної моделі хімічного процесу. Збір та обробка інформації; визначення мети і завдань досліджень; розробка плану експерименту; проведення дослідження; розрахунки коефіцієнтів рівняння регресії; перевірка однорідності дисперсій дослідів та адекватності моделі.	4
2	Оптимізація перебігу хімічного процесу. Проведення дослідження на моделі: вибір інтервалів варіювання змінних у рівнянні регресії, розрахунок кроків крутого сходження, дослідження за отриманим планом, визначення оптимуму цільової функції.	4
3	Розробка математичної моделі хімічного процесу одержання багатокомпонентних сумішей.	4

	Збір та обробка інформації; визначення мети і завдань досліджень; розробка плану експерименту; проведення дослідження; розрахунки коефіцієнтів рівняння регресії; перевірка однорідності дисперсій дослідів та адекватності моделі.	
4	Оптимізація складу багатокомпонентної системи. Проведення дослідження на моделі: вибір інтервалів варіювання змінних у рівнянні регресії, розрахунок кроків крутого сходження, дослідження за отриманим планом, визначення оптимуму цільової функції.	4

Лабораторні роботи обираються аспірантом відповідно до теми дисертаційної роботи та виконуються на її об'єктах досліджень.

ТЕОРЕТИЧНІ ВІДОМОСТІ З ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ В ХІМІЇ ТА ХІМІЧНІЙ ТЕХНОЛОГІЇ

Вирішення більшості проблем у хімії і хімічній технології пов'язане із проведенням складних і дорогих експериментів. Звідси зрозуміле значення методів оптимального планування експерименту, що дозволяють у ряді випадків істотно скоротити витрати часу і матеріальних ресурсів на виконання дослідницьких робіт.

Довгий час порядок проведення експерименту цілком визначався особистим досвідом і інтуїцією дослідників. Перші спроби застосування математичних методів для оптимального планування експерименту були зроблені англійським математиком Р. Фішером на початку 20-х років минулого сторіччя. Особливо швидкими темпами теорія планування експерименту стала розвиватися після 1951 р. в зв'язку з роботами Д. Бокса і К. Уілсона.

У сучасній математичній теорії оптимального планування експерименту існують два основних розділи:

1. Планування експерименту для вивчення механізмів складних процесів і властивостей багатокомпонентних систем;
2. Планування експерименту для оптимізації технологічних процесів і властивостей багатокомпонентних систем.

1. Основні поняття планування експерименту

Приступаючи до виконання експерименту в лабораторії, хіміки завжди визначають програму дій, що називається **плануванням експерименту**. Мета любого експерименту полягає в отриманні певного об'єму нової інформації про досліджувану речовину або про певний хіміко-технологічний процес її отримання. У ході виконання досліду використовується дороге обладнання, реактиви. Для того, щоб експеримент проходив оптимально, необхідно звести до мінімуму всі витрати на його здійснення. Тому, складаючи програму експериментальних досліджень, насамперед планується кількість дослідів та умови їх проведення.

Важливою задачею планування експерименту є мінімізація витрат при проведенні досліджень. При цьому, як правило, ставиться завдання одержання

даних з максимальною точністю. Однак це вимагає підвищення числа експериментів, а виходить, збільшується і його вартість. Внаслідок цього виникає задача **оптимізації постановки експерименту**.

Методично експерименти можуть бути проведені різними способами. Традиційний метод постановки експериментів полягає в тому, що змінюють який-небудь із параметрів, а інші підтримують постійними. Цей прийом зветься однофакторним експериментом. Очевидно, що така постановка експериментів вимагає проведення великої кількості експериментів.

Метод багатофакторного експерименту передбачає дослідження спільної дії основних параметрів і дозволяє при правильній організації процесу дослідження істотно скоротити загальне число експериментів у порівнянні з однофакторним експериментом. Так, у випадку одночасного вивчення впливу чотирьох параметрів серіями із шести паралельних експериментів при однофакторному експерименті потрібно провести 1440 експериментів, а при багатофакторному експерименті для досягнення тих же результатів – 96 експериментів, тобто в 15 разів менше.

Для постановки задачі по плануванню експерименту необхідно, насамперед, визначитися з вибором типу моделі досліджуваного процесу – статистичної або детермінованої. При складності досліджуваного процесу, множинності факторів впливу і неочевидності вибору серед них основних факторів, що впливають на нього найбільш значимим образом, перевага віддається моделі **«чорного ящика»**. Для побудови такої моделі необхідно визначитися з вибором функції відгуку, що повинна бути величиною кількісної, з яким фізичним змістом і ефективно описувати властивості об'єкта дослідження. Також важливо визначитися з вибором факторів (параметрів) досліджуваного процесу – деякі незалежні змінні, які можна задати і фіксувати з достатнім ступенем точності.

Слід зазначити, що модель чорного ящика дозволяє одержати математичний опис процесу (тобто його математичну модель) навіть при відсутності відомостей про його механізм. При цьому до цієї моделі можна застосовувати методи оптимального планування експерименту.

В теорії математичного планування експерименту незалежні змінні величини, що впливають на перебіг хіміко-технологічного процесу називають **впливаючими факторами**. Так, впливаючими факторами можуть бути температура, тиск, склад вихідної реакційної суміші і т.д. Дані величини при плануванні експерименту позначають літерами x_1, x_2, x_n . Фактори, які характеризуються певними цифровими значеннями (температура, тиск, концентрація), називаються **кількісними**. Фактори, які не характеризуються цифровими значеннями (наприклад, наявність або відсутність каталізатору), називаються **якісними**.

Перебіг хіміко-технологічного процесу кількісно характеризується однією або декількома величинами (наприклад продуктивністю обладнання, собівартістю продукції і т.д.), що в теорії планування експерименту називають **функціями відгуку** та позначають, наприклад, літерами y_1, y_2, y_n . Функції відгуку залежать від впливаючих факторів.

Геометричний образ, що відповідає функції відгуку, називають **поверхнею відгуку** (рис.1), а координатний простір, по осях якого відкладені впливаючі фактори – **факторним простором**.

Для зручності поверхня відгуку може бути зображена на площині в координатах x_1 та x_2 лініями, що відповідають постійним значенням функції відгуку. Це робиться аналогічно до зображення рельєфу на географічних картах.

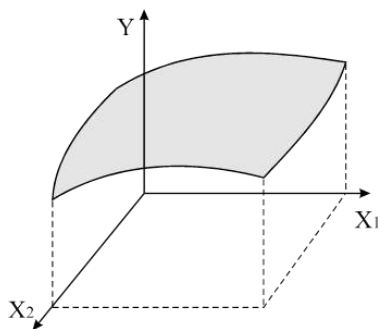


Рис.1. Поверхня відгуку та її проекція на факторний простір.

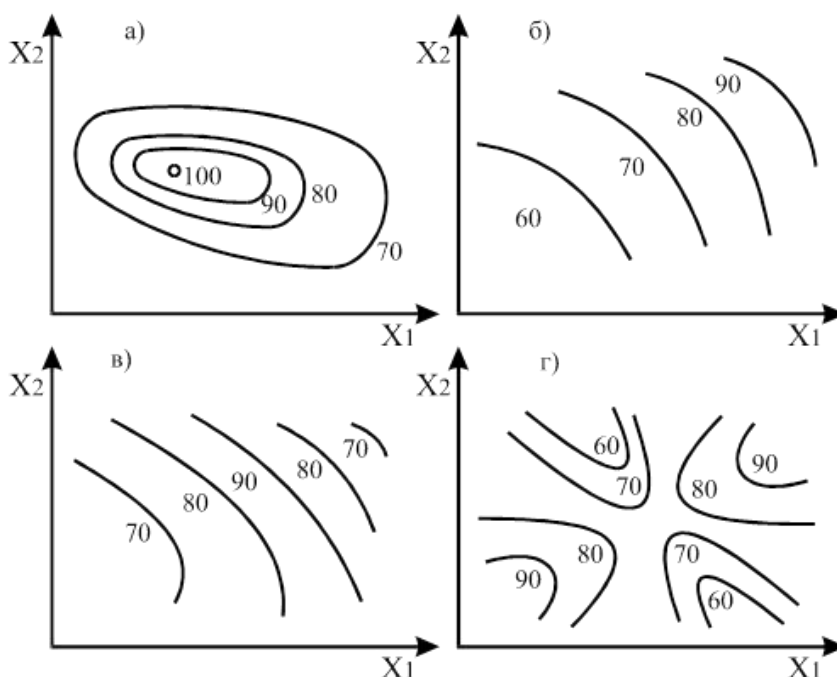


Рис.2. Типи поверхонь відгуку.

На рис.2 зображені деякі типи поверхонь відгуку. В якості прикладу функції відгуку беремо ступінь чистоти продукту хімічної реакції **A+B**, що надано у відсотках. На рис.2.а. поверхня відгуку має вигляд “**вершини**” та відповідає області значень факторів, де знаходиться максимум величини **y**. Аналогічний вигляд мають лінії постійного рівня **y** в випадку мінімуму функції **y** (тип “**западина**”). Поверхня, що зображена на рис.2.б, характеризує повільне зростання функції відгуку зі збільшення значень факторів x_1 та x_2 . Такий тип поверхонь називають “**стаціонарним зростанням**” (протилежний випадок – “**стаціонарне зменшення**”). Поверхня, що наведена на рис.2.в

називається “хребтом”. Його вершина відповідає найбільшим значенням функції відгуку. Аналогічно розташована лінія постійних значень функції відгуку у випадку типу поверхні “яр”, що відповідає мінімальним значенням функції відгуку. На рис.2.г зображено поверхню, що називається “сідлом”. На двох ділянках даної поверхні ми спостерігаємо зростання функції відгуку, а на двох інших - її зменшення. Слід зауважити, що на практиці зустрічаються поверхні відгуку більш складної форми, які являють собою комбінацію наведених типів поверхонь.

Отже, будь-який процес можна описати деякою математичною моделлю. У чому ж основна цінність такого математичного опису? У тім, що воно, по-перше, подає кількісну інформацію про вплив факторів; по-друге, дозволяє кількісно визначити значення функції відгуку при заданому режимі ведення процесу; по-третє, є основою для оптимізації процесу.

Розглянемо на прикладі недоліки однофакторного (класичного) експерименту по оптимізації процесу. Нехай якийсь процес або багатокомпонентний об'єкт описується математичною моделлю $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, де y – функція відгуку, а x_i – її фактори. Поставимо задачу визначити такі значення змінних x_1, x_2, \dots, x_n , при яких досягається максимальне (або мінімальне) значення функції y .

Для випадку двох змінних x_1 і x_2 функцію відгуку можна представити графічно у вигляді деякої поверхні в 3-хмірному просторі або кривих рівного рівня на площині (рис.3).

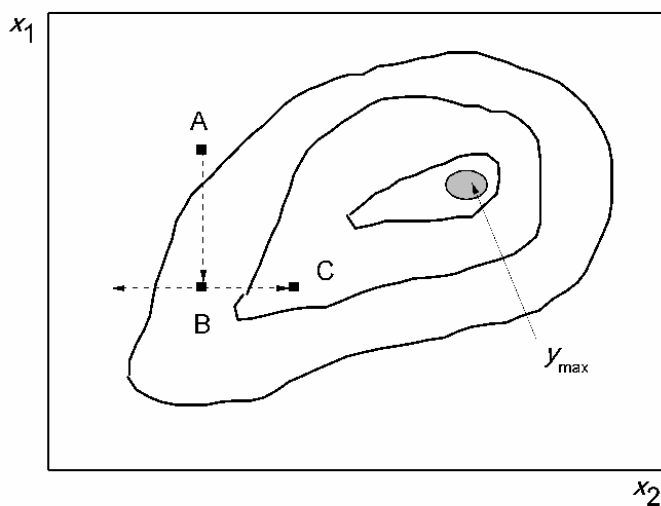


Рис.3. Графічна інтерпретація двухфакторної функції відгуку $y = f(x_1, x_2)$ на площині.

(Криві на графіку представляють точки факторного простору з однаковими значеннями функції відгуку).

Сутність знаходження екстремуму функції класичним методом Гаусса-Затделя полягає в наступному: вибирається деяка точка А с координатами x_1^0 і x_2^0 . Потім фіксують одну зі змінних (наприклад, x_1) і вимірюють значення функції відгуку при різних значеннях другої змінної. На рис.3 це можна зобразити як рух уздовж осі x_1 . Знаходять, що в точці В при $x_2 = x_2^B$ величина y має максимальне значення. Потім із точки В рухаються уздовж осі x_2 уліво і вправо і знаходять, що в точці С функція досягає максимального значення. Це

значення y у точці S є максимальне значення функції відгуку по даним двох однофакторних дослідів. Однак, як видно з рис.1, справжній максимум функції відгуку при цьому може перебувати в зовсім іншому місці факторного простору.

2. Оптимізація процесів методом Бокса-Уільсона

Для визначення дійсного екстремуму функції відгуку розроблене велике число різних математико-статистичних прийомів. Одним з них, що дає непогані результати, є метод Бокса-Уільсона, називаний також методом крутого сходження (або спуска, якщо екстремум функції – це мінімум). Цей метод дозволяє проводити оптимізацію процесу, використовуючи факторне планування, регресійний аналіз і рух по градієнту. Він дозволяє істотно скоротити число експериментів при відшуканні екстремуму функції відгуку.

Використання метод Бокса-Уільсона в постановці експерименту передбачає здійснення ряду етапів. Як і в класичному експерименті, спочатку вибирається точка A , що на підставі апріорної (тобто первісної чи попередньої) інформації є найкращою. У цій області проводиться багатофакторний експеримент, що дозволяє побудувати математичну модель об'єкта дослідження. На підставі цієї моделі можна визначити напрямок градієнта функції відгуку y . На другому етапі здійснюється постановка серії експериментів, що дозволяють здійснити покроковий рух у напрямку градієнта функції відгуку. Такий рух дає можливість найкоротшим шляхом досягти району екстремуму функції y .

Як відомо, будь-яку функцію можна розкласти в ряд Тейлора, а потім записати її з необхідним ступенем точності у вигляді рівняння регресії. Наприклад, для функції із двома змінними:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + \dots, \quad (1)$$

де b_1 – коефіцієнти регресії; коефіцієнти b_1 і b_2 характеризують лінійні ефекти, коефіцієнти b_{11} і b_{22} – квадратичні ефекти; коефіцієнт b_{12} – ефект взаємодії параметрів.

Для рішення задачі оптимізації часто можна обмежитися рухом по градієнту до екстремуму функції y , описаної лінійними рівняннями регресії, у якому зневажають всіма коефіцієнтами крім лінійних:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2. \quad (2)$$

Величини коефіцієнтів регресії говорять про ступінь впливу факторів на параметр оптимізації, а знак при них указує на те, як треба змінити фактори для поліпшення функції відгуку. Коефіцієнти регресії визначаються експериментально на підставі обробки результатів багатофакторного експерименту.

3. Повний факторний експеримент

Повний факторний експеримент (ПФЕ) – це таке активне планування експерименту, коли для кожного фактору вибирається певне число рівнів і реалізуються всі можливі їхні комбінації. Дослідження починаються з вибору

точки факторного простору, у якому значення функції відгуку найкращі. У цю точку переносять початок координат факторного простору і вона стає центром експериментального плану (точка 0 з координатами (x_{01}, x_{02}) на рис.4).

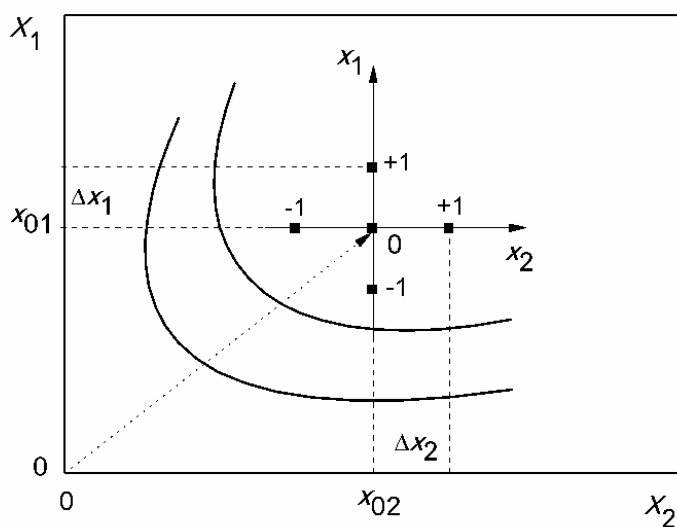


Рис.4. Введення кодіваних змінних.

Із цією метою вводять нові змінні, названі кодіваними:

$$x_i = \frac{\tilde{x}_i - \tilde{x}_{i0}}{\Delta x_i}, \quad (3)$$

де x_i – кодіване значення i -го фактору; \tilde{x}_{i0} – значення фактору на нульовому рівні; \tilde{x}_i – поточне значення фактору; Δx_i – інтервал варіювання фактору.

Інтервали варіювання факторів вибирають, по суті, довільно. Однак варто враховувати, що при невеликих їхніх значеннях може створитися уявлення, що даний фактор не впливає на функцію відгуку. При великих значеннях інтервалів варіювання важко врахувати взаємодію факторів.

Після вибору інтервалів варіювання встановлюють значення рівнів і складають **матрицю планування експерименту**. Для зручності обчислень коефіцієнтів регресії всі фактори в ході ПФЕ варіюють тільки на двох рівнях, що відповідають значенням кодіваних змінних +1 і -1. При двох рівнях факторів їхнього значення відповідають верхній і нижній границям інтервалу варіювання. У матриці планування фактори записуються в кодіваному виді. Матриця планування експерименту – це таблиця кодіваних значень варіюваних факторів, що включає умови проведення експериментів відповідно до обраного плану.

Приклад 1. Обчислити кодіване значення фактору для процесу фотометричного визначення концентрації, у якому світлопоглинання (A) розчину залежить від концентрації розчину і його рН: $y = A$, $x_1 = C$ (моль/л), $x_2 = \text{pH}$. Значення рН варіюють у ході експерименту від 5 до 10 ед. Очевидно, що

для рН $\tilde{x}_{i0}=7,5$ і $\Delta x_i = 2,5$. Обчислимо значення кодової змінної для рН на верхньому і нижньому рівнях:

$$x_i = \frac{\tilde{x}_i - \tilde{x}_{i0}}{\Delta x_i} = \frac{10 - 7,5}{2,5} = 1 \quad \text{та} \quad x_i = \frac{\tilde{x}_i - \tilde{x}_{i0}}{\Delta x_i} = \frac{5 - 7,5}{2,5} = -1.$$

Приклад 2. Скласти матрицю планування ПФЕ по екстракційному розділенню, у якому варіюється концентрація екстрагенту (x_1) і тривалість екстракції (x_2). Нульовий рівень факторів: $x_{01} = 5$ моль/л, $x_{02} = 20$ хв.

Прийемо, що інтервали варіювання будуть становити 3 моль/л і 10 хв, відповідно. Результати розрахунків рівнів факторів для проведення ПФЕ представлені в табл.1. У табл.2 наведені всі можливі комбінації факторів при їхньому варіюванні на двох рівнях.

Табл.1. Рівні факторів і інтервали їхнього варіювання

Фактори	Основний рівень	Інтервали варіювання	Верхній рівень	Нижній рівень
x_1	5	3	8	2
x_2	20	10	30	10

Табл.2. Матриця планування ПФЕ типу 2^2 для двох незалежних змінних, що варіюються на двох рівнях

№ дослідю	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	-1	-1	+1	y_1
2	+1	-1	-1	y_2
3	-1	+1	-1	y_3
4	+1	+1	+1	y_4

Щоб продемонструвати основні принципи¹ побудови матриць планування ПФЕ в табл.3 наведені умови експериментів повного трьохфакторного експерименту.

Табл.3. Матриця планування ПФЕ типу 2^3 для трьох незалежних змінних, що варіюються на двох рівнях

№ дослідю	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	ϵ_1
2	+1	-1	-1	-1	+1	-1	+1	ϵ_2
3	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	ϵ_3

¹ Основные принципы построения матриц планирования ПФЭ: уровни варьирования первого фактора чередуются от опыта к опыту, а частота смены уровней варьирования каждого последующего фактора вдвое меньше, чем у предыдущего.

4	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	ϵ_4
5	-1	-1	+1	+1	+1	-1	+1	ϵ_5
6	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	ϵ_6
7	-1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	ϵ_7
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	ϵ_8

Очевидно, що зі збільшенням кількості факторів різко зростає кількість експериментів ПФЕ. Однак для знаходження коефіцієнтів регресії не завжди потрібно багато експериментів. Можливо використовувати метод дробового факторного експерименту.

4. Метод дробового факторного експерименту

Для скорочення числа експериментів використовують дробовий факторний експеримент (ДФЕ), що полягає в тому, що для знаходження математичного опису процесу використовують певну частину повного факторного експерименту: $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$ тощо.

ДФЕ дозволяє отримати математичний опис процесу і визначити напрямки градієнтів функції відгуку. Для цього досить лінійного наближення. Лінійні коефіцієнти у випадку трьох змінних можна визначити, користуючись матрицею 2^{3-1} , а у випадку чотирьох змінних – матрицею 2^{4-1} . (У символі 2^{n-p} : n – загальне число факторів, p – число факторів, прирівняних до добутків факторів). Схема дробового факторного експерименту для чотирьох змінних представлена в табл.4.

Табл.4. Матриця планування дробового факторного експерименту типу 2^{4-1} для чотирьох незалежних змінних, що варіюються на двох рівнях

№ дослідів	x_1	x_2	x_3	$x_4 = x_1x_2x_3$	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	y
1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	ϵ_1
2	+1	-1	-1	+1	-1	+1	-1	ϵ_2
3	-1	+1	-1	+1	-1	-1	+1	ϵ_3
4	+1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	ϵ_4
5	-1	-1	+1	+1	+1	+1	-1	ϵ_5
6	+1	-1	+1	-1	-1	-1	+1	ϵ_6
7	-1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	ϵ_7
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	ϵ_8

Якщо в ПФЕ із чотирма змінними потрібно здійснити 16 дослідів, то в цьому випадку проводиться тільки 8 дослідів.

Для одержання матриці 2^{4-1} (так званої, дробової репліки для матриці плану 2^4) за основу береться ПФЕ плану 2^3 . Потім четвертий фактор прирівнюється потрійній взаємодії як найбільш незначущому: $x_4 = x_1x_2x_3$. Таку рівність називають співвідношенням, що генерує (або генеруючим співвідношенням).

Своєрідною «платою» за зменшення загальної кількості дослідів є те, що в методі ДФЕ одержують, так звані, змішані оцінки коефіцієнтів регресії, які являють собою алгебраїчні суми коефіцієнтів регресії.

5. Розрахунок коефіцієнтів рівняння регресії

Коефіцієнти регресії розраховують на підставі експериментальних даних по формулах:

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i, \quad (4)$$

$$b_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ij} y_i, \quad (5)$$

$$b_{km} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{kj} x_{mj} y_i, \quad (\text{де } k \neq m), \quad (6)$$

де i – номер дослідів ($i = 1, 2, 3 \dots m$), j – номер фактору ($i = 1, 2, 3 \dots k$); N – число дослідів у матриці планування експерименту; y_i – значення функції відгуку в i -тім досліді; x_{ij} – координати i -того дослідів.

Приклад 3. Розрахувати коефіцієнти регресії для експерименту, представленого в табл.2.

Відповідно до рівнянь (4)-(6), коефіцієнти регресії рівні:

$$b_0 = \frac{1}{4} (y_1 + y_2 + y_3 + y_4),$$

$$b_1 = \frac{1}{4} ((-1)y_1 + (+1)y_2 + (-1)y_3 + (+1)y_4),$$

$$b_2 = \frac{1}{4} ((-1)y_1 + (-1)y_2 + (+1)y_3 + (+1)y_4),$$

$$b_{12} = \frac{1}{4} ((+1)y_1 + (-1)y_2 + (-1)y_3 + (+1)y_4).$$

6. Перевірка однорідності дисперсій дослідів і адекватності моделі

Деякі з коефіцієнтів регресії можуть виявитися занадто малими, тобто незначущими. Щоб встановити, значущий коефіцієнт чи ні, необхідно, насамперед, обчислити оцінку дисперсії (помилку дослідів), з якою він визначається. Для цього необхідно проводити дублювання (повторення) дослідів.

Алгоритм розрахунків для перевірки однорідності дисперсій дослідів і адекватності моделі процесу:

1. Розраховують дисперсії вимірювань і перевіряють їхню однорідність;
2. Розраховують дисперсію відтворюваності;
3. Розраховують коефіцієнти регресії і складають математичну модель процесу;
4. Оцінюють значимість коефіцієнтів регресії;
5. Перевіряють адекватність рівняння регресії.

7. Оптимізації хімічних процесів методом крутого сходження

Після одержання адекватної математичної моделі необхідно почати рух по градієнту до екстремуму функції відгуку. Оптимальний шлях – це напрямок градієнта. Градієнт визначається через частинні похідні функції відгуку по *i*-тому фактору і оцінками таких частинних похідних є коефіцієнти рівняння регресії. Змінюючи незалежні змінні пропорційно величинами коефіцієнтів регресії, можна рухатися в напрямку градієнта функції відгуку по самому короткому шляху (тобто способом крутого сходження).

Суть розрахунку крутого сходження полягає в наступному. Значення коефіцієнта регресії дорівнює тангенсу кута між лінією регресії і віссю даного фактору (рис.5). Якщо його помножити на інтервал варіювання фактору (відрізок OA на рисунку), то вийде протилежний катет (відрізок AB) прямокутного трикутника OAB, що і дає координати точки (точка B на малюнку), що лежить на градієнті.

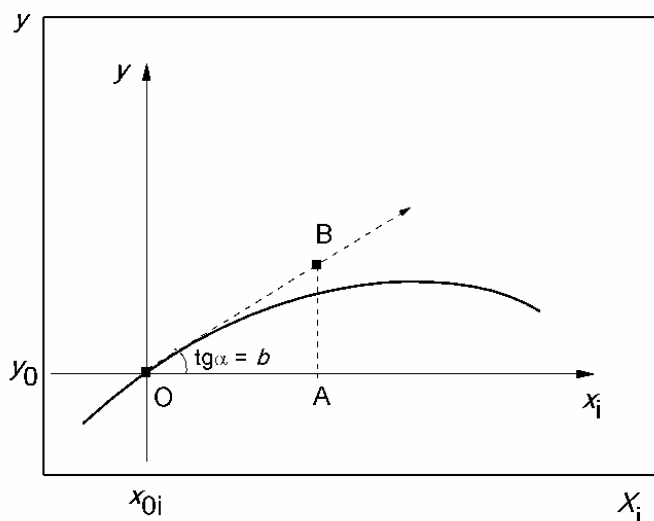


Рис.5. Схема розрахунку координат точок при русі в напрямку градієнта функції відгуку

Співвідношення добутків коефіцієнтів і інтервалів варіювання ($b_i \Delta x_i$) для двох факторів визначає співвідношення величин кроків (Δx_i^*) при їхньому варіюванні для руху в напрямку градієнта функції відгуку. Наприклад, крок варіювання другого фактору можливо визначити по формулі, задавши значення кроку для першого фактору:

$$\Delta x_2^* = \Delta x_1^* \frac{b_2 \Delta x_2}{b_1 \Delta x_1} . \quad (14)$$

Величина кроку Δx_i^* вибирається дослідником апріорно. Всі наступні кроки визначають шляхом алгебраїчного (тобто з урахуванням знака) додатка Δx_i^* до нульового рівня відповідного фактору. Кроки звичайно округляють до цілих значень.

Розглянемо зміст таких розрахунків на прикладі чотирьохфакторного експерименту по екстракції цинку у формі дитизонового комплексу.

При виконанні оптимізації рух до оптимуму може бути зупинено з двох причин:

1. Значення одного або декількох факторів або функції відгуку вийшли за межі припустимих значень (наприклад: концентрація реагентів не може бути негативної, тиск в апарату не може перевищувати припустимого);
2. Досягнутий екстремум критерію оптимальності² (функції відгуку).

У першому випадку на цьому оптимізація закінчується.

У другому випадку в області екстремума функції $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ шукають її новий математичний опис, але тепер у вигляді:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_nx_n + b_{12}x_1x_2 + \dots + b_{(n-1)n}x_{n-1}x_n,$$

у якому враховуються можливі взаємодії параметрів. Використовують повний факторний експеримент або метод дробових реплік і враховують тільки значимі фактори. Якщо вдається одержати адекватний опис цієї функції, то приступають до інтерпретації отриманого рівняння регресії. Якщо є апіорне припущення про можливість існування декількох екстремумів досліджуваної функції відгуку, то продовжують оптимізацію методом крутого сходження, оскільки існує ймовірність того, що оптимум, знайдений у результаті першого крутого сходження, міг бути локальним.

Якщо ж в області оптимуму не вдається одержати адекватного рівняння регресії, то переходять до планування експерименту для одержання математичного опису функції у вигляді багаточлена другого ступеня:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_nx_n + b_{12}x_1x_2 + \dots + b_{(n-1)n}x_{n-1}x_n + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + \dots + b_{nn}x_n^2.$$

Використовують **метод центрального композиційного планування** (ЦКП) експерименту, у якому до точок ПФЭ додають досліди в «зоряних» крапках і в центрі плану. Отриману при цьому композицію використовують для одержання математичного опису процесу у вигляді багаточлена другого ступеня.

Альтернативою математичному плануванню багатфакторного експерименту з метою одержання математичного опису функції у вигляді багаточлена другого ступеня є метод **контурно-графічного аналізу**. Сутність його складається в певному розташуванні дослідів у факторному просторі і одержанні додаткової інформації шляхом лінійної інтерполяції експериментальних даних, по яких будують на факторній площині лінії постійного рівня функції відгуку.

8. Інтерпретація рівнянь регресії

Інтерпретація рівнянь регресії – найважливіший етап моделювання процесів при використанні планування експерименту. Інтерпретація включає аналіз, насамперед, впливу окремих факторів і їхніх взаємодій, а потім -

² Критерій оптимальності – величина, яка характеризує рівень оптимальності процесу. Критерієм оптимальності може бути функція відгуку або сукупність ряду функцій відгуку, що характеризують процес.

особливостей поведження функції відгуку в різних частинах вивченої області факторного простору.

Спочатку оцінюється знак коефіцієнта b_n у змінної в рівнянні регресії, що показує в яку сторону – збільшення або зменшення – впливає на відгук даний фактор.

Потім порівнюються величини коефіцієнтів b_n у змінних: чим більше коефіцієнт регресії у якогось фактору, тим сильніше цей фактор впливає на функцію відгуку.

Подвійні взаємодії в рівнянні регресії, характеризуємі, наприклад, коефіцієнтом b_{12} , інтерпретують за умови, що один з факторів у такій взаємодії приймає значення +1, 0 і -1. Аналіз одержуваних рівнянь дозволяє оцінити залежність значень одного фактору від значень іншого, а також і від збігу або розбіжності знаків при коефіцієнтах b_1 , b_2 і b_{12} .

У тому випадку, якщо, наприклад, коефіцієнти b_1 і b_2 мають однаковий знак і знак при коефіцієнті b_{12} – такий же, те має місце явище синергізма впливу факторів x_1 і x_2 : кожний з них при спільному збільшенні впливає сильніше, ніж якщо вони збільшуються порізно.

Якщо число факторів невелике (2-4), інтерпретації може допомогти побудова ліній рівня відгуку, аналогічних горизонталям географічної карти.

Слід зазначити, що для практичного використання отриманої математичної моделі часто доцільно перейти в рівнянні регресії від кодованих змінних до фізичних.

Розглянемо цю процедуру на вище наведеному прикладі 1, у якому був показаний розрахунок кодованого значення фактору для процесу фотометричного аналізу, у якому світлопоглинання (A) розчину залежить не тільки від концентрації (C) досліджуваного розчину, але і від його рН: $y = A$, $x_1 = C$, $x_2 = \text{pH}$. Значення рН варіювали в ході експерименту від 5 до 10. Тому координатою для x_2 у центрі плану було обране значення рН = 7,5, а інтервал варіювання склав 2,5 од. рН.

На підставі формули (3) для кодування змінних перейдемо від кодової змінної до фізичної:

$$x_2 = \frac{\tilde{x}_2 - \tilde{x}_{02}}{\Delta x_i} = \frac{\tilde{x}_i - 7,5}{2,5} = 0,5\tilde{x}_i - 3.$$

Підставивши це значення змінної x_2 (як і інших «розкодованих» змінних) у рівняння регресії досліджуваного процесу, дослідник позбувається від необхідності переводити щораз умови дослідів у кодовані змінні.

Рекомендована джерела інформації.

Основна література:

1. Бондарь А.Г., Статюха Г.А., Потяженко И.А. Планирование эксперимента при оптимизации процессов химической технологии. – Киев: Вища школа, 1980. – 264 с.
2. Акулич И.Л. Математическое программирование в примерах и задачах. – М.: Высш. шк., 1986. – 319 с.
3. Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа. – Л.: Химия, 1984. – 167 с.
4. Румшинский А.З. Математическая обработка результатов эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 192 с.
5. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии: 4-е изд. – М.: Химия, 1985. – 448 с.
6. Вершинин В.И., Перцев Н.В. Планирование и математическая обработка результатов химического эксперимента: учебное пособие. – Омск: Изд-во ОмГУ, 2005. – 217 с.
7. Рузинов Л.П., Слободчикова Р.И. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. – М.: Химия, 1980. – 280 с.
8. Ликеш И., Ляга И. Основные таблицы математической статистики. – М.: Финансы и статистика, 1985. – 356 с.
9. Холлендер М., Вульф Д. Непараметрические методы статистики. – М.: Финансы и статистика, 1983. – 518 с.
10. Богачов Г.Н. Математическое моделирование и планирование эксперимента. - Л.: Химия, 1971. – 187 с.
11. Ермаков С.М., Жиглявский А.А. Математическая теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1987. – 320 с.
12. Володарский Е.Т., Мамоговский В.Н., Туз Ю.М. Планирование и организация измерительного эксперимента. – Киев.: Вища шк., 1987. – 280 с.
13. Химко-технологические системы: Синтез, оптимизация, управление / Под ред. И.П. Мухленова – Л.: Химия, 1986. – 424 с.
14. Рузинов Л.П., Слободникова Р.И. Планирование эксперимента в химической технологи. – М.: Химия, 1980. – 280 с.
15. Царева З.М., Орлова Е.И. Теоретические основы химической технологии. Учебное пособие. – Киев: Выща шк., 1986. – 260 с.

Додаткова література:

1. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии. – М.: Химия, 1975. – 575 с.
2. Кафаров В.В., Дорохов И.Н., Кольцова Э.М. Системный анализ процессов химической технологии. Энтропийный и вариационный методы неравновесной термодинамики в задачах химической технологии. – М.: Наука, 1988. – 367 с.
3. Кафаров В.В. Принципы создания безотходных химических производств. – М.: Химия, 1985. – 288 с.
4. Ягодин Г.А., Раков Э.Г., Третьякова Л.Г. Химия и химическая технология в решении глобальных проблем. – М.: Химия, 1988. – 176 с.

5. Лейтес И.Л., Сосна М.Х., Семенов В.П. Теория и практика химической энерготехнологии. – М.: Химия, 1988. – 280 с.
6. Бесков В.С., Флокк В. Моделирование каталитических процессов и реакторов. – М.: Химия, 1991. – 253 с.
7. Кафаров В.В., Макаров В.В. Гибкие автоматизированные производственные системы в химической промышленности. – М.: Химия, 1990. – 320 с.
8. Методи розрахунків у технології неорганічних виробництв. Навчальний посібник у 2-х частинах / За ред. О.Я. Лобойко і Л.Л. Товаржнянського. – Харків: Вид-во НТУ “ХП”. – 2001. – 480 с.
9. Статюха Г.А. Автоматизированное проектирование химико-технологических систем. – К.: Выща школа, 1989. – 400 с.
10. Смирнов Н.И., Вожжинский А.И., Плесовских В.Л. Химические реакторы в примерах и задачах. – СПб.: Химия, 1994. – 276 с.