

Учреждение образования
«БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

А. П. Кравчук, Е. Е. Трусова

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ОТРАСЛИ

Рекомендовано

учебно-методическим объединением по химико-технологическому образованию в качестве учебно-методического пособия для студентов учреждений высшего образования по специальности 1-48 01 01 «Химическая технология неорганических веществ, материалов и изделий» специализаций 1-48 01 01 06 «Технология стекла и ситаллов», 1-48 01 01 07 «Технология строительных материалов на основе вяжущих веществ», 1-48 01 01 08 «Технология неорганических полимерных связующих и композиционных материалов», 1-48 01 01 09 «Технология тонкой функциональной и строительной керамики», 1-48 01 01 10 «Технология эмалей и защитных покрытий», 1-48 01 01 11 «Химическая технология огнеупорных материалов», 1-48 01 01 14 «Химическая технология вяжущих материалов»

Минск 2015

УДК 66.011(075.8)
ББК 35.115я75
К78

Рецензенты:

кафедра инженерной математики Белорусского национального
технического университета (доктор физико-математических наук,
заведующий кафедрой *М. А. Князев*);
кандидат химических наук, доцент кафедры
радиационной химии и химико-фармацевтических технологий
Белорусского государственного университета *А. Д. Пещенко*

Все права на данное издание защищены. Воспроизведение всей книги или ее части не может быть осуществлено без разрешения учреждения образования «Белорусский государственный технологический университет».

Кравчук, А. П.

К78 Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов в отрасли : учеб.-метод. пособие для студентов специальности 1-48 01 01 «Химическая технология неорганических веществ, материалов и изделий» специализаций 1-48 01 01 06 «Технология стекла и ситаллов», 1-48 01 01 07 «Технология строительных материалов на основе вяжущих веществ», 1-48 01 01 08 «Технология неорганических полимерных связующих и композиционных материалов», 1-48 01 01 09 «Технология тонкой функциональной и строительной керамики», 1-48 01 01 10 «Технология эмалей и защитных покрытий», 1-48 01 01 11 «Химическая технология огнеупорных материалов», 1-48 01 01 14 «Химическая технология вяжущих материалов» / А. П. Кравчук, Е. Е. Трусова. – Минск : БГТУ, 2015. – 148 с.

ISBN 978-985-530-497-6.

В учебно-методическом пособии рассмотрены статистические методы обработки экспериментальных данных. Изложены теоретические основы построения экспериментально-статистических моделей химико-технологических процессов с использованием методов корреляционного и регрессионного анализа, планируемого эксперимента. Приведены сведения об оптимизации химико-технологических процессов.

**УДК 66.011(075.8)
ББК 35.115я75**

ISBN 978-985-530-497-6

© УО «Белорусский государственный
технологический университет», 2015
© Кравчук А. П., Трусова Е. Е., 2015



ПРЕДИСЛОВИЕ

Учебно-методическое пособие предназначено для студентов специальности 1-48 01 01 «Химическая технология неорганических веществ, материалов и изделий», выполняющих лабораторные работы по дисциплине «Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов в отрасли».

Интенсификация и модернизация действующих производств силикатных материалов, развитие экологически чистых и безотходных технологий, создание энерго- и материалосберегающих химико-технологических процессов невозможно представить без использования современных методов математического моделирования и оптимизации.

Математическое моделирование позволяет прогнозировать поведение объектов в неизвестных ситуациях, изучать многие характеристики проектируемых процессов, оценивать различные варианты реализации химико-технологических процессов, а также использовать математические методы для отыскания оптимальных составов сырьевых смесей и режимов эксплуатации оборудования, обеспечивая существенную экономию времени и материальных ресурсов.

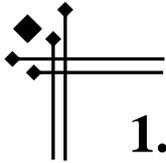
Учитывая сложность и многообразие технологических процессов в производстве силикатных материалов, их моделирование целесообразно выполнять с использованием экспериментально-статистических методов, которым уделяется значительное внимание в практикуме.

Рассматриваемый теоретический материал и лабораторные задания позволят студентам получить навыки статистической обработки экспериментальных данных, получения статистических моделей химико-технологических процессов методами корреляционного и регрессионного анализа, планируемого эксперимента, построения диаграмм «состав – свойство» с помощью симплекс-решетчатых планов Г. Шеффе, оптимизации методами линейного,

нелинейного программирования и с применением функции желательности.

В качестве среды для выполнения заданий предложено использовать программу Mathcad, которая предназначена для проведения разнообразных научных и инженерных расчетов. Обладая большим набором вычислительных средств, программа Mathcad отличается интуитивно понятным интерфейсом, легкостью в изучении и использовании. В данном пособии приведена весьма малая доля возможностей, которыми располагает пользователь при работе с Mathcad. Для более подробного ознакомления с этой программой следует обратиться к специальной литературе.

Основные операторы и функции Mathcad, наиболее часто используемые при выполнении заданий, примеры построения графиков и решения систем алгебраических уравнений представлены в приложениях 1–3.



1. СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ. ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ПРОДУКЦИИ

Цель моделирования и степень полноты знаний об исследуемых химико-технологических процессах (ХТП) определяют тип используемых математических моделей, которые делятся на две группы:

- 1) теоретические (детерминированные, аналитические);
- 2) экспериментально-статистические (эмпирические, стохастические).

Теоретические модели строятся на основе знания механизма протекания ХТП и включают описание «элементарных» процессов, в основе которых лежат материальный и тепловой балансы, записываемые с учетом гидродинамических режимов перемещения веществ, скорости химических реакций, диффузии, теплопередачи, фазовых превращений и т. д. Эти модели обычно пригодны для описания сравнительно простых явлений.

Для исследования, оптимизации и управления ХТП производства силикатных материалов и изделий на их основе в условиях дрейфа показателей производства наибольшие возможности предоставляют экспериментально-статистические модели. Экспериментально-статистическая модель – это уравнение (аппроксимационная зависимость), описывающее опытные данные. Необходимым условием ее построения является проведение экспериментальных исследований, результаты которых обрабатываются с использованием методов теории вероятностей и математической статистики.

При повторных (параллельных) измерениях в большинстве экспериментов получаются отличающиеся друг от друга значения измеряемых величин, которые заранее в большинстве случаев не удастся предсказать, что обусловлено влиянием неучтенных факторов, «шума» объекта, погрешности приборов, субъективности исследователя. Таким образом, результат измерений на сложном объекте является *случайной величиной (СВ)* – величиной, точное

значение которой в предстоящем испытании невозможно предсказать, исходя из условий опыта.

Случайные величины могут быть дискретными и непрерывными.

Дискретными СВ (ДСВ) называются случайные величины, возможные значения которых являются целыми числами. Например, количество рабочих, единиц оборудования, изделий, количество циклов прессования керамической плитки в течение суток и т. д. Возможные значения ДСВ отделены одно от другого интервалами, т. е. в цехе могут работать одна, две, три печи, но не 0,6 или 3,87 печи.

Пусть ДСВ X может принимать в результате опыта значения x_1, x_2, \dots, x_k . Отношение числа опытов m_i , в результате которых СВ X приняла значение x_i , к общему числу произведенных опытов n называется **частотой появления события**. Частота m_i / n сама является СВ и меняется в зависимости от количества произведенных опытов. При большом числе опытов она имеет тенденцию стабилизироваться около некоторого значения p_i , называемого **вероятностью события**:

$$p_i = P(X = x_i) \approx \frac{m_i}{n}.$$

Вероятность события p_i – число, заключенное между 0 и 1, характеризующее среднюю частоту появления в измерениях того или иного значения СВ.

ДСВ можно полностью задать **вероятностным рядом**, указав вероятность p_i для каждого значения x_i (табл. 1).

Таблица 1

Вероятностный ряд ДСВ

Значение СВ x_i	x_1	x_2	...	x_n
Вероятность появления СВ P_i	P_1	P_2	...	P_n

Соотношение, устанавливающее связь между возможными значениями СВ (x_i) и соответствующими им вероятностями (P_i), называется **законом распределения**.

Непрерывные СВ (НСВ) – СВ, принимающие любые значения на некотором промежутке числовой оси (время, температура обжига, давление прессования керамической плитки, расход топлива

на варку стекла, физико-химические свойства получаемого материала и т. д.).

Для НСВ в отличие от ДСВ определяется вероятность того, что в результате опыта ее значение попадет в некоторый интервал, поскольку вероятность того, что НСВ *точно* примет заданное значение, равна нулю (число значений, которые может принять НСВ, весьма велико). Удобно пользоваться вероятностью событий $X < x$, где x – произвольное действительное число, а X – значение НСВ. Эта вероятность является функцией от x :

$$P(X < x) = F(x)$$

и называется **функцией распределения СВ $F(x)$ (интегральной функцией распределения)**.

В виде функции распределения можно задать распределение как НСВ, так и ДСВ (рис. 1).

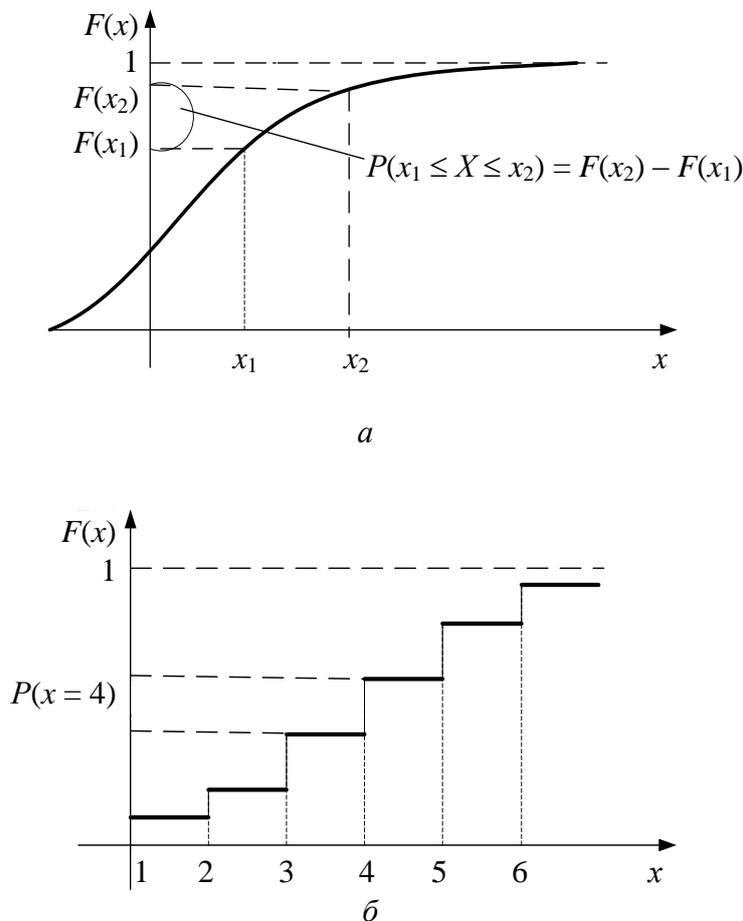


Рис. 1. Функция распределения:
a – НСВ; б – ДСВ

При определении вероятности появления НСВ $P(x_1 \leq X \leq x_2)$ в интервале от x_1 до x_2 с помощью интегральной функции от значения по оси ординат $F(x_2)$, соответствующего x_2 , вычитают $F(x_1)$ (рис. 1, а):

$$P(x_1 \leq X \leq x_2) = F(x_2) - F(x_1).$$

Для функции распределения ДСВ вероятность появления значений СВ равна высоте скачков. На рис. 1, б представлено определение $P(x = 4)$ вероятности того, что x примет значение, равное четырем. Сумма всех скачков функции распределения ДСВ равна 1.

Для характеристики НСВ наряду с интегральной функцией распределения часто употребляется производная функции распределения – *плотность распределения СВ $f(x)$ (дифференциальная функция)* $f(x) = \frac{dF(x)}{dx}$. Пример графического отображения дифференциальной функции представлен на рис. 2, согласно которому вероятность того, что СВ примет значения из интервала x_1-x_2 , $P(x_1 \leq X \leq x_2)$ равна площади фигуры, ограниченной осью x , прямыми $X = x_1$ и $X = x_2$ и кривой дифференциальной функции распределения:

$$F(x) = P(x_1 \leq X \leq x_2) = \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx = F(x_1) - F(x_2).$$

В прикладных задачах вместо полного определения соотношения между СВ и значением соответствующей вероятности в виде законов распределения часто находят *числовые характеристики*.

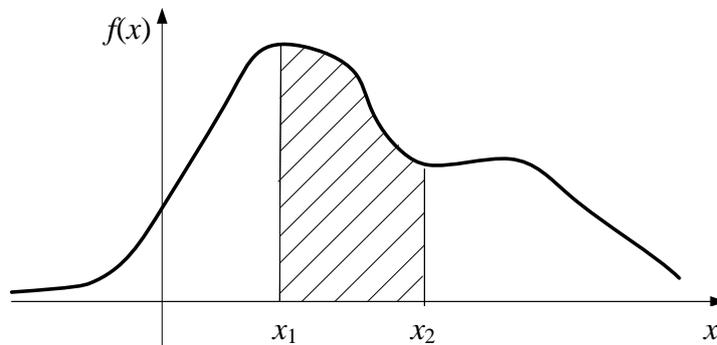


Рис. 2. Дифференциальная функция распределения НСВ

Рассмотрим ниже некоторые из них: начальный и центральный моменты случайной величины.

Для НСВ *начальный момент* k -го порядка определяется следующей формулой:

$$m_k = \int_{-\infty}^{\infty} x^k \cdot f(x) dx.$$

Начальный момент первого порядка ($k = 1$) называется *математическим ожиданием* СВ и для НСВ выражается интегралом:

$$m_x = M[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot f(x) dx.$$

Математическое ожидание характеризует центр рассеивания СВ.

Также применяются центральные моменты. *Центральный момент* k -го порядка для НСВ рассчитывается по формуле

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{\infty} (x - m_x)^k \cdot f(x) dx.$$

Дисперсия СВ (второй центральный момент) характеризует разброс значений случайной величины относительно ее центра, т. е. их отклонения от математического ожидания:

$$D[X] = M[(X - m_x)^2].$$

Формула для дисперсии НСВ выглядит следующим образом:

$$D[X] = \int_{-\infty}^{\infty} (x - m_x)^2 \cdot f(x) dx.$$

Среднеквадратическое отклонение вычисляется по формуле

$$\sigma_x = \sqrt{D[x]}.$$

Приведенные выше числовые характеристики СВ справедливы для *генеральной статистической совокупности* – совокупности, содержащей в себе все допустимые значения случайной величины. Учитывая большой объем генеральной совокупности, для ее полного изучения требуется, как правило, много времени и средств, поэтому экспериментальные исследования проводят на некоторой части генеральной совокупности, так на-

зываемой **выборочной статистической совокупности (выборке)**. Для выборки рассчитывают числовые характеристики, которые не совпадают в точности с соответствующими характеристиками генеральной совокупности, поскольку их значения зависят от того, какой объект выбран для измерений. Две выборки, принадлежащие одной и той же генеральной совокупности, дают несколько различающихся значений числовых характеристик. Выборочные характеристики являются не точными значениями, а *оценками числовых характеристик генеральной совокупности*.

На практике используются следующие оценки:

1) **среднее значение** – является оценкой математического ожидания:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i,$$

где n – число измерений; x_i – результаты измерений;

2) **выборочная дисперсия** – является оценкой дисперсии СВ и показывает разброс значений относительно среднего:

$$S^2 = \frac{1}{\nu} \cdot \sum_{i=1}^n (\bar{x} - x_i)^2,$$

где $\nu = n - 1$ – число степеней свободы, определяемое как общее число измерений n за вычетом числа оценок, уже рассчитанных по этим измерениям (в данном случае ранее была найдена одна оценка – среднее арифметическое \bar{x}) и применяемых при расчете рассматриваемой характеристики;

3) **стандартное отклонение** – является оценкой среднеквадратического отклонения СВ:

$$S = \sqrt{S^2};$$

4) **относительное стандартное отклонение:**

$$E = \frac{S}{\bar{x}} \cdot 100\%.$$

Относительное стандартное отклонение всегда измеряется в процентах и используется для того, чтобы иметь возможность сопоставить рассеивание нескольких СВ, измеряемых в различных физических единицах.

Одной из решаемых задач является определение по экспериментальным данным закона распределения случайной величины и расчет его числовых характеристик (параметров), что необходимо для выбора того или иного корректного статистического метода решения технологической задачи.

Наиболее часто результаты измерений НСВ показателей качества продукции (отклонения размеров керамической плитки, прочность бетона при изгибе, светопропускание, водостойкость листового стекла и т. д.) в производстве строительных материалов подчиняются **нормальному закону распределения** (закону распределения Гаусса) с параметрами \bar{x} и S .

Дифференциальная функция распределения СВ для нормального закона имеет вид

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot S^2}} \cdot e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2 \cdot S^2}},$$

где S – стандартное отклонение; \bar{x} – математическое ожидание СВ.

Графическое отображение двух нормальных кривых (дифференциальной функции нормального закона распределения СВ), или кривых Гаусса, для СВ x_1 и x_2 представлено на рис. 3. Согласно кривым нормального распределения, наименьшая вероятность появления НСВ x_1 и x_2 соответствует их значениям, которые максимально удалены от $x_{\text{ср}}$ и наоборот.

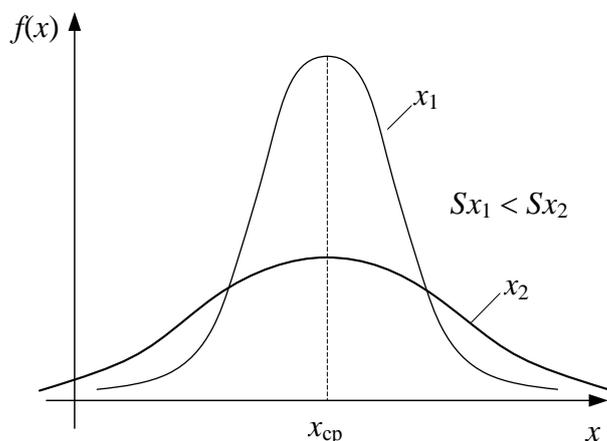


Рис. 3. Кривая Гаусса при разных значениях стандартного отклонения

При увеличении значения выборочной дисперсии СВ и, соответственно, ее стандартного отклонения S_2 по сравнению с S_1 , что обусловлено ростом разброса значений НСВ относительно среднего, изменяется форма кривой Гаусса – она становится более пологой, как это видно для кривой СВ x_2 (см. рис. 3 на с. 11). Суммарная площадь под кривыми не меняется и остается равной единице.

Если после статистической обработки выявлено, что результаты экспериментальных измерений показателей качества продукции подчиняются нормальному закону распределения, тогда их можно использовать для нахождения доли продукции, не соответствующей регламентируемым показателям, или доли брака B . На показатель качества накладывается ограничение $x_{ст}$, регламентированное стандартом, тогда относительную долю дефектной продукции (брака) B можно рассчитать по показателю качества P_k :

$$P_k = \frac{|x_{ст} - \bar{x}|}{S}$$

С использованием значения P_k по таблице (прил. 4) находят значение доли брака B .

Задание для студентов специализации «Химическая технология вяжущих материалов»

Проведена серия измерений механической прочности при сжатии образцов стоматологического материала для пломбирования корневых каналов зубов. Полученные значения приведены в табл. 2.

Таблица 2

Прочность при сжатии образцов стоматологического материала

Номер испытания	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Предел прочности при сжатии, МПа	44,0	47,2	45,8	41,2	49,1	41,8	44,8	47,6	45,8	48,1
Номер испытания	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Предел прочности при сжатии, МПа	43,5	45,2	42,3	44,6	46,8	48,5	45,3	49,5	51,5	45,5

Задание для студентов специализации «Технология стекла и ситаллов»

При проведении серии измерений в течение суток на поточной линии по производству листового полированного стекла флоат-методом определен коэффициент направленного пропускания света (Т, %) для стекла толщиной 3 мм. Полученные значения представлены в табл. 3.

Таблица 3

Результаты измерения коэффициента направленного пропускания света

Номер испытания	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Т, %	87,2	89,1	87,5	90,3	86,6	86,2	86,7	89,4	89,9	90,1
Номер испытания	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Т, %	86,5	84,2	88,3	87,1	85,3	86,9	84,8	87,5	88,2	85,6

Задание для студентов специализации «Технология тонкой функциональной и строительной керамики»

При выполнении серии измерений в течение суток на производстве керамической плитки для облицовки стен определена влажность керамической плитки после сушки в вертикальной касетной сушилке типа EVA 793. Полученные значения приведены в табл. 4.

Таблица 4

Результаты измерения влажности керамической плитки после сушки

Номер измерения	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Влажность, %	0,9	0,6	0,9	0,85	0,7	0,7	1,0	0,7	0,85	1,1
Номер измерения	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Влажность, %	0,85	0,9	0,8	0,75	0,9	0,7	0,5	0,75	0,85	0,9

Провести статистический анализ результатов экспериментальных исследований:

– определить статистические характеристики выборки: минимальное и максимальное значения, среднее значение выборки,

выборочную дисперсию, стандартное отклонение, относительное стандартное отклонение;

– построить графики дифференциальной и интегральной функций нормального распределения СВ;

– построить гистограмму распределения НСВ и сделать вывод о частоте появления ее значений, близких к среднему;

– определить долю продукции, не соответствующей требованиям;

– на основе полученных данных сделать вывод.



◆◆ Порядок выполнения задания

1. Записать **ORIGIN:=1** (нумерация во всех записываемых ниже этого выражения массивах будет начинаться с единицы, что удобно при дальнейших расчетах).

2. Ввести исходные данные в виде вектор-столбца σ (наименование переменной может быть любым и задается пользователем по смыслу):

$$\sigma := (\quad)$$

3. Пересчитать значения результатов измерений, представленные в вектор-столбце σ , согласно своему варианту (номер варианта соответствует номеру компьютера), по формуле

$$\sigma := \sigma + 0.05 \cdot n$$

где n – порядковый номер компьютера.

Результаты расчета по формуле необходимо вывести, используя следующую форму записи:

$$\sigma =$$

4. Провести сортировку элементов вектор-столбца σ в порядке возрастания, используя функцию Mathcad **sort(σ)**:

$$\sigma := \text{sort}(\sigma)$$

5. Определить количество элементов выборки с помощью функции:

$$n := \text{length}(\sigma)$$

6. Найти статистические характеристики выборки с помощью функций Mathcad: минимальное и максимальное значения (**min**(σ), **max**(σ)), математическое ожидание (среднее значение в выборке – **mean**(σ)). Расчеты следует выполнять с присваиванием имен каждой переменной; например, для определения минимального значения в выборке возможна следующая форма записи:

$$\begin{aligned} \mathbf{mn} &:= \mathbf{min}(\sigma) \\ \mathbf{mn} &= \end{aligned}$$

7. Выборочную дисперсию, стандартное отклонение и относительное стандартное отклонение СВ рассчитать с помощью формул, представленных в теоретической части (см. на с. 10).

Важно! Запись формул необходимо осуществлять в соответствии с правилами Mathcad, при этом следует учитывать, что переменным присвоены другие имена. Так, результаты измерений – случайная величина x имеет обозначение σ .

Например, формула для расчета выборочной дисперсии

$$S^2 = \frac{1}{n-1} \cdot \sum_{i=1}^n (\bar{x} - x_i)^2$$

в Mathcad будет записываться следующим образом:

$$\mathbf{S2} := \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{n-1}} \cdot \sum_{i=1}^{\mathbf{n}} (\mathbf{mean}(\sigma) - \sigma_i)^2$$

Обозначение переменной – выборочной дисперсии S^2 в Mathcad будет читаться как возведение в степень переменной S , поэтому произведена замена ее имени на **S2**; можно также использовать другое имя для выборочной дисперсии.

8. Построить графики дифференциальной **d**(σ) и интегральной **p**(σ) функций для нормального закона распределения СВ σ :

– рассчитать значения дифференциальной и интегральной функций распределения НСВ с помощью встроенных функций Mathcad:

а) **d:=dnorm**(σ , **mean**, **S**) – возвращает вектор значений дифференциальной функции нормального закона распределения НСВ из вектор-столбца σ при среднем арифметическом, равном **mean** (следует указать имя переменной, которая использовалась при расчете среднего значения), и среднеквадратическом отклонении **S**;

б) $\mathbf{p}:=\mathbf{pnorm}(\sigma, \mathbf{mean}, \mathbf{S})$ – возвращает вектор значений интегральной функции нормального закона распределения;

– вызвать двухмерный график ($\mathbf{X}-\mathbf{Y}$);

– записать по оси ординат \mathbf{d}, \mathbf{p} , а по оси абсцисс – σ . На графике появятся дифференциальная и интегральная кривые нормального закона распределения НСВ σ .

9. Построить гистограммы распределения НСВ в зависимости от числа и частоты их попадания в соответствующие интервалы с помощью функции $\mathbf{H}:=\mathbf{histogram}(\mathbf{M}, \sigma)$, где \mathbf{M} – количество интервалов, на которые разбивается диапазон изменения СВ (задается самостоятельно, например может быть 10). Функция возвращает матрицу, состоящую из двух столбцов. Первый столбец содержит интервалы, на которые разбивается диапазон значений СВ, второй – число попадающих в них данных.

Для отображения графика на основе полученной матрицы в виде гистограммы необходимо:

– построить двухмерный график ($\mathbf{X}-\mathbf{Y}$);

– записать по оси ординат $\mathbf{H}^{<2>}$ (обращение ко второму столбцу матрицы \mathbf{H}), по оси абсцисс – $\mathbf{H}^{<1>}$;

– перейти в режим форматирования и выбрать вкладку **Traces**;

– раскрыть список **Type** и выбрать тип диаграммы **bar**.

Если необходимо отображать на гистограмме не число, а частоту попаданий данных в соответствующие интервалы, выполняют расчет частоты:

$$\mathbf{v}:=\frac{\mathbf{H}^{<2>}}{\mathbf{n}}$$

где \mathbf{n} – количество измерений.

После чего строят гистограмму, записывая по оси ординат имя переменной \mathbf{v} .

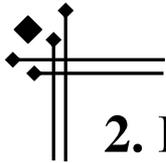
10. Определить долю продукции, не соответствующей требованиям:

– самостоятельно задать регламентируемое значение $\sigma_{\text{ст}}$;

– рассчитать значение показателя качества \mathbf{P}_k по формуле, записанной в теоретической части (см. на с. 12);

– по таблице, приведенной в приложении 1, установить долю продукции, не соответствующей предъявляемым требованиям.

11. Сделать выводы на основе полученных результатов.



2. ПРОВЕРКА СТАТИСТИЧЕСКИХ ГИПОТЕЗ

Одним из важных этапов построения экспериментально-статистических моделей ХТП является проведение исследований на моделируемом объекте. Чаще всего измерения проводят таким образом, что из всей совокупности объектов (*генеральная совокупность*) измеряется только лишь некоторое сравнительно небольшое их число (*выборка*). Это обусловлено тем, что генеральная совокупность слишком велика и измерить все объекты не представляется возможным или потребует значительных материальных и временных затрат. Например, изучение химического состава сырьевых материалов, поступающих на предприятие, в каждой партии, в каждом биг-бэге, мешке является весьма трудоемкой задачей. Поэтому в лаборатории контроля качества периодически определяют химический состав отдельных проб (выборка), отобранных из всей партии специальным образом, что позволяет судить о содержании компонентов во всей партии сырьевого материала (генеральной совокупности).

Выборка должна давать достаточное представление о генеральной совокупности, т. е. быть представительной (репрезентативной). В этой связи часто возникает вопрос о том, правильными ли будут результаты, полученные для выборки (выборки), перенести на генеральную совокупность.

Предположения о свойствах генеральной совокупности той или иной случайной величины называются *статистическими гипотезами*.

В общем случае основная выдвинутая гипотеза называется *нуль-гипотезой* H_0 . Противоречащие ей гипотезы H_i называют *альтернативными*, или конкурирующими.

Нуль-гипотеза H_0 : между выборками нет существенной разницы, они принадлежат одной генеральной совокупности, а имеющиеся различия обусловлены статистическим характером выборок, например влиянием случайных ошибок.

Если соблюдается нуль-гипотеза, тогда в большинстве случаев обе выборки объединяют в одну, поскольку любые их числовые характеристики (оценки) будут оценками одних и тех же генеральных (истинных) значений.

Противоположная, или **альтернативная, гипотеза H_1** : выборки относятся к разным генеральным совокупностям. Различия между ними обусловлены не только влиянием случайных причин, но и по существу.

Проверка статистических гипотез осуществляется с помощью **статистических критериев C_r** (например, критерий Пирсона χ^2 , критерий Колмогорова λ , критерий Фишера F , критерий Кохрена G , критерий Стьюдента t), назначаемых в зависимости от формулировки гипотезы H .

Перенос характеристик и свойств выборки на генеральную совокупность может быть осуществлен лишь с некоторой вероятностью, что предполагает возможность заключения ошибочных выводов. При проверке гипотез могут возникнуть ошибки двух родов. Если будет *отвергнута правильная гипотеза*, то совершается **ошибка первого рода**, если будет *допущена неправильная гипотеза*, то совершается **ошибка второго рода**.

Вероятность допустить ошибку первого рода называется **уровнем значимости** и обозначается α . С уровнем значимости связана величина $p = 1 - \alpha$, называемая **доверительной вероятностью**, которая характеризует надежность принятой гипотезы.

Вероятность ошибки второго рода обозначается β , а величина $p = 1 - \beta$ называется **мощностью критерия**. Чем больше эта мощность, тем меньше вероятность совершить ошибку второго рода.

В задачах статистического моделирования обычно устанавливают некоторое значение α или p и выбирают статистический критерий C_r так, чтобы минимизировать β . Выбор p и α определяется свойствами объекта исследования, точностью измеряемых средств и назначением получаемых результатов. При проведении экспериментальных исследований процессов, связанных с получением строительных материалов, доверительная вероятность p обычно принимается 0,95, т. е. с вероятностью 0,95 считается, что принятая гипотеза является достоверной или истинной, однако существует вероятность 0,05, что отвергнута правильная гипотеза. Если

принимается особо ответственное решение, то значение доверительной вероятности считается равным 0,99 ($\alpha = 0,01$) и более.

Процедура проверки гипотез состоит из следующих этапов:

- 1) по выборочным данным рассчитывают критерий проверки;
- 2) полученное значение критерия сравнивают с критическим значением, которое находят из таблиц. Критическое значение каждого конкретного критерия определяется уровнем значимости и числом степеней свободы, по которому были рассчитаны величины, входящие в критерий. Таблицы критических значений имеются в литературе по статистике и теории эксперимента, некоторые из них приведены в пособии.

Рассмотрим некоторые часто встречающиеся гипотезы и критерии для их проверки.

Гипотеза о нормальности закона распределения СВ. После проведения измерений величин (сбора исходных данных), которые необходимы для построения модели ХТП, часто возникает задача, согласно которой необходимо установить, являются ли результаты наблюдений y_1, y_2, \dots, y_N независимыми нормально распределенными случайными величинами (соблюдается ли для результатов наблюдений нормальное распределение).

Проверку этой гипотезы можно проводить при помощи критерия Пирсона χ^2 или критерия Колмогорова λ .

Критерий Пирсона χ^2 . Предположим, что в результате исследований выборки СВ объемом n были получены ее значения x_i .

Требуется проверить, что распределение значений наблюдаемой СВ x соответствует нормальному.

Суть использования критерия Пирсона для проверки заключается в сравнении *теоретических* и *эмпирических частот*. Эмпирические частоты n_i (количество значений СВ, попадающих в заданный интервал) находят для каждого значения СВ в выборке. Теоретические частоты n'_i вычисляются с помощью формул для теоретической функции нормального распределения.

Проверку закона распределения при использовании критерия χ^2 проводят в следующем порядке:

- весь диапазон значений СВ в выборке объемом n (n – количество значений) равномерно разбивают на k интервалов. Число k обычно берут в зависимости от объема выборки в интервале от 8 до 20;

– определяют число элементов выборки (значений СВ), попавших в i -й интервал, получая таким образом *экспериментальный ряд частот* – $n_1, n_2, n_3, \dots, n_k$;

– для определения *теоретического ряда частот*:

а) рассчитывают дискретный ряд распределения по формуле

$$x_i^* = \frac{x_{i\text{лев}} + x_{i\text{прав}}}{2},$$

где x_i^* – среднее арифметическое концов каждого интервала; $x_{i\text{лев}}, x_{i\text{прав}}$ – границы соответственно левого и правого i -го интервала;

б) вычисляют оценки параметров нормального распределения: \bar{x}^* – среднее арифметическое и S^* – выборочное среднеквадратическое отклонение:

$$\bar{x}^* = \frac{1}{n} \cdot \sum x_i^* \cdot n_i,$$
$$S^* = \sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum (x_i^*)^2 \cdot n_i - (\bar{x}^*)^2};$$

в) определяют теоретические вероятности попадания СВ в i -й интервал:

$$p_i = \Phi\left(\frac{x_{i\text{прав}} - \bar{x}^*}{S^*}\right) - \Phi\left(\frac{x_{i\text{лев}} - \bar{x}^*}{S^*}\right),$$

где $\Phi(x)$ – функция Лапласа, которая находится с помощью таблиц;

г) вычисляют теоретические частоты:

$$n_i' = n \cdot p_i;$$

– для проверки согласованности теоретического и экспериментального распределения подсчитывают меру расхождения:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^k \frac{(n_i - n_i')^2}{n_i'}$$

а также число степеней свободы:

$$v = k - f,$$

где f – число ограничений. Число ограничений равно числу параметров распределения, увеличенному на единицу (например, нормальный закон распределения имеет два параметра (математическое ожидание и стандартное отклонение));

– пользуясь таблицами, составленными для критерия Пирсона, при заданном уровне значимости, как правило 0,05, и известном числе степеней свободы определяют $\chi^2_{кр}$;

– сравнивают табличное значение $\chi^2_{кр}$ с расчетным χ^2 . Если $\chi^2 < \chi^2_{кр}$, тогда принимают нулевую гипотезу о нормальности распределения экспериментальной СВ при заданном уровне значимости. Если $\chi^2 > \chi^2_{кр}$, гипотеза о нормальном распределении СВ отвергается и следует подобрать другое теоретическое распределение.

Критерий Колмогорова λ . Критерий Пирсона применяют только в тех случаях, когда число наблюдений $n \geq 25$. Если теоретические значения параметров распределения известны, то лучшим критерием является критерий Колмогорова.

Для расчета критерия Колмогорова выполняют следующие действия:

1) как и для критерия Пирсона определяют теоретический и экспериментальный ряд частот;

2) рассчитывают накопленные суммы теоретических и эмпирических частот, которые образуются путем прибавления последующих частот к сумме предыдущих;

3) составляют разность между накопленными теоретическими и эмпирическими суммами и находят максимальное значение этой разности, вычисляя величину D по формуле

$$D_{\max} = \frac{\sum_{i=1}^k (n_i - n_{iT})}{\sum_{i=1}^k n_i} = \max |F_n(x) - F(x)|,$$

где $|F_n(x) - F(x)|$ – разность функций экспериментального и теоретического распределения СВ;

4) рассчитывают коэффициент λ , используя следующую формулу:

$$\lambda = D_{\max} \cdot \sqrt{n};$$

5) пользуясь таблицами, составленными для критерия Колмогорова, при заданном уровне значимости α , как правило 0,2–0,3 (доверительная вероятность 0,7–0,8), определяют $\lambda_{1-\alpha}$;

б) сравнивают табличное значение $\lambda_{1-\alpha}$ с расчетным λ . Если $\lambda < \lambda_{1-\alpha}$, тогда принимают нулевую гипотезу о нормальности распределения экспериментальной СВ при заданном уровне значимости.

Проверка наличия грубой ошибки в результатах измерений. Часто возникает вопрос о том, следует ли отвергать некоторые результаты эксперимента, резко отличающиеся от остальных. Если эти результаты получены из-за грубой ошибки, то их необходимо отбросить.

Нуль-гипотеза имеет вид: подозрительный результат относится к той же генеральной совокупности, что и остальные. Альтернативная: этот результат порожден грубой ошибкой и должен быть исключен из дальнейшей обработки данных.

Для проверки гипотезы о наличии грубой ошибки используются разные статистические критерии, разберем один из них. Предполагается, что результаты измерений подчиняются нормальному закону распределения.

Критерий υ :

$$\upsilon = \frac{|x_{\text{под}} - \bar{x}|}{S \cdot \sqrt{\frac{n-1}{n}}},$$

где $x_{\text{под}}$ – «подозрительный» результат (наибольший или наименьший); \bar{x} – среднее арифметическое; S – стандартное отклонение (при этом в расчет \bar{x} и S включается «подозрительный» результат); n – количество измерений.

Значение критерия υ сравнивают с табличным, полученным при заданных значениях уровня значимости α и числа степеней свободы $\nu = n - 1$. Если полученное значение υ больше значения, соответствующего табличному $\upsilon_{\text{кр}}$ при данном n с заданным уровнем значимости, например 0,05, то исследуемое наблюдение следует отбросить, если $\upsilon < \upsilon_{\text{кр}}$, то его следует оставить.

После проверки на наличие грубой ошибки в выборке необходимо пересчитать ее статистические оценки (среднее арифме-

тическое, выборочную дисперсию и т. д.) без отброшенного наблюдения.

Сравнение дисперсий (проверка однородности). Эта задача часто встречается при обработке результатов измерений, сравнении их точности. Например, имеются две выборки, средние значения в которых равны \bar{x}_1 и \bar{x}_2 , а выборочные дисперсии – S_1^2 и S_2^2 . Необходимо определить, являются ли данные дисперсии значимо различными или же выборки можно рассматривать как взятые из генеральных совокупностей с равными дисперсиями. Основная гипотеза, которая при этом проверяется: можно ли считать сравниваемые выборочные дисперсии оценками одной и той же генеральной дисперсии.

Если СВ является нормально распределенной, для проверки гипотезы об однородности выборочных дисперсий, рассчитанных для значений СВ из двух выборок, используется **критерий Фишера**, который равен

$$F = \frac{S_1^2}{S_2^2},$$

где S_1^2 , S_2^2 – выборочные дисперсии, имеющие степень свободы соответственно ν_1 и ν_2 , при этом должно выполняться условие $S_1^2 > S_2^2$, здесь S_1^2 – большая величина выборочной дисперсии в двух выборках.

Найденное значение сравнивается с табличным значением $F_{кр}$ при заданном уровне значимости p и степенях свободы $\nu_1 = n_1 - 1$ и $\nu_2 = n_2 - 1$. Если $F < F_{кр}$, тогда принимается гипотеза об однородности (равенстве) выборочных дисперсий.

Однородность дисперсий нескольких выборок проверяется с помощью **критерия Кохрена** по формуле

$$G = \frac{S_{\max}^2}{\sum_{u=1}^N s_u^2},$$

где S_{\max}^2 – максимальная дисперсия; $\sum_{u=1}^N s_u^2$ – сумма всех дисперсий выборок; N – число выборок; n – номер выборки.

Если расчетное значение G больше табличного $G_{кр}$ (при уровне значимости α и степенях свободы $\nu_1 = n_1 - 1$ для числителя и ν_2

= N для знаменателя), то гипотеза об однородности (равенстве) дисперсий отвергается.

Однородные выборочные дисперсии можно усреднить, т. е. найти единую оценку дисперсии по всей совокупности измерений:

$$S^2 = \frac{\sum_{i=1}^n v_i \cdot S_i^2}{\sum_{i=1}^n v_i}.$$

Сравнение двух выборочных средних значений СВ. Нуль-гипотеза: средние значения в двух сериях измерений являются оценками одного и того же генерального значения (математического ожидания, истинного значения).

Если дисперсии однородны и найдена общая оценка, тогда проверка двух средних проводится по **критерию Стьюдента**:

$$t = \frac{|\bar{x}_1 - \bar{x}_2|}{S \cdot \sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}}},$$

где S – единая оценка среднеквадратичного отклонения по всей совокупности измерений; n_1, n_2 – количество измерений соответственно в первой и второй выборках.

Критическое значение $t_{кр}$ определяется по таблице в зависимости от ν и α . При выполнении условия $t_{кр} > t$ соблюдается нуль-гипотеза.

Процедура сравнения средних резко усложняется, если серии измерений, в которых получены средние, сделаны с разной точностью (с разными дисперсиями). В этих случаях рекомендуют специальные методы.

**Задание 1 для студентов специализаций
«Химическая технология вяжущих материалов»,
«Технология стекла и ситаллов», «Технология тонкой
функциональной и строительной керамики»**

Для результатов определения механической прочности образцов стоматологического материала для пломбирования корневых

каналов зубов (см. табл. 2 на с. 12), коэффициента направленного пропускания света полированного стекла (см. табл. 3 на с. 13), влажности керамической плитки после сушки (см. табл. 4 на с. 13), представленных в разделе 1, провести проверку гипотезы о нормальности распределения значений с помощью критерия Колмогорова.



◆◆ Порядок выполнения задания 1

1. Присвоить **ORIGIN:=1**.
2. Ввести исходный вектор-столбец, содержащий экспериментальные данные (см. раздел 1).
3. Провести разбивку области изменения СВ от минимального до максимального значений на десять равных интервалов и определить количество значений выборки, попадающих в каждый полученный интервал:
 - задать количество интервалов, на которые разбивается диапазон изменения СВ **M:=10**;
 - записать выражение **am:=histogram(M, σ)**, где **σ** – значения СВ, для которой осуществляется разбивка. Функция возвращает матрицу, состоящую из двух столбцов. Первый столбец содержит границы интервалов, на которые разбивается диапазон значений СВ, второй – количество значений СВ, попадающих в них.
4. Задать массив столбца **a:=(y 0)**, где **y** – значения, представленные в первом столбце и строке массива **am**, вычесть величину интервала между первым и вторым элементом массива **am**.
5. Объединить массив **am** и вектор-столбец **a**, используя встроенную функцию Mathcad **stack**:

$$\mathbf{am}:=\mathbf{stack}(\mathbf{a}, \mathbf{am})$$

6. Сформировать из полученного массива **am** два отдельных вектора, содержащих границы интервалов **x** и число значений выборки **m**, попадающие в эти интервалы. Для этого следует записать выражения **x:=am^{<1>}** (Mathcad обратится к первому столбцу в массиве **am**) и **m:=am^{<2>}**.

7. Определить сумму элементов вектора \mathbf{m} , содержащего количество значений выборки, попадающих в i -й интервал (экспериментальные частоты), обозначив ее как \mathbf{n} .

8. Для установления *теоретической функции распределения значений СВ*:

– вычислить выборочные среднее, дисперсию и среднеквадратическое отклонение по формулам

$$\begin{aligned} \text{хсп} &:= \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{10} \frac{(x_i + x_{i+1}) \cdot m_{i+1}}{2} \\ \text{хсп2} &:= \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{10} \left(\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2} \right)^2 \cdot m_{i+1} \right) \\ \text{S2} &:= \frac{n}{n-1} \cdot (\text{хсп2} - \text{хсп}^2) \\ \text{S} &:= \sqrt{\text{S2}} \end{aligned}$$

– рассчитать интегральную функцию распределения \mathbf{F} , используя функцию $\mathbf{pnorm}(\mathbf{x}, \mathbf{хсп}, \mathbf{S})$, и представить ее графически.

9. Для нахождения *экспериментальной функции распределения значений СВ*:

– определить накопленные экспериментальные частоты \mathbf{v} (получают суммированием каждого предыдущего элемента вектора \mathbf{m} с последующим). Например, если вектор \mathbf{m} имеет вид, как представлено ниже, тогда вектор накопленных частот \mathbf{v} будет выглядеть так:

	1
1	0
2	1
3	1
4	3
5	10
6	8
7	9
8	1
9	0
10	2

 $\mathbf{m} =$
 $\mathbf{v} :=$

0
1
2
5
15
23
32
33
33
35

– рассчитать накопленные относительные частоты F_n :

$$F_n := \frac{v}{n}$$

10. Определить максимальную разность накопленных экспериментальных и теоретических относительных частот ($F_n - F$):

– записать выражение $D := \overline{|F_n - F|}$ (Mathcad построено вычитет от значений, представленных в вектор-столбце F , значения, записанные в вектор-столбце F_n по модулю;

– вычислить максимальное значение в вектор-столбце D :

$$D_{\max} := \max(D)$$

11. По формуле, приведенной в теоретической части (см. на с. 21), рассчитать критерий Колмогорова и сравнить его с табличным значением $\lambda_{1-\alpha}$, которое находят по приложению 5, принимая уровень значимости равным $\alpha = 0,2-0,3$. Если $\lambda < \lambda_{1-\alpha}$, тогда с вероятностью $p = 1 - \alpha$ результаты измерений следует считать нормально распределенными.

Задание 2 для студентов специализации «Химическая технология вяжущих материалов»

Проведено 11 измерений механической прочности при сжатии высокообжигового гипсового вяжущего через 28 сут разными методами. Из них 5 – известным надежным методом, 6 – новым, который сопоставляется с известным.

Механическая прочность при сжатии высокообжигового гипсового вяжущего через 28 сут, МПа:

Известный метод	38,2	36,3	34,3	35,8	36,5	–
Новый метод	35,7	38,9	33,4	34,2	36,5	36,7

Задание 2 для студентов специализации «Технология стекла и ситаллов»

Проведено 11 измерений оптических искажений ветровых закаленных стекол (дуга) разными методами. Из них 5 – извест-

ным надежным методом, б – новым, который сопоставляется с известным.

Оптические искажения ветровых закаленных стекол, мм:

Известный метод	2,2	2,5	2,3	2,8	2,5	–
Новый метод	2,7	2,6	2,4	2,2	2,5	2,7

Задание 2 для студентов специализации «Технология тонкой функциональной и строительной керамики»

Проведено 11 измерений механической прочности при изгибе образцов керамической плитки для пола толщиной 9 мм разными методами. Из них 5 – известным надежным методом, б – новым, который сопоставляется с известным.

Прочность керамической плитки для пола при изгибе, МПа:

Известный метод	25,2	24,3	24,3	25,8	25,5	–
Новый метод	25,7	26,9	24,4	25,2	25,5	25,7

Необходимо проверить результаты измерений на наличие грубых ошибок, сравнить оба метода друг с другом.



Порядок выполнения задания 2

1. Представить выборки в виде двух вектор-столбцов. Наименования переменных выбрать самостоятельно.

2. Пересчитать значения в вектор-столбцах в соответствии со своим вариантом по формуле

$$i:=i+0.5 \cdot N$$

где i – наименование вектор-столбца; N – номер компьютера.

3. Рассчитать статистические характеристики выборок (среднее, выборочную дисперсию, стандартное отклонение, используя формулы, приведенные в разделе 1 (см. на с. 10)).

4. Проверить статистическую гипотезу о грубой ошибке для результатов измерений с помощью критерия ν , используя формулу, представленную в теоретической части раздела 2 (см. на с. 22).

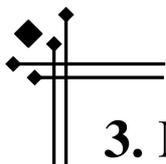
5. Оценить однородность дисперсий с помощью критерия Фишера и определить единую оценку дисперсии для всей совокупности измерений.

6. Провести сравнение средних с помощью критерия Стьюдента.

Уровень значимости принять равным 0,05. Табличные значения критериев ν , Фишера и Стьюдента указаны в приложениях 6–8 соответственно.

7. Сделать выводы на основе полученных результатов, в которых следует охарактеризовать:

- наличие (отсутствие) грубых ошибок в результатах измерений, полученных новым и известным методом;
- результаты проверки однородности дисперсий;
- являются ли сравниваемые средние оценкой генерального значения.



3. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Измеренное значение любой физической величины никогда не соответствует ее истинному значению, поскольку полученные результаты всегда содержат некоторую ошибку. Особенно существенно проявляются отклонения измеренных значений в показателях механических свойств (предел прочности, микротвердость и т. п.). Для оценки данных показателей проводят серию измерений.

Различают следующие основные виды ошибок измерений.

Систематические ошибки. Величины систематических ошибок остаются постоянными в серии измерений, выполненных одним и тем же методом с помощью одного и того же прибора. Такие ошибки обычно связаны с ограниченной точностью измерительных приборов. Причины, вызывающие систематические ошибки, в большинстве случаев известны, поэтому ошибки могут быть исключены изменением метода измерений, введением поправок к показаниям приборов и т. д.

Случайные ошибки. Величины случайных ошибок изменяются от опыта к опыту и остаются непостоянными даже в серии измерений, выполненных одним и тем же методом в одинаковых условиях эксперимента. Случайные ошибки вызываются большим числом случайных причин, действие которых на каждое измерение различно и не может быть заранее учтено. Такие ошибки могут быть обусловлены ошибками экспериментатора, наличием скрытых дефектов в образцах, погрешностями измерений размеров образцов и т. д.

Теория случайных погрешностей базируется на двух основных положениях (аксиомах).

1. При большом числе измерений случайные погрешности одинаковой величины, но разного знака встречаются одинаково часто.

2. Большие (по абсолютной величине) погрешности встречаются реже, чем малые, т. е. вероятность появления погрешности уменьшается с ростом величины погрешности.

Допустим, что было проведено n измерений некоторой величины, истинное значение x которой нам неизвестно. Обозначим через x_1, x_2, \dots, x_n результаты отдельных измерений, а через $\Delta x_i^* = x - x_i$ — истинную абсолютную погрешность i -го измерения. Тогда $x_i = x - \Delta x_i^*$ и, соответственно,

$$\sum_{i=1}^n x_i = n \cdot x - \sum_{i=1}^n \Delta x_i^*,$$

или

$$x = \bar{x} + \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \Delta x_i^*.$$

Если число измерений n достаточно велико ($n \rightarrow \infty$), то согласно теории случайных погрешностей

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \Delta x_i^* = 0,$$

поскольку в серии из большого числа измерений всякой положительной погрешности должна соответствовать равная ей по абсолютной величине отрицательная погрешность.

Таким образом, при $n \rightarrow \infty$ $x = \bar{x}$, т. е. при бесконечно большом числе измерений истинное значение измеряемой величины равно среднеарифметическому значению \bar{x} всех результатов измерений данной серии. Однако на практике число обычно проводимых измерений ограничено ($n \neq \infty$), и, следовательно, среднеарифметическое значение \bar{x} отличается от истинного значения x . Необходимо оценить величину расхождения $\Delta x = x - \bar{x}$, т. е. *величину абсолютной погрешности результатов серии измерений*.

При нормальном распределении случайной величины x ее значение изменяется в пределах: $\bar{x} - \Delta x \leq x \leq \bar{x} + \Delta x$. Интервал $\bar{x} - \Delta x \leq x \leq \bar{x} + \Delta x$ называют **доверительным интервалом**. Истинное значение измеряемой величины x попадает в доверительный интервал с некоторой доверительной вероятностью p . Так, если $p = 0,9$, то это значит, что в 90% измерений значения x будут

отличаться от истинного значения x не более чем на Δx , и лишь для остальных 10% они будут выходить за данный интервал. Следовательно, чем больше доверительная вероятность, тем более широким будет доверительный интервал. Уровень значимости показывает вероятность ошибочного вывода. Например, если $p = 0,95$, то $\alpha = 0,05$, т. е. в одном измерении из 20 значение измеряемой величины может быть больше или меньше значения $x \pm \Delta x$.

При выполнении математической обработки результатов измерений, если их количество $n > 15$, проводят проверку значений измеренных величин на соответствие нормальному распределению с помощью статистических критериев (составного критерия, критерия Пирсона, Мизеса – Смирнова) по ГОСТ 8.207–76 ($50 > n > 15$) или ГОСТ 11.006–74 ($n > 50$).

Если распределение результатов измерений соответствует нормальному, определяют среднее арифметическое величины:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i,$$

где n – число экспериментов; x_i – экспериментальное значение величины.

Вычисляют квадраты погрешностей отдельных измерений:

$$\Delta x^2 = (x_i - \bar{x})^2.$$

Среднеквадратическая погрешность серии измерений определяется по формуле

$$S_n = \sqrt{S_n^2} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n \cdot (n - 1)}}.$$

Если один из результатов измерений резко отличается от остальных, проверяют гипотезу о наличии грубой ошибки, т. е. не является ли измеренное значение грубой ошибкой (промахом), с помощью критерия v :

$$v = \frac{|x_{\text{под}} - \bar{x}|}{S_n \cdot \sqrt{n}},$$

где $x_{\text{под}}$ – «подозреваемый» на промах результат.

Сравнивают табличное $\upsilon_{\text{табл}}$ (прил. 6) и расчетное значение критерия υ при заданном значении p . Если $\upsilon < \upsilon_{\text{табл}}$, тогда грубые погрешности отсутствуют. При $\upsilon \geq \upsilon_{\text{табл}}$ результат измерения является грубой погрешностью. В этом случае его исключают из рассмотрения и заново вычисляют \bar{x} и S_n .

Доверительный интервал для измеренного значения x при заданной доверительной вероятности p и числе измерений n рассчитывают по формуле

$$\Delta x = t_{p,n} \cdot S_n,$$

где $t_{p,n}$ – коэффициент Стьюдента, выбираемый согласно значению доверительной вероятности p и числу степеней свободы $\nu = n - 1$ (прил. 6); S_n – среднеквадратическая погрешность.

Для оценки точности измерений вычисляют относительную погрешность:

$$\varepsilon = \pm \frac{\Delta x}{x} \cdot 100\%.$$

Рассеяние значений x_i относительно среднего значения \bar{x} характеризуется коэффициентом вариации:

$$V = \frac{S_n}{\bar{x}} \cdot 100\%.$$

Окончательные результаты записываются так: $x = \bar{x} \pm \Delta x$.

Задание для студентов специализации «Химическая технология вяжущих материалов»

Проведены 4 серии параллельных измерений плотности безавтоклавных силикатных материалов при различном содержании извести, % от массы сухой смеси (полусухое прессование). Полученные значения представлены в табл. 5.

Таблица 5

Плотность безавтоклавных силикатных материалов

Содержание извести, %	Плотность, кг/м ³									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
10	1670	1658	1663	1655	1670	1652	1672	1675	1679	1659

Содержание извести, %	Плотность, кг/м ³									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
15	1665	1653	1655	1667	1673	1659	1662	1655	1680	1628
20	1589	1590	1583	1575	1592	1585	1580	1589	1585	1592
25	1555	1552	1550	1545	1555	1560	1504	1565	1555	1545

Задание для студентов специализации «Технология стекла и ситаллов»

Проведены 4 серии параллельных измерений температурного коэффициента линейного расширения (ТКЛР) образцов петроситаллов (табл. 6), полученных методом термопластического формирования при различных температурах тепловой обработки.

Таблица 6

ТКЛР образцов петроситаллов

Темпера- тура термооб- работки, °С	ТКЛР, $\alpha \cdot 10^7 \text{ K}^{-1}$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
750	92,3	91,8	92,8	92,6	91,1	92,2	92,1	89,9	92,1	92,6
850	102,1	102,1	102,8	101,9	102,2	101,5	100,2	103,1	100,9	102,5
950	109,7	109,5	109,2	109,8	109,6	109,4	108,5	107,6	109,3	109,5
1050	104,2	105,4	105,3	105,9	103,5	105,4	105,1	100,5	104,6	104,8

Задание для студентов специализации «Технология тонкой функциональной и строительной керамики»

Проведены 4 серии параллельных измерений водопоглощения майоликовых изделий при различной температуре обжига. Полученные значения представлены в табл. 7.

Провести математическую обработку результатов измерений:

- рассчитать среднее арифметическое, отклонения от него и среднеквадратическую погрешность для измеренной величины;
- проверить наличие грубой ошибки;

– определить доверительный интервал, относительную погрешность и коэффициент вариации.

Таблица 7

Водопоглощение майоликовых изделий

Температура обжига, °С	Водопоглощение, %									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
900	20,1	19,8	20,2	21,1	19,9	20,3	19,0	25,1	19,4	19,8
950	17,2	17,5	17,3	16,9	17,2	18,0	16,2	17,4	18,2	16,5
1000	13,1	12,9	13,0	13,2	14,1	12,4	13,1	12,8	13,0	12,7
1050	7,1	7,5	6,9	7,2	6,3	6,6	7,7	6,1	8,2	6,8

Описание порядка выполнения работы представлено для первой серии измерений, для остальных действия производятся аналогично.



Порядок выполнения задания

1. Записать **ORIGIN:=1** (для удобства расчетов).
2. Ввести исходные данные в виде вектор-столбца **σ** .
3. Пересчитать значения результатов измерений, представленные в вектор-столбце **σ** , согласно своему варианту (номер варианта соответствует номеру компьютера), по формуле

$$\sigma := \sigma + 0.2 \cdot n$$

где **n** – порядковый номер компьютера.

4. Определить количество опытов **n** (элементов выборки) с помощью функции:

$$n := \text{length}(\sigma)$$

5. Найти среднее арифметическое **σ_{sr}** , используя функцию **mean(σ)**, с присваиванием имени переменной, например

$$\sigma_{sr} := \text{mean}(\sigma)$$

6. Рассчитать отклонения измеренной величины **$\Delta\sigma$** от среднего арифметического и среднеквадратическую погрешность **S_n** .

7. Выполнить проверку на наличие грубых ошибок:

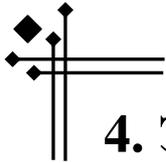
– найти в исходной выборке значение, которое имеет наибольшее отклонение от среднего арифметического по модулю («подозрительный» результат);

– рассчитать значение критерия ν и сравнить его величину с табличным $\nu_{\text{табл}}$ (прил. 6). Если проверяемый результат оказался грубой ошибкой, следует его исключить и повторить расчеты до п. 7 включительно.

8. По формулам, представленным в теоретической части (см. на с. 33), вычислить доверительный интервал $\Delta\sigma$, относительную погрешность ϵ и коэффициент вариации V .

9. Выполнить математическую обработку для остальных серий параллельных измерений.

10. По результатам расчетов сделать выводы.



4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, ПОЛУЧЕННЫЕ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ПАССИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

4.1. Общие сведения

При построении экспериментально-статистических моделей изучаемый объект представляют в виде «черного ящика» (рис. 4). Предполагается, что исследователь обладает незначительным количеством исходной информации о структуре объекта и механизме ХТП, протекающих в нем.

Задачей исследователя является определение взаимосвязи между входными x_i (факторами) и выходными y_i переменными (откликами) на основе экспериментальных исследований.

Результаты эксперимента можно описать с помощью уравнения (системы уравнений), которое в общем виде в статике задает связь между входными x_i, x_j и выходной y переменными:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i \cdot x_i + \sum_{i=1}^n \beta_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{i=1}^n \beta_{ii} \cdot x_i^2 + \dots,$$

где $\beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ii}$ – коэффициенты, характеризующие соответственно линейные эффекты, эффекты взаимодействия и квадратичные эффекты.

Коэффициенты $\beta_0, \beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ii}$ называются **коэффициентами регрессии** (лат. *regression* – движение назад), а уравнение – **уравнением регрессии**.

Учитывая статистическую природу ХТП и ограниченность объема экспериментальных

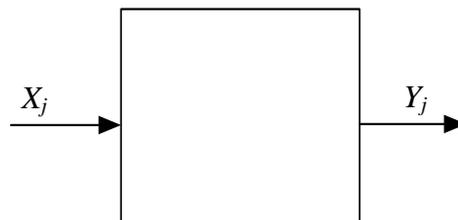


Рис. 4. Схема «черного ящика»

данных (выборки), получают **оценки** коэффициентов $\beta_0, \beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ii}$. Отсюда уравнение регрессии выглядит следующим образом:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i \cdot x_i + \sum_{i=1, j \neq i}^n b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{i=1}^n b_{ii} \cdot x_i^2 + \dots,$$

где y – оценка выходного параметра модели; n – число факторов; b_0, b_i, b_{ij}, b_{ii} – оценки коэффициентов уравнения регрессии; x_i – факторы модели.

Сбор исходных статистических данных, которые используются для расчета коэффициентов в уравнении регрессии (значений факторов x_i, x_j и откликов y_u), осуществляется методами *пассивного* или *активного эксперимента*.

Пассивный эксперимент выполняют при нормальной эксплуатации технологической установки, т. е. без целенаправленного вмешательства в ХТП, что не требует затрат времени и средств на постановку опытов. Исследователь, занимая «пассивную» позицию, получает некоторый объем экспериментальных значений факторов x_i и выходной переменной y , которые записывает в таблицу. В дальнейшем статистические данные обрабатывают с помощью *корреляционного* (лат. *correlatio* – соотношение, связь) и *регрессионного анализа*.

4.2. Корреляционный анализ

В основе *корреляционного анализа* лежит предпосылка о том, что переменные величины y и x_i являются СВ и между ними может существовать связь особого рода, так называемая корреляционная связь. **Корреляционная связь**, или **корреляция**, – связь случайных величин, которая носит вероятностный характер, т. е. каждому значению одной СВ соответствует множество возможных значений другой СВ.

В технологии силикатных материалов часто приходится иметь дело с корреляционной связью между параметрами. Примером корреляционной связи может служить взаимосвязь между содержанием компонентов в сырьевых и синтезируемых материалах; свойств силикатных материалов и их состава; температуры материала или изделия и расхода газа и т. д.

Корреляционная связь отличается от **функциональной**, в которой каждому значению одной величины (аргумента) соответствует определенное значение другой величины. Функциональные зависимости дают идеализированное представление об объекте исследования, так как не учитывают возможное влияние неконтролируемых переменных, неоднородность объектов исследования и погрешность при проведении измерений. Поэтому на практике взаимосвязь исследуемых величин всегда имеет вероятностный характер.

Наиболее простой случай корреляционной связи представляет корреляция двух переменных – **парная корреляция**. Форма парной корреляции бывает линейной и нелинейной.

Наглядное представление о такой связи дает **корреляционное поле**. При его построении данные опытов изображают точками, координаты которых соответствуют значениям двух случайных величин (рис. 5).

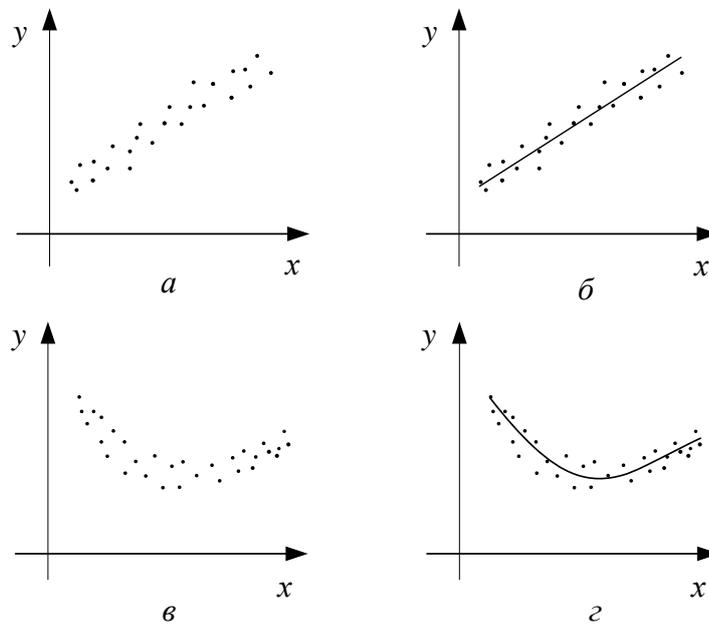


Рис. 5. Корреляционное поле (а, в) и функция регрессии (б, г)

Взаимосвязь переменных тем больше, чем теснее расположены точки корреляционного поля около некоторой прямой (линейная корреляция, рис. 5, б) или «плавной» кривой (нелинейная корреляция, рис. 5, г). Если все точки корреляционного поля попадут на эту линию, то теснота связи окажется наибольшей и связь переменных будет функциональной.

По тесноте (силе) парной корреляции выделяют:

- 1) функциональную;
- 2) сильную;
- 3) среднюю;
- 4) слабую;
- 5) нулевую (отсутствующую) корреляционную связь.

Тесноту линейной корреляционной взаимосвязи между двумя наблюдаемыми СВ оценивают по величине **выборочного коэффициента корреляции** (коэффициент корреляции Пирсона), который рассчитывается по формуле

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x}) \cdot (y_i - \bar{y})}{(N - 1) \cdot s_x \cdot s_y},$$

где N – число экспериментов; \bar{x} , \bar{y} – среднее арифметическое; s_x , s_y – стандартное отклонение x , y соответственно.

Коэффициент r может принимать значения от -1 до $+1$.

Парная линейная корреляционная связь может быть положительной (прямой) или отрицательной (обратной). На рис. 6 приведены виды корреляционных графиков для двух величин x и y при разных значениях коэффициента корреляции.

Если $r > 0$, то между СВ положительная связь, т. е. с увеличением одной случайной величины растет значение другой (рис. 6, *a*, *б*). Например, положительная корреляция между содержанием в кварцевом песке оксида хрома и железа указывает, что при увеличении содержания оксида хрома в кварцевом песке будет повышаться содержание оксида железа.

При $r < 0$ – с увеличением одной СВ уменьшается значение другой (рис. 6, *в*). При $r = 0$ корреляционная связь отсутствует (рис. 6, *г*). Если коэффициент корреляции $r = 0$, могут существовать иные формы зависимости между x и y , отличные от корреляции; но если обе величины имеют нормальный закон распределения, то отсутствие корреляции означает их независимость.

Любой выборочный коэффициент корреляции, являясь случайной величиной, может оказаться отличным от нуля даже, если случайные величины x и y независимы. Поэтому после расчета коэффициента корреляции определяют его **статистическую значимость**, т. е. надежность связи между x и y .

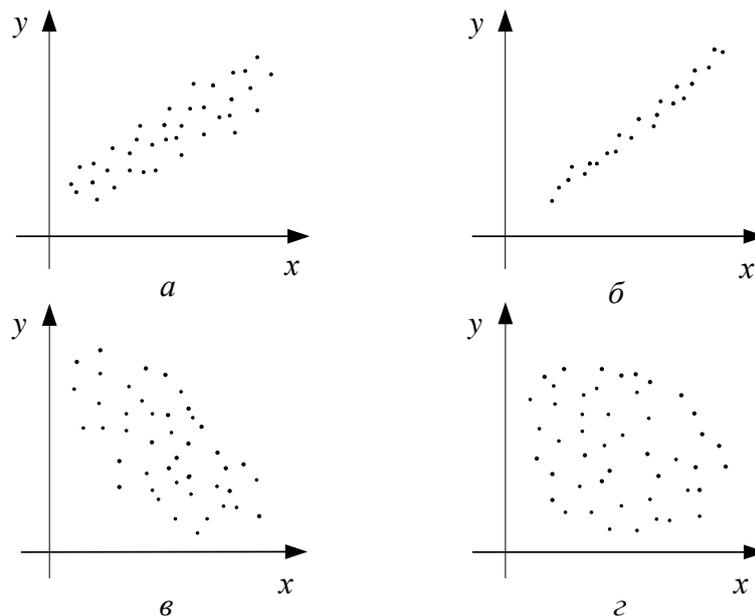


Рис. 6. Корреляционное поле случайной величины:
a – средняя положительная корреляция;
б – сильная положительная корреляция;
в – слабая отрицательная корреляция;
г – некоррелированные случайные величины ($r = 0$)

Для оценки статистической значимости рассчитывается **критерий Стьюдента**, значение которого сравнивается с табличным:

$$t = \frac{|r_{xy}|}{\sqrt{1 - r_{xy}^2}} \cdot \sqrt{N - 2}.$$

Между случайными величинами x и y корреляция отсутствует, если соблюдается условие $t_{кр} > t$. Если $t > t_{кр}$, тогда выборочный коэффициент существенно отличен от нуля, т. е. наблюдаемые величины x и y взаимосвязаны с доверительной вероятностью p , принятой при определении $t_{кр}$. Число степеней свободы при определении $t_{кр}$ рассчитывают как $\nu = N - 2$.

Коэффициент корреляции – статистический показатель. Он не содержит предположения, что изучаемые величины находятся в причинно-следственной связи. Поэтому любая трактовка корреляционной зависимости должна основываться на информации физико-химического характера.

Универсальной количественной характеристикой тесноты корреляционной связи при криволинейной, в том числе и

линейной зависимости (при линейной связи $\eta = |r|$), служит **корреляционное отношение**.

Корреляционное отношение имеет разные значения для корреляционной связи $y = f(x)$ и для связи $x = f(y)$. *Прямое корреляционное отношение* вычисляется по формуле

$$n_{y/x} = \sqrt{\frac{N \cdot \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i}{x_i} - \bar{y} \right)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}},$$

где N – число экспериментов; y_i / x_i – отношение экспериментальных значений выходной переменной и фактора; $(y_i / x_i - \bar{y})$ – отклонение точек экспериментальной линии регрессии от общего среднего по \bar{y} .

Обратное корреляционное отношение для малых выборок рассчитывается по формуле

$$n_{x/y} = \frac{N \cdot \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_i}{y_i} - \bar{x} \right)^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2},$$

где $(x_i / y_i - \bar{x})$ – отклонение точек экспериментальной регрессии от общей средней по \bar{x} ; $(x_i - \bar{x})$ – отклонение значений входных переменных в выборке от общего среднего по \bar{x} .

Корреляционное отношение всегда положительно и изменяется в пределах $0 < \eta < 1$. Если между y и x нет корреляционной связи, $\eta = 0$ (корреляционное поле представляет собой круг). Чем ближе корреляционное отношение к единице, тем сильнее связь между y и x . При функциональной связи между y и x $\eta = 1$.

Задание для студентов специализации «Химическая технология вяжущих материалов»

Определить степень корреляционной взаимосвязи между следующими показателями (табл. 8): возраст образцов бетона, сут;

расход заполнителя, воды и цемента, кг/м³; механическая прочность бетона при сжатии, МПа.

Таблица 8

**Исходные данные для студентов специализации
«Химическая технология вяжущих материалов»**

Возраст, сут	Расход компонентов сырьевой смеси, кг/м ³			Прочность бетона при сжатии, МПа
	воды	заполнителя	цемента	
32	221	1576	442	39,0
14	221	1652	346	28,5
5	203	1620	203	13,8
7	217	1741	227	15,8
9	231	1815	242	16,5
6	232	1746	233	12,5
28	168	1921	302	37,0
12	214	1745	268	23,4
18	214	1746	268	30,6
14	183	1817	280	32,8
11	211	1818	235	20,4
12	216	1692	282	21,5

**Задание для студентов специализации
«Технология стекла и ситаллов»**

Установить степень корреляционной взаимосвязи между нижеприведенными показателями (табл. 9): температура в печи, °С; толщина слоя холодной шихты, мм; влажность шихты, %; содержание фтора и SO₃ в отходящих газах, мг/м³.

Таблица 9

**Исходные данные для студентов специализации
«Технология стекла и ситаллов»**

Температура в печи, °С	Толщина слоя холодной шихты, мм	Влажность шихты, %	Содержание соединений в отходящих газах, мг/м ³	
			F ⁻	SO ₃
1051,9	0,30	11,33	0,60	1,53
1046,7	0,30	10,82	0,64	1,53
1056,0	0,37	12,24	0,65	1,58
1052,9	0,12	11,07	0,63	1,57
1050,6	0,54	12,13	0,58	1,52

Температура в печи, °С	Толщина слоя холодной шихты, мм	Влажность шихты, %	Содержание соединений в отходящих газах, мг/м ³	
			F ⁻	SO ₃
1056,7	0,43	13,41	0,66	1,52
1058,1	0,30	9,50	0,53	1,71
1064,3	0,16	11,31	0,48	1,49
1068,8	0,31	11,94	0,63	1,60
1071,8	0,38	9,07	0,70	1,59
1074,2	0,54	8,31	0,53	1,63
1076,5	0,31	9,60	0,46	1,57

**Задание для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной
и строительной керамики»**

Определить степень корреляционной взаимосвязи между следующими показателями (табл. 10): микротвердость глазури для санитарно-керамических изделий, МПа; ТКЛР глазури, $\alpha \cdot 10^7 \text{ K}^{-1}$; содержание SiO₂, Al₂O₃, CaO в составе глазури, мас. %.

Таблица 10

**Исходные данные для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной и строительной керамики»**

Технологические свойства		Содержание основных компонентов в составе глазури для санитарно-керамических изделий, мас. %		
микротвердость, МПа	ТКЛР, $\alpha \cdot 10^7 \text{ K}^{-1}$	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO
6450	57,6	67,59	9,44	12,57
6370	58,4	65,77	9,06	14,98
6170	59,2	63,95	8,69	17,40
6100	60,3	62,13	8,31	19,82
6230	58,8	65,12	9,47	14,98
6100	59,6	63,29	9,09	17,40
6030	61,7	61,47	8,72	19,82
6350	59,3	64,46	9,87	14,99
6100	60,4	62,64	9,49	17,40
6000	61,9	60,82	8,45	19,82
6100	61,5	61,98	8,90	17,40
6020	62,3	60,16	8,52	19,82



◆ Порядок выполнения задания

1. Представить исходные данные для проведения корреляционного анализа в виде матрицы размерности $m \times n$, где m – количество столбцов; n – количество строк. Присвоить матрице наименование **Data**. Пересчитать значения величин, представленные в массиве **Data**, согласно своему варианту (номер варианта соответствует номеру компьютера), по формуле

$$\mathbf{Data} := \mathbf{Data} + 0.05 \cdot N$$

где N – порядковый номер компьютера.

Внимание! Описание последующих действий представлено для первого и второго столбцов в массиве **Data**. Для остальных данных, записанных в других столбцах, действия выполняются аналогично.

2. Используя функцию **corr(x, y)**, рассчитать коэффициенты парной корреляции, где x и y – значения случайных величин, представленных в столбцах матрицы **Data**. Например, для нахождения коэффициента парной корреляции значений случайных величин, содержащихся в первом и втором столбцах матрицы **Data**, следует записать **r12:=corr(Data^{<0>}, Data^{<1>})**.

3. Построить график функции регрессии (в данном случае представлена линейной зависимостью) вида $f(x) = a + b \cdot x$ и корреляционное поле для каждой пары столбцов случайных величин. Для построения графика следует:

– определить коэффициенты уравнения (**a** и **b**):

а) присвоить имя переменным **X:=Data^{<0>}**, **Y:=Data^{<1>}**;

б) записать выражение **a:=intercept(X, Y)**. Mathcad, используя значения, присвоенные величинам **X** и **Y**, выполнит расчет коэффициента **a**;

в) аналогично рассчитать коэффициент **b** с помощью функции **slope(X, Y)**;

– записать **f(x):=a+b·x**;

– для расчета **f(x)** задать пределы изменения величины x , значения которой приведены в столбце **Data^{<0>}**. Например, **x:=min(Data^{<0>})..max(Data^{<0>})**. Если значения x изменяются в небольших пределах, тогда следует уменьшить шаг изменения переменной, например до 0,01, – **x:=min(Data^{<0>}), min(Data^{<0>})+**

+0.01..max(Data^{<0>}). Все переменные в выражении $f(x):=a+b \cdot x$ известны – можно вывести результаты расчета значений $f(x)=$;

– вызвать двухмерный график $X-Y$;

– записать по оси ординат $f(x)$, Y , а по оси абсцисс – X , x ;

– для получения точек корреляционного поля отформатировать вторую линию на графике:

а) щелчком правой кнопки мыши на графике вызвать контекстное меню;

б) перейти по вкладкам **Formate/Traces**, найти закладку **Type** и во второй строке, вызвав контекстное меню, выбрать опцию **Points**.

4. Для каждого коэффициента парной корреляции провести проверку статистической значимости с использованием критерия Стьюдента, согласно формуле, представленной в теоретических сведениях (см. на с. 41).

5. Сделать выводы на основе полученных результатов. Определить, между какими СВ наблюдается корреляционная взаимосвязь, охарактеризовать ее.

4.3. Линейная однофакторная регрессионная модель

Регрессионный анализ предполагает связь между случайной величиной y и неслучайными переменными x_i .

Этот метод позволяет решить следующие задачи: определить вид уравнения регрессии и рассчитать его коэффициенты; проверить точность расчета коэффициентов уравнения регрессии (проверить их значимость); выяснить, адекватно ли описывает полученная регрессионная модель реальный процесс.

В зависимости от сложности изучаемого ХТП частный вид уравнения регрессии будет разным. При проведении регрессионного анализа начинают с самых простых моделей ХТП, предполагая в дальнейшем их корректировку.

Простейший вид линейного уравнения регрессии:

$$y = b_0 + b_1 \cdot x_1.$$

Расчет коэффициентов в уравнении на основе результатов исследований, собранных при проведении пассивного эксперимента, может осуществляться с привлечением различных методов. Наи-

более распространенным способом определения коэффициентов является **метод наименьших квадратов (МНК)**.

Согласно методу наименьших квадратов, необходимо получить такие расчетные значения коэффициентов b_i , при которых сумма квадратов отклонений экспериментальных $y_{u\text{эксп}}$ от расчетных величин $y_{u\text{расч}}$ окажется наименьшей.

Аналитически это требование можно записать так:

$$F = \sum_{u=1}^N (y_{u\text{эксп}} - y_{u\text{расч}})^2 = \min$$

или с учетом уравнения регрессии

$$F = \sum_{u=1}^N (y_u - b_0 - b_1 \cdot x_{1u})^2 = \min.$$

Используя полученное выражение, получают систему **нормальных уравнений**, решая которую вычисляют коэффициенты b_0 и b_1 :

$$\begin{aligned} N \cdot b_0 + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u} &= \sum_{u=1}^N y_u, \\ b_0 \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u} + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 &= \sum_{u=1}^N y_u \cdot x_{1u}. \end{aligned}$$

Для проверки значимости коэффициентов регрессии, т. е. для определения, отличается ли истинное значение коэффициента от нуля ($\beta_i \neq 0$) или нет ($\beta_i = 0$), следует найти отношение абсолютного значения коэффициента к его стандартному отклонению:

$$t_{b_i} = \frac{|b_i|}{s_{b_i}}$$

и сравнить их со значением t -критерия, которое определяют по таблицам распределения Стьюдента для выбранного уровня значимости α (например, $\alpha = 0,05$) и числа степеней свободы ν , т. е. $t_{b_i} > t_{\text{кр}}$. Если условие соблюдается, то коэффициент b_i значим (нуль-гипотеза $\beta_i = 0$ отвергается).

Для определения стандартных отклонений s_{b_0} и s_{b_1} в простейшем случае (линейная зависимость от одного фактора $y = b_0 + b_1 \cdot x_1$) формулы имеют следующий вид:

$$s_{b_0} = \sqrt{\frac{s_0^2 \sum_{u=1}^N x_{1u}^2}{N \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 - \left(\sum_{u=1}^N x_{1u} \right)^2}},$$

$$s_{b_1} = \sqrt{\frac{s_0^2 \cdot N}{N \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 - \left(\sum_{u=1}^N x_{1u} \right)^2}},$$

где s_0^2 – дисперсия воспроизводимости (дисперсия опыта), характеризующая воспроизводимость эксперимента.

Для нахождения дисперсии воспроизводимости выполняют следующие действия. При одном и том же значении входной переменной x проводят несколько повторяющихся (параллельных, дублирующих) опытов, в каждом из которых измеряют выходную переменную y . По полученным данным вычисляют выборочные дисперсии $s_1^2, s_2^2, \dots, s_u^2, \dots, s_N^2$ (N – общее число сравниваемых дисперсий) для каждой группы параллельных опытов по формуле

$$s_u^2 = \frac{1}{m-1} \cdot \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \bar{y}_u)^2,$$

где m – число параллельных опытов ($k = 1, 2, \dots, m$); y_{uk} – экспериментальные значения выходной переменной; $\bar{y}_u = \frac{1}{m} \cdot \sum_{k=1}^m y_{uk}$ – среднее значение выходной переменной по результатам параллельных опытов.

Проверяют однородность выборочных дисперсий по каждой группе параллельных опытов $s_1^2, s_2^2, \dots, s_u^2, \dots, s_N^2$ с использованием критерия Кохрена:

$$G = \frac{S_{\max}^2}{\sum_{u=1}^N s_u^2},$$

где S_{\max}^2 – максимальная дисперсия; $\sum_{u=1}^N s_u^2$ – сумма всех выборочных дисперсий; N – число выборок.

Если расчетное значение G меньше табличного $G_{кр}$ (при уровне значимости α и степенях свободы $\nu_1 = m - 1$ для числителя и $\nu_2 = N$ для знаменателя), принимается гипотеза о равенстве (однородности) дисперсий. Следовательно, можно определить усредненную оценку, которая и является дисперсией воспроизводимости:

$$s_o^2 = \frac{\sum_{u=1}^N s_u^2}{N}.$$

Число степеней свободы, характеризующее эту дисперсию, $\nu = N \cdot (m - 1)$.

Проверка адекватности модели при линейной связи между переменными. Линейное уравнение регрессии адекватно описывает моделируемый объект, если выполняется неравенство:

$$F = \frac{s_{ост}^2}{s_o^2} < F_{кр},$$

где $F_{кр}$ – критическое значение критерия Фишера для выбранного уровня значимости ($p = 0,05$) и степеней свободы $\nu_1 = N - n - 1$ для числителя и $\nu_2 = N \cdot (m - 1)$ для знаменателя; $s_{ост}^2$ – остаточная дисперсия (дисперсия, характеризующая рассеяние экспериментальных данных $y_{iэксп}$ относительно рассчитанных по уравнению регрессии $y_{iрасч}$).

Остаточная дисперсия вычисляется по формуле

$$s_{ост}^2 = \frac{1}{\nu} \cdot \sum_{u=1}^N (y_{iэксп} - y_{iрасч})^2,$$

где $\nu = N - L$ – число степеней свободы; N – количество опытов; L – число связей (для линейного полинома $L = n + 1$, здесь n – количество факторов).

Если указанное выше условие не соблюдается, тогда следует увеличить число учитываемых факторов или заменить линейное уравнение регрессии нелинейным.

Если *параллельные опыты осуществить не удастся*, тогда производится оценка качества аппроксимации опытных точек принятым уравнением регрессии, согласно условию

$$F = \frac{s_y^2}{s_{\text{ост}}^2} > F_{\text{кр}},$$

где s_y^2 – дисперсия относительно среднего, которая вычисляется по формуле $s_y^2 = \frac{1}{N-1} \cdot \sum_{u=1}^N (y_u - \bar{y})^2$; $F_{\text{кр}}$ – критическое значение критерия Фишера для выбранного уровня значимости ($\alpha = 0,05$) и степеней свободы $\nu_1 = N - 1$ и $\nu_2 = N - n - 1$.

Чем больше значение F превышает критическое значение критерия Фишера $F_{\text{кр}}$, тем лучше выбранное уравнение регрессии описывает экспериментальные данные.

Задание для студентов специализации «Химическая технология вяжущих материалов»

Проведен пассивный эксперимент, в котором изучали влияние технологического фактора – водоцементного отношения (X) на механическую прочность цемента при сжатии, которая определялась через 7 сут (Y). Результаты исследований представлены в табл. 11, 12.

Таблица 11

Механическая прочность цемента при сжатии

Водоцементное отношение (X)	0,42	0,43	0,46	0,48	0,51	0,52	0,55	0,57	0,58	0,60
Прочность цемента при сжатии через 7 сут (Y), МПа	20,5	22,3	21,9	24,5	26,2	28,7	26,1	27,0	26,9	27,1

Таблица 12

Результаты проведения параллельных опытов при постоянных значениях водоцементного отношения

Водоцементное отношение (X)	0,51				0,60			
Прочность цемента при сжатии через 7 сут (Y), МПа	26,97	28,32	27,99	28,12	26,40	27,90	27,31	26,82

**Задание для студентов специализации
«Технология стекла и ситаллов»**

При проведении пассивного эксперимента изучалось влияние технологического фактора – температуры осветления (X) на количество пузырей в 1 см^3 стекломассы (Y). Результаты исследований показаны в табл. 13, 14.

Таблица 13

Количество пузырей в 1 см^3 стекломассы при различных температурах осветления

Температура осветления стекломассы (X), °С	1350	1375	1400	1425	1450	1475	1500	1525	1550	1575
Количество пузырей в 1 см^3 стекломассы (Y)	392	345	310	295	241	223	176	89	35	6

Таблица 14

Результаты проведения параллельных опытов при постоянных значениях температура осветления стекломассы

Температура осветления стекломассы (X), °С	1575				1425			
Количество пузырей в 1 см^3 стекломассы (Y)	18	8	12	5	285	296	289	307

**Задание для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной
и строительной керамики»**

Проведен пассивный эксперимент, в котором изучали влияние технологического фактора – содержания колеманита в составе композиции (X) на микротвердость глазури (Y). Результаты исследований представлены в табл. 15, 16.

Таблица 15

Микротвердость глазури при различном содержании колеманита в составе композиции

Содержание колеманита (X), мас. %	0	1,5	3,0	4,5	6,0	7,5	9,0	10,5	12,0	15,0
Микротвердость глазури (Y), МПа	7610	7630	7650	7658	7750	7780	7810	7865	7910	8010

Результаты проведения параллельных опытов при постоянных значениях содержания колеманита в составе композиции

Содержание колеманита (X), мас. %	6,0				12,0			
Микротвердость глазури (Y), МПа	7755	7740	7760	7720	7915	7920	7890	7900

Построить экспериментально-статистическую модель в виде линейного полинома $y = b_0 + b_1 \cdot x_1$ на основе данных пассивного эксперимента. Проверить значимость коэффициентов уравнения регрессии и адекватность полученной модели.



Порядок выполнения задания

1. Представить исходные данные для построения экспериментально-статистической модели и проверки ее адекватности в виде четырех векторов. В первом векторе записать значения технологического фактора (X); во втором – значения показателя свойства продукции (Y); в третьем и четвертом – значения показателя свойства продукции (Y1 и Y2), полученные в параллельных опытах.

2. Пересчитать значения величин в вектор-столбцах Y, Y1 и Y2, согласно своему варианту, по формуле

$$Y := Y + 0.1 \cdot N$$

где Y – наименование вектор-столбца; N – номер компьютера по порядку.

3. Определить коэффициенты уравнения (b0 и b1) для линейной зависимости вида $f(x) = b_0 + b_1 \cdot x$, используя функцию **intercept(X, Y)**, которая позволяет рассчитать коэффициент **b0**, и функцию **slope(X, Y)** для нахождения коэффициента **b1**. Например, для расчета коэффициента **b0** следует записать **b0:=intercept(X, Y)**.

Задать выражение **f(x):=b0+b1·x** (все переменные в выражении известны – можно вывести результаты расчета значений **f(x)=**).

4. Построить график функции регрессии. Для построения линейной зависимости и экспериментальных точек на графике следует:

– вызвать двухмерный график $X-Y$;
– записать по оси ординат $f(x)$, Y , а по оси абсцисс – X . На графике появится прямая линия, полученная согласно выражению $f(x) = b_0 + b_1 \cdot x$. Зависимость экспериментальных данных $Y = f(x)$ будет представлена в виде кривой, которую для получения точек следует отформатировать:

а) щелчком правой клавиши мыши на графике вызвать контекстное меню;

б) перейти по вкладкам **Formate/Traces**, найти закладку **Type** и во второй строке, вызвав контекстное меню, выбрать опцию **Points**.

5. Провести проверку статистической значимости коэффициентов уравнения с использованием критерия Стьюдента, согласно формуле, представленной в теоретической части (см. на с. 47):

– вычислить дисперсии по данным двух выборок параллельных опытов, записанных в векторах Y_1 и Y_2 ;

– рассчитать критерий Кохрена и сравнить его с табличным значением (прил. 9), принимая уровень значимости $\alpha = 0,05$. Сделать вывод об однородности выборочных дисперсий;

– провести общую оценку дисперсии воспроизводимости и определить число степеней свободы для нее;

– рассчитать по формулам стандартное отклонение коэффициентов уравнения регрессии и значение критерия Стьюдента. Сравнить его с табличным (прил. 8), принимая $\alpha = 0,05$. Сделать вывод о значимости коэффициентов регрессии.

6. Определить остаточную дисперсию по представленной в теоретических сведениях формуле (см. на с. 49). Экспериментальные значения выходной переменной представлены в вектор-столбце Y , расчетные – $f(x)$.

7. Рассчитать значение критерия Фишера и сравнить его с табличным (прил. 7) при $\alpha = 0,05$, сделать вывод об адекватности полученной экспериментально-статистической модели.

8. Сформулировать выводы.

4.4. Линейные и нелинейные регрессионные модели

Изучение влияния одного фактора на протекание ХТП является редкой задачей, чаще возникает необходимость оценить воздействие значительного количества технологических параметров

на выходную переменную, т. е. найти *линейную форму связи между y и x_n* следующего вида:

$$y = b_0 \cdot x_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + \dots + b_n \cdot x_n,$$

где x_0 – фиктивная переменная, равная 1.

Эта задача не отличается существенно от рассмотренной ранее, за исключением увеличения сложности вычислений.

При нахождении коэффициентов в уравнении используется метод наименьших квадратов. Получаемая система нормальных уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} b_0 \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u}^2 + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot x_{1u} + \dots + b_n \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot x_{nu} &= \sum_{u=1}^N y_u \cdot x_{0u}, \\ b_0 \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot x_{1u} + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 + \dots + b_n \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u} \cdot x_{nu} &= \sum_{u=1}^N y_u \cdot x_{1u}, \\ &\dots \\ b_0 \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot x_{nu} + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{nu} \cdot x_{1u} + \dots + b_n \cdot \sum_{u=1}^N x_{nu}^2 &= \sum_{u=1}^N y_u \cdot x_{nu}. \end{aligned}$$

Эту систему уравнений решают, используя приемы матричной алгебры. Для этого представим исходный статистический материал в матричной форме.

Матрица независимых переменных

Вектор наблюдений

$$X = \begin{bmatrix} x_{01} & x_{11} & \dots & x_{n1} \\ x_{02} & x_{12} & \dots & x_{n2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{0N} & x_{1N} & \dots & x_{nN} \end{bmatrix} \quad Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_N \end{bmatrix}$$

Матрица, транспонированная к X

Матрица коэффициентов B

$$X^T = \begin{bmatrix} x_{01} & x_{02} & \dots & x_{0N} \\ x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nN} \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix}$$

Тогда в *матричном виде система нормальных уравнений* запишется следующим образом:

$$X^T \cdot X \cdot B = X^T \cdot Y.$$

Таким образом, вектор-столбец B можно представить так:

$$B = (X^T \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot Y,$$

где $(X^T \cdot X)^{-1}$ – матрица, обратная матрице $(X^T \cdot X)$.

При составлении экспериментально-статистических моделей объектов химической технологии нередко возникает необходимость использовать *нелинейную форму связи*. В таких случаях также применяется метод регрессионного анализа, который предполагает определение коэффициентов в уравнении по методу наименьших квадратов и проверку адекватности модели при помощи критерия Фишера.

Задание для студентов специализации «Химическая технология вяжущих материалов»

1. Изучалось влияние технологических параметров получения силикатного кирпича в автоклаве: X_1 – давление, МПа; X_2 – время изотермической выдержки, ч, на показатель качества продукции (выходная переменная) – механическую прочность при сжатии силикатного кирпича, МПа (Y). Экспериментальные данные приведены в табл. 17, 18.

Таблица 17

Результаты определения механической прочности силикатного кирпича при сжатии

Давление (X_1), МПа	0,63	0,68	0,71	0,74	0,77	0,80	0,80
Время выдержки (X_2), ч	8,0	7,5	9,0	9,3	10,5	8,5	8,0
Прочность при сжатии (Y), МПа	15,4	12,3	13,5	15,5	17,4	16,3	16,9

Таблица 18

Результаты проведения параллельных опытов при постоянных значениях давления и времени выдержки силикатного кирпича в автоклаве

Условия обработки силикатного кирпича в автоклаве	Давление $X_1 = 0,74$ МПа; время выдержки $X_2 = 9,3$ ч				Давление $X_1 = 0,68$ МПа; время выдержки $X_2 = 7,5$ ч			
	Прочность при сжатии (Y), МПа	16,2	15,3	14,5	15,6	13,7	12,0	12,6

2. Проведены экспериментальные исследования влияния давления пара в автоклаве (P , МПа) на механическую прочность при сжатии силикатного кирпича ($\sigma_{сж}$, МПа) (табл. 19).

Таблица 19

**Исходные данные для студентов специализации
«Химическая технология вяжущих материалов»**

P , МПа	0,60	0,62	0,64	0,65	0,66	0,69	0,71	0,74
$\sigma_{сж}$, МПа	12,9	15,5	16,9	15,8	16,5	17,5	17,3	17,9

**Задание для студентов специализации
«Технология стекла и ситаллов»**

1. Изучалось влияние технологических факторов: X_1 – время выдержки, ч; X_2 – температура осветления, °С, на количество пузырей в 1 см³ стекломассы (Y). Экспериментальные данные приведены в табл. 20, 21.

Таблица 20

**Результаты определения количества пузырей
в 1 см³ стекломассы**

Время выдержки (X_1), ч	1	3	5	1	2	4	3
Температура осветления (X_2), °С	1350	1370	1400	1460	1500	1530	1590
Количество пузырей в 1 см ³ стекломассы (Y)	390	340	210	170	110	30	5

Таблица 21

**Результаты проведения параллельных опытов
при постоянных значениях температуры осветления
и времени выдержки**

Условия синтеза стекла	Температура осветления $X_1 = 1400^\circ\text{C}$; время выдержки $X_2 = 5$ ч				Температура осветления $X_1 = 1500^\circ\text{C}$; время выдержки $X_2 = 2$ ч			
Количество пузырей в 1 см ³ стекломассы (Y)	185	203	198	212	115	125	109	103

2. Проведены исследования влияния показателя разнотолщинности (Δd , мм) (разность квадратов отклонений толщины листа, измеренной в пяти точках по ширине от средней толщины) на угол оптических искажений листового стекла (α , град) (табл. 22).

Таблица 22

**Исходные данные для студентов специализации
«Технология стекла и ситаллов»**

α , град	40	39	35	32	29	27	26	24	23
$\Delta d \cdot 10^{-4}$, мм	68	60	58	36	22	19	21	16	16

Задание для студентов специализации «Технология тонкой функциональной и строительной керамики»

1. Изучалось влияние технологических факторов: X_1 – удельная поверхность частиц порошка SiC, м²/г; X_2 – температура жидкофазового спекания в среде аргона, °С, на относительную плотность спеченных SiC образцов, % (Y). Результаты исследований приведены в табл. 23, 24.

Таблица 23

Результаты определения относительной плотности спеченных SiC образцов в зависимости от технологических факторов

Удельная поверхность частиц порошка (X_1), м ² /г	11,5	11,0	11,1	10,9	10,7	9,2	8,3
Температура жидкофазового спекания (X_2), °С	1800	1823	1855	1870	1906	1915	1950
Относительная плотность спеченных SiC образцов (Y), %	80,9	80,0	79,1	78,2	79,3	74,4	75,5

Таблица 24

Результаты проведения параллельных опытов при постоянных значениях удельной поверхности частиц порошка SiC и температуры жидкофазового спекания в среде аргона

Условия синтеза	Удельная поверхность $X_1 = 11,1$ м ² /г; температура $X_2 = 1855$ °С				Удельная поверхность $X_1 = 8,3$ м ² /г; температура $X_2 = 1950$ °С			
Относительная плотность спеченных SiC образцов (Y), %	77,8	79,3	78,5	79,6	74,2	76,7	74,9	74,0

2. Проведены исследования влияния температуры спекания (T , °C) керамических материалов на основе системы $Al_2O_3 - SiO_2$ на открытую пористость (P , %) (табл. 25).

Таблица 25

**Исходные данные для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной и строительной керамики»**

T , °C	1150	1175	1200	1225	1250	1275	1300
P , %	49	43	35	33	31	30	29

На основе результатов пассивного эксперимента построить экспериментально-статистическую модель в виде линейного полинома вида $y = b_0 \cdot x_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2$ и проверить ее адекватность.

Используя данные задания 2, получить экспериментально-статистические модели в виде нелинейных полиномов:

$$- y = b_0 + b_1 \cdot x + b_2 \cdot x^2;$$

$$- y = b_1 \cdot x + b_2 \cdot x^2 + b_3 \cdot \frac{1}{1+x}.$$

Проверить качество аппроксимации опытных данных уравнениями, рассчитав критерий Фишера с использованием дисперсии относительно среднего. Сравнить, какое из приведенных уравнений более качественно описывает экспериментальные результаты.



**Порядок выполнения
задания 1**

1. Присвоить **ORIGIN:=1**.

2. Создать матрицу независимых переменных **X** (в первом столбце записать значение фиктивной переменной, равное 1) и вектор наблюдений **Y**. Пересчитать значения, приведенные в векторе **Y**, по формуле

$$Y := Y - 0.1 \cdot N \cdot n$$

где **Y** – наименование вектор-столбца наблюдений; **N** – номер компьютера по порядку; **n** – номер подгруппы.

3. Рассчитать вектор коэффициентов регрессии по формуле

$$B := (X^T \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot Y$$

В полученном векторе **B** элемент первой строки соответствует значению **B**₁, второй – **B**₂, третьей – **B**₃.

4. Присвоить $x1:=X^{<2>}$, $x2:=X^{<3>}$. Данная форма записи позволяет обратиться к данным (значениям технологических параметров X_1 и X_2), содержащимся во втором и третьем столбцах матрицы **X**.

5. Записать уравнение регрессии в виде

$$f(x1, x2)=B_1+B_2 \cdot x1+B_3 \cdot x2$$

где **x1**, **x2** – соответственно первый и второй столбцы в матрице независимых переменных **X**.

6. Построить трехмерный график, на котором должны быть представлены точки, соответствующие исходным экспериментальным данным, и поверхность отклика, аппроксимирующая их:

– вызвать трехмерный график;

– записать выражение (**x1**, **x2**, **Y**), **f**. Выражение в скобках соответствует графику для данных зависимости экспериментальных значений **Y** от факторов **x1** и **x2**. Выражение **f** – для зависимости расчетных значений **Y**, полученных по уравнению регрессии от факторов **x1** и **x2**.

7. Отформатировать график. Щелчком левой клавиши мыши вызвать меню **Свойства**, перейти по вкладкам **Данные QuickPlot** → **График 2**, задать пределы изменения факторов **x1** и **x2**. Перейти по вкладкам **Общие** → **График 1**, отметить опцию **Точечный график**. Перейти на вкладку **Оформление**. Для графика 1 убрать линии, отметить опцию **Рис. точки**, увеличить размер точек. Во вкладке **График 2** убрать линии, отметить опцию **Залить поверхность** и **Палитра**.

8. Согласно методике, представленной в подразделе 4.3, оценить адекватность полученного уравнения регрессии.



Порядок выполнения задания 2

1. Определить коэффициенты нелинейного уравнения регрессии $y = b_0 + b_1 \cdot x + b_2 \cdot x^2$, используя встроенную функцию Mathcad **linfit(X, Y, F)**. Эта функция возвращает вектор, содержащий

коэффициенты уравнения, которое обеспечивает наилучшую аппроксимацию данных из векторов \mathbf{X} и \mathbf{Y} .

2. Составить вектор независимой переменной \mathbf{X} и вектор наблюдений \mathbf{Y} .

3. Записать линейную комбинацию функции в виде массива $\mathbf{f}(\mathbf{x})$:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) := \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{x} \\ \mathbf{x}^2 \end{pmatrix}$$

4. Рассчитать вектор коэффициентов регрессии \mathbf{B} , используя функцию:

$$\mathbf{B} := \text{linfit}(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{f})$$

5. Записать уравнение регрессии с известными значениями коэффициентов:

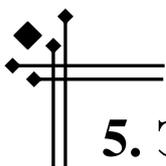
$$\mathbf{f}(\mathbf{X}) := \mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_2 \cdot \mathbf{X} + \mathbf{B}_3 \cdot \mathbf{X}^2$$

6. Для полученного уравнения построить график, на котором должны быть представлены точки, соответствующие исходным экспериментальным данным, и линия регрессии, аппроксимирующая их.

7. Провести оценку качества аппроксимации опытных точек принятым уравнением регрессии.

8. Для нелинейного уравнения регрессии вида $y = b_1 \cdot x + b_2 \cdot x^2 + b_3 \cdot \frac{1}{1+x}$ выполнить действия, последовательность которых представлена в п. 1–7.

9. По результатам проделанной работы сформулировать выводы.



5. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, ПОЛУЧЕННЫЕ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ АКТИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

5.1. Полный факторный эксперимент (ПФЭ)

Пассивный эксперимент обладает рядом недостатков, что не позволяет зачастую построить пригодные для управления и оптимизации объекта модели. Более эффективным является применение активного эксперимента, при котором исследователь активно вмешивается в эксперимент, согласно разработанному плану. Это дает возможность существенно уменьшить объем экспериментальных исследований и получать математические модели с минимально возможной ошибкой. В настоящее время существует значительное количество видов плана эксперимента, выбор которых определяется задачами исследований и особенностями моделируемого объекта.

Для получения математической модели ХТП в виде линейного полинома

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i \cdot x_i + \sum_{i=1, j \neq i}^n b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j$$

исследования планируют в соответствии с методикой ПФЭ, которая позволяет изучить влияние всех возможных комбинаций входных переменных (факторов) на выходную переменную (отклик).

При построении плана ПФЭ:

- 1) выбирают число уровней варьирования факторов и их нулевой уровень (центр плана), в который переносят начало координат;
- 2) задают интервал варьирования каждого фактора;
- 3) совершают операцию кодирования факторов (приведения их в безразмерный вид) и записывают их в матрицу планирования.

Нулевой уровень, или нулевая (центральная) точка, – это некоторое начальное значение фактора.

Интервал варьирования – часть области определения фактора, выбранная симметрично относительно его нулевого уровня.

Нулевой уровень и интервал варьирования задаются исследователем исходя из известной информации о моделируемом объекте, цели и задач исследования.

Уровень фактора – такое значение фактора, которое фиксируется при проведении эксперимента. Наибольшее распространение получил *двухуровневый полный факторный эксперимент типа 2^n* , где n – число факторов; 2 – число уровней варьирования.

В этом случае каждый из факторов варьируется на двух уровнях, в качестве которых используются верхняя и нижняя границы интервала варьирования (максимальное и минимальное значения фактора, которые он может принимать в опыте). Верхний и нижний уровни факторов могут быть записаны в натуральных или кодированных (безразмерных) значениях в виде +1 (верхний уровень) и –1 (нижний уровень). Для перевода натуральных значений в кодированные используется формула

$$x_i = \frac{X_i - X_{i0}}{\Delta X_i},$$

где x_i – кодированные значения i -го фактора (на верхнем или нижнем уровне); X_i – верхний или нижний уровень натуральной переменной; X_{i0} – нулевой уровень натуральной переменной; ΔX_i – интервал варьирования натуральной переменной.

План эксперимента обычно представляют в виде **матрицы планирования (таблицы)**, содержащей запись всех комбинаций факторов или части их в *кодированной форме*, причем каждая строчка определяет условия опыта, а каждый столбец – значения, которые будет принимать одна из независимых переменных (факторов) в разных опытах.

Например, в табл. 26 представлена матрица планирования ПФЭ 2^2 для двух факторов (максимальной температуры и времени обжига), которые варьируются на двух уровнях (верхнем и нижнем).

Во втором столбце табл. 26 приведены значения фиктивной переменной x_0 (равной +1), которая не принимает участия в эксперименте и необходима при вычислении свободного члена полино-

ма (коэффициента b_0). В первой строке табл. 26 спланирован первый опыт, когда факторы T (x_1) и τ (x_2) находятся на верхнем уровне ($x_1 = +1, T = 1050^\circ\text{C}; x_2 = +1, \tau = 2,5 \text{ ч}$) и т. д.

Таблица 26

Матрица планирования ПФЭ 2^2 в кодированных и натуральных значениях

Номер опыта	x_0	Кодированное значение фактора*		Натуральное значение фактора		Выходная переменная y_i
		x_1	x_2	$T, ^\circ\text{C}$	$\tau, \text{ч}$	
1	+1	+1	+1	1050	2,5	y_1
2	+1	-1	+1	950	2,5	y_2
3	+1	+1	-1	1050	1,5	y_3
4	+1	-1	-1	950	1,5	y_4

* Кодированные значения факторов x_k получены по формуле: $x_k = (x_i - x_0) / \Delta x$, где x_i – верхний или нижний уровень варьирования фактора; x_0 – натуральное значение фактора в центре плана ($T_0 = 1000^\circ\text{C}; \tau_0 = 2,0 \text{ ч}$); Δx – интервал варьирования фактора ($\Delta T = 50^\circ\text{C}; \Delta \tau = 0,5 \text{ ч}$). Например, кодированное значение фактора (температуры) для первого опыта составит: $T_k = (1050 - 1000) / 50 = +1$.

Число экспериментов в матрице планирования можно рассчитать, например для ПФЭ 2^2 их количество равно $2^2 = 4$.

Расположение опытных точек в приведенных координатах плана ПФЭ 2^2 для двух факторов x_1 и x_2 показано на рис. 7.

После построения матрицы планирования приступают к проведению экспериментов, которые должны быть рандомизированы, т. е. выполнены в случайном порядке. Причем каждый опыт (каждая строка матрицы планирования) повторяется несколько раз – это делается для оценки дисперсии воспроизводимости.

Расчет коэффициентов регрессии выполняют на основе данных (y_i), полученных в ходе эксперимента, по формулам

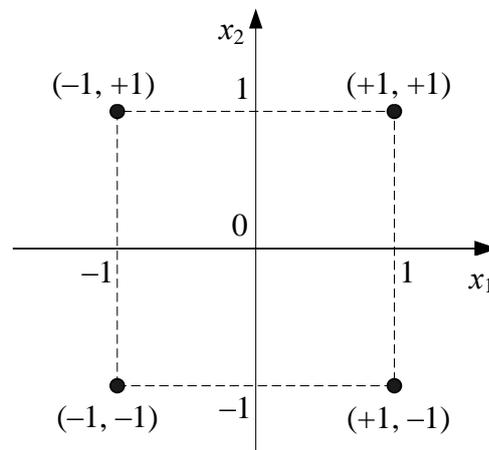


Рис. 7. Расположение опытных точек в ПФЭ 2^2

$$b_0 = \frac{1}{N} \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot y_u,$$

$$b_i = \frac{1}{N} \cdot \sum_{u=1}^N x_{iu} \cdot y_u, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

$$b_{ij} = \frac{1}{N} \cdot \sum_{u=1}^N x_{iu} \cdot x_{ju} \cdot y_u, \quad i \neq j; \quad i, j = 0, 1, 2, \dots, n,$$

где x_{0u} – значение фиктивной переменной, которое во всех опытах составляет +1; x_{iu}, x_{ju} – кодированные значения факторов; b_{ij} – коэффициент регрессии, характеризующий взаимодействие факторов $x_{iu} \cdot x_{ju}$.

После вычисления коэффициентов регрессии переходят к статистическому анализу уравнения регрессии, который состоит из трех основных этапов:

- оценка дисперсии воспроизводимости (или оценка ошибки опыта);
- проверка значимости коэффициентов уравнения регрессии;
- проверка адекватности модели.

Оценка дисперсии воспроизводимости. Для каждой группы параллельных опытов находят выборочные дисперсии по следующей формуле:

$$s_u^2 = \frac{1}{m-1} \cdot \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \overline{y_u})^2,$$

где m – число параллельных опытов ($k = 1, 2, \dots, m$); y_{uk} – экспериментальные значения выходной переменной; $\overline{y_u}$ – среднее значение выходной переменной по результатам параллельных опытов.

Проверку однородности дисперсий проводят по критерию Кохрена:

$$G = \frac{s_{u \max}^2}{\sum_{u=1}^N s_u^2}.$$

Если выполняется неравенство $G < G_{кр}$ (для значений степеней свободы $v_1 = m - 1$, $v_2 = N$ и заданного уровня значимости, здесь N – количество групп параллельных опытов), выборочные дисперсии по каждой группе параллельных опытов $s_1^2, s_2^2, \dots,$

s_u^2, \dots, s_N^2 однородны. Тогда рассчитывают дисперсию воспроизводимости как среднее арифметическое выборочных дисперсий:

$$s_o^2 = \frac{\sum_{u=1}^N s_u^2}{N}.$$

Неоднородные дисперсии усреднять нельзя, поэтому если условие не выполняется, то следует увеличить число параллельных опытов и повторить расчеты.

Проверка значимости коэффициентов уравнения регрессии проводится с помощью критерия Стьюдента. В процедуру проверки значимости коэффициентов регрессии входит:

1) вычисление дисперсий каждого коэффициента уравнения регрессии по формуле

$$s_{b_i}^2 = \frac{s_o^2}{N},$$

где N – число опытов в матрице планирования;

2) составление отношений

$$t_{b_i} = \frac{|b_i|}{s_{b_i}},$$

где $s_{b_i} = \sqrt{s_{b_i}^2}$;

3) сравнение t_{b_i} со значением t -критерия, которое находят по таблицам распределения Стьюдента для выбранного уровня значимости α (например, $\alpha = 0,05$) и числа степеней свободы $\nu = N \times (m - 1)$, т. е.

$$t_{b_i} > t_{кр}.$$

Если условие выполняется, то проверяемый коэффициент регрессии значим и наоборот.

Проверка адекватности модели. Полученное уравнение регрессии является адекватным, если соблюдается следующее условие:

$$F = \frac{s_{ост}^2}{s_o^2} < F_{кр},$$

где $F_{кр}$ – критическое значение критерия Фишера для выбранного уровня значимости и степеней свободы $\nu_1 = N - k$ для числителя и $\nu_2 = N \cdot (m - 1)$ для знаменателя; N – количество опытов в матрице планирования; k – число значимых коэффициентов регрессии.

Остаточная дисперсия вычисляется по формуле

$$s_{ост}^2 = \frac{1}{\nu} \cdot \sum_{i=1}^N (y_{iэксп} - y_{iрасч})^2,$$

где $\nu = N - k$ – число степеней свободы.

Задание для студентов специализации «Химическая технология вяжущих материалов»

Для проведения экспериментальных исследований влияния состава и удельной поверхности портландцемента на его прочность выбран план ПФЭ 2^3 . Изучалось влияние трех факторов: x_1 – содержание в цементе CaO, мас. %; x_2 – содержание в цементе SiO₂, мас. %; x_3 – удельная поверхность цемента, м²/кг, на механическую прочность при сжатии цемента (28 сут), МПа (y). Осуществлен выбор центра плана и интервала варьирования для каждого фактора (табл. 27).

Таблица 27

Исходные данные для студентов специализации «Химическая технология вяжущих материалов» при построении матрицы планирования ПФЭ 2^3

Фактор	Нулевая точка (центр плана) X_{i0}	Интервал варьирования ΔX_i
Содержание в цементе CaO (x_1), мас. %	63	3
Содержание в цементе SiO ₂ (x_2), мас. %	22	2
Удельная поверхность цемента (x_3), м ² /кг	295	45

Для получения модели и оценки дисперсии воспроизводимости в каждой точке плана (каждая строка матрицы) проделаны по два опыта, результаты которых обозначены через y_1 и y_2 . По полученным данным рассчитаны выборочные дисперсии (табл. 28),

число степеней свободы которых $\nu = 1$ (выборочные дисперсии s_u^2 получены по двум измерениям y_1 и y_2).

Таблица 28

Результаты исследований механической прочности при сжатии цемента через 28 сут

Номер опыта		1	2	3	4	5	6	7	8
Механическая прочность при сжатии цемента (28 сут), МПа	y_1	64	43	54	42	46	35	43	42
	y_2	60	47	59	46	44	43	38	43
Выборочная дисперсия s^2		2	8	8	12,5	8	2	32	12,5

Задание для студентов специализации «Технология стекла и ситаллов»

Для проведения экспериментальных исследований влияния технологических параметров процесса закалки на механическую прочность закаленного стекла выбран план ПФЭ 2^3 . Изучалось влияние трех факторов: x_1 – температура закалки, °С; x_2 – продолжительность нагрева стекла, с/мм; x_3 – давление воздуха в обдувочной решетке, кПа, на предел прочности при изгибе закаленного стекла толщиной 4 мм, МПа (y). Осуществлен выбор центра плана и интервала варьирования для каждого фактора (табл. 29).

Таблица 29

Исходные данные для студентов специализации «Технология стекла и ситаллов» при построении матрицы планирования ПФЭ 2^3

Фактор	Нулевая точка (центр плана) X_{i0}	Интервал варьирования ΔX_i
Температура закалки (x_1), °С	580	20
Продолжительность нагрева стекла (x_2), с/мм	150	20
Давление воздуха в обдувочной решетке (x_3), кПа	10	4

Для получения модели и оценки дисперсии воспроизводимости в каждой точке плана (каждая строка матрицы) проделаны по два опыта, результаты которых обозначены через y_1 и y_2 . По полу-

ченным данным рассчитаны выборочные дисперсии (табл. 30), число степеней свободы которых $\nu = 1$ (выборочные дисперсии s_u^2 получены по двум измерениям y_1 и y_2).

Таблица 30

Результаты исследований прочности при изгибе закаленного стекла

Номер опыта		1	2	3	4	5	6	7	8
Прочность при изгибе закаленного стекла, МПа	y_1	271	248	256	245	246	230	231	215
	y_2	265	241	252	243	251	235	229	219
Выборочная дисперсия s^2		18	24,5	8	2	12,5	12,5	2	8

**Задание для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной
и строительной керамики»**

Для проведения экспериментальных исследований влияния технологических параметров приготовления литейного шликера на основе шихтового состава фарфоровой массы, мас. %: глина Веско-Гранитик – 6, глина Stephan Schmidt – 14, каолин глуховецкий – 30, песок кварцевый – 17, полевой шпат вишневогорский – 24, бой обожженных изделий – 9, на вязкость шликера после выдержки 10 мин выбран план ПФЭ 2^3 . Изучалось влияние трех факторов: x_1 – температура шликера, °С; x_2 – время перемешивания, мин; x_3 – влажность шликера, %, на вязкость шликера, °Е (y). Осуществлен выбор центра плана и интервала варьирования для каждого фактора (табл. 31).

Таблица 31

**Исходные данные для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной и строительной керамики»
при построении матрицы планирования ПФЭ 2^3**

Фактор	Нулевая точка (центр плана) X_{i0}	Интервал варьирования ΔX_i
Температура шликера (x_1), °С	20	5
Время перемешивания шликера (x_2), мин	720	30
Влажность шликера (x_3), %	28	0,5

Для получения модели и оценки дисперсии воспроизводимости в каждой точке плана (каждая строка матрицы) проделаны по два опыта, результаты которых обозначены через y_1 и y_2 . По полученным данным рассчитаны выборочные дисперсии (табл. 33), число степеней свободы которых $\nu = 1$ (выборочные дисперсии s_u^2 получены по двум измерениям y_1 и y_2).

Таблица 32

Результаты исследований вязкости литейного шликера

Номер опыта		1	2	3	4	5	6	7	8
Вязкость литейного шликера, °Е	y_1	0,99	1,23	1,36	1,89	2,25	2,90	2,83	2,69
	y_2	1,38	1,56	1,82	1,40	2,63	2,28	2,31	3,33
Выборочная дисперсия s^2		0,076	0,054	0,106	0,120	0,072	0,192	0,135	0,205

Получить линейную статистическую модель вида

$$y = b_0 \cdot x_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_3 \cdot x_3 + b_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + b_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + b_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 + b_{123} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3.$$

Рассчитать коэффициенты линейного полинома, проверить их значимость и адекватность полученной модели.



Порядок выполнения задания

1. Присвоить **ORIGIN:=1**.

2. Для построения матрицы планирования ПФЭ 2^3 в кодированных величинах следует:

– сформировать семь вектор-столбцов, содержащих исходные данные (**x0** – фиктивная переменная, равная 1; **y1** и **y2** – прочность цемента при сжатии; **s2** – значения выборочной дисперсии для двух параллельных опытов **y1** и **y2**). В векторы **x1**, **x2**, **x3** записывают некодированные значения переменных: **x1** – содержание CaO; **x2** – содержание SiO₂; **x3** – удельная поверхность цемента, которые варьируются на нижнем и верхнем уровнях и для первого вектора чередуются через одну строку, для второго – через две, для третьего – через четыре.

Пересчитать значения для вектор-столбца **y1**:

$$y1:=y1-0.5 \cdot N \cdot n$$

где **y1** (**y2**) – наименование вектор-столбца; **N** – номер компьютера по порядку; **n** – номер подгруппы.

Аналогичные действия выполнить для вектор-столбца **y2**;

– определить через оператор присвоения «:=» значения интервала варьирования и нулевую точку плана для каждого из факторов;

– рассчитать векторы **x1k**, **x2k**, **x3k** в кодированных величинах, согласно формуле, приведенной в теоретической части (см. на с. 62) (для обращения к каждому элементу векторов используется оператор векторизации на палитре символов $\overrightarrow{f(M)}$; например, для записи $\overrightarrow{x1}$ при вычислениях будет производиться последовательное обращение к элементам вектора **x1**);

– найти произведения векторов в кодированных величинах **x1k·x2k**, **x1k·x3k**, **x2k·x3k**, **x1k·x2k·x3k**, используя оператор векторизации;

– с помощью функции **augment** из вектор-столбцов кодированных величин и значений отклика **y1**, **y2** сформировать матрицу планирования ПФЭ 2³.

3. Рассчитать дисперсию воспроизводимости:

– провести проверку однородности дисперсий (значения представлены в вектор-столбце **s2**) с использованием критерия Кохрена;

– если выборочные дисперсии однородны, определить дисперсию воспроизводимости;

– получить вектор-столбец **Y**, содержащий средние значения отклика в каждом из двух проведенных опытов (векторы **y1** и **y2** складывают, используя оператор векторизации, и делят на два);

– вычислить значения коэффициентов уравнения регрессии $b_0, b_1, b_2, b_3, b_{12}, b_{13}, b_{23}, b_{123}$, согласно формулам, представленным в теоретической части (см. на с. 63–64) (**значения факторов подставить в кодированных величинах**).

4. Проверить значимость коэффициентов регрессии:

– рассчитать дисперсию коэффициентов регрессии и среднеквадратичное отклонение;

– по таблице для уровня значимости 0,05 и числа степеней свободы $\nu = N$ (N – количество групп параллельных опытов или

строк в матрице планирования) определить значение критерия Стьюдента;

– сделать вывод о значимости коэффициентов регрессии.

5. Записать уравнение регрессии, включающее только значимые коэффициенты (**в записи использовать кодированные переменные**).

6. Проверить адекватность полученной модели с использованием критерия Фишера.

7. Сделать выводы по выполненной работе. Представить описание влияния факторов на отклик в соответствии с полученной моделью.

5.2. Дробный факторный эксперимент (ДФЭ)

Полный факторный эксперимент является весьма эффективным средством построения математической модели исследуемого объекта, особенно при числе факторов $n > 3$. Однако увеличение количества факторов приводит к резкому возрастанию числа опытов. Так, для шести факторов, варьирующихся на двух уровнях, ПФЭ 2^6 требует постановки 64 опытов, а 2^7 – 128 опытов. Точность модели при увеличении числа опытов возрастает, но увеличение числа опытов приводит к большим затратам средств и времени.

Для получения сравнительно точных коэффициентов уравнения регрессии можно обойтись количеством опытов существенно меньшим, чем в ПФЭ, используя метод **дробного факторного эксперимента** (или дробных реплик), который является частью ($1/2, 1/4, 1/8$ и т. д.) ПФЭ.

Предположим, что необходимо описать линейным уравнением взаимосвязь отклика и трех независимых переменных в виде

$$y = b_0 \cdot x_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_3 \cdot x_3.$$

Для этого можно было бы использовать план ПФЭ типа 2^3 с восьмью опытами. Если же за основу взять план ПФЭ типа 2^2 и добавить в него столбец для фактора x_3 , значения в котором определяются путем перемножения $x_1 \cdot x_2$ (табл. 33), то получим матрицу плана ДФЭ 2^{3-1} , в которой по сравнению с ПФЭ 2^3 количество опытов сократится вдвое. Однако, как видно из табл. 33,

реализованы не все возможные комбинации факторов x_1, x_2, x_3 в отличие от ПФЭ 2^3 .

Таблица 33

План ДФЭ 2^{3-1}

x_0	x_1	x_2	$x_3 = x_1 \cdot x_2$	y_u
+	+	+	+	y_1
+	-	+	-	y_2
+	+	-	-	y_3
+	-	-	+	y_4

Сокращение числа опытов приводит к появлению корреляции между столбцами x_3, x_1 и x_2 , что не позволяет разделять коэффициенты при факторах (x_1, x_2, x_3) и их взаимодействиях ($x_1 \cdot x_3, x_2 \cdot x_3, x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$), и, следовательно, коэффициенты получаются *смешанными*.

Каждый из смешанных коэффициентов b_0, b_1, b_2, b_3 , согласно матрице планирования, приведенной в табл. 33, оценивает соответствующую сумму, что записывается следующим образом:

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23},$$

$$b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13},$$

$$b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12},$$

$$b_0 \rightarrow \beta_0 + \beta_{123},$$

где буквами греческого алфавита обозначены коэффициенты регрессии, а буквами латинского алфавита – их оценки.

Для построения дробных реплик (плана ДФЭ) используют *генерирующее соотношение* – алгебраическое выражение, которое показывает, какие взаимодействия заменены новыми факторами. Например, рассмотренный выше план типа 2^{3-1} (полуреблика от ПФЭ 2^3) задавался следующим генерирующим соотношением: $x_3 = x_1 \cdot x_2$.

В зависимости от поставленной задачи дробную реплику подбирают таким образом, чтобы можно было извлечь максимальную информацию из эксперимента. Для этого необходимо установить разрешающую способность дробной реплики, т. е. найти, какие из коэффициентов являются несмешанными оценками, при помощи *определяющего контраста*. Его получают

путем умножения генерирующего соотношения на фактор, для которого изменены условия опытов. Например, получим определяющий контраст для плана 2^{3-1} путем умножения генерирующего соотношения $x_3 = x_1 \cdot x_2$ на x_3 :

$$x_3^2 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3.$$

Значение фактора, возведенного в квадрат или другую четную степень, заменяется единицей ($x_i^{2\gamma} = 1, \gamma = 1, 2, 3, \dots$), тогда определяющий контраст примет следующий вид:

$$1 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3.$$

С помощью определяющего контраста можно получить соотношения, задающие все смешанные оценки для выбранного плана ДФЭ. С этой целью следует определяющий контраст умножить на каждый фактор, при котором находится смешанный коэффициент. Например, для первой полуреплики плана 2^{3-1} такие соотношения имеют вид

$$x_1 \cdot 1 = x_1 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 = x_2 \cdot x_3,$$

$$x_2 \cdot 1 = x_2 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 = x_1 \cdot x_3,$$

$$x_3 \cdot 1 = x_3 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 = x_1 \cdot x_2,$$

что соответствует оценкам

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23},$$

$$b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13},$$

$$b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}.$$

Расчет коэффициентов регрессии и исследование уравнения регрессии при использовании ДФЭ аналогичны методике, изложенной при рассмотрении ПФЭ.

Задание для студентов специализации «Химическая технология вяжущих материалов»

Изучается влияние четырех факторов: x_1 – содержание в цементе СаО, мас. %; x_2 – содержание в цементе SiO₂, мас. %; x_3 – удельная поверхность цемента, м²/кг; x_4 – водоцементное отношение,

на предел прочности цемента при изгибе, МПа (y). Для составления матрицы планирования использовался метод ДФЭ – полуреплика 2^{4-1} . Оценивались линейные эффекты и смешанные парные взаимодействия, тройные взаимодействия приравнялись к нулю. В этой связи для обеспечения высокой разрешающей способности задано генерирующее соотношение $x_4 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$, тогда определяющий контраст принимает следующий вид: $1 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4$. В качестве нулевой точки (центра плана) выбирались значения факторов, которые в предварительных исследованиях дали удовлетворительные результаты.

Намечены следующие условия опытов, представленные в табл. 34.

Таблица 34

**Исходные данные для студентов специализации
«Химическая технология вяжущих материалов»
при построении матрицы планирования ДФЭ 2^{4-1}**

Фактор	Нулевая точка (центр плана) X_{i0}	Интервал варьирования ΔX_i
Содержание в цементе CaO (x_1), мас. %	61	3
Содержание в цементе SiO ₂ (x_2), мас. %	24	2
Удельная поверхность цемента (x_3), м ² /кг	275	30
Водоцементное отношение (x_4)	0,40	0,05

Для получения модели и оценки дисперсии воспроизводимости в каждой точке плана (каждая строка матрицы) проделаны по четыре опыта, результаты которых обозначены через y_1, y_2, y_3, y_4 . По полученным данным рассчитаны выборочные дисперсии (табл. 35), число степеней свободы которых $\nu = 3$.

Таблица 35

Результаты исследований механической прочности цемента при изгибе

Номер опыта	1	2	3	4	5	6	7	8	
Механическая прочность цемента при изгибе, МПа	y_1	5,7	4,1	4,3	3,6	4,5	4,0	4,5	4,0
	y_2	6,1	3,4	5,2	3,7	4,2	3,6	4,7	3,2
	y_3	5,6	4,0	4,7	3,9	4,4	4,5	5,1	3,1
	y_4	5,3	4,4	6,0	3,1	4,6	4,0	4,9	3,6
Выборочная дисперсия s^2	0,327	0,528	1,610	0,347	0,087	0,407	0,200	0,507	

Задание для студентов специализации «Технология стекла и ситаллов»

Изучается влияние четырех факторов: x_1 – температура закалки, °С; x_2 – продолжительность нагрева стекла, с/мм; x_3 – давление воздуха в обдувочной решетке, кПа; x_4 – толщина стекла, мм, на предел прочности при изгибе закаленного стекла толщиной 4 мм, МПа (y).

Для составления матрицы планирования использовался метод ДФЭ – полуреплика 2^{4-1} . Оценивались линейные эффекты и смешанные парные взаимодействия, тройные взаимодействия приравнивались к нулю. В этой связи для обеспечения высокой разрешающей способности задано генерирующее соотношение $x_4 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$, тогда определяющий контраст принимает вид следующего соотношения: $1 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4$. В качестве нулевой точки (центра плана) выбирались значения факторов, которые в предварительных исследованиях дали удовлетворительные результаты.

Намечены следующие условия опытов, представленные в табл. 36.

Таблица 36

Исходные данные для студентов специализации «Технология стекла и ситаллов» при построении матрицы планирования ДФЭ 2^{4-1}

Фактор	Нулевая точка (центр плана) X_{i0}	Интервал варьирования ΔX_i
Температура закалки (x_1), °С	580	20
Продолжительность нагрева стекла (x_2), с/мм	150	20
Давление воздуха в обдувочной решетке (x_3), кПа	10	4
Толщина стекла (x_4), мм	5	1

Для получения модели и оценки дисперсии воспроизводимости в каждой точке плана (каждая строка матрицы) проделаны по четыре опыта, результаты которых обозначены через y_1, y_2, y_3, y_4 . По полученным данным рассчитаны выборочные дисперсии (табл. 37), число степеней свободы которых $\nu = 3$.

**Результаты исследований механической прочности
при изгибе закаленного стекла**

Номер опыта		1	2	3	4	5	6	7	8
Механическая прочность при изгибе закаленного стекла, МПа	у ₁	266	208	235	245	180	248	261	175
	у ₂	272	207	240	243	185	252	257	174
	у ₃	275	200	234	245	186	249	254	176
	у ₄	268	202	239	248	179	245	259	179
Выборочная дисперсия s^2		48,75	44,75	26,00	12,75	37,00	25,00	26,75	14,00

**Задание для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной
и строительной керамики»**

Изучается влияние четырех факторов: x_1 – температура, °С; x_2 – время перемешивания, мин; x_3 – влажность, %; x_4 – плотность, кг/м³, на вязкость литейного шликера, °Е (y), на основе шихтового состава фарфоровой массы, мас. %: глина Веско-Гранитик – 6, глина Stephan Schmidt 13250 – 14, каолин глуховецкий – 30, песок кварцевый – 17, полевой шпат вишневогорский – 24, бой обожженных изделий – 9. Для составления матрицы планирования использовался метод ДФЭ – полуреплика 2^{4-1} . Оценивались линейные эффекты и смешанные парные взаимодействия, тройные взаимодействия приравнивались к нулю. В этой связи для обеспечения высокой разрешающей способности задано генерирующее соотношение $x_4 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$, тогда определяющий контраст принимает следующий вид: $1 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4$. В качестве нулевой точки (центра плана) выбирались значения факторов, которые в предварительных исследованиях дали удовлетворительные результаты.

Намечены следующие условия опытов (табл. 38).

Таблица 38

**Исходные данные для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной и строительной керамики»
при построении матрицы планирования ДФЭ 2^{4-1}**

Фактор	Нулевая точка (центр плана) X_{j0}	Интервал варьирования ΔX_j
Температура шликера (x_1), °С	20	5

Фактор	Нулевая точка (центр плана) X_{j0}	Интервал варьирования ΔX_i
Время перемешивания шликера (x_2), мин	720	30
Влажность шликера (x_3), %	28	0,5
Плотность шликера (x_4), кг/м ³	1815	10

Для получения модели и оценки дисперсии воспроизводимости в каждой точке плана (каждая строка матрицы) проделаны по четыре опыта, результаты которых обозначены через y_1, y_2, y_3, y_4 . По полученным данным рассчитаны выборочные дисперсии (табл. 39), число степеней свободы которых $\nu = 3$.

Таблица 39

Результаты исследований вязкости литейного шликера

Номер опыта		1	2	3	4	5	6	7	8
Вязкость литейного шликера, °E	y_1	0,99	1,23	1,36	1,89	2,75	2,90	2,83	2,69
	y_2	1,38	1,56	1,82	1,80	2,63	2,28	2,31	3,33
	y_3	0,97	1,98	1,45	2,14	2,92	2,44	2,63	2,65
	y_4	1,05	1,12	1,98	2,01	2,49	2,68	2,85	2,94
Выборочная дисперсия s^2		0,110	0,448	0,262	0,065	0,100	0,222	0,188	0,293

Получить экспериментально-статистическую модель следующего вида:

$$y = b_0 \cdot x_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_3 \cdot x_3 + b_4 \cdot x_4 + \\ + b_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + b_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + b_{23} \cdot x_2 \cdot x_3.$$

Проверить значимость коэффициентов полинома и адекватность полученной модели.



◆
◆ **Порядок выполнения**
◆ **задания**

1. Присвоить **ORIGIN:=1**.
2. Для построения матрицы планирования ДФЭ 2^{4-1} в кодированных величинах следует:

– сформировать десять вектор-столбцов, содержащих исходные данные (x_0 – фиктивная переменная, равная 1; y_1, y_2, y_3, y_4 – прочность цемента при изгибе; s_2 – значения выборочной дисперсии для двух параллельных опытов y_1 и y_2). В векторы x_1, x_2, x_3, x_4 записывают некодированные значения переменных x_1, x_2, x_3 и x_4 , которые варьируются на нижнем и верхнем уровнях, согласно плану ДФЭ 2^{4-1} , заданному следующим генерирующим соотношением: $x_4 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$;

– через оператор присвоения «:=» задать значения интервала варьирования и координаты нулевой точки плана в соответствии с исходными данными;

– рассчитать векторы $x_{1k}, x_{2k}, x_{3k}, x_{4k}$ в кодированных величинах, согласно формуле, приведенной в теоретической части (см. на с. 62) (для обращения к каждому элементу векторов используется оператор векторизации на палитре символов $\vec{f}(\vec{M})$; например, для записи \vec{x}_1 при вычислениях будет производиться последовательное обращение к элементам вектора x_1);

– определить произведения векторов в кодированных величинах $x_{1k} \cdot x_{2k}, x_{1k} \cdot x_{3k}, x_{2k} \cdot x_{3k}$, используя оператор векторизации;

– с помощью функции **augment** из вектор-столбцов кодированных величин и значений отклика сформировать матрицу планирования ДФЭ 2^{4-1} .

3. Рассчитать дисперсию воспроизводимости:

– провести проверку однородности выборочных дисперсий (значения представлены в вектор-столбце s_2) с использованием критерия Кохрена (число степеней свободы для максимальной дисперсии $v = m - 1$, где m – количество параллельных опытов, равное четырем);

– если выборочные дисперсии однородны, определить дисперсию воспроизводимости;

– получить вектор-столбец \bar{Y} , содержащий средние значения отклика в каждом из четырех проведенных опытов;

– вычислить значения коэффициентов уравнения регрессии $b_0, b_1, b_2, b_3, b_4, b_{12}, b_{13}, b_{23}$, согласно формулам (см. на с. 63–64) (значения факторов подставить в кодированных величинах).

4. Проверить значимость коэффициентов регрессии:

– рассчитать дисперсию коэффициентов регрессии и их стандартное отклонение;

– определить табличное значение критерия Стьюдента для уровня значимости 0,05 и числа степеней свободы $\nu = N \cdot (m - 1)$ (N – количество групп параллельных опытов или строк в матрице планирования);

– сделать вывод о значимости коэффициентов регрессии.

5. Записать, используя оператор присвоения, уравнение регрессии, включающее только значимые коэффициенты (**в записи применять кодированные переменные**).

6. Проверить адекватность полученной модели с использованием критерия Фишера.

7. Сделать выводы по выполненной работе. Представить описание влияния факторов на отклик, согласно полученной модели.

5.3. Центральное композиционное ротатабельное планирование (ЦКРП)

При проведении экспериментальных исследований объекта с помощью ПФЭ или ДФЭ возможна ситуация, при которой получаемая модель в виде линейного полинома не является адекватной, т. е. неверно описывает моделируемый объект. Это указывает на сложность поведения объекта в изучаемом интервале изменения входных переменных, что может быть обусловлено нелинейностью функции отклика, имеющей экстремумы.

Для описания области, близкой к экстремуму функции отклика (часто данная задача возникает при поиске оптимальных значений входных переменных, т. е. когда необходимо найти такие значения x_i , при которых отклик y будет максимальным (минимальным)), применяют полиномы второго порядка:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i \cdot x_i + \sum_{i=1, j \neq i}^n b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{i=1}^n b_{ii} \cdot x_i^2.$$

ПФЭ или ДФЭ требуют значительного количества опытов для определения коэффициентов b_{ii} . Поэтому более эффективным является применение *планов второго порядка*, например *центрального композиционного ротатабельного планирования (ЦКРП)*, что позволяет существенно сократить объем экспериментальных исследований.

Центральным план называют вследствие симметричности относительно центра плана (точка, в которой все кодированные факторы x_i равны нулю); **композиционным** – потому, что план komponуется путем добавления определенного числа опытов к плану первого порядка, например плану ПФЭ. Это обстоятельство является весьма удобным, поскольку позволяет предварительно провести исследования с помощью ПФЭ илиДФЭ, а затем при необходимости уточнения модели к уже полученным результатам добавить некоторое количество опытов, получив ЦКРП.

При построении ЦКРП к точкам плана ПФЭ 2^n (ядро плана) при $n < 5$ (если $n > 5$, пользуются дробными репликами) добавляются точки в центре плана (*нулевые точки*) и точки, расположенные на всех осях координат на одинаковых расстояниях $\pm\alpha$ от центра (*звездные точки*). Величину α называют *звездным плечом*, значение которого зависит от вида ЦКРП.

Для ПФЭ величина звездного плеча равна

$$\alpha = 2^{\frac{n}{4}},$$

а дляДФЭ

$$\alpha = 2^{\frac{n-p}{4}},$$

где p – дробность реплики ($p = 1 - 1/2$ реплика, $p = 2 - 1/4$ реплика).

Общее количество опытов при таком планировании:

$$N = 2^n + 2 \cdot n + n_0,$$

где слагаемые – соответственно число опытов ПФЭ (ДФЭ), звездных точек и нулевых точек.

Расположение опытных точек для ЦКРП, построенного для двух факторов на основе ПФЭ 2^2 , показано на рис. 8.

Матрица планирования ЦКРП для двух факторов представлена на рис. 9.

Аналогично строятся планы и при количестве факторов больше 2.

ЦКРП построены таким образом, что соблюдается принцип *ротатабельности*, обеспечивающий получение одинакового количества информации в опытных точках, находящихся в фактор-

ном пространстве на равном расстоянии (на одной сфере) от центра плана. Причем количество собираемой информации убывает пропорционально при уменьшении радиуса сферы ρ^2 , на которой расположены точки плана.

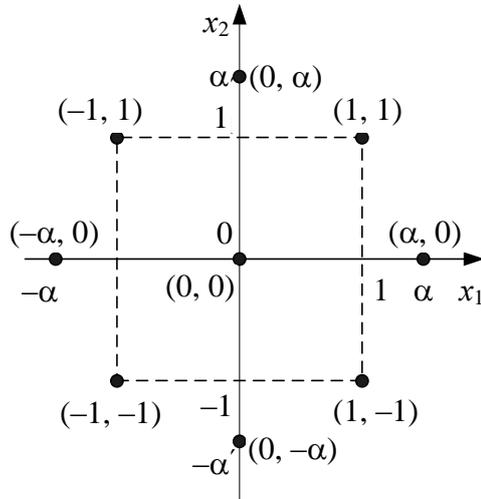


Рис. 8. Расположение опытных точек в ЦКРП для двух факторов

x_0	x_1	x_2	
+	-	-	Ядро плана – ПФЭ 2^2
+	+	-	
+	-	+	
+	+	+	
+	$-\alpha$	0	Звездные точки
+	$+\alpha$	0	
+	0	$-\alpha$	
+	0	$+\alpha$	Центральная точка
+	0	0	

Рис. 9. Матрица плана ЦКРП для двух факторов

В табл. 40 приведены значения α , n_0 и радиуса сферы $\rho_{\text{я}}$, на которой расположены точки ядра плана для различного числа факторов в ЦКРП.

Коэффициенты b_{jj} , рассчитываемые на основе данных ЦКРП, коррелированы между собой и со свободным членом b_0 . Поэтому в отличие от ПФЭ и ДФЭ для расчета коэффициентов полиномов требуется решать систему нормальных уравнений, что в матричном виде будет выглядеть следующим образом:

$$B = (X^T \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot Y,$$

или использовать специально выведенные формулы, которые имеются в литературе.

Таблица 40

Параметры плана ЦКРП в зависимости от числа факторов

Параметры плана	n (число факторов)								
	2	3	4	5	5	6	6	7	7
Ядро плана	2 ²	2 ³	2 ⁴	2 ⁵	2 ⁵⁻¹	2 ⁶	2 ⁶⁻¹	2 ⁷	2 ⁷⁻¹
ρ _я (радиус сферы)	1,41	1,73	2,00	2,24	2,27	2,45	2,45	2,64	2,64
α (звездное плечо)	1,41	1,68	2,00	2,38	2,00	2,83	2,38	3,36	2,83
n ₀ (количество нулевых точек)	5	6	7	10	6	15	9	21	14

Порядок проверки значимости коэффициентов регрессии осуществляется так же, как и в ПФЭ, однако с некоторыми видоизменениями.

Дисперсию воспроизводимости определяют по опытам в центре плана:

$$s_o^2 = \frac{\sum_{u=1}^{n_0} (y_{ou} - \bar{y}_o)^2}{n_0 - 1}, \quad \nu_o = n_0 - 1,$$

где y_{ou} – значение отклика, полученное по опытам в центре плана; \bar{y}_o – среднее значение отклика, полученное в центре плана; n_0 – число нулевых точек; ν_o – число степеней свободы дисперсии воспроизводимости.

Для проверки значимости коэффициентов регрессии:

– рассчитывают дисперсию коэффициентов уравнения регрессии по следующим формулам:

$$s_{b_0}^2 = a_1 \cdot s_o^2, \quad s_{b_j}^2 = a_3 \cdot s_o^2, \quad s_{b_{ij}}^2 = a_4 \cdot s_o^2, \quad s_{b_{jj}}^2 = (a_5 + a_6) \cdot s_o^2,$$

где a_1, a_3, a_4, a_5, a_6 – значения констант, согласно справочным данным (прил. 10);

– составляют отношения

$$t_{b_i} = \frac{|b_i|}{s_{b_i}} > t_{кр}$$

и сравнивают их со значением t -критерия, которое находят по таблицам распределения Стьюдента для выбранного уровня значимости и числа степеней свободы $\nu = \nu_0$.

Если условие выполняется, то проверяемый коэффициент регрессии значим и наоборот. Если один из квадратичных эффектов (x_i^2) оказался *незначимым*, после его исключения *следует пересчитать уравнение регрессии*.

Полученное уравнение регрессии является адекватным, если соблюдается условие

$$F = \frac{s_{\text{ад}}^2}{s_0^2} < F_{\text{кр}},$$

где $F_{\text{кр}}$ – табличное значение критерия Фишера для выбранного уровня значимости и числа степеней свободы $\nu_{\text{ад}} = \nu_1$ для числителя и $\nu_0 = \nu_2$ для знаменателя; $s_{\text{ад}}^2$ – дисперсия адекватности, которая определяется из соотношения

$$s_{\text{ад}}^2 = \frac{s_{\text{ост}}^2 \cdot \nu_{\text{ост}} - s_0^2 \cdot \nu_0}{\nu_{\text{ад}}},$$

здесь $\nu_{\text{ад}}$ – число степеней свободы дисперсии адекватности, равное

$$\nu_{\text{ад}} = \nu_{\text{ост}} - \nu_0.$$

Остаточную дисперсию рассчитывают по формуле

$$s_{\text{ост}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_{i\text{эксп}} - y_{i\text{расч}})^2}{N - l}, \quad \nu_{\text{ост}} = N - l,$$

где $y_{i\text{эксп}}$, $y_{i\text{расч}}$ – соответственно экспериментальные и расчетные значения выходной переменной (отклика); N – количество опытов; l – число значимых коэффициентов в уравнении регрессии.

Задание для студентов специализации «Химическая технология вяжущих материалов»

Для изучения процесса автоклавной обработки силикатного кирпича проведен активный эксперимент. На основании априорной

информации выбраны наиболее значимые факторы: x_1 – содержание воздушной строительной извести, мас. %; x_2 – длительность изотермической выдержки, ч; x_3 – давление пара, МПа; x_4 – влажность силикатной смеси, %; x_5 – давление прессования, МПа. В качестве выходной переменной (отклика) определяли механическую прочность при сжатии силикатного кирпича, МПа (Y).

Для получения уравнения регрессии выбран ЦКРП при количестве факторов, равном пяти (прил. 11). Ядро плана представляет собой полуреплику (ДФЭ) 2^{5-1} с генерирующим соотношением $x_5 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4$. Величина звездного плеча $\alpha = 2,00$. Число опытов равно 32.

Нулевой уровень, интервалы и уровни варьирования для выбранного плана приведены в табл. 41.

Таблица 41

**Исходные данные для студентов специализации
«Химическая технология вяжущих материалов» при построении
матрицы планирования ЦКРП**

Фактор	Нулевой уровень X_{i0}	Интервал варьирования ΔX_i	Верхний уровень		Нижний уровень	
			(+1)	(+2)	(-1)	(-2)
Содержание строительной извести (x_1), мас. %	14	4	18	22	10	6
Длительность изотермической выдержки (x_2), ч	7	1	8	9	6	5
Давление пара (x_3), МПа	0,8	0,1	0,9	1,0	0,7	0,6
Влажность силикатной смеси (x_4), %	7,25	2,0	9,25	11,25	5,25	2,25
Давление прессования (x_5), МПа	19,0	2,5	21,5	24,0	16,5	14,0

Результаты опытов представлены в табл. 42.

Таблица 42

**Результаты исследований механической прочности при сжатии
силикатного кирпича**

Номер опыта	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Y , МПа	34,7	41,4	39,0	39,2	29,5	26,6	30,0	34,5	32,2	41,4	33,7
Номер опыта	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
Y , МПа	40,9	23,9	33,3	27,7	35,9	25,0	33,3	42,0	49,2	17,5	41,0

Номер опыта	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	
Y, МПа	35,6	27,2	39,0	30,0	35,4	36,4	33,2	32,4	37,7	36,9	

Задание для студентов специализации «Технология стекла и ситаллов»

Для изучения процесса формования ленты листового полированного стекла на расплаве олова проведен активный эксперимент. На основании априорной информации выбраны наиболее значимые факторы: x_1 – съем стекломассы, т/сут; x_2 – уровень олова в ванне расплава, мм; x_3 – температура олова, °С; x_4 – температура ленты стекла, °С; x_5 – давление защитной атмосферы в ванне расплава, Па. В качестве выходной переменной (отклика) определяли содержание олова на нижней поверхности ленты стекла, г/м² (Y). Для получения уравнения регрессии выбран ЦКРП при количестве факторов, равном пяти (прил. 11). Ядро плана представляет собой полуреплику (ДФЭ) 2^{5-1} с генерирующим соотношением $x_5 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4$. Величина звездного плеча $\alpha = 2,00$. Число опытов равно 32.

Нулевой уровень, интервалы и уровни варьирования для выбранного плана приведены в табл. 43.

Таблица 43

Исходные данные для студентов специализации «Технология стекла и ситаллов» при построении матрицы планирования ЦКРП

Фактор	Нулевой уровень X_{i0}	Интервал варьирования ΔX_i	Верхний уровень		Нижний уровень	
			(+1)	(+2)	(-1)	(-2)
Съем стекломассы (x_1), т/сут	650	100	750	850	550	450
Уровень олова в ванне расплава (x_2), мм	55	5	60	65	50	45
Температура олова (x_3), °С	800	50	850	900	750	700
Температура ленты стекла (x_4), °С	950	25	975	1000	925	900
Давление защитной атмосферы в ванне расплава (x_5), Па	30	5	35	40	25	20

Результаты опытов представлены в табл. 44.

Таблица 44

**Результаты исследований содержания олова
на нижней поверхности ленты стекла**

Номер опыта	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$Y, \text{ г/м}^2$	0,650	0,540	0,585	0,365	0,254	0,500	0,580	0,365	0,320	0,458	0,480
Номер опыта	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
$Y, \text{ г/м}^2$	0,568	0,450	0,220	0,158	0,340	0,500	0,440	0,570	0,520	0,430	0,670
Номер опыта	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	
$Y, \text{ г/м}^2$	0,400	0,650	0,420	0,470	0,460	0,520	0,490	0,580	0,560	0,520	

**Задание для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной
и строительной керамики»**

С целью изучения процесса прессования керамических плиток для внутренней облицовки стен проведен активный эксперимент.

На основании априорной информации выбраны следующие наиболее значимые факторы: x_1 – гранулометрический состав пресс-порошка (массовая доля остатка на сите с сеткой № 025), мас. %; x_2 – температура штампа, °С; x_3 – влажность пресс-порошка, %; x_4 – давление прессования, МПа, x_5 – разнотолщинность керамической плитки, мм.

В качестве выходной переменной (отклика) определяли предел прочности при изгибе керамической плитки для внутренней облицовки стен, МПа (Y). Для получения уравнения регрессии выбран ЦКРП при количестве факторов, равном пяти (прил. 11). Ядро плана представляет собой полуреплику (ДФЭ) 2^{5-1} с генерирующим соотношением $x_5 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4$. Величина звездного плеча $\alpha = 2,00$. Число опытов равно 32.

Нулевой уровень, интервалы и уровни варьирования для выбранного плана приведены в табл. 45.

**Исходные данные для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной и строительной керамики»
при построении матрицы планирования ЦКРП**

Фактор	Нулевой уровень X_{i0}	Интервал варьирования ΔX_i	Верхний уровень		Нижний уровень	
			(+1)	(+2)	(-1)	(-2)
Гранулометрический состав пресс-порошка (массовая доля остатка на сите с сеткой № 025) (x_1), мас. %	20	5	15	10	25	30
Температура штампа (x_2), °С	50	10	60	70	40	30
Влажность пресс-порошка (x_3), %	5,0	0,5	5,5	6,0	4,5	4,0
Давление прессования (x_4), МПа	30	2	32	34	28	26
Разнотолщинность плитки (x_5), мм	0,5	0,2	0,7	0,9	0,32	0,1

Результаты опытов представлены в табл. 46.

Результаты исследований предела прочности при изгибе керамической плитки для внутренней облицовки стен

Номер опыта	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Y, МПа	13,7	17,4	15,0	15,2	16,8	15,6	15,0	19,5	11,2	10,4	9,7
Номер опыта	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
Y, МПа	12,9	14,9	15,3	15,7	15,9	13,0	13,3	14,0	13,2	17,5	13,0
Номер опыта	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	
Y, МПа	15,6	17,2	16,0	13,6	15,1	13,4	12,2	14,8	14,6	14,1	

Получить статистическую модель в виде полинома второй степени, проверить значимость коэффициентов регрессии и адекватность модели, найти оптимальное значение технологических параметров, при которых достигается максимальное значение прочности.



◆ Порядок выполнения ◆ задания

1. Присвоить **ORIGIN:=1**.

2. Записать план ЦКРП, сформировав матрицу **X** размером 6×32 (6 столбцов и 32 строки). В первом столбце ввести значения фиктивной переменной $x_0 = 1$, в остальных пяти столбцах – значения факторов в кодированном виде, согласно таблице для ротатбельного плана, представленного в приложении 11.

3. Вычислить коэффициенты уравнения регрессии путем решения системы нормальных уравнений, используя приемы матричной алгебры. Для этого следует выполнить следующие операции:

– представить значения отклика в виде вектор-столбца **Y**;

– найти произведения $\mathbf{X11} := \overrightarrow{(\mathbf{X}^{<2>} \cdot \mathbf{X}^{<2>})}$ или $\mathbf{X11} := (\mathbf{X}^{<2>})^2$, $\mathbf{X22} := (\mathbf{X}^{<3>})^2$, ..., $\mathbf{Xjj} := (\mathbf{X}^{<j+1>})^2$ (в векторы будут записаны значения, полученные при их умножении на самих себя), а также $\mathbf{X12} := \overrightarrow{(\mathbf{X}^{<2>} \cdot \mathbf{X}^{<3>})}$, $\mathbf{X13} := \overrightarrow{(\mathbf{X}^{<2>} \cdot \mathbf{X}^{<4>})}$, ..., $\mathbf{Xij} := \overrightarrow{(\mathbf{X}^{<i+1>} \cdot \mathbf{X}^{<j+1>})}$;

– объединить матрицу **X** и полученные ранее произведения в матрицу **Xp** с помощью функции **augment**;

– рассчитать вектор-столбец коэффициентов полинома по формуле $\mathbf{B} = (\mathbf{Xp}^T \cdot \mathbf{Xp})^{-1} \cdot \mathbf{Xp}^T \cdot \mathbf{Y}$.

4. Согласно формуле, представленной в теоретических сведениях (см. на с. 82), вычислить дисперсию воспроизводимости по результатам опытов в центре плана (отклики на опыты в центре плана представить в виде вектора **Y0**).

5. Проверить значимость коэффициентов полинома:

– определить дисперсии $s_{b_0}^2, s_{b_j}^2, s_{b_{ij}}^2, s_{b_{jj}}^2$ и стандартное отклонение для коэффициентов b_0, b_j, b_{ij}, b_{jj} ;

– рассчитать для каждого коэффициента значения критерия Стьюдента (в формулу взамен b_i подставить значения коэффициентов b_0, b_j, b_{ij}, b_{jj} и соответствующие им стандартные отклонения) и сравнить с табличным, выбранным при $\alpha = 0,05$ и $\nu = n_0 - 1$.

6. Провести пересчет коэффициентов полинома с учетом того, что часть незначима и их следует исключить из уравнения. Для

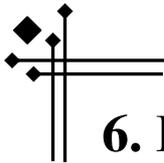
этого необходимо сформировать матрицу, в которую включены столбцы, соответствующие факторам при значимых коэффициентах, и рассчитать вектор-столбец коэффициентов.

7. Записать полученный полином и, используя его, найти значения отклика.

8. Определить по формулам, представленным в теоретической части (см. на с. 83), остаточную дисперсию и дисперсию адекватности.

9. Проверить адекватность полученной модели с использованием критерия Фишера.

10. Сделать выводы по выполненной работе. Представить описание влияния факторов на отклик в соответствии с полученной моделью.



6. ПОСТРОЕНИЕ ДИАГРАММ «СОСТАВ – СВОЙСТВО»

6.1. Общие сведения

В химической технологии часто приходится решать задачи поиска оптимального химического состава смеси для синтеза материалов с заданными свойствами. Особенность проведения экспериментальных исследований, позволяющих установить влияние содержания компонентов смеси на свойства синтезируемого материала, заключается в том, что входные переменные (содержание компонентов) зависят друг от друга (закоррелированы) и связаны между собой условием

$$\sum_{i=1}^q x_i = 1 = \text{const},$$

где x_i – концентрация компонента ($i = 1, 2, \dots, q$, здесь q – количество компонентов).

Это обстоятельство не позволяет использовать для проведения эксперимента ранее рассмотренные планы первого (ПФЭ,ДФЭ) и второго порядков (ЦКРП). Для этого применяются специальные методы, причем получаемая зависимость между содержанием компонентов смеси и свойством отображается графически в виде диаграмм «состав – свойство», которые, как и диаграммы состояния силикатных систем, представляют в виде правильного $(q - 1)$ -мерного симплекса.

Симплекс (лат. *simplex* – простой) – выпуклый многогранник, образованный множеством $k + 1$ точек в k -мерном пространстве и имеющий минимальное количество вершин. Например, для двухмерного пространства ($k = 2$) в качестве симплекса будет выступать треугольник (рис. 10, а), а для трехмерного ($k = 3$) – тетраэдр (рис. 10, б).

Содержание компонентов на диаграммах «состав – свойство» выражается в массовых, молярных или объемных процентах. Спо-

соб отчета содержания может быть различным. Например, в концентрационном треугольнике Гиббса вершины треугольника соответствуют чистым веществам, т. е. 100-му содержанию того компонента, обозначение которого стоит у данного угла треугольника; два других угла треугольника соответствуют его нулевому содержанию. Отсчет величины содержания каждого компонента ведется от угла с его нулевым содержанием к вершине, соответствующей 100-му содержанию данного компонента.

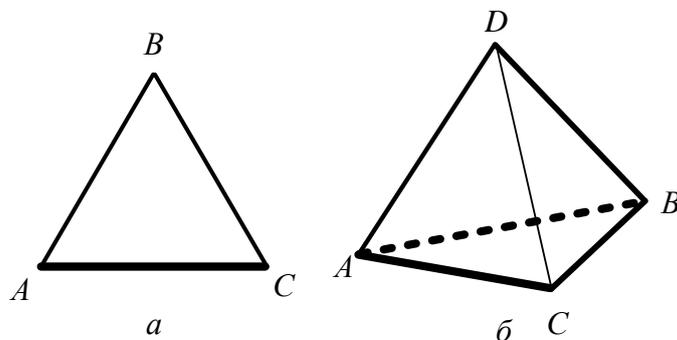


Рис. 10. Графическое отображение симплекса на плоскости для систем, содержащих:
 a – три компонента ($q = 3$); $б$ – четыре компонента ($q = 4$)

Проекция получаемой на основе экспериментальных исследований поверхности отклика (Y) на плоскость концентрационного треугольника представляют в виде линий равных значений (изолиний).

Для многих силикатных систем описать изменение свойства от состава с помощью линейных функций не удастся, необходимо использовать полиномы второго и более высоких порядков. Чем выше степень полинома, тем больший объем исследований требуется для определения его коэффициентов и построения диаграммы «состав – свойство». Если в качестве шага выбрать изменение содержания компонентов смеси на 10%, тогда при изучении трехкомпонентной системы требуется провести 66 опытов.

Методы планирования эксперимента, используемые при изучении многокомпонентных систем, позволяют существенно сократить объем исследований; получать регрессионные уравнения, отражающие взаимосвязь между содержанием компонентов и изучаемым свойством; строить диаграммы «состав – свойство» и осуществлять их интерпретацию.

- В таком случае исследователь решает следующие задачи:
- выбор модели и плана эксперимента;
 - экспериментальное определение свойств смесей (синтезированных материалов);
 - расчет коэффициентов выбранной модели по полученным значениям свойства;
 - проверка адекватности модели;
 - интерпретация полученных результатов.

6.2. Симплекс-решетчатые планы Шеффе

Расположение и количество опытных точек на симплексе определяется выбранным планом эксперимента. Широкое распространение для получения диаграмм «состав – свойство» получили *симплекс-решетчатые планы*, предложенные Шеффе. Эти планы позволяют при сравнительно малом количестве опытов определить коэффициенты для специально выведенных Шеффе приведенных полиномов второго и более высоких порядков и оценить влияние содержания компонентов на свойства смеси. При таком планировании экспериментальные точки равномерно располагаются в узлах $\{q, n\}$ -решетки, накладываемой на симплекс, где q – число компонентов смеси; n – степень полинома. Некоторые примеры планов Шеффе для трехкомпонентных систем представлены на рис. 11.

Рассмотрим подробнее симплекс третьего порядка для трех факторов (рис. 11, в). В каждой узловой точке симплекса третьего порядка содержится по три части компонентов. В точке x_3 смесь состоит из трех частей третьего компонента; в точке x_{122} к одной части первого компонента добавлены две части второго; в точке x_{223} к двум частям второго добавлена одна часть третьего, а точка x_{123} содержит по одной части всех трех компонентов.

Координаты точек симплексной решетки можно представить и в виде матрицы планирования. В табл. 47 приведена матрица планирования для построения полинома второй степени ($n = 2$) в трехкомпонентной системе ($q = 3$).

Индексы отклика (y), представленные в табл. 47, указывают, для какой экспериментальной точки (смеси) получены его значения. Например, условное обозначение отклика y_{12} показывает, что

значение свойства определено для точки, координаты которой соответствуют одной части первого компонента ($x_1 = 0,5$) и одной части второго компонента ($x_2 = 0,5$).

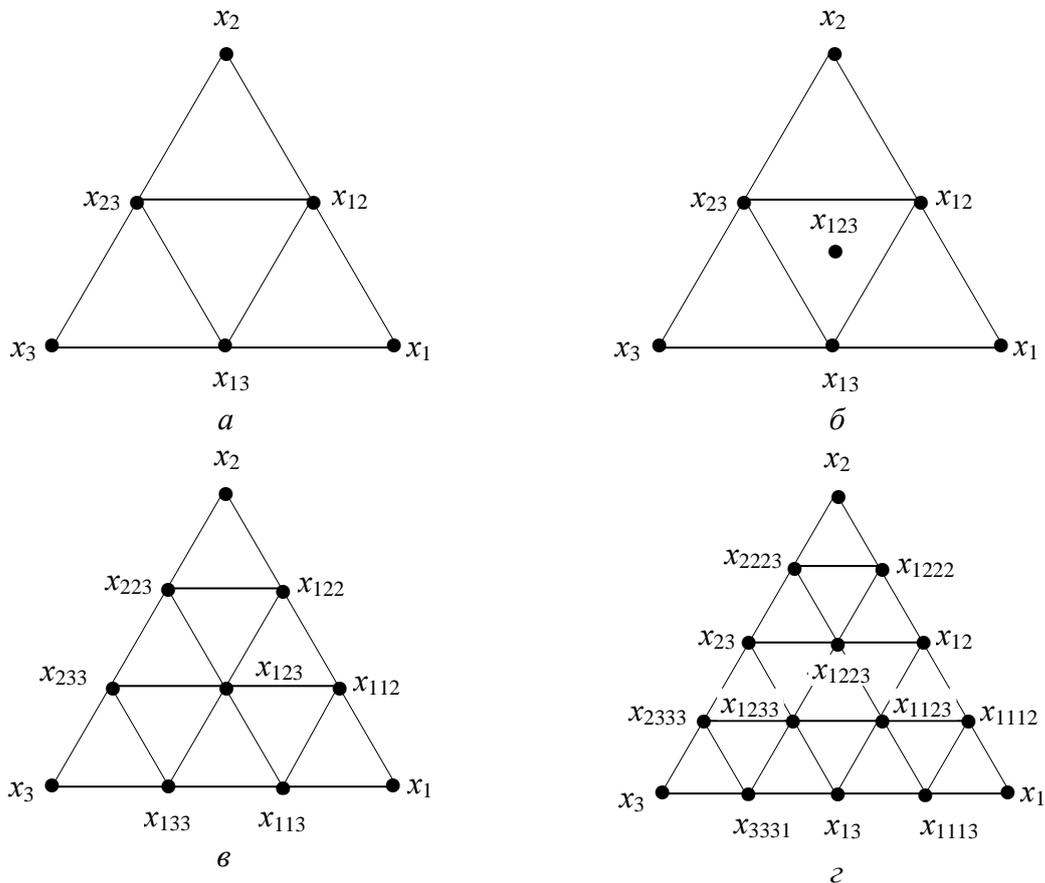


Рис. 11. Планы Шеффе ($\{3, n\}$ -решетки на симплексе) для получения полиномов:
a – второго порядка; *б* – неполного третьего порядка;
в – третьего порядка; *г* – четвертого порядка

Таблица 47

Матрица планирования для $\{3, 2\}$ -решетки

Номер состава	x_1	x_2	x_3	y
1	1,00	0,00	0,00	y_1
2	0,00	1,00	0,00	y_2
3	0,00	0,00	1,00	y_3
4	0,50	0,50	0,00	y_{12}
5	0,50	0,00	0,50	y_{13}
6	0,00	0,50	0,50	y_{23}

Расчет коэффициентов полинома при построении диаграмм «состав – свойство» осуществляют в соответствии с выведенными формулами. Например, для приведенного полинома третьей степени

$$y = \beta_1 \cdot x_1 + \beta_2 \cdot x_2 + \beta_3 \cdot x_3 + \beta_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + \beta_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + \beta_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 + \\ + \gamma_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot (x_1 - x_2) + \gamma_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot (x_1 - x_3) + \\ + \gamma_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot (x_2 - x_3) + \beta_{123} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$$

коэффициенты могут быть вычислены на основе результатов опытов (значений отклика в экспериментальных точках), согласно следующим формулам:

$$\beta_1 = y_1 \text{ и т. д.}, \\ \beta_{12} = \frac{9}{4} \cdot (y_{112} + y_{122} - y_1 - y_2), \\ \beta_{13} = \frac{9}{4} \cdot (y_{113} + y_{133} - y_1 - y_3), \\ \beta_{23} = \frac{9}{4} \cdot (y_{223} + y_{233} - y_2 - y_3), \\ \gamma_{12} = \frac{9}{4} \cdot (3 \cdot y_{112} - 3 \cdot y_{122} - y_1 + y_2), \\ \gamma_{13} = \frac{9}{4} \cdot (3 \cdot y_{113} - 3 \cdot y_{133} - y_1 + y_3), \\ \gamma_{23} = \frac{9}{4} \cdot (3 \cdot y_{223} - 3 \cdot y_{233} - y_2 + y_3), \\ \beta_{123} = 27 \cdot y_{123} - \frac{27}{4} \cdot (y_{112} + y_{122} + y_{113} + y_{133} + y_{223} + y_{233}) + \\ + \frac{9}{2} \cdot (y_1 + y_2 + y_3).$$

Для проверки адекватности уравнения регрессии ставят опыты в дополнительных, так называемых **контрольных точках**. Число контрольных точек и их координаты связаны с постановкой задачи и особенностями эксперимента.

Проверку адекватности проводят в каждой контрольной точке. Для этого составляют отношение

$$t = \frac{\Delta y \cdot \sqrt{n}}{s_y \cdot \sqrt{1 + \xi}} < t_{\alpha / l, \nu},$$

где $\Delta y = |y_{\text{эксп}} - y_{\text{расч}}|$; n – число параллельных опытов в каждой точке; s_y – стандартное отклонение, рассчитанное исходя из дисперсии воспроизводимости; ξ – величина, которая зависит только от состава смеси и определяется для полиномов заданного порядка, согласно соответствующим графикам, приведенным в литературе.

Величина t сравнивается с табличным значением $t_{\alpha/l, \nu}$, которое определяется на основании числа степеней свободы ν (принимается равным числу степеней свободы дисперсии воспроизводимости) и уровня значимости α / l (где l – число контрольных точек). Гипотеза об адекватности принимается, если $t_{\alpha/l, \nu} > t$.

Доверительный интервал рассчитывают по формуле

$$\Delta = \pm t_{\alpha/m, \nu} \cdot \frac{s_y}{\sqrt{n}} \cdot \xi^{0,5},$$

где $\pm t_{\alpha/m, \nu}$ – табличное значение критерия Стьюдента, которое определяется исходя из числа степеней свободы, равного числу степеней свободы дисперсии воспроизводимости, и уровня значимости α / m (здесь m – число коэффициентов в модели).

При изучении диаграмм «состав – свойство» многокомпонентных смесей часто возникает необходимость исследовать зависимость свойства от состава не во всей области изменения концентрации компонентов (например, исследователя не интересуют свойства смесей со 100%-ным содержанием компонентов), а в локальном участке диаграммы, т. е. внутри внешнего симплекса следует выделить внутренний (рис. 12). Тогда изучаемая локальная область на диаграмме представляет собой симплекс, координаты вершин которого $A_1(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_q^{(1)})$, $A_2(x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, \dots, x_q^{(2)})$, $A_q(x_1^{(q)}, x_2^{(q)}, \dots, x_q^{(q)})$ известны.

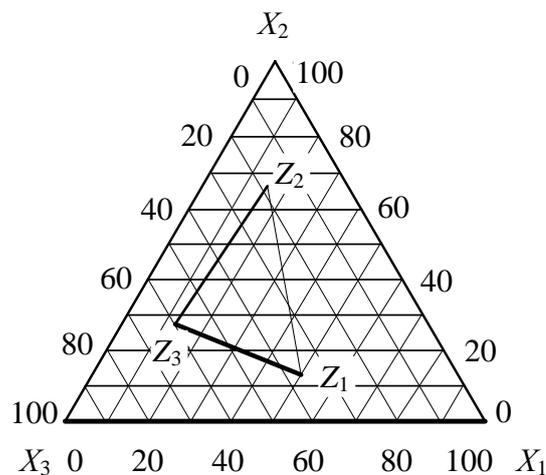


Рис. 12. Выделение локальной области во внешнем симплексе

Чтобы иметь возможность применять в этом случае планы, используемые для изучения полных диаграмм, проводят перенормировку и принимают переменные в вершинах за самостоятельные псевдокомпоненты (z_1, z_2, \dots, z_q) так, чтобы для всей области локального симплекса выполнялось условие

$$\sum_{i=1}^q z_i = 1,$$

где z_i – координаты псевдокомпонентов.

Планирование экспериментов осуществляется, как и для ранее описанных планов Шеффе, только в системе координат псевдокомпонентов (z_1, z_2, \dots, z_q). При проведении экспериментов переходят от псевдокомпонентов z_i к исходным компонентам x_i . Для любой u -й точки плана этот пересчет осуществляется по формуле

$$x_i^{(u)} = x_i^{(1)} + z_2^{(u)} \cdot (x_i^{(2)} - x_i^{(1)}) + z_3^{(u)} \cdot (x_i^{(3)} - x_i^{(1)}) + \dots + z_q^{(u)} \cdot (x_i^{(q)} - x_i^{(1)}),$$

где x_i – содержание i -го компонента в вершине $z_j(A_j)$.

После выполнения исследований на основе полученных результатов рассчитывают коэффициенты полинома в координатах псевдокомпонентов

$$y = f(z_1, z_2, \dots, z_q),$$

используя формулы для соответствующих планов, и проверяют его адекватность. Для практического использования это уравнение с помощью формул преобразуют в исходную систему координат $y = f(x_1, x_2, \dots, x_q)$.

Задание для студентов специализации «Технология стекла и ситаллов»

С целью установления взаимосвязи химического состава, температуры формования и температуры верхнего предела кристаллизации листовых стекол предполагалось построить математические модели и диаграммы «состав – свойство».

Стекла синтезировались в области системы $\text{Na}_2\text{O} - \text{MgO} - \text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2$, ограниченной содержанием компонентов, мас. %: SiO_2 (x_1) – 70,77–74,91; Na_2O (x_2) – 13,57–17,72; $\text{MgO} + \text{CaO}$ (x_3) –

9,79–13,17; количество Al_2O_3 поддерживалось постоянным – 1,72 мас. %. В локальной области диаграммы реализован симплекс-решетчатый план Шеффе, позволяющий рассчитать коэффициенты полинома неполного третьего порядка (см. рис. 11, б на с. 93).

Матрица планирования и результаты эксперимента (в каждой точке делали по три параллельных опыта для проверки адекватности модели) приведены в табл. 48.

Таблица 48

Матрица планирования для студентов специализации «Технология стекла и ситаллов» и результаты исследований

Номер опыта	Содержание псевдокомпонентов, доли единиц			Температура верхнего предела кристаллизации, °С	Температура формования, °С
	z_1	z_2	z_3		
1	1,00	0,00	0,00	960	974
2	0,00	1,00	0,00	900	920
3	0,00	0,00	1,00	1000	955
4	0,5	0,5	0,00	925	942
5	0,00	0,5	0,5	930	931
6	0,5	0,00	0,5	970	966
7	0,33	0,33	0,33	920	927

Для проверки адекватности модели провели два контрольных опыта ($l = 2$) в точках с координатами $z_1 = 0,33$; $z_2 = 0,33$; $z_3 = 0,33$ и $z_1 = 0,40$; $z_2 = 0,20$; $z_3 = 0,40$. Для этих составов, согласно справочным данным, $\zeta = 1$, уровень значимости $\alpha = 0,05$.

Экспериментальные значения температур кристаллизации и формования для проведенных опытов в контрольных точках составили соответственно: для первой – 950 и 948°С; для второй – 970 и 958°С. Дисперсия воспроизводимости, рассчитанная для трех серий параллельных опытов, – $s_0^2 = 21,852$ (число степеней свободы $\nu = 18$).

Вычислить коэффициенты неполного полинома третьей степени в координатах псевдокомпонентов, проверить адекватность полученной модели и построить трехкомпонентные диаграммы «состав – свойство», иллюстрирующие взаимосвязь между содержанием компонентов в составе стекла, температурой верхнего предела кристаллизации и температурой формования.

**Задание для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной
и строительной керамики»**

Изучалось влияние содержания нефтяного кокса и порошков карбида кремния с различной зернистостью на кажущуюся плотность формуемых образцов. Исходные компоненты: тонкомолотый (менее 1 мкм) нефтяной кокс – x_1 ; порошок карбида кремния зернистостью около 100 мкм – x_2 ; порошок карбида кремния зернистостью порядка 20 мкм – x_3 . Исследовалась локальная область диаграммы с координатами вершин: $z_1 = 1,0; z_2 = 0,0; z_3 = 0,0$ ($x_1 = 80, x_2 = 10, x_3 = 10$); $z_1 = 0,0; z_2 = 1,0; z_3 = 0,0$ ($x_1 = 10, x_2 = 80, x_3 = 10$); $z_1 = 0,0; z_2 = 0,0; z_3 = 1,0$ ($x_1 = 10, x_2 = 10, x_3 = 80$). Для проведения эксперимента был выбран симплекс-план из 10 опытов (см. рис. 11, с на с. 93), позволяющий аппроксимировать поверхность отклика полиномом третьей степени.

Матрица планирования и результаты эксперимента (в каждой точке делали по три параллельных опыта для проверки адекватности модели) представлены в табл. 49.

Таблица 49

**Матрица планирования для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной и строительной керамики»
и результаты исследований**

Номер опыта	Содержание псевдокомпонентов, доли единиц			Кажущаяся плотность, г/см ³
	z_1	z_2	z_3	
1	1,00	0,00	0,00	$y_1 = 1,43$
2	0,00	1,00	0,00	$y_2 = 2,12$
3	0,00	0,00	1,00	$y_3 = 1,92$
4	0,66	0,33	0,00	$y_{112} = 1,78$
5	0,33	0,66	0,00	$y_{122} = 2,06$
6	0,66	0,00	0,33	$y_{113} = 1,58$
7	0,33	0,00	0,66	$y_{133} = 1,86$
8	0,00	0,66	0,33	$y_{223} = 2,14$
9	0,00	0,33	0,66	$y_{233} = 2,02$
10	0,33	0,33	0,33	$y_{123} = 1,83$

Для проверки адекватности модели провели два контрольных опыта ($l = 2$) в точках с координатами $z_1 = 0,2$ ($x_1 = 24$ мас. %); $z_2 = 0,33$ ($x_2 = 33,1$ мас. %); $z_3 = 0,47$ ($x_3 = 42,9$ мас. %) и $z_1 = 0,5$ ($x_1 = 45$ мас. %);

$z_2 = 0,25$ ($x_2 = 27,5$ мас. %); $z_3 = 0,25$ ($x_3 = 27,5$ мас. %). Для этих составов, согласно справочным данным, $\zeta = 1$, уровень значимости $\alpha = 0,05$.

Экспериментальные значения кажущейся плотности для проведенных опытов в контрольных точках составили 1,889 и 1,732 г/см³. Дисперсия воспроизводимости, рассчитанная для трех серий параллельных опытов, – $s_0^2 = 0,00024$ (число степеней свободы $\nu = 24$).

Вычислить коэффициенты приведенного полинома третьей степени в координатах псевдокомпонентов, проверить адекватность полученной модели и построить трехкомпонентную диаграмму «состав – свойство», иллюстрирующую взаимосвязь между соотношением нефтяного кокса и порошков карбида кремния с разной дисперсностью и кажущейся плотностью образцов.



Порядок выполнения задания

1. По формулам, приведенным в теоретической части (см. на с. 94), исходя из экспериментальных данных определения свойства, рассчитать коэффициенты полинома и записать полученный полином.

2. Проверить адекватность модели, используя результаты контрольных опытов:

– на основании полученного полинома найти значение свойства в контрольных точках;

– вычислить значение критерия Стьюдента для обеих контрольных точек и сравнить его с табличным.

3. Рассчитать доверительный интервал для $\zeta_1 = 1$ и $\zeta_2 = 0,75$.

4. Построить для полученной модели в псевдокомпонентах диаграмму «состав – свойство» с использованием пакета STATISTICA for Windows (Version 5.5):

– открыть пакет статистической обработки экспериментальных данных STATISTICA;

– ввести исходные данные (согласно матрице планирования) для построения поверхности отклика в табличное поле пакета STATISTICA (рис. 13);

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
NUM	VAR1	VAR2	VAR3	VAR4	VAR5	VAR6	VAR7	VAR8	VAR9	VAR10
1	1,000	0,000	0,000	1,430						
2	0,000	1,000	0,000	2,120						
3	0,000	0,000	1,000	1,920						
4	,660	,330	0,000	1,780						
5	,330	,660	0,000	2,060						
6	,660	0,000	,330	1,580						
7	,330	0,000	,660	1,860						
8	0,000	,660	,330	2,140						
9	0,000	,330	,660	2,020						
10	,330	,330	,330	1,830						

Рис. 13. Скриншот табличного поля с исходными данными для построения диаграммы «состав – свойство» в программе STATISTICA

– перейти по вкладкам **Graphs** → **Stats 3D XYZ Graphs** → **Ternary Plots** (рис. 14);

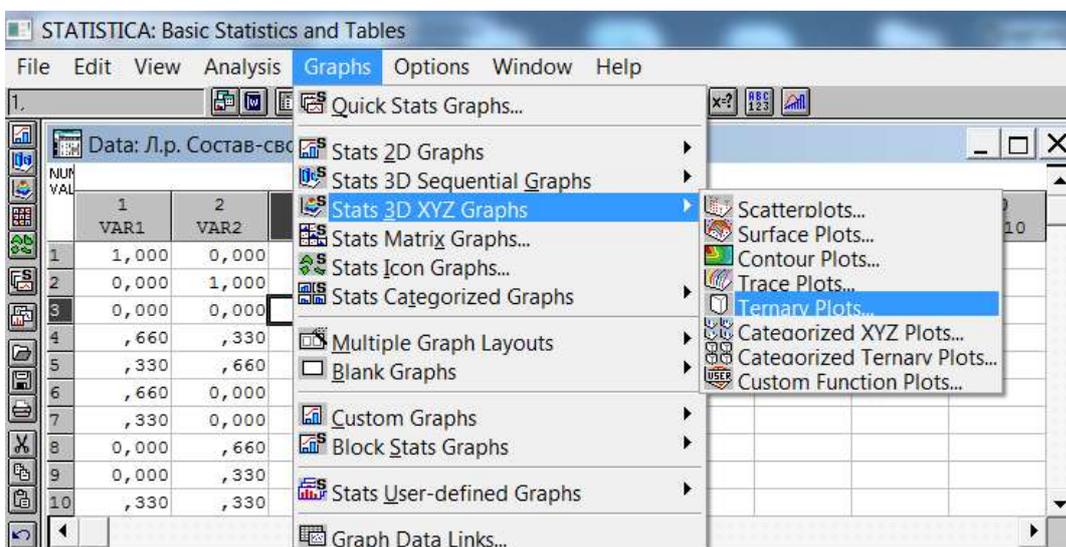


Рис. 14. Скриншот контекстного меню при переходе к вкладке **Ternary Plots**

– в появившемся окне **Ternary Graphs** (рис. 15) зайти во вкладку **Custom** (в данной вкладке задается модель пользователя, на основе которой будет построена поверхность отклика);

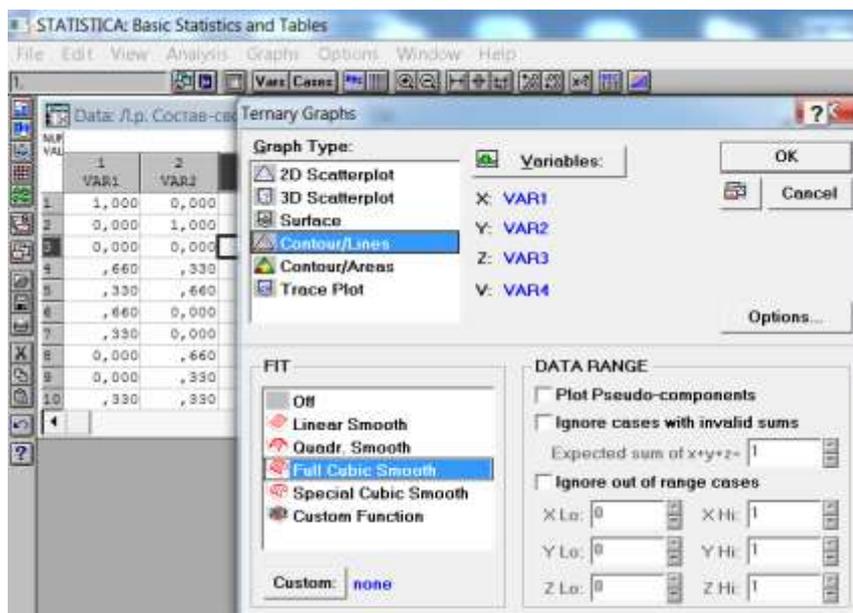


Рис. 15. Скриншот окна Ternary Graphs

– в поле **Enter function** записать ранее полученный полином, заменяя в уравнении обозначения z_1, z_2, z_3 на принятые в программе STATISTICA – x, y, z соответственно. Нажать кнопку **OK**;

– в раскрывшемся окне (рис. 16) нажать кнопку **Variables** и выбрать величины, необходимые для построения поверхности отклика, после чего нажать **OK**;

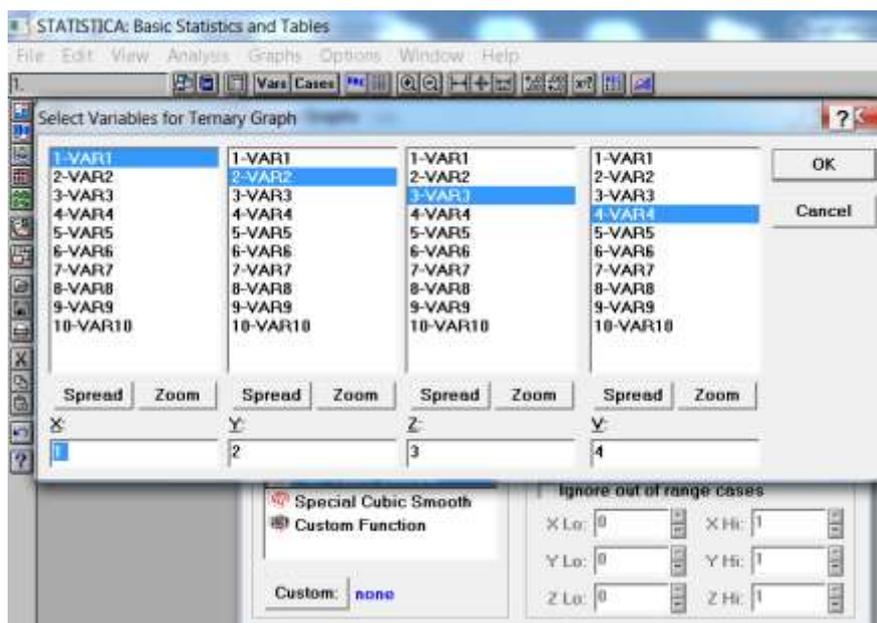


Рис. 16. Скриншот окна выбора переменных Ternary Graphs

– в появившемся окне также нажать кнопку **ОК**, в итоге получим диаграмму «состав – кажущаяся плотность» (рис. 17).

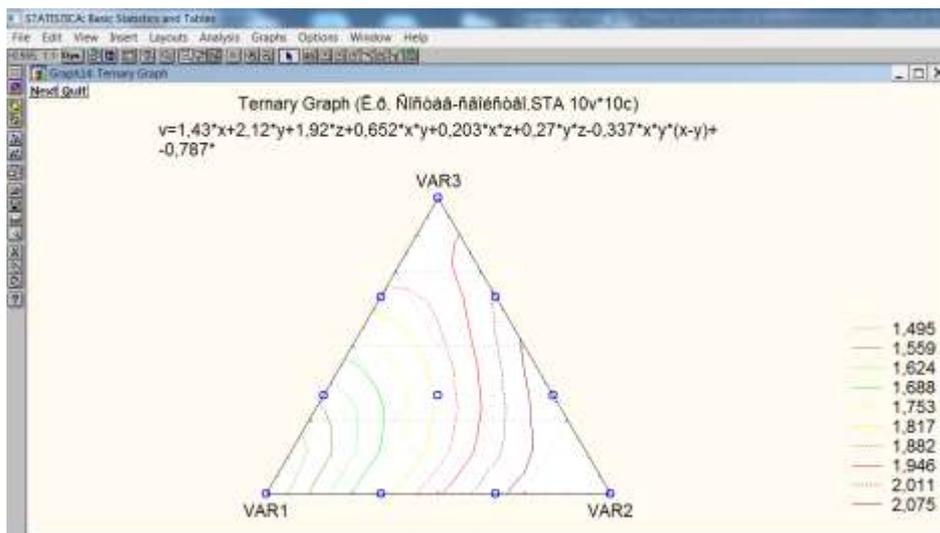


Рис. 17. Скриншот диаграммы «состав – кажущаяся плотность»

Диаграмму и все подписи на ней можно форматировать. Например, для заливки областей равных значений следует кликнуть по полю графика правой клавишей мыши и выбрать в контекстном меню опцию **Change General Layout**. В раскрывшемся окне отметить опцию **Areas** и нажать **ОК**. Появится график с заливкой поверхностей равных значений (рис. 18).

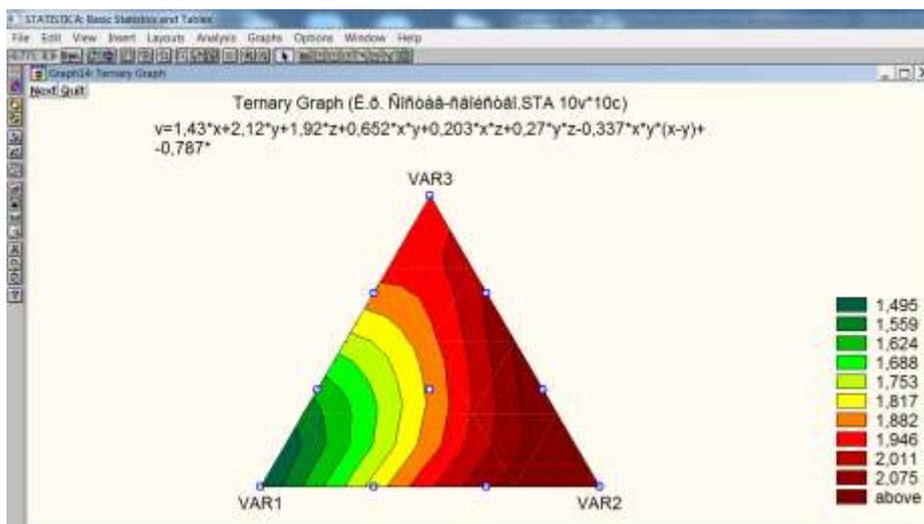


Рис. 18. Скриншот диаграммы с заливкой областей равных значений кажущейся плотности

В верхней части рисунка представлен фрагмент приведенного полинома четвертой степени в координатах псевдокомпонентов, описывающего зависимость кажущейся плотности от состава смеси. Линии равных значений кажущейся плотности показывают влияние псевдокомпонентов системы на данный показатель. Для анализа влияния содержания компонентов смеси необходимо от уравнения регрессии в псевдокомпонентах перейти к уравнению регрессии в натуральных компонентах.

В программе STATISTICA возможно представление поверхности отклика. Для этого в подменю настроек графика **Graph Type** следует выбрать опцию **Surface Plot** и нажать **ОК**. Получим график следующего вида (рис. 19).

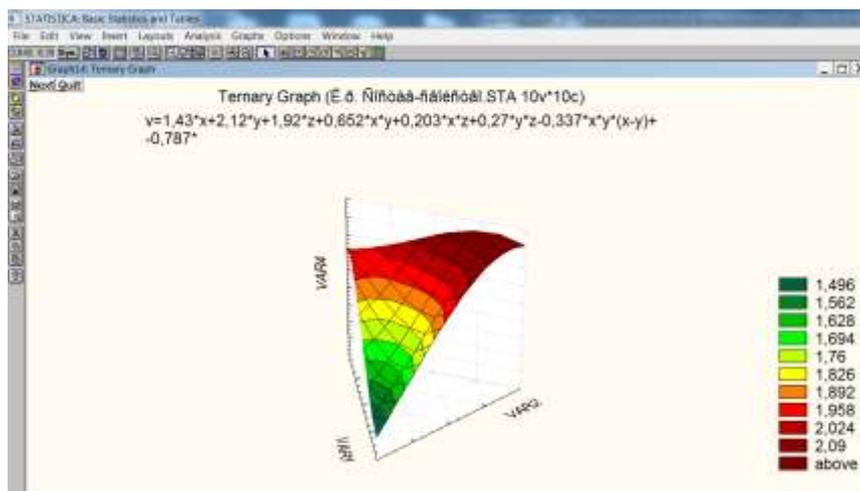
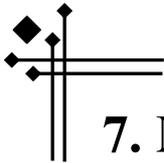


Рис. 19. Скриншот тернарного графика поверхности отклика

5. Сделать выводы по результатам выполненной работы. Охарактеризовать влияние состава смеси на свойство.



7. МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

7.1. Общие сведения

Во многих случаях целью моделирования ХТП является определение оптимальных условий их реализации.

Оптимизация – это целенаправленная деятельность, заключающаяся в получении наилучших результатов при соответствующих условиях.

Рассмотрим основные понятия, используемые при решении задачи оптимизации ХТП.

Критерий оптимальности – количественная оценка оптимизируемого качества. Его значения позволяют сравнивать между собой различные технологические режимы и выбирать оптимальный.

Критерий оптимальности выражают в виде экономической оценки (например, прибыль, норма прибыли, рентабельность, себестоимость). В частных задачах оптимизации, если рассматривается ХТП, протекающий в аппарате или агрегате, критерием оптимальности может служить технологическая характеристика (производительность, качество продукта, выход годного продукта).

Чтобы выбранный критерий оптимальности можно было эффективно использовать, он должен удовлетворять следующим основным требованиям:

- критерий оптимальности должен быть единственным;
- он должен выражаться числом;
- его величина должна изменяться монотонно при улучшении качества функционирования системы.

Управляющие параметры (оптимизирующие факторы) – входные переменные, оказывающие существенное влияние на ХТП: температура, давление, время, состав и количество сырьевой смеси и др. Значения остальных параметров при оптимизации учитываются, но не регулируются.

На управляющие параметры накладываются *ограничения* – технологические величины, которые в процессе работы агрегата (аппарата) не должны выходить из предписываемых технологией допусков.

При оптимизации ХТП на основании выбранного критерия оптимальности составляется так называемая *целевая функция*, представляющая собой зависимость критерия оптимальности от управляющих параметров, влияющих на его значение.

Успешное решение задачи оптимизации ХТП требует ее правильной формулировки, которая предполагает выбор критерия оптимальности, оптимизирующих факторов (управляющих воздействий) и установление ограничений на них, составление целевой функции.

Наиболее часто задача оптимизации в технологии силикатных материалов состоит в том, чтобы определить такие значения управляющих параметров (x_1, x_2, \dots, x_n), при которых значение критерия оптимальности будет максимальным (минимальным) и выполняются ограничения ($a_1 \leq x_1 \leq b_1, a_2 \leq x_2 \leq b_2, \dots, a_n \leq x_n \leq b_n$), накладываемые технологическими, эксплуатационными, конструктивными требованиями.

Решение задачи оптимизации включает следующие этапы:

1) составление математической модели оптимизируемого ХТП. Вместо математической модели можно использовать и сам оптимизируемый объект, однако это потребует вмешательства в нормальное течение технологического процесса, значительных затрат времени и ресурсов;

2) выбор критерия оптимальности, управляющих параметров и их возможных ограничений и формирование целевой функции;

3) поиск оптимальных условий ХТП с помощью выбранного метода оптимизации.

Методы, используемые для решения оптимизационных задач, подразделяются на следующие основные группы:

– *аналитические методы*. Их применяют для сравнительно простых детерминированных процессов, если целевая функция представляет собой аналитическое выражение, дифференцируемое во всем диапазоне изменения переменных, число переменных невелико и на них не накладываются ограничения;

– *методы математического программирования (линейного, динамического, нелинейного)*;

– методы экспериментально-статистической (поисковой) оптимизации используются, если вид целевой функции неизвестен и предполагают планирование и проведение экспериментальных исследований.

Известны также комбинированные методы, сочетающие некоторые достоинства отдельных методов из различных групп.

7.2. Линейное программирование

Метод линейного программирования используется для решения экономических и производственных задач оптимизации, в которых целевая функция представлена линейным уравнением и ограничения на независимые переменные задаются в виде линейных равенств и неравенств. В общем виде задача линейного программирования записывается следующим образом.

Целевая функция

$$F = c_1 \cdot x_1 + c_2 \cdot x_2 + \dots + c_n \cdot x_n,$$

где c_1, c_2, \dots, c_n – коэффициенты; x_1, x_2, \dots, x_n – оптимизируемые параметры.

Ограничения

$$\begin{aligned} a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + \dots + a_{1m} \cdot x_{1m} &\geq b, \\ x_1, x_2, \dots, x_n &\geq 0, \end{aligned}$$

где $a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1m}$ – коэффициенты.

Наиболее типичные экономические и производственные задачи, решаемые методом линейного программирования следующие.

1. Транспортная задача. На нескольких (m) предприятиях A_1, A_2, \dots, A_m выпускается одинаковая продукция в количестве a_1, a_2, \dots, a_m . Потребители продукции B_1, B_2, \dots, B_n находятся на разных расстояниях от предприятий и закупают различное количество продукции b_1, b_2, \dots, b_n . Стоимость перевозки единицы продукции c_{ij} из i -го предприятия к j -му потребителю известна. Необходимо организовать поставку продукции потребителям таким образом, чтобы был удовлетворен их спрос, вся произведенная продукция была вывезена и стоимость перевозок была минимальной.

Математически задача имеет вид

$$F = c_{11} \cdot x_{11} + c_{12} \cdot x_{12} + \dots + c_{m,n-1} \cdot x_{m,n-1} + c_{mn} \cdot x_{mn} =$$

$$= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n c_{i,j} \cdot x_{i,j} \rightarrow \min.$$

Требуется минимизировать целевую функцию F при соблюдении ограничений:

– вся продукция вывезена с предприятий

$$\sum_{j=1}^n x_{ij} = a_i, \quad i = \overline{1, m};$$

– запросы потребителей удовлетворены

$$\sum_{i=1}^m x_{ij} = b_j, \quad j = \overline{1, n};$$

– количество продукции не может быть отрицательным

$$x_{ij} \geq 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad j = \overline{1, n}.$$

2. Задача о наилучшем использовании ресурсов. На предприятии выпускается продукция n видов, для производства которой используется m видов сырья. Заданы ограничения: нормы расходов i -го вида ресурсов на выпуск j -го вида продукции $i = \overline{1, m}, j = \overline{1, n}$, – a_{ij} , имеющиеся их объемы b_1, b_2, \dots, b_m , прибыль от реализации единицы продукции каждого вида c_1, c_2, \dots, c_n . Необходимо составить план выпуска продукции (определить объемы выпуска различных видов продукции) x_1, x_2, \dots, x_n таким образом, чтобы предприятие при заданных ограничениях получило максимальную прибыль.

3. Задача оптимального использования оборудования. Например, необходимо за определенный период времени выпустить N_1 единиц продукта P_1 и N_2 единиц продукта P_2 . Для выпуска этой продукции используются две установки A и B различной мощности и стоимости. Надо так организовать процесс, чтобы расходы на эксплуатацию оборудования были минимальны.

4. Задача о смесях. Для получения смеси используется n сырьевых материалов, в которых содержится m компонентов. Единица j -го сырьевого материала содержит a_{ij} долей компонентов. Стоимость единицы j -го сырьевого материала – c_j . Требуется определить, какое количество сырьевых материалов следует взять

для приготовления смеси, содержащей не менее (не более) b_i i -х компонентов, при обеспечении ее минимальной стоимости.

Целевая функция будет иметь вид

$$F = c_1 \cdot x_1 + c_2 \cdot x_2 + \dots + c_n \cdot x_n \rightarrow \min.$$

Необходимо минимизировать целевую функцию F при соблюдении ограничений:

– условие получения заданного количества смеси K

$$x_1 + x_2 + \dots + x_n = K;$$

– ограничения по содержанию компонентов в сырьевой смеси

$$a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + \dots + a_{1n} \cdot x_n \geq b_1,$$

$$a_{21} \cdot x_1 + a_{22} \cdot x_2 + \dots + a_{2n} \cdot x_n \geq b_2,$$

...

$$a_{m1} \cdot x_1 + a_{m2} \cdot x_2 + \dots + a_{mn} \cdot x_n \geq b_m;$$

– ограничения на количество сырьевого материала, используемого для приготовления смеси

$$x_j \geq 0, j = \overline{1, n}.$$

Частным случаем задачи о смесях является задача определения состава стекла со свойствами, удовлетворяющими заданным требованиям, решение которой можно ускорить при помощи метода линейного программирования.

Целевая функция, которую необходимо максимизировать (например, прочность) или минимизировать (например, температурный коэффициент линейного расширения (ТКЛР)), записывается в виде

$$F = k_1 \cdot P_1 + k_2 \cdot P_2 + \dots + k_n \cdot P_n \rightarrow \max (\min),$$

где k_1, k_2, \dots, k_n – парциальное значение свойства компонента стекла; P_1, P_2, \dots, P_n – содержание компонента стекла, мас. % (мол. %).

Ограничения, составляемые для решения данной задачи, будут содержать четыре подсистемы:

1) требование, чтобы сумма содержаний всех компонентов в стекле была равна 100 мас. %:

$$P_1 + P_2 + \dots + P_n = 100;$$

2) вторая подсистема будет содержать неравенства для каждого контролируемого свойства, кроме того, которое оптимизируется. Величина свойства находится в интервале, задаваемом двумя неравенствами:

$$k_1 \cdot P_1 + k_2 \cdot P_2 + \dots + k_n \cdot P_n \leq K_{\text{в}},$$

$$k_1 \cdot P_1 + k_2 \cdot P_2 + \dots + k_n \cdot P_n \geq K_{\text{н}},$$

где $K_{\text{в}}$, $K_{\text{н}}$ – верхний и нижний заданные пределы данного свойства соответственно;

3) в третьей подсистеме при необходимости контролируются соотношения между содержанием компонентов стекла MeO , Me_2O_3 , MeO_2 в целом или соотношения между MeO и любой группой оксидов;

4) четвертую подсистему составляют, если необходимо вводить в стекло оксид или группу оксидов для придания стеклу, например, определенного цвета.

Для решения задач линейного программирования разработан универсальный алгоритм. Решение проводится шаговым методом, или симплекс-методом. Для двухмерных задач (критерий оптимальности зависит от двух переменных) решение возможно найти графически. Тогда в качестве симплекса выступает прямая, которую перемещают параллельно самой себе на графике до тех пор, пока значение критерия оптимальности не достигнет экстремума.

Для n -мерной задачи разработаны специальные расчетные алгоритмы, согласно которым учитывается, что система неравенств определяет границы выпуклого многоугольника и при определении оптимума параллельно самой себе перемещается не прямая, а гиперплоскость. Решение всегда находится в вершине (если оно единственное) или заполняет ребро многогранника.

Задание 1

Пусть имеется два предприятия-производителя, выпускающих однотипную продукцию в количестве 237 и 278 т. Эту продукцию требуется отправить трем потребителям в количестве 145, 210 и 160 т каждому. Известна стоимость перевозки 1 т продукции от производителя к потребителю (табл. 50).

Стоимость перевозки продукции от предприятия к потребителю

Наименование предприятия	Потребитель № 1	Потребитель № 2	Потребитель № 3
	Стоимость перевозки 1 т продукции		
Предприятие <i>A</i>	11,5	7,0	12,0
Предприятие <i>B</i>	6,2	10,0	9,0

Сумма всех заказов потребителей равна сумме произведенной продукции. С помощью метода линейного программирования найти такое распределение продукции, отправляемой потребителям, при котором сумма транспортных расходов будет минимальна.

**Порядок выполнения задания 1**

1. Ввести исходные данные для решения задачи:
– количество продукции, отправляемой потребителю:

$$\mathbf{a} := \begin{pmatrix} 145 \\ 210 \\ 160 \end{pmatrix}$$

- количество продукции, производимой предприятиями:

$$\mathbf{b} := \begin{pmatrix} 237 \\ 278 \end{pmatrix}$$

2. Выполнить проверку баланса количества производимой продукции и передаваемой потребителю:

$$\Sigma \mathbf{a} = 515$$

$$\Sigma \mathbf{b} = 515$$

3. Задать массив данных, содержащий значения стоимости грузоперевозки продукции от предприятия к потребителю:

$$\mathbf{c} := \begin{pmatrix} 11.5 & 7 & 12 \\ 6.2 & 10 & 9.0 \end{pmatrix}$$

4. Определить количество строк в векторе **a** и **b**:

$$\mathbf{M}:=\text{rows}(\mathbf{a})=3$$

$$\mathbf{N}:=\text{rows}(\mathbf{b})=2$$

5. Записать выражение для целевой функции, где **c** – стоимость грузоперевозки, **x** – количество продукции, которое предприятие отправляет потребителю:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) := \sum_{i=0}^{\mathbf{N}-1} \sum_{j=0}^{\mathbf{M}-1} (\mathbf{c}_{i,j} \cdot \mathbf{x}_{i,j})$$

6. Задать начальное условие для решения задачи методом линейного программирования:

$$\mathbf{x}_{\mathbf{N}-1, \mathbf{M}-1} := 0$$

7. Записать систему ограничений для решения задачи.

Внимание! Для введения знаков «=», «>» и т. д. используется панель инструментов **Boolean**.

Given

$$\mathbf{x}_{0,0} + \mathbf{x}_{1,0} = \mathbf{a}_0 \quad \mathbf{x}_{0,0} \geq 0$$

$$\mathbf{x}_{0,1} + \mathbf{x}_{1,1} = \mathbf{a}_1 \quad \mathbf{x}_{0,1} \geq 0$$

$$\mathbf{x}_{1,0} \geq 0$$

$$\mathbf{x}_{0,2} + \mathbf{x}_{1,2} = \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{x}_{1,1} \geq 0$$

$$\mathbf{x}_{0,0} + \mathbf{x}_{0,1} + \mathbf{x}_{0,2} = \mathbf{b}_0 \quad \mathbf{x}_{1,2} \geq 0$$

$$\mathbf{x}_{1,0} + \mathbf{x}_{1,1} + \mathbf{x}_{1,2} = \mathbf{b}_1 \quad \mathbf{x}_{0,2} \geq 0$$

8. Найти решение, используя встроенную функцию Mathcad:

$$\mathbf{X}_{\text{opt}} := \text{Minimize}(\mathbf{f}, \mathbf{x})$$

9. Сделать выводы.

Задание 2

С помощью метода линейного программирования определить оптимальный состав стекла, который характеризуется минимальным ТКЛР, показатель преломления составляет не менее 1,54, модуль упругости – не менее 72,0 ГПа. Допустимые пределы изменения содержания компонентов в составе стекла, мол. %: SiO₂ – 50–66; Al₂O₃ – 0–10; CaO – 0–16; MgO – 0–5; Na₂O – 0–15.

ТКЛР, модуль упругости и показатель преломления стекла определяются по аддитивной формуле:

$$K = \frac{\sum_{i=1}^N m_i \cdot \bar{k}_i}{100},$$

где m_i – содержание i -го компонента в составе стекла, мол. %; \bar{k}_i – приближенно-усредненное парциальное значение свойства i -го компонента в составе стекла по А. А. Аппену (табл. 51). Парциальное значение свойств для SiO_2 принято постоянным, поскольку его содержание в составе стекла не превышает 67 мол. %.

Таблица 51

Приближенно-усредненные парциальные величины свойств компонентов стекла

Наименование свойства	SiO_2	Al_2O_3	CaO	MgO	Na_2O
ТКЛР $\bar{\alpha}_i \cdot 10^7, \text{K}^{-1}$	38	-30	130	60	395
Модуль упругости $\bar{E}_i \cdot 10^{-10}, \text{Па}$	6,4	11,2	10,9	9,0	5,8
Показатель преломления \bar{n}_i	1,475	1,520	1,730	1,610	1,590



Порядок выполнения задания 2

1. Сформировать целевую функцию. В качестве критерия оптимальности выбрать ТКЛР стекла. Переменные в выражении для целевой функции, соответствующие содержанию оксидов, записать с индексом, например x_1, x_2 и т. д.

2. Задать начальные условия для каждой переменной, например $x_1 := 0$.

3. Записать систему ограничений:

– сумма содержаний в стекле всех компонентов должна быть равна 100 мол. %;

– неравенства для свойства модуля упругости и показателя преломления;

– область изменения содержания компонентов стекла. Например, если содержание SiO_2 обозначено через x_1 , тогда данное ограничение в Mathcad запишется следующим образом: $50 \leq x_1 \leq 66$.

4. Найти решение, используя встроенную функцию Mathcad.
5. Перевести состав стекла из молярных процентов в массовые.
6. Сделать выводы.

7.3. Методы нелинейного программирования

Методы нелинейного программирования: градиентные, безградиентные, случайного поиска и др. применяются, если целевая функция имеет нелинейный вид и на независимые переменные могут накладываться нелинейные ограничения, имеющие форму равенств или неравенств. Это численные методы, суть которых заключается в том, что вычисляется ряд значений целевой функции F при различных значениях оптимизирующих факторов; сопоставление значений целевой функции показывает, в каком направлении нужно двигаться в пространстве факторов, чтобы приблизиться к оптимуму. Между собой методы нелинейного программирования отличаются способом определения направления движения к оптимуму, алгоритмизацией поиска.

Оптимизация перебором применяется, если число возможных вариантов конечно. Рассчитывают целевую функцию для всех возможных вариантов и выбирают наибольшее (или наименьшее) значение.

Сканирование – метод, близкий к перебору, но применяемый к непрерывным функциям. Согласно этому методу, выполняется расчет целевой функции для значений оптимизирующих факторов, которые соответствуют координатам точек, расположенных в виде сетки в факторном пространстве. В качестве оптимальных принимаются такие значения независимых переменных, при которых целевая функция достигает максимума (минимума).

В зависимости от того, каким образом задается шаг сетки, формируемой для расчета целевой функции, существуют различные модификации метода сканирования. Рассмотрим простейший случай поиска максимума целевой функции, зависящей от одного фактора.

Зададим пределы изменения фактора x от a до b . Интервал $[a, b]$, на котором производится поиск экстремума целевой

функции, называется *интервалом неопределенности*. Задача поиска экстремума сводится к сужению интервала неопределенности (рис. 20).

Для этого выберем целое число q – количество рассчитываемых значений целевой функции. Равномерно разделим интервал $[a, b]$ с шагом Δx , который найдем по формуле

$$\Delta x = \frac{b - a}{q - 1}.$$

Границы каждого подынтервала назовем *узлами* (на рис. 20 каждый узел обозначен крестиком).

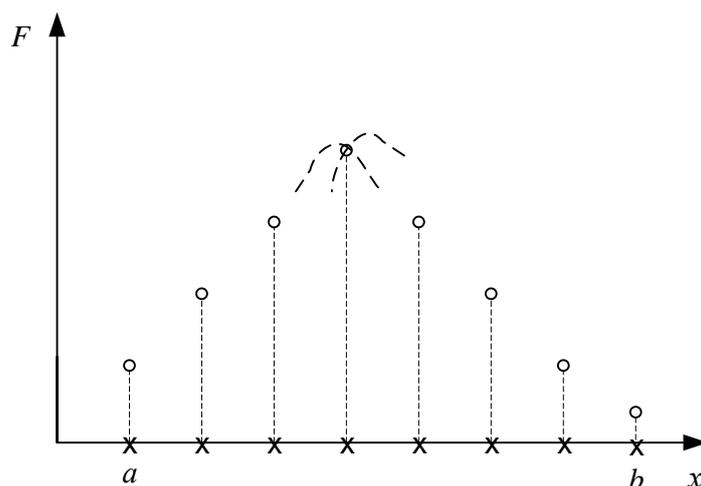


Рис. 20. Поиск максимума целевой функции методом сканирования:
 a, b – границы интервала неопределенности

В каждом узле рассчитаем $F(x)$ (точки на рис. 20). Максимальное значение $F(x)$ достигается при значении оптимизирующего фактора в четвертом узле слева. Истинный максимум может лежать либо справа, либо слева от полученной наилучшей точки (пунктиры на рис. 20). Однако точно положение экстремума не требуется знать, поскольку на производстве установка и поддержание заданного значения оптимизирующего фактора возможно только с определенной точностью.

Если осуществляется поиск оптимума для целевой функции нескольких переменных, тогда пространство поиска покрывается сеткой, в узлах которой выполняется расчет и сравнение значений целевой функции. Метод сканирования универсален

и сравнительно прост, однако при увеличении количества оптимизирующих факторов существенно возрастает объем вычислений.

Методы направленного поиска более эффективны, но не обладают той универсальностью, которой отличается сканирование. Их эффективность связана с тем, что продвижение в факторном пространстве происходит в направлении искомого экстремума. Однако при таком поиске необходимо, чтобы в области изменения оптимизирующих факторов целевая функция имела только один экстремум (максимум или минимум) нужного знака.

При выборе метода направленного поиска экстремума различают два основных случая:

1) одномерный поиск – целевая функция зависит только от одного фактора;

2) многомерный поиск – факторов больше одного.

Группа методов направленного поиска весьма обширна. Рассмотрим лишь некоторые из них.

Метод поочередного изменения переменных (Гаусса – Зейделя) является сравнительно простым, однако при увеличении числа факторов резко возрастает объем вычислений. Суть поиска заключается в поочередном варьировании переменных таким образом, чтобы при изменении каждой из них достигалось максимальное или минимальное значение целевой функции.

Выбираются координаты начальной точки поиска $x_{1н}$ и $x_{2н}$, единичные приращения обоих факторов (шаги) H_1 и H_2 , а также минимально возможные приращения факторов ε_1 и ε_2 .

Рассчитывается значение $F(x_{1н}, x_{2н})$ в точке 1 (рис. 21). Далее, не меняя величины x_2 , начинаем двигаться вдоль оси x_1 , давая на каждом шаге этому фактору приращение H_1 (или $-H_1$, в зависимости от того, при движении в какую сторону будет наблюдаться рост F). На каждом шаге – в точках 2, 3, 4 и т. д. – проводится расчет F . Шаги продолжают до тех пор, пока продолжается увеличение целевой функции.

Неудачными считаются те шаги, для которых получено меньшее значение F , чем на предыдущих; на рис. 21 они обозначены крестиками. После первого неудачного шага (точка 5) следует вернуться в предыдущую точку (в данном случае в точку 4), зафиксировать величину x_1 и начать изменять значение x_2 , задавая ему приращения H_2 (точки 6, 7, 8, 9).

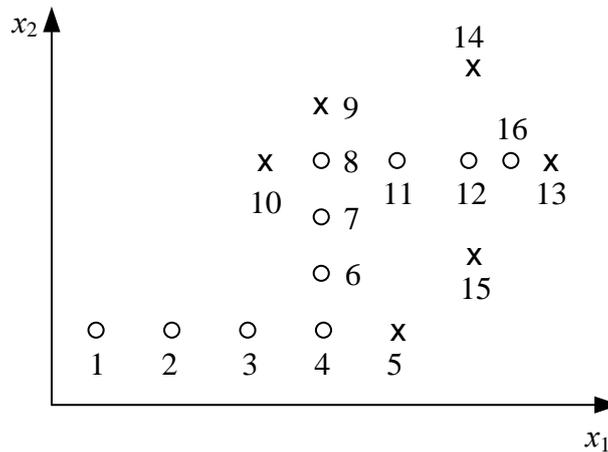


Рис. 21. Поиск оптимума методом поочередного изменения переменных:
 o – удачные шаги; x – неудачные шаги

Поскольку в точке 9 было получено значение целевой функции меньше, чем в точке 8, следует снова изменить направление и двигаться вдоль оси x_1 (точки 11, 12, 13) и т. д. На рис. 21 изображена ситуация, когда из точки 12 двигаться некуда: во всех окружающих точках (11, 13, 14, 15) значение F меньше, чем в данной. Это указывает на приближение к экстремуму, шаги величиной H_1 и H_2 из точки 12 переносят через него. Поэтому необходимо уменьшить величину шага (например, вдвое – см. точку 16) и продолжить поиск экстремума. Уменьшение величины шага может производиться неоднократно. Однако если величина шага H_1 и H_2 становится меньше, чем заданные значения ε_1 и ε_2 , считают, что максимум зафиксирован достаточно точно, и принимают лучшую точку за оптимум.

Метод градиента существует в большом числе вариантов. Поиск оптимума с помощью этих методов основан на свойстве градиента целевой функции, согласно которому вектор градиента по направлению совпадает с направлением наискорейшего возрастания целевой функции. Это позволяет, совершая минимальное количество шагов (вычислений целевой функции), наиболее быстро достигать точки экстремума. Однако градиентные методы требуют расчета производных целевой функции F :

$$\overrightarrow{\text{grad}F} = \frac{\partial F}{\partial x_i},$$

что усложняет решение задачи оптимизации.

Рассмотрим один из простейших вариантов реализации градиентных методов.

Выбирают координаты исходной точки $x_{1н}$ и $x_{2н}$, шаги H_1 и H_2 и малые приращения ε_1 и ε_2 . Поскольку H_1 и H_2 приняты за единичные приращения координат, формула градиента запишется как

$$\overrightarrow{\text{grad}F} = \frac{\partial F}{\partial x_1} \cdot \overrightarrow{H_1} + \frac{\partial F}{\partial x_2} \cdot \overrightarrow{H_2}.$$

Для расчета направления градиента вычисляют частные производные целевой функции по факторам во вспомогательных точках (рис. 22).

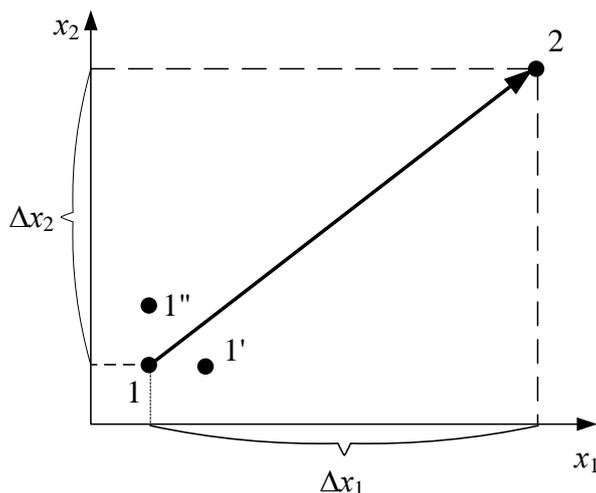


Рис. 22. Поиск оптимума методом градиента:
1 – исходная точка; 1' и 1'' – вспомогательные точки

Около начальной точки 1, для которой рассчитывают значение целевой функции, ставятся две вспомогательные точки: 1' на расстоянии ε_1 вдоль оси x_1 и 1'' на расстоянии ε_2 вдоль оси x_2 , и в них вычисляют производные по формулам

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} \approx \frac{F(x_1 + \varepsilon_1, x_2) - F(x_1, x_2)}{\varepsilon_1},$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_2} \approx \frac{F(x_1, x_2 + \varepsilon_2) - F(x_1, x_2)}{\varepsilon_2}.$$

После этого делают шаг в точку 2. Ее координаты находятся по формуле

$$x_{i+1,j} = x_{ij} + \Delta x_{ij},$$

причем

$$\Delta x_{ij} = \frac{\partial F}{\partial x_j} \cdot H_j,$$

где i – номер точки; j – номер фактора.

В точке 2 проводится расчет целевой функции. Если шаг оказался удачным, т. е. если $F_{i+1} > F_i$ (при поиске максимума), то делают следующий шаг в том же направлении. Если и этот шаг удачен, тогда продолжают двигаться в этом же направлении, рассчитывая при каждом шаге значение целевой функции и сравнивая его с предыдущим.

Если шаг неудачен (значение целевой функции в точке 2 меньше, чем в точке 1), в таком случае обычно уменьшают величину шага, например, вдвое. Теперь, если уменьшенный шаг в том же направлении будет удачен, нет смысла делать еще шаг, поскольку он приведет в «плохую» точку (см. рис. 23, a : крестик – неудачный шаг, $(i + 2)$ – точка половинного шага).

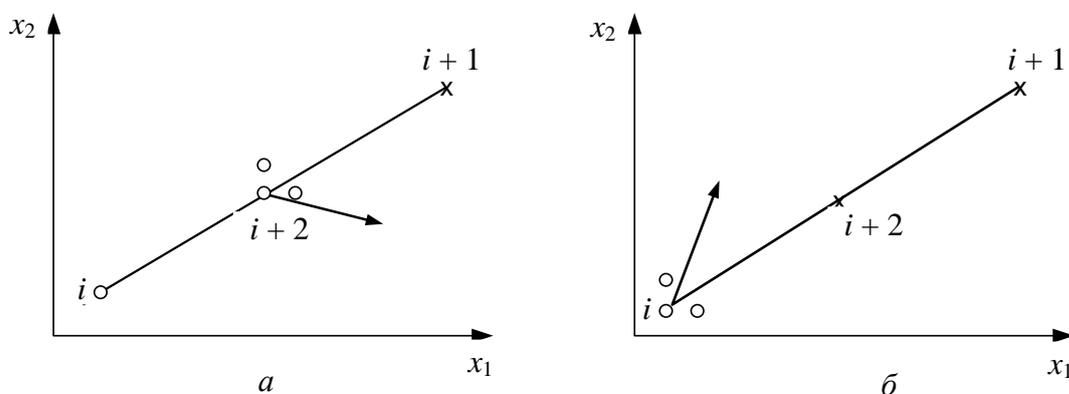


Рис. 23. Поиск оптимума методом градиента после совершения неудачного шага:

a – уменьшенный шаг удачен; b – уменьшенный шаг неудачен:

x – неудачный шаг; \rightarrow – новое направление градиента

В этом случае около точки $(i + 2)$ находят новое направление градиента (на рис. 23 вспомогательные точки для расчета производной обозначены кружками, новое направление градиента указывает стрелка). Если же и уменьшенный шаг не приведет в «хорошую» точку (рис. 23, b), то возвращаются в точку i и ищут новое направление градиента.

Поиск оптимума продолжают до тех пор, пока величина приращений Δx_{ij} окажется меньше, чем заданные значения ε_j .

В *случайном поиске* шаг из исходной точки осуществляется в случайном направлении (рис. 24). Величину шага определяют по формуле

$$\Delta x_{ij} = a_{ij} \cdot H_j,$$

где a_{ij} – случайное число, которое обычно либо находят по таблицам случайных чисел, имеющимся в большинстве книг и справочников по теории вероятностей, математической статистике и теории эксперимента, либо (чаще) рассчитывают на ЭВМ (*датчики случайных чисел*).

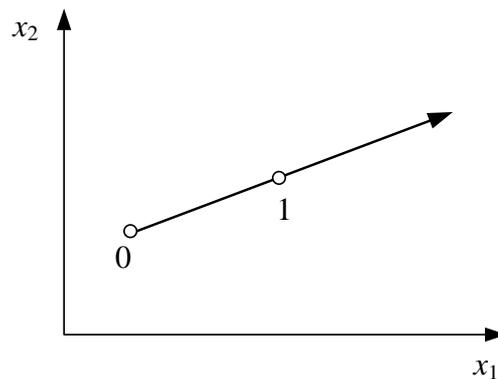


Рис. 24. Определение случайного направления в методе случайного поиска:
0 – исходная точка; 1 – случайная точка

Если шаг оказался удачным, обычно продолжают движение в том же направлении; если неудачным – рассчитывают новое случайное направление. Метод требует значительного количества расчетов, что, однако, не столь важно, если используется ЭВМ.

Задание 1

Дана целевая функция: $F(x) = -12 \cdot x + 2 \cdot x^2$.

Найти значение x , при котором $F(x)$ будет минимальна. Поиск оптимума осуществить с использованием метода сканирования. Принять величину интервала неопределенности $[a, b]$, равной $[0, 10]$, а значение $\varepsilon = 0,2$.



◆
◆ **Порядок выполнения**
◆ **задания 1**

Метод сканирования

1. Записать в Mathcad заданную целевую функцию.
2. Рассчитать интервал Δx по формуле

$$\Delta x = \frac{b-a}{q-1}$$

где q (количество узлов) принять равным 11.

3. Задать изменение величины переменной x (координаты узловых точек, в которых будет производиться расчет целевой функции):

$$x := 0,0 + \Delta x .. 10$$

4. Выполнить расчет целевой функции и определить значение x , при котором целевая функция минимальна.

Повторить расчеты, начиная от п. 2, путем подстановки значений q , равных 15, 30 и 45. Сделать выводы об изменении значений целевой функции.

Задание 2

Дана целевая функция: $F(x) = x_1 \cdot x_2 + x_1^2 + 2 \cdot x_2^2$.

Найти значения переменных x_1 и x_2 , при которых $F(x)$ будет минимальна. Поиск оптимума осуществить с использованием метода поочередного варьирования переменных и градиентного метода. Начальные координаты поиска $x_{10} = 2$ и $x_{20} = 2$, малые приращения $\varepsilon_1 = 0,2$ и $\varepsilon_2 = 0,2$.



◆
◆ **Порядок выполнения**
◆ **задания 2**

1. Метод поочередного варьирования переменных

1.1. Задать координаты начальной точки:

$$x_{10} := 2$$

$$x_{20} := 2$$

1.2. Записать исходное уравнение и выполнить расчет целевой функции в точке 0:

$$y_0 = x_{10}^2 + 2 \cdot x_{20}^2 + x_{10} \cdot x_{20}$$

1.3. Задать шаг изменения величины x_{10} , равный 0.8.

1.4. Рассчитать координаты точки 1:

$$x_{11} = x_{10} + \Delta x_1$$

1.5. Найти значение целевой функции в точке 1:

$$y_0 = x_{11}^2 + 2 \cdot x_{20}^2 + x_{11} \cdot x_{20}$$

1.6. Сравнить значения целевой функции в точках 0 и 1. Если значение целевой функции в точке 0 меньше, тогда следует зафиксировать значение $x_{10} = 2$ и сделать шаг в направлении изменения переменной x_2 , задавая приращение, равное 0.8:

$$\Delta x_2 = 0.8$$

$$x_{21} = x_{20} + \Delta x_2$$

1.7. Провести расчет целевой функции в точке 2 и сравнить ее со значением целевой функции в точке 0:

$$y_2 = x_{10}^2 + 2 \cdot x_{21}^2 + x_{10} \cdot x_{21}$$

1.8. Если шаг оказался неудачным, тогда следует задать приращение для переменной x_{10} при фиксированном значении x_{20} , равное -0.8 :

$$\Delta x_2 = -0.8$$

$$x_{13} = x_{10} + \Delta x_1$$

$$y_3 = x_{13}^2 + 2 \cdot x_{20}^2 + x_{13} \cdot x_{20}$$

1.9. Движение в факторном пространстве следует проводить до тех пор, пока шаги, которые будут выполняться в любом направлении, окажутся неудачными. Тогда следует зафиксировать полученное значение целевой функции в последней удачной точке и соответствующие ей значения переменных x_1 и x_2 .

2. Градиентный метод

2.1. Задать координаты начальной точки:

$$x_1 = 2$$

$$x_2 = 2$$

2.2. Провести расчет целевой функции в начальной точке:

$$F(x) := x_1 \cdot x_2 + x_1^2 + 2 \cdot x_2^2$$

2.3. Определить направление градиента путем вычисления частных производных по соответствующим переменным:

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = 2 \cdot x_1 + x_2$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_2} = 4 \cdot x_2 + x_1$$

2.4. Рассчитать значения частных производных в начальной точке, подставляя в выражения для частных производных x_1 и x_2 :

$$\text{grady1} := 2 \cdot x_1 + x_2$$

$$\text{grady2} := 4 \cdot x_2 + x_1$$

2.5. Для поиска минимума целевой функции уменьшить значения x_1 и x_2 в соотношении:

$$S = \frac{\text{grady1}}{\text{grady2}}$$

2.6. Принять изменение Δx_2 на первом шаге равным $\Delta x_2 := 0.5$, тогда Δx_1 будет изменяться как

$$\Delta x_1 := \Delta x_2 \cdot S$$

2.7. Определить координаты первой точки (x_{10} , x_{20}) в направлении градиента путем вычитания величины шага от исходных значений переменных:

$$x_{10} := x_1 - \Delta x_1$$

$$x_{20} := x_2 - \Delta x_2$$

2.8. Рассчитать целевую функцию для первой точки:

$$F(x) := x_{10} \cdot x_{20} + x_{10}^2 + 2 \cdot x_{20}^2$$

2.9. Таким же образом, путем вычитания величин Δx_2 и Δx_1 , выполнить еще пять шагов и на каждом произвести расчет целевой функции.

2.10. Сравнить полученные значения целевой функции. Согласно полученным данным, на последнем шаге значение целевой функ-

ции будет возрастать. Это указывает, что в пятой точке необходимо находить новое направление градиента, подставляя в приведенные ниже выражения взамен x_1 и x_2 координаты пятой точки x_{14} и x_{24} :

$$\text{grady1}:=2\cdot x_{14}+x_{24}$$

$$\text{grady2}:=4\cdot x_{24}+x_{14}$$

2.11. Определить следующее соотношение:

$$S = \frac{\text{grady1}}{\text{grady2}}$$

2.12. Задать величину шага исходя из полученного соотношения

$$\Delta x_2:=0.3$$

$$\Delta x_1:=\Delta x_2\cdot|S|$$

2.13. Рассчитать координаты шестой точки:

$$x_{16}:=x_{14}-\Delta x_1$$

Значение grady2 является отрицательным, поэтому для движения в направлении уменьшения целевой функции x_2 должно расти:

$$x_{26}:=x_{24}+\Delta x_2$$

Определить значение целевой функции в ней.

2.14. Аналогично выполнить еще два шага. На восьмом шаге целевая функция снова увеличивается, поэтому следует вернуться в седьмую точку и снова выполнить расчет направления градиента и целевой функции, согласно ранее представленной методике, сделав еще четыре шага.

Из полученных результатов выбрать минимальное значение целевой функции и соответствующие ему оптимальные значения x_1 и x_2 .

2.15. Сделать вывод на основании полученных результатов при нахождении оптимальных значений переменных, соответствующих минимуму целевой функции.

7.4. Задачи оптимизации при нескольких откликах.

Функция желательности

В технологии силикатных материалов нередко возникает задача оптимизации процессов, характеризующихся несколькими откликами (например, показатели качества продукции: морозостойкость,

прочность, пористость и т. д.), которые имеют различную размерность, что не позволяет сравнивать их между собой. В этом случае ее сводят к задаче оптимизации по одному критерию с ограничениями в виде равенств или неравенств и находят оптимум с помощью методов неопределенных множителей Лагранжа, линейного и нелинейного программирования и др.

Одним из наиболее удачных способов решения задачи оптимизации процессов с большим количеством откликов является использование в качестве обобщенного критерия оптимизации так называемой *обобщенной функции желательности D*.

Для построения обобщенной функции желательности *D* измеренные значения откликов с помощью специальных формул преобразуют в безразмерную шкалу желательности *d*, которая записывается по оси ординат. Ось абсцисс представляет собой равномерную шкалу натуральных значений откликов. Функция желательности отражает взаимосвязь между значением отклика *Y* и соответствующим ему значением *d* (*частной функцией желательности*).

Интервал значений на шкале желательности изменяется в пределах 0–1, хотя возможны и другие варианты шкалы. Значение $d = 0$ ($D = 0$) соответствует абсолютно неприемлемому значению отклика; а $d = 1$ ($D = 1$) – самому лучшему значению отклика, которое задается субъективно на основе имеющейся информации перед преобразованиями. Промежуточные значения желательности и соответствующие им числовые отметки приведены в табл. 52.

Таблица 52

Базовые отметки шкалы желательности

Количественная отметка на шкале желательности	Желательность значения отклика
0,80–1,00	Очень хорошо
0,63–0,80	Хорошо
0,37–0,63	Удовлетворительно
0,20–0,37	Плохо
0,00–0,20	Очень плохо

Такой выбор числовых отметок объясняется удобством вычислений, поскольку

$$d = 0,63 \approx 1 - \frac{1}{e}, \text{ а } d = 0,37 \approx \frac{1}{e}.$$

Как правило, кривая функции желательности имеет экспоненциальный вид и в зависимости от требований, предъявляемых к значениям отклика, бывает с односторонними (рис. 25) и двухсторонними (рис. 26) ограничениями.

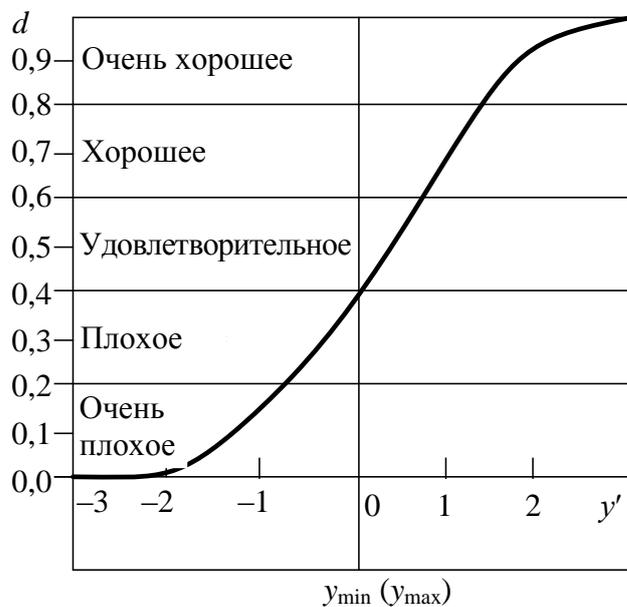


Рис. 25. Функция желательности для отклика, ограниченного с одной стороны

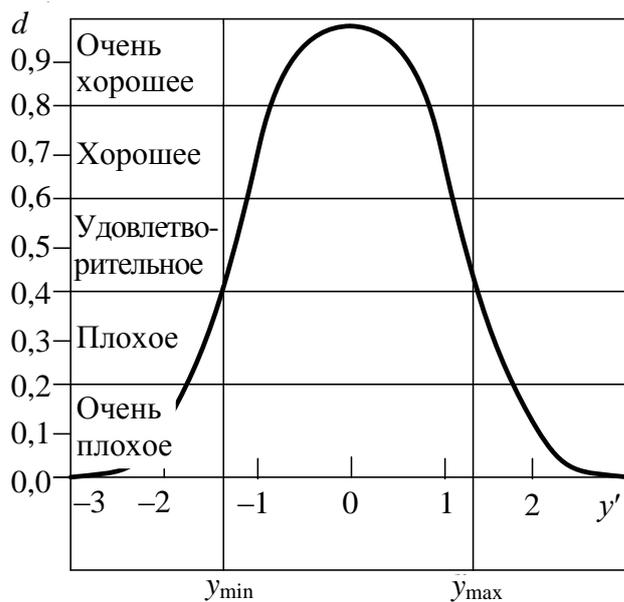


Рис. 26. Функция желательности при двухстороннем ограничении отклика

Кривая (см. рис. 25 на с. 125), ограниченная с одной стороны $y \geq y_{\min}$ или $y \leq y_{\max}$, используется в тех случаях, когда при оптимизации ХТП необходимо получить величину отклика не более (менее) некоторого требуемого значения. Например, согласно ГОСТ 111–2001, коэффициент направленного пропускания света для листового стекла толщиной 4 мм должен быть не менее 0,88, что является односторонним ограничением.

В случае одностороннего ограничения преобразование y в d осуществляется по формуле

$$d = \exp[\exp(-y')],$$

в данном выражении

$$y' = b_0 + b_1 \cdot y,$$

где y – значение преобразуемого отклика.

Коэффициенты b_0 и b_1 определяют путем решения системы из двух уравнений. С этой целью для двух значений свойства y задают соответствующие значения желательности d предпочтительно в интервале $0,2 < d < 0,8$ и рассчитывают

$$y' = \ln(|\ln(d)|).$$

Кривая (см. рис. 26 на с. 125) с двухсторонними ограничениями $y_{\min} \leq y \leq y_{\max}$ используется тогда, когда значения отклика должны находиться в заданном диапазоне, причем изменение показателя за пределы диапазона является нежелательным.

Для двухстороннего ограничения преобразование измеренного отклика y в шкалу d производится при помощи выражения

$$d = \exp\left[-(|y'|)^n\right],$$

где $y' = \frac{2 \cdot y - (y_{\max} + y_{\min})}{y_{\max} - y_{\min}}$; n – положительное число ($0 < n < \infty$), не

обязательно целое, которое вычисляют, задавая некоторому значению y значение d (предпочтительно в интервале $0,6 < d < 0,9$), по формуле

$$n = \frac{\ln \ln 1/d}{\ln |y'|}.$$

Показатель степени n определяет наклон кривой. Задавая при помощи величины n крутизну кривой желательности, можно учесть особую важность отдельных откликов; для них n будет иметь большее значение, и малому изменению отклика вблизи ограничивающих пределов будет соответствовать резкое изменение желательности.

После построения частных функций желательности d комбинируют из них обобщенный показатель желательности D . Если какой-либо один отклик является абсолютно неудовлетворительным, обобщенная функция желательности D должна быть равна 0 независимо от уровня остальных откликов. Математическим выражением, отвечающим этим требованиям, служит среднее геометрическое частных функций желательности, т. е.

$$D = \left(\prod_{i=1}^k d_i^{\delta_i} \right)^{1/\sum_{i=1}^k \delta_i},$$

где k – количество откликов; d_i – частные функции желательности для i -го отклика; δ_i – статистический вес (важность) i -го отклика ($0 \leq \delta_i \leq 1$).

Очевидно, что если какое-либо одно $d_i = 0$, то соответствующее $D = 0$. Более того, на D сильно влияют именно наименьшие значения d_i . В то же время $D = 1$ только тогда, когда все частные желательности $d_i = 1$ ($i = 1, 2, \dots, k$). Таким образом, значения D , как и d , варьируются в пределах от 0 до 1. С обобщенной функцией желательности D можно проделывать все вычислительные операции, как и с любым откликом системы, можно использовать D в роли критерия оптимизации ХТП.

Задание для студентов специализации «Химическая технология вяжущих материалов»

Найти оптимальное сочетание факторов: x_1 – содержание в цементе СаО, мас. %; x_2 – водоцементное отношение; x_3 – удельная поверхность цемента, м²/кг, при которых достигаются наилучшие показатели качества цемента (отклики): Y_1 – предел прочности цемента при изгибе, МПа; Y_2 – морозостойкость (количество циклов); Y_3 – водонепроницаемость. Для определения

регрессионной зависимости между факторами и откликами использовался ПФЭ 2^3 .

Намечены следующие условия опытов (табл. 53).

Таблица 53

**Условия опытов для студентов специализации
«Химическая технология вяжущих материалов»**

Фактор	Нулевая точка (центр плана) X_{i0}	Интервал варьирования ΔX_i
Содержание в цементе СаО (x_1), мас. %	62	2
Водоцементное отношение (x_2)	0,5	1
Удельная поверхность цемента (x_3), м ² /кг	275	30

Матрица планирования в натуральных величинах и значения откликов приведены в табл. 54.

Таблица 54

**Матрица планирования и значения откликов
для студентов специализации «Химическая технология
вяжущих материалов»**

x_0	x_1	x_2	x_3	Предел прочности цемента при изгибе (Y_1), МПа	Морозостойкость (Y_2)	Водонепроницае- мость (Y_3)
1	60	0,4	245	3,3	225	8
1	64	0,4	245	3,8	230	5
1	60	0,6	245	3,6	205	9
1	64	0,6	245	4,0	200	7
1	60	0,4	305	3,9	300	10
1	64	0,4	305	4,6	250	12
1	60	0,6	305	4,5	260	8
1	64	0,6	305	4,4	310	6

**Задание для студентов специализации
«Технология стекла и ситаллов»**

Найти оптимальное сочетание факторов: x_1 – содержание в стекле СаО, мас. %; x_2 – время выдержки, ч; x_3 – температура термо-

обработки стекла, °С, при которых достигаются наилучшие показатели качества стеклокристаллического материала типа сигран: Y_1 – микротвердость, МПа; Y_2 – предел прочности при изгибе, МПа; Y_3 – теплоемкость, Дж/(кг · К). Для определения регрессионной зависимости между факторами и откликами использовался ПФЭ 2^3 .

Намечены следующие условия опытов (табл. 55).

Таблица 55

**Условия опытов для студентов специализации
«Технология стекла и ситаллов»**

Фактор	Нулевая точка (центр плана) X_{i0}	Интервал варьирования ΔX_i
Содержание в стекле СаО (x_1), мас. %	10	2,5
Время выдержки (x_2), ч	2	1
Температура термообработки стекла (x_3), °С	960	25

Матрица планирования (без эффектов взаимодействий) в натуральных величинах и значения откликов представлены в табл. 56.

Таблица 56

**Матрица планирования и значения откликов для студентов
специализации «Технология стекла и ситаллов»**

x_0	x_1	x_2	x_3	Y_1	Y_2	Y_3
1	7,5	1,0	935	8930	28,9	0,79
1	12,5	1,0	935	8540	25,6	0,81
1	7,5	3,0	935	9015	24,5	0,82
1	12,5	3,0	935	9125	25,8	0,80
1	7,5	1,0	985	9165	31,5	0,81
1	12,5	1,0	985	9854	37,5	0,68
1	7,5	3,0	985	9542	35,6	0,69
1	12,5	3,0	985	9263	33,5	0,72

**Задание для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной
и строительной керамики»**

Найти оптимальное сочетание факторов: x_1 – содержание глины месторождения «Гайдуковка», мас. %; x_2 – содержание нефелин-

сиенита, мас. %; x_3 – температура обжига, °С, при которых достигаются наилучшие показатели качества майоликовых изделий: Y_1 – водопоглощение, %; Y_2 – открытая пористость, %; Y_3 – кажущаяся плотность, кг/м³. Для определения регрессионной зависимости между факторами и откликами использовался ПФЭ 2³.

Намечены следующие условия опытов (табл. 57).

Таблица 57

**Условия опытов для студентов специализации
«Технология тонкой функциональной
и строительной керамики»**

Фактор	Нулевая точка (центр плана) X_{i0}	Интервал варьирования ΔX_i
Содержание глины месторождения «Гайдуковка» (x_1), мас. %	60	5
Содержание нефелин-сиенита (x_2), мас. %	15	5
Температура обжига (x_3), °С	1000	50

Матрица планирования (без эффектов взаимодействий) в натуральных величинах и значения откликов представлены в табл. 58.

Таблица 58

**Матрица планирования и значения откликов для студентов
специализации «Технология тонкой функциональной
и строительной керамики»**

x_0	x_1	x_2	x_3	Y_1	Y_2	Y_3
1	55	10	950	12,66	24,62	1945
1	65	10	950	18,80	35,77	1903
1	55	20	950	18,52	27,44	1768
1	65	20	950	26,72	41,92	1570
1	55	10	1050	2,66	6,66	2460
1	65	10	1050	3,75	7,58	2022
1	55	20	1050	3,94	8,68	2203
1	65	20	1050	2,62	6,16	2110

В случае определения функций желательности принять, что на выходные параметры накладываются односторонние ограничения.



◆ Порядок выполнения задания

1. Ввести исходные данные в виде отдельных вектор-столбцов.

2. Самостоятельно задать наихудшие и лучшие значения для каждого из откликов, соответствующие значениям желательности, равным 0,2 и 0,8.

3. Рассчитать кодированное значение y' для каждой из двух отметок шкалы желательности по следующей формуле:

$$y' = \ln(|\ln(d)|).$$

4. Определить частные функции желательности для каждого из векторов откликов по формуле

$$d = \exp[-\exp(b_0 + b_1 \cdot Y)],$$

где Y – значения отклика.

Коэффициенты b_0 и b_1 рассчитать, решив систему уравнений для каждого отклика (Y_1, Y_2, Y_3):

$$b_0 + b_1 \cdot Y_{\max} = y',$$

$$b_0 + b_1 \cdot Y_{\min} = y',$$

где Y_{\max}, Y_{\min} – значения отклика, заданные согласно п. 2.

5. Построить графики зависимости частных функций желательности от значений откликов, предварительно проведя сортировку значений функции желательности и отклика в порядке возрастания, используя функцию **sort(W)**, где **W** – сортируемая величина.

6. Рассчитать обобщенную функцию желательности:

$$D = \left(\prod_{i=1}^k d_i^{\delta_i} \right)^{1 / \sum_{i=1}^k \delta_i}.$$

7. Определить оптимальные значения факторов, при которых D достигает максимального значения. Сделать вывод.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Некоторые операторы и функции Mathcad

Встроенные операторы Mathcad		
Оператор	Обозначение	Описание
Нижний индекс	A_n	Выбор n -й строки в массиве (векторе) A
Верхний индекс	$A^{<n>}$	Выбор n -го столбца в массиве A
Векторизация	\vec{A}	Выполнение заданной операции для всех элементов массива A
Транспонирование	A^T	Транспонирование массива A
Суммирование конечного ряда	$\sum_{i=m}^n X_i$	Сумма членов X для $i = m, m + 1, \dots, n$, причем X может быть любым выражением
Некоторые функции Mathcad		
Функция	Описание	
augment(A, B)	Объединяет два массива A и B путем размещения B после A (массивы A и B должны иметь одинаковое число строк)	
corr(X, Y)	Коэффициент корреляции двух векторов X и Y	
dnorm(x, μ, σ)	Плотность вероятности для нормального распределения случайной величины x (μ – среднее значение, σ – среднеквадратичное отклонение)	
Given	Ключевое слово, открывающее блок решения систем уравнений (обычно используются функции Find , Minerr , Maximize и Minimize)	
histogram(n, A)	Функция, возвращающая массив с двумя столбцами для построения гистограмм	
intercept(X, Y)	Возвращает коэффициент b_0 линейной регрессии $y = b_0 + b_1 \cdot x_1$ векторов X, Y	
length(X)	Число элементов в векторе X	
linfit(X, Y, F)	Возвращает вектор коэффициентов методом наименьших квадратов для функции, записанной в символьном векторе F , и значений, приведенных в векторах X и Y	
max(A)	Наибольший по значению элемент массива A	
Maximize(f, var1, var2, ...)	Возвращает значения переменных $var1, var2, \dots$ с ограничительными условиями, при которых функция переменных f достигает максимума (используется в вычислительном блоке Given)	

Функция	Описание
mean(X)	Среднее значение элементов вектора X
min(A)	Наименьший элемент в матрице A
pnorm(x, μ, σ)	Значение функции нормального распределения случайной величины x (μ – среднее значение, σ – среднеквадратичное отклонение)
slope(X, Y)	Возвращает коэффициент b_1 линейной регрессии $y = b_0 + b_1 \cdot x_1$ векторов X, Y
sort(X)	Вектор X , отсортированный в порядке возрастания
stack(A, B)	Объединяет две матрицы A и B путем размещения A над B (матрицы A и B должны иметь одинаковое число столбцов)

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Построение графиков в Mathcad

Порядок построения двухмерного графика в декартовой системе координат функции $f(x)$:

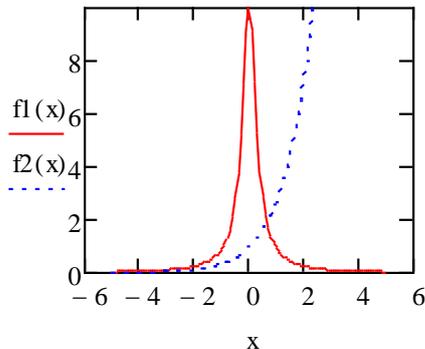
- ввести выражение для функции $f(x)$;
- вызвать шаблон графика нажатием кнопки  (график X–Y);
- в нижнем свободном поле шаблона указать имя независимой переменной – x , в левом поле – $f(x)$. Если строятся *графики нескольких функций* в одном шаблоне, то после каждой переменной следует *поставить запятую* и в новой метке набрать имя переменной. Таким же образом можно указать в шаблоне несколько независимых переменных.

Примечание. Пределы изменения аргумента и его шаг в Mathcad задаются автоматически. Если необходимо ограничить область определения функции, то до построения графика следует задать переменную x как ранжированную, указав диапазон ее изменения и шаг.

Пример построения графиков функций одной переменной $f(x) = \frac{1}{0.1+x^2}$ и $f_2(x) = e^x$ (диапазон изменения переменной x от -5 до 5) представлен ниже:

$$f(x) := \frac{1}{0.1+x^2} \quad f_2(x) := e^x \quad \text{Задание функции}$$

$$x1 := -5 \quad x2 := 5 \quad \Delta x := 0.1 \quad \text{Пределы изменения и шаг аргумента } x$$
$$x := x1, x1 + \Delta x \dots x2 \quad \text{Выражение для расчета значений } x \text{ на заданном отрезке}$$



Графики функций $f_1(x)$, $f_2(x)$

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Решение алгебраических систем уравнений в Mathcad

Решим алгебраическую систему следующих линейных уравнений:

$$0,84 \cdot x_1 + 0,15 \cdot x_2 + 0,035 \cdot x_3 + 0,0046 \cdot x_4 = 84,$$

$$0,01 \cdot x_1 + 0,62 \cdot x_2 + 0,12 \cdot x_3 + 0,005 \cdot x_4 = 6,$$

$$0,08 \cdot x_2 + 0,32 \cdot x_3 = 2,$$

$$0,021 \cdot x_1 + 0,032 \cdot x_2 + 0,03 \cdot x_3 + 0,55 \cdot x_4 = 13,$$

$$0,132 \cdot x_4 + 0,58 \cdot x_5 = 15.$$

Решение систем линейных уравнений в Mathcad осуществляется с применением векторных и матричных операторов и функций. Для этого запишем матрицу коэффициентов **A**, и вектор свободных членов **B**, содержащий числа, которые находятся в правой части уравнения:

$$\mathbf{A} := \begin{pmatrix} \mathbf{0.84} & \mathbf{0.15} & \mathbf{0.035} & \mathbf{0.0046} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0.01} & \mathbf{0.62} & \mathbf{0.12} & \mathbf{0.005} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0.08} & \mathbf{0.32} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0.021} & \mathbf{0.032} & \mathbf{0.03} & \mathbf{0.55} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0.132} & \mathbf{0.58} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{B} := \begin{pmatrix} \mathbf{84} \\ \mathbf{6} \\ \mathbf{2} \\ \mathbf{13} \\ \mathbf{15} \end{pmatrix}$$

Решение рассматриваемой системы уравнений будет выглядеть следующим образом:

$$\mathbf{X} := \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{B}$$

$$X = \begin{pmatrix} 97.539 \\ -18.135 \\ 135.001 \\ 13.604 \\ 22.766 \end{pmatrix}$$

Выше представлены результаты расчета значений неизвестных переменных. В полученном векторе число в первой строке соответствует значению переменной x_1 , во второй – x_2 и т. д.

Решение можно также получить с помощью встроенной функции Mathcad **Isolve(A, B)**:

$$X := \text{Isolve}(A, B)$$

$$X = \begin{pmatrix} 97.539 \\ -18.135 \\ 135.001 \\ 13.604 \\ 22.766 \end{pmatrix}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 4

Определение доли продукции, не соответствующей заданным показателям (доли брака), при $\alpha = 0,05$

Показатель качества продукции P_k	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
Доля брака B , %	20,0	46,0	42,1	38,2	34,5	30,8	27,4	24,4	21,2	18,4
Показатель качества продукции P_k	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4	1,5	1,7	1,9	2,1	2,3
Доля брака B , %	15,9	13,6	11,5	9,7	8,1	6,7	4,7	2,9	1,8	1,1

ПРИЛОЖЕНИЕ 5

Квантили распределения Колмогорова

α	$\lambda_{1-\alpha}$	α	$\lambda_{1-\alpha}$	α	$\lambda_{1-\alpha}$
0,99	0,44	0,50	0,83	0,15	1,14
0,90	0,57	0,40	0,89	0,10	1,22
0,80	0,64	0,30	0,97	0,05	1,36
0,70	0,71	0,25	1,02	0,02	1,52
0,60	0,77	0,20	1,07	0,01	1,63

ПРИЛОЖЕНИЕ 6

Критерий u при различных значениях n и p

Число опытов n	Доверительная вероятность p			Число опытов n	Доверительная вероятность p		
	0,90	0,95	0,99		0,90	0,95	0,99
3	1,41	1,41	1,41	17	2,38	2,55	2,87
4	1,64	1,69	1,72	18	2,40	2,58	2,90
5	1,79	1,87	1,96	19	2,43	2,60	2,93
6	1,89	2,00	2,13	20	2,45	2,62	2,96
7	1,97	2,09	2,26	21	2,47	2,64	2,98
8	2,04	2,17	2,37	22	2,49	2,66	3,01
9	2,10	2,24	2,46	23	2,50	2,68	3,03
10	2,15	2,29	2,54	24	2,52	2,70	3,05
11	2,19	2,34	2,61	25	2,54	2,72	3,07
12	2,23	2,39	2,66	26	2,55	2,73	3,09
13	2,26	2,43	2,71	27	2,57	2,75	3,11
14	2,30	2,46	2,76	28	2,58	2,76	3,12
15	2,33	2,49	2,80	29	2,60	2,78	3,14
16	2,35	2,52	2,84	30	2,61	2,79	3,16

ПРИЛОЖЕНИЕ 7

Критерий распределения Фишера F при $\alpha = 0,05$

Число степеней свободы минимальной дисперсии ν_2	Число степеней свободы максимальной дисперсии ν_1								
	1	2	3	4	5	6	12	24	∞
1	164,4	199,5	215,7	224,6	230,2	234,0	244,9	249,0	254,3
2	18,5	19,2	19,2	19,3	19,3	19,3	19,4	19,5	19,5
3	10,1	9,6	9,3	9,1	9,0	8,9	8,7	8,6	8,5
4	7,7	6,9	6,6	6,4	6,3	6,2	5,9	5,8	5,6
5	6,6	5,8	5,4	5,2	5,1	5,0	4,7	4,5	4,4
6	6,0	5,1	4,8	4,5	4,4	4,3	4,0	3,8	3,7
7	5,6	4,7	4,4	4,1	4,0	3,9	3,6	3,4	3,2
8	5,3	4,5	4,1	3,8	3,7	3,6	3,3	3,1	2,9
9	5,1	4,3	3,9	3,6	3,5	3,4	3,1	2,9	2,7
10	5,0	4,1	3,7	3,5	3,3	3,2	2,9	2,7	2,5
11	4,8	4,0	3,6	3,4	3,2	3,1	2,8	2,6	2,4
12	4,8	3,9	3,5	3,3	3,1	3,0	2,7	2,5	2,3
13	4,7	3,8	3,4	3,2	3,0	2,9	2,6	2,4	2,2
14	4,6	3,7	3,3	3,1	3,0	2,9	2,5	2,3	2,1
15	4,5	3,7	3,3	3,1	2,9	2,8	2,5	2,3	2,1
16	4,5	3,6	3,2	3,0	2,9	2,7	2,4	2,2	2,0
17	4,5	3,6	3,2	3,0	2,8	2,7	2,4	2,2	2,0
18	4,4	3,6	3,2	2,9	2,8	2,7	2,3	2,1	1,9
19	4,4	3,5	3,1	2,9	2,7	2,6	2,3	2,1	1,8
20	4,4	3,5	3,1	2,9	2,7	2,6	2,3	2,1	1,8
22	4,3	3,4	3,1	2,8	2,7	2,6	2,2	2,0	1,8
24	4,3	3,4	3,0	2,8	2,6	2,5	2,2	2,0	1,7
26	4,2	3,4	3,0	2,7	2,6	2,4	2,1	1,9	1,7
28	4,2	3,3	2,9	2,7	2,6	2,4	2,1	1,9	1,6
30	4,2	3,3	2,9	2,7	2,5	2,4	2,1	1,9	1,6
40	4,1	3,2	2,9	2,6	2,5	2,3	2,0	1,8	1,5
60	4,0	3,2	2,8	2,5	2,4	2,3	1,9	1,7	1,4
120	3,9	3,1	2,7	2,5	2,3	2,2	1,8	1,6	1,3
∞	3,8	3,0	2,6	2,4	2,2	2,1	1,8	1,5	1,0

ПРИЛОЖЕНИЕ 8

Табличное значение критерия Стьюдента для различных значений p

Число степеней свободы ν	Доверительная вероятность p			
	0,90	0,95	0,99	0,999
1	6,314	12,706	63,657	636,619
2	2,920	4,303	9,925	31,598
3	2,353	3,182	5,841	12,941
4	2,132	2,786	4,604	8,610
5	2,015	2,571	4,032	6,859
6	1,943	2,447	3,707	5,959
7	1,895	2,365	3,499	5,405
8	1,860	2,306	3,355	5,041
9	1,833	2,262	3,106	4,781
10	1,812	2,228	3,169	4,578
11	1,796	2,201	3,106	4,437
12	1,782	2,179	3,055	4,318
13	1,771	2,160	3,012	4,221
14	1,761	2,145	2,977	4,140
15	1,753	2,131	2,947	4,073
16	1,746	2,120	2,921	4,015
17	1,740	2,110	2,898	3,965
18	1,734	2,101	2,878	3,922
19	1,729	2,093	2,861	3,883
20	1,725	2,086	2,845	3,850
30	1,697	2,042	2,750	3,646
40	1,684	2,021	2,704	3,551
60	1,671	2,000	2,660	3,460
120	1,658	1,980	2,617	3,373

ПРИЛОЖЕНИЕ 9

Табличное значение критерия Кохрена

Число степеней свободы ν_2 суммарной дисперсии $\sum_{u=1}^N s_u^2$	Число степеней свободы ν_1 максимальной дисперсии $s_{u \max}^2$													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	16	36	144	∞
2	0,9985	0,9750	0,9392	0,9057	0,8584	0,8534	0,8332	0,8159	0,8010	0,7880	0,7341	0,6602	0,5813	0,5000
3	0,9069	0,8709	0,7977	0,7457	0,7071	0,6771	0,6530	0,6333	0,6167	0,6025	0,5466	0,4748	0,4031	0,3333
4	0,9065	0,7679	0,6841	0,6287	0,5895	0,5598	0,5365	0,5175	0,5017	0,4884	0,4366	0,3720	0,3093	0,2500
5	0,8412	0,6838	0,5981	0,5440	0,5063	0,4783	0,4564	0,4387	0,4241	0,4118	0,3645	0,3066	0,2513	0,2000
6	0,7508	0,6161	0,5321	0,4803	0,4447	0,4184	0,3980	0,3817	0,3682	0,3568	0,3135	0,2612	0,2119	0,1667
7	0,7271	0,5612	0,4800	0,4307	0,3907	0,3726	0,3555	0,3384	0,3254	0,3154	0,2756	0,2278	0,1833	0,1429
8	0,6798	0,5157	0,4377	0,3910	0,3595	0,3362	0,3185	0,3043	0,2926	0,2829	0,2462	0,2022	0,1616	0,1250
9	0,6385	0,4775	0,4027	0,3584	0,3286	0,3067	0,2901	0,2768	0,2659	0,2568	0,2226	0,1820	0,1446	0,1111
10	0,5020	0,4450	0,3733	0,3311	0,3029	0,2823	0,2666	0,2541	0,2439	0,2353	0,2032	0,1655	0,1308	0,1000
12	0,4510	0,3924	0,3264	0,2880	0,2624	0,2439	0,2299	0,2187	0,2098	0,2020	0,1737	0,1403	0,1100	0,0833
15	0,4709	0,3346	0,2758	0,2419	0,2195	0,2034	0,1911	0,1815	0,1736	0,1671	0,1429	0,1144	0,0889	0,0667
20	0,3894	0,2705	0,2205	0,1921	0,1735	0,1602	0,1501	0,1422	0,1357	0,1303	0,1108	0,0879	0,0675	0,0500

Окончание прил. 9

Число степеней свободы v_2 суммарной дисперсии $\sum_{u=1}^N s_u^2$	Число степеней свободы v_1 максимальной дисперсии $s_{u\max}^2$													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	16	36	144	∞
24	0,3434	0,2354	0,1907	0,1656	0,1493	0,1374	0,1286	0,1216	0,1160	0,1113	0,0942	0,0743	0,0567	0,0417
30	0,2929	0,1980	0,1593	0,1377	0,1237	0,1137	0,1061	0,1002	0,0958	0,0921	0,0771	0,0604	0,0457	0,0333
40	0,2370	0,1576	0,1259	0,1082	0,0968	0,0887	0,0827	0,0780	0,0745	0,0713	0,0595	0,0462	0,0347	0,0250
60	0,1737	0,1131	0,0895	0,0766	0,0682	0,0623	0,0583	0,0552	0,0520	0,0497	0,0411	0,0316	0,0234	0,0167
120	0,0998	0,0632	0,0495	0,0419	0,0371	0,0337	0,0312	0,0292	0,0279	0,0266	0,0218	0,0165	0,0120	0,0083

ПРИЛОЖЕНИЕ 10

Константы (а) для расчета коэффициентов регрессии и их дисперсий при использовании ЦКРП (количество факторов $k \leq 7$)

k	Число опытов N	n_0	a	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7
2	13	5	1,412	0,20	0,10	0,125	0,25	0,1251	0,0187	0,10
3	20	6	1,682	0,1663	0,0568	0,0732	0,125	0,0625	0,0069	0,0568
4	31	7	2,00	0,1428	0,0357	0,0417	0,0625	0,0312	0,0037	0,0357
5*	32	6	2,00	0,1591	0,0341	0,0417	0,0625	0,0312	0,0028	0,0341
5	52	10	2,378	0,0988	0,0191	0,0231	0,0312	0,0156	0,0015	0,0191
6*	53	9	2,378	0,1108	0,0187	0,0231	0,0312	0,0156	0,0012	0,0187
6	91	15	2,828	0,0725	0,0098	0,0125	0,0156	0,0078	0,0005	0,0098
7*	92	14	2,828	0,0703	0,0098	0,0125	0,0156	0,0078	0,0005	0,0098
7	163	21	2,333	0,0398	0,0052	0,0066	0,0078	0,0039	0,0002	0,0052

Примечание. k – число независимых переменных.

* Полуреплика.

ПРИЛОЖЕНИЕ 11

**Матрица для ЦКРП для пяти факторов
с ядром ДФЭ 2^{5-1}**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
1	+1	+1	+1	+1	+1	17	-2	0	0	0	0
2	-1	+1	+1	+1	-1	18	+2	0	0	0	0
3	+1	-1	+1	+1	-1	19	0	-2	0	0	0
4	-1	-1	+1	+1	+1	20	0	+2	0	0	0
5	+1	+1	-1	+1	-1	21	0	0	-2	0	0
6	-1	+1	-1	+1	+1	22	0	0	+2	0	0
7	+1	-1	-1	+1	+1	23	0	0	0	-2	0
8	-1	-1	-1	+1	-1	24	0	0	0	+2	0
9	+1	+1	+1	-1	-1	25	0	0	0	0	-2
10	-1	+1	+1	-1	+1	26	0	0	0	0	+2
11	+1	-1	+1	-1	+1	27	0	0	0	0	0
12	-1	-1	+1	-1	-1	28	0	0	0	0	0
13	+1	+1	-1	-1	+1	29	0	0	0	0	0
14	-1	+1	-1	-1	-1	30	0	0	0	0	0
15	+1	-1	-1	-1	-1	31	0	0	0	0	0
16	-1	-1	-1	-1	+1	32	0	0	0	0	0



ЛИТЕРАТУРА

1. Бондарь, А. Г. Математическое моделирование в химической технологии / А. Г. Бондарь. – Киев: Вища школа, 1973. – 280 с.
2. Закгейм, А. Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов / А. Ю. Закгейм. – М.: Химия, 1982. – 288 с.
3. Клименко, В. В. Методы технической кибернетики в технологии стекла / В. В. Клименко, О. Ф. Кучеров, В. Е. Маневич. – М.: Стройиздат, 1973. – 127 с.
4. Голубцова, Е. С. Статистические методы исследования конструкционной керамики / Е. С. Голубцова, Б. А. Каледин. – Минск: Технопринт, 2004. – 259 с.
5. Ахназарова, С. Л. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии / С. Л. Ахназарова, В. В. Кафаров: учеб. пособие. – М.: Высш. шк., 1985. – 327 с.
6. Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – М.: Академкнига, 2006. – 416 с.
7. Колесников, В. Л. Компьютерное моделирование и оптимизация химико-технологических систем / В. Л. Колесников, П. П. Урбанович, И. М. Жарский. – Минск: БГТУ, 2004. – 532 с.
8. Погорелова, Ю. Н. Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов: лабораторный практикум для студентов специальности 1-48 01 05 «Химическая технология переработки древесины» / Ю. Н. Погорелова, И. А. Хмызов. – Минск: БГТУ, 2010. – 72 с.
9. Корниенко, В. С. Математическая статистика. Решение задач по теме: «Проверка статистических гипотез». Методическая разработка / В. С. Корниенко. – Волгоград: Волгоград. гос. с.-х. академия, 2010. – 68 с.
10. Колесников, В. Л. Компьютерное моделирование в химической технологии. Курсовое и дипломное проектирование: учеб. пособие / В. Л. Колесников, И. М. Жарский, П. П. Урбанович. – Минск: БГТУ, 2008. – 336 с.

11. Дворкин, Л. И. Оптимальное проектирование составов бетона / Л. И. Дворкин. – Львов: Вища школа, 1981. – 160 с.
12. Папко, Л. Ф. Основы научных исследований / Л. Ф. Папко. – Минск: БГТУ, 2005. – 37 с.
13. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. – М.: Высш. шк., 1991. – 400 с.
14. Харченко, М. А. Корреляционный анализ / М. А. Харченко. – Воронеж: ВГУ, 2008. – 31 с.
15. Вайтехович, П. Е. Моделирование и оптимизация технологических процессов и оборудования: учеб.-метод. пособие / П. Е. Вайтехович, В. С. Францкевич. – Минск: БГТУ, 2014. – 268 с.
16. Бондарь, А. Г. Планирование экспериментов при оптимизации процессов химической технологии: учеб. пособие / А. Г. Бондарь, Г. А. Статюха, И. А. Потяженко. – Киев: Вища школа, 1980. – 264 с.
17. Марченко, В. М. Методы оптимизации и статистической обработки результатов измерений: учеб. пособие / В. М. Марченко, Т. Б. Копейкина. – Минск: БГТУ, 2007. – 142 с.
18. Бояринов, А. И. Методы оптимизации в химической технологии / А. И. Бояринов, В. В. Кафаров. – М.: Химия, 1975. – 576 с.
19. Глухов, В. Н. Автоматическое регулирование процессов термообработки и сушки строительных изделий / В. Н. Глухов. – Л.: Стройиздат, 1982. – 88 с.
20. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов / В. А. Холоднов [и др.]. – СПб.: Проффессионал, 2003. – 478 с.
21. Боровиков, В. П. Statistica. Статистический анализ и обработка данных в среде Windows / В. П. Боровиков, И. П. Боровиков. – М.: Филинь, 1998. – 600 с.
22. Пантелеев, А. В. Методы оптимизации в примерах и задачах / А. В. Пантелеев, Т. А. Летова. – М.: Высш. шк., 2005. – 544 с.
23. Матвеев, М. А. Расчеты по химии и технологии стекла / М. А. Матвеев, Г. М. Матвеев, Б. Н. Френкель. – М.: Изд-во литературы по строительству, 1972. – 240 с.
24. Дятко, А. А. Инженерные расчеты в Mathcad 14: учеб.-метод. пособие / А. А. Дятко, Т. В. Кишкурно. – Минск: БГТУ, 2010. – 77 с.
25. Математическое моделирование химико-технологических процессов / Ас. М. Гумеров [и др.]. – М.: Колос, 2008. – 159 с.



СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
1. СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ. ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ПРОДУКЦИИ	5
2. ПРОВЕРКА СТАТИСТИЧЕСКИХ ГИПОТЕЗ	17
3. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ	30
4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, ПОЛУЧЕННЫЕ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ПАССИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА	37
4.1. Общие сведения.....	37
4.2. Корреляционный анализ.....	38
4.3. Линейная однофакторная регрессионная модель	46
4.4. Линейные и нелинейные регрессионные модели	53
5. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, ПОЛУЧЕННЫЕ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ АКТИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА	61
5.1. Полный факторный эксперимент (ПФЭ).....	61
5.2. Дробный факторный эксперимент (ДФЭ)	71
5.3. Центральное композиционное ротатабельное планирование (ЦКРП).....	79
6. ПОСТРОЕНИЕ ДИАГРАММ «СОСТАВ – СВОЙСТВО».....	90
6.1. Общие сведения.....	90
6.2. Симплекс-решетчатые планы Шеффе	92
7. МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ.....	104
7.1. Общие сведения.....	104
7.2. Линейное программирование	106
7.3. Методы нелинейного программирования	113
7.4. Задачи оптимизации при нескольких откликах. Функция желательности	123

ПРИЛОЖЕНИЕ 1. Некоторые операторы и функции Mathcad ...	132
ПРИЛОЖЕНИЕ 2. Построение графиков в Mathcad.....	134
ПРИЛОЖЕНИЕ 3. Решение алгебраических уравнений в Mathcad	135
ПРИЛОЖЕНИЕ 4. Определение доли продукции, не соответствующей заданным показателям (доли брака), при $\alpha = 0,05$	137
ПРИЛОЖЕНИЕ 5. Квантили распределения Колмогорова	137
ПРИЛОЖЕНИЕ 6. Критерий υ при различных значениях n и p	138
ПРИЛОЖЕНИЕ 7. Критерий распределения Фишера F при $\alpha = 0,05$	139
ПРИЛОЖЕНИЕ 8. Табличное значение критерия Стьюдента для различных значений p	140
ПРИЛОЖЕНИЕ 9. Табличное значение критерия Кохрена	141
ПРИЛОЖЕНИЕ 10. Константы a для расчета коэффициентов регрессии и их дисперсий при использовании ЦКРП (количество факторов $k \leq 7$).....	143
ПРИЛОЖЕНИЕ 11. Матрица для ЦКРП для пяти факторов с ядром ДФЭ 2^{5-1}	144
ЛИТЕРАТУРА	145

Учебное издание

Кравчук Александр Петрович
Трусова Екатерина Евгеньевна

**МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ В ОТРАСЛИ**

Учебно-методическое пособие

Редактор *Е. С. Ватеичкина*
Компьютерная верстка *Е. С. Ватеичкина*
Корректор *Е. С. Ватеичкина*

Подписано в печать 14.12.2015. Формат 60×84¹/₁₆.
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 8,7. Уч.-изд. л. 8,9.
Тираж 100 экз. Заказ .

Издатель и полиграфическое исполнение:
УО «Белорусский государственный технологический университет».
Свидетельство о государственной регистрации издателя,
изготовителя, распространителя печатных изданий
№ 1/227 от 20.03.2014.
Ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.