Учреждение образования
«БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Кафедра технологии стекла и керамики

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ОТРАСЛИ

**Программа, методические указания
и контрольные задания для студентов специальности
1-48 01 01 «Химическая технология неорганических
веществ, материалов и изделий»
заочной формы обучения**

Минск 2012

УДК 66.011(073)
ББК 35.1151я73
М74

Рассмотрены и рекомендованы к изданию редакционно-издательским советом университета.

Составители:
И. А. Левицкий, *А. П. Кравчук*

Рецензент
доктор технических наук, профессор кафедры информационных систем и технологий БГТУ
В. А. Колесников

По тематическому плану изданий учебно-методической литературы на 2012 год. Поз. 180.

Для студентов специальности 1-48 01 01 «Химическая технология неорганических веществ, материалов и изделий» заочной формы обучения.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

Целью учебной дисциплины «Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов в отрасли» является формирование у студентов знаний об основных методах использования ЭВМ в химической технологии, моделирования и оптимизации химико-технологических процессов, а также овладение умениями и навыками применения указанных знаний к типовым стадиям химико-технологического процесса.

В результате изучения дисциплины студент должен знать:

– методы математического описания технологических процессов;

– приемы работы с программным обеспечением для моделирования технологических процессов;

– экспериментально-статистические методы описания технологических процессов;

– методы постановки и решения задач оптимизации химико-технологических процессов.

Студент должен уметь:

– составлять математическое описание типовых технологических процессов;

– моделировать протекание основных технологических процессов на основе программных продуктов;

– решать задачи оптимизации технологических процессов.

Изучение дисциплины «Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов в отрасли» предусмотрено в 8–9-м семестрах. В соответствии с учебным планом студент обязан:

– выполнить и защитить контрольную работу (9-й семестр);

– выполнить лабораторный практикум (8-й и 9-й семестры);

– сдать зачет по программе дисциплины (9-й семестр).

Данное пособие включает программу дисциплины, методические указания по выполнению контрольной работы, примеры решения задач, требования к оформлению контрольной работы и перечень рекомендуемой литературы.

1. ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Введение

Основные понятия дисциплины «Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов отрасли». Предмет изучения. Задачи, роль и место дисциплины в системе подготовки инженера-химика-технолога, связь с другими учебными дисциплинами. Круг задач химической технологии, решаемых с применением методов математического моделирования.

1.2. Основные понятия моделирования

Модели и способы моделирования. Материальные, мысленные и математические модели. Основные требования к процессу моделирования. Теория подобия. Аналогия. Математическое моделирование. Основные виды математических моделей.

Основные понятия системных объектов. Химико-технологический процесс как система. Понятие системы. Описание системных объектов (функциональное, морфологическое, информационное). Структура системных объектов. Классификация систем. Входы (факторы) и выходы (отклики) систем. Контролируемые и неконтролируемые входы. Причины возникновения неконтролируемых факторов. Подходы к описанию систем: структурный, эмпирический (метод черного ящика).

Особенности моделей и задач математического моделирования. Составление математического описания объекта. Точность моделей. Параметры модели. Лимитирующие стадии. Стационарные и нестационарные процессы. Объекты с сосредоточенными и распределенными параметрами. Составление математического описания. Группы уравнений, выделяемые в составе математического описания, разработанного на основе физической природы моделируемого объекта. Выбор метода решения уравнений. Блочный принцип построения математических моделей.

1.3. Элементы теории эксперимента как основы построения математических моделей

Случайные величины. Вероятность. Числовые характеристики случайной величины (математическое ожидание, дисперсия, среднеквадратическое отклонение (ошибка). Основные законы распределений случайной величины. Зависимые и независимые случайные величины. Корреляция.

Статистические оценки и проверка гипотез. Генеральная совокупность и выборка. Свойства оценок (состоятельность, несмещенность, эффективность). Нуль-гипотеза. Альтернативная гипотеза. Ошибки первого и второго рода. Уровень значимости. Критерий исключения грубой ошибки. Метод максимального правдоподобия. Метод наименьших квадратов. Критерии согласия: Пирсона, Колмогорова, Смирнова, Кохрена, Фишера, Неймана, Хартли, знаков. Проверка гипотез относительно уравнений регрессии, интерпретация уравнения регрессии.

Планирование эксперимента. Пассивный и активный эксперимент. Факторное пространство. Матрица планирования. Неполноблочные планы. Греко-латинские квадраты, кубы, параллелепипеды. Полный и дробный факторный эксперименты. Планы первого порядка. Планы второго порядка (ортогональное, ротатабельное, D-оптимальное планирование). Интерпретация уравнений регрессии.

Построение информационных сетей для получения математических моделей высоких порядков. Основные понятия: вектор главных эффектов, конечное кольцо порядка, поле порядка, класс вычетов, конечная проективная плоскость, конечная проективная геометрия, фундаментальный симплекс. Этапы формирования информационной сети. Выбор и обоснование числа факторов и уровней их варьирования. Определение числа вершин фундаментального симплекса. Правила составления групп координат вершин связок плоскостей на бесконечности. Правила составления линейно независимых векторов.

1.4. Компьютерное моделирование химико-технологических систем

Вероятностные модели. Теоретические основы получения полиномиальных моделей. Проверка их адекватности. Линеаризующие преобразующие соответствия.

Графические модели. Классификация топологических моделей химико-технологических систем. Основные понятия и определения теории графов. Контур, цепь, путь, цикл. Характеристика и принципы построения топологических моделей.

Типовые математические модели химико-технологических процессов. Потоки в аппаратах непрерывного действия. Модели идеальных потоков (идеального вытеснения и смешения). Модели неидеальных потоков (диффузионная и ячеечная). Основные уравнения ячеечной модели. Ячеечная модель с обратными потоками. Комбинированная модель.

Математическое моделирование химических превращений, процессов тепло- и массообмена в технологическом оборудовании. Построение кинетических моделей. Математическое моделирование химических превращений, протекающих в технологических установках. Моделирование теплообменных процессов. Изотермические и адиабатические процессы. Режим частичного теплообмена. Тепловые балансы. Детерминированный и стохастический подходы к описанию массопередачи. Моделирование массообменных процессов. Внешнедиффузионное торможение. Процессы с межфазным массообменом. Основные этапы составления математического описания процессов.

1.5. Оптимизационные задачи в химической технологии

Оптимизация химико-технологических процессов. Формулировка задачи оптимизации. Критерий оптимальности. Ограничения. Оптимизирующие факторы. Целевая функция. Общая схема решения оптимизационных задач.

Методы решения оптимизационных задач. Градиентные методы: релаксации, градиента, наискорейшего спуска, крутого восхождения. Безградиентные методы: сканирования, конфигураций, симплекс-планирования, симплекс-планирования с помощью правильных многогранников, деформируемого многогранника, скользящего поиска, случайного поиска, слепого поиска, случайных направлений, случайного локального поиска. Достоинства и недостатки методов решения оптимизационных задач.

Исследование и оптимизация свойств смесей химических веществ. Теоретические основы и особенности построения диаграмм «состав – свойство». Симплекс-решетчатые планы Шеффе. Барицентрическая система координат. Виды моделей и расчет коэффициентов. Матричная форма решеток Шеффе. Выделение локальных областей.

Принятие управленческих решений в условиях неопределенности и риска. Теория парных матричных игр с нулевой суммой. Платежная матрица. Верхняя и нижняя цены игры. Решение парных матричных игр. Матрица рисков. Критерий Вальда, Сэвиджа, Гурвица.

1.6. Оценка качества продукции

Теоретические основы оценки качества продукции. Функция желательности. Кривая, ограниченная с одной стороны. Кривая с двусторонними ограничениями. Подготовка исходных данных и методика расчета.

Правила настраивания функции желательности. Настраивание функции желательности по кривым с односторонним или двусторонним ограничением.

2. ЗАДАНИЯ ДЛЯ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ

2.1. Теоретические вопросы

1. Понятия модели и аналогии. Типы моделей и виды моделирования.
2. Физическое моделирование. Теория подобия. Достоинства и недостатки метода.
3. Математическое моделирование. Математическое подобие. Достоинства и недостатки метода. Компьютерное моделирование.
4. Понятие химико-технологической системы. Внешние связи системы. Факторы. Отклики. Шум.
5. Этапы построения математической модели химико-технологических систем. Математическое описание. Статистический и детерминированный подходы. Блочная структура математической модели.
6. Понятие о дискретных и непрерывных случайных величинах. Дифференциальная (плотность вероятности) и интегральная функции распределения случайной величины. Законы распределения непрерывной случайной величины.
7. Математическое ожидание, дисперсия, среднеквадратическое отклонение случайной величины. Нормальный закон распределения случайной величины.
8. Генеральная совокупность, выборка. Статистические оценки и их свойства. Понятие о проверке статистических гипотез. Критерий исключения грубой ошибки, критерий Фишера, критерий Стьюдента.
9. Нуль- и альтернативная гипотезы. Ошибки первого и второго рода. Способы уменьшения ошибок. Уровень значимости.
10. Проверка гипотезы о нормальности закона распределения случайной величины.
11. Понятие о корреляции случайных величин. Выборочный коэффициент корреляции, корреляционное отношение и его свойства.
12. Классификация экспериментально-статистических методов построения моделей. Статистические модели на основе пассивного эксперимента. Достоинства и недостатки пассивного эксперимента.
13. Понятие о корреляционном и регрессионном анализе.
14. Понятие о дисперсионном анализе.
15. Уравнение регрессии. Метод наименьших квадратов. Постановка задачи и общий вид решения. Система нормальных уравнений.
16. Проверка гипотез о значимости коэффициентов и адекватности уравнения регрессии, построенного по данным пассивного эксперимента.

17. Статистические модели в виде нелинейных полиномов на основе данных пассивного эксперимента. Метод Брандона.

18. Полный факторный эксперимент.

19. Дробный факторный эксперимент.

20. Центральные композиционные планы. Статистический анализ уравнения регрессии для планов второго порядка.

21. Интерпретация уравнения регрессии. Канонический анализ статистической математической модели.

22. Построение информационных сетей для получения математических моделей высоких порядков.

23. Симплекс-решетчатые планы Шеффе. Методика расчета коэффициентов аппроксимирующих полиномов. Выделение локальных областей. Проверка адекватности модели.

24. D-оптимальные планы.

25. Планирование эксперимента в производственных условиях.

26. Применение операционного исчисления при решении дифференциальных уравнений. Преобразование Лапласа. Свойства операционного соответствия.

27. Передаточная функция. Структурные схемы объектов химической технологии.

28. Классификация типовых химико-технологических процессов. Статические и динамические характеристики типовых процессов. Типовые сигналы.

29. Типовые законы изменения входных параметров (ступенчатое и импульсное возмущение на входе). Инерционность технологического объекта.

30. Математическое моделирование гидродинамической структуры однофазных потоков.

31. Экспериментальное изучение распределения частиц потока во времени.

32. Модель идеального перемешивания.

33. Модель идеального вытеснения.

34. Однопараметрическая диффузионная модель.

35. Ячеечная модель.

36. Комбинированные модели.

37. Математические модели простейших типов теплообменных аппаратов.

38. Классификация топологических моделей химико-технологических систем. Основные понятия и определения теории графов.

39. Характеристика и принципы построения топологических моделей.

40. Оптимизация химико-технологических процессов. Постановка и формулировка задачи оптимизации. Критерий оптимальности.

41. Общие принципы выбора управляющих параметров, их ограничения.

42. Классификация методов решения оптимизационных задач. Постановка задач линейного программирования.

43. Оптимизация химико-технологических процессов симплекс-методом.

44. Поиск оптимума численными методами. Метод перебора, сканирования, случайный поиск.

45. Методы направленного поиска оптимума: дихотомий, покоординатный спуск.

46. Градиентные методы оптимизации.

47. Метод штрафных функций.

48. Экспериментальный поиск. Оптимизация химико-технологических процессов методами Бокса – Уилсона и Гаусса – Зейделя.

49. Решение компромиссных оптимизационных задач в химической технологии. Обобщенная и частная функции желательности.

2.2. Практическое задание

50. Построить однофакторную статистическую модель в виде линейного полинома на основе данных пассивного эксперимента. Проверить значимость коэффициентов уравнения регрессии и адекватность полученной модели (прил. 1, 2).

51. Построить план полнофакторного эксперимента ПФЭ 2^2 (интервал варьирования факторов задать самостоятельно) и по известным значениям показателей качества продукции получить обобщенную функцию желательности, используя данные прил. 3.

3. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ВЫПОЛНЕНИЮ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ

Контрольная работа включает два теоретических вопроса из различных разделов дисциплины и два практических задания.

Контрольное задание выдается студентам в период установочной сессии преподавателем из числа заданий, приведенных в табл. 1 раздела 3.

Контрольная работа выполняется на отдельных листах белой бумаги формата А4, скрепленных скоросшивателем, с необходимой надписью на титульном листе. Теоретические вопросы оформляются при помощи текстового редактора Word, а задачи решаются с использованием математического пакета Mathcad. При необходимости для пояснения текстовый материал следует сопровождать схемами и рисунками.

В контрольной работе должен присутствовать как распечатанный, так и электронный вариант (CD-R, DVD-R) задач.

Теоретические вопросы охватывают основные разделы программы дисциплины. В связи с тем что для выполнения контрольного задания необходимо использовать, как правило, несколько литературных источников, указываются учебники и учебные пособия, в которых рассматриваемые вопросы дисциплины изложены в достаточном объеме.

Модели и способы моделирования. Основные понятия системных объектов изложены в источниках [1–7].

Материал о *случайных величинах, статистических оценках и проверке гипотез* изложен в источниках [1–4].

Материал по *планированию эксперимента* рассмотрен в источниках [1–4, 8–11].

Необходимые сведения по *графическим моделям* приведены в источнике [4].

Типовые математические модели гидродинамических потоков рассмотрены в источниках [1–6].

Математические модели простейших типов теплообменных аппаратов представлены в источниках [1–3, 6].

Сведения по решению оптимизационных задач изложены в источниках [1–4, 7–10, 12].

Решение компромиссных оптимизационных задач в химической технологии. Обобщенная и частная функции желательности представлены в источниках [4, 9, 10, 13].

При выполнении контрольной работы рекомендуемая основная литература включает источники [1–4, 6, 10, 14].

Таблица 1

Варианты заданий для контрольной работы

Вариант задания	Номера вопросов	Вариант задания	Номера вопросов
21	21; 37; 50 (21); 51 (21)	1	1; 23; 50 (1); 51 (1)
22	22; 39; 50 (22); 51 (22)	2	2; 18; 50 (2); 51 (2)
23	23; 45; 50 (23); 51 (23)	3	3; 13; 50 (3); 51 (3)
24	24; 38; 50 (24); 51 (24)	4	4; 28; 50 (4); 51 (4)
25	25; 40; 50 (25); 51 (25)	5	5; 40; 50 (5); 51 (5)
26	26; 15; 50 (26); 51 (26)	6	6; 43; 50 (6); 51 (6)
27	27; 48; 50 (30); 51 (30)	7	7; 32; 50 (7); 51 (7)
28	28; 49; 50 (28); 51 (29)	8	8; 35; 50 (8); 51 (8)
29	29; 40; 50 (29); 51 (30)	9	9; 36; 50 (9); 51 (9)
30	30; 43; 50 (30); 51 (1)	10	10; 34; 50 (10); 51 (10)
31	31; 18; 50 (2); 51 (4)	11	11; 31; 50 (11); 51 (11)
32	32; 41; 50 (12); 51 (7)	12	12; 41; 50 (12); 51 (12)
33	33; 42; 50 (11); 51 (9)	13	13; 44; 50 (13); 51 (13)
34	34; 45; 50 (14); 51 (17)	14	14; 46; 50 (14); 51 (14)
35	35; 46; 50 (24); 51 (5)	15	15; 47; 50 (15); 51 (15)
36	36; 18; 50 (21); 51 (13)	16	16; 48; 50 (16); 51 (16)
37	37; 16; 50 (15); 51 (6)	17	17; 43; 50 (17); 51 (17)
38	38; 49; 50 (20); 51 (14)	18	18; 42; 50 (18); 51 (18)
39	39; 5; 50 (28); 51 (19)	19	19; 29; 50 (19); 51 (19)
40	40; 22; 50 (25); 51 (8)	20	20; 30; 50 (20); 51 (20)

Примечание. После номера практического задания в скобках приведен его вариант, который представлен в прил. 1–3.

Построение статистической модели в виде линейного полинома на основе данных пассивного эксперимента, ее статистический анализ и получение обобщенной функции желательности (вопросы № 50, 51) проводятся по методике, изложенной в разделах 4, 5. Исходные данные для выполнения практического задания приведены в прил. 1–3.

4. ПОСТРОЕНИЕ СТАТИСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ В ВИДЕ ЛИНЕЙНЫХ ПОЛИНОМОВ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ПАССИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Приступая к исследованию химико-технологического процесса, априорных данных о котором недостаточно, начинают с самых простых статистических моделей, например линейных, предполагая в дальнейшем введение соответствующих поправок.

Простейший вид уравнения регрессии:

$$y = b_0 + b_1 \cdot x_1, \tag{1}$$

т. е. линейное уравнение с двумя неизвестными коэффициентами b_0 и b_1. На практике всегда существует разброс результатов, обусловленный влиянием случайных факторов. Тогда для нахождения коэффициентов b_0 и b_1 наблюдают N опытов и получают переопределенную систему уравнений

$$\begin{cases} y_1 = b_0 + b_1 \cdot x_{11}, \\ y_2 = b_0 + b_1 \cdot x_{12}, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots, \\ y_N = b_0 + b_1 \cdot x_{1N}. \end{cases} \tag{2}$$

В таком случае необходимо усреднить экспериментальные данные с целью определения коэффициентов b_0 и b_1. Самым распространенным, хотя и не единственным, способом определения коэффициентов уравнения регрессии является **метод наименьших квадратов, который содержит в себе требование минимума суммы квадратов отклонений выходного параметра объекта и модели**. Аналитически это требование можно записать так:

$$F = \sum_{u=1}^{N} (y_u - y_{u\text{расч}})^2 = \min \tag{3}$$

или с учетом линейного полинома

$$F = \sum_{u=1}^{N} (y_u - b_0 - b_1 \cdot x_{1u})^2 = \min. \tag{4}$$

Т. е. наилучшими будут те значения коэффициентов b, при которых сумма квадратов отклонений расчетных величин $y_{u\text{расч}}$ от опытных y_u окажется наименьшей.

Для нахождения минимума дифференцируемой функции нескольких переменных следует приравнять к нулю частные производные функции по искомым величинам (в данном случае по коэффициентам многочлена b_0 и b_1), т. е.

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial b_0} &= -2 \cdot \sum_{u=1}^{N} (y_u - b_0 - b_1 \cdot x_{1u}) = 0, \\ \frac{\partial F}{\partial b_0} &= -2 \cdot \sum_{u=1}^{N} (y_u - b_0 - b_1 \cdot x_{1u}) = 0. \end{aligned} \tag{6}$$

Преобразовав полученные выражения, получают систему *нормальных уравнений*

$$\begin{cases} N \cdot b_0 + b_1 \cdot \sum\limits_{u=1}^{N} x_{1u} = \sum\limits_{u=1}^{N} y_u, \\ b_0 \cdot \sum\limits_{u=1}^{N} x_{1u} + b_1 \cdot \sum\limits_{u=1}^{N} x_{1u}^2 = \sum\limits_{u=1}^{N} y_u \cdot x_{1u}. \end{cases} \tag{7}$$

Решение системы дает расчетные формулы для вычисления коэффициентов b_0 и b_1:

$$b_0 = \frac{\sum\limits_{u=1}^{N} y_u \cdot \sum\limits_{u=1}^{N} x_{1u}^2 - \sum\limits_{u=1}^{N} x_{1u} \cdot y_u \cdot \sum\limits_{u=1}^{N} x_{1u}}{N \cdot \sum\limits_{u=1}^{N} x_{1u}^2 - \left(\sum\limits_{u=1}^{N} x_{1u}^2 \right)^2}, \tag{8}$$

$$b_1 = \frac{N \cdot \sum\limits_{u=1}^{N} x_{1u} \cdot y_u - \sum\limits_{u=1}^{N} x_{1u} \cdot \sum\limits_{u=1}^{N} y_u}{N \cdot \sum\limits_{u=1}^{N} x_{1u}^2 - \left(\sum\limits_{u=1}^{N} x_{1u}^2 \right)^2}. \tag{9}$$

Для проверки значимости коэффициентов уравнения регрессии следует найти отношение абсолютного значения коэффициента к его среднеквадратическому отклонению

$$t_{b_i} = \frac{|b_i|}{s_{b_i}} \tag{10}$$

и сравнить их со значением t-критерия, которое находят по таблицам распределения Стьюдента для выбранного уровня значимости α (например, $\alpha = 0{,}05$) и числа свободы v, т. е.

$$t_{b_i} = \frac{|b_i|}{s_{b_i}} > t_{\text{кр}}. \tag{11}$$

Если условие соблюдается, то коэффициент b_i значим (нуль-гипотеза $\beta_i = 0$ отвергается).

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

$$s_{b_0} = \sqrt{\frac{s_{\text{o}}^2 \cdot \sum_{u=1}^{N} x_{1u}^2}{N \cdot \sum_{u=1}^{N} x_{1u}^2 - \left(\sum_{u=1}^{N} x_{1u}\right)^2}}, \tag{12}$$

$$s_{b_1} = \sqrt{\frac{s_{\text{o}}^2 \cdot N}{N \cdot \sum_{u=1}^{N} x_{1u}^2 - \left(\sum_{u=1}^{N} x_{1u}\right)^2}}, \tag{13}$$

где s_{o}^2 – дисперсия воспроизводимости (дисперсия опыта), характеризует воспроизводимость эксперимента; N – количество опытов

Чтобы определить дисперсию воспроизводимости s_{o}^2, проводят параллельные (дублирующие) опыты. Затем вычисляют выборочные дисперсии $s_1^2, s_2^2, ..., s_u^2, ..., s_N^2$ для каждой группы параллельных опытов по формуле

$$s_u^2 = \frac{1}{m-1} \cdot \sum_{k=1}^{m} (y_{uk} - \overline{y_u})^2, \tag{14}$$

где m – число параллельных опытов $(k = 1, 2, ..., m)$; y_{uk} – экспериментальные значения выходного параметра в параллельных опытах; $\overline{y_u} = \frac{1}{m} \cdot \sum_{k=1}^{m} y_{uk}$ – среднее значение выходного параметра по результатам параллельных опытов.

Затем проводят проверку однородности (равенства) выборочных дисперсий с использованием критерия Кохрена по формуле

$$G = \frac{s_{\max}^2}{\sum_{u=1}^{N} s_u^2}, \tag{15}$$

где $s_{\max}^2$ – максимальная дисперсия; $\sum_{u=1}^{N} s_u^2$ – сумма всех выборочных дисперсий. Если расчетное значение G меньше табличного $G_{кр}$ (при уровне значимости p и степенях свободы $v_1 = m - 1$ для числителя и $v_2 = N$ для знаменателя), принимается гипотеза об однородности дисперсий. Если выборочные дисперсии по каждой группе параллельных опытов $s_1^2, s_2^2, ..., s_u^2, ..., s_N^2$ однородны, то для объединенной выборки вычисляется дисперсия воспроизводимости

$$s_о^2 = \frac{\sum_{u=1}^{N} s_u^2}{N}. \qquad (16)$$

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

Если ставится серия параллельных опытов только в одной из экспериментальных точек, тогда дисперсия воспроизводимости вычисляется по следующей формуле:

$$s_о^2 = \frac{1}{m-1} \cdot \sum_{k=1}^{m} (y_{uk} - \overline{y_u})^2 \qquad (17)$$

и имеет число степеней свободы $v = m - 1$.

Проверка адекватности модели при линейной связи между переменными проводится при помощи статистических критериев, в частности критерия Фишера.

Линейное уравнение регрессии адекватно описывает исследуемый объект, если выполняется неравенство

$$F = \frac{s_{ост}^2}{s_о^2} < F_{кр}, \qquad (18)$$

где $s_{ост}^2$ – остаточная дисперсия; $F_{кр}$ – критическое значение критерия Фишера для выбранного уровня значимости ($\alpha = 0{,}05$) и степеней свободы числителя $v_1 = N - n - 1$ (n – количество факторов) и знаменателя $v_2 = N \cdot (m - 1)$.

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

Остаточная дисперсия $s_{ост}^2$ вычисляется по формуле

$$s_{\text{ост}}^2 = \frac{1}{v} \cdot \sum_{u=1}^{N} (y_u - y_{u\text{расч}})^2, \tag{19}$$

где $v = N - l$ – число степеней свободы; N – количество опытов; l – число связей (для линейного полинома $l = n + 1$); $y_{u\text{расч}}$ – выходная величина, рассчитанная по уравнению регрессии; y_u – значения выходной величины, полученные экспериментально.

Если *параллельные опыты осуществить не удается*, тогда производится оценка качества аппроксимации опытных точек принятым уравнением регрессии. Проводят сравнение остаточной дисперсии и дисперсии относительного среднего s_y^2, которая вычисляется по формуле

$$s_y^2 = \frac{1}{N-1} \cdot \sum_{u=1}^{N} (y_u - \bar{y})^2. \tag{20}$$

Условие, при выполнении которого считают, что уравнение имеет смысл, выражается неравенством

$$F = \frac{s_y^2}{s_{\text{ост}}^2} > F_{\text{кр}}, \tag{21}$$

где $F_{\text{кр}}$ – критическое значение критерия Фишера для выбранного уровня значимости ($\alpha = 0{,}05$) и степеней свободы $v_1 = N - 1$ и $v_2 = N - n - 1$.

Пример. Построим линейную статистическую модель при проведении пассивного эксперимента по исследованию зависимости показателя качества продукции (Y – количество пузырей в 1 см^3 стекломассы) от технологического фактора (X – температура осветления, °С). Исходные данные, полученные при использовании пассивного эксперимента, приведены в табл. 2, 3.

Таблица 2

Результаты пассивного эксперимента по определению количества пузырей в 1 см^3 стекломассы в зависимости от температуры осветления

Переменная	Значение									
Температура осветления 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	203	176	122	72	23

Таблица 3

Результаты проведения параллельных опытов при X = 1425°C

Переменная	Значение			
Температура осветления X, °C	1425	1425	1425	1425
Количество пузырей в 1 $см^3$ стекломассы Y	298	301	296	290

При проведении расчетов воспользуемся *математическим редактором Mathcad*, основные приемы работы в котором представлены в учебных изданиях [13–15].

1. Для удобства работы с векторами в Mathcad записываем

$$ORIGIN := 1$$

Данная форма записи показывает, что порядковая нумерация элементов в строках векторов будет начинаться с единицы.

2. Представляем исходные данные для построения статистической модели и проверки ее адекватности в виде трех векторов. В первом векторе записываем значения технологического фактора X, во втором – показатель свойства продукции Y, в третьем – показатель свойства продукции Y1, полученный при постоянном значении X1 = 1425°C.

$$X := \begin{pmatrix} 1350 \\ 1375 \\ 1400 \\ 1425 \\ 1450 \\ 1475 \\ 1500 \\ 1525 \\ 1550 \\ 1575 \end{pmatrix} \quad Y := \begin{pmatrix} 392 \\ 345 \\ 310 \\ 295 \\ 241 \\ 203 \\ 176 \\ 122 \\ 72 \\ 23 \end{pmatrix} \quad Y1 := \begin{pmatrix} 298 \\ 301 \\ 296 \\ 290 \end{pmatrix} \quad X1 := \begin{pmatrix} 1425 \\ 1425 \\ 1425 \\ 1425 \end{pmatrix}$$

3. Определяем коэффициенты уравнения (**b0** и **b1**) для линейной зависимости вида f(x) = **b0** + **b1** · x, используя встроенные функции Mathcad: **intercept(x, y)** – возвращает коэффициент **b0**; **slope(x, y)** – коэффициент **b1** по методу наименьших квадратов.

$$b0 := \mathrm{intercept}(X, Y)$$

$$b0 = 2.546 \times 10^3$$

$$b1 := \mathrm{slope}(X, Y)$$

$$b1 = -1.592$$

4. Записываем уравнение регрессии в виде

$$y(x) := b0 + b1 \cdot x$$

5. Строим линейную зависимость, согласно полученной модели аппроксимирующую экспериментальные данные:

– задаем интервал изменения величины x

$$x := 1350, 1350 + 25 .. 1575 \quad ;$$

– вызываем двухмерный график;

– записываем по осям ординат и абсцисс соответственно f(x), Y и x, X;

– для представления экспериментальных точек отформатируем график (щелчком правой клавиши мыши на графике вызываем контекстное меню, выбираем вкладку «formate», затем «traces» и во вкладке «line» отмечаем бесцветную линию, после чего переходим к вкладке «type» и выбираем опцию «points»). Получаем график, представленный на рис. 1.

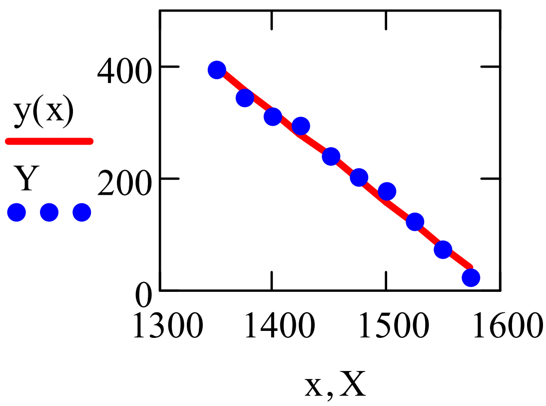

Рис. 1. Линейная зависимость, аппроксимирующая исходные экспериментальные данные

На рис. 1 представлены экспериментальные точки отклика (выделены синим цветом) и прямая линия (выделена красным цветом), аппроксимирующая опытные данные согласно полученному уравнению регрессии.

6. Вычисляем дисперсию воспроизводимости $s2_o$ по данным параллельных опытов, количество которых составляет m = 4.

$$m := 4$$

$$s2_o := \frac{1}{m-1} \cdot \sum_{i=1}^{m} \left(Y1_i - \mathrm{mean}(Y1)\right)^2$$

$$s2_o = 21.583$$

В приведенных формулах **mean(Y1)** – функция Mathcad, позволяющая определить среднее значение величины Y1 по выборке параллельных опытов.

7. Рассчитываем среднеквадратическое отклонение коэффициентов уравнения регрессии. Для этого необходимо определить количество опытов N, используя встроенную функцию Mathcad **length(X)** – возвращает количество элементов в строках вектора исходных данных X.

$$N := \mathrm{length}(X)$$

Тогда

$$s_{b0} := \sqrt{\frac{s2_o \cdot \sum_{i=1}^{N} (X_i)^2}{-\left(\sum_{i=1}^{N} X_i\right)^2 + N \cdot \sum_{i=1}^{N} (X_i)^2}}$$

$$s_{b0} = 29.958$$

$$s_{b1} := \sqrt{\frac{s2_o \cdot N}{-\left(\sum_{i=1}^{N} X_i\right)^2 + N \cdot \sum_{i=1}^{N} (X_i)^2}}$$

$$s_{b1} = 0.02$$

8. Определяем значение критерия Стьюдента для каждого из коэффициентов и сравниваем его с табличным t_{kr}, которое находим по прил. 4, принимая уровень значимости равным $\alpha = 0{,}05$ и число степеней свободы v = m – 1 = 3.

$$t_{b0} := \frac{|b0|}{s_{b0}} \qquad t_{b1} := \frac{|b1|}{s_{b1}}$$

$$t_{b0} = 84.993 \qquad t_{b1} = 77.813$$

$$t_{kr} := 3.182 \qquad t_{kr} := 3.182$$

$$t_{b0} > t_{kr} = 1 \qquad t_{b1} > t_{kr} = 1$$

Согласно проведенной проверке расчетное значение критерия Стьюдента больше, чем табличное, т. е. коэффициенты уравнения регрессии статистически значимы. Форма записи $t_{b0} > t_{kr} = 1$ в редакторе Mathcad показывает, что приведенное неравенство является истинным, если выражение – «ложь», тогда после знака «равно» появляется цифра ноль.

9. Проведем проверку адекватности линейной статистической модели. Рассчитываем остаточную дисперсию. Для этого:

– определяем вектор значений выходного параметра y(X) по уравнению регрессии путем подстановки в него значений из вектора (X):

$$y(X) := b0 + b1 \cdot X$$

y(X) =

397
357.2
317.4
277.6
237.8
198
158.2
118.4
78.6
38.8

где X – вектор, содержащий значения температуры осветления; коэффициенты b0 и b1 известны;

– рассчитываем число степеней свободы остаточной дисперсии v1. Число связей l = n + 1, где n – количество факторов.

$$l := 2$$

Тогда

$$v1 := N - l$$
$$v1 = 8$$

Рассчитываем остаточную дисперсию

$$s2_{ост} := \frac{1}{v1} \cdot \sum_{i=1}^{N} \left(Y_i - y(X)_i\right)^2$$

$$s2_{ост} = 148.7$$

10. Рассчитываем значение критерия Фишера и сравниваем его с табличным F_{kr}, которое определяется по прил. 5, исходя из уровня значимости $\alpha = 0{,}05$ и числа степеней свободы числителя v1 = 8, знаменателя v2 = 3.

$$F := \frac{s2_{ост}}{s2_o}$$

$$F = 6.89$$

$$F_{kr} := 8.84$$

$$F < F_{kr} = 1$$

Таким образом, табличное значение критерия Фишера больше, чем расчетное, что указывает на адекватность построенной модели.

5. ПОСТРОЕНИЕ ОБОБЩЕННОЙ ФУНКЦИИ ЖЕЛАТЕЛЬНОСТИ

Задачу оптимизации процессов, характеризующихся несколькими критериями оптимальности (например, морозостойкость, прочность, пористость), обычно сводят к задаче оптимизации по одному критерию с ограничениями в виде равенств или неравенств. В зависимости от вида поверхности отклика и характера ограничений для оптимизации используют методы неопределенных множителей Лагранжа, линейного и нелинейного программирования, ридж-анализ и др. К недостаткам этих способов решения задачи оптимизации следует отнести *вычислительные трудности*.

Поэтому 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 предлагается преобразовать измеренные значения откликов в безразмерную шкалу желательности d. Ее построение, устанавливающее соотношение между значением отклика Y и соответствующим ему значением d (**частной функцией желательности**), является в своей основе субъективным.

Для построения шкалы желательности используют метод количественных оценок с интервалом значений желательности от нуля до единицы, хотя возможны и другие варианты. Значение $d = 0$ ($D = 0$) соответствует абсолютно неприемлемому значению данного отклика; а $d = 1$ ($D = 1$) – самому лучшему, причем дальнейшее улучшение его или невозможно, или не представляет интереса. Промежуточные значения желательности и соответствующие им числовые отметки приведены в табл. 4.

Таблица 4

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

Построенная в соответствии с табл. 4 шкала d является безразмерной, при помощи которой всякий отклик реально преобразовать так, чтобы его можно было интерпретировать в терминах полезности или желательности для любого специфического применения.

Простейшим типом преобразования служит такое, в котором существуют верхний и (или) нижний пределы спецификации. Вне этих пределов значение $d = 0{,}0$, между ними значение $d = 1$. Частная функция желательности при одностороннем ограничении (рис. 2) имеет вид

$$d = 0,\ y < y_{\min}; \quad 1,\ y \geq y_{\min}. \tag{22}$$

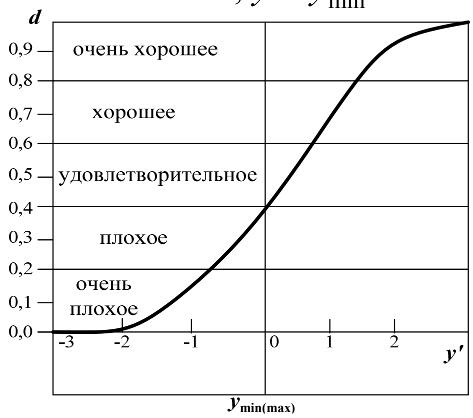

Рис. 2. Простейший вид частной функции желательности

Таким образом получается частная функция желательности, если спецификация задает ограничение сверху. Если для данного свойства существует двустороннее ограничение (рис. 3), то

$$d = 0,\ y < y_{\min} \text{ и } y > y_{\max}; \quad 1,\ y_{\min} < y < y_{\max}. \tag{23}$$

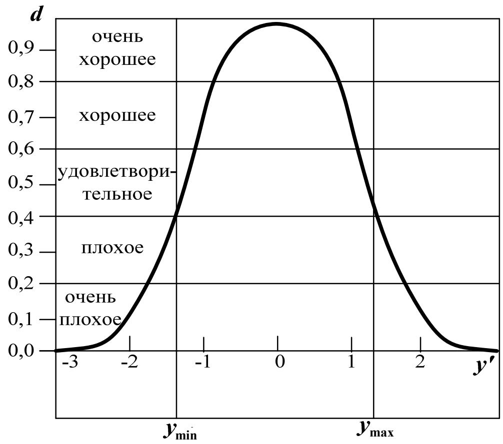

Рис. 3. Функция желательности для двустороннего ограничения

Односторонняя спецификация наиболее часто встречается на практике.

Для односторонних ограничений вида $y \le y_{max}$ или $y \ge y_{min}$ формой преобразования y в d служит экспоненциальная зависимость (рис. 2)

$$d = \exp\left[\exp\left(-y^{/}\right)\right]. \qquad (24)$$

В данном выражении

$$y^{/} = b_0 + b_1 \cdot y. \qquad (25)$$

Коэффициенты b_0 и b_1 можно определить, если задать для двух значений свойства y соответствующие значения желательности d предпочтительно в интервале $0{,}2 < d < 0{,}8$, тогда

$$y^{/} = \ln\left(\left|\ln(d)\right|\right). \qquad (26)$$

Нелинейное преобразование y в $y^{/}$ применяется, если данное свойство имеет особую важность; нарушение ограничивающих условий недопустимо; малому изменению свойства вблизи ограничивающего предела соответствует резкое изменение желательности.

Имея несколько откликов, преобразованных в шкалу d, можно при помощи арифметических операций скомбинировать из этих различных d некий обобщенный показатель желательности D. При этом если какой-либо один отклик является абсолютно неудовлетворительным, обобщенная функция желательности D должна быть равна 0 независимо от уровня остальных откликов. Обобщенная функция желательности вычисляется по формуле

$$D = \left(\prod_{i=1}^{k} d_i^{\delta_i}\right)^{1/\sum_{i=1}^{k}\delta_i}, \qquad (27)$$

где k – количество откликов (критериев оптимизации); d_i – частные функции желательности для i-го отклика; δ_i – статистический вес (важность) i-го отклика ($0 \le \delta_i \le 1$).

Очевидно, что если какое-либо одно $d_i = 0$, то соответствующее $D = 0$. С обобщенной функцией желательности D можно проделывать все вычислительные операции, как и с любым откликом системы, можно использовать D в роли *критерия оптимизации* при исследовании и оптимизации процесса.

Пример. Получить обобщенную функцию желательности для сочетания факторов: X1 – содержание в цементе Al_2O_3, мас. %; X2 – водоцементное отношение; X3 – удельная поверхность цемента, м^2/кг, – определяющих следующие показатели качества цемента (критерии оптимизации): Y1 – предел прочности цемента при изгибе, МПа; Y2 – морозостойкость (количество циклов); Y3 – водонепроницаемость. Для нахождения регрессионной зависимости между факторами и откликами использовался полнофакторный эксперимент для трех факторов на двух уровнях варьирования (ПФЭ 2^3).

Намечены следующие условия опытов (табл. 5).

Таблица 5

Условия опытов

Фактор	Нулевая точка (центр плана) $Xi0$	Интервал варьирования ΔXi
X1	6	2
X2	0,5	0,1
X3	275	30

Построим матрицу планирования ПФЭ 2^3, которая содержит условия опытов и полученные значения откликов. Примеры построения матрицы планирования при полнофакторном эксперименте представлены в источниках [2, 3, 8, 9].

Матрица планирования (без эффектов взаимодействий) в натуральных величинах и значения откликов приведены в табл. 6.

Таблица 6

Матрица планирования и значения откликов

X0	X1	X2	X3	Y1	Y2	Y3
1	4	0,4	245	3,3	225	8
1	8	0,4	245	3,8	230	5
1	4	0,6	245	3,6	205	9
1	8	0,6	245	4,0	200	7
1	4	0,4	305	3,9	300	10
1	8	0,4	305	4,6	250	12
1	4	0,6	305	4,5	260	8
1	8	0,6	305	4,4	310	6

Принимаем, что при определении функций желательности если на выходные параметры накладываются односторонние ограничения, то худшим (минимальным) значениям показателей качества присваиваем значение желательности, равное 0,05, а лучшим (максимальным) – 0,95.

1. Рассчитываем значения частных функций желательности для каждого показателя качества продукции.

1.1. Вводим исходные данные, представленные в табл. 6, в виде вектор-столбцов:

$$X1 := \begin{pmatrix} 4 \\ 8 \\ 4 \\ 8 \\ 4 \\ 8 \\ 4 \\ 8 \end{pmatrix} \quad X2 := \begin{pmatrix} 0.4 \\ 0.4 \\ 0.6 \\ 0.6 \\ 0.4 \\ 0.4 \\ 0.6 \\ 0.6 \end{pmatrix} \quad X3 := \begin{pmatrix} 245 \\ 245 \\ 245 \\ 245 \\ 305 \\ 305 \\ 305 \\ 305 \end{pmatrix}$$

$$Y1 := \begin{pmatrix} 3.3 \\ 3.8 \\ 3.6 \\ 4.0 \\ 3.9 \\ 4.6 \\ 4.5 \\ 4.4 \end{pmatrix} \quad Y2 := \begin{pmatrix} 225 \\ 230 \\ 205 \\ 200 \\ 250 \\ 300 \\ 260 \\ 310 \end{pmatrix} \quad Y3 := \begin{pmatrix} 8 \\ 5 \\ 9 \\ 7 \\ 10 \\ 12 \\ 8 \\ 6 \end{pmatrix}$$

1.2. Определяем максимальное и минимальное значения для каждого из трех векторов (Y1, Y2, Y3), содержащих значения показателей качества продукции, используя функцию **max**(W), **min**(W) – возвращает значение минимального и максимального элемента в выборке.

$y1mx := \max(Y1)$ $\quad y1mx = 4.6$

$y1mn := \min(Y1)$ $\quad y1mn = 3.3$

$y2mx := \max(Y2)$ $\quad y2mx = 310$

$y2mn := \min(Y2)$ $\quad y2mn = 200$

$y3mn := \min(Y3) \quad y3mx = 12$

$y3mx := \max(Y3) \quad y3mn = 5$

1.3. Задаем числовые отметки шкалы желательности, соответствующие максимальному и минимальному значениям показателей качества продукции, равные 0,95 и 0,05.

$dmx := 0.95 \quad dmn := 0.05$

1.4. Рассчитываем кодированное значение $y^{/}$ для каждой из двух отметок шкалы желательности по формуле

$ykmx := \ln(|\ln(dmx)|) \quad ykmn := \ln(|\ln(dmn)|)$

$ykmx = -2.97 \qquad ykmn = 1.097$

1.5. Для определения частных функции желательности каждого из векторов показателей качества продукции по формуле $d = \exp\left[-\exp\left(b_0 + b_1 \cdot \mathrm{Y}\right)\right]$ (где Y – значения показателя качества продукции) необходимо рассчитать коэффициенты b_0 и b_1 для каждого показателя качества продукции (Y1, Y2, Y3), решая систему уравнений следующего вида:

$$\begin{cases} b_0 + b_1 \cdot \mathrm{Y}_{max} = y^{/} \\ b_0 + b_1 \cdot \mathrm{Y}_{min} = y^{/} \end{cases}$$

где Y_{max} и Y_{min} – минимальное и максимальное значения показателя качества продукции, определеные по пункту 1.2.

Решаем систему уравнений для отклика Y1, используя приемы матричной алгебры.

Составляем матрицу, столбцы которой содержат коэффициенты при b_0 и b_1:

$$y1M = \begin{pmatrix} 1 & 4.6 \\ 1 & 3.3 \end{pmatrix}$$

Записываем вектор свободных членов, содержащий кодированные значения $y^{/}$, определенные по пункту 1.4:

$$ykm = \begin{pmatrix} -2.97 \\ 1.097 \end{pmatrix}$$

Рассчитываем вектор коэффициентов B1, в первой строке которого содержится значение коэффициента b_0, а во второй – b_1, по следующему выражению:

$$B1 := \left(y1M^T \cdot y1M\right)^{-1} \cdot y1M^T \cdot ykm$$

$$B1 = \begin{pmatrix} 11.422 \\ -3.129 \end{pmatrix}$$

Аналогичным образом получаем матрицы, содержащие значения коэффициентов b_0 и b_1 для показателей качества продукции Y2 и Y3.

$$B2 = \begin{pmatrix} 8.492 \\ -0.037 \end{pmatrix} \qquad B3 = \begin{pmatrix} 4.002 \\ -0.581 \end{pmatrix}$$

1.6. Рассчитываем значения частных функций желательности

$$d1 := e^{-e^{B1_0 + B1_1 \cdot Y1}} \qquad d2 := e^{-e^{B2_0 + B2_1 \cdot Y2}} \qquad d3 := e^{-e^{B3_0 + B3_1 \cdot Y3}}$$

$$d1 = \begin{pmatrix} 0.05 \\ 0.534 \\ 0.31 \\ 0.715 \\ 0.632 \\ 0.95 \\ 0.932 \\ 0.909 \end{pmatrix} \quad d2 = \begin{pmatrix} 0.305 \\ 0.372 \\ 0.083 \\ 0.05 \\ 0.624 \\ 0.928 \\ 0.722 \\ 0.95 \end{pmatrix} \quad d3 = \begin{pmatrix} 0.592 \\ 0.05 \\ 0.746 \\ 0.392 \\ 0.849 \\ 0.95 \\ 0.592 \\ 0.187 \end{pmatrix}$$

1.7. Строим графики зависимости частных функций желательности d_i от значений откликов Y_i, проведя сортировку значений функции желательности и отклика в порядке увеличения, используя функцию **sort(W)**, где W – сортируемая величина.

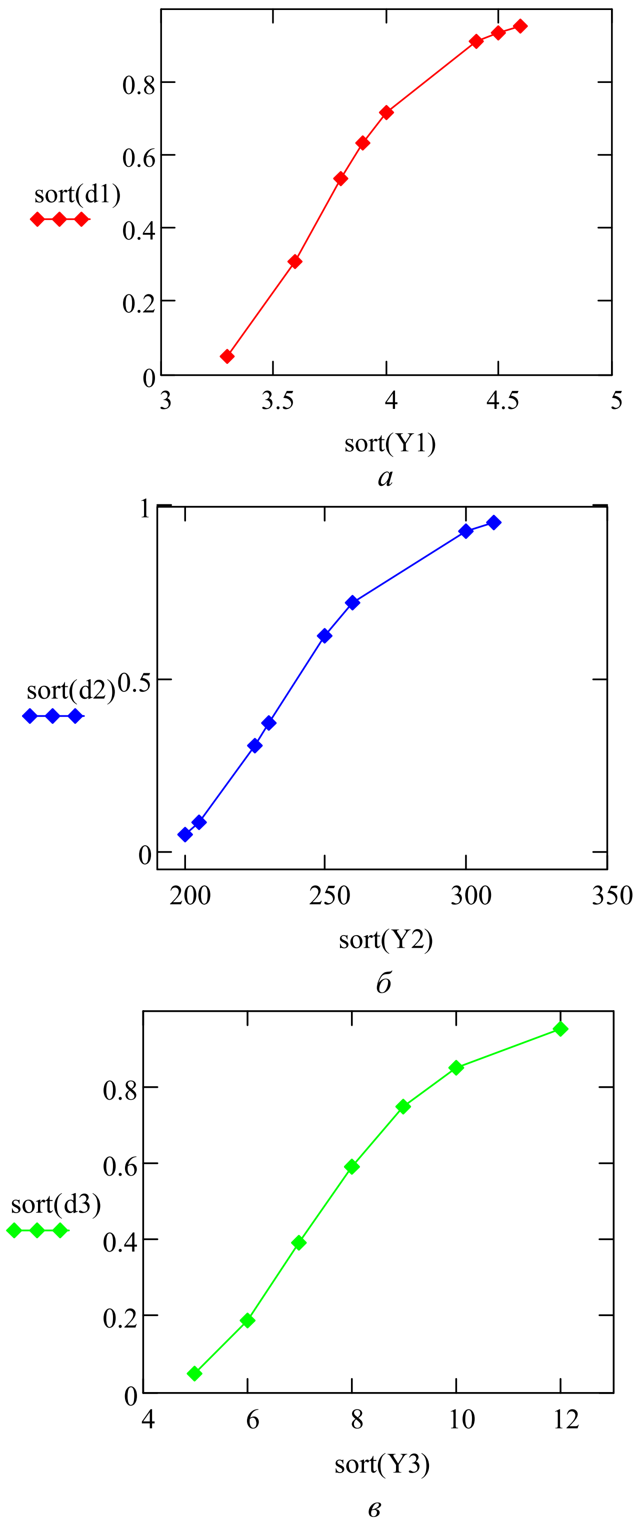

Рис. 4. Частные функции
желательности для откликов:
а – предел прочности цемента при изгибе;
б – морозостойкость; *в* – водонепроницаемость

1.8. Рассчитываем обобщенную функцию желательности по формуле, для этого задаем статистический вес δ_i (важность) каждого из показателей качества продукции:

$$\delta := \begin{pmatrix} 0.95 \\ 0.85 \\ 0.85 \end{pmatrix}$$

Тогда

$$\mathrm{ORIGIN} := 1$$

$$D := \left(\overrightarrow{\left(d1^{\delta_1} \cdot d2^{\delta_2} \cdot d3^{\delta_3}\right)}\right)^{\frac{1}{\sum_{i=1}^{3} \delta_i}}$$

$$D = \begin{pmatrix} 0.197 \\ 0.223 \\ 0.269 \\ 0.251 \\ 0.692 \\ 0.943 \\ 0.742 \\ 0.555 \end{pmatrix}$$

Таким образом, согласно полученным данным максимальное значение обобщенной функции желательности D = 0,943 (очень хорошо) достигается при следующем сочетании факторов: содержание в цементе Al_2O_3 – 8 мас. %; водоцементное отношение – 0,4; удельная поверхность цемента – 305 м^2/кг.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Исходные данные для построения линейной однофакторной статистической модели

Вариант	*1*	*2*	*3*	*4*	*5*	*6*	*7*	*8*	*9*	*10*
Удельная поверхность частиц порошка SiC X, $м^2/г$	9,3	9,1	8,9	8,7	8,5	8,3	8,1	7,9	7,7	7,5
	10,5	10,3	10,1	9,9	9,7	9,5	9,3	9,1	8,9	8,7
	11,5	11,3	11,1	10,9	10,7	10,5	10,3	10,1	9,9	9,7
	12,4	12,2	12,0	11,8	11,6	11,4	11,2	11,0	10,8	10,6
	13,6	13,4	13,2	13,0	12,8	12,6	12,4	12,2	12,0	11,8
	14,3	14,1	13,9	13,7	13,5	13,3	13,1	12,9	12,7	12,5
Относительная плотность спеченных образцов SiC Y, %	72,3	71,4	70,5	69,6	68,7	67,8	66,9	66,0	65,1	64,2
	76,8	75,9	75,0	74,1	73,2	72,3	71,4	70,3	69,4	63,5
	80,2	79,3	78,4	77,5	76,6	75,7	74,8	63,9	63,0	62,1
	84,9	84,0	83,1	82,2	81,3	80,4	79,5	78,6	77,7	76,8
	90,0	89,1	88,2	87,3	86,4	85,5	84,6	83,5	82,6	81,5
	97,3	96,4	95,5	94,4	93,5	92,6	91,7	90,8	89,9	89,0
Вариант	*11*	*12*	*13*	*14*	*15*	*16*	*17*	*18*	*19*	*20*
Температура осветления стекломассы X, °C	1425	1435	1445	1455	1465	1475	1485	1495	1505	1515
	1445	1455	1455	1465	1475	1485	1495	1505	1515	1525
	1460	1470	1470	1480	1490	1500	1510	1520	1530	1540
	1485	1495	1505	1515	1525	1535	1545	1555	1565	1575
	1500	1510	1520	1530	1540	1550	1560	1570	1580	1590
	1510	1520	1530	1540	1550	1560	1570	1580	1590	1600
Количество пузырей в 1 $см^3$ стекломассы Y	298	278	268	248	228	208	188	168	148	128
	255	240	225	210	195	180	165	150	135	120
	230	217	204	191	178	165	152	139	126	113
	196	186	176	166	156	146	136	126	116	106
	135	125	115	105	95	85	75	65	55	45
	124	114	104	94	84	74	64	54	44	344
Вариант	*21*	*22*	*23*	*24*	*25*	*26*	*27*	*28*	*29*	*30*
Давление пара в автоклаве X, МПа	0,71	0,70	0,69	0,68	0,67	0,66	0,65	0,64	0,63	0,62
	0,75	0,74	0,73	0,72	0,71	0,70	0,69	0,68	0,67	0,66
	0,79	0,78	0,77	0,76	0,75	0,74	0,73	0,72	0,71	0,70
	0,82	0,81	0,80	0,79	0,78	0,77	0,76	0,75	0,74	0,73
	0,87	0,86	0,85	0,84	0,83	0,82	0,81	0,80	0,79	0,78
	0,90	0,89	0,88	0,87	0,86	0,85	0,84	0,83	0,82	0,81
Прочность силикатного кирпича при сжатии Y, МПа	28,9	26,9	24,9	22,9	20,9	18,9	16,9	14,9	12,9	10,9
	35,4	33,4	31,4	29,4	27,4	25,4	23,4	21,4	19,4	17,4
	38,1	36,1	34,1	32,1	30,1	28,1	26,1	24,1	22,1	20,1
	40,8	38,8	36,8	34,8	32,8	30,8	28,8	26,8	24,8	22,8
	44,5	42,5	40,5	38,5	36,5	34,5	32,5	30,5	28,5	26,5
	46,4	44,4	42,4	40,4	38,4	36,4	34,4	32,4	30,4	28,4

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Результаты проведения параллельных опытов

Вариант	*1*	*2*	*3*	*4*	*5*	*6*	*7*	*8*	*9*	*10*
Удельная поверхность частиц порошка SiC X, $м^2/г$	11,5	11,3	11,1	10,9	10,7	10,5	10,3	10,1	9,9	9,7
Относительная плотность спеченных образцов SiC Y, %	80,9 79,6 81,1 80,3	80,0 78,7 80,2 79,4	79,1 77,8 79,3 78,5	78,2 76,9 78,4 77,6	77,3 76,0 77,5 76,7	76,4 75,1 76,6 75,8	75,5 74,2 76,7 74,9	74,6 73,3 75,8 74,0	73,7 72,4 74,9 73,1	72,8 71,5 74,0 72,2
Вариант	*11*	*12*	*13*	*14*	*15*	*16*	*17*	*18*	*19*	*20*
Температура осветления стекломасссы X, °C	1425	1435	1445	1455	1465	1475	1485	1495	1505	1515
Количество пузырей в 1 $см^3$ стекломассы Y	298 308 296 290	278 288 276 270	258 268 256 250	238 248 236 230	218 228 216 210	198 208 196 190	178 188 176 170	158 168 156 150	138 148 136 130	118 128 116 110
Вариант	*21*	*22*	*23*	*24*	*25*	*26*	*27*	*28*	*29*	*30*
Давление пара в автоклаве X, МПа	0,87	0,86	0,85	0,84	0,83	0,82	0,81	0,80	0,79	0,78
Прочность силикатного кирпича при сжатии Y, МПа	43,9 45,6 46,1 44,7	41,9 43,6 44,1 42,7	39,9 41,6 42,1 40,7	37,9 39,6 40,1 38,7	35,9 37,6 38,1 36,7	33,9 35,6 36,1 34,7	31,9 33,6 34,1 32,7	29,9 31,6 32,1 30,7	27,9 29,6 30,1 28,7	25,9 27,6 28,1 26,7

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Исходные данные для построения функции желательности

Вариант		*1*	*2*	*3*	*4*	*5*	*6*	*7*	*8*	*9*	*10*
Нулевая точка, X_i0	Водоцементное отношение X1	0,45	0,45	0,47	0,47	0,48	0,48	0,49	0,49	0,50	0,50
	Удельная поверхность цемента X2, $м^2$/кг	270	275	270	275	270	275	270	275	270	275
Значения показателя качества продукции	Предел прочности цемента при изгибе Y1, МПа	3,3 3,8 4,5 4,2	4,3 4,8 5,5 5,2	3,5 4,0 4,7 4,4	4,5 5,0 5,7 5,4	3,4 3,9 4,6 4,3	3,6 4,1 4,8 4,5	3,0 3,5 4,2 3,9	3,2 3,7 4,4 4,1	2,7 3,2 3,9 3,6	2,9 3,4 4,1 3,8
	Морозостойкость Y2	235 230 260 290	255 250 280 310	245 240 270 300	265 260 290 320	240 235 265 295	250 245 275 315	220 215 245 275	230 225 255 285	205 200 230 260	215 210 240 270
Вариант		*11*	*12*	*13*	*14*	*15*	*16*	*17*	*18*	*19*	*20*
Нулевая точка, X_i0	Содержание оксида Na_2O в листовом стекле X1, мас. %	14,2	14,2	14,4	14,4	14,6	14,6	14,8	14,8	15,0	15,0
	Температура отжига листового стекла X2, ºС	570	580	570	580	570	580	570	580	570	580
Значения показателя качества продукции	Предел прочности листового стекла при изгибе Y1, МПа	68,7 69,9 72,3 70,0	70,7 71,9 73,3 71,0	68,2 69,4 71,8 69,5	69,2 70,4 72,8 70,5	67,2 68,4 70,8 68,5	67,7 68,9 71,3 69,0	66,2 67,4 69,8 67,5	66,7 67,9 70,3 68,0	65,2 66,4 68,8 66,5	65,7 66,9 69,3 67,0
	Температурный коэффициент линейного расширения Y2	82,3 86,1 84,1 89,9	81,3 85,1 83,1 88,9	83,8 87,6 85,6 91,4	83,3 87,1 85,1 90,9	85,3 89,1 87,1 92,9	84,8 88,6 86,6 92,4	86,8 90,6 88,6 94,4	86,3 90,1 88,1 93,9	88,3 92,1 90,1 95,9	87,7 91,6 89,6 95,4

Окончание

Вариант		*21*	*22*	*23*	*24*	*25*	*26*	*27*	*28*	*29*	*30*
Нулевая точка, X_i0	Размер частиц ZrO_2, мкм, X1, в керамике $Al_2O_3 – ZrO_2$	1,45	1,45	1,60	1,60	1,75	1,75	1,90	1,90	2,05	2,05
	Содержание ZrO_2, об. %, X2, в керамике $Al_2O_3 – ZrO_2$	6,0	8,0	6,0	8,0	6,0	8,0	6,0	8,0	6,0	8,0
Значения показателя качества продукции	ТрещиностойкостьY1, МПа · $м^{0,5}$	5,0 6,4 7,1 5,8	5,3 6,7 7,4 6,1	5,1 6,5 7,2 5,9	5,4 6,8 7,5 6,2	5,2 6,6 7,3 6,0	5,7 7,1 7,8 6,5	5,5 6,9 7,6 6,3	6,0 7,4 8,1 6,8	5,8 7,2 7,9 6,6	6,3 7,7 8,4 7,1
	Предел прочности при изгибе Y2, МПа	480 420 450 500	475 415 445 495	470 410 440 490	465 405 445 485	460 400 450 480	455 395 445 475	445 390 440 470	440 385 435 465	435 380 430 460	425 375 425 455

Примечание. При построении матрицы полнофакторного эксперимента ПФЭ 2^2 значения интервала варьирования для факторов задать самостоятельно.

ПРИЛОЖЕНИЕ 4

Табличное значение критерия Стьюдента для различных значений α

Число степеней свободы, v	Уровень значимости α			
	0,1	0,05	0,01	0,001
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 5

Табличное значение критерия Фишера при $\alpha = 0{,}05$

Число степеней свободы мини-мальной диспер-сии, v_2	Число степеней свободы максимальной дисперсии, v_1									
	1	2	3	4	5	6	8	12	24	∞
1	161,4	199,5	215,7	224,6	230,2	234,0	238,9	243,9	249,0	254,0
2	18,51	19,00	19,16	19,25	19,30	19,33	19,37	19,41	19,43	19,50
3	10,13	9,55	9,28	9,12	9,01	8,94	8,84	8,74	8,64	8,53
4	7,71	6,94	6,59	6,39	6,26	6,16	6,04	5,91	5,77	5,63
5	6,61	5,79	5,41	5,19	5,05	4,95	4,82	4,68	4,53	4,36
6	5,99	5,14	4,76	4,53	4,39	4,28	4,15	4,00	3,84	3,67
7	5,50	4,74	4,35	4,12	3,97	3,87	3,73	3,57	3,41	3,23
8	5,32	4,46	4,07	3,84	3,69	3,58	3,44	3,28	3,12	2,93
9	2,12	4,26	3,86	3,63	3,48	3,37	3,23	3,07	2,90	2,71
10	4,96	4,10	3,71	3,48	3,33	3,22	3,07	2,91	2,74	2,54
11	4,84	3,98	3,59	3,36	3,20	3,09	2,95	2,79	2,61	2,40
12	4,75	3,88	3,49	3,26	3,11	3,00	2,85	2,69	2,50	2,30
13	4,67	3,80	3,41	3,18	3,02	2,92	2,77	2,60	2,42	2,21
14	4,60	3,74	3,34	3,11	2,96	2,85	2,70	2,53	2,35	2,13
15	4,54	3,68	3,29	3,06	2,90	2,79	2,64	2,48	2,29	2,07
16	4,49	3,63	3,24	3,01	2,85	2,74	2,59	2,42	2,24	2,01

ЛИТЕРАТУРА

1. Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – М.: Академкнига, 2006. – 416 с.

2. Бондарь, А. Г. Математическое моделирование в химической технологии / А. Г. Бондарь. – Киев: Вища школа, 1973. – 280 с.

3. Закгейм, А. Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов / А. Ю. Закгейм. – М.: Химия, 1982. – 288 с.

4. Колесников, В. Л. Компьютерное моделирование и оптимизация химико-технологических систем / В. Л. Колесников, П. П. Урбанович, И. М. Жарский. – Минск: БГТУ, 2004. – 532 с.

5. Математическое моделирование химико-технологических процессов / Ас. М. Гумеров [и др.]. – М.: КолосС, 2008. – 159 с.

6. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. – М.: Высшая школа, 1991. – 400 с.

7. Андрижиевский, А. А. Моделирование и оптимизация тепломассообменных процессов: учеб. пособие / А. А. Андрижиевский, А. Г. Трифонов. – Минск: БГТУ, 2005. – 320 с.

8. 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.

9. Пен, Р. З. Статистические методы моделирования и оптимизации процессов целлюлозно-бумажного производства / Р. З. Пен. – Красноярск: КГУ, 1982. – 120 с.

10. Ахназарова, С. Л. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии: учеб. пособие / С. Л. Ахназарова, В. В. Кафаров. – М.: Высшая школа, 1985. – 327 с.

11. Клименко, В. В. Методы технической кибернетики в технологии стекла / В. В. Клименко, О. Ф. Кучеров, В. Е. Маневич. – М.: Стройиздат, 1973. – 127 с.

12. Марченко, В. М. Методы оптимизации и статистической обработки результатов измерений: учеб. пособие / В. М. Марченко, Т. Б. Копейкина. – Минск: БГТУ, 2007. – 142 с.

13. Колесников, В. Л. Компьютерное моделирование в химической технологии. Курсовое и дипломное проектирование: учеб. посо-

бие / В. Л. Колесников, И. М. Жарский, П. П. Урбанович. – Минск: БГТУ, 2008. – 336 с.

14. Дятко, А. А. Инженерные расчеты в Mathcad 14: учеб.-метод. пособие для студентов / А. А. Дятко, Т. В. Кишкурно. – Минск: БГТУ, 2010. – 77 с.

15. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов / В. А. Холоднов [и др.]. – СПб.: Профессионал, 2003. – 478 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ОТРАСЛИ

Составители:
Левицкий Иван Адамович
Кравчук Александр Петрович

Редактор *Ю. А. Ирхина*
Компьютерная верстка *Ю. А. Ирхина*
Корректор *Ю. А. Ирхина*

Издатель и полиграфическое исполнение:
УО «Белорусский государственный технологический университет».
ЛИ № 02330/0549423 от 08.04.2009.
ЛП № 02330/0150477 от 16.01.2009.
Ул. Свердлова, 13а, 220006, Минск.