

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Кравчук А.П.

**Электронный конспект лекций по дисциплине:
«Моделирование и оптимизация
химико-технологических процессов в отрасли»**

*для студентов специальности
1-48 01 01 «Химическая технология неорганических веществ,
материалов и изделий»*

Минск

Введение

Основные понятия дисциплины «Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов отрасли». Предмет изучения дисциплины. 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.

Применение методов и средств моделирования позволяет решать следующие задачи, в том числе:

1. Оптимальное проектирование новых и интенсификация действующих производственных процессов путем составления, исследования их математического описания и оптимизации технологических режимов.

2. Контроль за ходом технологического процесса, получение необходимой информации о нем и переработка этой информации. Информация может поступать прямо в управляющие машины, которые автоматически корректируют возникшие отклонения от нормального хода процесса. Это база для создания химических заводов будущего – заводов-автоматов, полностью управляемых машинами.

3. Максимальное ускорение переноса результатов лабораторных исследований новых процессов и технологических схем в промышленность. Так как освоение нового химического процесса (от лабораторных результатов до промышленной реализации) зачастую длится многие годы, в течение которых могут появляться новые более совершенные и эффективные способы проведения этого же процесса, то приходится либо существенно переделывать, либо вовсе отказываться от разработанных схем. Поэтому сокращение сроков освоения технологических схем приобретает решающее значение.

4. Решение задач исследований и реализации процессов, которые невозможно проводить без применения методов моделирования ввиду возникающих вычислительных и других трудностей.

Особое значение, в связи с широкомасштабным внедрением и использованием компьютерной техники, приобрело компьютерное моделирование, которое дает возможность учесть наибольшее число факторов и явлений, влияющих на протекание реальных процессов, и обеспечить высокую точность предсказания их поведения при расчетах. В результате коэффициенты запаса, которые необходимо было вводить раньше при проектировании для обеспечения надежности оборудования химических производств, могут быть существенно уменьшены, что должно привести к требуемой экономии энергетических, материальных и других ресурсов.

Наибольшее распространение среди компьютерных моделей получили структурные (физико-химические) и эмпирические. При построении физико-химических моделей используются модельные представления о механизме реально протекающих процессов химической технологии. Методологические принципы для создания таких моделей основаны на признании того факта, что различные ХТП базируются на одинаковых законах физики и химии, в частности, на знании закономерностей, так называемых элементарных процессов (гидродинамики, массо- и теплопередачи, химической кинетики, процессов фазовых переходов и т.д.). Физико-химические

модели, как правило, справедливы для описания поведения реальных процессов в более широком диапазоне изменения режимных и конструкционных параметров, чем эмпирические модели, и поэтому более пригодны для решения задачи оптимизации химических производств.

Эмпирические модели применяются, когда закономерности элементарных процессов химической технологии мало изучены или недостаточно известны. Для математического описания реальных процессов используется кибернетический принцип «черного ящика» и анализируются экспериментальные данные о входных переменных системы (условно независимых) и выходных переменных системы (зависимых).

Следует отметить, что в последнее десятилетие широкое применение получили так называемые пакеты моделирующих программ (ПМП) для компьютерного моделирования производств. Они используют физико-химические модели отдельных процессов химической технологии, позволяют решать большое разнообразие задач компьютерного моделирования, включая задачи идентификации и оптимизации. Среди известных ПМП наиболее распространены следующие комплексы программ – ASPEN, HYSYS, PRO-n и ChemCad.

С использованием компьютерных моделей химических производств решаются задачи как автоматизированного проектирования химико-технологических процессов (САПР), так и управления химическими процессами (АСУТП) и предприятиями (АСУП).

1 Основные понятия моделирования

1.1 Модели и способы моделирования. Классификация моделей. Теория подобия и физическое моделирование. Математическое моделирование. Виды математических моделей. Основные требования к процессу моделирования.

В научно-технических исследованиях весьма часто возникает следующая ситуация. Нас интересует некоторый объект – назовем его оригиналом. Но вместо того, чтобы изучить непосредственно оригинал, мы изучаем другой объект – модель, а результаты исследования модели распространяем на оригинал.

Примем следующее определение модели. **Модель** – такая мысленно представляемая или материально реализованная система, которая отображает или воспроизводит объект исследования и способна замещать его так, что изучение системы дает нам новую информацию об объекте. Процесс создания модели, ее исследования и распространения результатов на оригинал называют моделированием.

Пример. В лаборатории получено новое ценное вещество. Мы хотим построить установку для его производства. Эта установка и есть оригинал. Но прежде, чем строить ее, мы создадим модель установки и, скорее всего, не одну. Изучая работу этих моделей, мы будем стараться узнать – каковы должны быть параметры и режим работы оригинала, чтобы результаты этой работы оказались наилучшими. Вопросы о том, как должны быть построены модели, чтобы такие выводы оказались достаточно точными, и как делать эти выводы, решает теория моделирования.

1.1.1 Типы моделей

В основу классификации моделей положен, во-первых, способ воспроизведения, т.е. средства, при помощи которых строится модель и, во-вторых характер тех объектов, тех областей реального мира, которые воспроизводятся в модели.

В зависимости от способа построения (воспроизведения) модели могут быть разделены на:

- **материальные** (действующие, реальные, вещественные);
- **идеальные** (воображаемые, умозрительные, мысленные).

Материальные модели, в свою очередь, могут быть разделены на три основные группы: первая группа – это модели, создаваемые для того, чтобы воспроизвести или отобразить пространственные свойства. Отношение этих моделей к объекту характеризуется **геометрическим подобием**. К этой группе относятся различные макеты, компоновки, пространственные модели молекул и т. д.

Во вторую группу входят модели, создаваемые с целью воспроизвести как пространственные свойства натурального объекта, так и динамику изучаемых процессов. Основой модельного отношения является здесь **физическое подобие** модели и объекта, предполагающее одинаковость или сходство их физической природы и тождественность законов движения (модели летательных аппаратов, кораблей, плотин и т.д.).

К третьей группе материальных моделей относятся модели, не обладающие с объектом одной и той же физической природой и не имеющие с ним физического и геометрического подобия. Здесь отношение между моделью и реальным объектом является отношением аналогии. Эта аналогия выражается наличием одинакового математического формализма, которым описывается поведение этих систем. К этим моделям относятся все возможные **аналоговые модели**.

Действующие, или материальные, модели неразрывно связаны с воображаемыми, или идеальными, моделями главным образом потому, что человек, прежде чем построить модель из каких-либо материалов, мысленно представляет ее, теоретически обосновывает. При построении идеальных моделей исследователь опирается на определенную семантику и пользуется логическими, математическими и другими специфическими правилами и законами.

Идеальные модели делятся на образные, или иконические (иконографические), которые осуществляют графическое отображение свойств объекта (схемы, чертежи и т. д.), и символические (знаковые), которые являются математическими описаниями процессов или объектов и называются математическими моделями.

1.1.2 Виды моделирования

Принято различать методы **физического** и **математического** моделирования, которые основаны на принципах соответственно физического и математического подобия. Все процессы, протекающие в физически подобных объектах, характеризуются одинаковой физической природой. Математически подобные объекты имеют различную физическую природу, но описываются уравнениями одинакового вида.

Физическое моделирование.

Физическое моделирование – это метод исследований на моделях, которые имеют одинаковую с оригиналом физическую природу и воспроизводят весь ком-

плекс свойств изучаемых явлений. Метод известен с XV в.

Метод физического моделирования до недавнего времени находил широкое применение в аэро- и гидродинамике, кораблестроении, мостостроении, в химической технологии и т. д.

Научной основой физического моделирования является теория подобия. Ее основное положение: *необходимое физическое подобие модели и объекта обеспечивается лишь при равенстве всех одностипных определяющих безразмерных комплексов (критериев подобия) в сходственных точках модели и объекта.*

При физическом моделировании в дополнение к геометрическому подобию предусматривается подобие скоростей, сил, материальных сред и т. п.

При моделировании на основе метода подобия безразмерные комплексы играют двоякую роль.

Во-первых, на их основе определяют, когда модель подобна оригиналу, при этом комплексы служат собственно критериями подобия.

Во-вторых, значения тех же комплексов в сходственных точках и есть та количественная мера, которая переносится с модели на объект.

Рассмотрим некоторые, часто используемые критерии подобия.

Критерий Рейнольдса (критерий гидродинамического подобия):

$$Re = W \frac{l}{\nu},$$

где W – скорость потока; l – определяющий размер; ν – кинематическая вязкость среды.

Критерий Нуссельта (критерий теплового подобия):

$$Nu = \alpha \frac{l}{\lambda},$$

где α – коэффициент теплоотдачи; l – определяющий размер; λ – коэффициент теплопроводности.

Критерии подобия позволяют установить аналогию между разными явлениями. Возможность физического моделирования определяется следующей зависимостью:

$$f = \alpha - R, \tag{1.3}$$

где f – число степеней свободы; α – количество параметров характеризующих процесс; R – число критериев, которое необходимо поддерживать.

Если число степеней свободы $f < 0$, то применять физическое моделирование нельзя, так как нет свободы выбора параметров модели.

Достоинства метода физического моделирования:

– возможность изучения процесса без составления его математического описания;

– наглядность, так как физическая модель воспроизводит практически все стороны исследуемого оригинала;

– возможность воспроизведения производственного процесса в лабораторных условиях.

Недостатки метода физического моделирования:

- отсутствие универсальности, так как для каждого нового процесса необходимо создавать новую модель;
- высокая стоимость моделей для исследования сложных процессов;
- невозможность применения этого метода для моделирования большей части химических процессов и реакторов, а также других сложных объектов.

Подробнее остановимся на последнем недостатке. Использование теории подобия позволяет сформулировать требования к модели, удовлетворение которых обеспечивает возможность количественного распространения результатов эксперимента с модели на оригинал. Но в тех случаях, когда процесс в оригинале сложен, удовлетворить этим требованиям оказывается очень трудно. Когда число критериев, определяющих подобие, достаточно велико, построение подобной модели становится нереальной задачей. Именно этим определяются трудности, возникшие при попытках применения метода подобия для моделирования химических процессов и реакторов.

Рядом исследователей были сформулированы критерии подобия для данного класса процессов. Но оказалось, что в подавляющем большинстве случаев эти процессы настолько сложны, что для соблюдения подобия модели и оригинала потребовалось бы идентичность очень большого числа критериев подобия сразу, обеспечить которую практически невозможно.

В качестве примера рассмотрим систему, в которой протекает химическая реакция. Исходя из теории подобия, для такой системы можно составить критерии подобия, в частности критерий Рейнольдса, характеризующий гидродинамический режим и критерий Дамкеллера, характеризующий химическое превращение и др.

$$Da = r \cdot l / W,$$

где r – скорость химической реакции.

Критерии Re , Da (другие критерии в целях упрощения не рассматриваются) характеризуют изучаемую систему. Однако эти критерии несовместны между собой, поскольку при $Re = \text{const}$ величина W обратно пропорциональна, а при $Da = \text{const}$ – прямо пропорциональна величине l .

Из приведенного сопоставления следует, что для сохранения гидродинамического подобия скорость потока должна изменяться обратно пропорционально, а для сохранения химического подобия – прямо пропорционально линейному размеру l . Естественно, что в одном и том же процессе это невозможно.

Причина этого лежит не в неудачном выборе критериев подобия, а в невозможности в общем случае сохранить одинаковым влияние физических факторов на скорость химического превращения в реакторах различного масштаба.

В химическом реакторе скорость собственно химического превращения не зависит от размеров реакционной системы. Но протекание химической реакции приводит к изменению состава и температуры. Следствием этого является возникновение процессов переноса вещества и тепла, скорость которых существенно зависит от размеров системы.

Состав и температура, в свою очередь, сильно влияют на скорость химической реакции. В результате возникает очень сложная зависимость условий протекания химического процесса от размеров аппарата. Причем изменение размера реактора

может значительно изменить как общую скорость процесса, так и соотношение скоростей реакций, приводящих к различным продуктам реакции, т. е. избирательность процесса.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что невозможность использования метода физического моделирования для химических реакторов объясняется несовместимостью условий подобия физических и химических составляющих процесса. Этот вывод справедлив для большинства химических процессов и реакторов.

Однако физическое моделирование широко используется для гидродинамических и тепловых процессов, протекающих в тех частях реактора, где химическое превращение отсутствует (например, распределительные и смесительные устройства и др.).

Математическое моделирование.

Математическое подобие физических процессов. Математика как одна из древнейших наук в разные времена и в разных областях играла различные роли: от простого подручного до высшего судьи, решающего вопрос об истине. Такое многообразие ролей определяется возможностью описывать различные объекты и процессы окружающего мира с помощью универсальных в той или иной мере соотношений, т. е. заменять оригинал его математическим аналогом – **математической моделью**. **Математической моделью** называется приближенное описание какого-либо явления или процесса внешнего мира, выраженное с помощью математической символики.

Под **математическим моделированием** понимают изучение свойств объекта на математической модели. Его целью является определение оптимальных условий протекания процесса, управление им на основе математической модели и перенос результатов на объект.

Математическое моделирование как современный аппарат системного анализа применяется практически на всех уровнях исследования физических процессов и технических устройств: от понимания их сути и характерных особенностей до их практической реализации.

Данный метод базируется на математическом подобии: у математически подобных объектов процессы имеют различную физическую природу, но описываются идентичными уравнениями.

В качестве примера математического подобия рассмотрим несколько различных по физической природе явлений и их математические описания:

1. Закон Фурье

$$q = -\lambda \frac{dT}{dX}$$

2. Закон Фика

$$j = -D \frac{dC}{dX}$$

3. Закон Ома

$$i = -x \frac{dU}{dX}$$

Знак «-» при коэффициентах уравнений означает, что поток направлен из областей с большими значениями параметра в область, где этот параметр имеет меньшее значение.

Во всех четырех законах переноса наблюдается подобие (единообразие) математических описаний различных физических явлений. Поэтому любой из перечисленных процессов может быть описан в рамках единой математической модели.

Каждый из приведенных законов можно с использованием определенных пересчетных коэффициентов интерпретировать, например, на электрической модели, иллюстрирующей закон Ома. Среди рассмотренных примеров электрическая модель является наиболее простой и может быть применена для нескольких оригиналов с различной физической природой, т. е. она становится универсальной. На такой модели воспроизводится не сам физический процесс, а его математическое описание или проводится аналогия между законами, которые выражают явления в оригинале и в модели.

Практика научных исследований подтвердила, что вполне правомерно представлять изучаемый процесс на модели, в которой протекает другой по своей природе процесс, если математические описания этих процессов изоморфны.

Гомоморфизм – это соответствие некоторых свойств оригинала свойствам модели.

Изоморфизм – взаимный гомоморфизм, т. е. когда все свойства модели соответствуют свойствам оригинала.

По сравнению с физическим математическое моделирование – более универсальный метод. Метод математического моделирования:

- позволяет осуществить с помощью одного устройства исследование целого класса задач, имеющих одинаковое математическое описание;
- использует весьма эффективное средство исследования объектов – быстродействующую вычислительную технику;
- экономичнее метода физического моделирования как по затратам времени, так и по стоимости;
- позволяет сравнительно просто изменять параметры исследуемого объекта.

Математическое моделирование не лишено и недостатков. Принимаемые допущения при математическом моделировании нередко существенно искажают сущность процесса, что значительно снижает точность результатов решения задач. Кроме того, при математическом моделировании не удастся визуально наблюдать за ходом процесса.

Классификация математических моделей.

Математические модели можно классифицировать по нескольким признакам. Рассмотрим некоторые из них.

1. Известно, что математическая модель содержит переменные процесса. Если основные переменные процесса изменяются во времени и в пространстве, то модели, описывающие такие процессы, называются *моделями с распределенными параметрами*. Обычно эти модели записываются в виде дифференциальных уравнений в частных производных.

Если основные переменные процесса не изменяются в пространстве, а изменяются только во времени, то математические модели, описывающие такие процес-

сы, называются *моделями с сосредоточенными параметрами* и они записываются в виде обыкновенных дифференциальных уравнений.

2. По характеру режима процессов, протекающих в моделируемых объектах, различают статические и динамические модели. *Статическая модель* включает описание связей между основными переменными процесса в установившихся режимах (в равновесном состоянии без изменения во времени). *Динамическая модель* включает описание связей между основными переменными процесса во времени при переходе от одного режима к другому.

Совокупность статической и динамической моделей с ограничениями и дополнительными условиями называют *полной математической моделью* процесса.

3. По природе процессов, протекающих в моделируемых объектах, различают модели *детерминированные* и *вероятностные (стохастические)*.

Модель, описывающая процесс, в котором значение выходной величины однозначно определяется значением входной величины, называется *детерминированной моделью*.

Модель, описывающая процесс, в котором изменение выходных величин происходит беспорядочно и часто дискретно, при этом значение выходной величины не находится в однозначном соответствии с входной величиной, называется *стохастической моделью*.

4. По функциональным признакам. Математическая модель может возникнуть в результате:

1) прямого изучения реального процесса. Такие модели называются *феноменологическими*;

2) процесса дедукции. Новая модель является частным случаем некоторой более общей модели. Такие модели называются *асимптотическими*;

3) процесса индукции. Новая модель является обобщением элементарных моделей. Такие модели называются *моделями ансамблей*.

Все математические модели по функциональному назначению можно условно разбить на четыре основные группы:

- модели прогноза или расчетные модели;
- оптимизационные модели;
- кибернетические модели;
- экспертные системы.

Модели прогноза или расчетные модели без управления. Основное назначение подобных моделей – дать прогноз о поведении системы во времени и в пространстве на основе информации о начальном состоянии поведения на границе моделируемого объекта.

Как правило, модели прогнозирования описываются алгебраическими, трансцендентными, дифференциальными, интегральными, интегродифференциальными уравнениями и неравенствами. Пример, модели распределения тепла, электрического поля, химической кинетики, гидродинамики и т. д.

Оптимизационные модели используются как на уровне проектирования, так и в задачах оптимального управления различных технологических систем.

Методы отыскания экстремума функции многих переменных с различными ограничениями часто называются методами математического программирования.

Задачи математического программирования являются одними из важнейших оптимизационных задач.

Как правило, к задачам математического программирования неприменимы методы классического анализа для отыскания экстремума функции нескольких переменных.

Кибернетические модели используются для анализа конфликтных ситуаций. Понятия *кибернетическое моделирование*, *искусственный интеллект*, *нейроматематика* тесно связаны с математическим моделированием и не мыслимы без него. При построении модели прибегают к известным упрощениям, цель которых – стремление отобразить не весь объект, а с максимальной полнотой охарактеризовать некоторый его «срез». Задача заключается в том, чтобы путем введения ряда упрощающих допущений выделить важные для исследования свойства.

Экспертными системами принято называть программные средства, выполняющие какие-либо аналитические функции. В зависимости от уровня и способа решения задач различают экспертные системы, основанные:

- на правилах;
- на принципах;
- на примерах;
- на имитационном моделировании.

Компьютерное моделирование.

В связи с понятием математического моделирования возникает родственное ему понятие компьютерного моделирования.

Компьютерное моделирование – это математическое моделирование с использованием средств вычислительной техники.

Системный подход в рамках компьютерного моделирования предполагает последовательное выполнение следующих действий:

1. Определение цели моделирования.
2. Разработка концептуальной модели.
3. Формализация модели.
4. Программная реализация модели.
5. Планирование модельных экспериментов.
6. Реализация плана эксперимента.
7. Анализ и интерпретация результатов моделирования.

Содержание первых двух этапов практически не зависит от математического метода, положенного в основу моделирования (и даже наоборот – их результат определяет выбор метода). А вот реализация остальных пяти этапов существенно отличается для каждого из двух основных подходов к построению модели. Именуется эти подходы разными авторами по-разному, но используют для их обозначения термины «аналитическое» и «имитационное» моделирование.

Аналитическое моделирование предполагает использование математической модели реального объекта в форме алгебраических, дифференциальных, интегральных и других уравнений, связывающих между собой выходные и входные переменные, дополненные системой ограничений. При этом предполагается наличие однозначной вычислительной процедуры получения точного решения уравнений.

При *имитационном* моделировании используемая математическая модель

воспроизводит логику (алгоритм) функционирования исследуемой системы во времени при различных сочетаниях значений параметров системы и внешней среды.

1.1.3 Основные требования к процессу моделирования.

Чтобы моделирование имело смысл, оно должно удовлетворять двум требованиям.

1. *Экономичность*. Исследование на модели должно быть более экономичным, чем непосредственно исследование оригинала.

Моделирование может экономить средства, время или, например, быть безопаснее, чем прямое изучение оригинала. Экономичность не обязательно означает дешевизну модели. Экономичности можно добиться либо создав дешевую модель (малую по размерам, сделанную из дешевых материалов и т. п.), либо создав модель дорогую, но универсальную – способную «обслуживать» различные оригиналы.

2. *Традуктивность* (от латинского *traductio* – перенесение, перевод). Она означает, что мы должны знать, как по результатам испытания модели определить интересующие нас параметры оригинала. При этом нас практически всегда интересует количественная традукция. Нам недостаточно узнать в результате моделирования, что такой-то процесс вообще осуществим. Важно иметь возможность рассчитать и оптимизировать его.

Пример. Недостаточная традуктивность.

На лабораторной установке отработаны условия протекания синтеза вещества. Установлено, что реакция проходит при 690 К. Для создания столь высокой температуры пришлось намотать поверху обмотку электрообогрева и покрыть реактор теплоизоляцией. В этих условиях во всей реакционной зоне поддерживалась практически одинаковая температура и реакция заканчивалась за 1,3 с.

При переходе к полупромышленным масштабам выяснилось, что одной из главных технологических проблем является выделение большого количества тепла реакции, вследствие которого температура в реакционной зоне непрерывно меняется, а главной конструктивной задачей – отвод тепла. Наилучший результат получен при продолжительности реакции 4,6 с, однако осталось неясно, как изменятся оптимальные параметры конструкции и режима при переходе к большому промышленному масштабу. Значит, данное моделирование проведено неправильно – оно не позволило рассчитать и оптимизировать процесс до сооружения оригинала.

1.2 Основные понятия системных объектов. Химико-технологический процесс (ХТП) как система. Понятие системы. Внешние связи системы. Входы (факторы) и выходы (отклики) систем. Контролируемые и неконтролируемые входы. Уровни иерархии химико-технологической системы. Типовые химико-технологические процессы.

По определению академика А.И. Берга под **сложной системой** следует понимать организованное множество различных элементов, взаимосвязанных и выполняющих определенные функции. **Система** – это совокупность элементов, отличающаяся двумя особенностями. Во-первых, сущность системы невозможно понять, рассматривая только свойства отдельных элементов. Для системы существенен способ взаимодействия элементов, выраженный в ее структуре. Во-вторых, система функционирует обязательно во взаимодействии с окружающим миром. Без понимания этого взаимодействия также невозможно понять ее сущность. По сути, любой

объект природы и общества является системой.

Пример. Превращение несистемы в систему.

Оборудование, предназначенное для монтажа технологической установки, лежит на складе. В этом виде его нельзя рассматривать как систему: элементы (единицы оборудования) не взаимодействуют друг с другом. При монтаже оборудования и сборке технологической схемы возникает структура, взаимодействие элементов. Но чтобы установка стала системой, необходимо еще взаимодействие с окружающим миром: воздействие внешнего мира на систему (например, подача сырья и энергии) и воздействие системы на внешний мир (выпуск продукции). Без этого структура окажется бессмысленной, а системность установки будет лишь кажущейся. Конечно, если установку временно законсервируют, она не перестанет быть системой – но лишь постольку, поскольку предполагается возможность вышеназванного взаимодействия.

Для решения задач моделирования химико-технологического процесса (ХТП) применяется *системный подход*, в соответствии с которым он рассматривается как некоторая функциональная система («объект»).

Объект, представляющий собой один аппарат или секцию аппарата (типовой ХТП), в котором протекают физико-химические процессы, называется *физико-химической системой (ФХС)*.

Объект, являющийся совокупностью соединённых между собой аппаратов (производство ТНСМ материалов), в частности, для производства некоторого целевого продукта, называется *химико-технологической системой (ХТС)*.

Объекты химической технологии обычно находятся под влиянием различных факторов (параметров, переменных).

Внешние связи объекта можно представить схемой, изображенной на рисунке.

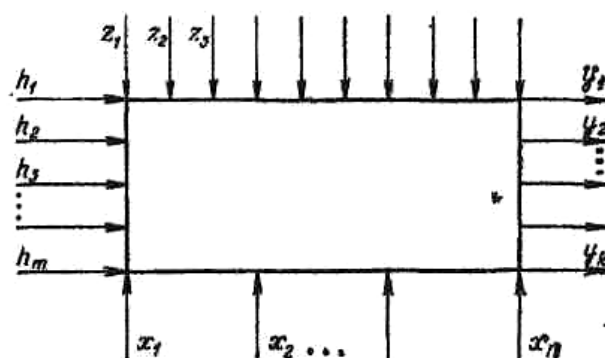


Рисунок – Схема внешних связей системы

Воздействие, поступающее на вход объекта, называют **входной переменной**, или входом, а реакцию на выходе того же объекта – **выходной переменной**, или **выходом**. Между этими величинами существует взаимосвязь, которая характеризует протекающий в объекте процесс. Объект обычно подвергается возмущениям, и для их компенсации используют **управляющие воздействия**.

Входные переменные на рисунке 2 разделены на три группы: H, X, Z . Факторы H и X – **контролируемые входные переменные**. Это те воздействия, которые мы контролируем (измеряем) в процессе функционирования системы.

При этом h_1, h_2, \dots, h_m – входные переменные, **контролируемые**, но **нерегулируемые**. Значения их могут быть измерены, но возможность воздействия на них отсутствует. Предполагается также, что эти параметры не зависят от режима процесса.

Например, температура и влажность окружающей среды, контролируемый состав исходного сырья, теплоносителя, количество и качество которых могут быть определены, но не подлежат изменению.

x_1, \dots, x_n – **управляющие переменные** (факторы, параметры). Объект химической технологии обычно подвержен влиянию различных возмущений. С целью компенсации этих возмущений на объект накладываются управляющие воздействия. Управляющими, называются те переменные (факторы), на которые можно оказывать прямое воздействие в соответствии с определенным выбором или предъявляемыми требованиями, что позволяет управлять процессом. Например, расходы газа и воздуха, скорость загрузки, тепловой режим или режим термообработки, количество сырьевой смеси, подаваемой в аппарат и т.д. Для нестационарных режимов объектов одним из компонентов вектора X может быть время.

Z – вектор **неконтролируемых (возмущающих)** переменных. Возмущающими называют параметры, значения которых случайным образом изменяются с течением времени и которые недоступны для измерения. Например, случайные ошибки измерения, индивидуальные особенности стекловаара.

Возмущающие воздействия могут зависеть как от процесса в объекте, так и не зависеть от него и, следовательно, бывают соответственно **внутренними** и **внешними**.

Возможны три основных причины того, что тот или иной параметр оказывается неконтролируемым: 1) отсутствует полная информация об объекте, вследствие чего мы не знаем, что данная переменная существенно влияет на поведение объекта, и поэтому не контролируем ее; 2) сложность контроля переменной; 3) количество слабых возмущающих воздействий весьма велико.

Пример. Неконтролируемая переменная.

До того, как Ч. Гудьир установил, что взаимодействие с серой приводит к вулканизации резины, эта переменная была неконтролируемой. В многочисленных попытках получить из каучука более ценный продукт Гудьир обрабатывал его и серосодержащими веществами (например, парами серной кислоты), причем в ряде случаев получал обнадеживающие результаты; но пока он не понял, что действующая переменная – именно сера, вулканизация не была изобретена.

Вторая причина неконтролируемости переменной – сложность его контроля. Есть один важный параметр, сильно влияющий на самые разнообразные системы, контролировать который мы умеем очень плохо. Это индивидуальность и душевное состояние человека, работающего с данной системой. Мы далеко не всегда знаем, какие именно параметры этого сложного параметра оказывают влияние и как их измерять.

Наиболее распространена третья причина, по которой мы не контролируем множества входных воздействий. Каждое воздействие из этого множества **слишком слабо**, чтобы стоило его контролировать. С другой стороны, таких слабых воздействий столь много (практически бесконечно много), что все их контролировать невозможно. На химико-технологический процесс как-то влияют и микропримеси, попадающие из воздуха и из аппаратуры и солнечный луч, пробившийся в окно и слегка подогретый аппарат; и вибрации от проехавшего за стеной грузовика, чуть-чуть уплотнившие слой катализатора...

При этом каждый из этих параметров влияет очень слабо, но их столь много,

что совокупное их влияние оказывается весьма ощутимым. Важно отметить, что это влияние носит *случайный характер*: не контролируя входы Z , невозможно предсказать, как они повлияют в той или иной момент. В эксперименте их влияние появляется в *случайных ошибках опытов*; на производстве – в *случайных возмущениях режима*. В целом влияние неконтролируемых воздействий часто обозначают термином **шум** (источник шума может заключаться и внутри системы, но это не изменит наших рассуждений).

Выходные переменные (факторы, отклики, параметры). Это переменные, величины которых определяются режимом процесса и которые характеризуют его состояние, возникающие в результате суммарного воздействия входных, управляющих и возмущающих параметров. Например, количество и качество получаемых изделий, себестоимость продукции.

На входные и выходные переменные обычно накладываются **ограничения**, определяющие диапазон изменения каждой переменной.

ХТП имеет сложную структуру: составляющие его элементарные процессы протекают на разных уровнях: от наинизшего (уровень молекулы) до высшего (уровень цеха или предприятия). Поэтому модель строится путем последовательного перехода в описании ХТП с одного уровня на другой, согласно иерархической соподчиненности элементов системы.

Выделяют следующие ступени иерархии системы:

Микроуровень. Процессы и явления рассматриваются без учета влияния закономерностей движения потоков фаз в аппаратах. Например, процессы, протекающие в масштабе порядка расстояния между молекулами, которые подчиняются закономерностям химической кинетики.

Макроуровень (ФХС – сплошная многофазная многокомпонентная среда в отдельном аппарате или секции аппарата, распределенная в пространстве и переменная во времени, в каждой точке гомогенности которой и на границе раздела фаз происходит перенос вещества, энергии и импульса при наличии их источников (стоков)) – представляет собой зону аппарата или отдельный аппарат (зона нагрева, выдержки при максимальных температурах, охлаждения в тепловых агрегатах т. д.). На этом уровне учитывают число, конфигурацию, взаимную связь и взаимное расположение рабочих зон. Все процессы рассматриваются с учётом движения материальных и тепловых потоков. Например, стекловаренная печь непрерывного действия включает варочную и выработочную зоны, в которых протекают процессы теплообмена и массообмена.

Уровень производства – ХТС (технологическая схема процесса, которая рассматривается как совокупность тесно связанных подсистем (процессов в аппаратах (ХТП)), имеющих единую цель функционирования). Совокупность аппаратов, связанных между собой тепловыми, материальными и информационными потоками.

Уровень предприятия – несколько производств, составляющих предприятие.

Модель каждого высшего уровня содержит модели низших уровней и соотношения, описывающие переход с одного уровня на другой. Такой подход часто позволяет анализировать и моделировать процесс по частям, что существенно упрощает анализ; в то же время при этом не упускается из виду структура – характер связей уровней.

При этом производство рассматривается как химико-технологическая система (ХТС), а процессы в отдельных аппаратах – как физико-химические системы (ФХС).

Схематическое изображение ХТС в виде совокупностей ФХС представлено на рисунке 4. На вход ХТС поступают потоки, характеризующиеся вектором входных переменных X (например, химический состав шихты и ее количество на входе в стекловаренную печь, температура и давление в аппаратах и т.д.). В пределах ФХС входные переменные X претерпевают целенаправленное физико-химическое превращение в вектор выходных переменных Y , например количество изделий и их показатели качества.

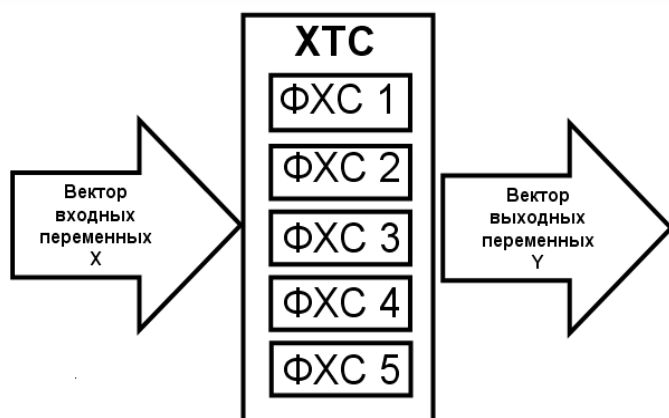


Рисунок – Схематическое представление ХТС в виде совокупности ФХС

Типовые ХТП.

Для моделирования сложных ХТС их разъединяют на технологические звенья, в которых протекают сходные ХТП.

По характеру материальных и энергетических связей все многообразие ХТП можно разделить на 5 основных классов: 1) гидродинамические, 2) тепловые, 3) диффузионные, или массообменные, 4) механические и 5) химические.

К классу **гидродинамических** относятся процессы перемещения жидкостей и газов по трубопроводам и аппаратам, перемешивания в жидких средах, процессы обработки неоднородных жидких и газовых систем (очистка газов от пыли и туманов, разделение суспензий и эмульсий путем отстаивания, фильтрования, центрифугирования и т. п.). Скорость гидродинамических процессов определяется законами механики и гидродинамики.

Класс **тепловых** процессов составляют процессы нагревания, охлаждения, конденсации, выпаривания, теплообмена и т. п. Скорость тепловых процессов определяется законами теплопередачи.

Класс **диффузионных (массообменных)** процессов связан с переносом вещества в различных агрегатных состояниях из одной фазы в другую (адсорбция, десорбция, растворение, кристаллизация, увлажнение, сушка, сублимация, ионный обмен, абсорбция, дистилляция и ректификация и др.). Скорость диффузионных процессов определяется законами массопереноса.

К классу **механических** процессов относятся процессы дробления, измельчения, грохочения, транспортирования твердых материалов, гранулирования и др.

Класс **химических** процессов весьма многообразен. Скорость химических процессов определяется законами химической кинетики.

Каждый из этих классов с учетом целевого назначения и условий реализации в свою очередь делится на типовые процессы.

1.3 Этапы построения математической модели ХТП. Составление математического описания. Теоретический и экспериментально-статистический подход к построению моделей. Виды теоретических моделей. Физико-химические блочно-

структурные модели ХТП. Прямая и обратная задачи моделирования. Пассивный и активный эксперимент. Уравнение регрессии.

Построение математической модели химико-технологического процесса в общем случае включает несколько этапов:

1. Постановка задачи исследования:

– формулирование целей моделирования;

– выбор определяющих переменных (факторов) исследуемого процесса.

2. Составление математического описания объекта моделирования.

3. Выбор метода решения системы уравнений математического описания и реализация его в форме моделирующей программы;

4. Проверка адекватности модели реальному объекту моделирования.

В результате вместо анализа свойств реальных объектов или их физических моделей, реализуемых обычно на пилотных или полупромышленных установках, большинство исследований можно проводить с применением разработанной ММ, что существенно дешевле, быстрее и безопаснее.

Для корректного решения этих задач необходимо, чтобы математическая модель была адекватна реальному процессу. **Адекватность ММ** – соответствие математической модели экспериментальным данным (согласно ГОСТ 24026-80).

Наиболее сложным этапом математического моделирования является этап составления математического описания (МО).

Математическое описание ХТП в общем виде представляют собой систему уравнений вида:

$$y_i = \hat{O}_i(H, X, Z, a)$$

Каждое из уравнений определяет зависимость i -го выхода от всех входных воздействий. Но установить вид функции Φ принципиально невозможно: мы не знаем полного списка аргументов этой функции – ведь факторы Z неизвестны. Во многих случаях каждое из уравнений достаточно точно – можно представить в виде

$$y_i = F_i(H, X, a) + \Psi_i(Z)$$

Здесь функция разбита на два слагаемых: зависимость F_i от контролируемых, факторов и шум Ψ_i . Нужно установить вид функции F и оценить шум Ψ_i . Часто в качестве математической модели понимают именно совокупность функций $F_i(H, X, a)$, выделяя оценку шума в отдельную задачу.

Способы составления математического описания ХТП будут разными в зависимости от целей моделирования и степени полноты знаний об исследуемом объекте (см. рисунок).

Математическое описание процессов в отдельных аппаратах может быть **теоретическим (аналитическим, детерминированным, структурным)** или **экспериментально-статистическим (эмпирическим, вероятностным, стохастическим)**, в соответствии с чем, различают **теоретические** или **экспериментально-статистические (эмпирические)** модели.

МО теоретических моделей строится на основе знания механизма протекания ХТП:

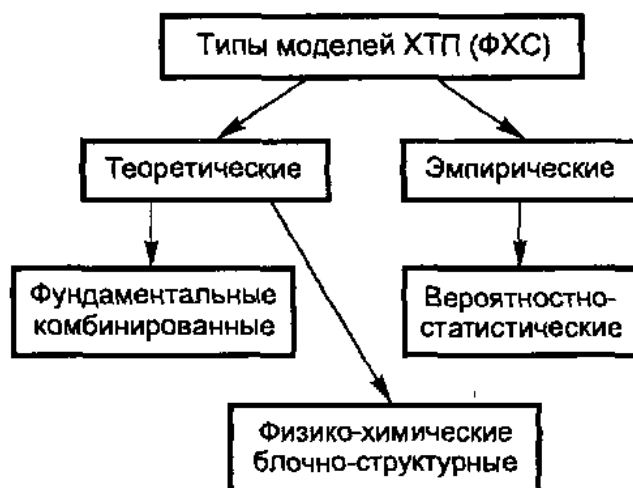
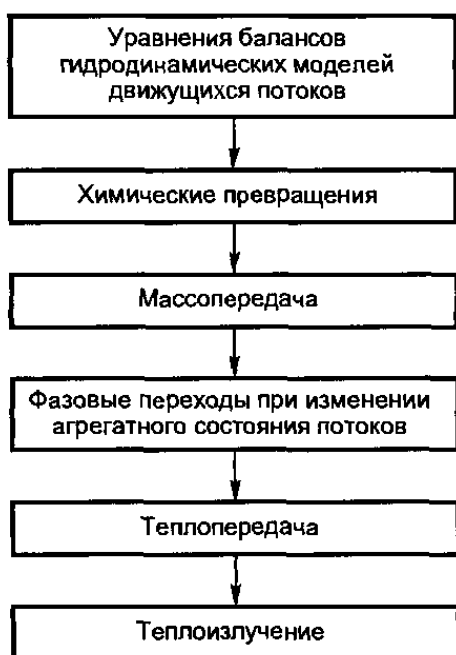


Рисунок – Типы моделей ХТП

– для **фундаментальных комбинированных моделей ХТП** – это детальное описание механизмов процесса, в том числе и на атомно-молекулярном уровне с помощью интегро-дифференциальных уравнений;

– для **физико-химических блочно-структурных моделей ХТП** – приближенное описание, базирующиеся на модельном представлении гидродинамических, массо- и теплообменных процессов, а также химических превращений, называемых в этом случае «элементарными» процессами.



Для физико-химических блочно-структурных моделей при составлении математического описания предварительно выделяют основные явления и элементы в объекте и затем устанавливают связи между ними. Для каждого выделенного элемента и явления записывают уравнение (или систему уравнений), отражающие его функционирование. Кроме того, в математическое описание включают уравнения связи между различными выделенными явлениями. В зависимости от процесса математическое описание может быть представлено в виде системы алгебраических, дифференциальных, интегральных и интегродифференциальных уравнений.

При физико-химическом моделировании решается так называемая **прямая задача** математического моделирования, когда известен вид уравнений МО (7) и значения его коэффициентов **a**, необходимо определить значения выходных переменных **Y**.

Преимущества физико-химических моделей:

1) качественно более правильно характеризуют моделируемый объект даже при наличии недостаточно точных в количественном отношении параметров модели;

2) могут использоваться для экстраполяции свойств реальных объектов за пределы диапазона изменения переменных, в которых проводилась их экспериментальная проверка и определение коэффициентов моделей **а**.

Недостатки:

1) составление таких моделей требует по сравнению с экспериментально-статистическими больших затрат времени и средств и пригодны для описания сравнительно простых явлений.

Для исследования процесса производства ТН и СМ, анализа экономических показателей производства, изучения физико-химических процессов в условиях дрейфа показателей и параметров во времени наибольшие возможности представляют экспериментально-статистические модели.

Экспериментально-статистический подход используется, когда знаний о внутренней структуре объекта недостаточно или они отсутствуют совсем. Уравнение математического описания при этом представляет собой систему эмпирических зависимостей, полученных в результате статистического исследования (эксперимента) на действующем объекте.

Экспериментально-статистические методы математического моделирования классифицируют (рисунок) следующим образом: 1) по способу сбора экспериментальных данных (**активный и пассивный эксперимент**), 2) по виду моделей (**математические модели статики и динамики объектов исследования**).

Пассивный эксперимент – эксперимент при котором уровни факторов в каждом эксперименте регистрируются исследователем, но не задаются. (уровень фактора – фиксированное значение фактора относительно начала отсчета). Он проводится в режиме нормальной эксплуатации объекта и предполагает регистрацию контролируемых и выходных переменных без внесения искусственных возмущений в его работу.

Активный (планируемый) – эксперимент, в котором уровни факторов в каждом опыте задаются исследователем. На вход исследуемого объекта подаются определенные воздействия, которые заранее планируются в соответствии с некоторым оптимальным критерием (методы планирования эксперимента).

Каждому сочетанию способа эксперимента и цели моделирования соответствует определенная группа математических методов. В частности, для составления математических **моделей статики объектов при пассивном эксперименте** используются *методы корреляционного и регрессионного анализа*.

Математические **модели статики объекта при активном эксперименте** получают, например, *методами факторного эксперимента, методом ортогонального центрального композиционного планирования, методом центрального композиционного рототабельного планирования*.

При построении **математических моделей динамики объекта на основе пассивного эксперимента** широко используются *методы теории случайных функций, метод динамического регрессионного анализа и ряд других*; **при активном эксперименте** используются те же *методы теории случайных функций с учетом вида активного воздействия* (например, «белый шум», последовательность псевдослучайных сигналов).

При экспериментально-статистическом моделировании объект исследования

представляют в виде «черного ящика», определяя связи между **выходными переменными** и множеством **входных переменных (факторов)**.

В общем виде математическим описанием объекта представлено функцией, которая называется **функцией отклика (зависимость математического ожидания отклика от факторов)**

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n)$$

Где независимые переменные x_1, x_2, \dots, x_n – факторы; $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$ – коэффициенты модели. Пространство с координатами x_1, x_2, \dots, x_n – **факторное пространство**. Геометрическое изображение функции отклика в факторном пространстве называется **поверхностью отклика**.

При использовании статистических методов связь между факторами x_i, x_j и выходной переменной y в **статике** задается в виде полинома (отрезка ряда Тейлора), в который разлагается неизвестная функция:

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

где $\beta_0, \beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ii}$ называются **коэффициентами регрессии**, характеризующие соответственно линейные эффекты, эффекты взаимодействия и квадратичные эффекты.

Обычно используют полиномы не выше второго порядка, тогда коэффициент β_0 представляет собой константу. Коэффициенты $\beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ii}$ называются взаимодействиями и выражают влияние на выходной параметр y соответственно фактора x_i , совместного влияния факторов x_i и x_j .

Для **экспериментально-статистических моделей** не требуется решение уравнений математического описания процесса. Решается так называемая **обратная задача** математического моделирования, когда по данным эксперимента (пассивного или активного) рассчитывают коэффициенты полинома и определяют вид уравнений математического описания (МО).

Природа ХТП в ряде случаев является статистической (случайность предопределяется самой сущностью явлений: процессы, происходящие на молекулярном или атомном уровнях, а измеряются макроскопическими приборами, неучтенные факторы, «шум» приводят к тому, что в результате повторных измерений в большинстве реальных экспериментов получаются отличающиеся друг от друга значения экспериментальных величин), а экспериментальные данные представляют собой выборку, поэтому исследователь получает не истинные значения, а **оценки** коэффициентов $\beta_0, \beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ii}$. Тогда уравнение регрессии записывается так:

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

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

С точки зрения исследования механизма процесса, его физико-химических свойств полиномиальная модель не несет необходимой информации. Зная лишь численные значения коэффициентов, нельзя восстановить искомую функцию ни, тем более, дифференциальные уравнения, описывающие процесс.

Эти модели, как правило, лишены физического смысла и справедливы только

в том диапазоне изменения параметров реального процесса, где был поставлен эксперимент. За пределами этого диапазона экстраполяция поведения процессов с использованием эмпирических моделей не желательна.

Преимуществом статистических моделей является возможность их построения для целей оптимизации и управления процессом сложных и малоизученных действующих объектов, а также для корректировки и уточнения гипотетических представлений об изучаемом процессе.

Недостатки:

1) построение статистических моделей осуществимо лишь при наличии реального объекта, который допускает выполнение определенного объема экспериментальных исследований;

2) узость их применения, которая объясняется: во-первых, ограниченным действием модели в рабочем режиме процесса (экстраполяция за пределы рабочего режима процесса недопустима); во-вторых, невозможностью переноса действия модели даже на однотипный объект.

Пример. Режим отжига стекла в туннельной печи, который определяется видом кривой изменения температуры вдоль туннеля печи можно аппроксимировать линейным регрессионным уравнением вида

$$\Theta = a_0 - a_1 \cdot x,$$

где Θ – температура отжига по зонам печи; a_0 , a_x – свободный член уравнения и коэффициент уравнения регрессии; x – координаты расположения термодатчиков по зонам печи вдоль продольной оси.

Уравнение регрессии, описывающее зависимость остаточных напряжений в листовом стекле от режима отжига и возмущающих воздействий:

$$\sigma = n_0 + n_1 \cdot \delta + n_2 \cdot v - n_5 \cdot a_1,$$

где σ – остаточные напряжения в ленте стекла; δ – толщина ленты стекла; v – скорость выработки ленты стекла; a_1 – коэффициент наклона кривой отжига; n_0 , n_1 , n_2 , n_5 – коэффициенты уравнения регрессии.

$$Pa(t) = b_0 + b_1 \cdot \Theta_k(t) - b_2 \cdot \Theta_{ол12}(t) + b_3 \cdot \Theta_{ол20}(t) + b_4 \cdot \delta(t),$$

где b_0 – b_4 – коэффициенты уравнения регрессии; Θ_k – температура в канале для подачи стекломассы во флоат-ванну; $\Theta_{ол12}$ – температура олова в 12-ом пролете флоат-ванны; $\Theta_{ол20}$ – температура олова в 20-ом пролете флоат-ванны; t – время в сутках; δ – толщина стекла.

2.1 Понятие о случайных величинах. Проверка статистических гипотез.

Вероятность. Числовые характеристики случайной величины. Законы распределений случайной величины. Нормальный закон распределения. Генеральная совокупность и выборка. Нуль-гипотеза. Альтернативная гипотеза. Ошибки первого и второго рода. Уровень значимости. Критерии проверки статистических гипотез: Пирсона, Колмогорова, Стьюдента, Кохрена, Фишера.

Историческая справка. Теория вероятностей и математическая статистика возникли в середине XVII века в результате развития общества и товарно-денежных отношений. Свою роль в этом процессе сыграли и азартные игры, они послужили простыми моделями для выявления закономерностей в появлении случайных событий. Кроме того, развитие математической статистики было обусловлено необходимостью обрабатывать скопившиеся к тому времени данные в области управления государством: демографии, здравоохранении, торговле и других отраслях хозяйственной деятельности. Можно перечислить довольно длинный список имен великих ученых, внесших свой вклад в развитие математической статистики: П. Ферма (1601–1665) и Б.Паскаль (1623–1662),

Я. Бернулли (1654–1705) и П. Лаплас (1749–1827), К. Гаусс (1777–1855) и С. Пуассон (1781–1840), Т. Байес (1701–1761) и др. Первым, кто удачно объединил методы антропологии и социальной статистики с достижениями в области теории вероятностей и математической статистики, был бельгийский статистик Л. Кетле (1796—1874). Из его работ следовало, что задача статистики заключается не в одном лишь сборе и классификации данных, а в их анализе с целью открытия закономерностей. Л. Кетле одним из первых показал, что случайности, наблюдаемые в живой природе, вследствие их повторяемости обнаруживают определенную тенденцию, которую можно описать языком математики. Л. Кетле заложил и основы биометрии.

Создание же математического аппарата этой науки принадлежит английской школе статистиков XIX века, во главе которой стояли Ф. Гальтон и К. Пирсон. Разработанные Ф. Гальтоном (1822–1911) и К. Пирсоном (1857–1936) биометрические методы вошли в золотой фонд математической статистики. Пирсон ввел в биометрию такие понятия, как среднее квадратичное отклонение и вариация, ему принадлежит разработка метода моментов, критерия согласия, он ввел термин «нормальное распределение», который сейчас общепринят во многих странах. (Известно еще много вариантов названия этого распределения, например, лапласовское распределение, гауссовское распределение, распределение Гаусса—Лапласа, распределение Лапласа—Гаусса. В качестве аппроксимации к биномиальному распределению оно рассматривалось Муавром еще в 1733 г., однако Муавр не изучал его свойств.) К. Пирсон усовершенствовал предложенные Гальтоном методы корреляции и регрессии.

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 (таблица).

Таблица – 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 (рисунок).

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 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) $f(x) = \frac{dF(x)}{dx}$** .

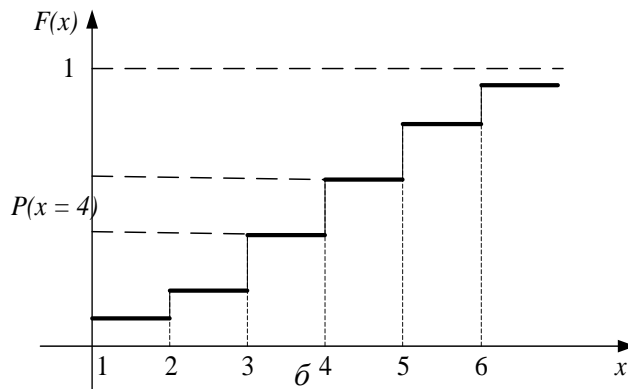
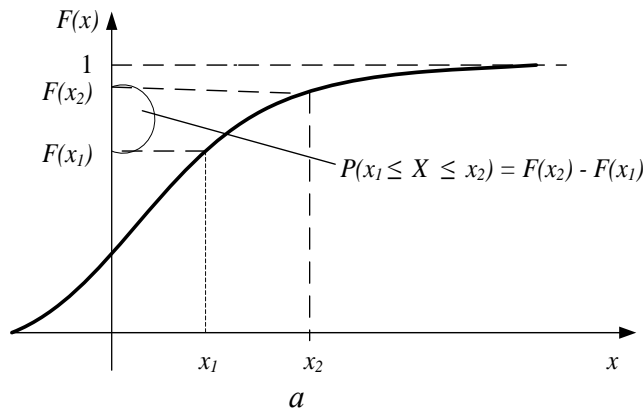


Рисунок – Функция распределения: *a* – НСВ; *б* – ДСВ

Пример графического отображения дифференциальной функции представлен на рисунке, 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**.

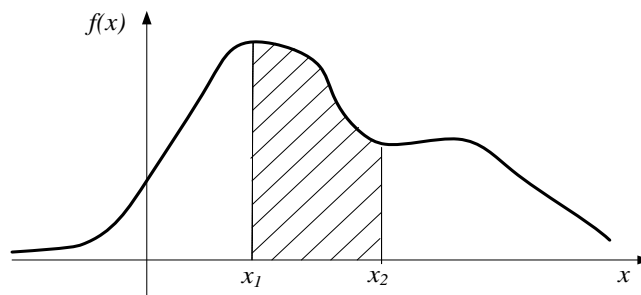


Рисунок – Дифференциальная функция распределения НСВ

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 называемой *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 рисунке. Согласно кривым нормального распределения, наимень-

шая вероятность появления НСВ x_1 и x_2 соответствует их значениям, которые максимально удалены от x_{cp} и наоборот.

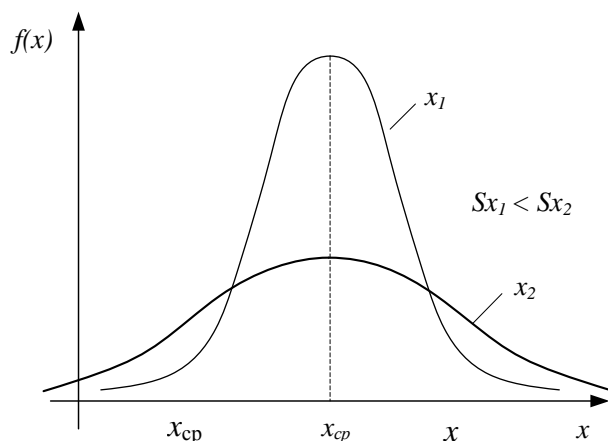


Рисунок – Кривая Гаусса при разных значениях стандартного отклонения

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. рисунок). Суммарная площадь под кривыми не меняется и остается равной единице.

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 Cr** (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 Cr 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 про-

верки.

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) находятся для каждого значения СВ в выборке. Теоретические частоты n'_i вычисляются с помощью формул для теоретической функции нормального распределения.

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

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 v :

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

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

После проверки на наличие грубой ошибки в выборке необходимо пересчи-

тать ее статистические оценки (среднее арифметическое, 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 $\nu_2 = N$ для знаменателя), то гипотеза об однородности (равенстве) дисперсий отвергается.

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

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

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.

2.2 Корреляционный и регрессионный анализ. Виды корреляционной связи. Парная корреляция. Коэффициент корреляции и проверка его значимости. Сила корреляционной связи. Поле корреляции. Корреляционное отношение. Модели ХТП в виде линейных полиномов. Метод наименьших квадратов. Система нормальных уравнений и ее решение в матричном виде. Проверка значимости коэффициентов регрессии и адекватности получаемых моделей.

Предпосылки к построению моделей. При составлении математических моделей объектов, входные переменные которых измеряются, но не поддаются управлению либо их изменение ограничивается технологическим режимом, используется **пассивный эксперимент**. Исследователь, занимая «пассивную» позицию, собирает некоторый объем экспериментальных значений факторов x_i и выходной переменной y_u , которые обычно записывает в таблицу исходных статистических данных.

Для получения статистических математических моделей в виде полиномов на основе статистических данных, собранных при пассивном эксперименте, в инженерной практике пользуются методами корреляционного и регрессионного анализа, которые позволяют решить следующие основные задачи:

- а) выяснить, насколько удачно выбрана форма уравнения регрессии;
- б) вычислить коэффициенты регрессии для выбранного полинома;
- в) определить наличие связи между выходной переменной y и факторами x_i оценить количественно силу этой связи;
- г) проверить точность вычисления коэффициентов регрессии b_0, b_1, \dots, b_n (оценить их значимость);
- д) установить адекватность уравнения регрессии реальному процессу.

Корреляция (от лат. *correlatio* — соотношение, взаимосвязь).

Историческая справка. Впервые в научный оборот термин «корреляция» ввёл французский палеонтолог Жорж Кювье в XVIII веке. Он разработал «закон корреляции» частей и органов живых существ, с помощью которого можно восстановить облик ископаемого животного, имея в

распоряжении лишь часть его останков. Кювье был самым выдающимся зоологом конца XVIII и начала XIX в. Особенно ценны заслуги его в области сравнительной анатомии: он не только исследовал строение множества животных, но и установил ряд весьма ценных теоретических взглядов; таков особенно выясненный им закон соотношения органов, в силу которого изменение в одном из органов сопровождается непременно рядом изменений в других. Кювье установил понятие о типах и в высокой степени улучшил классификацию животного царства.

В статистике слово «корреляция» первым стал использовать английский биолог и статистик Фрэнсис Гальтон в конце XIX века (Ф. Гальтон был двоюродным братом Чарльза Дарвина по их деду – Эразму Дарвину).

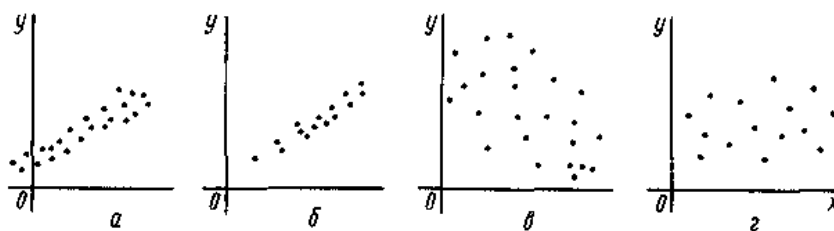
Он первым ввел в биологию и психологию математические методы. В 1892 он первым предложил принципы того, как можно вычислить **коэффициент корреляции**. Например, в антропометрии: длина ноги у пропорционально сложенного человека коррелирует с длиной рук.

Ещё в 1885 году Ф.Гальтон открыл в лондонском музее Саут-Кенингстон постоянную лабораторию, чтобы собирать статистические данные о мужчинах, женщинах и детях. Это ему нужно было для его занятий вопросами наследования физических и умственных особенностей и способностей. В лаборатории делались замеры размаха рук посетителей, роста, веса, силы рук, объём лёгких, оценивалась быстрота реакции, умение различать цвета, проверялись зрение и слух. После того, как Гальтон ознакомился со статьёй Гершеля и с его коллекцией отпечатков пальцев рук, распорядился, чтобы в лаборатории при музее стали снимать у посетителей ещё и отпечатки пальцев. Лаборатория в музее пользовалась успехом и интересом у посетителей, считалось хорошим тоном подвергнуться измерениям и исследованиям, которые проводил ассистент Гальтона, сержант Рэндл.

В 1888 году Гальтон сделал доклад на заседании Королевского общества, он назывался «Корреляции и их измерение, преимущественно по антропометрическим данным».

В основе **корреляционного анализа** лежит предпосылка о том, что переменные величины y (выходной параметр) и x_i (факторы) являются случайными величинами и между ними может существовать связь особого рода, так называемая **корреляционная связь**, при которой с изменением одной величины изменяется распределение другой (с ростом одной из них растёт (или убывает) другая).

Наиболее простой случай вероятностной связи представляет корреляция двух факторов – парная корреляция.



- а) – положительная корреляция; б) – сильная положительная корреляция;
в) – слабая отрицательная корреляция; г) – некоррелированные случайные величины

Рисунок – Поле корреляции случайной величины

Наглядное представление о такой связи дает корреляционное поле. При его построении данные изображают точками, координаты которых соответствуют значениям двух случайных величин. Взаимосвязь величин тем больше, чем теснее расположены точки корреляционного поля около некоторой прямой или плавной кривой, отражающей график зависимости одной случайной величины от другой. Если все

точки попадут на эту линию, то теснота связи окажется наибольшей. На рисунке приведены корреляционные графики для двух величин x и y .

Количественно степень линейной взаимосвязи между двумя наблюдаемыми случайными величинами оценивают по величине **выборочного коэффициента корреляции** r_{xy} , который рассчитывается по формуле

$$r_{xy} = \frac{\sum_{u=1}^N (x_u - \bar{x}) \cdot (y_u - \bar{y})}{(N-1) \cdot s_x \cdot s_y}$$

где N – число экспериментов; \bar{x} , \bar{y} – средние значения фактора и выходного параметра; s_x , s_y – среднеквадратические отклонения x , y при этом

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \cdot \sum_{u=1}^N x_u$$

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \cdot \sum_{u=1}^N y_u$$

$$s_x = \sqrt{\frac{1}{N-1} \cdot \sum_{u=1}^N (x_u - \bar{x})^2}$$

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

Коэффициент корреляции r может принимать значения от -1 до $+1$. При $r = \pm 1$ одна из величин x или y является линейной функцией второй. При $r = 0$ корреляционная связь отсутствует. При $r = 0$ 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

При $r = 0$ корреляционная связь отсутствует. При $r \neq 0$ 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.

Если $r > 0$, то между случайными величинами прямая связь, т. е. с увеличением одной случайной величины увеличивается значение другой, например, высокая положительная корреляция между содержанием в рудах цинка и галлия указывает, что при увеличении содержания цинка в руде будет повышаться содержание галлия. При $r < 0$ – с увеличением одной случайной величины уменьшается значение другой.

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 необходимо определить его статистическую значимость, т. е. необходимо проверить надежность связи между x и y .

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

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

Проверяется **нуль-гипотеза H_0** , которая заключается в предположении, что между случайными величинами x и y корреляция отсутствует, тогда должно соблюдаться условие $t_{кр} > t$.

Если $t > t_{кр}$, тогда принимаем альтернативную гипотезу (выборочный коэффициент существенно отличен от нуля), т.е. наблюдаемые величины x и y взаимосвязаны с **доверительной вероятностью α** , принятой при определении $t_{кр}$. Число степе-

ней свободы/при определении $t_{кр}$ рассчитывают как $v=N-2$.

Коэффициент корреляции можно рассчитывать только в том случае, если есть основание предполагать линейную взаимосвязь между случайными величинами в пределах тех интервалов, в которых рассматривается их изменение.

Низкие значения коэффициента корреляции могут быть получены в случае, когда зависимость фактически функциональна, но она нелинейная, а, например, параболическая. В этом случае разброс точек относительно прямой будет велик.

Если мерой тесноты связи при линейной ее форме служит линейный коэффициент корреляции, то для криволинейной зависимости такой мерой служит **корреляционное отношение**.

Регрессия (лат. *Regressus* — обратное движение).

Регрессионный анализ является одним из наиболее распространенных методов обработки экспериментальных данных при изучении зависимостей в физике, биологии, экономике, технике и других областях.

Термин «регрессия» был введен Ф. Гальтоном в 1886 г. Гальтон обнаружил, что в среднем сыновья высоких отцов имеют не такой большой рост, а сыновья отцов с небольшим ростом выше своих отцов. Это было интерпретировано им как «регрессия к посредственности». Ошибки в рассуждениях Гальтона были разъяснены позднее, например, Браунли.

Регрессионный анализ предполагает связь случайной величины y и неслучайных переменных x_i . Применение метода регрессионного анализа правомерно при выполнении следующих условий:

- 1) результаты наблюдений y_1, y_2, \dots, y_N представляют собой независимые нормально распределенные случайные величины;
- 2) факторы $x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n$ измеряются с пренебрежимо малой ошибкой по сравнению с ошибкой в определении y и некоррелированы друг с другом;
- 3) оценки дисперсий $s_1^2, s_2^2, \dots, s_u^2, \dots, s_N^2$ значений выходного параметра y , полученных при одинаковых условиях (в параллельных опытах) должны быть однородными.

Статистические модели в виде линейных полиномов. В исследованиях объектов химической технологии во многих случаях связь между выходной переменной и факторами можно аппроксимировать линейной зависимостью. При исследовании процесса, априорных данных о котором недостаточно, исследователи начинают с самых простых моделей процесса, предполагая в дальнейшем введение соответствующих поправок.

Рассмотрим простейший вид уравнения:

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

т. е. линейное уравнение с двумя неизвестными коэффициентами b_0 и b_1 . Для определения модели следует найти значения коэффициентов b_0 и b_1 . При отсутствии помех достаточно двух опытов, чтобы решением уравнений

$$y_1 = b_0 + b_1 \cdot x_{11}$$

$$y_2 = b_0 + b_1 \cdot x_{12}$$

установить коэффициенты b_0 и b_1 . Если исследуемая система характеризуется линейной зависимостью и в ней не возникают помехи, то все остальные экспериментальные данные должны укладываться на прямую. Однако на практике всегда существует разброс результатов, обусловленный влиянием случайных факторов.

Поэтому для определения точных значений коэффициентов b_0 и b_1 наблюдают N опытов и получают переопределенную систему уравнений

$$\begin{aligned} y_1 &= b_0 + b_1 \cdot x_{11} \\ y_2 &= b_0 + b_1 \cdot x_{12}, \\ &\dots\dots\dots \\ y_N &= b_0 + b_1 \cdot x_{1N} \end{aligned}$$

В таком случае возникает задача усреднения экспериментальных данных, результатом решения которой являются значения коэффициентов уравнения. Самым распространенным, хотя и не единственным, способом определения значений коэффициентов является **метод наименьших квадратов**, который содержит в себе требование минимума суммы квадратов отклонений выходной переменной объекта (экспериментального значения выходной переменной) и модели (расчетного значения выходной переменной). Математически это требование можно записать так

$$F = \sum_{u=1}^N (y_u - y_{уданн})^2 = \min$$

или с учетом линейного полинома

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

Т.е. наилучшими будут те значения параметров b , при которых сумма квадратов отклонений расчетных величин y от экспериментальных окажется наименьшей.

Преимущества метода наименьших квадратов: 1) простота вычислительных операций; 2) точность результатов (при достаточном объеме экспериментальных данных).

Таким образом, процедура нахождения коэффициентов уравнения регрессии сводится к задаче определения минимума функции. Известно, что необходимым условием минимума дифференцируемой функции нескольких переменных является выполнение условия равенства нулю частных производных функции по искомым величинам (в данном случае по коэффициентам многочлена), то есть

$$\frac{\partial F}{\partial b_0} = 2 \cdot \sum_{u=1}^N (y_u - b_0 - b_1 \cdot x_{1u}) = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial b_1} = 2 \cdot \sum_{u=1}^N (y_u - b_0 - b_1 \cdot x_{1u}) \cdot x_{1u} = 0$$

Преобразуем полученные выражения, раскрывая скобки и перенося y_u в правую часть уравнения, перейдем к системе так называемых нормальных уравнений

$$N \cdot b_0 + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u} = \sum_{u=1}^N y_u$$

$$b_0 \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u} + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 = \sum_{u=1}^N y_u \cdot x_{1u}$$

решение которой дает расчетные формулы для вычисления коэффициентов b_0 и b_1 :

$$b_0 = \frac{\sum_{u=1}^N y_u \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 - \sum_{u=1}^N x_{1u} \cdot y_u \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}}{N \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 - (\sum_{u=1}^N x_{1u})^2}$$

$$b_1 = \frac{N \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u} \cdot y_u - \sum_{u=1}^N x_{1u} \cdot \sum_{u=1}^N y_u}{N \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 - (\sum_{u=1}^N x_{1u})^2}$$

Коэффициент b_0 проще найти по известному b_1 из первого уравнения системы:

$$b_0 = \bar{y} - b_1 \cdot \bar{x}$$

Таким образом, между коэффициентами b_0 и b_1 существует корреляционная связь.

Линейная форма связи для n переменных.

При расчете статистических зависимостей технологических объектов чаще всего возникает необходимость найти линейную форму связей n переменных

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

где x_0 – фиктивная переменная, равная 1, т. е. определить коэффициенты b_0 и b_1, \dots, b_n .

Эта задача не отличается от случая линейной связи между двумя переменными. Для нахождения коэффициентов используется метод наименьших квадратов. Система нормальных уравнений тогда имеет вид:

$$b_0 \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u}^2 + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot x_{1u} + \dots + b_n \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot x_{nu} = \sum_{u=1}^N y_u \cdot x_{0u}$$

$$b_0 \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot x_{1u} + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 + \dots + b_n \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u} \cdot x_{nu} = \sum_{u=1}^N y_u \cdot x_{1u}$$

.....

$$b_0 \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot x_{nu} + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{nu} \cdot x_{1u} + \dots + b_n \cdot \sum_{u=1}^N x_{nu}^2 = \sum_{u=1}^N y_u \cdot x_{nu}$$

Возрастающие вычислительные трудности заставляют прибегать к приемам, которые придают процессу вычисления коэффициентов ряд особенностей.

№ опыта	Переменные факторы						Выходной параметр
	x_1	x_2	...	x_l	...	x_n	
1	x_{11}	x_{21}	...	x_{l1}	...	x_{n1}	y_1
2	x_{12}	x_{22}	...	x_{l2}	...	x_{n2}	y_2
3	x_{13}	x_{23}	...	x_{l3}	...	x_{n3}	y_3
...
u	x_{1u}	x_{2u}	...	x_{lu}	...	x_{nu}	y_u
...
N	x_{1N}	x_{2N}	...	x_{lN}	...	x_{nN}	y_N
	\bar{x}_1	\bar{x}_2	...	\bar{x}_l	...	\bar{x}_n	\bar{y}
	S_{x_1}	S_{x_2}	..	S_{x_l}	...	S_{x_n}	S_N

При нахождении коэффициентов регрессии на ЭВМ можно использовать приемы матричной алгебры (x_{0N} – фиктивная переменная, равная 1).

Представим исходный статистический материал в матричной форме:

Матрица независимых переменных

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

Вектор наблюдений

$$Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_N \end{bmatrix}$$

Матрица транспонированная к X:

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

Матрица коэффициентов, которые необходимо определить B :

$$B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix}$$

В матричном виде система нормальных уравнений запишется следующим образом:

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

Действительно умножая $X^T \cdot X \cdot B$, получим матрицу столбец:

$$X^T \cdot X \cdot B = \begin{bmatrix} b_0 \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u}^2 + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot x_{1u} + \dots + b_n \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot x_{nu} \\ b_0 \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot x_{1u} + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 + \dots + b_n \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u} \cdot x_{nu} \\ \dots \\ b_0 \cdot \sum_{u=1}^N x_{0u} \cdot x_{nu} + b_1 \cdot \sum_{u=1}^N x_{nu} \cdot x_{1u} + \dots + b_n \cdot \sum_{u=1}^N x_{nu}^2 \end{bmatrix}$$

Умножив $X^T \cdot Y$ получим

$$X^T \cdot Y = \begin{bmatrix} \sum_{u=1}^N y_u \cdot x_{0u} \\ \sum_{u=1}^N y_u \cdot x_{1u} \\ \dots \\ \sum_{u=1}^N y_u \cdot x_{nu} \end{bmatrix}$$

Матрица столбец B определится следующим образом:

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

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

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

Проверка адекватности модели и значимости коэффициентов уравнения регрессии при линейной связи между переменными. Ориентировочно оценить адекватность линейного уравнения регрессии, т. е. соответствие полученной математической модели исследуемого объекта экспериментальным данным позволяет коэффициент множественной корреляции.

Получив уравнение регрессии, исследователь проверяет две гипотезы:

- гипотезу об адекватности уравнения;
- гипотезу о значимости коэффициентов уравнения (**коэффициентов регрессии**).

При проверке гипотезы об адекватности уравнения регрессии определяют, достаточно ли точно данное уравнение описывает объект. Проверка проводится при помощи статистических критериев, в частности, критерия Фишера. Считается, что уравнение регрессии адекватно описывает исследуемый процесс, если остаточная

дисперсия s_{ocm}^2 (дисперсия, характеризующая рассеяние опытных данных относительно уравнения регрессии) $y_{уд\ddot{a}n}$ выходной величины, рассчитанной по уравнению регрессии относительно экспериментальных данных y_u , не превосходит в статистическом смысле ошибки опыта s_o^2 .

Остаточная дисперсия вычисляется по формуле:

$$s_{ocm}^2 = \frac{1}{v} \cdot \sum_{u=1}^N (y_u - y_{уррас})^2$$

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

Чтобы определить дисперсию опыта s_o^2 (дисперсию воспроизводимости), необходимо иметь несколько значений выходной переменной, измеренных при одинаковых условиях (при тех же значениях факторов). С этой целью проводятся параллельные (дублирующие) опыты, и значения y_{uk} в m параллельных опытах записываются в отдельные графы таблицы исходных статистических данных. Затем вычисляются выборочные дисперсии $s_1^2, s_2^2, \dots, s_u^2, \dots, s_N^2$ 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 выходного параметра; $\bar{y} = \frac{1}{m} \cdot \sum_{k=1}^m y_{uk}$ – среднее значение выходной переменной по результатам параллельных опытов.

Если выборочные дисперсии по каждой группе параллельных опытов $s_1^2, s_2^2, \dots, s_u^2, \dots, s_N^2$ однородны (проверка проводится с использованием критерия Кохрена по формуле: $G = \frac{S_{max}^2}{\sum_{u=1}^N S_n^2}$ где S_{max}^2 – максимальная дисперсия, а $\sum_{u=1}^N S_n^2$ – сумма всех дис-

персий выборок, N – число выборок, n – номер выборки. 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 о равенстве (однородности) дисперсий, тогда ошибка опыта (дисперсия воспроизводимости) вычисляется так:

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

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

Если дисперсии не являются однородными следует увеличить количество параллельных опытов.

Линейное уравнение регрессии адекватно описывает исследуемый объект, если выполняется неравенство:

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

где $F_{кр}$ – критическое значение критерия Фишера для выбранного уровня зна-

чимости ($p=0,05$) и степеней свободы числителя $\nu_1=N-n-1$ и знаменателя $\nu_2=N(m-1)$.

При соблюдении условия считают, что полученное уравнение регрессии адекватно. Если указанное выше условие не соблюдается, тогда следует увеличить число учитываемых факторов или заменить линейное уравнение регрессии нелинейным.

Если *параллельные опыты осуществить не удастся*, то рассчитать дисперсию воспроизводимости не представляется возможным. Тогда производится оценка качества аппроксимации опытных точек принятым уравнением регрессии. Проводят сравнение остаточной дисперсии и дисперсии относительно среднего s_y^2 , которая вычисляется по формуле:

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

где s_y^2 – дисперсия выходной переменной относительно среднего; y_u – экспериментальные значения выходной переменной; \bar{y} – среднее значение выходной переменной в N опытах.

Критерий значимости (критерий Фишера) в этом случае будет иметь вид дисперсионного отношения:

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

где $F_{кр}$ – критическое значение критерия Фишера для выбранного уровня значимости ($p=0,05$) и степеней свободы $\nu_1=N-1$ и $\nu_2=N-n-1$.

Если указанное выше условие соблюдается, то уравнение регрессии имеет смысл. В этом случае критерий Фишера показывает, во сколько раз уменьшается рассеивание относительно полученного уравнения по сравнению с рассеиванием относительно среднего. Чем больше значение F превышает $F_{кр}$, тем эффективнее уравнение регрессии.

Проверка значимости коэффициентов уравнения регрессии. После вычисления оценок коэффициентов регрессии b_0, b_1, \dots, b_n проверяют их значимость (точность), т. е. случайно или значимо каждый из вычисленных по статистическим данным b_i отличается от нуля (проверка **нуль-гипотезы** о равенстве нулю генерального параметра $\beta_i=0$). Коэффициенты b – выборочные оценки и, стало быть, содержат случайные ошибки. Если влияние одного из факторов пренебрежимо мало, истинное значение соответствующего коэффициента регрессии равно нулю ($\beta=0$), но вследствие случайных ошибок оценка не равна истинному значению ($\beta \neq b; b \neq 0$). Такой коэффициент b называют **незначимым**. Гипотезу о значимости коэффициентов часто не удается проверить ввиду корреляции факторов, а значит и корреляции коэффициентов.

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

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

и сравнить их со значением t-критерия, которое находят по таблицам распределения Стьюдента для выбранного уровня значимости p (например, $p=0,05$) и числа свободы ν , то есть

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

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

В практических расчетах нередко возникают трудности в определении s_{b_i} , которое определяется по формуле:

$$s_{b_i} = \sqrt{\sum_{u=1}^N \left(\frac{\partial b_i}{\partial y_u}\right)^2 \cdot s_u^2}$$

где s_{b_i} – среднеквадратичное отклонение коэффициента уравнения регрессии.

При большом числе факторов пользоваться этой формулой затруднительно. 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:

$$s_{b_0} = \sqrt{\frac{s_o^2 \sum_{u=1}^N x_{1u}^2}{N \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 - \left(\sum_{u=1}^N x_{1u}\right)^2}} \quad s_{b_1} = \sqrt{\frac{s_o^2 \cdot N}{N \cdot \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 - \left(\sum_{u=1}^N x_{1u}\right)^2}}$$

где s_o^2 – дисперсия опыта (дисперсия воспроизводимости), характеризует воспроизводимость эксперимента.

Статистические модели в виде нелинейных полиномов. Достоинства и недостатки статистических моделей построенных на основе данных пассивного эксперимента.

При составлении статистических моделей объектов химической технологии нередко возникает необходимость использовать нелинейную форму связи – параболу второй, третьей или более высоких степеней, логарифмическую, гиперболическую, степенную или показательную функциональные зависимости. В таких случаях чаще всего используют так называемый метод классического регрессионного анализа для составления статистической модели в виде полинома второй (или более высокой) степени, т. е. уравнение вида:

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

Определение коэффициентов в уравнении, например, для полинома второй степени при n переменных, производят по методу наименьших квадратов. исследование уравнения проводится по статистическим критериям (в частности, адекватность модели устанавливается по критерию Фишера). За исключением нахождения выборочных коэффициентов корреляции, которые при нелинейной форме зависимости между исследуемыми переменными теряют смысл.

Преимущества пассивного эксперимента: относительная простота его организации и «невмешательство» в ход технологического процесса.

Преимущества пассивного эксперимента:

- информация поступает в процессе нормальной эксплуатации объекта, что значительно облегчает постановку эксперимента на промышленных объектах;
- относительная простота организации пассивного эксперимента.

Опыт, однако, показал, что регрессионный анализ, примененный при обработке

данных пассивного эксперимента, не всегда приводит к эффективным результатам.

Недостатки пассивного эксперимента:

– часто не соблюдается требование регрессионного анализа, состоящее в том, что факторы x_i должны измеряться с пренебрежимо малой ошибкой по сравнению с ошибкой в определении y (ошибка в их измерении часто превышает интервал изменения самих факторов) и быть некоррелированными между собой;

– невозможно получить точное описание исследуемого процесса. Интервалы варьирования технологических факторов настолько малы, что изменение выходной величины будет в большей мере обуславливаться действием неконтролируемых случайных возмущений, поскольку при сборе экспериментальных данных на действующем объекте во избежание появления брака возможно лишь незначительное «покачивание» входных факторов в технологическом процессе;

– часто не рассматриваются факторы, оказывающие значительное влияние на процесс, из-за невозможности регистрировать факторы и изменять их;

– ограниченность действия математической модели, составленной на основе пассивного эксперимента, областью рабочего режима процесса.

Данных пассивного эксперимента, собранных при значительных ограничениях, высоком уровне помех и нередко низком уровне оснащенности производства контролирующими приборами, явно недостаточно, чтобы построить математические модели, пригодные для управления и оптимизации технологических процессов.

2.3 Построение моделей на основе данных активного эксперимента. Матрица планирования и ее свойства. Интервал и уровень варьирования факторов. Полный и дробный факторный эксперименты. Генерирующее соотношение, определяющий контраст. Центральное композиционное рототабельное планирование. Интерпретация уравнений регрессии.

Перед регрессионным анализом как методом получения математических моделей стохастических процессов значительные перспективы появились после введения в процесс экспериментирования активного начала. Идеи планирования эксперимента, впервые предложенные английским математиком Фишером в 20-х годах и затем развитые Дж.Боксом, заставили по-новому подойти к процессу экспериментирования. Пассивная позиция исследователя сменилась активной постановкой оптимального плана по управлению процессом эксперимента. Результаты такого эксперимента обрабатывают по некоторому оптимальному алгоритму с целью составления математической модели процесса в виде линейного полинома (методы полного и дробного факторного эксперимента) или нелинейного полинома (метод рототабельного планирования эксперимента). Полученные таким образом математические модели, эффективно используются при оптимизации и управлении исследуемого процесса.

Преимущества: позволяет соблюсти теоретические предпосылки статистических методов, резко сократить количество экспериментов и получить математическую модель с минимально возможной ошибкой.

Недостаток: однако, планируемый эксперимент не всегда возможно проводить на действующих технологических объектах, поэтому обычно его широко использу-

ют при исследовании опытных и пилотных установок.

Историческая справка. Роналд Фишер внёс огромный вклад в развитие современной прикладной математической статистики. Уже в статье 1922 года Фишер разработал методологию построения вероятностной модели не только случайной выборки, но и генеральной совокупности, ввёл термины «статистические параметры» и правила их оценки. Фишер перечислил требования к статистическим оценкам: состоятельность, эффективность, достаточность. Фундаментальный в теории вероятностей термин «дисперсия» также был введен Фишером в 1916 году,

Наибольшее влияние среди работ Фишера имела монография учебного характера «Статистические методы для исследователей» (1925), рассчитанная на первое знакомство прикладного специалиста с математической статистикой. Книга написана ясным стилем, в ней много практических примеров, почти нет доказательств. Только в Великобритании эта монография выдержала 14 переизданий. Одним из недавних применений методики Фишера стало обнаружение бозона Хиггса, достоверность которого была подтверждена статистически.

Идеи Фишера развили Джордж Снедекор, Гарольд Хотеллинг, Фрэнк Йейтс, Харальд Крамер и другие.

В области биологии с именем Фишера связаны принцип Фишера и теория «фишеровского убегания». Но главным вкладом в биологию стала монография «Генетическая теория естественного отбора» (1930). Модель Фишера, дополненная в 1930-е годы трудами Сьюалла Райта и Джона Холдейна, легла в основу популяционной генетики и современной синтетической теории эволюции.

Полный факторный эксперимент (ПФЭ). Сущность факторного эксперимента состоит в одновременном варьировании всех факторов при его проведении по определенному плану.

На основе результатов исследований влияния факторов на выходную переменную в соответствии с планом эксперимента получают математическую модель в виде линейного полинома и исследуют его методами математической статистики (проверяют значимость коэффициентов и адекватность ММ).

В экспериментальных исследованиях зависимость выходной переменной y от входных x называют **функцией отклика**. Функции отклика соответствует в факторном пространстве n -мерная поверхность, которую обычно называют **поверхностью отклика**.

План эксперимента указывает расположение опытных точек в n -мерном пространстве независимых переменных (**факторном пространстве**), или иными словами, условия всех опытов, которые следует провести.

Наиболее распространен следующий порядок построения плана эксперимента:

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

Нулевой уровень (нулевая точка фактора, центр плана) – это некоторое начальное значение фактора. При наличии априорной информации об объекте исследований выбор нулевых точек факторов осуществляют таким образом, чтобы они «попадали» в область оптимальных значений выходной переменной. Если объект мало изучен, однако имеется некоторый опыт управления им, то в качестве нулевого уровня принимают те величины факторов, которые дают наилучшее значение выходной переменной.

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

Интервал варьирования выбирают на основании априорной информации и затем уточняют после получения математической модели. Удачный выбор интервала варьирования факторов гарантирует достоверность математической модели объекта и исключает необходимость проведения дополнительных исследований. Основное требование к интервалу варьирования состоит в том, чтобы он значимо (неслучайно) влиял на выходную переменную, т.е. он был не меньше удвоенной среднеквадратической ошибки измерения фактора.

Уровень варьирования фактора – такое значение фактора, которое фиксируется при проведении эксперимента. Наибольшее распространение получило планирование эксперимента на двух уровнях, когда в качестве уровней используются верхняя и нижняя границы интервала варьирования.

Обозначения верхних и нижних уровней факторов символами +1 и –1 соответствуют их кодированию по формуле:

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

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

Постановка опытов по таким планам носит название **двухуровневого полного факторного эксперимента типа 2^n** , где n – число факторов. Тогда для двух факторов число экспериментов равно $2^2=4$, для трех – $2^3=8$ и т. д.

План, содержащий запись всех комбинаций факторов или части их в кодированной форме называют **матрицей планирования**. В частности, в таблице представлена матрица планирования для двух факторов на двух уровнях.

Таблица – Матрица планирования вида 2^2 в кодированных значениях

№ опыта	x_0	x_1	x_2	Выходная переменная y_u
1	+1	+1	+1	y_1
2	+1	-1	+1	y_2
3	+1	+1	-1	y_3
4	+1	-1	-1	y_4

Во второй графе таблицы приведены значения фиктивной переменной x_0 (тождественно равной +1), которая необходима при вычислении свободного члена полинома. В первой строке таблицы представлены условия первого опыта, когда факторы x_1 и x_2 находятся на верхнем уровне, во второй строке – второй опыт при x_1 на нижнем и x_2 – на верхнем уровне и т. д.

Расположение опытных точек в приведенных координатах представленного плана 1-го порядка для двух факторов x_1 и x_2 показано на рисунке.

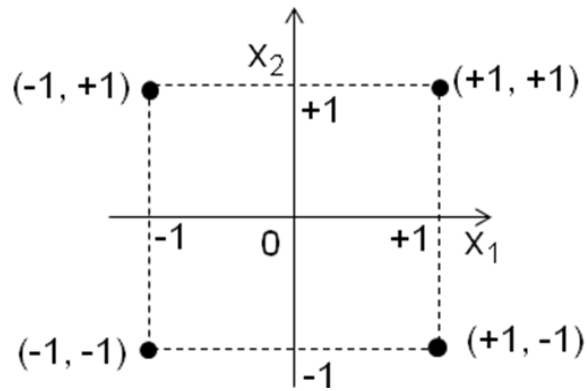


Рисунок – Расположение опытных точек в ПФЭ 2^2

Точки располагаются в вершинах квадрата, центр которого совпадает с центром плана, стороны параллельны осям и равны 2.

Пользуясь планом, представленным выше, после проведения эксперимента можно определить коэффициенты линейного уравнения регрессии

$$y = b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2$$

Матрица планирования для ПФЭ 2^3 будет выглядеть следующим образом.

Таблица – Матрица планирования для ПФЭ 2^3

x_0	x_1	x_2	x_3	Выходная переменная y_u
+1	-	-	-	Y_1
+1	+	-	-	Y_2
+1	-	+	-	Y_3
+1	+	+	-	Y_4
+1	-	-	+	Y_5
+1	+	-	+	Y_6
+1	-	+	+	Y_7
+1	+	+	+	Y_8

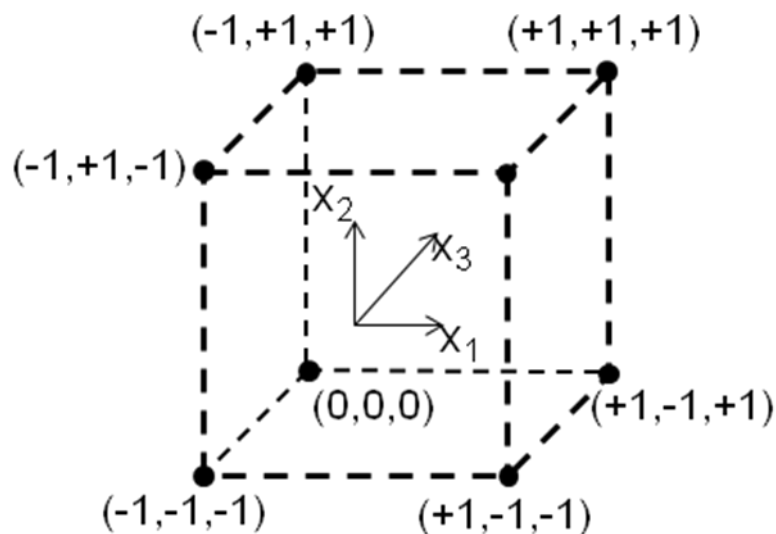


Рисунок – Расположение опытных точек в ПФЭ 2^3

Двухуровневый план весьма эффективен особенно при $n > 3$, когда для проверки адекватности модели располагают достаточным количеством степеней свободы ν , т. е. имеется превышение числа опытов N над числом определяемых коэффициентов модели $(n+1)$. Например, при плане 2^3 , т. е. $N=8$, $\nu=N-(n+1)=8-3-1=4$, а при плане 2^5 : $\nu=32-5-1=26$.

Построение плана ПФЭ 2^2 продемонстрируем на примере. Изучалось влияние процесса варки в горшковой печи на качество провара стеклянной заготовки y (выходная переменная, отклик). В качестве факторов были выбраны: максимальная температура x_1 и время выдержки при максимальной температуре x_2 . При этом известно, что изменение температуры от 1440 до 1480 °С и времени от 2 до 3,5 часов значимо вызывает изменение количества дефектов. В качестве нулевых уровней, или **центра плана**, в рассмотренном примере принимаем 1460 °С для фактора x_1 и 2,75 ч – для фактора x_2 . Задаем интервал варьирования для факторов: максимальная температура $x_1 - 20$ °С, время выдержки при максимальной температуре $x_2 - 0,75$ ч. Тогда нижним и верхним уровням значений факторов будут соответствовать: для максимальной температуры – 1440 и 1480 °С; времени выдержки – 2 и 3,5 ч.

Запишем матрицу планирования для ПФЭ 2^2 в кодированных и натуральных значениях.

Таблица – Матрица планирования вида 2^2 в кодированных и натуральных значениях

№ опыта	x_0	x_1	x_2	T	t	Выходная переменная y_u
1	+1	+1	+1	1480	3,5	y_1
2	+1	-1	+1	1440	3,5	y_2
3	+1	+1	-1	1480	2	y_3
4	+1	-1	-1	1440	2	y_4

После построения матрицы планирования приступают к проведению экспериментов. Порядок опытов в матрице планирования **не должен** определять реальную последовательность выполнения опытов, т.е. они должны быть рандомизованы.

Для оценки дисперсии воспроизводимости каждый опыт (каждая строка матрицы планирования) повторяется несколько раз. В этом случае учитывают два обстоятельства:

1) число повторений для каждой строки матрицы должно быть одинаковым (все опыты – по 2 раза, или по 5 раз и т. п.);

2) рандомизируют все опыты, включая параллельные: если параллельные опыты делать подряд, нарушится независимость ошибок.

Либо для оценки дисперсии воспроизводимости проводят специальную серию параллельных опытов в центре плана, т. е. в точке с координатами $(0, 0, 0, \dots, 0)$. В расчетные формулы для определения коэффициентов регрессии опыты этой серии не включаются. Если факторов достаточно много, такой прием позволяет экономить опыты по сравнению с дублированием опытов матрицы планирования. При этом не удастся проверить гипотезу об однородности оценок дисперсии воспроизводимости. Однако привлечение еще одной точки – центра плана – позволяет более надежно проверить гипотезу об адекватности.

Можно и комбинировать оба приема: дублировать точки плана и добавить

центральные точки. В любом варианте все опыты должны быть рандомизованы.

После проведения экспериментов выполняют расчет коэффициентов уравнения регрессии и статистический анализ полученного уравнения.

Благодаря свойствам **матрицы планирования ПФЭ: ортогональности и ротатабельности** процесс обработки экспериментальных данных существенно упрощается.

Ротатабельность инвариантность к вращению координат, предполагает минимум дисперсии расчетного значения выходной переменной в любой точке факторного пространства при равенстве дисперсий в точках, расположенных на одинаковом расстоянии от центра плана.

Ортогональность – равенство нулю всех скалярных произведений вектор-столбцов:

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

Условие, выраженное данным уравнением, называется **свойством ортогональности**

$$\sum_{u=1}^N x_{iu} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

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

В уравнениях n – число факторов, N – число опытов, u – номер опыта ($u=1, 2, \dots, N$).

Свойство ортогональности уменьшает трудности, связанные с расчетом коэффициентов уравнения регрессии по методу наименьших квадратов, так как матрица коэффициентов нормальных уравнений ($X^T \cdot X$) становится диагональной и ее диагональные элементы равны числу опытов в матрице планирования N , а сумма внедиагональных равна нулю.

Рассмотрим расчет коэффициентов по методу МНК на примере ПФЭ 2^3

$$B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = (X^T \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot Y$$

Матрица ($X^T \cdot X$) будет выглядеть следующим образом

$$X^T \cdot X = \begin{bmatrix} \sum_{u=1}^8 x_{0u}^2 & \sum_{u=1}^8 x_{0u} \cdot x_{1u} & \sum_{u=1}^8 x_{0u} \cdot x_{2u} & \sum_{u=1}^8 x_{0u} \cdot x_{3u} \\ \sum_{u=1}^8 x_{0u} \cdot x_{1u} & \sum_{u=1}^8 x_{1u}^2 & \sum_{u=1}^8 x_{1u} \cdot x_{2u} & \sum_{u=1}^8 x_{1u} \cdot x_{3u} \\ \sum_{u=1}^8 x_{0u} \cdot x_{2u} & \sum_{u=1}^8 x_{1u} \cdot x_{2u} & \sum_{u=1}^8 x_{2u}^2 & \sum_{u=1}^8 x_{2u} \cdot x_{3u} \\ \sum_{u=1}^8 x_{0u} \cdot x_{3u} & \sum_{u=1}^8 x_{1u} \cdot x_{3u} & \sum_{u=1}^8 x_{2u} \cdot x_{3u} & \sum_{u=1}^8 x_{3u}^2 \end{bmatrix}$$

Учитывая свойство ортогональности

$$X^T \cdot X = \begin{pmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}$$

Матрица обратная матрице моментов

$$(X^T \cdot X)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{8} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{pmatrix}$$

Умножив $X^T \cdot Y$ получим

$$X^T \cdot Y = \begin{bmatrix} \sum_{u=1}^8 y_u \cdot x_{0u} \\ \sum_{u=1}^8 y_u \cdot x_{1u} \\ \sum_{u=1}^8 y_u \cdot x_{2u} \\ \sum_{u=1}^8 y_u \cdot x_{3u} \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = (X^T \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot Y = \begin{pmatrix} \frac{1}{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{8} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{pmatrix} \times \begin{bmatrix} \sum_{u=1}^8 y_u \cdot x_{0u} \\ \sum_{u=1}^8 y_u \cdot x_{1u} \\ \sum_{u=1}^8 y_u \cdot x_{2u} \\ \sum_{u=1}^8 y_u \cdot x_{3u} \end{bmatrix}$$

Следовательно, коэффициент уравнения регрессии b_i определяется скалярным произведением столбца y на соответствующий столбец x_i , деленное на число опытов в матрице планирования N :

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

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

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

где b_{ij} – коэффициент регрессии, характеризующий взаимодействие факторов $x_{iu} \cdot x_{ju}$.

Полученные значения коэффициентов некоррелированы между собой и являются несмешанными оценками для соответствующих теоретических коэффициентов $b_i \rightarrow \beta_i$

По данным ПФЭ можно рассчитать не только коэффициенты линейного полинома, но и коэффициенты при произведениях факторов. В планировании эксперимента их называют взаимодействиями. По опытам ПФЭ 2^2 , кроме b_0 , b_1 и b_2 , можно рассчитать b_{12} – коэффициент при произведении $x_1 \cdot x_2$. Полный факторный эксперимент 2^3 позволяет рассчитать парные взаимодействия b_{12} , b_{13} и b_{23} и тройное взаимодействие b_{123} – коэффициент при $x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$. Учет взаимодействий позволяет оценить ряд особенностей поведения объекта, связанных с его нелинейностью. Необходимо учесть, однако, что ПФЭ не позволяет оценить коэффициенты при членах x^2 , x^3 и т. д. и построить полный многочлен 2-й и более высоких степеней.

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

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

Для расчета дисперсии воспроизводимости вычисляют выборочные дисперсии 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 – среднее значение выходной переменной по результатам параллельных опытов.

Проверку однородности дисперсий можно проводить по критерию Кохрена в случае равенства числа параллельных опытов для каждого условия опыта (для каждой строки матрицы планирования). Критерий Кохрена рассчитывают по формуле:

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

Если выполняется неравенство $G < G_{кр}$. (для значений степеней свободы $v_1=m-1$, $v_2=N$ и заданного уровня значимости, 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, то дисперсия воспроизводимости вычисляется так:

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

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

Статистический анализ найденного уравнения регрессии включает проверку значимости, как линейных эффектов, так и эффектов взаимодействия, если они имеются (модель можно получить в виде линейного или неполного квадратичного полиномов). Это объясняется тем, что какой-либо коэффициент регрессии может оказаться незначимым вследствие несовершенства отсеивания несущественных

факторов, из-за неудачного выбора интервала варьирования или по другим причинам.

В соответствии со свойствами ПФЭ, дисперсии всех коэффициентов регрессии должны быть равны. Поэтому в первую очередь проверяют значимость самых малых b_i . Для проверки такой гипотезы пользуются критерием Стьюдента.

В процедуру проверки значимости коэффициентов регрессии входит:

а) вычисление дисперсий коэффициентов регрессии $s_{b_i}^2$, которые при факторном планировании первого порядка для всех коэффициентов регрессии равны и минимальны, по формуле:

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

где N – число опытов в матрице планирования;

б) составление отношений

$$t_{b_i} = \frac{|b_i|}{s_{b_i}} \text{ здесь } s_{b_i} = \sqrt{s_{b_i}^2}$$

и сравнение их со значением t-критерия, которое находят по таблицам распределения Стьюдента для выбранного уровня значимости p (например, $p = 0,05$) и числа свободы $v = N \cdot (m - 1)$, то есть

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

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

Если какой-либо из коэффициентов окажется незначимым, он может быть выведен из состава уравнения без пересчета всех остальных.

Поскольку доверительные интервалы коэффициентов регрессии в случае линейной и неполной квадратичной модели равны между собой, то коэффициент регрессии можно считать значимым, если его абсолютное значение превышает величину абсолютного значения отклонения Δb_i , то есть

$$|b_i| > |\Delta b_i|$$

При этом отклонение любого коэффициента регрессии можно записать так:

$$\Delta b_i = \pm s_{b_i} \cdot t_T$$

В практических расчетах для проверки значимости коэффициентов b_i наиболее часто используют выражения указанные выше выражения.

Чтобы проверить гипотезу об адекватности математической модели вычисляют остаточную дисперсию по формуле:

$$s_{ост}^2 = \frac{1}{v} \cdot \sum_{u=1}^N (\overline{y_{u \text{ эксп}}} - y_{урач.})^2$$

где $v = (N \cdot m - n - 1)$ – число степеней свободы; N – количество опытов; n – количество факторов. Рассчитывают критерий Фишера:

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

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

При соблюдении условия считают, что полученное уравнение регрессии адекватно.

Дробный факторный эксперимент (ДФЭ). При проведении ПФЭ увеличение количества факторов приводит к резкому увеличению числа опытов типа 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 уменьшения количества опытов используют метод **дробного факторного эксперимента** (или дробных реплик), который является частью ($1/2, 1/4, 1/8$ и т. д.) ПФЭ. При этом ДФЭ позволяет получить достаточно точные оценки коэффициентов уравнения регрессии. Однако сокращение числа опытов приводит к появлению корреляции между некоторыми столбцами матрицы планирования, что не позволяет отдельно оценивать эффекты факторов и эффекты взаимодействия, и, следовательно, оценки получаются **смешанными** (оценки в которых учитываются линейные эффекты и эффекты взаимодействия).

Рассмотрим идею ДФЭ на примере. Для получения зависимости отклика от трех независимых переменных следующего вида

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

следует использовать ПФЭ типа 2^3 с 8-ю опытами.

Однако если известно, что эффекты парного и тройного взаимодействий сравнительно малы и описание объекта может быть представлено уравнением

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

тогда для решения задачи достаточно ограничиться полуреplikой, или планом 2^{3-1} с четырьмя опытами, при чем произведение $x_1 \cdot x_2$ плана ПФЭ 2^2 приравняем третьему фактору $x_3 = x_1 x_2$. Полученные условия опытов запишем в таблицу (матрица I).

Таблица I

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

В матрице I столбец x_1 совпадает со столбцом $x_2 x_3$ (столбцы $x_1 x_3, x_2 x_3, x_1 x_2 x_3$ введены для пояснения), столбец x_2 – со столбцом $x_1 x_3$, а столбец $x_1 x_2 x_3$ со столбцом x_0 . В таком случае коэффициенты регрессии b_0, b_1, b_2, b_3 , являются смешанными и каждый из них оценивает при этом соответствующую сумму, что принято записывать 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 генеральной

совокупности (математические ожидания соответствующих коэффициентов), а буквами латинского алфавита – их оценки. Можно реализовать и другую полуреплику, где $x_3 = -x_1 x_2$ (матрица II, таблица).

Таблица II

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

По матрице II смешанные оценки коэффициентов регрессии будут

$$b_1'' \rightarrow \beta_1 - \beta_{23}$$

$$b_2'' \rightarrow \beta_2 - \beta_{13}$$

$$b_3'' \rightarrow \beta_3 - \beta_{12}$$

$$b_0'' \rightarrow \beta_0 - \beta_{123}$$

Объединив матрицы I и II, заданные таблицами, получим план типа 2^3 , где линейные эффекты определяются отдельно. Действительно, взяв среднее из сумм и разностей для первой и второй систем смешанных оценок, выразим несмешанные оценки так

$$b_1 \rightarrow \frac{b_1' + b_1''}{2} \rightarrow \beta_1$$

$$b_2 \rightarrow \frac{b_2' + b_2''}{2} \rightarrow \beta_2 \text{ и т.д.}$$

Для построения дробных реплик используют специальные алгебраические выражения: **генерирующее соотношение** и **определяющий контраст**. Эти выражения также позволяют выявить смешанные эффекты и выполнить анализ полученного на основе данных ДФЭ уравнения регрессии.

Генерирующее – соотношение, показывающее, какие взаимодействия заменены новыми факторами (оно генерирует, или создает, дробную реплику). Так, рассмотренное выше планирование типа 2^{3-1} (полуреплика от 2^3) задавалось одним из следующих генерирующих соотношений: $x_3 = x_1 x_2$ или $x_3 = -x_1 x_2$.

С генерирующими соотношениями можно производить алгебраические операции: умножать обе части равенства на любые эффекты – линейные, двойные, тройные и другие взаимодействия. При этом фактор, возведенный в квадрат или другую четную степень, заменяется единицей ($x_i^{2\gamma} = 1, \gamma = 1, 2, 3, \dots$) Например, умножим генерирующие соотношения для плана 2^{3-1} на x_3 :

$$x_3^2 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3, x_3^2 = -x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$$

учитывая сказанное выше:

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

Данные произведения называют **определяющим контрастом**. **Определяющий контраст** дает возможность установить разрешающую способность дробной реплики, т. е. найти, какие из коэффициентов являются несмешанными оценками для соответствующих генеральных коэффициентов.

По принятому определяющему контрасту можно получить соотношения, задающие все смешанные оценки для данной дробной реплики. С этой целью следует умножить каждый фактор на определяющий контраст. В рассматриваемом примере для первой полуреплики плана 2^3 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

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}, \quad b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13}, \quad b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12},$$

а для второй полуреплики:

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

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

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

$$b_1 \rightarrow \beta_1 - \beta_{23}, \quad b_2 \rightarrow \beta_2 - \beta_{13}, \quad b_3 \rightarrow \beta_3 - \beta_{12},$$

При использовании ДФЭ необходимо иметь четкое представление о так называемой разрешающей способности дробной реплики. Тогда в зависимости от поставленной задачи подбирают дробная реплика, при помощи которой можно извлечь максимальную информацию из эксперимента. Например, в задаче с четырьмя факторами $n=4$, в качестве генерирующего соотношения можно выбрать:

$$x_4 = x_1 x_2 x_3$$

$$\text{либо } x_4 = x_1 x_2$$

$$\text{либо } x_4 = x_1 x_3$$

чаще всего в отличие от парных тройные взаимодействия равны нулю, тогда в качестве **генерирующего соотношения** целесообразно принять

$$x_4 = x_1 x_2 x_3$$

Определяющий контраст $1 = x_1 x_2 x_3 x_4$. Получим следующую систему совместных оценок для уравнения регрессии.

$$x_1 \cdot 1 = x_1 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4 = x_2 \cdot x_3 \cdot x_4;$$

$$x_2 \cdot 1 = x_2 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4 = x_1 \cdot x_3 \cdot x_4;$$

$$x_3 \cdot 1 = x_3 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_4;$$

$$x_4 \cdot 1 = x_4 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot x_4 = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3;$$

$$x_1 \cdot x_2 = x_3 \cdot x_4;$$

$$x_1 \cdot x_3 = x_2 \cdot x_4;$$

$$x_1 \cdot x_4 = x_2 \cdot x_3.$$

что соответствует оценкам

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{234},$$

$$b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{134},$$

$$b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{124},$$

$$b_4 \rightarrow \beta_4 + \beta_{123},$$

$$b_{12} \rightarrow \beta_{12} + \beta_{34},$$

$$b_{13} \rightarrow \beta_{13} + \beta_{24},$$

$$b_{14} \rightarrow \beta_{14} + \beta_{23},$$

Расширенная матрица планирования ДФЭ 2^{4-1} будет выглядеть следующим образом

x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	$x_1 \cdot x_2$	$x_1 \cdot x_3$	$x_1 \cdot x_4$	y_u
+	-	-	-	-	+	+	+	y_1
+	+	-	+	-	-	+	-	y_2
+	-	-	+	+	+	-	-	y_3
+	-	+	-	+	-	+	-	y_4
+	+	+	-	-	+	-	-	y_5
+	+	-	-	+	-	-	+	y_6
+	-	+	+	-	-	-	+	y_7
+	+	+	+	+	+	+	+	y_8

Расчет коэффициентов регрессии и исследование уравнения регрессии при использовании метода ДФЭ проводится, так же как и для ПФЭ.

Планы второго порядка. Метод центрального композиционного ротатабельного планирования эксперимента. Для описания области близкой к экстремуму функции отклика (область оптимальных значений выходной переменной) применяют полиномы вида

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

Результаты исследований, полученные при проведении ПФЭ или ДФЭ, не позволяют определить коэффициенты уравнения. В этом случае, применяют хорошо разработанные **планы второго порядка**, например **центральное композиционное ротатабельное планирование (ЦКРП)**.

Центральным план называют вследствие симметричности относительно центра плана (точки, в которой все кодированные факторы x_u равны нулю); **композиционным** – потому, что они komponуются путем добавления определенного числа опытов к плану 1-го порядка, например плану ПФЭ.

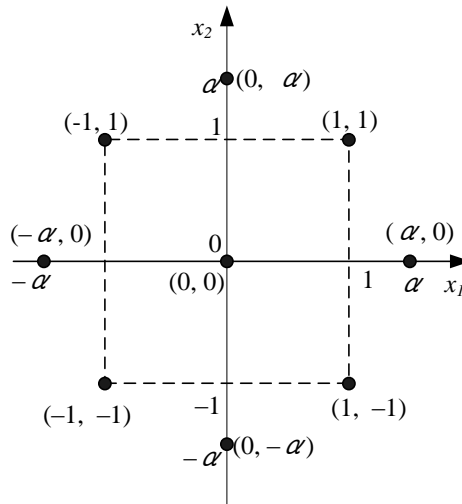
Ядро ЦКРП составляет ПФЭ типа 2^n при $n < 5$. Если $n > 5$, то можно пользоваться дробными репликами, обеспечивающими раздельное определение линейных эффектов и эффектов взаимодействия. При построении ЦКРП к точкам плана ПФЭ добавляются точки в центре плана (*центральные точки* – одна или несколько параллельных) и точки, расположенные на всех осях координат на одинаковых расстояниях $\pm \alpha$ от центра (*звездные точки*). Величину α называют **звездным плечом**. Для разных вариантов планов звездное плечо может быть разным.

Общее количество опытов при таком планировании определяется формулой:

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

где слагаемые – соответственно число опытов ПФЭ, **звездных точек** и **нулевых точек**.

Для двух факторов характер достройки показан на рисунке.



α – звездное плечо.

Рисунок – Расположение опытных точек в плане 2-го порядка

Матрица такого плана имеет вид:

X_0	X_1	X_2
+	-	-
+	+	-
+	-	+
+	+	+
+	$-\alpha$	0
+	$+\alpha$	0
+	0	$-\alpha$
+	0	$+\alpha$
+	0	0

Ядро плана – ПФЭ 2^2

Звездные точки

Центральная точка

Аналогично строятся планы и при $k > 2$.

Планы второго порядка в строгом смысле не ортогональны. Специальный подбор величины α и добавочное преобразование переменных позволяют получить ортогональность и избавиться от взаимной корреляции коэффициентов при квадратах факторов.

Однако ЦКРП построены таким образом, что соблюдается принцип **ротатабельности**, обеспечивающий равномерное получение информации на исследуемой сфере факторного пространства. Условия ротатабельности задаются соотношениями:

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = N \cdot \lambda_2, \quad i = 1, 2, \dots, n;$$

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^4 = 3 \cdot \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 \cdot x_{ju}^2 = 3 \cdot N \cdot \lambda_4, \quad i, j = 1, 2, \dots, n, \quad i \neq j$$

где N – число опытов; n – число факторов; λ_2 и λ_4 – некоторые произвольно выбираемые константы, связанные условием

$$\frac{\lambda_4}{\lambda_2^2} > \frac{n}{n+2}$$

Звездные точки строят на осях координат факторов и для ПФЭ величина звездного плеча α равна

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

а для ДФЭ

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

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

Для выбора звездного плеча α , числа звездных точек и числа нулевых точек можно пользоваться справочными данными.

Коэффициенты b_{ji} коррелированы между собой и со свободным членом b_0 . Поэтому, в отличие от ПФЭ и ДФЭ, для определения коэффициентов полиномов необходимо решать систему нормальных уравнений. В матричном виде решение системы нормальных уравнений будет выглядеть следующим образом:

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

Расчет параметров (коэффициентов уравнения) полиномов 2-й степени при ЦКРП также может проводиться по специально выведенным формулам, которые имеются в литературе.

Проверка значимости коэффициентов регрессии осуществляется также как и в ПФЭ, однако, с некоторыми видоизменениями.

Так при использовании ротатабельных планов отпадает необходимость в постановке дополнительных параллельных опытов для оценки дисперсии воспроизводимости. Дисперсию воспроизводимости определяют по опытам в центре плана:

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

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

Для проверки значимости коэффициентов регрессии:

1) рассчитывают дисперсию коэффициентов уравнения регрессии по следующим формулам:

$$s_{b_0}^2 = a_1 \cdot S_o^2; \quad s_{b_j}^2 = a_3 \cdot S_o^2; \quad s_{b_{ji}}^2 = a_4 \cdot S_o^2; \quad s_{b_{jj}}^2 = (a_5 + a_6) \cdot S_o^2;$$

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

2) составляют отношения

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

$$\text{здесь } s_{b_i} = \sqrt{s_{b_i}^2}$$

и сравнивают их со значением t -критерия, которое находят по таблицам распределения Стьюдента для выбранного уровня значимости p (например, $p = 0,05$) и числа степеней свободы $v = v_o$, то есть

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

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**.

Проверку адекватности уравнения регрессии проводят по критерию Фишера:

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_0^2}$$

где $S_{ад}^2$ – дисперсия адекватности, которая определяется из соотношения:

$$S_{\text{ад}}^2 = \frac{S_{\text{инд}}^2 \cdot v_{\text{инд}} - S_i^2 \cdot v_i}{v_{\text{ад}}}$$

число степеней свободы дисперсии адекватности

$$v_{ад} = v_{ост} - v_0$$

Остаточную дисперсию рассчитывают по формуле:

$$S_{ост}^2 = \frac{\sum_{u=1}^N (y_u^{экс} - y_u^{расч})^2}{N - l} \quad v_{ост} = N - l$$

где $y_u^{экс}$, $y_u^{расч}$ – экспериментальные и расчетные согласно модели значения выходной переменной (отклика); N – количество опытов; l – число значимых коэффициентов в уравнении регрессии.

Уравнение адекватно, если $F < F_{кр}$. $F_{кр}$ – табличное значение критерия Фишера для выбранного уровня значимости и числа степеней свободы числителя $v_{ад} = v_1$ и знаменателя $v_0 = v_2$.

Интерпретация уравнений регрессии.

Интерпретация включает анализ, прежде всего, влияния отдельных факторов и их взаимодействий, а затем – особенностей поведения функции отклика в различных частях изученной области факторного пространства.

Влияние факторов проще всего анализировать по уравнению 1-й степени. Здесь вначале оценивается знак коэффициента регрессии, показывающий, в какую сторону – увеличения или уменьшения – влияет на отклик данный фактор.

Планированный эксперимент позволяет также *сопоставить влияние отдельных факторов*. В обычных уравнениях регрессии значение одного коэффициента трудно сопоставлять со значением другого. Факторы (а соответственно, и коэффициенты регрессии) величины размерные, и нельзя сказать, что, например, больше: 1 м или 0,001 кг. В планированном эксперименте факторы приведены к безразмерному кодированному виду; в этом виде каждый из них варьируется в одинаковых пределах, от -1 до $+1$. Поэтому большее, чем b_q , по абсолютной величине значение b_p означает, что в *заданных пределах варьирования* изменение p -го фактора сильнее повлияет на отклик, чем изменение q -го фактора.

Двойные взаимодействия обычно можно интерпретировать следующим образом. Рассмотрим уравнение

$$y = b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_{12} \cdot x_1 \cdot x_2$$

Для анализа двойных взаимодействий удобно преобразовать уравнение регрессии.

Если задать определенное значение одного из факторов, например, фактора x_2 , то оно перейдет в уравнение с одним фактором x_1 . Так, при $x_2=+1$.

$$y = (b_0 + b_2) + (b_1 + b_{12}) \cdot x_1$$

Соответственно, при $x_2=0$

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

и при $x_2=-1$ получим

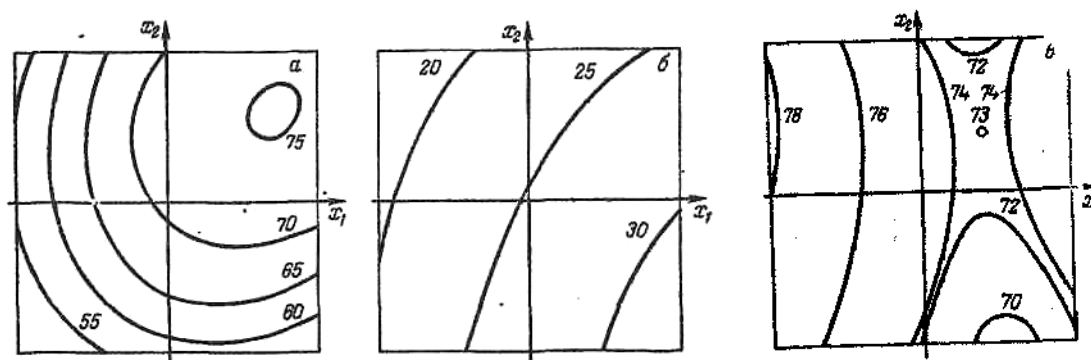
$$y = (b_0 - b_2) + (b_1 - b_{12}) \cdot x_1$$

Сила влияния фактора x_1 характеризуется, как сказано выше, коэффициентом при этом факторе. Если $b_{12}=0$, то в уравнениях коэффициенты при факторе x_1 будут одинаковы; сила его влияния не зависит от значения x_2 . Если знаки при b_1 и b_{12} одинаковы, то x_1 влияет тем сильнее, чем больше x_2 ; если знаки разные, то наоборот, влияние x_1 ослабевает с ростом x_2 . Таким же образом влияние фактора x_2 зависит от значения x_2 и от совпадения или расхождения знаков при b_2 и b_{12} .

В том случае, когда оба коэффициента b_1 и b_2 имеют одинаковый знак и знак при b_{12} – такой же, обычно говорят о *синергизме* влияния факторов x_1 и x_2 : каждый из них при их совместном увеличении влияет сильнее, чем если они увеличиваются порознь.

Если знаки коэффициентов b_1 и b_2 одинаковы, а b_{12} имеет противоположный знак, то каждый фактор в отдельности влияет сильнее, чем при одновременном воздействии второго – *антагонизм влияния факторов*.

Когда объект описывается уравнением 2-й степени, то чаще всего при его интерпретации интерес представляет положение экстремума, либо общий характер зависимости. Если число факторов невелико (2–4), интерпретации может помочь построение линий уровня отклика. Для функции второго порядка от двух факторов основные возможные случаи показаны на рисунке (пределы изменения x_1 и x_2 от -1 до $+1$).



а – экстремум в области эксперимента; б – экстремум далеко от области эксперимента; в – седло в области эксперимента; числа у линий уровня соответствуют значениям отклика.

Рисунок – Линии уровня многочленов 2-й степени

На рисунке (а) изображена ситуация, когда экстремум лежит в области эксперимента. Из уравнения можно найти точку оптимума, а график помогает оценить поведение отклика вблизи нее: например, насколько можно отклониться от опти-

мальных значений x_1 и x_2 , не опасаясь сильного уменьшения значения отклика.

На рисунке (б) экстремум (максимум) далек от области эксперимента, поверхность отклика повышается при движении в сторону увеличения x_1 и уменьшения x_2 . В эту сторону и нужно двигаться, если нам нужен максимум.

Рисунок (в) иллюстрирует случай, когда экстремума на поверхности нет, а есть седло – точка, двигаясь от которой в любом направлении вдоль одной прямой (на рисунке – вдоль оси x_1) будем наблюдать возрастание отклика, а двигаясь вдоль другой прямой (на рисунке – вдоль оси x_2), получим убывание отклика.

Если факторов больше двух, то графики, аналогичные приведенным на рисунке, можно построить, рассмотрев сечения области эксперимента плоскостями. Например, при четырех факторах, можно задать определенные значения x_1 и x_2 (скажем, $x_1=0$; $x_2=0$) и рассмотреть при этом условия зависимости y от x_3 и x_4 . Затем можно перейти к другим сечениям: либо, к другим значениям тех же факторов (сечение, параллельное предыдущему), либо задать значения другой пары факторов.

Методы анализа при большом числе факторов рассмотрены в литературе.

2.4 Исследование и оптимизация свойств смесей химических веществ.

Диаграммы «состав-свойство». Симплекс-решетчатые планы Шеффе. Линии равных значений свойств. Приведенные полиномы, расчет их коэффициентов. Выделение локальных областей диаграммы «состав–свойство». Системы координат симплекса в натуральных и псевдокомпонентах. Получение приведенных полиномов при исследовании локальных областей.

В химической технологии часто приходится решать задачи поиска оптимальных сырьевых композиций для синтеза материалов с заданными свойствами.

При изучении свойств смеси, зависящих только от соотношений компонентов **факторное пространство** (пространство координаты которого соответствуют рассматриваемым факторам) представляет собой правильный $(q-1)$ -мерный **симплекс**.

Для таких систем переменные не являются независимыми и выполняется соотношение

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

где x_i – концентрация компонента системы, $i=1,2\dots q$; q – количество компонентов.

Симплекс (лат. *simplex* – простой).

Симплекс в k -мерном пространстве – выпуклый многогранник, имеющий ровно $k+1$ вершин, каждая из которых определяется пересечением k гиперплоскостей. Для регулярного симплекса вершины равноудалены от центра фигуры.

Например, для двухмерного пространства ($k = 2$) в качестве симплекса будет выступать треугольник (рисунок, *a*), а для трехмерного ($k = 3$) – тетраэдр (рисунок, *б*).

Содержание компонентов на диаграммах «состав – свойство» выражается в массовых, молярных или объемных процентах. Способ отсчета содержания может быть различным. Например, в концентрационном треугольнике Гиббса (рисунок) вершины треугольника соответствуют чистым веществам, т. е. 100-му содержанию того компонента, обозначение которого стоит у данного угла треугольника; два дру-

гих угла треугольника соответствуют его нулевому содержанию.

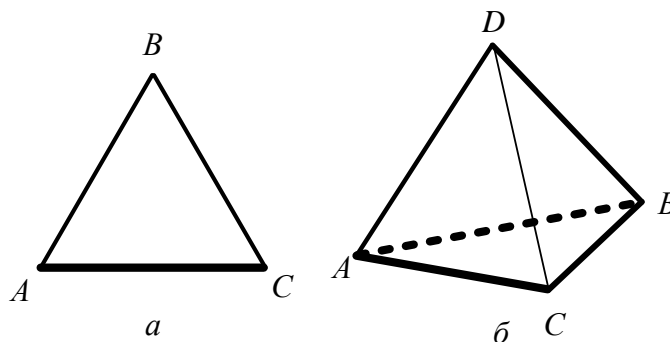


Рисунок – Графическое отображение симплекса на плоскости для систем, содержащих:
a – три компонента ($q = 3$); *б* – четыре компонента ($q = 4$)

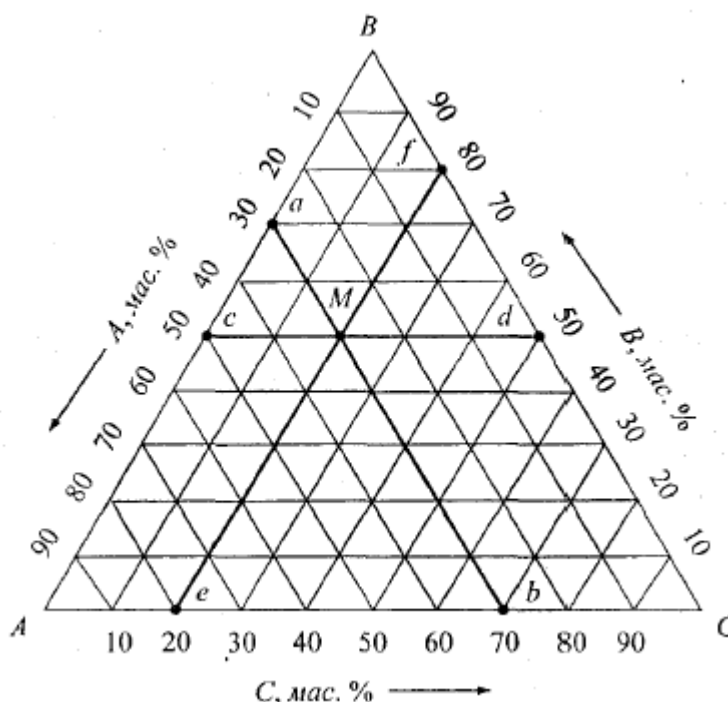


Рисунок – Концентрационный треугольник Гиббса

Отсчет величины содержания каждого компонента ведется от угла с его нулевым содержанием к вершине соответствующей 100-му содержанию данного компонента. Такой способ отсчета принят в треугольнике Гиббса.

Для определения содержания компонента А, например в точке М через эту точку необходимо провести прямую *ab* параллельную противоположной (по отношению к вершине со 100%-ым содержанием А) стороне треугольника ВС. Эта прямая отсекает на двух других сторонах АВ и АС треугольника равные отрезки *aВ* и *bС*, которые характеризуют содержание компонента А (в данном случае 30 %). Точно также для определения содержания компонентов В и С проводятся соответствующие прямые, параллельные сторонам АС (прямая *cd*) и АВ (прямая *ef*), содержание компонентов В и С определяется отрезками *сА* (или *dС*) и *еА* (или *fВ*) (в данном случае 50 % В и 20 % С).

При $q=4$ правильный симплекс – тетраэдр, каждая вершина которого соответствует чистым компонентам. Ребро представляет собой двухкомпонентную систему,

грань – трехкомпонентную. Точки внутри тетраэдра соответствуют четырехкомпонентным системам. Так, компонент x_1 , отсутствует на грани x_2, x_3, x_4 , а по сечениям тетраэдра, приближающимся к вершине x_1 , содержание компонента x_1 , увеличивается.

Графически такую систему представляют в виде сечений трехмерного симплекса плоскостями, перпендикулярными одной из его осей. Состав четырехкомпонентных смесей, лежащих в плоскости сечения, определяется уже двумерным симплексом, что позволяет изменение свойств системы представлять в виде контурных кривых. При этом в одном сечении варьируют только тремя компонентами. Переход от одного сечения к другому соответствует изменению четвертого компонента.

Свойство (Y) обычно представляют **проекциями линий равного значения (изолиниями)** на плоскость концентрационного треугольника (например, диаграмма состояния, представленная на рисунке).

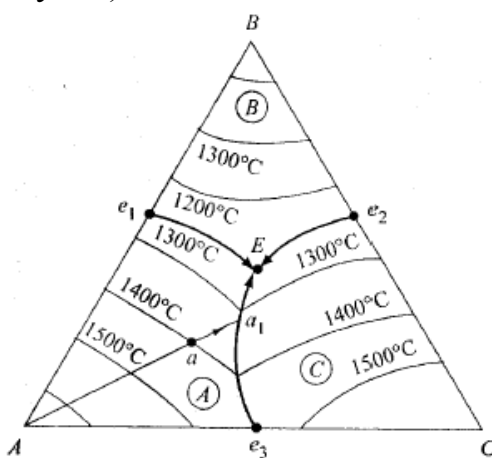


Рисунок – Диаграмма состояния трехкомпонентной системы с эвтектикой без химических соединений с проекцией изолиний температуры

Построение диаграмм «состав–свойство» предполагает значительный объем экспериментальных исследований. Например, если в качестве шага выбрать изменение содержания компонентов на 10 %, тогда при изучении трехкомпонентной системы требуется провести 66 опытов.

Сократить объем эксперимента при изучении многокомпонентных систем позволяют методы планирования эксперимента, при этом отпадает необходимость в пространственном представлении сложных поверхностей, так как значение свойства можно определять из уравнений, однако возможность графической интерпретации результатов сохраняется.

В таком случае исследователь решает следующие задачи:

- 1) выбор количества экспериментальных точек и плана эксперимента;
- 2) определение свойств экспериментальных смесей (синтезированных материалов);
- 3) расчет коэффициентов выбранной модели по полученным значениям свойства;
- 4) проверка адекватности модели;
- 5) построение диаграммы «состав–свойство», анализ полученных результатов.

Как правило, априори почти ничего нельзя сказать о виде математической модели, описывающей зависимость свойств смеси от состава. Поэтому при планировании эксперимента для решения задач на диаграммах «состав–свойство» предполагается, что *изучаемое свойство* является непрерывной функцией аргументов и *может быть с достаточной точностью представлено полиномом*.

Поверхности отклика в многокомпонентных системах, как правило, имеют сложный характер, например, при изучении температурных превращений вещества, так и во многих других случаях встречаются резкие скачки свойств в отдельных точках диаграммы (например, эвтектики), по линиям и плоскостям раздела. Для адекватного описания таких поверхностей необходимы полиномы высоких степеней, и, следовательно, большое число опытов. Обычный полином степени n от q переменных имеет C_{q+n}^n коэффициентов

$$1) y = b_0 + \sum_{1 \leq i \leq q} b_i \cdot x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} b_{ijk} \cdot x_i \cdot x_j \cdot x_k + \sum_{i=1}^q b_{ii} \cdot x_i^2 + \dots,$$

соотношение

$$2) \sum_{i=1}^q x_i = 1 \text{ позволяет исключить } q\text{-ый компонент и снизить число коэффициентов}$$

до C_{q+n-1}^n . Однако желательно ввести в модель все q компонентов.

Шеффе предложил описывать свойства смесей приведенными полиномами, получаемыми из выражения (1) с учетом нормированности суммы независимых переменных (2).

Получим приведенный полином второй степени для тройной системы.

Общий вид

$$3) y = b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_3 \cdot x_3 + b_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + b_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + b_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 + b_{11} \cdot x_1^2 + b_{22} \cdot x_2^2 + b_{33} \cdot x_3^2$$

$$4) x_1 + x_2 + x_3 = 1$$

тогда

$$5) b_0 \cdot x_1 + b_0 \cdot x_2 + b_0 \cdot x_3 = b_0$$

Умножим последовательно на x_1, x_2, x_3

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

$$6) x_2^2 = x_2 - x_1 \cdot x_2 - x_2 \cdot x_3$$

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

Подставим 5 и 6 в 3

$$y = (b_0 \cdot x_1 + b_0 \cdot x_2 + b_0 \cdot x_3) + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_3 \cdot x_3 + b_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + b_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + b_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 + b_{11} \cdot (x_1 - x_1 \cdot x_2 - x_1 \cdot x_3) + b_{22} \cdot (x_2 - x_1 \cdot x_2 - x_2 \cdot x_3) + b_{33} \cdot (x_3 - x_1 \cdot x_3 - x_2 \cdot x_3)$$

и приведем подобные члены

$$y = (b_0 + b_1 + b_{11}) \cdot x_1 + (b_0 + b_2 + b_{22}) \cdot x_2 + (b_0 + b_3 + b_{33}) \cdot x_3 + (b_{12} - b_{11} - b_{22}) \cdot x_1 \cdot x_2 + (b_{13} - b_{11} - b_{33}) \cdot x_1 \cdot x_3 + (b_{23} - b_{22} - b_{33}) \cdot x_2 \cdot x_3$$

Обозначим

$$\beta_i = b_0 + b_i + b_{ii} \quad \beta_{ij} = b_{ij} - b_{ii} - b_{jj}$$

Тогда получим приведенный полином второй степени для трех переменных

$$y = \beta_1 \cdot x_1 + \beta_2 \cdot x_2 + \beta_3 \cdot x_3 + \beta_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + \beta_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + \beta_{23} \cdot x_2 \cdot x_3$$

Таким образом, число коэффициентов уменьшилось с 10 до 6. Приведенный по-

лином второй степени от q переменных

$$y = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i \cdot x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} \cdot x_i \cdot x_j$$

содержит C_{q+1}^2 коэффициентов

Приведенный полином третьего порядка для 3-х компонентной смеси

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

Приведенный полином четвертого порядка для 3-х компонентной смеси

$$y = \beta_1 \cdot x_1 + \beta_2 \cdot x_2 + \beta_3 \cdot x_3 + \beta_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + \beta_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + \beta_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 + \gamma_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot (x_1 - x_2) + \\ + \gamma_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot (x_1 - x_3) + \gamma_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot (x_2 - x_3) + \delta_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot (x_1 - x_2)^2 + \delta_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot (x_1 - x_3)^2 + \\ + \delta_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot (x_2 - x_3)^2 + \beta_{1123} \cdot x_1^2 \cdot x_2 \cdot x_3 + \beta_{1223} \cdot x_1 \cdot x_2^2 \cdot x_3 + \beta_{1233} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3^2$$

Нелинейная часть этих полиномов называется синергизмом, если вызывает увеличение отклика по сравнению с откликом, предсказываемым линейной частью уравнения, а антагонизмом при уменьшении – отклика. Например, β_{ij} в полиноме второго порядка называют квадратичным коэффициентом бинарного синергизма компонентов i и j . Возможны и другие преобразования, однако наибольшее распространение получили приведенные полиномы. Таким образом, минимально возможное число экспериментальных точек для определения полинома степени n от q переменных составляет C_{q+n-1}^n (таблица).

Таблица

Число компонентов	Степень полинома			
	2	3 (неполная)	3	4
3	6	7	10	15
4	10	14	20	35
5	15	25	35	70
6	21	41	56	126
8	36	92	120	330
10	55	175	220	715

Следует отметить, что использование полиномов выше пятой степени для описания зависимости «состав-свойство», как правило, нецелесообразно, поскольку они могут указать на ложные эффекты, и требуют слишком большого числа опытов.

Это противоречие преодолевают разбиением всей области концентраций на локальные подобласти, хорошо описываемые полиномами невысоких степеней.

Симплекс-решетчатые планы Шеффе. Широкое применение диаграмм «состав–свойство» началось после публикации результатов работы Шеффе, которые широко применяются и в настоящее время. Шеффе предложил предельно простые решетчатые планы экспериментов с очень малым количеством опытов, которые располагаются в узлах легко создаваемой сетчатой структуры и позволяют получить для описания влияния соотношения компонентов на свойства материалов или смесей уравнения 2-го и более высоких порядков. Он также вывел несложные формулы для расчета коэффициентов аппроксимирующих полиномов специального вида.

Экспериментальные точки располагаются в узлах сетчатой структуры и представляют $\{q, n\}$ -решетку на симплексе, где q – число компонентов смеси; n – степень полинома. Некоторые $\{3, n\}$ -решетки представлены на рисунке, а $\{4, n\}$ – на рисунке.

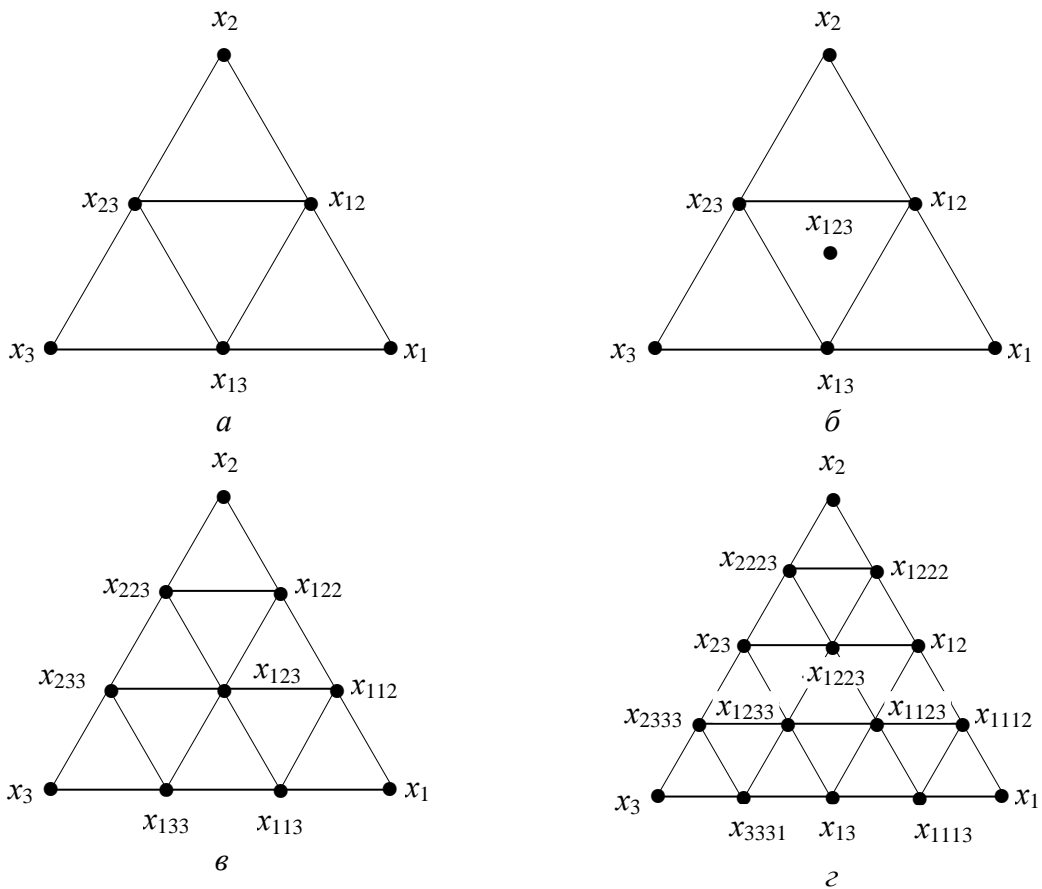


Рисунок – Планы Шеффе ($\{3, n\}$ -решетки на симплексе)

для получения полиномов:

a – второго порядка; $б$ – неполного третьего порядка;

$в$ – третьего порядка; $г$ – четвертого порядка

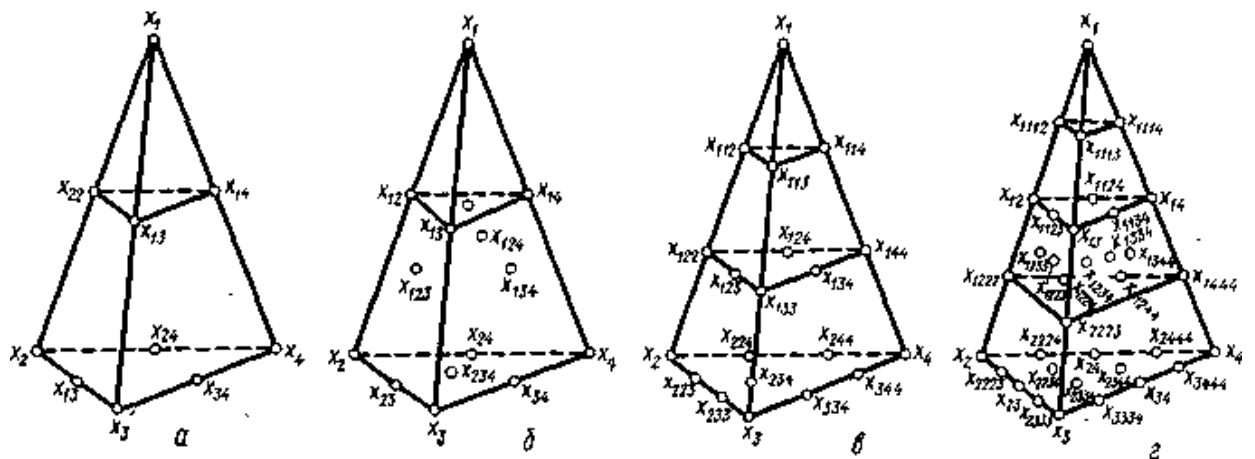


Рисунок – $\{4, n\}$ -решетки для полиномов: а) – второго порядка; б) неполного третьего порядка; в) третьего порядка; г) – четвертого порядка

Рассмотрим подробнее симплекс третьего порядка для трех факторов.

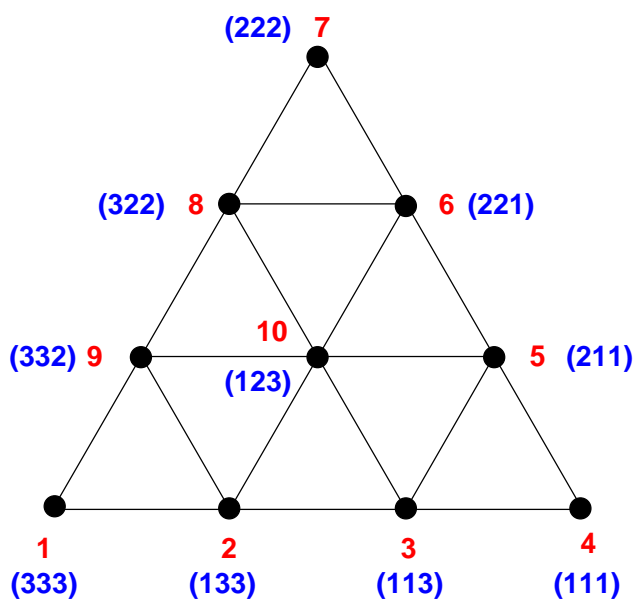


Рисунок – $\{q, n\}$ -решетка Шеффе, $\{q, n\} = \{3, 3\}$

В каждой узловой точке симплекса третьего порядка содержится по три части компонентов. В первой точке смесь состоит из трех частей третьего компонента; в шестой точке к одной части первого компонента добавлено две части второго; в восьмой – к двум частям второго добавлена одна часть третьего, а десятая точка содержит по одной части всех трех компонентов.

Чтобы ставить эксперимент на решетке трехкомпонентного симплекса четвертого порядка, следует иметь в виду, что смеси во всех узловых точках в этом случае состоят уже из четырех частей. Так, например, в четвертой точке содержится три части первого и одна часть третьего компонента и т. д.

Координаты точек симплексной решетки записывают в виде матрицы планирования. В таблице 1 представлена матрица планирования для построения полинома второй степени в трехкомпонентной системе, а в таблице 2 – для построения полинома четвертой степени в трехкомпонентной системе.

Таблица 1 – Матрица планирования для $\{3, 2\}$ -решетки

№ опыта	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	0,0	0,50	0,50	y_{23}

Таблица 2 – Матрица планирования для $\{3, 4\}$ -решетки

№ опыта	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}
7	0,75	0,25	0,00	y_{1112}
8	0,25	0,75	0,00	y_{1222}
9	0,75	0,00	0,25	y_{1113}
10	0,25	0,00	0,75	y_{1333}
11	0,00	0,75	0,25	y_{2223}
12	0,00	0,25	0,75	y_{2333}
13	0,50	0,25	0,25	y_{1123}
14	0,25	0,50	0,25	y_{1223}
15	0,25	0,25	0,50	y_{1233}

Индексы отклика (y) указывают на относительное содержание каждого компонента в смеси, для которой определено это свойство. Например, рассмотрим условное обозначение отклика (свойства) имеющее следующий вид – y_{1112} . Индекс «1112» при переменной « y » показывает, что значение свойства получено в экспериментальной точке, координаты которой соответствуют трем частям первого компонента ($x_1=0,75$) и одной части второго компонента ($x_2=0,25$).

Коэффициенты приведенных полиномов получают, используя свойство насыщенности плана. Для получения коэффициентов полинома последовательно подставляют в уравнение координаты всех точек матрицы планирования. Получим формулы для расчета коэффициентов полинома второй степени, используя значения переменных x_1, x_2, x_3 , представленные в матрице планирования для {3, 2}-решетки (таблица 1). Последовательно подставим в уравнение

$$y = \beta_1 \cdot x_1 + \beta_2 \cdot x_2 + \beta_3 \cdot x_3 + \beta_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + \beta_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + \beta_{23} \cdot x_2 \cdot x_3$$

координаты всех шести точек матрицы планирования. Тогда при подстановке координат первой точки ($x_1=1, x_2=0, x_3=0$) получим

$$\beta_1 = y_1$$

соответственно

$$\beta_2 = y_2 \text{ и } \beta_3 = y_3$$

При подстановке координат четвертой точки ($x_1=0,5, x_2=0,5, x_3=0$) получим

$$y_{12} = \beta_1 \cdot 0,5 + \beta_2 \cdot 0,5 + \beta_3 \cdot 0 + \beta_{12} \cdot 0,5 \cdot 0,5 + \beta_{13} \cdot 0,5 \cdot 0 + \beta_{23} \cdot 0,5 \cdot 0$$

так как $\beta_i = y_i$, то

$$y_{12} = y_1 \cdot 0,5 + y_2 \cdot 0,5 + \beta_{12} \cdot 0,25$$

отсюда

$$\beta_{12} = 4 \cdot y_{12} - 2 \cdot y_1 - 2 \cdot y_2$$

соответственно

$$\beta_{13} = 4 \cdot y_{13} - 2 \cdot y_1 - 2 \cdot y_3; \beta_{23} = 4 \cdot y_{23} - 2 \cdot y_2 - 2 \cdot y_3$$

Для полинома четвертой степени, выраженного уравнением:

$$y = \beta_1 \cdot x_1 + \beta_2 \cdot x_2 + \beta_3 \cdot x_3 + \beta_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + \beta_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + \beta_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 + \gamma_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot (x_1 - x_2) + \\ + \gamma_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot (x_1 - x_3) + \gamma_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot (x_2 - x_3) + \delta_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot (x_1 - x_2)^2 + \delta_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot (x_1 - x_3)^2 + \\ + \delta_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot (x_2 - x_3)^2 + \beta_{1123} \cdot x_1^2 \cdot x_2 \cdot x_3 + \beta_{1223} \cdot x_1 \cdot x_2^2 \cdot x_3 + \beta_{1233} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3^2$$

коэффициенты могут быть рассчитаны согласно следующим уравнениям:

$$\beta_1 = y_1; \beta_2 = y_2; \beta_3 = y_3;$$

$$\beta_{12} = 4 \cdot y_{12} - 2 \cdot y_1 - 2 \cdot y_2; \beta_{13} = 4 \cdot y_{13} - 2 \cdot y_1 - 2 \cdot y_3; \beta_{23} = 4 \cdot y_{23} - 2 \cdot y_2 - 2 \cdot y_3;$$

$$\gamma_{12} = \frac{8}{3} \cdot (-y_1 + 2 \cdot y_{1112} - 2 \cdot y_{1222} + y_2);$$

$$\gamma_{13} = \frac{8}{3} \cdot (-y_1 + 2 \cdot y_{1113} - 2 \cdot y_{1333} + y_3);$$

$$\gamma_{23} = \frac{8}{3} \cdot (-y_2 + 2 \cdot y_{2223} - 2 \cdot y_{2333} + y_3);$$

$$\delta_{12} = \frac{8}{3} \cdot (-y_1 + 4 \cdot y_{1112} - 6 \cdot y_{12} + 4 \cdot y_{1222} - y_2);$$

$$\delta_{13} = \frac{8}{3} \cdot (-y_1 + 4 \cdot y_{1113} - 6 \cdot y_{13} + 4 \cdot y_{1333} - y_3);$$

$$\delta_{23} = \frac{8}{3} \cdot (-y_2 + 4 \cdot y_{2223} - 6 \cdot y_{23} + 4 \cdot y_{2333} - y_3);$$

$$\beta_{1123} = 32 \cdot (3 \cdot y_{1123} - y_{1223} - y_{1233}) + \frac{8}{3} \cdot (6 \cdot y_1 - y_2 - y_3) - 16 \cdot (y_{12} + y_{13}) - \frac{16}{3} \cdot (5 \cdot y_{1112} + 5 \cdot y_{1113} - \\ 3 \cdot y_{1222} - 3 \cdot y_{1333} - y_{2223} - y_{2333});$$

$$\beta_{1223} = 32 \cdot (3 \cdot y_{1223} - y_{1123} - y_{1233}) + \frac{8}{3} \cdot (6 \cdot y_2 - y_1 - y_3) - 16 \cdot (y_{12} + y_{13}) - \frac{16}{3} \cdot (5 \cdot y_{1112} + 5 \cdot y_{2223} - \\ 3 \cdot y_{1112} - 3 \cdot y_{2333} - y_{1113} - y_{1333});$$

$$\beta_{1233} = 32 \cdot (3 \cdot y_{1233} - y_{1123} - y_{1223}) + \frac{8}{3} \cdot (6 \cdot y_3 - y_1 - y_2) - 16 \cdot (y_{13} + y_{23}) - \frac{16}{3} \cdot (5 \cdot y_{1333} + 5 \cdot y_{2333} - \\ 3 \cdot y_{1113} - 3 \cdot y_{2223} - y_{1112} - y_{1222}).$$

После определения коэффициентов уравнения регрессии необходимо провести статистический анализ полученных результатов, включающий:

1) проверку адекватности уравнения;

2) определение доверительного интервала значений отклика, предсказываемые по уравнению регрессии.

При постановке эксперимента по симплекс-решетчатым планам нет степеней свободы для проверки адекватности уравнения, так как эти планы насыщенные. Для проверки адекватности 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:

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

где $\Delta y = |y_{\text{эксн}} - y_{\text{расч}}|$; n – число параллельных опытов в каждой точке, ξ – зависит только от состава смеси и определяется согласно соответствующим графикам для полиномов заданного порядка (см. приложение); s_y – среднее квадратичное отклонение, рассчитанное исходя из дисперсии воспроизводимости.

Величина t , распределенная по закону Стьюдента, сравнивается с табличным значением $t_{\alpha/l, \nu}$, которое определяется исходя из числа степеней свободы ν (принимается равным числу степеней свободы дисперсии воспроизводимости) и уровню значимости равному α/l – где l число контрольных точек. Гипотеза об адекватности принимается, если $t_{\alpha/l, \nu} < t$.

Для построения доверительного интервала:

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

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

Планирование эксперимента при исследовании локальных участков диаграмм.

Выделение локальных областей. Предположим, что исследователю предстоит оптимизировать смесь для производства силикатного кирпича, состоящую из нескольких компонентов – извести, песка и воды. Если за основу взять симплекс третьего порядка (рисунок), очевидно, что проведение эксперимента в первой, четвертой и седьмой точках решетки практически исключается, так как смеси, содержащие только индивидуальные компоненты, для достижения цели совершенно непригодны.

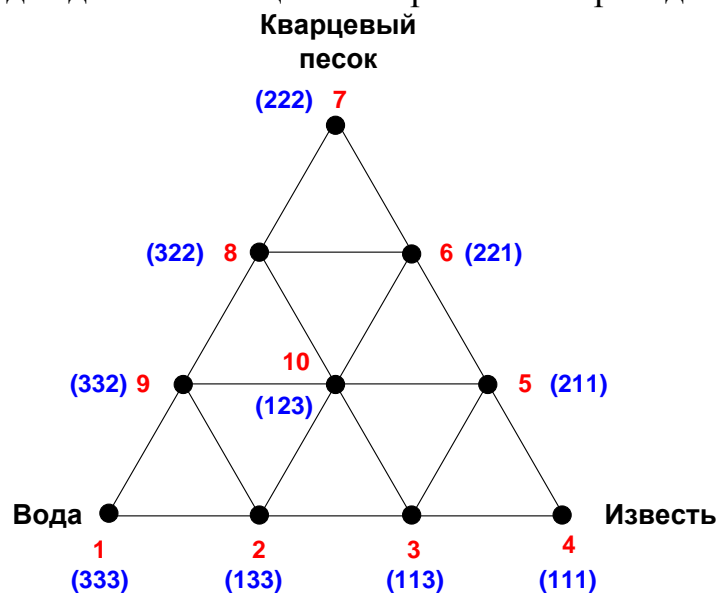


Рисунок – {3, 3}-решетка Шеффе

Таким образом, при изучении диаграмм «состав-свойство» q -компонентных смесей часто возникает необходимость исследовать зависимость свойства от состава не во всей области изменения концентрации компонентов, а в локальном участке диаграммы, т.е. внутри внешнего симплекса следует выделить внутренний (рисунок).

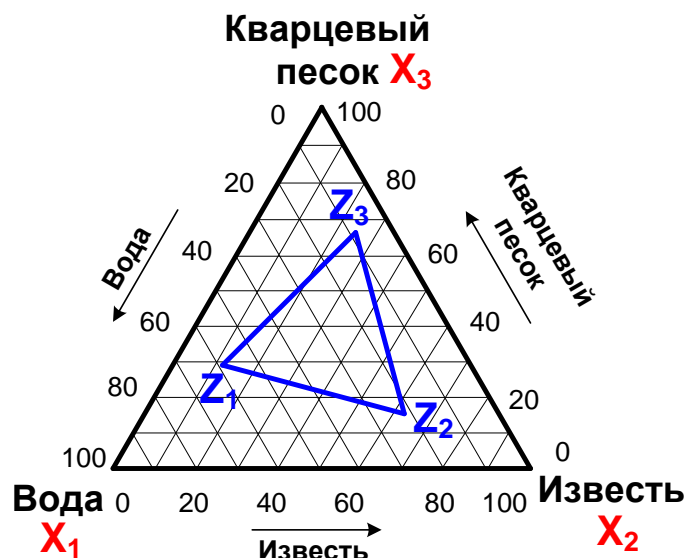


Рисунок 4 – Выделение локальной области в системе «вода–известь–кварцевый песок»

Изучаемая локальная область на диаграмме может представлять собой неправильный 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. Чтобы иметь возможность применять в этом случае планы, используемые для изучения полных диаграмм, проводят перенормировку и принимают составы в вершинах A_j , $j=1, 2, \dots, q$ за самостоятельные псевдокомпоненты так, чтобы для всей области локального симплекса выполнялось условие

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

Относительно новых переменных z_1, z_2, \dots, z_q , удовлетворяющих указанному условию могут быть построены все ранее описанные планы.

Две системы координат внутреннего и внешнего симплексов должны быть согласованы между собой. Для выделения внутренних локальных областей в факторном пространстве должны быть заданы координаты вершин многоугольников, причем точки могут располагаться как угодно, в любом месте.

Для проведения экспериментов необходимо перейти от псевдокомпонентов z_i к исходным компонентам x_i . Для любой u -ой 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 $z_j(A_j)$.

Реализовав план, рассчитывают коэффициенты уравнения регрессии в координатах псевдокомпонентов.

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

используя формулы для соответствующих планов, и проверяют его адекватность. Для практического использования уравнение регрессии записывают в исходной системе координат при помощи формул перевода координат из одной системы в другую:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -U_x \frac{\partial c}{\partial x} - U_y \frac{\partial c}{\partial y} - U_z \frac{\partial c}{\partial z} + D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right).$$

Однако решение этих уравнений можно найти только для частных случаев. Для многофазных же потоков не получены уравнения даже в общем виде. Поэтому при разработке моделей принимаются упрощающие допущения.

Такое положение вынуждает при составлении математических описаний прибегать к использованию более простого, приближенного представления о внутренней структуре потоков, т. е. возникает необходимость познавать процесс через модели структуры потоков в аппаратах (**физико-химические блочно-структурные модели ХТП** – приближенное описание, базирующиеся на модельном представлении гидродинамических, массо- и теплообменных процессов, а также химических превращений, называемых в этом случае «элементарными» процессами).

Структура движущейся технологической среды характеризуется степенью перемешивания частиц потока, которая определяет поле концентраций и градиент температуры. Это важное обстоятельство послужило предпосылкой для установления по признаку перемешивания некоторых типовых моделей движущихся потоков.

К типовым прежде всего относятся модель **идеального перемешивания** и **модель идеального вытеснения**. Указанные модели – соответствуют идеальным потокам, однако в ряде случаев их можно использовать для характеристики реальных потоков.

Кроме перечисленных, к типовым моделям гидродинамических потоков относятся **диффузионная, ячеечная** и **комбинированные** модели. Диффузионная и ячеечная модели характеризуют реальные потоки. Эти модели при предельных идеализированных условиях переходят в одну из теоретических моделей – идеального вытеснения или идеального перемешивания. Комбинированные модели также представляют реальные потоки в сложных объектах и строятся сочетанием более простых моделей, соответствующих отдельным участкам сложного потока.

Модели структуры потока (гидродинамические модели) математически записываются в виде дифференциальных уравнений, которые выражают связь между наиболее характерными параметрами процесса. Для химико-технологических объектов большей частью эту связь имеет смысл находить, исходя из анализа явлений перемещения и распределения вещества в данном потоке. Поэтому универсальным видом гидродинамической математической модели является уравнение, характеризующее изменение концентрации вещества в потоке, которое обуславливается только движением. Поскольку в рассматриваемом «элементарном» процессе перемещения веществ изменение концентрации вызывается одними гидродинамическими факторами, то при разработке гидродинамических моделей принимается условие, что скорость химической реакции $w_r = 0$.

Чем больше используется параметров при построении описания гидродинамики процесса, тем точнее модель будет отражать реальный процесс. Но уравнения при этом усложняются настолько, что в практических расчетах найти их решение весьма затруднительно или невозможно. Слишком простое описание, которое можно получить, если принять ряд упрощений и не учесть часть параметров, легко ре-

шается. Однако этот путь, как правило, не приводит к положительным результатам, так как решения слишком упрощенных математических описаний могут недопустимо отклоняться от соответствующих характеристик реального процесса. Поэтому при формулировке допущений, принимаемых при составлении математического описания гидродинамики процесса, необходимо тщательно проанализировать имеющиеся теоретические сведения и экспериментальные данные с тем, чтобы математическая модель в достаточной степени отражала реальный процесс.

Таким образом, при построении модели структуры потока следует учитывать, что модель должна:

- а) отражать физическую сущность реального потока и в то же время иметь достаточно простое математическое описание;
- б) давать возможность определить ее параметры (коэффициенты уравнений) экспериментальным или расчетным способом;
- в) быть удобной для использования при расчетах конкретных химико-технологических процессов.

Экспериментальное изучение распределения частиц потока во времени.

В аппаратах химической технологии в результате действия кинетических, гидродинамических факторов, а также факторов тепло- и массообмена, в общем случае имеет неравномерность распределения частиц среды во времени как по сечению потока, так и вдоль потока вследствие поперечного и продольного перемешивания. При этом степень неравномерности характеризует структуру среды или структуру реального потока.

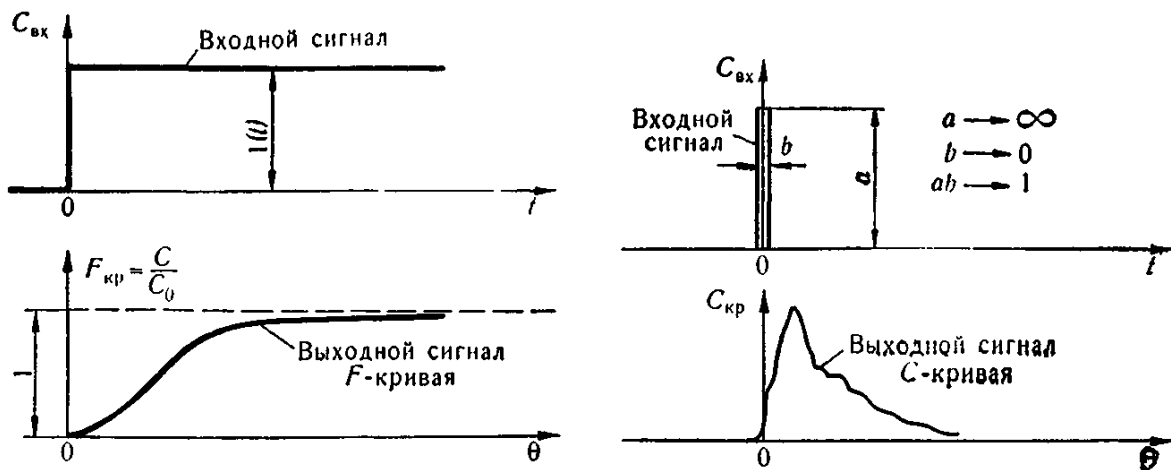
Степень неравномерности распределения частиц среды во времени можно оценить по распространению вещества или по концентрации вещества в потоке.

В результате прохождения возмущающего воздействия (индикатора) через аппарат по виду реакции на его выходе дают оценку структуры потока в аппарате или определяют модель потока. При этом реакция объекта определяется фиксированием изменений во времени содержания индикатора в потоке на выходе из аппарата.

Возмущающим воздействием может быть введение в аппарат вместе с поступающим потоком какого-либо *индикатора* (трассера), не реагирующего со средой (наибольшее распространение получили **импульсный** и **ступенчатый** виды возмущений). В качестве индикаторов (трассеров) используют, например, подкрашенные инертные газы или жидкости, растворы солей, флуоресцирующие примеси, радиоактивные изотопы при соблюдении обязательного условия, что они не претерпевают физико-химических превращений в потоке.

Реакции объектов на стандартные входные сигналы (ступенчатый $C_{вх}=1(0)$ или импульсный $C_{вх}=\delta(t)$) имеют специальные названия. При стандартном **ступенчатом** сигнале на входе функция отклика на выходе из аппарата представляет собой зависимость, которую называют *F-кривой* (обозначим ее $F_{кр}$), или **интегральной кривой**. Графическое изображение F-кривой удобно представлять в безразмерных координатах. Для этого концентрацию индикатора в потоке на выходе C относят к его начальной концентрации C_0 и откладывают по оси ординат значения $F_{кр} = C/C_0$ также используют понятие безразмерного времени $\Theta=t/\tau$, где t – натуральное время; $\tau=V/v$ – среднее время пребывания частиц потока в аппарате, где V/v – отношение объема зоны к объемному расходу жидкости.

Типичная форма отклика на стандартный ступенчатый сигнал изображена на рисунке, из которого следует, что показатель $F_{кр}$ в потоке на выходе, равный C/C_0 изменяется от 0 до 1. F-кривая является временной характеристикой объекта, ее вид определяется лишь свойствами или структурой потока (среды) в аппарате.



При **импульсной** подаче трассера на входе системы получается S-кривая, (импульсная характеристика) или **дифференциальная кривая** ($C_{кр}$). По координатным осям, в которых обычно строят S-кривую, аналогично предыдущему случаю, откладывают безразмерные единицы. При этих условиях площадь, ограниченная S-кривой, всегда равна единице. Вид S-кривой также определяется структурой потока в аппарате.

Математическая связь между интегральной и дифференциальной кривыми выражается соотношениями:

$$\frac{dF_{кр}(t)}{dt} = C_{кр}(t)$$

$$F_{кр}(t) = \int_0^{\infty} C_{кр}(t) dt$$

Метод установления модели потока на основе информации о его структуре состоит в том, что фиксируют реакцию объекта на выходе и затем полученные выходные кривые сравнивают с аналогичными кривыми известных типовых моделей. По результатам совпадений или отклонений дают оценку структуры исследуемого процесса и строят модель, отражающую гидродинамику данного потока.

Модель идеального перемешивания (МИС). Согласно этой модели принимается, что поступающий в аппарат поток мгновенно распределяется по всему объему вследствие полного перемешивания частиц потока (рисунок). При этом концентрация распределенного вещества во всех точках зоны идеального перемешивания и в потоке на выходе из него одинакова.

Уравнение модели идеального перемешивания в дифференциальном виде запишется следующим образом:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{v}{V} \cdot (c_{вх} - c)$$

Заданные *начальные условия* $t=0, c_{t=0} = c_0$

где $c_{вх}, c_{вых} = c$ – концентрация вещества в потоке соответственно на входе, выходе и в любой точке объема аппарата, моль/м³; t – время, с; v – объемная скорость потока, поступающего в зону идеального перемешивания и выходящего из него, м³/с; V – объем зоны идеального перемешивания, м³.

Модель МИС – модель с сосредоточенными параметрами.

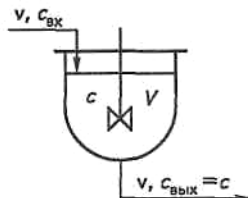


Рисунок – Схематическое изображение аппарата со структурой потока МИС

Отношение V/v характеризует среднее время пребывания элементов потока в зоне идеального перемешивания; его принято называть средним временем пребывания элементов потока в аппарате и обозначать τ , оно определяется экспериментально либо расчетным путем. Тогда с учетом параметра τ дифференциальное уравнение модели идеального перемешивания:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (c_{вх} - c)$$

Графическая интерпретация аналитических выражений для $F(t)$ и $\phi(t)$ показана на рисунках.

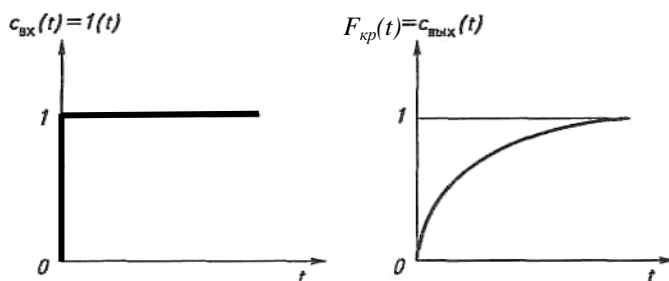


Рисунок – F-кривая МИС

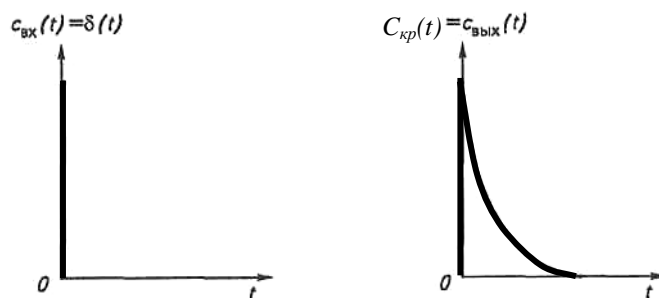


Рисунок – C-кривая МИС

Наилучшим образом МИС соответствует реальным потокам в проточных аппаратах с мешалкой, высота которых мало отличается от диаметра, мешалка создает высокую степень перемешивания, а объемная скорость потока v невелика.

Модель идеального вытеснения. В соответствии с моделью идеального вытеснения (МИВ) принимается поршневое движение потока без перемешивания вдоль потока при равномерном распределении концентрации вещества в направлении, перпендикулярном движению (рисунок).

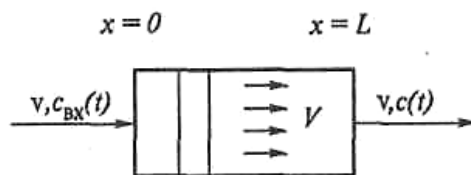


Рисунок – Схематическое изображение аппарата со структурой потока МИВ

При этом время пребывания всех элементов потока в зоне идеального вытеснения одинаково и равно отношению объема зоны вытеснения к объемному расходу жидкости $\tau = V/v$.

Дифференциальное уравнение МИВ в общем виде записывают как

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u \cdot \frac{\partial c}{\partial x}$$

Начальные и граничные условия:

$$t = 0, \quad c(t, x) = c(0, x); \quad t > 0, \quad x = 0, \quad c(t, 0) = c_{\text{вх}},$$

где $u = v/S$ – средняя линейная скорость потока, м/с; S – площадь сечения зоны идеального вытеснения, м^2 .

МИВ представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных, поскольку концентрация изменяется во времени и в пространстве $c(x, t)$. Эта модель является моделью с распределенными параметрами.

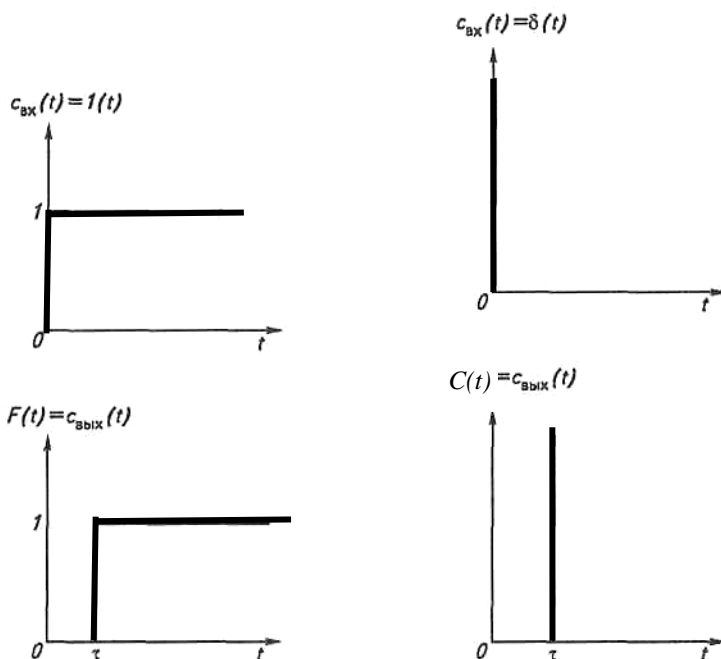


Рисунок – F -кривая МИВ; C -кривая МИВ

Из графиков F -кривой и C -кривой (рисунок) видно, что выходная кривая повторяет по форме кривую входного возмущения со сдвигом по времени на величину

т.

Из анализа графиков F -кривой и S -кривой МИВ вытекает практический вывод, которым пользуются при экспериментальном изучении неизвестной структуры потока в аппарате: если при ступенчатом или импульсном входных сигналах на выходе потока получается их повторение со сдвигом во времени, то это свидетельствует о том, что поток соответствует модели идеального вытеснения. К аналогичному выводу можно также прийти, оценив передаточную функцию модели $e^{-p\tau} = W(p)$, которая в точности отвечает передаточной функции звена чистого запаздывания.

Модель идеального вытеснения широко используется в химической технологии при описании аппаратов, работающих по принципу вытеснения (например, теплообменников). К МИВ близки трубчатые аппараты с большим отношением длины трубок к диаметру ($L/d > 100$) при турбулентном движении жидкости ($Re > 10\ 000$). Это объясняется тем, что при $L/d > 100$ продольное перемешивание незначительно и мало искажает поток вытеснения, а турбулентное движение при этом обеспечивает равномерное распределение концентрации по сечению аппарата.

Однопараметрическая диффузионная модель. Диффузионная модель получила широкое распространение при оценке структуры реальных потоков в аппаратах, в которых происходит продольное и продольно-радиальное перемешивание (например, поток в слоях насадки колонных аппаратов).

Природа возникновения продольного и радиального перемешивания весьма сложна. Перемешивание возникает в результате молекулярной и конвективной диффузии. **Молекулярная диффузия** – это перенос массы вещества молекулами (область микрокинетики). Основным законом молекулярной диффузии является первый закон Фика, согласно которому количество продиффундировавшего вещества пропорционально градиенту концентрации, площади, перпендикулярной направлению диффузионного потока, и времени

$$dM = -D \cdot \frac{\partial c}{\partial x} \cdot dF \cdot dt$$

где dM – количество продиффундировавшего вещества; D – коэффициент диффузии; $\frac{\partial c}{\partial x}$ – градиент концентрации в направлении диффузии; dF – элементарная площадь через которую происходит диффузия (перпендикулярная направлению диффузионного потока); dt – время диффузии. Знак «минус» в уравнении показывает, что при молекулярной диффузии в направлении перемещения вещества концентрация убывает.

Конвективная диффузия – это перенос вещества макрочастицами среды, который определяется турбулентностью потока, его гидродинамическим состоянием. Конвективная диффузия связана с представлениями макрокинетики. Основным закон конвективной диффузии (закон Шукарева) устанавливает, что количество вещества, перенесенное от поверхности раздела фаз в воспринимающую фазу, пропорционально разности концентраций у поверхности раздела фаз и в ядре потока воспринимающей фазы, поверхности фазового контакта и времени

$$dM = \beta \cdot (c_s - c_f) \cdot dF \cdot dt$$

где β – коэффициент массоотдачи; c_s – концентрация в воспринимающей фазе у по-

верхности раздела фаз; c_f – концентрация в ядре потока воспринимающей фазы

Различают **однопараметрическую** и **двухпараметрическую** диффузионные модели. Если при построении модели учитывают только продольное перемешивание, а в радиальном направлении концентрацию принимают постоянной, то такая модель называется **однопараметрической (ОДМ)**.

Если математическое описание учитывает кроме продольного и радиальное перемешивание, то при составлении модели необходимо ввести дополнительно второй параметр – коэффициент радиального перемешивания D_R . Тогда модель называется **двухпараметрической (ДДМ)**. Ввиду сложности решения уравнения ДДМ она используется сравнительно редко.

Дифференциальное уравнение однопараметрической диффузионной модели.

Структуру потока, соответствующую однопараметрической диффузионной модели, можно представить так: некоторая технологическая среда перемещается со средней линейной скоростью u в продольном канале, вдоль которого происходит перемешивание за счет прямого и обратного потоков при равномерном распределении концентрации вещества в направлении, перпендикулярном движению.

При разработке ОДМ принимают следующие допущения:

- изменение концентрации вещества является непрерывной функцией координаты x (расстояние по длине аппарата);
- концентрация вещества в каждом сечении потока постоянна;
- объемная скорость потока $v=U \cdot s$ и коэффициент продольного перемешивания D_L не изменяются по длине и сечению потока.

Уравнение ОДМ записывается в следующем виде:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_L \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - U \cdot \frac{\partial c}{\partial x}$$

Начальные и граничные условия:

$$t = 0, \quad c(0, x) = c; \quad t > 0, \quad x = 0, \quad c(t, 0) = c_{\text{вх}},$$

где D_L – коэффициент продольного перемешивания, м/с; U – линейная скорость потока, м/с.

ОДМ характеризуется распределенными параметрами. При отсутствии продольного перемешивания ($D_L=0$) уравнение превращается в уравнение МИВ.

Коэффициент продольного перемешивания D_L находится опытным или расчетным путем и зависит от изменения геометрических характеристик аппаратов, свойств среды, режима перемешивания и других условий. При экспериментальном определении коэффициента продольного перемешивания D_L его обычно представляют в виде безразмерного комплекса – критерия Пекле.

$$Pe = \frac{U \cdot L}{D_L}$$

где L – определяющий линейный размер зоны (длина аппарата), м.

При $Pe \rightarrow 0$, $D_L \rightarrow \infty$ ОДМ переходит в МИС, при $Pe \rightarrow \infty$, $D_L \rightarrow 0$ ОДМ переходит в МИВ (рисунок).

В практике технологических расчетов ОДМ значительно лучше соответствует процессам в реальных аппаратах химической технологии, в которых перемещение проводится по принципу вытеснения. Недостатками являются сложность установле-

ния граничных условий и необходимость оценки коэффициента продольного перемешивания.

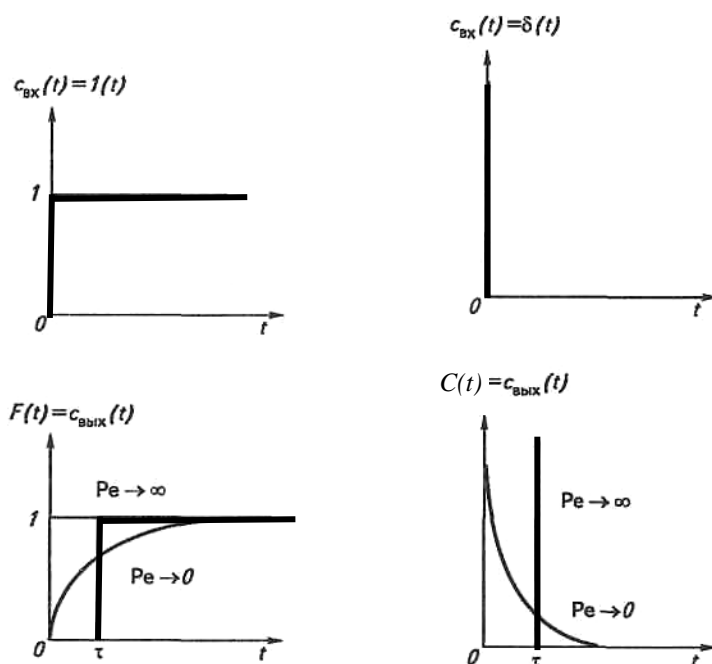


Рисунок – F-кривые ОДМ; C-кривые ОДМ

Характер графического изображения F и C кривых ОДМ представлен на рисунке.

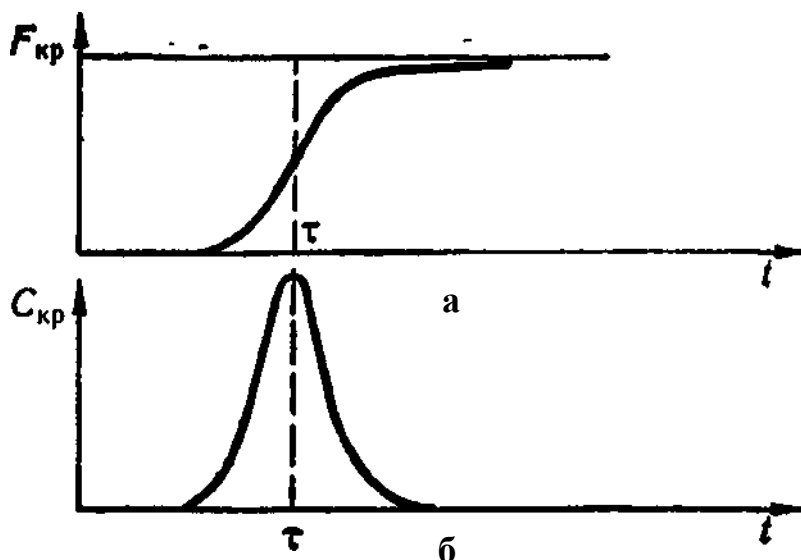


Рисунок – Характерный вид графического изображения ОДМ: а) F-кривая; б) C-кривая

ОДМ дает возможность достаточно хорошо воспроизвести свойства реального потока при исследовании многих аппаратов, в частности: пленочных, распылительных, барботажных, пульсационных, насадочных колонн, роторно-дисковых экстракторов, а также трубчатых аппаратов.

Ячеечная модель. Типовые модели идеального смешения, идеального вытеснения, ОДМ с определенной степенью точности могут применяться для воспроизведения структуры и гидродинамических свойств потоков в различных аппаратах химической технологии. Однако идеальные модели в ряде случаев неадекватны реальному процессу, а диффузионная модель отличается сложностью. По этой причине структуру реальных потоков в трубчатых и колонных аппаратах, а также для каскадов последовательно расположенных реакторов удобнее представить в виде так называемой **ячеечной модели** (рисунок).

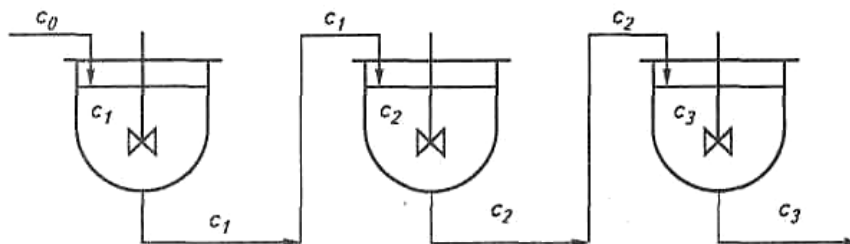


Рисунок – Принципиальная схема ячейечной модели

Физическая сущность ячейечной модели заключается в том, что движущийся материальный поток рассматривается состоящим из ряда последовательно соединенных ячеек. При этом принимается, что в каждой из таких ячеек поток имеет структуру полного перемешивания, а между ячейками перемешивание отсутствует. Количество предполагаемых ячеек идеального перемешивания n является параметром, характеризующим ячейечную модель реального потока (n – число ячеек). Если $n=1$, ячейечная модель переходит в МИС, а если $n \rightarrow \infty$, то в МИВ. Чем больше принять ячеек, тем каждая из них точнее воспроизводит режим идеального перемешивания, а весь аппарат при $n \rightarrow \infty$ соответствует модели идеального вытеснения.

Математическое описание ячейечной модели. При выводе уравнений ячейечной модели приняты следующие допущения:

- в каждой ячейке поток имеет структуру полного перемешивания, и концентрация c_i – не изменяется в пределах каждой ячейки ($i=1, 2, \dots, n$ – индекс ячейки);
- между ячейками перемешивание отсутствует;
- объемная скорость v не изменяется по длине и сечению потока.

Для удобства также принимается, что объемы каждой из n ячеек одинаковы и равны V_1 , а сумма объемов всех ячеек $V=n \cdot V_1$, среднее время пребывания частиц в каждой ячейке $\tau_1 = V_1/v = \tau/n$, а среднее время пребывания в системе $\tau = V/v$.

Поскольку в каждой ячейке поток находится в состоянии идеального перемешивания, то для любой i -й ячейки справедливо уравнение МИС

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{1}{\tau_i} \cdot (c_{i-1} - c_i)$$

Если учесть, что $\tau_i = \tau/n$, то уравнение примет вид:

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{n}{\tau} \cdot (c_{i-1} - c_i)$$

где $i=1, 2, \dots, n$

Система уравнений представляет собой математическое описание изменения концентрации в каждой из принятых n ячеек, т.е. является системой уравнений яче-

ечной модели, которую можно записать:

$$\frac{dc_1}{dt} = \frac{n}{\tau} \cdot (c_0 - c_1)$$

$$\frac{dc_2}{dt} = \frac{n}{\tau} \cdot (c_1 - c_2)$$

$$\frac{dc_3}{dt} = \frac{n}{\tau} \cdot (c_2 - c_3)$$

.....

$$\frac{dc_{n-1}}{dt} = \frac{n}{\tau} \cdot (c_{n-2} - c_{n-1})$$

$$\frac{dc_n}{dt} = \frac{n}{\tau} \cdot (c_{n-1} - c_n)$$

При использовании ячеечной модели для воспроизведения гидродинамических свойств реального потока важно удачно выбрать число ячеек n , так как значение этого параметра отражает степень перемешивания в аппарате и, следовательно, его роль в ячеечной модели аналогична критерию Пекле в диффузионной модели.

При определении числа ячеек в ряде случаев можно воспользоваться формальной аналогией между числом Пекле и величиной n . Между этими параметрами существует связь, которая выражается зависимостью

$$n = \frac{U \cdot L}{2 \cdot D_L} = \frac{Pe_L}{2}$$

где U – средняя линейная скорость потока; L – высота зоны потока (в насадочных колоннах – это высота насадки); D_L – коэффициент продольного перемешивания; Pe – критерий Пекле («диффузионный»).

По этой зависимости можно вычислить число ячеек n и вместо диффузионной модели применить в исследованиях ячеечную модель, которая значительно проще.

Ячеечная модель достаточно точно воспроизводит свойства потоков в последовательно соединенных аппаратах с мешалками, создающими интенсивное перемешивание (каскады реакторов) в абсорбционных и экстракционных колоннах при некоторых гидродинамических режимах, и удовлетворительно – в аппаратах с псевдооживленным слоем.

Комбинированные модели.

Типовые гидродинамические модели идеального перемешивания, идеального вытеснения, диффузионная, ячеечная воспроизводят свойства потоков, характеризующихся различной гидродинамикой, но в каждом случае гидродинамический режим по своему упорядочен и отличается однородностью структуры. Это сравнительно благоприятные случаи. При характеристике движения реальных потоков бывает, что ни одна из перечисленных гидродинамических моделей достаточно точно не воспроизводит свойства потока. Это связано с тем, что в разных частях аппарата устанавливается своя структура потока, гидродинамика потока сильно неупорядочена и наблюдаются явления такого рода, как застойные зоны, байпасирование, рециклы, проскальзывание и т. п.

В подобных случаях прибегают к построению комбинированных моделей на основе приведенных выше простейших моделей с добавлением застойных зон, а

также введением байпасирования и рециркуляции отдельных частей потоков. Математическое описание процесса при этом существенно усложняется, однако таким способом удастся достигнуть требуемой точности воспроизведения свойств объекта моделирования.

Принцип построения комбинированных моделей состоит в том, что исследуемый процесс рассматривается расчлененным на отдельные участки (зоны), соединенные последовательно, параллельно или по схеме с обратной связью, которые отличаются неодинаковой структурой потоков. При этом комбинированная модель представляет собой сочетание математических описаний всех зон, составляющих процесс.

Количество зон и предполагаемый характер потока в каждой зоне устанавливаются путем выяснения физической картины процесса, в частности, по опытным кривым изменения концентрации вещества в потоке на выходе при соответствующих входных возмущениях.

При построении комбинированных моделей необходимо учитывать следующие виды течения жидкости (газа), которые могут возникать в реальных аппаратах.

Застойные зоны в аппарате представляют собой относительно медленно движущиеся участки жидкости, которые, тем не менее, можно с достаточным основанием считать полностью неподвижными. Однако при нахождении времени пребывания веществ в аппарате застойные зоны могут не приниматься во внимание.

Принято считать, что если частицы потока на каком-то участке аппарата остаются дольше, чем удвоенное среднее время пребывания, то это свидетельствует о наличии там застойной зоны. Указанное условие используется для вычисления объема застойной зоны.

Байпасный поток – часть жидкости (газа), движущаяся параллельно аппарату или некоторой его зоне, в результате чего часть потока попадает на выход аппарата, не претерпевая никаких изменений (проскок части потока).

Циркуляционные потоки (рециклы или обратные потоки) – это всякого рода возвраты потока. Они возникают потому, что часть жидкости (газа), которая выводится за пределы аппарата или определенной его части, возвращается в него снова и затем смешивается со свежими порциями вещества на входе в аппарат или в некоторую его зону.

Струйный поток (проскальзывание) – местный поток, мгновенно переносящий вещество непосредственно из одной зоны аппарата в другую.

При построении комбинированной модели, включающей перечисленные компоненты, не учитывают те зоны, которые мало изменяют гидродинамическую картину. Влияние компонентов на структуру потока принято оценивать, исходя из объемов участков (зон), составляющих процесс. Поэтому одна из основных задач заключается в определении объемов зон объекта с различными типами течения жидкости (газа).

При окончательном решении вопроса, какую зону включать в математическое описание, а какую нет, следует иметь в виду, что с увеличением количества зон можно описать процесс любой сложности, однако математическое моделирование может усложниться настолько, что модель окажется неприемлемой.

3.2 Математическое моделирование тепломассообменных процессов.

Тепловые процессы в керамической промышленности в основном представлены процессами сушки и обжига. Процессы сушки имеют место при производстве как сырьевых материалов, так и самих керамических изделий. При сушке керамических материалов и изделий используются различные методы подвода тепла: конвективный – тепло передается от нагретого газа, кондуктивный – тепло передается теплопроводностью от нагретой поверхности, радиационный – тепло передается лучистой энергией. В керамической промышленности наибольшее распространение получили конвективная и комбинированная конвективно-радиационная сушка.

Основными технологическими требованиями при сушке сырья является его конечное влагосодержание, максимальная температура и гранулометрический состав, при сушке изделий – отсутствие трещин, коробления и деформации и конечное влагосодержание изделия.

Отсутствие трещин, коробления и деформации обеспечивается созданием такого режима сушки, при котором скорость сушки (текущая или средняя за некоторый период времени) не превышает некоторого критического значения.

Обжиг является заключительным переделом при изготовлении керамических изделий. В обжиговые печи материал поступает после сушки. Подвод тепла может осуществляться как от дымовых газов, образующихся в результате сгорания топлива, так и от электронагревателей. Обжиг как процесс формирования керамических изделий обуславливается прежде всего физико-химическими процессами, происходящими в них, а также внешними теплотехническими факторами: температурой, составом и скоростью газовой среды. Основной задачей при обжиге является выдерживание заданного закона изменения температуры материала: заданной кривой обжига. Кривая обжига состоит из трех интервалов: интервал нагрева, интервал поддержания постоянной температуры (обжига) и интервал охлаждения. Соответственно этому печи подразделяются на зоны подогрева, обжига и охлаждения. Длина зон определяется видом обжигаемых изделий и заданной кривой обжига.

В керамической промышленности, в частности при сушке кирпича, может иметь место сопряженная работа печей и сушилок.

Тепловые процессы в стекольной промышленности. Основным агрегатом стекольной промышленности является стекловаренная печь, которая служит для получения стекломассы из смеси сырьевых материалов (шихты) и стеклобоя. Стекла различных назначений и составов имеют разные свойства и требуют различных условий варки и выработки. Для этого используются разнообразные конструкции стекловаренных печей. Широкое применение в стекольной промышленности находят ваннные стекловаренные печи. Основной задачей при управлении работой ванной стекловаренной печи является поддержание требуемых значений температур в варочной и студочной частях, приспособлениях для механизированной выработки, регенераторах и рекуператорах, а также давления в рабочем пространстве, уровня стекломассы (загрузки шихты).

Для выработки стекол требуемого качества очень важны различные процессы их тепловой обработки: отжиг, закалка, выдержка при высоких температурах. Термином «отжиг» в технологии стекла характеризуют процесс уменьшения или удале-

ния внутренних остаточных напряжений в стекле при его твердении. При отжиге стекла одновременно с удалением внутренних напряжений происходят также и структурные изменения, вследствие которых наблюдается изменение физических свойств стекла (показателя преломления, плотности и др.), что особенно важно при отжиге оптических и некоторых других специальных стекол. Закалкой стекла называется процесс получения значительных постоянных внутренних напряжений в стекле путем его быстрого охлаждения от температур, лежащих выше температуры стеклования, где релаксация термоупругих напряжений происходит практически полностью.

Путем такой тепловой обработки на поверхности стекла после охлаждения создаются напряжения сжатия, повышающие механическую прочность и термостойкость стекла. Основной задачей при указанных выше процессах тепловой обработки стекла является выдерживание заданного закона изменения температуры стекла: заданной кривой отжига (закалки). Указанные температурные кривые, как правило, могут быть разбиты на несколько характерных интервалов в соответствии с которыми и предназначенные для тепловой обработки стекла печи также разбиваются на несколько участков, например, печь для отжига полированного стекла разбита на три участка: выравнивания температур и ответственного отжига, медленного охлаждения и быстрого охлаждения.

Тепловые процессы в промышленности вяжущих материалов представлены процессами сушки, дегидратации (гипсоварочные котлы, запарники и самозапарники), тепловлажностной обработки (автоклавы и пропарочные камеры), обжига (шахтные и вращающиеся печи). Широкое применение в технологии вяжущих веществ и изделий на их основе тепловой обработки обуславливает наличие разнообразных теплотехнических установок.

Для тепловлажностной обработки материалов и изделий (силикатный кирпич, ячеистый бетон, тяжелый бетон, асбестоцементные изделия, высокопрочный гипс) насыщенным водяным паром, получаемым из котельных под избыточным давлением 0,8–1,2 МПа и температуре 174–207°C используют автоклавы.

Для каждого вида материала и изделия устанавливается свой режим тепловлажностной обработки, исключающий нарушение его структуры и снижение прочности.

Цикл работы автоклава складывается из следующего времени: загрузки материала, тепловой обработки, включающей время подъема температуры, изотермической выдержки, спуска пара, охлаждения материала, его выгрузки и очистки автоклава. Цикл работы составляет от 7 до 18 часов в зависимости от обрабатываемого материала и необходимых свойств готовых изделий.

Тепловлажностная обработка цементных бетонов путем увеличения температуры среды до 80–100 °C осуществляется в пропарочных камерах с целью увеличения скорости реакций гидратации, и, как следствие, ускорения процесса набора прочности, т.е. изделия в более короткий срок приобретают механическую прочность, допускающую их транспортировку и монтаж.

В производстве извести и цемента широко распространены вращающиеся печи (ВП). Ими производится около 80% всех вяжущих веществ. ВП является печью непрерывного действия, работает по принципу противотока и используется для

мокрого, сухого и комбинированного способов производства. Работает на всех видах топлива при их факельном сжигании. С верхнего конца печи (холодного) подается сырье для обжига, с нижнего (горячего конца) – выгружается обожженный материал. Материал перемещается по длине печи благодаря уклону и вращению барабана. Топливо и воздух подаются в нижний конец печи. После выгрузки материала из печи он подается в холодильник.

Особенностью управления работой вращающейся печи является то, что в одном агрегате одновременно протекают взаимообусловленные химические и физические превращения вещества, термохимические, тепломассообменные, газодинамические процессы, осуществляется факельное сжигание топлива, происходит перенос возогнанных и конденсированных фаз из материального потока в газовый и обратно. Каждый из приведенных отдельных процессов сам по себе достаточно сложен. При управлении же всей системой в целом возникают дополнительные трудности, обусловленные взаимным влиянием указанных процессов, накладывающихся друг на друга. Так, например, разложение CaCO_3 с выделением CO , частично происходит в пламенном пространстве и действует на горение топлива как углекислотный огнегаситель, изменяя форму факела, что в свою очередь влияет на процесс декарбонизации CaCO_3 . Или при возникновении клинкерной пыли снижаются КПД холодильника и теплосодержание вторичного воздуха, что обуславливает удаление факела от горячего обреза печи и приводит к еще более интенсивному клинкерному пылению.

Для построения моделей тепло- и массообменных процессов происходящих в сушилках и печах используют три метода получения математических моделей объектов: статистический (экспериментальный), детерминированный (аналитический), экспериментально-аналитический.

Моделирование процесса обжига кирпича в туннельной печи.

Для получения математических моделей печей обжига необходимо составлять уравнения теплового баланса для материала, теплоносителя и всех конструктивных элементов печей: корпуса, экрана, транспортирующих устройств. В связи с тем, что основной задачей управления тепловым режимом печей является выдерживание заданной кривой изменения температуры материала, при получении математических моделей печей их целесообразно разбить на зоны, которые различаются характером изменения температуры (подъем, стабилизация и спад), скоростью изменения температуры, способом подвода (или отвода) тепла и т.д.

При составлении математической модели печи необходимо определить следует или не следует учитывать распределенность параметров материала, теплоносителя и конструктивных элементов печи по направлению движения материала. Это в основном зависит от длины зоны и диапазона изменения температуры материала и теплоносителя по направлению движения материала в пределах данной зоны.

Туннельная печь для обжига кирпича состоит из горизонтального обжигательного канала, в котором двигаются вагонетки с кирпичом. Движение материала и теплоносителя противоточное.

По мере движения материала вдоль печи его температура меняется в соответствии с графиком, согласно которому можно выделить три основные зоны: 1) зона подготовки (происходит подсушивание материала и дальнейший его нагрев); 2) зона обжига; 3) зона охлаждения (рисунок).

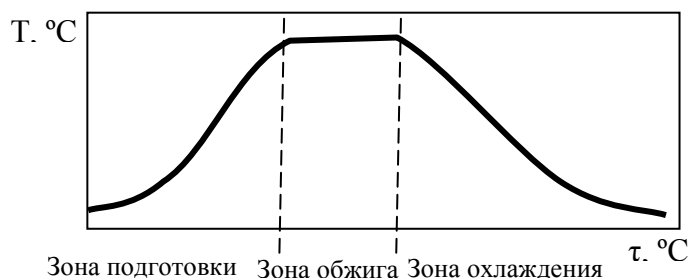


Рисунок – Температурный режим туннельной печи обжига кирпича

В качестве исходных приближений при составлении математической модели процесса обжига кирпича в туннельной печи принимаем:

- дымовые газы нагревают кирпич на всех его гранях;
- в 7 фиксированных точках кирпича рассматривается изменение физических параметров;
- длина туннеля во много раз превышает его поперечное сечение;
- температура газа зависит от времени и одинакова в пределах одной зоны;
- к окончанию времени пребывания кирпича в зоне его температура выравнивается по объему и сравнивается с температурой газа.

Для составления математической модели всю печь по длине разделим на 48 зон, равных технологическим зонам. Примем, что температура в каждой зоне постоянная, т. е. не зависит от времени.

Тогда тепловой баланс печи зависит от тепловой мощности газовых горелок, тепловых потерь в окружающую среду через ограждающие конструкции печи, от теплоты, вносимой или выносимой дымовыми газами, садкой кирпича-сырца (обожженного кирпича) и вагонетками.

Согласно уравнению теплового баланса запишем выражение для изменения температуры смеси воздуха и дымовых газов по продольному сечению канала печи в i -й зоне:

$$c_p \cdot G_i^v \cdot T_i^g = c_p \cdot (G_i^v - G_{i+1}^v) \cdot T_{i+1}^g + P_i^g - Q_i^0 - Q_i^k - Q_i^w \quad (1)$$

где c_p – теплоемкость смеси воздуха и дымовых газов; G_i^v – расход смеси воздуха и дымовых газов по продольному сечению канала печи; зависит от расхода воздуха, подаваемого на горение газа, расхода самого газа, расхода подаваемого или отбираемого из зоны воздуха; T_i^g $i = 1, 2, \dots, N$ – температура газа в зоне; N – число зон.

Левая часть уравнения (1) представляет собой поток теплоты, переносимой газами через границу i -й и $(i-1)$ -й зон.

Правая часть уравнения представлена несколькими слагаемыми.

Первое слагаемое – поток теплоты, проносимой горячими газами через границу между i -й и $(i+1)$ -й зонами.

Второе слагаемое P_i^g – это тепловая мощность газовых горелок. При отсутствии газовых горелок в рассматриваемой зоне (зоны подготовки и охлаждения) данный член равен нулю.

Q_i^0 – тепловые потери в окружающую среду через ограждающие конструкции печи.

Q_i^k – количество теплоты, приносимой (забираемой) садкой кирпича.

Q_i^w – количество теплоты, приносимой (забираемой) вагонеткой массой M_w .

В отношении распространения теплоты кирпич и вагонетка представляют собой однородную сплошную среду.

Поля температур кирпича и вагонетки определяются соответствующими дифференциальными уравнениями нестационарной теплопроводности без внутренних источников теплоты, в трех пространственных координатах:

$$c_q \cdot \rho_q \cdot \frac{\partial T_i^q}{\partial \tau} = \lambda_q \cdot \left(\frac{\partial^2 T_i^q}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_i^q}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T_i^q}{\partial z^2} \right)$$

где q – индекс $q=k, w$ соответствует кирпичу и вагонетке; c_q, ρ_q, λ_q – соответственно теплоемкость, плотность и теплопроводность веществ (кирпича или вагонеток); $\tau \in [0, \Delta\tau]$ – время ($\Delta\tau$ – продолжительность толкания, т. е. время, в течение которого садка находится в i -й зоне).

Для этого уравнения записываем начальные и граничные условия.

Начальные условия: $T_i^q(0) = T_{i-1}^q(\Delta t)$

Граничные условия:

$$\alpha_i (T_i^g - T_i^q)_{x=0, x=hx} = \lambda_q \cdot \frac{\partial T_i^g}{\partial x} \Big|_{x=0, x=hx}$$

$$\alpha_i (T_i^g - T_i^q)_{y=0, y=hy} = \lambda_q \cdot \frac{\partial T_i^g}{\partial y} \Big|_{y=0, y=hy}$$

$$\alpha_i (T_i^g - T_i^q)_{z=0, z=hz} = \lambda_q \cdot \frac{\partial T_i^g}{\partial z} \Big|_{z=0, z=hz}$$

Здесь hx, hy, hz – толщины прогреваемого материала в направлениях x, y, z .

Для приближенного решения уравнения (2) прогреваемый объем разбивают на определенное количество контрольных объемов. Например, при разбиении на 7 контрольных объемов с температурами $T_j, j=1,2,\dots,7$ получают систему разностных уравнений, которая решается относительно неизвестных температур T_j .

При $\tau=\Delta\tau$ определяют среднюю температуру:

$$T_i^q = \frac{\sum_{j=1}^6 T_j^n + T_4^n}{7} \quad (3)$$

где T_i^q – температура газа в i -й зоне; T_j^n – температура поверхности кирпича в шести плоскостях; T_4^n – температура в центре кирпича.

Уравнения (1) и (3) составляют общую систему уравнений относительно неизвестных T_i для газа, кирпича и вагонетки, $i=1,2,\dots,N$. Уравнение (3) используется для расчета температур в кирпиче и вагонетке, а уравнение (1) – для расчета температуры смеси воздуха и дымовых газов, и решаются итерационным (повторяющимся) методом. Результатом расчетов являются температуры садки по зонам.

Математическая модель позволяет получить оптимальный температурный режим с минимальными затратами энергии и высоким качеством кирпича.

Для оптимизации процесса обжига, согласно месячному плану, сначала рассчитываются ритм и режим работы печи с помощью математической модели и подбираются технологические параметры, а затем эти изменения переносятся на печь.

4.1 Оптимизационные задачи и этапы их решения. Формулировка задачи оптимизации. Критерий оптимальности (целевая функция). Ограничения на оптимизирующие параметры.

Целью моделирования химико-технологического процесса является его наилучшая реализация, его оптимизация. В настоящее время принято считать, что **оптимизация** – это целенаправленная деятельность, заключающаяся в получении наилучших результатов при соответствующих условиях.

Современный этап развития химической технологии, как и вообще всех технических наук, характеризуется принципиально новой постановкой задачи оптимизации.

Поиски оптимальных решений привели к созданию специальных математических методов и уже в XVIII в. были заложены математические основы оптимизации (математический аппарат бесконечно малого, вариационное исчисление, численные методы и др.). Однако до второй половины XX в. методы оптимизации во многих областях науки и техники применялись очень редко, поскольку практическое использование математических методов оптимизации требовало огромной вычислительной работы, которую реализовать без быстродействующей вычислительной техники было крайне трудно, а в ряде случаев и невозможно. Особенно большие трудности возникали при решении задач оптимизации процессов в химической технологии.

Расчеты процессов и аппаратов химических производств, как правило, связаны с необходимостью выбора лучшего варианта из многих возможных. Этот выбор до недавнего времени осуществлялся на основе субъективной оценки и опыта проектанта или исследователя. Но даже самые опытные исследователи не могли рассмотреть и оценить разнообразные варианты, которые возникали при проектировании новых или исследовании действующих производств. Очень часто на стадии разработки выбирался далеко не лучший вариант, и после пуска производства начинались бесчисленные, переделки: ощупью искали пути улучшения процесса. Нередко эти переделки растягивались на 10–15 лет.

Решение проблемы стало возможным благодаря постановке задач оптимизации и нахождению оптимальных результатов с помощью ЭВМ.

Общая постановка задачи оптимизации, критерий оптимальности, ограничения.

Постановка задачи оптимизации предполагает:

1. Наличие объекта оптимизации и выявление цели оптимизации; при этом формулировка каждой задачи оптимизации должна содержать необходимое требование установления экстремального значения только одной величины.

2. Наличие ресурсов оптимизации, под которыми понимают возможность выбора значений некоторых параметров оптимизируемого объекта (проектируемого или исследуемого). Объект должен обладать определенными степенями свободы – управляющими воздействиями, которые позволяют изменять его состояние в соответствии с теми или другими требованиями.

3. Возможность количественной оценки оптимизируемой величины, поскольку лишь при выполнении этого условия можно сравнивать эффекты от выбора тех

или иных управляющих воздействий.

Формулировка задачи оптимизации процессов в общей постановке – заключается в *определении значений управляющих параметров*, оптимизирующих принятый *показатель качества – критерий оптимальности*, который имеет *максимально или минимально* возможную величину, при условии, что *выполняются ограничения на переменные*, накладываемые технологическими, эксплуатационными, конструктивными требованиями, условиями устойчивости, пропускной способности, наличия сырья и т. п.

Принято различать задачи *статической оптимизации* для процессов, протекающих в установившихся режимах, и задачи *динамической оптимизации*, или задачи создания и реализации системы оптимального управления процессом при неустановившихся режимах эксплуатации, для решения которых требуется изучение динамики процесса (например, пуск процесса или перевод его с одного режима в другой при минимальных отклонениях качества продукции, оптимальное управление периодическим процессом).

Для решения задач оптимизации необходимо:

1. Составить математическую модель объекта оптимизации;
2. Выбрать критерий оптимальности и сформировать функцию цели (целевая функция может быть как без ограничений, так и с ограничениями на значения отдельных параметров);
3. Определить управляющие параметры и их возможные ограничения;
4. Выбрать метод оптимизации, который позволит найти экстремальные значения искомых величин.

1. Основные принципы составления математической модели были разобраны ранее. Принципиально можно вместо математической модели использовать сам оптимизируемый объект, на котором опытным путем найти в удобной форме зависимость критерия оптимальности и управляющих параметров. Однако это осуществимо лишь при наличии реального объекта и, кроме того, экспериментальное изучение требует существенного вмешательства в нормальное течение процесса, поскольку по результатам измерения только одного режима нельзя установить, оптимален он или нет. Таким образом, наличие математической модели процесса, которая позволяет, не затрагивая по существу сам процесс, определить, какое решение нужно принять, чтобы улучшить его режим, является важным условием при решении задач оптимизации. Следует также учесть, что, если математическая модель построена, то эксперимент на процессе фактически заменяется экспериментом на его модели.

Для успешного использования математической модели при решении задач оптимизации необходимо, чтобы модель достаточно верно качественно и количественно описывала свойства моделируемого объекта, т. е. была ему адекватна.

2. Обычно оптимизируемая величина связана с экономичностью работы рассматриваемого объекта. В общем случае объектом может считаться любой производственный комплекс: аппарат, агрегат, цех, завод, комбинат, отрасль промышленности. Оптимальный, или наилучший, вариант работы объекта должен измеряться какой-то количественной мерой – **критерием оптимальности**.

Критерий оптимальности – количественная оценка оптимизируемого качества. Это главный признак, по которому судят о том, насколько хорошо функциони-

рует данная система, работает данный процесс, насколько хорошо решена задача оптимизации.

На основании выбранного критерия оптимальности составляется так называемая **целевая функция**, (ее еще называют функцией качества, экономическим критерием), представляющая собою зависимость критерия оптимальности от параметров, влияющих на его значение. Вид критерия оптимальности (или целевой функции) определяется конкретным содержанием решаемой задачи оптимизации.

Чтобы выбранный критерий оптимальности можно было эффективно использовать он должен удовлетворять трем основным **требованиям**:

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

Наиболее часто критерий оптимальности выражают в виде экономической оценки (например, прибыль, норма прибыли, рентабельность, приведенный доход, себестоимость). Однако в частных задачах оптимизации, когда объект является частью технологического процесса (аппарат либо агрегат в масштабе цеха, завода, комбината), критерием оптимальности может служить технологическая характеристика, косвенно оценивающая экономичность работы агрегата (например, производительность, чистота продукта, выход продукта и т. д).

При постановке конкретных задач оптимизации критерий оптимальности должен быть записан в виде аналитического выражения.

Если оптимизируемый процесс рассматривают как детерминированный, возмущающие параметры в его математическое описание не включают. Тогда критерий оптимальности детерминированного процесса в общем виде может быть представлен как функция входных, выходных и управляющих (оптимизируемых) параметров

$$F = F(x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_m; u_1, u_2, \dots, u_k)$$

В векторной форме записи:

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$$

$$Y = (y_1, y_2, \dots, y_m)$$

$$U = (u_1, u_2, \dots, u_k)$$

Тогда функция принимает вид

$$F = F(X; Y; U)$$

Поскольку параметры u также являются функцией оптимизируемых параметров x , то для фиксированных значений входных величин x критерий оптимальности можно рассматривать как функцию управляющих параметров

$$F = F(U)$$

Если случайные возмущения достаточно велики и их необходимо учитывать при математическом описании, т. е. оптимизируемый процесс – стохастический, тогда управляющие U и входные параметры X объединены в группу входов причем

$Y_i = \varphi_i(X, U) = f_i(X)$ – модель записанная в виде уравнения регрессии (модель справедлива только для некоторой локальной области исследуемого пространства функции цели)

Отсюда критерий оптимальности будет иметь следующий вид.

$$F = F(X)$$

В задачах оптимизации детерминированных процессов различают **простые** и **сложные** критерии оптимальности. Критерий оптимальности **простой**, если требуется определить максимальное или минимальное значение R без заданных условий на какие-либо другие величины. Такие критерии оптимальности обычно выбираются при постановке частных задач оптимизации в терминах технологических оценок (например, максимальная прочность) и иногда в общих задачах, если требуется найти производительность или себестоимость целевого продукта без каких-либо условий на величины, определяющие указанные экономические оценки.

Критерий оптимальности называется **сложным**, если необходимо установить максимальное или минимальное значение R при некоторых условиях, которые накладываются на ряд других величин (критерии оптимальности в задачах определения максимальной производительности $B_{i\max}$ по i -му продукту при заданной себестоимости S_i или нахождение минимальной себестоимости S_{\min} i -го продукта при заданной производительности $B_i = \text{const}$). К сложным относятся также критерии оптимальности, если их аналитические выражения имеют вид: $F = F(x_1, x_2)$, где x_1 и x_2 – оптимизируемые параметры.

3. Выбор управляющих параметров и их ограничений. – важнейший этап оптимизации. Ему предшествует построение математической модели, формулировка задачи и формирование критерия оптимальности.

Процедура решения задачи оптимизации процессов включает установление (или выбор) **управляющих параметров (факторов) и их количества**, возможность изменения которых позволяет управлять и оптимизировать процесс (это может быть температура, давление, время, состав исходной смеси и др.).

Остальные параметры при этом не регулируются, хотя их значения, учитываются при определении оптимальных условий.

Выбор количества оптимизируемых параметров зависит от того, на какой стадии разработки производства осуществляется оптимизация.

1. Если производство проектируется (оптимальное проектирование), то к числу оптимизирующих целесообразно отнести как можно большее число параметров, поскольку регулирование параметров (изменение значений) осуществляется не в действительности, а на математической модели.

2. После пуска производства (оптимальное управление), число выбираемых оптимизируемых воздействий становится существенно меньшим. Во-первых, часть параметров регулировать сложно или вообще невозможно: таковы, например, размеры аппаратов. Во-вторых, чем больше управляющих факторов, тем сложнее становится система управления объектом.

В этой связи для оптимального управления используют сравнительно небольшое число параметров.

Как только определены **управляющие параметры**, в большинстве задач оптимизации устанавливают **ограничения** на область изменения этих параметров (переменных).

Ограничения – технологические величины, которые в процессе работы агрегата (аппарата) не должны выходить из предписываемых технологией допусков (например, увеличение температуры варки в печи приводит к перерасходу топлива и

снижению срока службы огнеупоров, снижение температуры варки приведет к появлению непроваренной, неосветленной стекломассы, а также в конечном итоге к ее кристаллизации).

Чаще всего ограничения возникают по следующим причинам:

– *по количеству и качеству сырья и продукции*: состав сырья, как правило, задается, количество сырья также может быть ограничено; выпуск продукции не должен быть меньше планового и больше того, что можно реализовать; качество продукта не должно быть ниже требований ГОСТа;

– *по условиям технологии*: расход воздуха не может превышать производительность вентилятора; температура не может быть выше предела, при котором разрушается футеровка аппарата; размеры аппаратов изменять мы не можем, и т. д.;

– *по экономическим и конъюнктурным соображениям*: капитальные затраты не должны превышать выделенной суммы; срок ввода нового производства не должен быть позже запланированного; нельзя применять методы и устройства, защищенные иностранными патентами;

– *по соображениям охраны труда и окружающей среды* – чрезвычайно важная группа ограничений, жесткость, которых все возрастает.

Ограничения на переменные могут задаваться в различной форме: числом, процентным соотношением, уравнением, неравенством.

Ограничения можно различать по формально-математическим признакам. Так, выделяют ограничения *типа равенств* и *типа неравенств*. Ограничения *типа равенств* устанавливают определенное значение того или иного параметра

$$h_i = a_i$$

Параметр h_i можно рассматривать как один из контролируемых нерегулируемых входов (состав сырья, размеры аппаратов и т. д.)

Ограничения *типа неравенств* определяют пределы, в которых допустимо изменение параметров X процесса

$$x_j \geq a_j$$

$$x_k \leq b_k$$

$$a_i \leq x_i \leq b_i$$

Два первых ограничения задают *односторонние пределы* (например, производительность не ниже заданной; температура не выше той, на которую рассчитан материал). Третье – *двусторонние* (например, температура в пределах от температуры замерзания до температуры кипения).

Также при решении задач оптимизации ограничения подразделяют на: 1) *ограничения 1-го рода*, где в качестве параметров фигурируют входные факторы; 2) *ограничения 2-го рода* эти параметры являются различными функциями входов, например, выходные показатели.

4. Методы решения оптимальных задач основаны на предположении, что математическая модель оптимизируемого объекта известна.

Выбор метода оптимизации должен быть обусловлен: 1) возможностью получения конечных результатов с наименьшими затратами на вычисления 2) получением наибольшего объема информации об искомом решении. Чем сложнее объект оптимизации, тем труднее выбрать метод решения оптимальной задачи. При выборе ме-

тогда оптимизации для рассматриваемой задачи нужно проанализировать известные решения других задач и исходить из опыта их решения и конкретного существа самой задачи. Некоторые методы специально разработаны для решения оптимальных задач объектов, которые описываются математическими моделями определенного вида.

Все методы решения оптимальных задач подразделяются на следующие основные группы.

1. *Аналитические методы.* Их применяют, когда мы можем продифференцировать целевую функцию и найти ее экстремум.

2. *Методы математического программирования: линейного, нелинейного, динамического.* Для их применения нужно, чтобы целевая функция была вычислимой: должен быть известен алгоритм, по которому можно рассчитать значение критерия оптимальности при заданных значениях факторов.

3. *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.

4.2 Методы решения оптимизационных задач. Аналитический поиск экстремума функции. Методы математического программирования (линейного, нелинейного). Задачи линейного программирования: о смесях, транспортная и их решение графическим способом. Методы нелинейного программирования: сканирование, дихотомия, градиент, поочередное варьирование переменных, случайный поиск, симплексный метод. Достоинства и недостатки методов решения оптимизационных задач. Экспериментальный поиск оптимума методами Гаусса-Зейделя и Бокса-Уилсона.

Аналитический поиск экстремума функций, заданных без ограничений на независимые переменные, применяется к задачам, у которых оптимизируемая функция имеет аналитическое выражение, дифференцируемое во всем диапазоне исследований, а число переменных невелико.

Пусть целевая функция задана выражением

$$F = F(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

Поиск экстремального значения функции производится в результате приравнивания ее производной нулю и решения системы уравнений:

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_2} = 0$$

.....

$$\frac{\partial F}{\partial x_n} = 0$$

Левые части уравнений – функции от факторов x_1, x_2, \dots, x_n . Решение системы

может дать величины $x_{1\text{опт}}$, $x_{2\text{опт}}$, ..., $x_{n\text{опт}}$, являющиеся оптимальными значениями факторов. Если оптимизируется технологический процесс, то этому решению соответствует оптимальный режим.

Область применения указанного метода – это наиболее простые детерминированные процессы с сосредоточенными параметрами без ограничений на основные переменные.

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

$$a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + \dots + a_{1m} \cdot x_{1m} \geq b$$

$$x_1, x_2, \dots, x_n \geq 0$$

где $a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1m}$ – коэффициенты.

Наиболее типичные экономические и производственные задачи, решаемые методом линейного программирования:

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 А и В, 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

$$F = c_1 \cdot x_1 + c_2 \cdot x_2 + \dots + c_n \cdot x_n \rightarrow \min.$$

– 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 в мас.% (мол.%).

Ограничения, составляемые для решения данной задачи, будут содержать четыре подсистемы:

– требование, чтобы сумма содержаний всех компонентов в стекле была равна 100 мас.%:

$$P_1 + P_2 + \dots + P_n = 100$$

– вторая подсистема будет содержать неравенства для каждого контролируемо-

го свойства, кроме того, которое оптимизируется. Величина свойства находится в интервале, задаваемом двумя неравенствами

$$k_1 \cdot P_1 + k_2 \cdot P_2 + \dots + k_n \cdot P_n \leq K_B$$

$$k_1 \cdot P_1 + k_2 \cdot P_2 + \dots + k_n \cdot P_n \geq K_H$$

где K_H и K_B – верхний и нижний заданные пределы данного свойства соответственно.

– 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 другой группой оксидов;

– 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.

Например, решим задачу максимизации целевой функции, имеющей вид:

$$F(x) = x_1 + x_2$$

при наличии ограничений на переменные x_1 и x_2 в виде неравенств:

$$2 \cdot x_1 + x_2 \leq 1$$

$$x_1 + 2 \cdot x_2 \leq 1$$

$$x_1 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$

В рассматриваемом случае размерность решаемой задачи равна двум и для наглядного изображения решения воспользуемся графическим представлением.

Построим многоугольник $OASB$ (рисунок), ограниченный прямыми линиями, соответствующими уравнениям:

$$2 \cdot x_1 + x_2 = 1$$

$$x_1 + 2 \cdot x_2 = 1$$

$$x_1 = 0$$

$$x_2 = 0$$

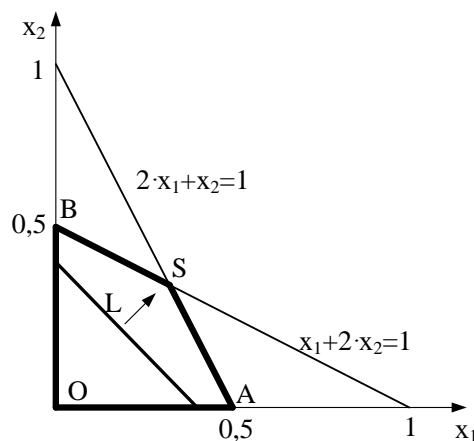


Рисунок – Решение задачи линейного программирования графическим способом

Величина целевой функции имеет постоянное значение вдоль линии l , определяемой уравнением:

$$x_1 + x_2 = C$$

На рисунке эта линия изображена для случая $C=0,4$. Если линию l перемещать на плоскости (x_1, x_2) параллельно самой себе, то величина C и, следовательно, значение целевой функции будут изменяться. Очевидно, что максимальному значению целевой функции в данном случае отвечает предельное положение линии l , когда она проходит через точку S , которая является вершиной многоугольника $OASB$. При этом максимальное значение $F(x)$ определяется координатами вершины S , т.е. координатами точки пересечения линий, соответствующих двум первым уравнениям системы, совместное решение которых позволяет найти:

$$x_{1opt} = \frac{1}{3}; \quad x_{2opt} = \frac{1}{3};$$

Максимальное значение целевой функции с учетом этих значений будет составлять $F(x) = \frac{2}{3}$.

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.

Методы нелинейного программирования объединяют различные способы решения оптимальных задач: градиентные, безградиентные, случайного поиска и др. Они применяются для оптимизации как детерминированных, так и стохастических процессов.

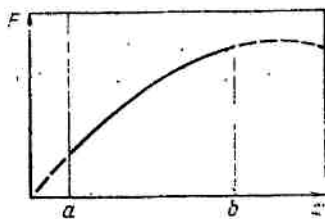
Общим для методов нелинейного программирования является то, что их используют при решении оптимальных задач с нелинейными функциями цели и ограничениями в виде нелинейных соотношений, имеющих форму равенств или неравенств.

Все разновидности нелинейного программирования – это численные методы поискового типа. Их сущность заключается в определении набора независимых переменных, дающих наибольшее приращение оптимизируемой функции. Техника поиска основана на расчетах, которые определяют направление наиболее быстрого изменения функции цели. Между собой методы нелинейного программирования отличаются способом определения направления движения к оптимуму, алгоритмизацией поиска.

Их применяют, во-первых, если в точке экстремума отсутствуют производные. Так, изменение целевой функции может носить дискретный характер, например, при сравнении разных вариантов проведения процесса, когда F меняется не непрерывно, а скачком от одного варианта к другому. Но производные в точке экстремума могут отсутствовать и у непрерывной функции. Чаще всего это бывает, если экстремум расположен на краю области допустимых значений. На рисунке максимум лежит на краю области, в этой точке производная отсутствует.

Во-вторых, целевая функция весьма сложна и задана таким образом, что продифференцировать ее в общем виде не удастся, вследствие чего приходится обра-

щаться к численным методам.



a, b – границы области допустимых значений.

Рисунок. – График, иллюстрирующий оптимум на краю области допустимых значений

Суть численных методов: вычисляется ряд значений F при различных значениях аргументов; сопоставление этих значений показывает, в каком направлении нужно двигаться в пространстве факторов, чтобы приближаться к оптимуму. В подавляющем большинстве случаев эти методы не дают теоретически точных значений координат оптимума. Но практически это и не нужно – достаточно знать эти координаты с задаваемой точностью.

1. Оптимизация перебором применяется, если число возможных вариантов конечно. Рассчитывают целевую функцию для всех возможных вариантов и выбирают наибольшее (или наименьшее) значение. Перебор легко осуществляется на ЭВМ, причем все варианты могут быть заранее записаны в памяти машины, несмотря на крайнюю простоту метода, он часто оказывается чрезвычайно эффективным. Применение перебора позволяет найти такие варианты, до которых без нее дойти практически невозможно.

2. Сканирование – метод, близкий к перебору, но применяемый к непрерывным функциям.

Рассмотрим для примера одномерное сканирование – случай, когда ищем максимум целевой функции от одного фактора (поиск минимума осуществляется точно так же).

Зададим пределы изменения фактора x от a до b . Здесь a и b – ограничения, которые можно установить в любой реальной задаче.

Данный интервал $[a, b]$, на котором производится поиск экстремума целевой функции называется **интервал неопределенности**.

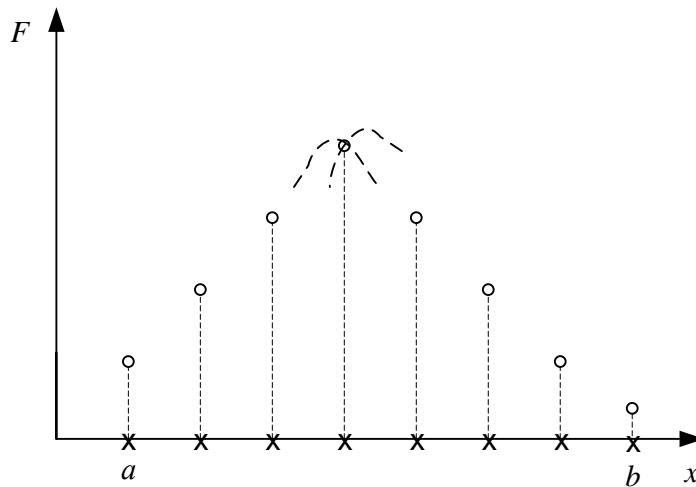
При этом не требуется определить точку экстремума абсолютно точно. Достаточно сильно сузить интервал неопределенности. Например, если оптимальная температура, соответствующая максимуму целевой функции, заключена в пределах от 1050 до 1051 К, то большая точность не нужна. В промышленных условиях точность регулирования не превышает 1 К. Таким образом следует выбрать интервал неопределенности [380, 381], и дальнейшее его сужение смысла не имеет.

Итак, в одномерном случае задача поиска экстремума сводится к сужению интервала неопределенности. Методом сканирования эта задача следующим образом (рисунок):

Выберем целое число q – количество значений целевой функции, которое придется рассчитывать. Рассчитаем интервал Δx

$$\Delta x = \frac{b-a}{q-1}$$

Отложим от точки a до точки b интервалы Δx (рисунок 25.1). Границы каждого интервала назовем **узлами**; на рисунке 25.1 каждый узел – обозначен крестиком.



a, b – границы интервала неопределенности.

Рисунок – График исследования функции сканированием:

В каждом узле рассчитаем $F(x)$ (см. точки на рис. 25.1). Теперь принимают за максимум наибольшее из полученных значений – на рисунке это 4-я точка слева. К концу расчета интервал неопределенности δ составит $2\Delta x$: истинный максимум может лежать либо справа, либо слева от полученной наилучшей точки (пунктиры на рис. 25.1).

Формула (118) определяет **эффективность метода**

$$\delta = \frac{2 \cdot (b-a)}{q-1}$$

. При сканировании для достижения достаточно малого δ величина q должна быть велика. Метод малоэффективен. Но он удобен для первоначального исследования функции, поскольку дает возможность представить ее вид на всем отрезке, установить число экстремумов и их локализацию.

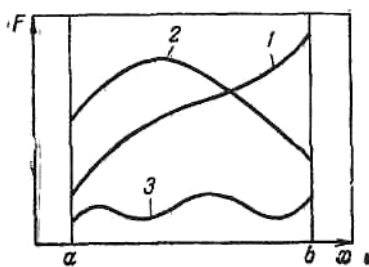
При исследовании сканированием функции более чем одного фактора участок на плоскости (факторное пространство для двух факторов) покрывают сетью узлов и таким образом исследуют поведение функции на этом участке. Это возможно в любом \bar{K} -мерном факторном пространстве (где k – количество факторов), но по мере роста K резко растет число необходимых расчетов и падает эффективность метода.

Методы направленного поиска.

Методы направленного поиска более эффективны, но не обладают той универсальностью, которой отличается сканирование. Их эффективность связана с тем, что это – **методы направленного поиска**, в которых происходит продвижение в факторном пространстве в сторону искомого экстремума. Но направленность поиска имеет следующее основное требование – условие унимодальности функции, ограничивающее применимость методов.

Унимодальная функция – это функция, имеющая в допустимой области только

один экстремум нужного знака (один максимум, если ищем максимум, один минимум в противоположном случае). Например, на рисунке функция 1 унимодальна.



a, b — границы области допустимых значений; 1 — функция унимодальна; 2 — унимодальна при поиске максимума; 3 — неунимодальна.

Рисунок — График унимодальных и неунимодальных функций.

Функция 2 унимодальна, если ищем максимум, и неунимодальна при поиске минимума (два минимума — при $x=a$ и при $x=b$). Функция 3 неунимодальна.

Методы направленного поиска обладают следующим недостатком: не позволяют установить, единственный ли найденный экстремум, а если известно, что не единственный, то в какой это экстремум: глобальный (экстремальный для всей области) или локальный (другие точки могут оказаться выше в случае максимума или ниже для минимума). Если при решении задачи оптимизации появится подозрение, функция неунимодальна, следует грубо исследовать функцию сканированием и выделить область глобального экстремума.

При выборе метода поиска экстремума целевой функции важен выбор числа факторов. Здесь различают два основных случая: 1) когда F зависит только от одного фактора, $F=F(x)$: тогда говорят об **одномерном поиске**; 2) факторов больше одного — **многомерный поиск**. Рассмотрим метод одномерного поиска (метод дихотомий) и три — многомерного — покоординатный спуск, градиентный метод, метод случайного поиска.

Дихотомия. Как и при описании сканирования, рассмотрим поиск максимума на отрезке $[a, b]$, показанном на рисунке.

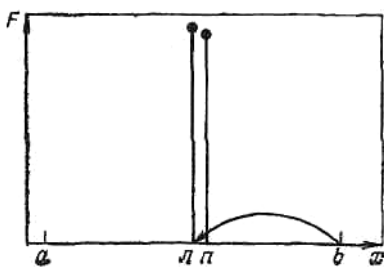


Рисунок — График поиска максимума методом дихотомий.

Разделим отрезок пополам — точка l (левая) на рисунке. Рассчитаем значение $F=F(l)$ в этой точке. Пока мы еще ничего не можем сказать об экстремуме, кроме того, что он принадлежит нашему отрезку.

Теперь выберем малое приращение фактора, равное ε , и поставим на отрезке правую точку $n=l+\varepsilon$. Рассчитаем $F(n)$. Теперь, поскольку $F(l)>F(n)$, как изображено

на рисунке, можно утверждать, что, если $F(x)$ унимодальна, то *максимум находится в левой половине отрезка*.

Проделаем теперь следующее. Отбросим правую половину отрезка (на ней максимума нет). Для этого правый конец – точку b – перенесем в точку l . Сделаем это так. Точку l обозначим через b (такая операция не вполне привычна для традиционной математики, но в алгоритмических языках она чрезвычайно распространена). На рисунке этот перенос обозначен стрелкой. (Разумеется, если бы было $F(l) < F(n)$, то точку l мы перенесли бы точку a). Можно перенести конец отрезка и в точку n , но так как l и n близки, то это почти одно и то же.

После того, как правый конец отрезка перенесен, *задача вернулась к исходным условиям*: задан отрезок от a до b , на котором нужно найти максимум. Поэтому проводится следующий цикл расчета, ничем не отличающийся от предыдущего, кроме значения b . Снова делим пополам отрезок, снова ставим вспомогательную точку на расстоянии ε , снова переносим в середину либо правый, либо левый конец. Такой алгоритм (расчет складывается из одинаковых циклов, различающихся лишь начальными условиями) называют **итерационным**.

В принципе итерации можно проводить до бесконечности: делить пополам все меньшие отрезки. Поэтому в любом итерационном алгоритме нужно задать **правило останова**, определяющее, когда можно прекращать расчет, т. е. считать, что полученная точность уже достаточна. Например, можно остановить итерации, когда интервал неопределенности окажется меньше ε :

$$\delta = b - a \leq \varepsilon$$

Эффективность алгоритма дихотомии определяется так: каждая пара расчетов (точки l и n) уменьшает отрезок $[a, b]$ вдвое. Обозначим исходный отрезок индексом *исх*. Если сделать q расчетов (q – четное), то

$$\delta = \frac{(b - a)_{\text{исх}}}{2^{q/2}}$$

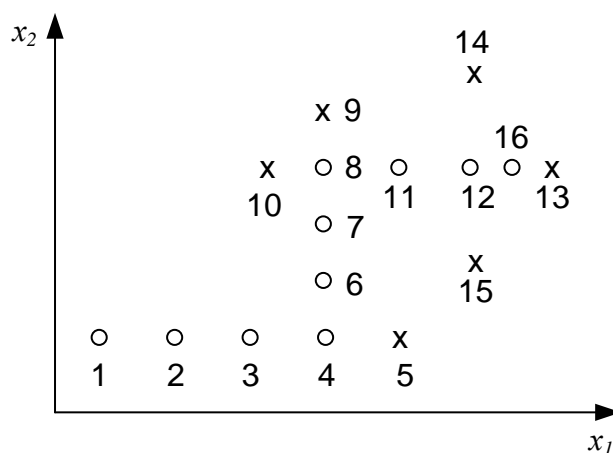
Методы многомерного поиска (случай, когда F – функция более, чем одного фактора) рассмотрим в простейшем варианте, когда оптимизация проводится без ограничений. Ограничения вносят заметные осложнения в алгоритмы поиска, но при этом их сущность, как правило, не изменяется.

Изложение будем иллюстрировать случаем двух факторов (этот случай можно изобразить на графике). Рассматривается поиск максимума.

Поочередное варьирование переменных. Этот метод сводится к следующему. Выбираются координаты начальной точки поиска $x_{1н}$ и $x_{2н}$, т. е. те значения x_1 и x_2 , от которых мы начнем искать оптимум. Выбираются единичные приращения обоих факторов (*шаги*) H_1 и H_2 , а также малые приращения факторов ε_1 и ε_2 . Выбор всех этих величин определяется физическим смыслом задачи и той информацией о ней, которой мы располагаем заранее.

Рассчитывается значение $F(x_{1н}, x_{2н})$ в точке 1 (рисунок). 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 продолжаются до тех пор, пока продолжается рост F . Неудачными будем считать те шаги, на которых получено меньшее значение F , чем на предыдущих; на ри-

сунке они обозначены крестиками.



о – удачные шаги; х – неудачные шаги.

Рисунок – График движения в пространстве факторов при оптимизации методом покоординатного спуска

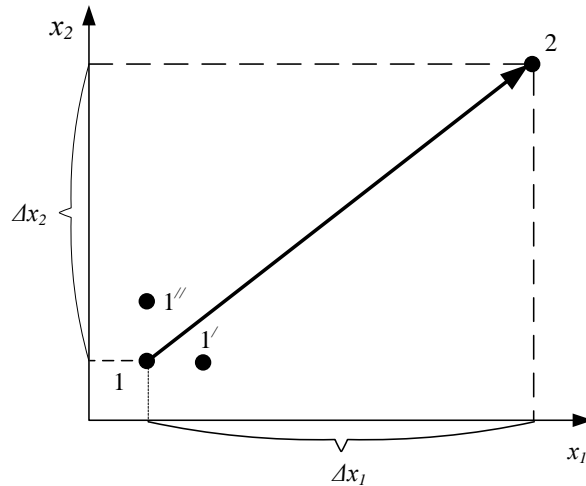
После первого неудачного шага (точка 6) возвращаемся в предыдущую точку (в данном случае – в точку 5), фиксируем величину x_1 и начинаем изменять x_2 , давая ему приращения H_2 или $-H_2$ (точки 7, 8, 9, 10). Затем снова движемся вдоль оси x_1 (точки 11, 12, 13), снова меняем направление (точки 14, 15) и т. д. (разумеется, если факторов больше двух, то после движения вдоль осей x_1 и x_2 проводится движение вдоль осей x_3, x_4 и т. д., и лишь затем вновь движемся вдоль оси x_1). На рисунке изображена ситуация, когда из точки 12 двигаться некуда: во всех окружающих точках (9, 13, 14, 15) значение F меньше, чем в данной. Это значит, что мы уже приблизились к максимуму и прежние крупные шаги из точки 12 переносят нас через него. Поэтому уменьшаем шаги (например, вдвое – см. точку 16) и продолжаем поиск уменьшенными шагами. Уменьшение шага может производиться неоднократно. Но в тот момент, когда уменьшенные шаги оказываются меньше, чем соответственно ε_1 и ε_2 , логично считать, что максимум зафиксирован достаточно точно и можно закончить расчет, приняв лучшую точку за оптимум.

Метод градиента существует в большом числе вариантов. Рассмотрим один из простейших.

Как и в методе покоординатного спуска, вначале выберем координаты исходной точки x_{1n} и x_{2n} , шаги H_1 и H_2 и малые приращения ε_1 и ε_2 . Движение к оптимуму начнем не вдоль какой-либо оси координат, а в направлении *градиента целевой функции* (или, если ищем минимум, то в противоположном градиенту направлении). Поскольку H_1 и H_2 приняты за единичные приращения координат, формула градиента получит вид:

$$\overrightarrow{gradF} = \frac{\partial F}{\partial x_1} \cdot \overrightarrow{H_1} + \frac{\partial F}{\partial x_2} \cdot \overrightarrow{H_2}$$

Для расчета направления градиента необходимо знать частные производные целевой функции по факторам. Для расчета производных проводится вспомогательная серия расчетов (рисунок).



I – исходная точка, I' и I'' – вспомогательные точки.

Рисунок – Графическая схема расчетов по методу градиента

Около начальной точки I ставятся две вспомогательные точки: I' на расстоянии ε_1 вдоль оси x_1 и I'' на расстоянии ε_2 вдоль оси x_2 и в них рассчитывается F . Производные находят 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 для следующего расчета F . Ее координаты находятся по формуле

$$x_{i+1,j} = x_{ij} + \Delta x_{ij}$$

причем

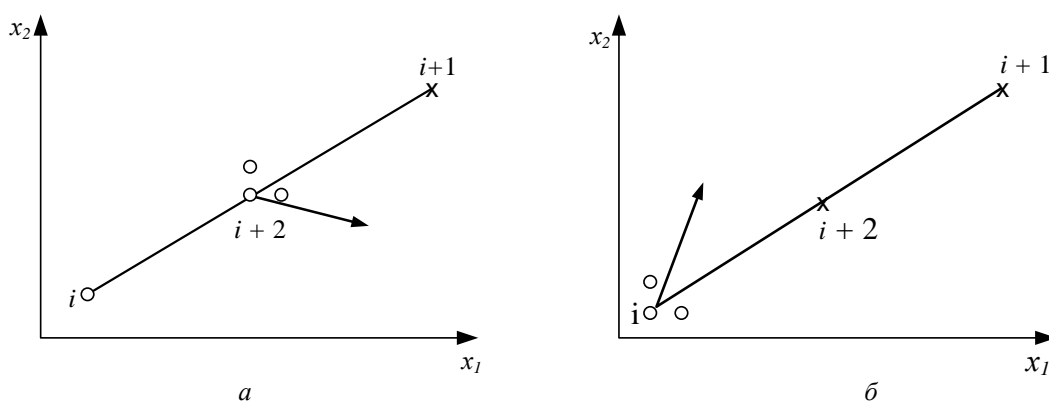
$$\Delta x_{ij} = \frac{\partial F}{\partial x_j} \cdot H_j$$

Здесь i – номер точки; j – номер фактора.

Дальше можно поступать по-разному. Можно определить производные в новой точке $i+1$, найти направление градиента, сделать шаг и т. д. Но чаще делают иначе. Если шаг оказался удачным, т. е. если $F_{i+1} > F_i$ (при поиске максимума), то делают следующий шаг в том же направлении, подставляя в формулу ранее найденные значения производных. Практически наверняка это будет уже не направление градиента: направление градиента в разных точках пространства факторов – разное, если только функция F не является линейной. Но можно надеяться, что еще один шаг в прежнем направлении снова даст приращение F нужного знака, хотя и не максимально возможное (так как от градиента мы отклонились); зато мы сэкономили на том, что не надо лишний раз считать производные. Если и этот шаг удачен, шагнем еще раз и т. д.

Если шаг неудачен, очевидно, поверхность настолько искривлена, что, мы «перескочили» через ту окрестность предыдущей точки, в которой функция возрастала. Поэтому в таком случае обычно уменьшают шаг, 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., а: крестик – неудачный шаг, $(i+2)$ –точка половинного шага).



а – уменьшенный шаг удачен; б – уменьшенный шаг неудачен; X– неудачный шаг; стрелка – новое направление градиента.

Рисунок – Графическая схема расчетов после совершения неудачного шага

В этом случае около точки $(i+2)$ поставим вспомогательные точки для расчета производных по формуле (121), найдем новое направление градиента и двинемся по нему (на рисунке вспомогательные точки – кружки, новое направление градиента – стрелка). Если же и уменьшенный шаг не приведет в «хорошую» точку (рисунок, б), то вернемся в точку i и будем в ней искать направление градиента.

Движение продолжим до тех пор, пока шаги не станут очень малыми. Уменьшение шагов объясняется двумя причинами. Во-первых, неоднократным уменьшением в тех случаях, когда большой шаг оказывался неудачным. Во-вторых (это принципиально важнее), тем, что вблизи оптимума производные близки к нулю, и формула (123) дает уже очень малые приращения.

Для останова вычислений можно использовать момент, когда оба приращения Δx_{ij} окажутся меньше, чем соответствующие малые величины ε_j .

Случайный поиск. В методе покоординатного спуска движение из исходной (и любой промежуточной) точки производится шагами, направленными вдоль одной из осей координат. В методе градиента – шагами по направлению градиента. В **случайном поиске** шаг из исходной точки осуществляется в случайном направлении (рисунок). 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*).

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.

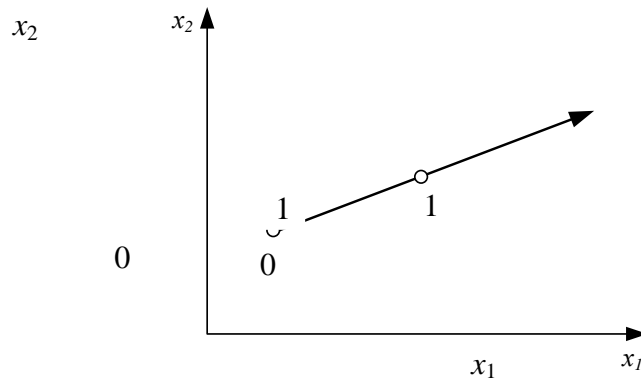


Рисунок – Определение случайного направления
в методе случайного поиска:
0 – исходная точка; 1 – случайная точка

Практика оптимизации показывает, что в ряде случаев (много факторов, очень сложный вид поверхности, влияние ограничений) случайный поиск может оказаться эффективнее остальных методов.

Симплексный метод оптимизации. Основной особенностью метода симплексов является объединение процесса изучения исследуемого объекта и процесса поиска оптимума, что достигается применением специально построенного плана в виде симплекса. Этот метод часто дает лучшие результаты по сравнению с методами градиента и случайного поиска. *Симплексом* называют простейший выпуклый многогранник, вершины которого равноудалены от центра фигуры. Симплекс называется **регулярным**, если расстояния между его вершинами равны между собой. Путем соответствующего преобразования координат регулярным можно сделать любой симплекс. На плоскости такой симплекс имеет вид правильного треугольника. В трехмерном пространстве регулярный симплекс является тетраэдром с четырьмя равноудаленными одна от другой вершинами.

Расчеты целевой функции проводятся в точках исследуемого пространства, которые соответствуют координатам вершин симплекса.

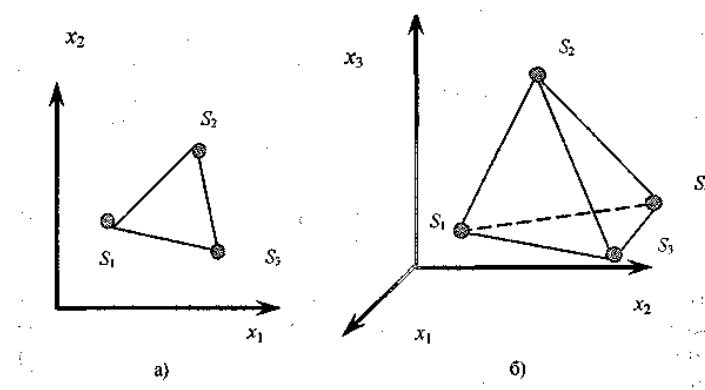


Рисунок – Примеры регулярных симплексов на плоскости (а) и в пространстве (б)

Симплекс обладает своеобразной особенностью: в нем можно условно отбро-

снять одну вершину и найти новую вершину, симметричную отброшенной. На основе оставшихся и новой вершин строится новый симплекс – зеркальное отражение исходного. Повторяя такую процедуру, можно осуществить перемещение симплекса в факторном пространстве.

Доказано, что, если каждый раз отбрасывать ту вершину, значение выходного параметра в которой будет худшим по сравнению с другими, то центр симплекса перемещается к оптимуму (рисунок).

Метод последовательного симплекс-планирования не требует вычисления производных целевой функции, а поэтому связан с очень простыми расчетами при выборе направления движения – с шаговым движением в область оптимума, причем для каждого шага определяется только одно значение целевой функции (независимо от числа факторов). Сущность симплексного метода оптимизации заключается в том, что положение каждой вершины треугольника на плоскости определяется парой координат, зная которые можно вычислить значение целевой функции.

Сравнивая эту величину в трех точках A , B , C (рисунок, а), можно определить, в какой из них содержится наибольшее (наихудшее). На рисунке 2, а из трех точек исходного симплекса ABC наихудшей является точка A .

Поэтому можно построить новый симплекс, сохранив положение двух точек B и C старого симплекса, а новую точку D расположить симметрично вершине A относительно грани BC . Эту процедуру можно повторять многократно. Пунктирные стрелки, соединяющие прежние вершины с новыми, показывают путь преобразования симплексов. На рисунке, б показан пример поиска оптимума целевой функции с помощью этого метода.

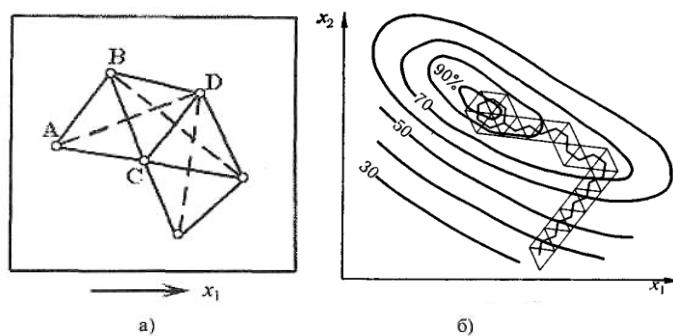


Рисунок – Траектория поиска оптимума методом отражения наихудшей точки

Важным достоинством симплексного метода является возможность успешного применения метода при движении в тех случаях, когда надо учитывать одновременно несколько критериев оптимизации.

Из любого симплекса, добавив всего одну точку, можно получить новый симплекс, если отбросить одну из вершин исходного симплекса, но использовать оставшуюся грань. Это обстоятельство учитывают при симплекс-планировании.

Движение в факторном пространстве в область оптимума осуществляется в данном случае перемещением симплекса путем последовательного отбрасывания вершины с минимальным значением параметра оптимизации и построением нового симплекса на оставшейся грани с новой вершиной, которая, в силу симметрии, является зеркальным отображением отброшенной. Здесь движение ведется после каждо-

го опыта.

Возможны различные способы ориентации симплекса относительно системы координат, однако чаще всего центр симплекса помещают в начало координат, а расстояние между симплексами принимают равным единице.

В результате образуется цепочка симплексов, перемещающихся в область оптимума. Центр этих симплексов движется по линии, близкой к градиенту.

Стратегия симплекс-планирования определяется правилами, знание которых позволяет правильно решить три задачи:

- записать исходный симплекс;
- найти координаты следующих точек при движении;
- своевременно закончить движение.

При движении симплекса в факторном пространстве может возникнуть колебание симплекса. Это явление вероятно при условии, что во вновь полученной точке величина параметра оптимизации является минимальной, так же как и в точке, которая была исключена на предыдущем шаге. При отбрасывании указанной точки происходит возврат к исходному симплексу, а далее симплексы начинают колебаться относительно одной грани. Такое явление может быть, например, если все вершины сохраняемой грани симплекса располагаются вблизи «гребня» на поверхности отклика, а одна вершина имеет сравнительно малое значение параметра оптимизации. После отражения соответствующей точки относительно сохраняемой грани симплекса получается симметричная точка, в которой величина параметра оптимизации также является минимальной.

Борьбу с колебаниями рекомендуется вести следующим образом. Возвращаются в исходный симплекс, с которого начались колебания, и отбрасывают ту точку, которая является второй по порядку минимальности параметра оптимизации. Если же и тогда нет необходимого эффекта, то вновь возвращаются в исходный симплекс и отбрасывают третью точку с учетом минимального параметра оптимизации и т. д.

Причиной закливания симплекса возникает из-за того, что в результате движения достигнута область оптимума. Тогда решают вопрос о целесообразности окончания движения.

Основанием для решения вопроса об окончании движения могут быть прекращение поступательного движения симплекса и его закливание, если повторение элемента в вершине, вокруг которой вращается симплекс, дает близкие результаты. В таких случаях нельзя сразу принимать решение о прекращении движения, поскольку вращение симплекса вокруг одной из вершин свидетельствует лишь о том, что эта вершина находится в непосредственной близости от оптимума.

Предполагая, что область оптимума находится вблизи вершины, вокруг которой вращается симплекс, положение данной области можно уточнить уменьшением размеров симплекса. Это соответствует уменьшению шага движения. Если после одного уменьшения размера симплекса закливание наступает опять, то иногда еще раз уменьшают симплекс и т. д., пока интервалы варьирования факторов не будут соизмеримы с ошибкой измерений.

Симплекс-планирование с помощью правильных многогранников. Рассмотрим наглядную иллюстрацию алгоритма симплексного метода на примере задачи отыскания наименьшего значения целевой функции двух независимых переменных с

линиями постоянного уровня, изображенными на рисунке.

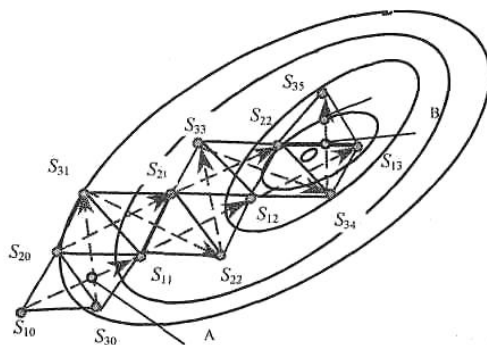


Рисунок – Поиск оптимума симплексным методом

Прежде всего, производится расчет значений целевой функции в трех точках S_{10} , S_{20} и S_{30} , соответствующих вершинам начального симплекса (треугольника). Из найденных трех значений целевой функции выбирается наибольшее. В представленном на рисунке 3 случае наибольшее значение целевой функции получается в точке S_{10} .

Далее строится новый симплекс, для чего вершина S_{10} исходного симплекса заменяется вершиной S_{11} , расположенной симметрично вершине относительно центра грани симплекса, находящейся против вершины S_{10} . Для варианта, изображенного на рисунке 3, построение нового симплекса осуществляется определением центра A стороны треугольника $S_{20}S_{30}$, после чего на продолжении прямой, проведенной через вершину S_{10} и точку A , откладывается отрезок $AS_{11} = AS_{10}$. Пунктирная стрелка, соединяющая прежнюю вершину с новой, показывает путь преобразования симплекса.

В новой вершине S_{11} вычисляется значение целевой функции, которое сравнивается с известными значениями для других вершин нового симплекса (S_{20} и S_{30}), и снова находится вершина S_{30} с наибольшим значением целевой функции, подлежащая исключению при построении следующего симплекса $S_{11}S_{20}S_{31}$ и т. д.

В результате применения рассмотренной процедуры исключения вершин симплексов с наибольшим значением целевой функции процесс сходится к ее минимальному значению. Из рисунка видно, что вблизи от оптимума может возникнуть заикливание, которое для рассматриваемого случая двух переменных сводится к тому, что вновь полученная вершина S_{35} последнего симплекса $S_{13}S_{22}S_{35}$ исключается и образуется предыдущий симплекс $S_{13}S_{22}S_{34}$. Для того чтобы устранить заикливание, достаточно изменить размеры симплекса в сторону его уменьшения, что соответствует уменьшению шага спуска в районе оптимума, используемого и в градиентных методах. Наиболее просто это можно сделать, если вдоль прямой $S_{34}S_{35}$ от точки B отложить отрезок, равный половине отрезка $S_{34}B$, в результате чего во вновь полученном деформированном симплексе $S_{13}S_{22}S_{35}$ исключению уже будет подлежать вершина S_{13} . Если заикливание возникнет снова, то размеры симплекса опять уменьшаются, пока не будет достигнута требуемая точность определения оптимума.

Критерием окончания поиска могут служить размеры симплекса. Поиск можно прекратить, например, если все ребра симплекса станут меньше заданной достаточно малой величины.

Таким образом, алгоритм симплексного метода допускает автоматическое изменение величины шага, при использовании которого вдали от оптимума возможно применение симплексов большого размера, что обеспечивает более быстрый спуск.

Случаи заикливания могут встретиться и в задачах более высокой размерности, для которых установление момента заикливания представляет определенные трудности. Для обнаружения заикливания при этом часто применяется следующий прием. Если после построения $n+1$ симплексов одна или несколько вершин исходного симплекса оказываются неисключенными, то размеры последнего симплекса изменяются и поиск продолжается с новым отсчетом исключаемых вершин.

В качестве начального симплекса при применении симплексного метода поиска лучше всего использовать правильный симплекс со всеми вершинами и гранями, соответственно одинаково удаленными от центра симплекса. Для таких начальных симплексов поиск производится наиболее эффективно. Примерами правильных симплексов на плоскости и в трехмерном пространстве являются соответственно равносторонний треугольник и тетраэдр, образованный равносторонними треугольниками.

Доказано, что при применении правильных симплексов направление движения в симплексном методе совпадает с направлением градиента, если, естественно, симплекс достаточно мал. Вместе с тем реализация данного метода не требует существенного увеличения вычислительных затрат с повышением размерности решаемой задачи, поскольку на каждом шаге рассчитывается только одно значение целевой функции независимо от числа переменных. В то же время при использовании градиентных методов поиска с возрастанием числа независимых переменных соответственно увеличивается число вычисляемых значений целевой функции при расчете производных по всем переменным.

Экспериментальный поиск оптимума. Если вид целевой функции неизвестен, тогда находят оптимум экспериментально, используя теорию планирования эксперимента, которая в т.ч. включает методы поиска оптимума.

Для нахождения оптимума экспериментальными методами можно применять любой из рассмотренных ранее численных методов. Однако при этом следует учитывать:

1) вследствие наличия случайных ошибок опытные точки нельзя располагать слишком близко одна к другой. В противном случае значения критерия оптимальности, полученные в соседних точках окажутся значительно меньше уровня ошибки, вследствие чего не удастся опровергнуть гипотезу о равенстве этих значений.

2) эксперимент дороже, чем единичный расчет целевой функции. Расчетная задача, где приходится 1000 раз считать F , может оказаться не очень большой по объему. Эксперимент же по отыскиванию оптимума, требующий 100 опытов, – уже очень велик.

3) при экспериментальной оптимизации характер зависимости F от факторов, как правило, проще, чем при расчетной, поскольку ошибки опытов «сглаживают рельеф» целевой функции. Это позволяет в эксперименте обычно работать с простейшими математическими моделями – чаще всего с многочленами 1-го или 2-го порядков.

Метод Гаусса — Зейделя. При оптимизации методом Гаусса — Зейделя поиск оптимума исследуемого процесса осуществляется поочередным варьированием каждого входного параметра до достижения частного оптимума выходного параметра. На рис. изображены линии равного выхода целевой функции при двух входных параметрах (x_1 и x_2) и общие представления о действии метода Гаусса — Зейделя.

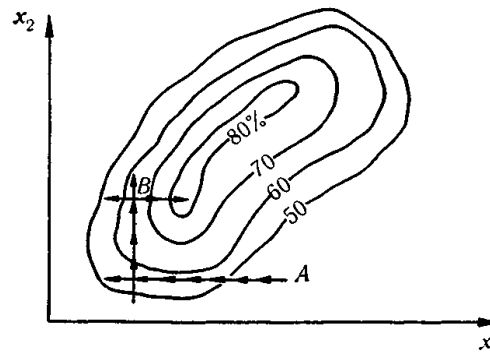


Рисунок – Поиск оптимума методом Гаусса-Зейделя

Вначале достигается оптимум по направлению одной из координатных осей при фиксированных значениях входных параметров по другим координатным осям. Затем, зафиксировав найденное значение выходного параметра, переходят к варьированию другого входного параметра, где вновь достигается частное значение оптимума и т. д.

Данный метод прост. Однако основным недостатком метода является длительность продвижения в область оптимума, поэтому указанным способом редко попадают в область оптимума. Чаще всего ограничиваются однократным варьированием по каждой из координатных осей (точка В, рис.).

Метод Бокса–Уилсона (метод крутого восхождения). В начале 50-х годов был разработан подход к оптимизации, называемый методом Бокса–Уилсона. В планировании эксперимента **градиентный метод** движения к оптимуму называют **крутым восхождением**. Отличия от метода, описанного ранее, обусловлены ошибками опытов. По этой причине нельзя находить частные производные так, как там указано: в формулах приращения ее должны быть малы; при малых расстояниях между точками слишком сильно скажутся ошибки опытов, и оценка направления градиента будет очень сильно отклоняться от истинного направления.

Метод крутого восхождения позволяет отыскать оптимум в два этапа:

1) шаговое крутое восхождение в район оптимума. Ставится одна или несколько серий опытов, цель которых – приблизиться к оптимуму по градиенту функции, т.е. в направлении наискорейшего возрастания (или убывания) выходного параметра.

2) исследование в самом районе оптимума. Ставится план 2-го порядка.

Вокруг исходной точки как центра строят факторный эксперимент 2^k или дробный факторный эксперимент. Зависимость отклика от факторов описывают многочленом 1-й степени (в дальнейшем, обозначим критерий оптимальности, он же

отклик, буквой y)

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

Тогда частные производные получают вид:

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = b_1$$

$$\frac{\partial y}{\partial x_2} = b_2$$

.....

$$\frac{\partial y}{\partial x_n} = b_n$$

С учетом того, что за единичный шаг в направлении каждой оси x_i (x_i выражено в размерных, некодированных – так называемых натуральных, единицах) целесообразно принять интервал варьирования ΔX_i , тогда координаты точки в которую необходимо выполнить шаг будут определяться следующим образом:

$$x_i = b_i \cdot \Delta X_i \cdot m \text{ при } i = 1, 2, \dots, n$$

Здесь m – множитель, регулирующий длину шага: шаг должен быть не слишком мал – иначе движение будет очень медленным, но и не слишком велик, иначе можно быстро уйти в область, где направление градиента – совсем иное.

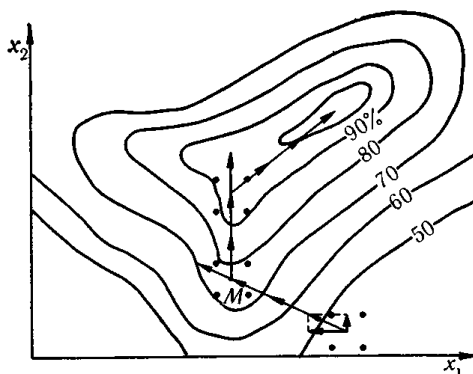


Рисунок – Поиск оптимума методом крутого восхождения

Однако, в отличие от градиентного метода, корректировка направлений производится не после каждого следующего шага, а по достижению частного экстремума целевой функции (рисунок) в некоторой точке M на данном направлении, как это делают при реализации метода Гаусса—Зейделя. Т.е. движение по направлению крутого восхождения продолжается до тех пор, пока y возрастает (либо убывает, если мы ищем минимум).

В точке частного экстремума находят новое направление градиента, либо ставится новый факторный эксперимент (план 2-го порядка), составляется математическая модель и вновь осуществляется крутое восхождение.

По-особому выглядит крутое восхождение в *промышленном эксперименте*. Особенность этого случая – *малое расстояние между опытными точками*, обусловленное тем, что во избежание появления брака в производственных условиях нельзя сильно изменять режим. Вследствие этого влияние ошибок велико, и все коэффициенты, кроме b_0 , оказываются незначимыми (их значения *тонут на фоне шу-*

ма). В этом случае поступают так. Начинают многократно повторять факторный эксперимент. При этом шум постепенно уменьшается, так как уменьшается дисперсия среднего. В какой-то момент значение одного (наибольшего по абсолютной величине) коэффициента становится больше уровня шума. Тогда делают один шаг по градиенту. Практически смещают центр плана вдоль соответствующей оси, вокруг него строят новый план, и вся процедура повторяется.

4.3 Решение оптимизационных задач с множеством откликов. Частная и обобщенная функция желательности. Безразмерная шкала желательности. Функция желательности с одно- и двухсторонними ограничениями. Методика расчета функции желательности и правила ее настраивания.

Задачу оптимизации процессов, характеризующихся несколькими откликами (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 предложенной Харрингтоном 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 . Построение шкалы желательности, которая устанавливает соотношение между значением отклика Y и соответствующим ему значением d (**частной функцией желательности**), является в своей основе субъективным.

Для построения шкалы желательности удобно использовать метод количественных оценок с интервалом значений желательности от нуля до единицы, хотя возможны и другие варианты шкалы. Значение $d=0$ или ($D=0$) соответствует абсолютно неприемлемому значению данного отклика; а $d=1$ ($D=1$) – самому лучшему значению отклика, причем дальнейшее улучшение его или невозможно, или не представляет интереса.

Простейшим типом преобразования служит такое, в котором существует верхний и (или) нижний пределы спецификации, причем эти пределы являются единственным и не допускающим изменений критерием качества. Вне этих пределов значение $d=0,0$, между ними значение $d=1$. Частная функция желательности при одностороннем ограничении (рисунок, a) имеет вид

$$d = 0, y < y_{\min}$$
$$1, y \geq y_{\min}$$

Таким образом, получается частная функция желательности, если спецификация задает ограничение сверху.

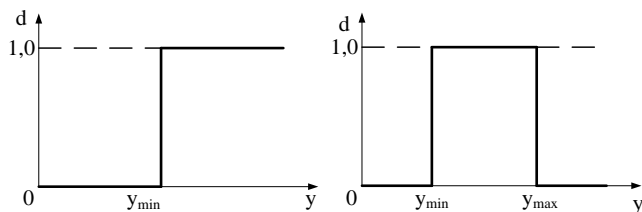


Рисунок – Простейший вид частной функции желательности

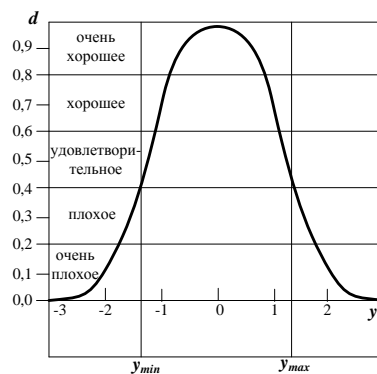


Рисунок – Функция желательности для двухстороннего ограничения

Если для данного свойства существует двустороннее ограничение (рисунок, б), то

$$d = 0, y < y_{\min} \text{ и } y > y_{\max}$$

$$1, y_{\min} < y < y_{\max}$$

Всегда желательно, чтобы значение отклика находилось не только между пределами спецификации, но и на определенном расстоянии от них, чтобы противостоять присущим производственному процессу случайным колебаниям. Кроме того, довольно трудно бывает провести точную пограничную линию между приемлемой и неприемлемой продукцией. Тогда получаемые промежуточные значения желательности и соответствующие им числовые отметки приведены в таблице.

Таблица – Базовые отметки шкалы желательности

Количественная отметка на шкале желательности	Желательность значения отклика
0,8–1,00	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

$$d = 0,63 \approx 1 - \frac{1}{e}, \text{ а } d = 0,37 \approx \frac{1}{e}$$

Построенная в соответствии с таблицей 1 шкала d представляет собой безразмерную шкалу, при помощи которой любой отклик может быть преобразован так, чтобы его можно было интерпретировать в терминах полезности или желательности для любого специфического применения.

Таким образом, преобразование y в d осуществляется по более сложным законам.

Для двустороннего ограничения вида

$$y_{\min} \leq y \leq y_{\max}$$

преобразование измеренного отклика y в шкалу d (рисунок 2) производится при помощи выражения

$$d = \exp\left[-\left(|y'\right|^n\right),$$

где n – положительное число ($0 < n < \infty$), не обязательно целое;

$$y' = \frac{2 \cdot y - (y_{\max} + y_{\min})}{y_{\max} - y_{\min}};$$

показатель степени n можно вычислить, если задать некоторому значению y значение d (предпочтительно в интервале $0,6 < d < 0,9$) по формуле:

$$n = \frac{\ln \ln 1/d}{\ln |y'|}$$

Задавая при помощи контрольной точки крутизну кривой желательности, можно учесть особую важность отдельных свойств; для них n будет иметь большее значение, и малому изменению свойства вблизи ограничивающих пределов будет соответствовать резкое изменение желательности. Показатель степени n определяет наклон кривой, и когда n становится большим, кривая приближается к своей предельной форме (см. рисунок 1, б): $d=0$ вне пределов спецификации и $d=1,0$ между этими пределами. Если нет спецификации, целесообразно дать статистическую оценку n по ряду значений y и соответствующих d .

Для односторонних ограничений вида $y \leq y_{\max}$ или $y \geq y_{\min}$ более удобной формой преобразования y в d служит другая экспоненциальная зависимость (рисунок):

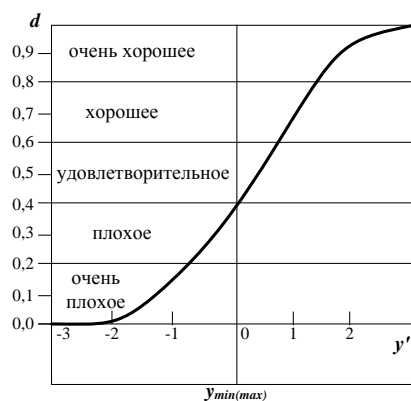


Рисунок – Функция желательности для свойства, ограниченного с одной стороны

$$d = \exp\left[\exp(-y')\right]$$

В данном выражении

$$y' = b_0 + b_1 \cdot y$$

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

$$y' = \ln(\ln(d))$$

Нелинейное преобразование y в y' применяется, если данное свойство имеет особую важность; нарушение ограничивающих условий недопустимо, и малому изменению свойства вблизи ограничивающего предела соответствует резкое измене-

ние желательности. Односторонняя спецификация наиболее часто встречается на практике.

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. 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 (критериев оптимизации); 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 $d_i=1$ ($i=1, 2, \dots, k$). Среднее геометрическое частных функций позволяет применить к частным желательностям и обобщенному показателю единый способ задания базовых отметок шкалы желательности, представленный в таблице 1, так как если $d_1=d_2=\dots=d_k=0,37$, то и $D=0,37$ и т. д. 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. Следует иметь в виду, что множество возможных значений D ограничено: $D \leq 1$. Очень эффективным оказалось применение обобщенной функции желательности при разработке рецептур и технологии получения материалов.

Перечень рекомендуемой литературы

№	Название учебников и учебных пособий, год издания	Авторы	Кол-во экз. в библиотеке
1	2	3	4
Основная			
1	Математическое моделирование в химической технологии. – Киев: Вища школа, 1973. – 280 с.	А.Г. Бондарь.	41
2	Введение в моделирование химико-технологических процессов. – М.: Химия, 1982. – 288 с.	А.Ю. Закгейм.	111
3	Методы оптимизации эксперимента в химической технологии / учеб. пособие для хим.-технол. спец. вузов. – М.: Высшая школа, 1985. – 327 с.	С.Л. Ахназарова, В.В. Кафаров.	99
4	Компьютерное моделирование и оптимизация химико-технологических систем. – Мн.: БГТУ, 2004. – 532 с.	В.Л. Колесников, П.П. Урбанович, И.М. Жарский.	401
5	Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высш. шк., 1991. – 400 с.	В.В. Кафаров, М.Б. Глебов.	32
6	Методы технической кибернетики в технологии стекла. – М.: Стройиздат, 1973. – 127 с.	В. В. Клименко, О. Ф. Кучеров, В. Е. Маневич.	4
7	Математическое моделирование химико-технологических процессов. – М.: КолосС, 2008. – 159 с.	Ас. М. Гумеров [и др.].	5
8	Моделирование и оптимизация технологических процессов и оборудования: учеб.-метод. пособие. – Мн.: БГТУ, 2014. – 268 с.	П. Е. Вайтехович, В. С. Францкевич.	120
9	Моделирование и оптимизация тепломассообменных процессов. – Мн.: БГТУ, 2005. – 320 с.	А.А. Андрижиевский, А.Г. Трифонов.	122
10	Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов. – М.: Академкнига, 2006. – 416 с.	Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин.	3
11	Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов. – С.-Пб.: Проффессионал, 2003. – 480 с.	В.А. Холоднов [и др.].	2
Дополнительная			
12	Элементы теории математических моделей. – М.: КомКнига, 2007. – 192 с.	А.Д. Мышкис.	–
13	Компьютерное моделирование в химической технологии: учебное пособие для хим.-технол. спец. вузов. – Мн.: БГТУ, 2008. – 336 с.	В.Л. Колесников, П.П. Урбанович, И.М. Жарский.	218
14	Компьютерные модели в промышленной экологии. – Мн.: БГТУ, 2003. – 243 с.	В.Л. Колесников, П.П. Урбанович, И.М. Жарский.	366
15	Статистические методы исследования конструкционной керамики. – Мн.: Технопринт, 2004. – 259 с.	Е.С. Голубцова, Б.А. Каледин.	4
16	Statistica. Статистический анализ и обработка данных в среде Windows. – М.: Филинь, 1998. – 600 с.	В.П. Боровиков, И.П. Боровиков.	1

1	2	3	4
17	Математические методы планирования экспериментов. – М.: «ДеЛи принт», 2005. – 295 с.	Ю.П. Грачев, Ю.М. Плаксин.	2
18	Компьютерные технологии вычислений в математическом моделировании. – М.: Финансы и статистика, 1999. – 256 с.	Ю.В. Васильков, Н.Н. Василькова.	1
19	Статистическая обработка результатов активного эксперимента: учебное пособие. – М.: РХТУ Д.М. Менделеева, 2006. – 52 с.	Т.Н. Гартман [и др.]; под ред. Т.Н. Гартмана.	–
20	Методы оптимизации в примерах и задачах. – М.: Высшая школа, 2005. – 544 с.	А.В. Пантелеев, Т.А. Летова.	–
21	Планирование экспериментов при оптимизации процессов химической технологии: учеб. пособие. – Киев: Вища школа, 1980. – 264 с.	А. Г. Бондарь, Г.А. Статюха, И. А. Потяженко.	–
22	Методы оптимизации и статистической обработки результатов измерений: учеб. пособие. – Минск: БГТУ, 2007. – 142 с.	В. М. Марченко, Т. Б. Копейкина.	270