

**В.Л. КОЛЕСНИКОВ
И.М. ЖАРСКИЙ
П.П. УРБАНОВИЧ**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
И ОПТИМИЗАЦИЯ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
СИСТЕМ**

*Допущено Министерством образования Республики Беларусь
в качестве учебного пособия для студентов
химико-технологических специальностей учреждений,
обеспечивающих получение высшего образования*

Минск БГТУ
2004

УДК 66:681.3 (075.8)

ББК 35:32.85

К 86

Р е ц е н з е н т ы :

заведующий кафедрой кибернетики химико-технологических процессов
Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева,
заслуженный деятель науки РФ, доктор технических наук,
профессор *Л.С. Гордеев*;

заведующий кафедрой математических проблем управления Гомельского
государственного университета им. Франциска Скорины
доктор технических наук, профессор *И.В. Максимей*;

заведующий кафедрой математического моделирования и оптимизации
химико-технологических процессов Санкт-Петербургского государственного
технологического института (Технического университета)
доктор технических наук, профессор *В.А. Холоднов*

Колесников В.Л.

К 86 Компьютерное моделирование и оптимизация химико-технологических систем: Учеб. пособие для студентов химико-технологических специальностей / В.Л. Колесников, И.М. Жарский, П.П. Урбанович. — Мн.: БГТУ, 2004. — 532 с.

ISBN 985-434-368-5

Изложены математические основы применения ЭВМ в химической технологии и природоохранной деятельности. Охарактеризованы общие принципы построения информационных сетей для получения математического описания сложных когерентных объектов, приведены поисковые алгоритмы решения компромиссных оптимизационных задач.

При освоении обучающих компьютерных модулей можно использовать правила и рекомендации по организации вычислительных экспериментов, изложенные в данном пособии.

В качестве приложения имеется компакт-диск с пакетами программных обучающих модулей, которые могут устанавливаться на жесткий диск компьютеров пользователей.

Предназначено для студентов химико-технологических специальностей высших учебных заведений, а также аспирантов и инженерно-технических работников химической промышленности и охраны окружающей среды.

УДК 66:681.3 (075.8)

ББК 35:32.85

ISBN 985-434-368-5

© Колесников В.Л., Жарский И.М., Урбанович П.П., 2004

© Учреждение образования «Белорусский
государственный технологический университет», 2004

ПРЕДИСЛОВИЕ

Интенсификация производственных процессов базируется на наукоемких технологиях и современных методах компьютерного моделирования и оптимизации.

Проблемы компьютерного моделирования связаны с задачами управления химико-технологическими системами. Их плодотворное сотрудничество позволяет не только создавать системы управления, но и изменять сами производственные процессы, снабжает необходимой информацией для совершенствования технологии, реконструкции и создания новых процессов.

Интенсивное развитие методов построения моделей привело к образованию самостоятельного направления в общей теории управления, которое получило название идентификации объектов управления.

В настоящее время роль идентификации еще больше возросла в связи с тем, что современные методы управления сложными объектами и особенно технологическими процессами, характеристики которых меняются во времени, предусматривают наличие идентификатора в контуре управления. При этом предусматривается непрерывное уточнение модели объекта, на основе которой вырабатывается управляющее воздействие.

Появление быстродействующих электронных вычислительных машин знаменует наступление новой эры в решении многочисленных инженерных, научных и экономических задач. Речь необходимо вести не только о числе простейших арифметических операций, но и об организации сложных вычислительных процессов, а также новых, чисто компьютерных методах решения задач и исследования реальных объектов.

Методами компьютерного моделирования и оптимизации решены многие научные и технические задачи, связанные с организацией функционирования сложных производственных комплексов.

В зависимости от характера описываемых объектов применяются математические модели различных типов. Характерная особенность химико-технологических систем заключается в изменчивости условий функционирования. Это связано с неоднородностью сырья, с меняющимся солевым составом речной воды, с нестабильностью погодных условий и ветрового режима, колебаниями давления и температуры в магистральных трубопроводах и т. д.

Эти обстоятельства приводят к тому, что наиболее подходящим классом математических моделей для идентификации химико-технологических систем являются стохастические модели

Использование универсальных вероятностных моделей коренным образом меняет ситуацию в области компьютерного моделирования и решения практических задач. При этом играют наиболее важную роль следующие обстоятельства.

Во-первых, при подготовке к моделированию конкретного объекта отпадает надобность в дополнительном программировании каких-либо задач. Вместо составления программ производится настройка «универсальной» модели на этот объект. Одно это значительно сокращает трудоемкость подготовки к моделированию.

Во-вторых, структура моделирующего алгоритма для имитации процесса функционирования модуля позволяет размещать сведения о параметрах элементов системы и схемы ее сопряжения во внешней памяти компьютера без сколько-нибудь заметного снижения производительности. Это обстоятельство позволяет моделировать за практически приемлемое время объекты весьма большой сложности.

В-третьих, возможно создание унифицированных форм и процедур ввода в компьютер данных о сложной системе и библиотеки программ перехода от типовых процессов к программным модулям.

И, наконец, в-четвертых, возможно создание унифицированных процедур обработки результатов моделирования и их количественного и качественного анализа.

Не будет преувеличением сказать, что проблема оптимизации является в определенном смысле, пожалуй, самой острой проблемой современности. В любой сфере деятельности человек всегда

ищет оптимальные решения. Оптимальность является той жар-птицей, за которую стоит заплатить обожженными руками.

За многолетнюю историю оптимизации разработано большое число методов, которые в значительной мере связаны с объектом оптимизации, т. е. опираются на сведения о природе и структуре объекта.

Настоящая книга написана инженерами для инженеров. Главная цель — просто и доступно изложить основные идеи и направления в области компьютерного моделирования и оптимизации химико-технологических систем.

Теоретической базой пособия являются основные положения, содержащиеся в многочисленных монографиях и учебниках академика В.В. Кафарова и его коллег и соавторов — В.П. Мешалкина, В.Л. Перова, А.И. Бояринова, И.Н. Дорохова, Л.Н. Липатова.

В основу логической структуры учебного пособия положен принцип преемственности информации, методы организации сбора которой изложены в первой части. Рассматриваются вопросы проблемного инженерного проектирования на стадии предварительного изучения объекта с привлечением творческого потенциала группы экспертов, субъективные мнения которых можно объективно обрабатывать с помощью методов ранговой корреляции и конкордации. Подробно разбираются методы планирования активных экспериментов с построением информационных сетей через проективные геометрии и поля Галуа.

Во второй части на основе собранной информации разбираются методы ее компьютерной обработки с получением полиномиальных моделей высоких порядков, разновидности которых формируются с помощью линеаризующих преобразующих соответствий. Даны алгоритмы вычисления комплексной оценки качества продукции по нескольким признакам с использованием настраиваемой функции желательности. В состав пособия включены вопросы переработки графической информации для анализа и синтеза химико-технологических схем, а также методы математического описания системных объектов и получения моделей функционирования производственных комплексов в условиях псевродинамики.

В третьей части полученные математические модели используются для решения компромиссных оптимизационных задач. В каче-

стве наиболее удачных методов оптимизации подробно описаны и рекомендуются методы случайного локального поиска и деформируемого многогранника с алгоритмом скользящего допуска, т. к. они могут работать с линейными и нелинейными функциями и системами ограничений в виде равенств и неравенств. Оптимизация рецептур описана по методу симплекс-решетчатого планирования экспериментов для получения и анализа диаграмм «состав — свойство». Вследствие естественных колебаний качества сырьевых, энергетических и водных ресурсов, а также влияний на технологические процессы погодных условий инженеру часто приходится корректировать технологические режимы при неполной информации об объекте управления. Поэтому для компьютерной поддержки принятия управленческих решений в условиях неопределенности и риска в пособии использовано математическое обеспечение теории парных матричных игр с нулевой суммой с решением задач в смешанных стратегиях методами итераций и статистических критериев. Для формализации и решения задач рационального распределения ограниченных ресурсов разбирается метод линейного программирования. Исчисление интервальных прогнозов основано на применении математических методов обработки временных рядов, из которых с помощью преобразования Фурье можно получить текущие спектры и, используя окно Кайзера, выделить интересующий диапазон. Предыстория позволяет получить математическую модель процесса в виде авторегрессионной функции и использовать ее для исчисления прогноза и дисперсии прогноза.

При изложении материала в книге использованы отдельные определения и формулировки теории, а также некоторые задачи из источников, приведенных в списке литературы.

В последние годы использованию компьютерных обучающих программных модулей и тренажеров в инженерном образовании уделяется много внимания. Предлагаемая книга имеет приложенный к ней компакт-диск с программными средствами, устанавливаемыми на жесткий диск компьютеров пользователей. Книга, по существу, является методическим дополнением к компакт-диску.

Все эти средства прошли широкую апробацию на ряде кафедр Белорусского государственного технологического университета и в других вузах Беларуси. Многие программные средства базируются

на использовании системных математических моделей, поэтому пользователь должен иметь математическую подготовку на уровне базового курса высшей математики технического вуза.

Названия описанных в книге и размещенных на диске программных средств, естественно, совпадают. Порядок инсталляции приведен ниже.

Подготовка книги к изданию осуществлялась авторами по коллегиальному принципу. При этом материал подразделов 2.6 и 6.4.6 подготовлен совместно с О.В. Германом, подразделов 2.2.4; 5.1.4; 6.5 — совместно с А.А. Лапиковым, программное обеспечение тренажеров 4.1.6, 4.2.5, 6.3.10 осуществляли Ю.Л. Строков, С.Б. Макась, Ю.А. Романов.

Мы понимаем, что в тексте книги или help-файлов тренажеров могут быть неточности или ошибки. Заранее приносим читателям наши извинения. Будем благодарны за все замечания, присланные по адресу: 220050, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Белорусский государственный технологический университет.

Авторы

ВВЕДЕНИЕ

Кому предназначаются компьютерные программные средства?

Прежде всего, тренажеры *не являются развлекательными* компьютерными программными средствами. Их нельзя сравнивать с компьютерными играми, в которых все, что потребуется, так или иначе присутствует на экране, нужно только угадать, какую клавишу нажать в текущий момент. Поэтому «человек с улицы» без предварительной специализированной подготовки в виде прослушанных лекций или самостоятельного изучения материала help-файлов тренажеров ничего, кроме раздражения, не испытает и ничему в профессиональном отношении не научится.

Пакет предназначен для использования при организации и проведении учебных занятий со студентами старших курсов высших технических учебных заведений по природоохранным и химико-технологическим специальностям.

Особенности инсталляции программных модулей

Тренажеры разрабатывались в разное время, поэтому для программирования использовались различные средства: Visual Basic 5, Visual Basic 6, Delphi 3, Delphi 5, Visual C++ (рис. 1–5).

Файлы типа *EcoGame_Install.exe* — самораспаковывающиеся и самоустанавливающиеся.

Поскольку в состав инсталляционного пакета входят файлы Vbrun60.exe, обеспечивающие обработку программ, полученных

с помощью Visual Basic 6, то при установке программ на компьютеры, на которых нет этой среды, прежде чем записывать системные файлы при конфликте версий Setup спросит сохранять или заменять имеющиеся файлы. На запрос рекомендуется ответить «Нет для всех».



Рис. 1. Установка программного модуля, полученного с помощью Wise Install Master

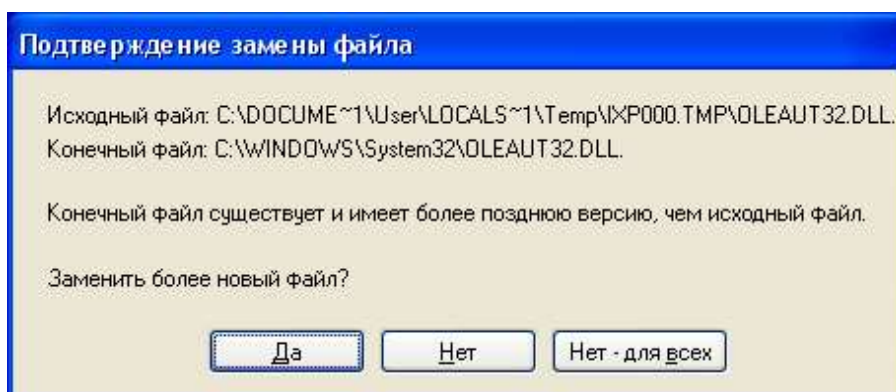


Рис. 2. Диалоговое окно, возникающее при установке программ, полученных с помощью Visual Basic 6, из инсталляционного пакета, созданного с помощью Wise Install Master



Рис. 3. Инсталляция модуля, разработанного в среде Delhi 3, с помощью Install Shield

Настройки стандартов компьютеров могут не совпадать со стандартами представления чисел в программных продуктах. Поэтому при затруднениях с запуском можно посоветовать перенастроить разделитель целой и дробной частей числа. Десятичную точку сменить на запятую или наоборот. «Пуск» — «Настройка» — «Панель управления» — «Язык и стандарты».



Рис. 4. Инсталляция модуля, разработанного в среде Visual C++, полученного с помощью Wise Install Master

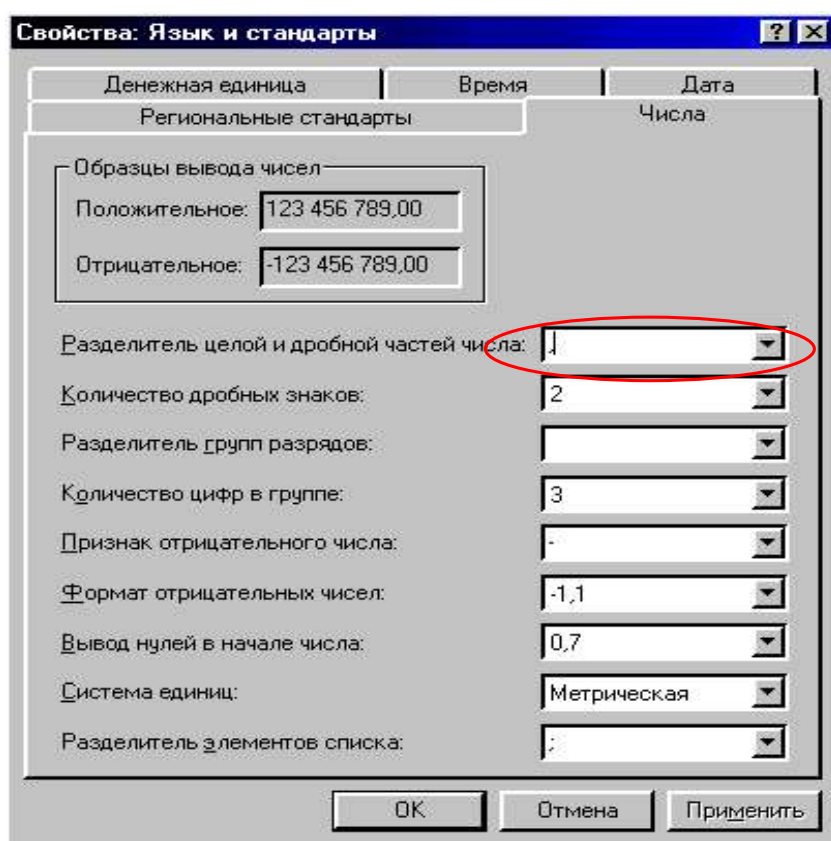


Рис. 5. Изменение разделителя целой и дробной частей чисел

Для корректной работы тренажеров мы рекомендуем их установку начать с пакета Ienaks. Инсталлированный на винчестер, при загрузке он выдает картинку (рис. 6).



Рис. 6. Привет от автора

1. ГЕНЕРИРОВАНИЕ ИНФОРМАЦИИ НА СТАДИИ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО ИЗУЧЕНИЯ ОБЪЕКТА

1.1. ПОНЯТИЕ ИНФОРМАЦИИ

Термин «информация» широко применяется как в современной науке, так и во всей человеческой практике. Фактически вся деятельность человека связана с *получением, переработкой, передачей, хранением информации*. Мы живем в мире, насыщенном разнообразной информацией, без нее само наше существование невозможно.

1.1.1. Терминология

Термин «информация» имеет несколько значений:

- совокупность каких-либо сведений, знаний о чем-либо;
- сведения, являющиеся объектом хранения, передачи и переработки;
 - совокупность количественных данных, выражаемых при помощи цифр или кривых, графиков и используемых при сборе и обработке каких-либо сведений;
 - сведения, сигналы об окружающем мире, которые воспринимают организмы в процессе жизнедеятельности;
 - в биологии — совокупность химически закодированных сигналов, передающихся от одного живого объекта другому (от родителей потомкам) или от одних клеток, тканей, органов другим в процессе развития особи;
 - в математике, кибернетике — количественная мера устранения энтропии (неопределенности), мера организации системы;

• в философии — свойство материальных объектов и процессов сохранять и порождать определенное состояние, которое в различных вещественно-энергетических формах может быть передано от одного объекта другому; степень, мера организованности какого-либо объекта (системы).

Определения 1–4 трактуют информацию как сведения, данные, сообщения, сигналы, подлежащие передаче, приему, обработке, хранению и отражающие реальную действительность или интеллектуальную деятельность (шенноновская информация).

Во всех определениях, кроме последнего, информация рассматривается как объединяющая категория, которую можно объяснить через более простые категории. В последнем определении информация — изначальная, неопределяемая категория, которую нужно изучать через ее свойства, т. е. информация материальна, как вещество и энергия, проявляется в тенденции материи к организации, выражает способность организованной материи к предопределению своих состояний.

Физически информация определяет предсказуемость свойств и поведения объекта во времени — чем выше уровень организации, тем менее подвержен объект действию среды.

Количество и ценность информации — взаимодополняющие категории. Можно говорить о «количестве ценной информации» применительно к заданной цели, подобно тому, как мы говорим о «количестве ценного вида вещества» или о «количестве ценного вида энергии».

Энтропия есть мера беспорядка, негентропия — мера порядка, организованности. Определения негентропии в физике нет, существует интуитивное восприятие этого понятия. Организованность есть первичная категория.

Основная особенность понятия информации, заимствованного из теории связи, состоит в абстрагировании от смыслового содержания информации и использовании только ее количественной меры. Однако для решения большинства задач необходимо оперировать количественными характеристиками смыслового, или семантического, содержания информации.

Поэтому полезно рассматривать обе концепции понятия информации: одну, основанную на вероятностном подходе к процессам преобразования информации, вторую — на использовании понятия тезауруса информации. Тезаурус (в переводе с греческого «сокрови-

ще») — словарь, в котором показаны семантические отношения между лексическими единицами.

Некоторые полезные термины и их толкование.

Мнемоника — совокупность приемов, имеющих целью облегчить запоминание возможно большего числа сведений.

Семантика — раздел семиотики, изучающий знаковые системы как средства выражения смысла, т. е. правила интерпретации знаков и составленных из них выражений.

Эвристика — совокупность логических приемов и методических правил теоретического исследования и отыскания истины, наука, изучающая творческую деятельность.

Наука есть система знаний о законах функционирования и развития объектов:

- наука фиксируется в максимально определенном языке;
- наука представляет знание, эмпирически проверяемое и подтверждаемое;
- наука представляет систему возрастающих, использующихся знаний;

В состав науки входят:

- предмет;
- теория;
- гипотеза;
- метод;
- факт.

Научная теория объясняет надежно установленные факты, не противоречит другим работающим теориям, предсказывает возможность получения новых результатов, указывает путь развития по законам внутренней логики.

Технология — способ освоения человеком материального мира посредством социально организованной деятельности, включающий три компонента:

- научные принципы;
- орудия труда;
- людей, владеющих профессиональными навыками.

Проблема — совокупность (и неопределенность) задач при их целостности. Признак проблемы — наличие частных решений как следствий.

1.1.2. Количество информации

В классической теории информации известно, по крайней мере, два определения количества информации. Оба очень близки между собой, принципиальное различие между ними появляется лишь при попытке ввести смысловое содержание информации. Первое определение (по Хартли) использует комбинаторный подход, второе (по Шеннону) вводит в понятие информации вероятностную точку зрения. Чем больше неопределенности в принятом сообщении, тем больше информации в нем содержится.

1.1.2.1. Количество информации по Хартли. Для измерения количества информации введена специальная единица измерения, которая называется бит (bit) информации. Так, при наличии двух равновероятных событий в отсутствие шумов

$$I = -\log_2\left(\frac{1}{2}\right) = 1 \text{ bit}; \quad \log_a N = x; \quad a^x = N; \quad 2^x = \frac{1}{2}; \quad 2^x = 2^{-1}. \quad (1.1)$$

Начнем с простого примера. Поезд подходит к станции. Используя переключатель дистанционного управления железнодорожной стрелкой, диспетчер может направить поезд либо на путь *A*, либо на путь *B*. Если переключатель поставить в «верхнее положение», стрелка откроет путь *A*, а если в «нижнее» — путь *B*. Ставя переключатель в то или другое положение, диспетчер тем самым посылает управляющий сигнал, содержащий информацию в один **бит**. Слово «бит» происходит от словосочетания binary digit, которое в переводе с английского означает «двоичная цифра».

Если на железнодорожной станции восемь путей: *A, B, C, D, E, F, G, H*, то чтобы направить поезд на путь *A*, надо поставить все три переключателя в положение 0, т. е. подать систему сигналов 000. Чтобы направить поезд на путь *B*, надо подать систему сигналов 001. Каждому пути отвечает свой набор сигналов:

<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>G</i>	<i>H</i>
000	001	010	011	100	101	110	111

Мы видим, что для выбора одного из восьми исходов нужен всякий раз набор из трех элементарных сигналов, каждый из которых

несет информацию в 1 бит. Следовательно, всякий раз нужна информация в 3 бита.

Итак, чтобы выбрать один вариант из двух, нужен 1 бит информации, чтобы выбрать один вариант из восьми, нужны 3 бита информации. Для выбора одного из N вариантов нужна информация в I битов:

$$I = \log_2 N. \quad (1.2)$$

Это есть **формула Хартли**. Она предложена в 1928 году американцем Хартли, который занимался вопросами количественной оценки информации.

Сообщение, как правило, набирается или составляется из символов или элементов: буквенного алфавита, цифр, слов или фраз, названий цвета, предметов и т. д. Обозначим общее число символов в алфавите через m . Если сообщение формируется из двух независимо и равновероятно появляющихся символов, то нетрудно видеть, что число возможных комбинаций равно m^2 . Действительно, зафиксировав один из двух символов сообщения ($n = 2$) и комбинируя его со всеми возможными символами алфавита, получим m различных сообщений. После этого фиксируем следующий символ алфавита и снова его комбинируем со всеми символами алфавита, получим еще m сообщений. С учетом предыдущего имеем $2m$ сообщений. Продолжив этот процесс до тех пор, пока не будет зафиксирован последний символ алфавита, получим всего $mm = m^2$ сообщений. В общем случае, если сообщение содержит n элементов (n — длина сообщения), число возможных сообщений $N = m^n$.

Ответ «да–нет» не всегда содержит 1 бит информации. 1 бит — это *максимальная* информация, которая может содержаться в одном ответе. В таком случае и двоичная цифра не всегда несет информацию в 1 бит.

Тогда как же быть с данным выше определением бита информации? И можно ли пользоваться формулой Хартли? Все, что говорилось ранее, остается в силе, но с одной оговоркой: **варианты должны быть равновероятными**.

1.1.2.2. Количество информации по Шеннону. Управление возможно в мире, где необходимости диалектически противостоит случайность. Чтобы управлять, надо иметь выбор. Ситуация, в которой

мы хотим осуществить управление, должна нести в себе неопределенность. Неопределенность можно сопоставить с нехваткой информации. Осуществляя управление, мы вносим информацию и тем самым уменьшаем неопределенность.

Часто приходится выбирать между вариантами, не являющимися равновероятными, и тогда необходимо принимать во внимание *вероятность выбора того или иного варианта*. Предположим, что задается вопрос, ответ на который имеет два исхода — «да» или «нет». Если оба исхода равновероятны, то ответ несет информацию ровно в 1 бит. Если же исходы «да» и «нет» имеют разную вероятность, то в ответе содержится информация меньше 1 бита, причем тем меньше, чем сильнее различаются вероятности исходов. В предельном случае, когда вероятность «да» (или «нет») обращается в единицу, ответ вообще не содержит информации.

Итак, будем полагать, что различные исходы (различные варианты) характеризуются разными вероятностями.

Пусть имеем алфавит, состоящий из m элементов (символов) $h_1, h_2, \dots, h_i, \dots, h_m$. Вероятности появления этих элементов в сообщении соответственно равны $p_1, p_2, \dots, p_i, \dots, p_m$. Составим из этих элементов сообщение, содержащее n элементов. Среди них будет n_1 элементов h_1, n_2 элементов h_2, \dots, n_m элементов h_m . Вероятность появления каждой комбинации из n элементов выразится произведением вероятностей отдельных элементов, так как предполагается, что появление каждого элемента есть независимое событие. С учетом повторяющихся элементов вероятность некоторого сообщения

$$p = p_1^{n_1} p_2^{n_2} \cdots p_m^{n_m} = \prod_{i=1}^m p_i^{n_i}. \quad (1.3)$$

Вероятность появления одного символа

$$p_i = \frac{n_i}{n}. \quad (1.4)$$

Можно считать, что все N возможных сообщений (все перестановки) равновероятны. Поэтому

$$p = \frac{1}{N} = \prod_{i=1}^m p_i^{n_i}, \quad (1.5)$$

откуда число возможных сообщений

$$N = \frac{1}{\prod_{i=1}^m p_i^{np_i}}. \quad (1.6)$$

Логарифмируя, получаем количество информации в сообщении длиной n при неравновероятности его элементов:

$$Q = \log N = -n \sum_{i=1}^m p_i \log p_i. \quad (1.7)$$

Это соотношение является одним из основных в теории информации. Его называют **формулой Шеннона**.

Предположим, что исходы равновероятны — значения x_i случайной величины X реализуются с одинаковой вероятностью p . Эта вероятность равна, очевидно, $1/N$.

В данном случае получаем

$$Q = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N \log_2 N = \frac{1}{N} \cdot N \cdot \log_2 N = \log_2 N, \quad (1.8)$$

т. е. приходим к формуле Хартли. Мы видим, таким образом, что формула Хартли получается из формулы Шеннона как **частный** случай — когда все исходы равновероятны.

Количество информации может уменьшаться также из-за того, что в силу особенностей языка различные символы с разной вероятностью появляются в тексте сообщения. Так, на 1000 букв приходится следующее количество повторений (табл. 1).

Таблица 1

Частоты использования букв в английском и русском алфавитах

Английский язык		Русский язык	
Буква	Частота повторения	Буква	Частота повторения
<i>E</i>	131	<i>О</i>	110
<i>T</i>	105	<i>Е</i>	87
<i>A</i>	86	<i>А</i>	75
<i>O</i>	80	<i>И</i>	75
<i>N</i>	71	<i>Т</i>	65
<i>K</i>	68	<i>Н</i>	65
<i>I</i>	63	<i>С</i>	55

Так, свойство буквы E в английском языке встречаться чаще буквы I позволяет предсказывать, предопределять сообщение, т. е. неравновероятное, неравномерное появление символов в сообщении уменьшает количество информации в принимаемом сообщении.

Современный развитый язык насчитывает в своем составе до 100 тыс. слов. Однако не все они одинаково часто употребляются. В среднем достаточно знать несколько тысяч слов, чтобы изъясняться. Слова в языке также обладают разной вероятностью появления. Очевидно, что неравномерное распределение вероятностей появления отдельных слов в языке (максимум одних и минимум других) также уменьшает количество информации, так как можно предсказать появление тех или иных слов в сообщении.

1.1.3. Понятие энтропии информации

Количество информации на один символ сообщения носит название энтропии:

$$H = \frac{Q}{n} = -\sum_{i=1}^m p_i \log p_i. \quad (1.9)$$

Энтропия характеризует ансамбль сообщений с заданным алфавитом и является мерой неопределенности, которая имеется в ансамбле. Действительно, длина сообщения n имеет в известном смысле второстепенный характер: можно посылать длинные или короткие телеграммы, сочинять длинные или короткие стихотворные произведения, писать маленькие или большие полотна. Главное — определить, узнать статистические свойства данного ансамбля сообщений независимо от длины сообщения. Например, интересно узнать статистические особенности ансамбля стихотворных произведений Лермонтова, музыкальных произведений Бетховена. Одним из таких параметров, которые характеризуют свойства ансамбля сообщений, и является энтропия.

Можно говорить об энтропии не на отдельный символ, а на n символов, где $n = \text{const}$ для всех сообщений. В этом случае, очевидно, что понятия энтропии и количества информации совпадают. Чем больше энтропия, тем больше информации несет в себе сообщение.

1.1.4. Генерирование информации

Прежде всего необходимо выяснить, откуда берется информация, увеличивающая сложность. Увеличение элементного состава требует преобладания вещественной и энергетической ассимиляционных компонент метаболизма, уменьшение энтропии — преобладания информационной компоненты.

Развитие системы является следствием ее взаимодействия со средой. Ингредиенты развития черпаются из среды и усваиваются системой после соответствующей обработки, которая должна превратить компоненты среды в компоненты, ценные для системы. Чтобы система развивалась, она должна обладать способностью генерировать ценные структурные формы, используя сырьевую базу среды.

Чтобы создать нечто ценное, необходим образец того, что создаешь, либо программа созидания, либо способ отбора удачных случайных событий.

Генерирование информации означает увеличение ее ценности.

Ö áí í î ñòù èí ò î ðì àöèè — ñðááí èðáèüí àÿ èàðááí ðèÿ, î í à ì î - æáð èçì áðÿòüñÿ î ðí î ñèðáèüí î î ðí ø èí áí èèè áóáóù ááí ñèñòáì ù èèè î ðí î ñèðáèüí î ñðááù . Í î ñðááà èçì áí ÷èáà, ñèó÷àéí à, áá ñáí éñòáà òí èüèí ÷àñðè÷íí çááèñÿò î ð ñèñòáì ù . Î î ÿòí î ó î áðñí áèðèáí óð òáí - í î ñòù èí ò î ðì àöèè ì î æí î î î ðáááèèòù òí èüèí í à î ñí î ááí èè î ðí - áí î çà ñðááù .

Òí, ÷òí î áðáí èçì ù «èí ò î ðì àöèèííí áí ñàì î î áí î áèáí èÿ», «ñàì î - èí ñòðóèðèðí ááí èÿ» ñòù áñòáóð òðááèüí î, í á î î áèáæèòñí î í áí èð : í í è î ðí ÿáèÿð òñÿ á áèí èí áè÷àñèèð ñèñòáì àð, î ðí èçáí áñòáá. × áðí àÿ ñù - ðùá è ÿí áðáèð èç «ñðááù », î ðí èçáí áñòáí î î æáð î î èí î ñòùð áí ññòá - í î áèòù àì î ðèçàèèííí ù á î î ðáðè è ðáñø èðèòüñÿ, ó÷àñðèá èð ááé î ðè ÿòí î î áðáí è÷èòñÿ î ðááí èñáí í ù ì è, ò. á. í áðáí ð÷àñèè è, ò óí èòèÿì è; áí î èí á áí çì î æí î ááòí î àðè÷àñèí á ñàì î áí ñí ðí èçáí àÿù ááñÿ î ðááí ðè - ÿðèá — èèááðí àðè÷àñèàÿ ñèñòáì à.

«Ááí áðèðí ááí èá» èí ò î ðì àöèè î ðí ð äü í á ñèí í í èí «ñí çááí èð ». Í ù áí áí ðèí î «ááí áðèðí ááí èè» ÿí áðáèè, òááðáí î î í èí àÿ, ÷òí ÿí áð - áèÿ í á ñí çáááòñÿ, à î ðáí áðàçóáòñÿ èç î áí î áí áèáà á áðóáí é, áí èáá «òáí í ù è» á ááí í í èí í èðáòí î ñèó÷àá, î ðè÷àí áñÿèèè î ðí òáññ áá - í áðèðí ááí èÿ ÿí áðáèè ñí î ðí áí æáááòñÿ áí èüø èì è èèè ì áí üø èì è ÿí áðááðè÷àñèè è î î ááðÿì è.

Точно так же следует понимать генерирование информации: преобразование одного информационного кода в другой, более ценный для системы, генерирующей информацию. При этом возможны информационные потери.

Схема программы генерирования информации включает:

- распознавание в среде компонент, обладающих соответствующей информационной структурой;
- отбор этих компонент из многокомпонентной среды;
- предварительная обработка, состоящая в отщеплении ценных информационных блоков — микроблоков, т. е. в отделении частей, необходимых системе;
- объединение группы ценных информационных микроблоков в единый макроблок;
- присоединение макроблока к подготовленному заранее макроблоку или программе генерирования информации;
- использование новой, усложненной, программы для дальнейшего генерирования информации.

Уровень детерминизма и роль случайности такой схемы определяются соотношением между свойствами системы и среды.

Поскольку обрабатывать и присоединять можно и то, о чем знаешь очень мало, исходная программа может быть несравнимо менее информативной, чем конечный результат, и даже менее, чем присоединяемые макроблоки.

В сложных системах часто применяется двухканальный прием информации от среды. По первому каналу вводится долговременная информация относительно медленноменяющихся (квазипостоянных) свойств среды, по второму каналу — оперативная информация относительно быстроменяющихся свойств среды.

Изложенные соображения позволяют отметить два способа генерирования информации.

Первый способ характеризуется ассимиляцией готовых вещественных структур среды, последовательно наращиваемых системой по определенному плану. Информационный код этих структур образует генерируемую информацию. Будем называть этот способ самоорганизацией. Самоорганизация включает рост и размножение системы.

Второй способ характеризуется ассимиляцией информации и отображением среды, формированием по определенному плану до-

полнительных связей в подготовленной вещественной структуре. При этом способе информация генерируется без увеличения элементного состава. Будем называть этот способ обучением.

Полное развитие системы предполагает эффективное сочетание обоих способов генерирования информации.

1.2. ПРОБЛЕМНОЕ ИНЖЕНЕРНОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ НА СТАДИИ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО ИЗУЧЕНИЯ ОБЪЕКТА

Развитие науки и резкое увеличение числа научных открытий требуют от инженеров знания фундаментальных наук, которые составляют основу инженерного образования. Поэтому инженер сталкивается с необходимостью знать современные научные достижения и уметь применять их для решения практических вопросов.

Хотя новые сложные проблемы, стоящие перед инженерами, требуют учета социальных и политических факторов и хотя для принятия решений необходимы научные знания, все же нужно сказать, что важнейшие задачи инженера по-прежнему связаны с проектированием и разработкой технологических процессов.

Ни одно правительство или фирма не в состоянии позволить себе сделать все, что они в данный момент захотят. Необходимо наличие экономических ресурсов, и инженер-проектировщик, если он собирается принимать какие-либо важные решения, должен знать экономические возможности как в масштабах своего отдела, так и в масштабе фирмы, страны и всего мира в целом. В данном случае знание этого вопроса означает нечто большее, чем умение чеканить фразы о важности прибыли и достоинствах «свободного» предпринимательства, и предполагает понимание таких факторов, как загрязнение рек и учет людских и других ресурсов, благодаря которым общество становится богатым, а экономика — эффективной.

Задача инженерного проектирования почти всегда формулируется следующим образом: разработать при некоторых ограничениях, обусловленных способом решения, элемент, систему или процесс, обеспечивающие оптимальное выполнение поставленной задачи при некоторых ограничениях, налагаемых на решение.

При решении инженерных задач имеют место ограничения *двух* видов. Одна группа ограничений относится к методу решения задачи и охватывает такие вопросы, как наличие знаний, сроки и имеющиеся в распоряжении лабораторное оборудование и вычислительная техника. Другая группа ограничений относится к самому решению задачи и связана с действием таких факторов, как физические ограничения, издержки, наличие материалов, оборудования или производственного мастерства.

1.2.1. Процесс инженерного проектирования

Первым этапом является изучение и уяснение цели или задачи. Цель может определяться заданием или вытекать из характера работы.

Второй этап процесса инженерного проектирования — описание более конкретной задачи, которая должна быть решена для достижения общей цели. Если, например, общей целью является получение пресной воды из морской, то возможным путем решения нашей задачи будет создание ядерной энергетической установки для опреснения морской воды методом испарения. Другим путем решения этой же задачи может быть также создание установки для химического опреснения воды или солнечной установки. Заметим, что выбор пути решения задачи предполагает принятие решения.

На следующем этапе инженерного проектирования обычно требуется, чтобы инженер-проектировщик получил некоторую идею — новую или старую, по-новому примененную к решению его задачи. Ему нужно сформулировать способ решения или составить общее представление о задаче. Иногда для этого требуются огромное творческое воображение, искусство и изобретательность, а иногда — это просто шаблонное применение известного принципа или его пересмотренного варианта. В значительной мере качество решения определяется качеством идеи или принципа, использованных на данном этапе. В определенном смысле этот этап представляет собой основу процесса проектирования.

Как только идея или способ решения задачи найдены, инженер должен проанализировать принятую идею. Инженерный анализ требует четкого определения задачи или вопроса, которые должны решаться, построения модели, настолько простой, что ее можно будет

проанализировать за приемлемое время, и в то же время настолько сложной, что полученные с ее помощью результаты будут достаточно содержательны. Инженерный анализ этой модели должен основываться на применении физических принципов и нахождении численных результатов. Сюда входят также проверка, оценка, обобщение и оптимизация результатов.

При решении любой задачи может потребоваться многократное повторение любого из этапов, и движение будет происходить как вперед, так и назад.

Задача науки состоит в открытии законов, а задача анализа — в определении воздействия на входе системы для получения заданного выхода или определения выхода по заданному входному воздействию.

Вследствие того, что анализ связан главным образом с такими случаями, когда задан выход, задача нахождения воздействия на входе при требуемом выходе называется *инверсным анализом*.

Изобретательство, инженерный анализ и принятие решений представляют собой три процесса интеллектуальной деятельности. Изобретательство — это получение или генерация ряда вариантов, инженерный анализ — детальное изучение одного из вариантов, а принятие решений — выбор одного из числа имеющихся вариантов.

1.2.2. Методы проблемного инженерного проектирования в химической технологии

Как правило, большинство студентов технических специальностей не любят изучать изобретательство. Здесь слишком много неясного. Инженеры же любят конкретные реальные вопросы и задачи, которые четко сформулированы. Поэтому они чувствуют себя неловко в связи с той неопределенностью, которая окружает все изобретательство. Такая позиция имеет неблагоприятные последствия и наносит ущерб деятельности инженеров. Это приводит к нежеланию заниматься нечетко сформулированными задачами, а следовательно, и новыми задачами, которые всегда сформулированы нечетко. Изобретательность является важным качеством инженера, и хотя сказано и написано много глупостей о способах развития творческих способностей, все же известны и кое-какие полезные и ценные материалы о получении новых идей.

1.2.2.1. Понятие творческой деятельности. Каковы отличительные признаки тех предметов, процессов, решений задач, идей или произведений искусства, которые принято называть творческими?

Прежде всего, следует указать на такое их качество, как *новизна* или *уникальность*. Это очевидное условие, не требующее пояснения.

Во-вторых, творческими называются вещи, которые либо *полезны*, как, например, различные промышленные изделия, либо имеют большую *ценность*, как, например, произведения искусства. И хотя идея, вещь, процесс или картина могут быть новыми или уникальными, но если они никогда не были и никогда не будут кому-нибудь полезны и к тому же ни для кого не представляют ценности, то их уже нельзя считать творческими. В отличие от них творческая вещь либо имеет определенное утилитарное назначение, либо прекрасна, либо обладает тем и другим качествами одновременно.

Третье качество вещей, процессов и решений, которые принято называть творческими, состоит в том, что они вносят *простоту* там, где раньше была сложность. Это качество часто называют *изяществом*. Новые простые решения сложных задач изящны, и их можно назвать творческими. Новые, но сложные решения простых задач нельзя назвать творческими.

Для творческих решений характерно также создание *новых соотношений*. Прежде не связанные между собой элементы при объединении часто дают новый единственный в своем роде эффект, или решение.

Таким образом, любые вещи независимо от того, являются ли они материальными предметами, идеями, теориями, художественными произведениями и т. д., могут называться творческими в том случае, когда они обладают тремя основными признаками:

- новизной и уникальностью;
- полезностью или ценностью;
- изяществом.

1.2.2.2. Процесс творчества. Этапы творческого процесса:

- подготовка: накопление знаний и совершенствование мастерства, формулировка задачи;
- концентрация усилий: упорная работа с целью получить решение;
- передышка: период умственного отдыха, когда изобретатель отвлекается от решаемой задачи;

- озарение: получение новой идеи или видоизменение уже известной, которая является искомым решением;
- доведение работы до конца: обобщение, оценка.

Если от творческой деятельности ждут результатов, то необходимо создать такие условия для решения задачи, чтобы сам процесс изобретательства протекал в наиболее благоприятной обстановке. Если кто-либо берется за решение задачи без должной подготовки или не выделяет времени на концентрацию усилий или на передышку, то вряд ли можно ожидать, что его деятельность окажется плодотворной.

1.2.2.3. Психологическая инерция. Психологическая инерция — это игнорирование всех возможностей, кроме единственной, встретившейся в самом начале.

Тенденция к использованию определенного метода для решения вырабатывается привычкой либо может определяться складом характера. Каждый из нас испытывал нежелание отказаться от любимой идеи. «Склонность к изобретательству» рассматривается как универсальное достоинство. Однако настойчивость, если она заходит слишком далеко, может перерасти в упрямство. Если кто-либо ставит своей целью, несмотря ни на что, реализовать какой-либо конкретный метод вместо того, чтобы найти наилучший, то в этом случае налицо психологическая инерция.

Определенные обстоятельства усиливают психологическую инерцию или способствуют ее появлению, например нетерпение или состояние напряжения. Немногие получают «правильные» ответы, если они вынуждены торопиться или находятся в состоянии напряжения по другой причине. Этот же эффект обнаруживается и при других обстоятельствах. В условиях опасности или при волнении люди гораздо упорнее придерживаются прежних решений, методов и привычек. При опасности человек редко отваживается на что-либо неизведанное.

Знакомство с вопросом также усиливает психологическую инерцию. Известные нам объекты, процессы или идеи редко используются в новом качестве. Существует также эффект, называемый *функциональной устойчивостью*. Доказано, что предметы, выполняющие в данной ситуации обычные для них функции, редко используются в новом качестве. Психологическая инерция, обус-

ловленная знакомством с предметом и его назначением, вполне обычное явление.

Психологическая инерция влияет также и на обучение. Понять — значит увидеть. Экспериментаторы показали, что люди в большей мере стремятся узнать те факты, которые подтверждают их мнения, чем те, которые противоречат их убеждениям.

Таким образом, психологическая инерция является серьезной помехой творческому подходу как к общественной и политической деятельности, так и к изобретательской деятельности в области техники.

К счастью, психологическую инерцию все же можно преодолеть. С ней относительно легко справиться, просто *помня о ней*.

1.2.2.4. Тренировка с целью преодоления психологической инерции. Тренировка для преодоления психологической инерции имеет целью разрушить традиционную схему взглядов и представлений. Идея состоит в том, чтобы научиться преодолевать хотя бы на некоторое время привычку человека к данным условиям. В большинстве случаев тренировка в преодолении психологической инерции начинается с определения совершенно незнакомых физических условий. Например, один из способов состоит в описании окружающей среды на некоторой воображаемой планете. Затем предлагается разработать проекты инженерных сооружений с учетом этих условий. Поскольку в этих условиях традиционные решения неприемлемы, психологическая инерция преодолевается. Например, сила тяжести, если она вообще существует, может быть направлена вверх или по окружности или будет то возрастать, то убывать. Обитатели планеты могут быть одноногими, или слепыми, или же обладать некоторыми сверхчеловеческими способностями. Имеется бесчисленное множество проблем, связанных с проектированием для этой планеты зданий, средств сообщения и т. п. Потрудившись над их решением, человек уже не вернется к земным задачам с убеждением, что существует только единственно возможный способ создания вещей.

1.2.2.5. Метод «мозгового штурма». Известно, что критика или даже боязнь критики служит помехой творческому мышлению. Разумеется, любая новая идея может оказаться неверной. Если автор боится критики, которая может быть вызвана тем, что идея его плоха, то он не захочет испытывать или высказывать непроверенные

мысли. В этом случае многие потенциально хорошие идеи (или мысли, которые могут вызвать эти идеи у других) оказываются потерянными. Чтобы устранить препятствия, вызываемые боязнью критики при генерировании идей, был разработан так называемый метод «мозгового штурма» (brainstorming).

Этому методу уделялось большое внимание в печати в прошлом, поэтому многие уже слышали о нем. Однако его нельзя рассматривать как универсальное средство. С этим методом связаны определенные успехи и неудачи. Для эффективного применения метода «мозгового штурма» необходимо представлять себе его возможности и знать, как и когда его целесообразно применять. Если этот метод применяется правильно и в соответствующих условиях людьми, которые знают, как его применять, то он может служить мощным средством генерирования идей.

Несмотря на распространенное мнение, применять метод «мозгового штурма» все же довольно трудно, и для этого нужна серьезная тренировка. Часто этот метод ни к чему не приводит. Применяя его, необходимо соблюдать следующие правила.

Первое из правил состоит в том, что любая критика и вынесение суждения — благоприятного или неблагоприятного — не допускаются. Поскольку люди имеют привычку все подвергать критике, такая отсрочка в вынесении суждения — наиболее жесткое и наиболее важное правило.

Второе правило заключается в генерировании *большого числа* идей. Кроме того, одна идея может породить другую. К тому же нелегко сразу выпалить идею, как только она приходит в голову, не оценив ее (т. е. не вынеся суждения о ней). Однако когда критика не допускается, каждая идея так же хороша, как и любая другая. При «мозговом штурме» чем больше идей, тем лучше.

Третьим правилом является необходимость *свободно высказывать свои мысли*. Нужны разнообразные идеи. При окончательном разборе, который состоится позднее, многие идеи окажутся бесполезными, однако сам процесс должен происходить таким образом, чтобы поток идей был бурным, и они следовали друг за другом как можно быстрее. При «мозговом штурме» коллективный разум группы должен генерировать непрерывную последовательность идей.

При использовании метода «мозгового штурма» для инженерно-

го проектирования в целях получения наилучших результатов рекомендуется, чтобы члены группы не были лично заинтересованы в рассматриваемой задаче и не были слишком глубоко связаны друг с другом. Очевидно, они должны иметь общее представление о задаче, знать и понимать ее, но не обязаны быть специалистами по рассматриваемому вопросу. Позже специалисты могут дать свое заключение об этих идеях и подробно развить их.

Метод «мозгового штурма» лучше всего использовать для решения задач, которые не являются точными или специальными. При решении очень сложных задач и задач технического характера эффективность применения этого метода менее вероятна, чем при решении задач более общего типа.

При соответствующих условиях и при наличии людей, знающих, как применять указанные правила, «мозговой штурм» может оказаться ценным методом, позволяющим получать новые идеи.

1.2.2.6. Инверсия. Придумать новую задачу очень трудно. Значительно чаще встречаются новые методы решения. Многие новые решения получают благодаря новому подходу к известной задаче.

Одним из способов получения новой точки зрения является так называемый метод инверсии. Он требует сознательного преодоления психологической инерции, отказа от прежних взглядов на задачу с тем, чтобы посмотреть на нее с некоторой новой или измененной позиции.

Если некоторый объект обычно рассматривается снаружи, то применение метода инверсии означает, что теперь он будет исследован изнутри. Если в рассматриваемом устройстве некоторая деталь всегда располагалась вертикально, то инверсия означает, что ее перевертывают вверх дном, ставят в горизонтальное положение или помещают под некоторым углом. Если одна часть системы движется, а другая неподвижна, то инверсия означает, что эти части меняются местами. Перевернуть вверх дном, вывернуть наизнанку, поменять местами — эти слова характеризуют существо метода инверсии, используемого для получения новых идей.

1.2.2.7. Аналогия. Большое число оригинальных мыслей рождается по аналогии, и этот процесс можно с успехом применять для стимулирования новых идей. Часто решение задач подсказывается аналогичными ситуациями, встречающимися в других задачах, при-

роде или даже художественной литературе. Использование аналогичных инженерных решений, особенно заимствованных из других областей, для получения новых идей довольно просто, однако здесь уместно показать, каким образом наблюдение за другими вещами значительно расширяет знания, которые можно использовать при решении данной задачи.

Получение идей для инженерных решений путем использования аналогий с механизмами живой природы также несложно, однако для большинства инженеров это очень трудно, так как у них отсутствует даже начальная подготовка в области биологии, и особенно в области физиологии. Природа изобрела так много способов создания различных вещей, что она в изобилии дает новые идеи, которые можно использовать для решения инженерных задач. Например, в природе существуют буквально сотни различного рода «насосов», каковыми являются сердца и другие органы разных животных.

Для использования аналогий из области литературы необходимо хорошее знание художественной литературы, фольклора, мифологии и научной фантастики. Это означает, что из литературы берется реальная или фантастическая идея и применяется в рассматриваемой инженерной задаче либо самостоятельно, либо в некотором видоизмененном виде или же используется другая идея, подсказанная данной. Например, некоторую идею может дать зеркало Алисы. Лилипуты из «Путешествий Гулливера» были довольно грамотными инженерами.

Аналогия является обильным источником новых идей и может использоваться с успехом.

1.2.2.8. Эмпатия. Эмпатия означает отождествление личности одного человека с личностью другого и проникновение его в чувства другого лица. Она часто используется в сфере человеческих отношений и характеризует то состояние, когда приходится ставить себя в положение другого.

Этим термином можно определить также и отождествление человека с разрабатываемым предметом, деталью или процессом. Задача состоит в том, чтобы «стать» деталью и посмотреть с ее позиции и ее точки зрения, что можно сделать.

Эмпатия требует от человека определенного вхождения в образ.

Этому способствуют природная одаренность и нескованность, однако большинство людей могут применять данный метод при соответствующей тренировке. Этот метод очень полезен для получения новых идей.

И эмпатия, и аналогия полезны как при работе в одиночку, так и в составе группы. «Мозговой штурм» обычно используется как групповой метод, хотя некоторые утверждают, что его можно применять и при работе в одиночку. Разумеется, всегда нужно проявлять такт, обычно лучше давать идеям благожелательную оценку, чем отрицательную.

1.2.2.9. Фантазия. Фантазия — это воображение, она связана с желанием, чтобы произошло то, чего хочется. Использование фантазии для стимулирования новых идей заключается в размышлении над некоторыми фантастическими решениями, в которых при необходимости используются нереальные вещи или сверхъестественные процессы.

Часто бывает полезно рассмотреть идеальные решения, даже если это сопряжено с некоторой долей фантазии. Разумеется, есть надежда, что размышление о желательном может натолкнуть нас на новую идею или точку зрения, которая, в конечном счете, приведет к новому, осуществимому решению.

1.2.2.10. Систематическое исследование новых комбинаций. Процессам, называемым творческими, присуще следующее качество: к ним приходят в результате использования новых соотношений между различными, ранее не связанными между собой параметрами. Это означает, что творческие решения часто находятся путем создания новых комбинаций вещей, процессов или идей. Отсюда следует, что систематическое исследование новых комбинаций может оказаться полезным средством, способствующим изобретательству.

1.2.3. Примеры использования методов проблемного инженерного проектирования

1.2.3.1. Вибрирующий диск проигрывателя (по Дж. Диксону). Один из студентов предложил во время занятий своей группы решить следующую задачу. Проигрыватель, установленный в студенческом общежитии, постоянно вибрирует, и игла все время перескакивает через дорожки. Далее приводится запись беседы, которая происходила в группе.

- Боб Вот моя задача. Стол, на котором установлен проигрыватель, немного качается. Как только кто-либо касается стола, игла перескакивает на другую дорожку. Мне нужен надежный способ зафиксировать ее.
- Джим Предусмотрена ли какая-либо защита от вибрации?
- Боб Да. Имеются четыре демпфирующие пружины — по одной с каждого угла проигрывателя.
- Джон Может быть, нужны другие пружины — более жесткие или, быть может, более упругие?
- Билл Ты говоришь, что стол качается. Что вызывает вибрацию — вертикальные или горизонтальные толчки?
- Боб Я думаю, что главным образом горизонтальные перемещения. По вертикали пружины работают нормально.
- Билл Здесь, по-видимому, пружины предназначены только для того, чтобы гасить вертикальные колебания. Мы должны заняться поиском способа, позволяющего избавиться от горизонтальных колебаний.
- Джон Горизонтальные пружины!
Имеющиеся пружины работают в вертикальной плоскости. Все, что нужно сделать, — это добавить несколько пружин в горизонтальной плоскости.
- Джим Пружины не должны быть ни вертикальными, ни горизонтальными. Их следует установить под углом. Можно установить их под некоторым углом и вернуться к четырем пружинам.
- Билл Попробуем применить некоторые методы, например эмпатию. Эл, ты силен в этом. Вообрази себе, что ты под проигрывателем, и постарайся удерживать его неподвижно, пока я трясу стол. Что при этом происходит?
- Эл (Выходит на середину комнаты, поднимает руки вверх и раздвигает их в стороны, как будто держит над головой большой груз). Мне нужны бедра на шарнирах. Когда ты поворачиваешь стол, мои ноги тоже поворачиваются вместе с ним, а ведь верхняя часть туловища должна оставаться неподвижной. Нужно иметь бедра на шарнирах, как у тех девчонок что отплясывают рокси.
- Джим Шаровая опора.

- Эл (Все еще в той же позе). Единственное, что можно еще сделать, — это поставить пока проигрыватель на пол и посмотреть, смогу ли я удержать стол неподвижным. Столу можно придать большую устойчивость. Боб, ты говорил, что стол качается. Можно ли его закрепить?
- Боб Мы уже делали все, что можно. Когда проигрыватель стоит на полу, происходит то же самое, хотя и в меньшей мере. Дрожит весь этот дурацкий дом.
- Джим Шаровая опора все-таки подошла бы. А что если взять шарики? Пусть проигрывать катается на шариках.
- Билл Знаете, нам нужен своего рода «эффект скатерти». Помните, как выдергивают скатерть из-под тарелок? Нам нужно, чтобы при горизонтальной вибрации стола проигрыватель оставался неподвижным.
- Эл (Возвращается на свое место). Эффект скатерти имеет место вследствие того, что мы преодолеваем трение. Если бы у нас был низкий коэффициент трения.
- Боб Смазка! Проигрыватель плавает в масляной ванне!
- Джон Или можно использовать воздушную смазку. Это бы сообщило упругость и по вертикали. Один способ — воздушная подушка, другой — воздушная смазка. Как в «плавающем» пылесосе. Но откуда должен поступать воздух?
- Джим Я думаю, что мы еще не полностью исчерпали возможности опоры на шариках. Если бы мы посадили проигрыватель на шарики, он оставался бы неподвижным, даже если бы стол вибрировал по горизонтали.
- Билл Да, но при этом нет защиты от вибрации по вертикали. А что если поставить упругие шарики? Мягкие! Они будут действовать как пружины по вертикали и как смазка по горизонтали.
- Боб Хорошая идея! Шарики должны быть своего рода противоположностью так называемой «прыгающей замазке». Это вещество деформируется, когда на него давят медленно, но оно не поддается быстрой деформации. Мне нужно то, что должно оставаться жестким при медленных движениях, но будет эластичным, когда наносится сильный удар.

- Джим Хорошо, попытаемся еще раз применить эмпатию по другому поводу. Проблема состоит в том, что игла не остается в канавке пластинки, когда проигрыватель получает горизонтальные толчки.
- Джон Так сделаем звукосниматель более тяжелым, тогда он не будет сдвигаться. Ой, нет, это испортит пластинку!
- Боб Действительно, давление на пластинку должно оставаться прежним.
- Джим Подождите. Допустим, что я — звукосниматель. Моя рука — это иголка. (Джим ложится на пол, вытягивает руку и опускает пальцы вниз, имитируя иглу).
- Боб Это не совсем так, Джим. Звукосниматель сбалансирован относительно своей опоры.
- Джим Все в порядке. Я сохраняю равновесие относительно оси качания. Это можно вообразить. Теперь потрясем пол, я имею в виду стол. Я должен стараться двигаться в такт. Однако в силу своей инерции я остаюсь неподвижным, в то время как все остальное вибрирует.
- Эл Уменьшить вес звукоснимателя!
- Боб Сохранив при этом заданное давление на пластинку.
- Эл Это можно сделать, отрегулировав противовес относительно опоры звукоснимателя.
- Джим (Поднимаясь с пола). Я запачкал рубашку, а Боб получил идею!
- Джон Мы что, вообще отказались от пружин? Боб, ты говорил, что проигрыватель установлен на пружинах. А что если подвесить весь проигрыватель на пружинах?
- Эл Установив их под углом.
- Джим А почему бы не подвесить проигрыватель к потолку?
- Боб Весь дом дрожит.
- Джим Действительно! Подвесив, но на очень длинных пружинах и, возможно, с демпфером, мы бы получили очень большой период колебаний. Своего рода медленное покачивание. Никаких резких движений. И игла, возможно, останется на месте.
- Эл Тебе нужен волшебный ковер, на который бы ты поставил свой проигрыватель. Прекрасный неподвижный волшебный ковер.

Джон Как воздушная подушка.
Эл А почему бы и не обычная подушка? Здесь же целая охапка перьев!
Боб Я получил уже много идей. Достаточно.

1.2.3.2. Задача о сортировании помидоров (по Дж. Диксону).

Задача состоит в том, чтобы найти способ быстрого автоматического отделения зеленых (незрелых) помидоров от созревших при их массовой обработке. В некоторых районах фермеры, выращивающие помидоры, считают, что с экономической точки зрения более выгодно убирать весь урожай помидоров со всех плантаций одновременно. Эту работу могут выполнять машины. В этом случае в бункере оказываются перемешанными как зрелые, так и незрелые помидоры. Каким образом их можно рассортировать? Было проведено занятие для обсуждения этой проблемы методом «мозгового штурма».

Том Мы сортируем их по цвету. В данном случае, вероятно, нужно применять индикатор цвета.
Дэйв Излучательная или отражательная способность — зеленый помидор должен иметь большую отражательную способность.
Эд Твердость. Мы надавливаем на них слегка или притрагиваемся к ним.
Дик Электропроводность.
Том Сопротивление электрическому току.
Дэйв Магнетизм!
Дик Размер! Разве зеленые помидоры не меньше по размеру?
Эд Вес. Созревшие помидоры будут тяжелее.
Том Размер и вес должны быть связаны друг с другом.
Дэйв Размер и вес дают плотность.
Эд Удельный объем.
Том В зрелых помидорах очень много воды, поэтому они имеют удельный объем воды.
Дэйв Они плавают или тонут?
Дик Может быть, сортировать их по плотности — в зависимости от того, плавают они в воде или тонут?

- Эд Не обязательно в воде, может быть, и в другой жидкости.
- Дэйв Неядовитой.
- Том Соленая вода.
- Дик Рентгеновские лучи — для определения размера семян или чего-либо подобного.
- Том Запах, аромат.
- Эд Звук! Можно ли прослушать помидор?
- Дик Может ли помидор слышать?
- Дэйв Тепло! Инфракрасное излучение
- Эд Теплопроводность.
- Том Удельная теплоемкость.
- Дик Способность фокусника жонглировать ими.
- Эд Посадить женщину — пусть наблюдает за ними и нажимает кнопку.
- Дик Просто потрясти бункер — созревшие помидоры окажутся сверху или снизу.
- Эд При встряхивании продувать воздух через бункер.
- Том Использовать случайные числа, например пусть каждый третий или седьмой помидор зрелый.

Это занятие продолжалось еще некоторое время, но уже сейчас можно высказать некоторые впечатления. Идеи высказываются свободно, подхватываются, сменяются другими в совершенно произвольном порядке. Отсутствие критики делает это возможным. Обычно впоследствии можно составить длинный перечень возможных идей для оценки и дальнейшего исследования.

1.3. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА МНЕНИЙ СПЕЦИАЛИСТОВ НА СТАДИИ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО ИЗУЧЕНИЯ ОБЪЕКТА С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ РАНГОВОЙ КОРРЕЛЯЦИИ И КОНКОРДАЦИИ

1.3.1. Описание проблемы

Исключительно большой интерес представляет изучение совокупности факторов, влияющих на характеристики того или иного процесса при условии их взаимосвязи и взаимодействия.

Следует иметь в виду, что задачи, связанные с многофакторными экспериментами, решаются при неполном знании механизма исследуемых явлений.

Чаще всего исследователь на первом этапе работы занимается предварительным изучением объекта исследования: сбором априорной информации и подготовкой объекта исследования. Первая часть работы включает изучение известных данных, сбор мнений специалистов и др. Это позволяет избежать дублирования и правильно сформулировать цели работы, а также сократить объем исследований.

При выборе критерия оптимальности необходимо стремиться, чтобы он был экономическим по форме, но технологическим по содержанию.

После этого выбирают управляющие параметры, воздействие которых на объект исследования можно изменять целенаправленно. Сбор информации при опросе специалистов позволяет назвать факторы, но при окончательном отборе следует учитывать возможность измерения их с достаточной точностью имеющимися средствами. Важным требованием, предъявляемым к управляющим факторам, является отсутствие их взаимозаменяемости. Предварительное изучение объекта исследования заканчивается составлением списка входных и выходных параметров.

Таким образом, предварительное изучение исследуемого процесса, прежде всего, сводится к тому, что мы должны формализовать априорные сведения об изучаемом объекте или процессе, объективно обработать субъективные сведения, которые были получены в результате опроса ученых и ведущих специалистов.

Для предварительного выявления влияния множества факторов на процесс целесообразно использовать метод ранговой корреляции.

Для этого создается специальная анкета опроса. Специалисты должны ответить на вопрос о степени влияния различных факторов на протекание процесса. При этом факторам приписываются порядковые номера $1, 2, 3, \dots, n$ в зависимости от величины вносимого ими вклада в данный процесс. Эти номера принято называть рангами. Чем выше ранг фактора, тем меньше степень влияния его на процесс. Если не представляется возможным четко разделить два и более факторов по степени их значимости, то всем им приписывается одинаковый ранг, равный среднему арифметическому по-

рядковых номеров этих факторов. Такой ранг обычно называется связанным. Например, если 5-й и 6-й факторы обладают одинаковой степенью влияния на процесс, то каждому из них присваивается связанный ранг 5,5. Результаты опроса сводятся в специальную таблицу. Сравнительная степень влияния определяется в соответствии с суммой рангов, присваиваемых этому фактору всеми исследователями.

Таким образом, методы ранговой корреляции предназначены для объективной обработки субъективной информации. Потребность в таких методах может часто возникать в процессе разработки химической технологии.

1.3.2. О коэффициенте ранговой корреляции

Объекты некоторой совокупности называются ранжированными по некоторому признаку, если они перенумерованы в порядке возрастания или убывания этого признака:

$$\begin{aligned} x_1, & x_2, \dots, x_n; \\ y_1, & y_2, \dots, y_n. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Коэффициент ранговой корреляции оценивает связь между признаками X и Y , исходя из известных ранжирований одних и тех же объектов по этим признакам. Употребляют два способа его определения.

1.3.2.1. Коэффициент ранговой корреляции по Кендаллу. Вычис-

$$\begin{aligned} a_{ij} &= 0 \quad \text{при } x_i = x_j; \\ a_{ij} &= +1 \quad \text{при } x_i < x_j; \\ a_{ij} &= -1 \quad \text{при } x_i > x_j, \end{aligned}$$

где x_i — номер i -го объекта в ранжировании по признаку X , и аналогично

$$\begin{aligned} b_{ij} &= 0 \quad \text{при } y_i = y_j; \\ b_{ij} &= +1 \quad \text{при } y_i < y_j; \\ b_{ij} &= -1 \quad \text{при } y_i > y_j, \end{aligned}$$

где y_i — номер i -го объекта в ранжировании по признаку Y .

Коэффициент ранговой корреляции по Кендаллу τ определяется формулой

$$\tau = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} b_{ij}}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n b_{ij}^2} \quad (1.11)$$

и изменяется от минус единицы до плюс единицы:

- равенство $\tau = 0$ означает, что признаки X и Y для рассматриваемых объектов независимы;
- равенство $\tau = +1$ означает, что ранжирования по признакам X и Y совпадают;
- равенство $\tau = -1$ означает, что ранжирования по этим признакам прямо противоположны.

Формула, аналогичная определению коэффициента корреляции в теории вероятностей, не удобна для вычислений. При помощи некоторых преобразований ее нетрудно привести к виду

$$\tau = \frac{S}{\frac{1}{2} \cdot n \cdot (n-1)} ; \quad (1.12)$$

$$S = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n a_{ij} b_{ij} , \quad (1.13)$$

где n — число ранжируемых объектов.

При вычислении по этой формуле рекомендуется заранее располагать объекты в том порядке, в котором они проранжированы по признаку X ; в этом случае все числа a_{ij} , фигурирующие в ней, будут равны $+1$.

1.3.2.2. Коэффициент ранговой корреляции по Спирмену. Коэффициент ранговой корреляции по Спирмену также определяется формулой (1.11), в которой теперь надо принять

$$\begin{aligned} a_{ij} &= x_j - x_i ; \\ b_{ij} &= y_j - y_i . \end{aligned} \quad (1.14)$$

Коэффициент ρ обладает перечисленными выше свойствами для τ . Удобная для вычислений формула выглядит следующим образом:

$$\rho = 1 - \frac{6 \cdot S(d^2)}{n \cdot (n-1)}; \quad (1.15)$$

$$S(d^2) = \sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2. \quad (1.16)$$

1.3.2.3. Оценка значимости коэффициента ранговой корреляции. Будем рассматривать n ранжированных объектов как выборку из множества (генеральной совокупности) объектов. Задача оценки значимости состоит в том, чтобы проверить, можно ли, зная коэффициент ранговой корреляции для выборки, утверждать, что признаки X и Y зависимы для всей генеральной совокупности.

Пусть эти признаки на самом деле независимы. Тогда для произвольной выборки все ранжировки равновероятны. Для каждой ранжировки можно найти величину S , использующуюся при вычислении коэффициента τ , и величину ρ , а затем, разделив число ранжировок, для которых эти величины принимают заданные значения, на их общее число, определить частоту появления этих значений. При $n > 10$ распределение частот близко к нормальному закону. Для величины S среднее квадратическое отклонение этого закона можно найти по формуле

$$\sigma_\tau = \sqrt{\frac{1}{18} \cdot n \cdot (n-1) \cdot (2 \cdot n + 5)}, \quad (1.17)$$

а для величины $S(d^2)$ — по формуле

$$\sigma_\rho = \sqrt{\frac{1}{n-1}} \quad (1.18)$$

при среднем равном нулю.

Пусть теперь для заданной выборки найдено значение S и соответствующее ему значение τ . Коэффициент ранговой корреляции τ будем называть значимым, т. е. свидетельствующим о наличии зависимости между признаками X и Y , если соблюдено следующее условие: вероятность случайного появления полученного или еще большего отклонения S от среднего значения не превосходит заданного числа q_0 . Это число q_0 называется уровнем значимости и обычно принимается равным 0,05 (5%-ный уровень значимости). Аналогично вводится понятие значимости коэффициента ранговой корреляции ρ . Практически

определение значимости коэффициента ранговой корреляции сводится к следующему:

- вычисляют величины S и ϕ (или $S(d^2)$ и s , если речь идет о коэффициенте ранговой корреляции по Спирмену);
- если $n < 10$, то для данного значения исследуемой величины S или $S(d^2)$ по таблице определяют вероятность случайного появления найденного или еще большего отклонения S или $S(d^2)$ от среднего значения.
- если табличная вероятность не превосходит 0,05, коэффициент ранговой корреляции считают значимым;
- при $n \geq 10$ коэффициент ранговой корреляции считают значимым, если справедливо неравенство $|S| \geq 1,65 \sigma_\tau$ ($|\rho| \geq 1,65 \sigma_\rho$ для коэффициента ρ).

1.3.3. Ранжирование с совпавшими рангами

В некоторых случаях бывает трудно расположить данные объекты в строгом порядке по отношению к исследуемому признаку. Тогда надо приписывать одинаковый ранг тем объектам, чье положение в ранжировании друг относительно друга неясно. Такой ранг принимают равным среднему значению мест, поделенных этими объектами. Пусть ранжирование по признаку X содержит k разных значений ранга, а ранжирование по признаку Y — s разных значений. Обозначим через t_1, t_2, \dots, t_k число объектов, имеющих соответственно первое, второе и т. д. значения ранга в первом ранжировании, и через U_1, U_2, \dots, U_s — число объектов, имеющих первое, второе и т. д. значения ранга во втором ранжировании.

Коэффициент ранговой корреляции по Кендаллу определяется в случае ранжирования с совпавшими рангами равенством

$$\tau = \frac{S}{\sqrt{\left[\frac{1}{2} \cdot n \cdot (n-1) - T\right] \cdot \left[\frac{1}{2} \cdot n \cdot (n-1) - U\right]}}, \quad (1.19)$$

где S — та же сумма, что и для различных рангов.

$$T = \frac{1}{2} \cdot \sum_{r=1}^k t_r \cdot (t_r - 1); \quad U = \frac{1}{2} \cdot \sum_{r=1}^l U_r \cdot (U_r - 1). \quad (1.20)$$

Коэффициент ранговой корреляции по Спирмену вычисляют по формуле

$$\rho = \frac{\frac{1}{6} \cdot (n^3 - n) - S(d^2) - T - U}{\sqrt{\left[\frac{1}{6} \cdot (n^3 - n) - 2 \cdot T\right] \cdot \left[\frac{1}{6} \cdot (n^3 - n) - 2 \cdot U\right]}}. \quad (1.21)$$

При наличии совпавших рангов дисперсия нормального распределения, к которому стремится распределение частот появления тех или иных значений S , когда признаки X и Y независимы, задается формулой

$$\begin{aligned} \sigma_s^2 = & \frac{1}{18} \left[n \cdot (n-1) \cdot (2 \cdot n + 5) - \sum_{r=1}^k t_r \cdot (t_r - 1) \cdot (2 \cdot t_r + 5) - \right. \\ & \left. - \sum_{r=1}^l U_r \cdot (U_r - 1) \cdot (2 \cdot U_r + 5) \right] + \frac{1}{9 \cdot n \cdot (n-1) \cdot (n-2)} \sum_{r=1}^k t_r \cdot (t_r - 1) \times \\ & \times (t_r - 2) \cdot \sum_{r=1}^l U_r \cdot (U_r - 1) \cdot (U_r - 2) + \frac{1}{2 \cdot n \cdot (n-1)} \sum_{r=1}^k t_r \cdot (t_r - 1) \times \\ & \times \sum_{r=1}^l U_r \cdot (U_r - 1). \end{aligned} \quad (1.22)$$

Для коэффициента ρ соответствующая дисперсия вычисляется еще более громоздко, а потому коэффициент ранговой корреляции по Спирмену в случае совпавших рангов применяется редко.

Однако в прочих случаях его использование предпочтительнее, так как, во-первых, он чаще позволяет установить наличие зависимости между признаками X и Y (если такая зависимость на самом деле имеется) и, во-вторых, требует меньших вычислений.

1.3.4. Конкордация

Пусть имеется n объектов, в разной степени обладающих одним и тем же качеством X , и пусть требуется по возможности объективно проранжировать их по этому качеству. Предположим, что m исследователей дали m в той или иной степени различные ранжирова-

ния. Чтобы усреднить мнения этих исследователей, естественно, нужно подсчитать для каждого объекта сумму полученных им рангов и рассмотреть суммарное ранжирование:

$$\sum_{j=1}^m x_{j1}; \sum_{j=1}^m x_{j2}; \dots; \sum_{j=1}^m x_{jn} . \quad (1.23)$$

Однако ожидать, что такое усредненное мнение будет верным, можно только тогда, когда между отдельными исследователями существует значительное согласие. Степень этого согласия и оценивается коэффициентом конкордации. Коэффициент конкордации определяют следующим образом. Подсчитывают среднее значение суммарных рангов, равное $\frac{1}{2} \cdot m \cdot (n + 1)$, и, вычитая его из каждого из суммарных рангов, находят разности

$$d_i = \sum_{j=1}^m x_{ij} - \frac{1}{2} \cdot m \cdot (n + 1) , \quad (1.24)$$

после чего составляют сумму квадратов этих разностей:

$$S(d^2) = \sum_{i=1}^n d_i^2 = \sum_{i=1}^n \left[\sum_{j=1}^m x_{ji} - \frac{1}{2} \cdot m \cdot (n + 1) \right]^2 . \quad (1.25)$$

Величина $S(d^2)$ примет свое максимальное значение

$$S_{\max}(d^2) = (1/12) \cdot m^2 \cdot (n^3 - n) \quad (1.26)$$

только в том случае, если все исследователи дадут одинаковые ранжирования.

Коэффициентом конкордации называется частное

$$W = \frac{S(d^2)}{S_{\max}(d^2)} = \frac{12 \cdot S(d^2)}{m^2 \cdot (n^3 - n)} . \quad (1.27)$$

Эта величина всегда заключена между нулем и единицей. Если $W = 0$, то связи между ранжированиями отдельных исследователей не существует; если же $W = 1$, эти ранжирования полностью совпадают. Если в некоторых ранжированиях имеются совпавшие ранги, для каждого из них подсчитывается величина

$$T = \frac{1}{12} \cdot \sum_{r=1}^k (t_r^3 - t_r). \quad (1.28)$$

В случае наличия совпавших рангов коэффициент конкордации определяется по формуле

$$W = \frac{S(d^2)}{\frac{1}{12} \cdot n^2 \cdot (n^3 - n) - m \cdot \sum_{j=1}^m T_j}. \quad (1.29)$$

Вычислив коэффициент конкордации, и, получив положительное значение, нельзя еще быть уверенным, что суммарная ранжировка несет объективную информацию. Надо убедиться в том, что найденное значение коэффициента конкордации значимо, т. е. не могло получиться вследствие случайной расстановки рангов. Предположив, что ранги расставляются случайно, можно найти распределение частот появления для всевозможных значений W .

Оказывается, что величина

$$z = \frac{1}{2} \ln \frac{(m-1) \cdot W}{1-W} \quad (1.30)$$

подчиняется F -распределению Фишера со степенями свободы

$$f_1 = n - 1 - \frac{2}{m}; \quad f_2 = (m-1) \cdot f_1. \quad (1.31)$$

Подсчитав z для F -распределения при заданных значениях степеней свободы и заданном уровне значимости q (обычно $q = 0,05$), находится соответствующее критическое значение z_0 . Если $z > z_0$, коэффициент конкордации W значим.

При $n > 7$ распределение частот проще описывается законом распределения χ^2 : величина $m(n-1)W$ распределена по этому закону с числом степеней свободы $f = n - 1$. Если присутствуют совпавшие ранги, такое же распределение имеет величина

$$\chi_W^2 = \frac{S(d^2)}{\frac{1}{12} \cdot m \cdot n \cdot (n+1) - \frac{1}{(n-1)} \sum_{j=1}^m T_j}. \quad (1.32)$$

Вычисленная величина сравнивается с табличным значением χ_p^2 , найденным для распределения χ^2 при заданных числе степеней свободы и уровне значимости. Если значение превышено, коэффициент конкордации значим.

1.3.5. Программный модуль «Konkor»

1.3.5.1. Назначение и области использования программного модуля. Обучающий компьютерный тренажер предназначен для обработки мнений группы экспертов на стадии предварительного изучения объекта с помощью методов ранговой корреляции и конкордации, объективной обработки субъективной информации. Он может быть использован для оценки эффективности природоохранных мероприятий, вычисления приоритетов и выстраивания упорядоченных последовательностей из различных вариантов решения экологических проблем с точки зрения группы экспертов, которые каждому варианту присваивают балльные оценки (ранги).

1.3.5.2. Функциональные возможности программного модуля. Компьютерный обучающий программный модуль позволяет:

- осуществлять ввод и редактирование до 35 наименований оцениваемых факторов 25 специалистами, входящими в группу экспертов;
- осуществлять ввод и редактирование значений балльных оценок (рангов) эффективности каждого фактора, выставляемых каждым экспертом;
- вычислять значения коэффициентов ранговой корреляции данной статистической выборки по Кендаллу и Спирмену;
- проверять значимость вычисленных значений коэффициентов ранговой корреляции;
- формировать упорядоченную последовательность (ранжированный ряд) из изучаемых факторов в соответствии с возрастанием или убыванием признака, выбранного в качестве критерия эффективности;
- осуществлять расчет коэффициента конкордации, характеризующего степень согласованности мнений специалистов, входящих в группу экспертов;

- организовывать вычислительный эксперимент по рациональному природоохранному проектированию путем целенаправленного изменения значений элементов в матрице рангов;

- формировать, редактировать, копировать и распечатывать файл отчета вычислительного эксперимента с целью анализа ситуации и выработки управленческих решений.

1.3.5.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

Konkor.exe Главный исполняемый файл программного модуля

Audit.lpd Файл данных для расчета рабочего примера

Konkor.hlp Файл помощи

Konkor.cnt Файл оглавления

1.3.5.4. Рабочий интерфейс и структура программного модуля



The image shows a portion of a software interface. On the left, there is a mathematical formula: $P = \bar{x} \pm Sx$. On the right, the number 2.6 is displayed inside a circle.

Рис. 7. Рабочий интерфейс программного модуля «Konkor»

Рабочее поле интерфейса тренажера состоит из областей (рис. 7):

- панели информационного обеспечения;

- панели для управления работой тренажера;
- фрейма для ввода и коррекции исходных данных.

1.3.5.5. Запуск и управление работой программного модуля.

На рабочей панели тренажера для старта активны две командные кнопки: «Новый набор» и «Загрузить набор». Это обеспечивает выбор и дает возможность использовать тренажер в двух вариантах:

- создавать свой сценарий;
- воспользоваться рабочим примером, предлагаемым разработчиками.

Если пользователь выбрал первый вариант, то вызывается диалоговое окно, где задаются параметры нового сценария программного модуля (рис. 8).

$$S_x = \sqrt{\frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^N D_i} = \sqrt{\frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}, \quad (2.5)$$

Рис. 8. Рабочий момент создания сценария

Когда завершён ввод информации с пульта или для работы был выбран вариант «Загрузить набор», можно продолжить заполнение матрицы новыми данными, нажимая кнопку «Добавить столбец» на рабочей панели тренажера.

Следует обратить внимание на три командные кнопки окна решения: «Сохранить», «Очистить» и «Ок».

Кнопка «Ок» позволяет вновь вернуться к исходному варианту и осуществить целенаправленные изменения условий проведения вычислительного эксперимента. При этом вновь появится окно с новыми результатами решения задачи. Но они будут приписаны к концу выведенного предыдущего варианта решения и т. д. Таким образом, создается протокол вычислительного эксперимента.

Кнопка «Очистить» позволяет начать формировать новый протокол решения задачи.

Кнопка «Сохранить» дает возможность создать файл отчета в двух форматах:

- текстовом;
- графическом *.rtf.

1.3.5.6. Описание рабочего примера. Предприятие в качестве первого шага по совершенствованию системы управления в области охраны окружающей среды с помощью предварительной проверки должно выявить сильные и слабые места, риски и возможности как базиса для создания действенной системы управления охраны окружающей среды.

Одной из основных составных частей предварительной проверки является экспертиза существующей практики управления окружающей средой.

Наиболее приемлемым подходом к проведению предварительной проверки может быть использование математической обработки мнений специалистов (группы экспертов) путем анализа интервью, контрольных листков и анкет.

Ранжирование по важности и эффективности экспертируемых природоохранных мероприятий позволит обосновать последовательность их исполнения и определить объемы финансирования по срокам.

Специфический перечень природоохранных мероприятий для каждого предприятия может ориентировочно включать следующие проблемы:

- достаточность и качество информации о ресурсах и состоянии окружающей среды;
- совершенствование организационно-технической документации;
- методический уровень расчетов «Затраты — прибыль», связанных с окружающей средой;

- повышение квалификации работников в области охраны окружающей среды;
- ревизия объемов потребления ресурсов;
- организация переработки отходов;
- замена опасных процессов;
- размещение опасной продукции и материалов;
- своевременность оценки потенциальных аварийных ситуаций;
- умелое управление инвестиционной политикой.

Результирующий отчет по предварительной проверке должен содержать ранжированный ряд природоохранных мероприятий по убывающему признаку с оценкой значимости степени согласованности мнений экспертов (рис. 9).

$$\bar{X} - S_x \leq X \leq \bar{X} + S_x \quad (2.7)$$

$$S_{\bar{x}} = S_x / \sqrt{N} . \quad (2.8)$$

Рис. 9. Результаты решения задачи

1.3.5.7. Оформление результатов. Ранжированный ряд факторов:

Управление инвестиционной политикой	17,0
Замена опасных процессов	24,0
Размещение опасной продукции	31,0
Своевременность оценки аварийных ситуаций	37,0
Организация переработки отходов	48,0
Ревизия объемов потребления ресурсов	60,0
Методический уровень расчетов	75,0
Достаточность и качество информации	81,0
Повышение квалификации работников	91,0
Совершенствование документации	94,0
КОЭФФИЦИЕНТ КОНКОРДАЦИИ	0,8989
Расчетное значение критерия Пирсона	80,8999
Табличное значение критерия Пирсона	17,5863
Число степеней свободы	9

Гипотеза о значимости коэффициента конкордации не отвергается

1.3.5.8. Сохранение протокола

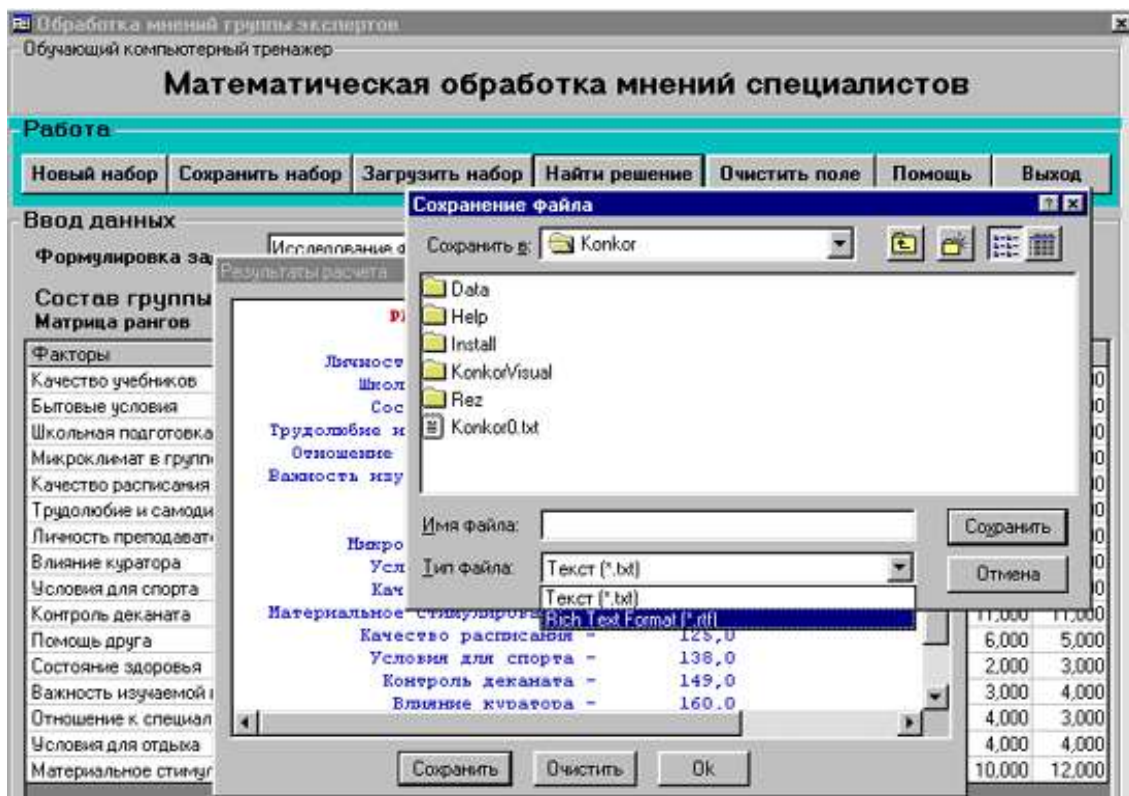


Рис. 10. Сохранение протокола отчета

2. КОМПЬЮТЕРНАЯ ОБРАБОТКА ИНФОРМАЦИИ

2.1. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЙ, НАБЛЮДЕНИЙ И ИСПЫТАНИЙ

2.1.1. Термины и определения

Любой результат эксперимента называется *элементарным событием*. Произвольное множество всех элементарных событий, относящихся к одному и тому же эксперименту, называется *пространством элементарных событий*.

Событием или *случайным событием* называется любое подмножество пространства элементарных событий. Событие, не содержащее ни одного элементарного события, называется невозможным и обозначается \emptyset (пустое множество).

Вероятность события в последовательности независимых испытаний (схема Бернулли)

$$P_n(k) = \frac{n!}{k!(n-k)!} \cdot p^k \cdot (1-p)^{n-k}, \quad (2.1)$$

где n — число независимых испытаний; k — число успехов; p — вероятность (относительная частота появления события в пространстве элементарных событий).

Случайной величиной (СВ) называется величина X , которая в результате опыта может принимать то или иное значение, причем заранее (до опыта) неизвестное.

В теоретико-вероятностной схеме случайной величиной называют числовую измеримую функцию от элементарных исходов. Сле-

довательно, можно говорить о числовой функции, описывающей результаты эксперимента и определенной на пространстве элементарных событий. Такие числовые функции называют случайными величинами и обозначают прописными буквами латинского алфавита X, Y, Z, \dots , а их значения — строчными x, y, z, \dots .

Дискретной СВ называется величина, которая в зависимости от элементарных исходов принимает конечное или бесконечное счетное множество значений.

Случайная величина считается заданной, если известен закон распределения, который может принимать различные формы.

Законом распределения дискретной СВ называется всякое соотношение, устанавливающее связь между возможными значениями СВ и соответствующими им вероятностями.

Закон распределения СВ можно задать таблицей, графиком или аналитическим выражением.

Функцией распределения (интегральной функцией распределения) СВ X называется функция $F(x)$, значения которой равны вероятностям $P(X < x)$ того, что СВ X примет значение, меньшее произвольно выбранного значения x , т. е. $X \in]-\infty; x[$ **Плотностью распределения вероятностей $f(x)$** (дифференциальной функцией распределения) СВ X называют первую производную от функции распределения, т. е.

$$f(x) = F'(x). \quad (2.2)$$

График плотности распределения вероятностей $f(x)$ называют **кривой плотности распределения вероятностей**.

Группа объектов, объединенных по некоторому качественному или количественному признаку, называется **статистической совокупностью**. Различают генеральную и выборочную совокупности.

Выборочной совокупностью или **выборкой** называется совокупность случайно отобранных объектов.

Генеральной совокупностью называется совокупность всевозможных (всех возможных) объектов, из которых производится выборка.

Статистическая совокупность, расположенная в порядке возрастания или убывания значения признака, называется **вариационным рядом**, а ее объекты — **вариантами**.

Вариационный ряд называется *дискретным*, если его члены принимают конкретные изолированные значения. Если члены вариационного ряда заполняют некоторый интервал, то такой ряд называют *непрерывным*.

Статистическим распределением выборки называется соотношение между значениями вариант и соответствующими им частотами или частостями.

Статистическое распределение можно представить в виде таблицы, в первую строку которой записывают варианты (элементы вариационного ряда), а во вторую — соответствующие им частоты или частости.

Для непрерывного вариационного ряда составляется таблица, в первой строке которой помещены интервалы изменения вариант, а во второй — соответствующие им частоты.

Для геометрической интерпретации дискретного распределения на оси абсцисс откладывают варианты, на оси ординат соответствующие им частоты или частости. Ломаную линию, соединяющую полученные точки, называют *полигоном*.

Для непрерывного вариационного ряда интервал, в котором заключены все значения ряда, разбивают на несколько подинтервалов с шагом $x_i - x_{i+1} = h$ и находят для каждого подинтервала сумму частот m_i или частостей ω_i вариант, попавших в i -й интервал. На оси абсцисс откладывают подинтервалы, а над ними на расстоянии m_i/h или ω_i/h проводят отрезки, параллельные оси абсцисс. Соединив концы отрезков и интервалов линиями, параллельными оси Oy , получают ступенчатую фигуру, состоящую из прямоугольников, которая называется *гистограммой*. Площадь i -го частичного прямоугольника равна сумме частот вариант i -го интервала. Значит, площадь гистограммы частот равна сумме всех частот, т. е. объему выборки.

Эмпирической (статистической) функцией распределения называется функция $F^*(x)$, значения которой равны относительной частоте щ события $X < x$:

$$F^*(x) = \omega(X < x), \quad (2.3)$$

где $\omega(X < x) = m_x/n$; m_x — число вариант, меньших x ; n — объем выборки.

Функция распределения *генеральной* совокупности $F(x)$ называется **теоретической функцией распределения**. Различие между эмпирической и теоретической функциями распределения состоит в том, что $F(x)$ определяет вероятность события $X < x$, а $F^*(x)$ — относительную частоту этого события. Из закона больших чисел (теоремы Бернулли) следует, что $F^*(x)$ стремится по вероятности к $F(x)$, т. е. при больших n значения $F^*(x)$ и $F(x)$ мало отличаются друг от друга.

Отсюда следует, что эмпирическую функцию распределения можно использовать для приближенного представления теоретической функции.

Выборки используются для проверки предположений (*гипотез*) относительно тех или иных свойств распределения генеральной совокупности. В частности, такого рода задачи возникают при сравнении различных технологических процессов или методов обработки по определенным измеряемым признакам, например по точности, производительности, качеству и т. д.

Результаты, полученные при обработке выборки из некоторой совокупности, могут быть использованы для нахождения решений относительно всей совокупности, чаще всего в виде функций распределения. Подобные решения называются **статистическими**. Вследствие вероятностного характера принимаемое решение может быть ошибочным, т. е. могут быть расхождения между статистическими и теоретическими функциями распределения. Для оценки значимости расхождений используют **критерии согласия**.

Статистической называется гипотеза о предполагаемом виде неизвестного распределения или о параметрах известных распределений. Например, утверждения «генеральная совокупность распределена по закону Пуассона» или «дисперсии двух совокупностей, подчиняющихся нормальному закону, равны между собой» — статистические гипотезы.

Нулевой называется выдвинутая гипотеза, **конкурирующей** — гипотеза, которая противоречит нулевой.

Простой называется гипотеза, содержащая только одно предположение. **Сложная гипотеза** состоит из конечного или бесконечного числа простых гипотез.

Критерием согласия статистической гипотезы с опытными данными называют правило, позволяющее на основании выборки принять или отвергнуть нулевую гипотезу.

В статистической оценке гипотезы могут быть допущены ошибки. Ошибка первого рода состоит в том, что будет отвергнута правильная гипотеза, ошибка второго рода — в том, что будет принята неверная гипотеза. Вероятность совершить ошибку первого рода обозначается буквой β и называется **уровнем значимости критерия**. Наиболее часто уровень значимости принимают равным 0,05 или 0,01 (5 % или 1 %).

Критической областью называется совокупность значений статистики критерия, при которых нулевую гипотезу отвергают.

Областью принятия гипотезы (областью допустимых значений) называется совокупность значений статистики, при которых гипотезу принимают.

Критическими называются точки, отделяющие критические области от областей принятия гипотезы.

Мощностью критерия называется вероятность попадания статистики в критическую область при условии, что справедлива конкурирующая гипотеза, т. е. мощность критерия — это вероятность отвергнуть нулевую гипотезу, если верна конкурирующая.

2.1.2. Числовые и графические характеристики результатов измерений случайной величины

В качестве наилучшей оценки измеряемого показателя представляется разумным выбрать среднее значение всех полученных результатов:

$$X = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i, \quad (2.4)$$

где N — число измерений; x_i — текущие значения показателя.

Средняя погрешность результатов измерений Di , называемая отклонением, показывает, насколько результат i -го измерения x_i отличается от среднего значения X .

Чтобы оценить достоверность результатов измерений x_1, x_2, \dots, x_N в среднем, мы могли бы попытаться усреднить отклонения Di .

Но среднее значение отклонений равно нулю! Поэтому для этой цели вычисляют выборочное стандартное отклонение

$$S_x = \sqrt{1/(N-1) \sum_{i=1}^N D_i} = \sqrt{1/(N-1) \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}. \quad (2.5)$$

Особенность выражения (2.5) состоит в том, что оно правильно описывает абсурдный случай, когда $N = 1$. В этом случае получается неопределенность типа $0/0$, что соответствует действительности, так как по одному измерению ни о какой статистике не может быть и речи.

Следует обратить внимание на то, что S_x , вычисленное по формуле (2.5), характеризует среднюю погрешность отдельных измерений x_1, x_2, \dots, x_N . Чтобы записать интересующий нас итог в готовом виде

$$P = \bar{x} \pm S_x \quad (2.6)$$

как наилучшую оценку величины X параметра P в вероятном интервале

$$\bar{X} - S_x \leq X \leq \bar{X} + S_x, \quad (2.7)$$

нужно вычислить величину стандартного отклонения среднего

$$\bar{S}_x = S_x / \sqrt{N}. \quad (2.8)$$

Множитель N в знаменателе (2.8) имеет важное смысловое значение. Многократное повторение индивидуальных измерений x_1, x_2, \dots, x_N приводит к заметному изменению стандартного отклонения, но стандартное отклонение среднего медленно уменьшается с увеличением N . Следовательно, при большом N конечный результат будет более надежным. Этот фактор $(1/N)$ обеспечивает очевидный способ увеличения точности измерений. К сожалению, \sqrt{N} возрастает довольно медленно с увеличением N . Для повышения точности измерений в 10 раз число опытов N необходимо увеличить в 100 раз!

Если результаты измерений представлять в форме простого ряда данных в той последовательности, в которой они получены при измерениях, то придется иметь дело с беспорядочными наборами чисел,

из которых извлекается мало информации. Очевидно, надо искать более наглядный и более эффективный способ подготовки к оценке результатов измерений.

Рассмотрим пример измерения прочности образцов какого-либо вида продукции:

$$C(10) = 3,75; 4,0; 3,9; 4,3; 4,2; 4,0; 3,9; 3,7; 4,0; 4,2.$$

Представленные в такой форме записи данные не позволяют выявить в них какую-нибудь закономерность.

Попробуем расположить числа в возрастающем порядке:

$$C1(10) = 3,7; 3,75; 3,9; 3,9; 4,0; 4,0; 4,0; 4,2; 4,2; 4,3.$$

Теперь нетрудно обратить внимание на повторяемость некоторых чисел. Далее можно определить долю, с которой реализуется каждый результат с одинаковым значением от общего числа измерений N (табл. 2):

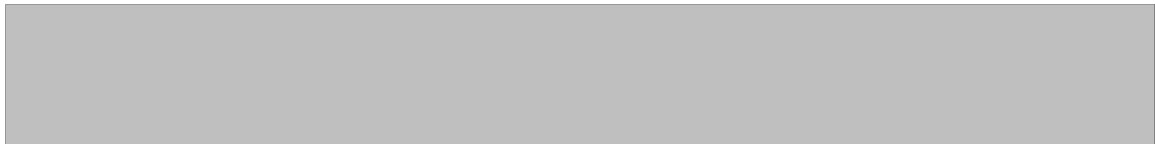
$$F_k = N_k / N, \quad (2.9)$$

где N_k — число повторений k -й величины показателя.

Отношение (2.9) называют частотой реализации k -го результата.

Т а б л и ц а 2

Результаты измерения качества продукции



$$M = 24 \cdot \ln \left[\frac{\sum (n_i - 1) \cdot c}{24} \right]$$

Данные, приведенные на рис. 11, уже весьма наглядны. Совершенно четко выделяется центральная вершинная часть с уменьшением значений параметра по краям в обе стороны от центра. Графики, подобные рис. 11, называются гистограммами дискретной случайной величины. Подобные графики можно строить и для непрерывных величин.

Рис. 11. Гистограмма результатов десяти измерений

2.1.3. Основные законы предельных распределений случайной величины

2.1.3.1. Понятие предельного распределения случайной величины. Если весь диапазон значений результатов измерений случайной величины разбить на подходящее число интервалов («бинов») и сосчитать, сколько значений измеренного показателя попадает в каждый «бин», то для всех «бинов» получим частоту F_k .

Частота F_k характеризует распределение результатов измерений. В большинстве экспериментов, если увеличивать число измерений, гистограмма будет принимать некоторую определенную каноническую форму. С ростом числа измерений до бесконечности их распределение стремится к некоторой определенной кривой, которая называется предельным распределением.

Законом распределения дискретной СВ называется всякое соотношение, устанавливающее связь между возможными значениями СВ и соответствующими им вероятностями.

Закон распределения СВ можно задать таблицей, графиком или аналитическим выражением.

Функцией распределения (интегральной функцией распределения) СВ X называется функция $F(x)$, значения которой равны вероятностям $P(X < x)$ того, что СВ X примет значение, меньшее произвольно выбранного значения x , т. е. $X \in]-\infty; x[$.

$$F(x) = P(X < x) = P(-\infty < X < x). \quad (2.10)$$

Для дискретных случайных величин $F(x)$ вычисляется по формуле

$$F(x) = \sum_{x_i < x} P(X < x_i), \quad (2.11)$$

где суммирование осуществляется по всем значениям i , для которых $x_i < x$.

Свойства функции распределения

1. Функция распределения $F(x)$ является неотрицательной, заключенной между нулем и единицей:

$$0 \leq F(x) \leq 1. \quad (2.12)$$

2. Функция распределения $F(x)$ является неубывающей, т. е. при $b > a$:

$$F(b) > F(a). \quad (2.13)$$

3. Вероятность появления непрерывной случайной величины в интервале $] a; b [$ равна приращению функции распределения $F(x)$ на этом интервале:

$$P(a < x < b) = F(b) - F(a). \quad (2.14)$$

4. Если все возможные значения случайной величины X принадлежат интервалу $] a; b [$, то

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < a \\ 1 & \text{при } x > b. \end{cases} \quad (2.15)$$

Если же все возможные значения случайной величины X принадлежат всей числовой оси, то

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} F(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} F(x) = 1. \quad (2.16)$$

Плотностью распределения вероятностей $f(x)$ (дифференциальной функцией распределения) случайной величины X называют первую производную от функции распределения, т. е. $f(x) = F'(x)$.

График плотности распределения вероятностей $f(x)$ называют кривой плотности распределения вероятностей.

Свойства плотности распределения вероятностей случайной величины

1. Плотность распределения вероятностей неотрицательна:

$$f(x) \geq 0. \quad (2.17)$$

2. Интеграл в бесконечных пределах от плотности распределения вероятностей равен единице:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1. \quad (2.18)$$

3. Вероятность того, что непрерывная случайной величины X принадлежит интервалу $] a; b [$:

$$P(a \leq X \leq b) = \int_a^b f(x) dx. \quad (2.19)$$

4. Функция распределения $F(x)$ выражается через плотность распределения вероятностей $f(x)$ формулой

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(u) du . \quad (2.20)$$

Законом распределения случайной величины называется соотношение, учитывающее связь между возможными ее значениями и соответствующими вероятностями.

Наиболее часто встречающиеся законы распределения.

Биномиальное распределение. Распределение случайной величины, равной числу успехов k в n испытаниях, определяется по биномиальному распределению:

$$P(X = k) = P_n(k) = C_n k p^k q^{n-k}, \quad (2.21)$$

где n — натуральное число; $0 < p < 1$; $q = 1 - p$, $k = 0, 1, \dots, n$. Математическое ожидание $M(X) = np$, дисперсия $D(X) = npq$.

Пуассоновское распределение. Если вероятность появления события мала, а число испытаний велико, то применение формулы Бернулли затруднительно. В этом случае пользуются ее предельным значением

$$P_\tau(k) = \frac{(\lambda \cdot \tau)^k \cdot e^{-\lambda \cdot \tau}}{k!}, \quad (2.22)$$

где λ — интенсивность потока, равная среднему числу событий, появляющихся в единицу времени.

Нормальное (или гауссово) распределение. Плотность распределения вероятностей имеет вид

$$f_{x,\sigma}(x) = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}}. \quad (2.23)$$

Следовательно, для случайной величины X математическое ожидание совпадает с модой и медианой распределения.

2.1.3.2. Нормальный закон предельного распределения случайной величины. Поскольку очевидно, что ни в каком измерении нельзя точно определить истинное значение любой непрерыв-

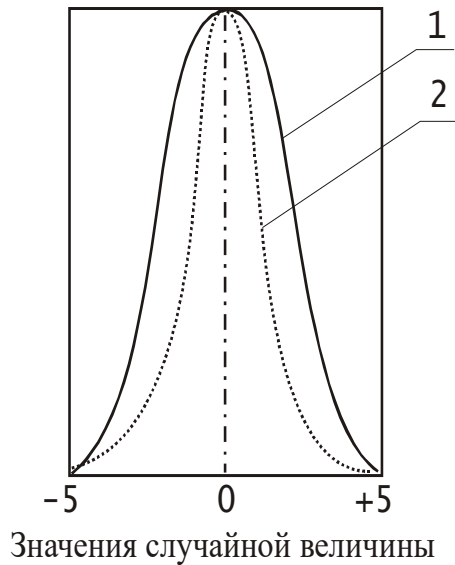


Рис. 12. Колоколообразная форма кривой функции Гаусса с центром $x = 0$ (1 — сигма велика; 2 — сигма мала)

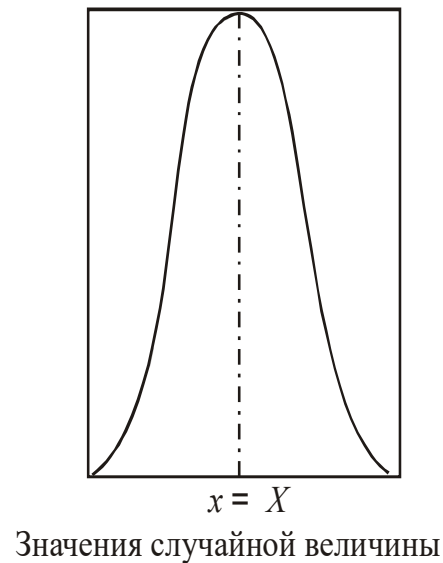


Рис. 13. Колоколообразная форма кривой функции Гаусса с центром $x = X$

ной переменной (например, длины, времени и т. д.), то не ясно, существует ли вообще истинное значение такой величины. Тем не менее оказывается очень удобным предполагать, что любая физическая величина имеет истинное значение, и мы будем исходить из этого предположения. В математике функция, график которой имеет форму колоколообразной кривой, называется функцией нормального распределения, или функцией Гаусса.

Основная форма представления этой функции имеет вид

$$e^{-x^2/2\cdot\sigma^2}, \quad (2.24)$$

где σ — фиксированный параметр, который называется параметром ширины или шириной.

Когда $x = 0$, функция Гаусса равна единице. Функция симметрична относительно $x = 0$, так как она имеет одни и те же значения как для x , так и для $-x$. При удалении x от нуля в любом направлении функция $x^2/2 \sigma^2$ возрастает, причем возрастает быстро, если величина u мала, и более медленно, если u велика. Следовательно, по мере удаления x от нуля функция стремится к нулю.

Таким образом, общий вид функции Гаусса будет таким, как показано на рис. 12. Этот график объясняет термин «параметр шири-

ны» для σ , поскольку при больших значениях σ колокол выглядит широким, а при малых σ — узким.

Функция Гаусса (2.25) представляет собой колоколообразную кривую с центром в $x = 0$. Чтобы получить колоколообразную кривую с центром в какой-то другой точке $x = X$, мы просто заменим x на $x - X$. Таким образом, функция

$$e^{-(x-X)^2/2\sigma^2} \quad (2.25)$$

достигает максимума при $x = X$ и спадает симметрично по обе стороны от $x = X$, как показано на рис. 13.

Выражение (2.25) еще не является окончательным, оно не описывает предельное распределение, поскольку любое распределение должно быть нормировано, т. е. должно удовлетворять условию

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1. \quad (2.26)$$

Чтобы выполнить это условие, вводят

$$f(x) = N \cdot e^{-(x-X)^2/2\sigma^2}. \quad (2.27)$$

Умножение на N не изменяет ни формы, ни положения максимума при $x = X$. Теперь мы должны выбрать «нормировочный множитель» N таким образом, чтобы $f(x)$ была нормирована в соответствии с (2.59). Для этого необходимо сделать подстановку подынтегрального выражения.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} N \cdot e^{-(x-X)^2/2\sigma^2} dx. \quad (2.28)$$

При оценке интегралов такого вида всегда нужно произвести замену переменных, чтобы упростить подынтегральное выражение.

Обозначим $x - X = y$ (в этом случае $dx = dy$) и получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} N \cdot e^{-y^2/2\sigma^2} dy. \quad (2.29)$$

Затем можно обозначить $y/\sigma = z$ (в этом случае $dy = \sigma dz$), тогда

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{z^2/2} \cdot \sigma dz . \quad (2.30)$$

Получившийся интеграл — один из стандартных интегралов.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{z^2/2} dz = \sqrt{2 \cdot \pi} . \quad (2.31)$$

Возвращаясь к (2.58) и (2.59), находим, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = N \cdot \sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi} . \quad (2.32)$$

Так как этот интеграл должен быть равен единице, нормировочный множитель N следует выбрать как $N = 1/(\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi})$.

Таким образом, приходим к выводу, что нормированная функция Гаусса, или нормированная функция нормального распределения, имеет вид

$$f_{X,\sigma}(x) = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-(x-X)^2 / 2 \cdot \sigma^2} . \quad (2.33)$$

Нижние индексы X , σ добавлены, чтобы указать центр и ширину распределения.

Функция $f_{X,\sigma(x)}$ описывает предельное распределение результатов измерений величины x , истинное значение которой равно X и на которую оказывают влияние только случайные ошибки. Говорят, что результаты измерений распределены нормально, если их предельное распределение описывается функцией Гаусса (2.33). Малые значения σ приводят к распределению типа острого пика, соответствующего точным измерениям, в то время как большие значения σ дают широкое распределение, соответствующее измерениям с малой точностью.

На рис. 14 приведены два примера распределения Гаусса с различными центрами X и ширинами σ . Обратите внимание, как фактор σ в знаменателе формулы (2.33) автоматически обеспечивает для более узкого распределения (σ меньше) большую высоту в центре, как это и должно быть, чтобы полная площадь под кривой равнялась 1.

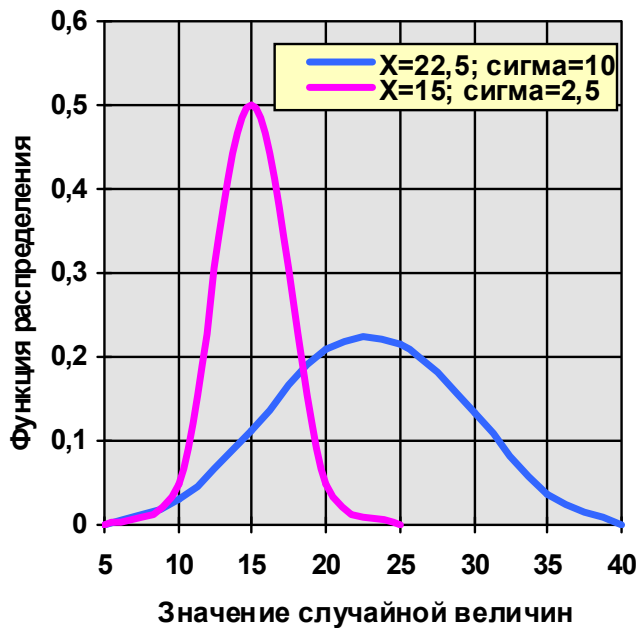


Рис. 14. Два нормальных, или гауссовых, распределения

Если предельное распределение результатов измерений описывается функцией Гаусса, то говорят, что эти результаты распределены нормально или подчиняются нормальному закону распределения генеральной совокупности.

Если взять интеграл (2.26) в пределах от $-\infty$ до $+\infty$, то получится площадь под кривой, в которую должны попасть все измерения (как выполненные, так и невыполненные). Но если нам достаточно пред-

сказать только 95 правильных результатов из 100 измерений, а в 5 случаях мы имеем право на ошибку, то справа и слева от центра мы можем поставить пределы уже не от $-\infty$ до $+\infty$, а такие, которые определяют величину площади под кривой в размере 95% от полной.

Если интеграл (2.28) представляет собой вероятность того, что любое единичное измерение приведет к результату, лежащему внутри интервала $a \leq X \leq b$, то, используя функцию распределения Гаусса, можно вычислить вероятность того, что результат измерения окажется в пределах одного стандартного отклонения от истинного значения X :

$$F_k = N_k / N, \tag{2.34}$$

Выполнив подстановку $z = (x - \bar{x})/\sigma$, $dx = \sigma dz$ и расширив область интересов до любого количества σ или его части ($t \cdot \sigma$), будем иметь

$$= P(X < x) = P(-\infty < X \tag{2.35}$$

Интеграл (2.35) часто называют функцией ошибок и обозначают $erf(t)$ или нормальным интегралом ошибок.

2.1.3.3. Функция Лапласа. В некоторых работах по теории вероятностей (Гаусс, Лаплас) в качестве параметра нормального закона использовалась мера точности h . Однако среднее квадратическое отклонение u является более удобным параметром, так как оно непосредственно связано с дисперсией случайной величины, а для дисперсии существуют теоремы, облегчающие ее вычисление в ряде случаев. Поэтому в настоящее время в качестве параметра рассеивания в нормальном законе принимается u . Применительно к такому выбору параметра рассеивания составлено и большинство таблиц, используемых при расчетах по математической статистике и теории ошибок.

Нормальный закон определяется двумя параметрами: математическим ожиданием \bar{x} , средним квадратическим отклонением u (дисперсией σ^2 или мерой точности h).

Для функции распределения $F(x)$ нормальной случайной величины имеем

$$F(x) = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^x e^{-\frac{(x_1 - \bar{x})^2}{2 \cdot \sigma^2}} dx. \quad (2.36)$$

Интеграл, стоящий в правой части уравнения, не может быть сведен к элементарным функциям в конечном виде, однако может быть выражен через функцию одного переменного, которая легко табулируется. Для выполнения этого преобразования введем новую переменную интегрирования, положив

$$t = \frac{x_1 - \bar{x}}{\sigma}, \quad (2.37)$$

после чего получим

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{\frac{x - \bar{x}}{\sigma}} e^{-\frac{t^2}{2}} dt = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^0 e^{-\frac{t^2}{2}} dt + \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_0^{\frac{x - \bar{x}}{\sigma}} e^{-\frac{t^2}{2}} dt. \quad (2.38)$$

Первое слагаемое правой части последнего выражения равняется $1/2$, так как дает половину площади, ограниченной кривой плотности нормального закона с единичной дисперсией. Остается свести к удобной табличной форме второе слагаемое этой формулы. Для этой

цели рассмотрим функцию, введенную Лапласом, определяемую формулой

$$\Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_0^z e^{-\frac{t^2}{2}} dt. \quad (2.39)$$

Второе слагаемое отличается от правой части предыдущего выражения только отсутствием множителя 2 перед интегралом и верхним пределом интегрирования. Следовательно, выражение для функции распределения нормального закона можно окончательно переписать в виде

$$F(x) = \frac{1}{2} \cdot \left[1 + \Phi\left(\frac{x - \bar{x}}{\sigma}\right) \right]. \quad (2.40)$$

Иногда функцию Лапласа определяют формулой

$$\Phi_1(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^z e^{-t^2} dt. \quad (2.41)$$

Именно эта функция была рассчитана Лапласом и соответствует нормальному закону с единичной мерой точности.

Т а б л и ц а 3

Краткая таблица функции Лапласа

z	$\Phi(z)$	z	$\Phi(z)$	z	$\Phi(z)$	z	$\Phi(z)$	z	$\Phi(z)$
0	0	1,00	0,6827	2,00	0,9545	3,00	0,9973	4,00	0,999937
0,25	0,1974	1,25	0,7887	2,25	0,9756	3,25	0,9988	4,25	0,999965
0,50	0,3829	1,50	0,8664	2,50	0,9876	3,50	0,9995	4,50	0,999993
0,75	0,5468	1,75	0,9199	2,75	0,9940	3,75	0,9998	4,75	0,999997

Пользуясь табл. 3, можно определить вероятность того, что нормальная случайная величина отклонится по абсолютному значению от своего математического ожидания не более чем на σ , 2σ , 3σ и т. д. Действительно, используя формулу для вероятности попадания случайной величины в заданный интервал функции распределения и формулу (2.40), получим

$$P((-k \cdot \sigma \leq X \leq k \cdot \sigma) = \frac{1}{2} \cdot [\Phi(k) - \Phi(-k)] = \Phi(k). \quad (2.42)$$

С помощью (2.42) легко определить вероятность того, что результат любого случайного измерения окажется в пределах одного стандартного отклонения (она составит 68%), двух стандартных отклонений ($P(-2\sigma; +2\sigma) = 95,4\%$), трех стандартных отклонений ($P(-3\sigma; +3\sigma) = 99,7\%$). То же самое можно сказать иначе: вероятность того, что результат измерения окажется вне одного стандартного отклонения, довольно значительна (32%), вероятность того, что он будет лежать вне 2σ , значительно меньше (4,6%), а того, что он будет лежать за пределами 3σ , совсем ничтожна (0,3%). Это явление получило название «Правило трех сигм».

Таким образом, если вычислить величину дисперсии и стандартного отклонения по результатам измерений качества окружающей среды за достаточно продолжительный промежуток времени, то оценку качества выразить записью

$$\bar{x} - 3\sigma \leq x \leq \bar{x} + 3\sigma. \quad (2.43)$$

Если ориентироваться на требование обеспечить 95%-ную вероятность ($p = 0,95$) или, что то же самое, предсказать свершение события с коэффициентом доверия $\alpha = 1 - p$, то нужно отыскать такое значение $t_{\alpha, n-1}$, для которого справедливо равенство

$$P(-t_{\alpha, n-1} \leq \frac{\bar{x} - \alpha}{\sigma} \sqrt{n} \leq +t_{\alpha, n-1}) = 1 - \alpha. \quad (2.44)$$

Поэтому полученный из (2.44) интервал

$$\bar{x} - \frac{\sigma}{\sqrt{n}} t_{\alpha, n-1} \leq x \leq \bar{x} + \frac{\sigma}{\sqrt{n}} t_{\alpha, n-1} \quad (2.45)$$

есть доверительная оценка величины X с мерой надежности $p = 1 - \alpha$.

На основании (2.45) можно вычислить требуемое количество опытов, чтобы обеспечить заданную точность при согласованной доверительной вероятности и известной величине стандартного выборочного отклонения.

Если (2.45) переписать в виде

$$|\bar{x} - \mu| = t \frac{\sigma}{\sqrt{N}}, \quad (2.46)$$

то решение (2.46) относительно N дает

$$N = \frac{t^2 \cdot \sigma^2}{(\bar{x} - \mu)^2}. \quad (2.47)$$

Если предположить, что требуемая точность прогноза $|(\bar{x} - \mu)|$ и возможности прибора (σ) более или менее одинаковы, а доверительная вероятность $P = 0,95$ ($t = 2,96$), то минимальное число опытов получится $N = 4$. Если требуемая точность, допустим, в 10 раз превосходит неизбежную погрешность, то число опытов уже составит $N = 400$.

Статистические оценки (2.44) и (2.45) в конечном итоге — самая важная информация об измеряемом объекте, сама суть статистической обработки. Но чтобы иметь право выйти на эти результаты, необходимо с определенностью знать, имеем ли мы дело с объектом, который подчиняется нормальному закону распределения конкретной выборочной совокупности. Ведь кроме вариационного ряда, мы к началу работы ничем не располагаем.

2.1.3.4. Биномиальный закон предельного распределения случайной величины. Чтобы определить в общем виде биномиальное распределение, необходимо ввести некоторые понятия. Во-первых, представим, что мы делаем n независимых испытаний. Каждое испытание может иметь различные исходы. Будем называть исход, в котором мы заинтересованы, как успех или выигрыш. Обозначим через p вероятность успеха в любом одном испытании и через $q = 1 - p$ вероятность «проигрыша» (т. е. получения любого исхода, кроме представляющего интерес).

С помощью этих определений можно найти вероятность получения v успехов в n испытаниях:

$$\begin{aligned} P(v \text{ успехов в } n \text{ испытаниях}) &= b_{n,p}(v) = \\ &= \frac{n \cdot (n-1) \cdot \dots \cdot (n-v+1)}{1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot v} \cdot p^v \cdot q^{n-v}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Буква b в формуле означает «биномиальное»; нижние индексы в $b_{n,p}(v)$ указывают, что распределение зависит от n — числа сделанных испытаний и p — вероятности успеха в одном испытании.

Распределение называется биномиальным из-за его тесной связи с хорошо известным разложением бинома в ряд. Дробь в приве-

денном выражении — биномиальный коэффициент, часто обозначаемый $\binom{n}{v}$

$$\binom{n}{v} = \frac{n(n-1)\dots(n-v+1)}{1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot v} = \frac{n!}{v!(n-v)!}. \quad (2.49)$$

Биномиальный коэффициент появляется в разложении бинома

$$(p+q)^n = p^n + n \cdot p^{n-1} \cdot q + \dots + q^n = \sum_{v=0}^n \binom{n}{v} \cdot p^v \cdot q^{n-v}, \quad (2.50)$$

которое справедливо для любых двух чисел p и q и любого положительного целого n .

Теперь можно переписать выражение для биномиального распределения в более компактном виде

$$F(x) = \sum_{x_j < x} P(X < x_j), \quad (2.51)$$

Биномиальное распределение определяет вероятность появления v «успехов» в n испытаниях в случае, когда p есть вероятность успеха в единственном испытании. Если бы мы повторили полностью весь эксперимент (состоящий из n испытаний) много раз, то среднее число успехов определится как

$$\bar{v} = \sum_{v=0}^n v \cdot b_{n,p}(v) = n \cdot p, \quad (2.52)$$

т. е. среднее число успехов равно вероятности успеха в одном испытании (p), умноженной на число испытаний n .

Аналогично можно рассчитать и стандартное отклонение для рассматриваемого числа успехов

$$\sigma_v = \sqrt{n \cdot p \cdot (1-p)}. \quad (2.53)$$

В общем случае, когда $p \neq 1/2$, биномиальное распределение несимметрично.

Вероятность возможного значения $X = k$ определяется по формуле Бернулли:

$$P_n(k) = C_n^k \cdot p^k \cdot q^{n-k}; \quad (2.54)$$

$$C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!}, \quad (2.55)$$

где $P_n(k)$ — вероятность появления события A ровно k раз.

ПРИМЕР. На участке работает 4 станка. Вероятность того, что в произвольный момент времени работает один станок, равна 0,9. Найти вероятность того, что в некоторый момент времени работает 3 станка.

Решение. По формуле биномиального распределения имеем

$$P_4^3 = C_4^3 \cdot 0,9^3 \cdot 0,1^1 = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot (4-3)} \cdot 0,9^3 \cdot 0,1^1 = 0,2916.$$

2.1.3.5. Пуассоновский закон предельного распределения случайной величины. Под *поток событий* будем понимать последовательность событий, происходящих одно за другим в некоторые моменты времени (например, поток вызовов на телефонной станции, поток включений приборов в электросети и т. д.). Поток событий называется *регулярным*, если события следуют одно за другим через строго определенные промежутки времени.

Простейшим (пуассоновским) потоком называется поток событий, обладающий следующими свойствами:

1) *стационарностью*, т. е. вероятность попадания того или иного числа событий на участок времени длиной t зависит только от длины участка и не зависит от того, где расположен этот участок;

2) *независимостью* (отсутствием последствия), т. е. число событий, попадающих на один из неперекрывающихся участков времени, не зависит от числа событий, попадающих на другие;

3) *ординарностью*, т. е. вероятность попадания на элементарный участок Δt двух или более событий пренебрежимо мала по сравнению с вероятностью попадания одного события.

Число событий, попадающих на интервал времени $]0; \tau[$, будет распределено по закону Пуассона:

$$P_\tau(x) = \frac{(\lambda \cdot \tau)^x \cdot e^{-\lambda \cdot \tau}}{x!}, \quad (2.56)$$

где λ — интенсивность потока, равная среднему числу событий, появляющихся в единицу времени.

ПРИМЕР. Среднее число появления бракованных изделий в течение 1 ч равно 2. Найти вероятность того, что за 4 ч образуется:

- 3 бракованных образца;
- менее 3 бракованных образцов;
- не менее 3 бракованных образцов.

Решение. Предположим, что процесс появления бракованных изделий в течение τ ч является пуассоновским. Тогда возможными значениями переменной x будут 0, 1, 2. Вероятности этих значений определяем по приведенным ниже формулам:

$$P_4(x=3) = \frac{8^3 \cdot e^{-8}}{3!} = \frac{512 \cdot 0,000335}{6} = 0,028;$$

$$P_4(x < 3) = P(x=0) + P(x=1) + P(x=2) = e^{-8} + \frac{8 \cdot e^{-8}}{1} + \frac{8^2 \cdot e^{-8}}{2} \approx 0,01.$$

Поскольку $P_4(x < 3) + P_4(x \geq 3) = 1$, т. е. вместе образуют достоверное событие, то

$$P_4(x \geq 3) = 1 - P_4(x < 3) = 1 - 0,01 = 0,99 .$$

2.1.3.6. Статистическая оценка неизвестных параметров распределения. На практике во многих случаях функция распределения рассматриваемой СВ X неизвестна, ее определяют по результатам наблюдений, т. е. по выборке (по виду гистограммы или полигона частостей). Наиболее часто при исследовании непрерывных СВ применяется нормальное распределение, так как оно является предельным для многих распределений.

После того как выбрано распределение, производится оценка параметров. Например, если для описания случайной величины выбрано нормальное распределение

$$0 \leq F(x) \leq 1. \quad (2.12) \quad (2.57)$$

то по выборке x_1, x_2, \dots, x_n требуется оценить два параметра — математическое ожидание a и среднее квадратическое отклонение σ .

Если выбрано распределение Пуассона, то требуется оценить только один параметр λ , которым определяется это распределение:

$$P(X = x) = \frac{\lambda^x}{x!} \cdot e^{-\lambda}. \quad (2.58)$$

Задача оценивания неизвестного параметра Θ состоит в построении приближенных формул

$$\Theta \cong u(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (2.59)$$

где x_1, x_2, \dots, x_n — варианты рассматриваемой выборки, функцию u называют выборочной функцией или статистикой, а ее значение — оценкой.

Оценки параметров подразделяются на точечные и интервальные.

Точечная оценка параметра Θ определяется одним числом, интервальная — двумя числами — концами интервала, накрывающего параметр Θ .

Точечная оценка, математическое ожидание которой равно оцениваемому параметру, называется *несмещенной*.

Точечная оценка, математическое ожидание которой не равно оцениваемому параметру, называется *смещенной*.

Несмещенной оценкой генеральной средней (математического ожидания) является выборочное среднее:

$$\bar{x}_{\text{выб}} = \frac{\sum_{i=1}^k n_i \cdot x_i}{n}, \quad (2.60)$$

где x_i — варианты выборки; n_i — частоты; $\sum_{i=1}^k n_i$ — объем выборки.

Выборочная дисперсия

$$D_{\text{выб}} = \frac{\sum_{i=1}^k n_i \cdot (x_i - \bar{x}_{\text{выб}})^2}{n} \quad (2.61)$$

является смещенной оценкой генеральной дисперсии, так как

$$M[D_{\text{выб}}] = \frac{n-1}{n} \cdot D_{\text{ген}}. \quad (2.62)$$

Несмещенной оценкой генеральной дисперсии является исправленная выборочная дисперсия

$$S_{\text{ген}}^2 = \frac{n}{n-1} \cdot D_{\text{выб}} \quad \text{или} \quad S_{\text{ген}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^k n_i \cdot (x_i - \bar{x}_{\text{выб}})^2}{n-1}. \quad (2.63)$$

Статистическая оценка, определяемая двумя числами, концами интервала, покрывающего оцениваемый параметр, называется **интервальной**.

Метод моментов. Одним из методов получения оценок неизвестных параметров распределения по выборке является метод моментов. Он основывается на том, что эмпирические моменты (или их функции) принимаются за оценки соответствующих теоретических моментов (или их функций) и параметры выражаются через эти моменты.

Эмпирические начальные моменты порядка k определяются формулами

$$v_k^* = \bar{x}^k = \frac{1}{n} \cdot \sum_i x_i^k, \quad (2.64)$$

а соответствующие им теоретические начальные моменты порядка k — формулами

$$v_k = \begin{cases} \sum_i x_i^k \cdot p_i(x, \Theta) & \text{для дискретных СВ,} \\ \int_{-\infty}^{\infty} x^k \cdot f(x, \Theta) dx & \text{для непрерывных СВ.} \end{cases} \quad (2.65)$$

Для нахождения оценок параметров функции распределения $F(x, \Theta_1, \Theta_2)$, содержащей два неизвестных параметра Θ_1 , и Θ_2 , составляется система из двух уравнений:

$$\left. \begin{aligned} v_1(\hat{\Theta}_1, \hat{\Theta}_2) &= v_1^*(\hat{\Theta}_1, \hat{\Theta}_2); \\ \mu_2(\hat{\Theta}_1, \hat{\Theta}_2) &= \mu_2^*(\hat{\Theta}_1, \hat{\Theta}_2), \end{aligned} \right\} \quad (2.66)$$

решением которой является оценка $\hat{\Theta}_1, \hat{\Theta}_2$ функции распределения $F(x, \Theta_1, \Theta_2)$.

Приравнивая теоретический и эмпирический начальные моменты первого порядка, находим, что оценкой математического ожидания СВ X , имеющей произвольное распределение, является среднее арифметическое наблюдений СВ X . Аналогично, приравнивая теоре-

тический и эмпирический центральные моменты второго порядка, находим, что оценка дисперсии, имеющей произвольное распределение, определяется по формуле

$$D(X) = \sigma_x^2 = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 / n. \quad (2.67)$$

Таким же образом можно найти оценки теоретических моментов любого порядка.

Метод максимального правдоподобия. Другим методом получения оценок является метод максимального правдоподобия, суть которого состоит в следующем: для получения оценки неизвестного параметра необходимо найти такое значение $\hat{\Theta}$, при котором вероятность реализации полученной выборки X_1, X_2, \dots, X_n (n -мерной СВ) была бы максимальной.

Предположим, что составляющие СВ независимы, тогда вероятность того, что они примут значения, равные наблюдаемым:

$$\begin{aligned} L &= P(X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_n = x_n); \\ n &= P((x_1, \Theta)P(x_2, \Theta) \dots P(x_n, \Theta)). \end{aligned} \quad (2.68)$$

Величина L называется **функцией правдоподобия**, а $\hat{\Theta}$, являющаяся точкой максимума этой функции, — **оценкой, полученной по методу максимального правдоподобия**.

В случае непрерывной СВ функция максимального правдоподобия имеет вид:

$$L = f(x_1, x_2, \dots, x_n) = f(x_1, \Theta)f(x_2, \Theta) \dots f(x_n, \Theta). \quad (2.69)$$

Выражение (2.69) определяет плотность распределения вероятностей непрерывной СВ или плотность распределения выборки. Для нахождения оценок в этом случае составляется система m уравнений (m — число оцениваемых параметров):

$$\frac{\partial L}{\partial \Theta_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (2.70)$$

и выбирается то решение, при котором функция правдоподобия достигает максимума.

Поскольку экстремум функции L и $\ln L_1$ достигается при одних и тех же значениях $\Theta = u(x_1, x_2, \dots, x_n)$, то для упрощения расчетов иногда пользуются логарифмической функцией правдоподобия.

Метод наибольшего правдоподобия дает состоятельные оценки. Недостаток метода заключается в том, что иногда оценки наибольшего правдоподобия являются смещенными, кроме того, для нахождения оценок часто приходится решать сложные системы уравнений.

Метод наименьших квадратов. Применяется для оценивания параметров зависимостей между случайными величинами. Суть его состоит в следующем. Фиксируется некоторая случайная величина X и измеряется некоторая случайная величина Y , которая связана с X зависимостью

$$y_i = f(x_i, \Theta) + \varepsilon, \quad (2.71)$$

где $f(x_i, \Theta)$ — известная функция; Θ — оцениваемый параметр; ε — случайная ошибка в i -м измерении.

Необходимо по результатам эксперимента найти оценку Θ^* .

В качестве критерия используется сумма квадратов

$$F(\Theta) = \sum (y_i - f(x_i, \Theta))^2. \quad (2.72)$$

В качестве оценки для параметра Θ принимается такое Θ^* , для которого сумма квадратов минимальна, т. е. $L(\Theta^*) = \min F(\Theta)$. Рассмотрим линейную модель

$$y_i = \sum_{j=1}^n \Theta_j \cdot x_{ij} + \varepsilon_i \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (2.73)$$

где i — номер эксперимента; j — номер переменной; x_{ij} — значение j -й переменной в i -м эксперименте.

В матричной форме записи вектор оцениваемых параметров имеет вид, $\Theta^T = (\Theta_1, \Theta_2, \dots, \Theta_m)$, вектор результатов эксперимента $Y^T = (y_1, y_2, \dots, y_n)$, а матрица условий наблюдений представляется в форме

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{21} & \dots & x_{m1} \\ x_{12} & x_{22} & \dots & x_{m2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{1n} & x_{2n} & \dots & x_{mn} \end{pmatrix}. \quad (2.74)$$

Если матрица X — невырожденная, т. е. $|X^T \cdot X| \neq 0$, то оценкой по методу наименьших квадратов для параметров модели является *статистика*

$$\Theta^* = (X^T \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot Y. \quad (2.75)$$

Оценка (2.75) является несмещенной. Наилучшим в среднем квадратичном смысле прогнозом для Θ будет статистика $Y^* = \Sigma \Theta^* \cdot x_j$.

2.1.3.7. Критерии согласия. Критерии согласия позволяют оценить, насколько теоретический закон распределения согласуется с наблюдаемой на опыте выборкой. Так как даже в том случае, когда выборка составлена из значений случайной величины, заведомо подчиняющейся данному закону распределения, ее элементы будут распределяться по случайному закону, проверка согласия принятого закона распределения возможна только вероятностными методами. Поэтому результатом проверки не может быть точное подтверждение или отрицание гипотезы, а только установление вероятности того, что данная гипотеза не противоречит опытными данным.

Схемы использования критериев согласия. Все критерии согласия, независимо от их конкретного воплощения, составляются по одинаковой схеме. Прежде всего выбирается некоторый параметр χ , который может служить мерой случайного разброса элементов выборки при предполагаемом (теоретическом) законе распределения. Параметр χ , который в значительной степени может быть выбран произвольно, должен удовлетворять некоторым общим требованиям. Так, например, необходимо, чтобы закон распределения для этого параметра мог быть определен просто и не зависеть от вида проверяемого закона распределения. Кроме того, необходимо, чтобы этот параметр обладал должной «чувствительностью», т. е. чтобы отличие проверяемого закона распределения от действительного достаточно существенно сказывалось на его значении.

После того как параметр χ выбран, задаются некоторой вероятностью α («уровнем значимости»), достаточно малой для того, чтобы в данной задаче событие, имеющее меньшую вероятность, считать практически невозможным. Пользуясь законом распределения χ , определяют такое значение χ_α этой случайной величины, для которого выполняется равенство

$$P\{\chi > \chi_\alpha\} \geq \alpha. \quad (2.76)$$

Далее находят значение χ для данной выборки. Обозначим это значение χ_q .

Если окажется, что $\chi_q > \chi_\alpha$, то это означает (в предположении, что имеет место теоретический закон распределения), что произошло событие, вероятность которого меньше α , т. е. весьма маловероятное. В этом случае следует признать, что сделанное предположение о виде закона распределения случайной величины X плохо согласуется с результатами опыта и должно быть отвергнуто. Если окажется, что $\chi_q < \chi_\alpha$, то сделанное предположение о виде закона распределения случайной величины X не противоречит опытным данным.

Как и при всех вероятностных расчетах, критерий согласия не может дать абсолютной уверенности в правильности или ложности сделанного предположения о виде закона распределения, однако при систематическом его применении можно в конце концов получить достаточную уверенность в правильности выводов о виде закона распределения. Выбор уровня значимости α определяется степенью ответственности выводов, которые делаются на основе применения критерия согласия. Обычно для α выбирается одно из следующих значений: 0,10; 0,05 и 0,01, для которых и составлено большинство таблиц, служащих для определения χ_α .

Центральные статистические моменты. Проверка соответствия результатов измерений нормальному закону распределения производится путем вычисления особых параметров выборочной совокупности (центральных статистических моментов): асимметрии:

$$A = \frac{1}{N\sigma^2} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^3; \quad (2.77)$$

эксцесса:

$$E = \frac{1}{N \cdot \sigma^4} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^4 - 3, \quad (2.78)$$

а также дисперсий этих величин:

$$D(A) = \frac{6(N-1)}{(N+1)(N-3)}; \quad (2.79)$$

$$D(E) = \frac{24(N-2)(N-3)}{(N+1)^2(N+3)(N+5)}. \quad (2.80)$$

Критериями согласия в решении вопроса о соответствии выборочной совокупности нормальному закону распределения случайной величины выступают неравенства

$$|A| \leq 3\sqrt{D(A)}; \quad (2.81)$$

$$|E| \leq 5\sqrt{D(E)}. \quad (2.82)$$

Если неравенства (2.81) и (2.82) выполняются, то наблюдаемое распределение измеряемой величины можно считать нормальным.

Нормальность распределения экспериментального вариационного ряда можно также проверить путем вычисления математического ожидания, моды и медианы выборки, группированной в виде гистограммы (рис. 15).

Оценкой моды d_x унимодального (одновершинного) распределения является элемент выборки, встречающийся с наибольшей частотой. Для группированной выборки, когда длины всех интервалов группировки одинаковы и равны b , оценка моды вычисляется по формуле

$$d_x = a_\alpha + b \frac{n_\alpha - n_{\alpha-1}}{2n_\alpha - n_{\alpha-1} - n_{\alpha+1}}, \quad (2.83)$$

где a_α — нижняя граница интервала, содержащего наибольшее число элементов выборки; n_α — число элементов выборки в этом интервале; $n_{\alpha-1}, n_{\alpha+1}$ — число элементов в соседних интервалах.

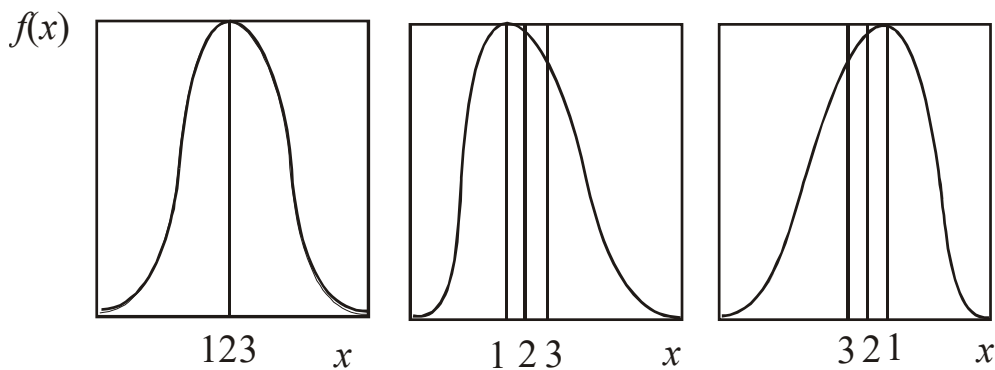


Рис. 15. Параметры распределения случайной величины: 1 — мода; 2 — математическое ожидание; 3 — медиана

Оценкой медианы h_x называется число \tilde{h}_x , которое делит вариационный ряд на две части, содержащие равное число элементов. Если объем выборки n — нечетное число ($n = 2k + 1$), то

$$\tilde{h}_x = x^{(k+1)}, \quad (2.84)$$

т. е. является элементом вариационного ряда со средним номером. Если n — четное ($n = 2k$), то

$$\tilde{h}_x = (x^{(k)} + x^{(k+1)})/2. \quad (2.85)$$

Оценка медианы для группированной совокупности также может быть вычислена по формуле

$$\tilde{h}_x = a_n + b \frac{n/2 - (n_1 + n_2 + \dots + n_{h-1})}{n_h}. \quad (2.86)$$

Критерий Хи-квадрат (Пирсона). Существует много различных предельных распределений, соответствующих множеству различных типов возможных экспериментов. Вероятно, к самым важным для использования в химической технологии следует отнести три:

- гауссово (или нормальное);
- биномиальное;
- распределение Пуассона.

Предположим, что мы выполняем эксперимент, для которого известно ожидаемое распределение результатов. Предположим далее, что мы повторяем эксперимент несколько раз и регистрируем результаты наблюдений. Вопрос, который при этом нужно решить, согласуется ли наблюдаемое распределение с ожидаемым теоретическим распределением.

Начнем с конкретного примера. Предположим, что мы сделали 40 измерений выхода конечного химического продукта из одной тонны исходного сырья, и получили значения, приведенные в табл. 4.

Т а б л и ц а 4

Измеренные значения x (в килограммах)

731	772	771	681	722	688	653	757	733	742
739	780	709	676	760	748	672	687	766	645
678	748	689	810	805	778	764	753	709	675
698	770	754	830	725	710	738	638	787	712

Пусть у нас имеются основания полагать, что результаты этих измерений распределены в соответствии с законом Гаусса. В таких экспериментах обычно не известны заранее ни центр X , ни ширина σ ожидаемого распределения. Следовательно, нашим первым шагом будет расчет наилучших оценок для этих величин по результатам 40 измерений:

$$(\text{наилучшая оценка } X) = \bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{40} x_i}{40} = 730,1;$$

$$(\text{наилучшая оценка } \sigma) = \sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{40} (x_i - \bar{x})^2}{39}} = 46,8 .$$

Чтобы определить, удовлетворяет ли фактическое распределение наших результатов гипотезе, что эти результаты распределены по закону Гаусса, на основании рассчитанных значений X и σ мы должны рассчитать, как, согласно нашим ожиданиям, были бы распределены эти 40 результатов, если бы гипотеза была верна, и сравнить это ожидаемое распределение с нашим фактически полученным распределением. Первая трудность заключается в том, что x есть непрерывная переменная, поэтому мы не можем говорить об ожидаемом числе измерений для какого-то одного значения x . Вместо этого должны говорить об ожидаемом числе в некотором интервале $a < x < b$, т. е. должны поделить весь интервал возможных значений на **бины**. В случае 40 измерений мы могли бы выбрать границы бинов при $X - \sigma$, X и $X + \sigma$, определяя таким образом четыре бина, как показано в табл. 5.

Таблица 5

Возможный выбор бинов для данных табл. 4

Номер бина	1	2	3	4
Значения x в бине	$x < X - \sigma$ или $x < 683,3$	$X - \sigma < x < X$ или $683,3 < x < 730,1$	$X < x < X + \sigma$ или $730,1 < x < 776,9$	$X + \sigma < x$ или $776,9 < x$
Число наблюдений Q_k в бине	8	10	16	6

Последняя строка показывает число данных, которые попали в соответствующий бин.

Поделив весь интервал возможных измеренных значений на бины, мы можем сформулировать наш вопрос более точно. Во-первых, можем сосчитать число результатов измерений, которые попадают в каждый бин k . Обозначим это число через O_k . Далее, предполагая, что результаты наших измерений распределены нормально (с X и σ , как мы оценили), мы можем рассчитать *ожидаемое* число E_k результатов измерений для каждого бина k . Затем необходимо будет решить, насколько хорошо наблюдаемые числа O_k согласуются с ожидаемыми числами E_k .

Вероятность того, что результат любого одного измерения попадает в интервал $a < x < b$, равна площади под функцией Гаусса между $x = a$ и $x = b$.

В нашем примере вероятности попадания результата измерения в каждый из четырех бинов — это четыре площади под колоколообразной кривой, две равные из которых вместе дают хорошо известное значение 68%, так что вероятность попадания в один из двух центральных бинов составляет 34%, т. е. $P_2 = P_3 = 0,34$. Две внешние площади представляют оставшиеся 32%; таким образом, $P_1 = P_4 = 0,16$. Чтобы найти ожидаемые числа E_k , мы просто умножим эти вероятности на полное число измерений $N = 40$. Тот факт, что числа E_k не целые, служит напоминанием о том, что «ожидаемое число» — это не то, которое мы действительно ожидаем в любом отдельном эксперименте; это скорее среднее ожидаемое число, которое получится после повторения всей серии измерений много раз.

Таблица 6

Ожидаемые числа E_k и наблюдаемые числа O_k для 40 измерений, результаты которых приведены в табл. 4

Номер бина	1	2	3	4
Бин	$x < X - \sigma$	$X - \sigma < x < X$	$X < x < X + \sigma$	$X + \sigma < x$
Наблюдаемое число O_k	8	10	16	6
Ожидаемое число	6,4	13,6	13,6	6,4
$O_k - E_k$	1,6	-3,6	2,4	-0,4

Теперь наша задача — решить, насколько хорошо ожидаемые числа E_k согласуются с соответствующими наблюдаемыми числами O_k

(в нижней строке табл. 6). Мы, естественно, не ожидаем *идеального* согласия между E_k и O_k после любого конечного числа измерений. Но с другой стороны, если бы наша гипотеза о том, что результаты измерений распределены нормально, была правильной, то мы ожидали бы, что в некотором смысле отклонения $O_k - E_k$ будут *малы*. И наоборот, если бы оказалось, что отклонения $O_k - E_k$ *велики*, то мы стали бы подозревать, что наша гипотеза неверна.

Чтобы придать точный смысл утверждениям, что отклонения $O_k - E_k$ «малы» или «велики», мы должны решить, насколько большими мы ожидали получить значения $O_k - E_k$, если бы результаты наших измерений действительно были распределены нормально. Если представить, что вся серия из 40 измерений повторяется много раз, то числа O_k результатов измерений в любом одном бине k можно рассматривать как результат счетного эксперимента. Множество различных результатов для O_k должно было бы иметь среднее значение E_k и флуктуировать относительно E_k со стандартным отклонением порядка $\sqrt{E_k}$. Таким образом, два числа, которые нужно сравнивать, — это отклонение $O_k - E_k$ и ожидаемая величина его флуктуации $\sqrt{E_k}$.

Итак, мы должны рассмотреть отношение

$$\frac{O_k - E_k}{\sqrt{E_k}}. \quad (2.87)$$

Поскольку числитель для разных бинов может быть как положительным, так и отрицательным, то для проверки гипотезы это отношение нужно возвести в квадрат для каждого k и затем просуммировать по всем бинам. Эта процедура определяет число, называемое χ^2 (хи-квадрат).

$$\chi^2 = \sum_{k=1}^n \frac{(O_k - E_k)^2}{E_k}. \quad (2.88)$$

Должно быть ясно, что это число служит показателем того, насколько хорошо согласуются эмпирическое и теоретическое распределения. Если $\chi^2 = 0$, то согласие идеальное, т. е. $O_k = E_k$ для всех бинов, что в высшей степени невероятно. В общем случае отдельные члены в сумме должны быть порядка 1, а в сумме всего n членов. Значит,

если (χ^2 порядка n или меньше), то эмпирическое и теоретическое распределения согласуются настолько хорошо, насколько можно было бы ожидать. Другими словами, если $\chi^2 \leq n$, то у нас нет оснований сомневаться в том, что результаты наших измерений были распределены так, как предполагалось.

Простой расчет для нашего примера дает

$$\chi^2 = \frac{(1,6)^2}{6,4} + \frac{(-3,6)^2}{13,6} + \frac{(2,4)^2}{13,6} + \frac{(-0,4)^2}{6,4} = 1,80.$$

Так как величина 1,80 для χ^2 меньше, чем число членов в сумме (4), то у нас нет оснований сомневаться в гипотезе, что результаты наших измерений распределены нормально.

Оказывается, что более строгой процедурой было бы сравнение χ^2 не с числом бинов n , а с **числом степеней свободы**, обозначаемым через d .

В общем случае число степеней свободы d в статистических расчетах определяется как число полученных данных минус число параметров, вычисленных по этим данным и используемых в расчетах.

$$d = k - c, \quad (2.89)$$

где k – число бинов; c – число параметров, которые были вычислены по данным для расчета ожидаемых чисел E_k .

Число c часто называют **числом связей**.

Расчетная величина $\chi^2 = \sum_{k=1}^n \frac{(O_k - E_k)^2}{E_k}$ при $n \rightarrow \infty$ стремится к

распределению хи-квадрат с $d = k - c - 1$ степенями свободы, где c означает число параметров теоретического распределения $F(x)$, оцениваемых на основании выборки, а k – число интервалов, на которые разбито все множество наблюдаемых данных.

Чтобы определить, на сколько интервалов (бинов) следует разбивать вариационный ряд, можно воспользоваться формулой

$$k = 1 + 3,2 \cdot \lg n = 1 + 1,38976 \cdot \ln n. \quad (2.90)$$

Нужно иметь в виду, что значения k должны находиться в пределах 5–10. Следовательно, чтобы получить минимально допустимое число бинов, объем выборки должен быть не менее 20 измерений.

Обычно выборка разбивается на 7 интервалов (бинов), при этом ее номинальный объем составляет 100 измерений.

Число $c + 1$ означает количество линейных связей, которые накладываются на эмпирический ряд частот при вычислении теоретического ряда частот.

Проверка гипотезы о нормальном распределении **для дискретного вариационного ряда** сводится к следующему алгоритму:

1) вычислить теоретические частоты по формуле

$$m_i^* = \frac{n \cdot h}{\sigma_{\text{выб}}} \cdot \varphi(u_i), \quad (2.91)$$

где n — объем выборки; h — шаг, равный разности между двумя соседними вариантами; $y_{\text{выб}}$ — выборочное среднее квадратичное отклонение, $u = (x_i - x_{\text{выб}}^*) / y_{\text{выб}}$, $x_{\text{выб}}^*$ — выборочное среднее.

$$\varphi(u) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-u^2/2}; \quad (2.92)$$

2) вычислить величину

$$\chi_q^2 = \sum_{i=1}^r \frac{(m_i - m_i^*)^2}{m_i^*}; \quad (2.93)$$

3) найти число степеней свободы $k = r - 3 - 1$, где r — число различных значений x_i ; 3 — количество линейных связей, которые накладываются на эмпирический ряд частот при вычислении теоретического ряда частот (чаще всего это выборочное среднее, выборочное среднее квадратическое отклонение и собственно теоретическая частота);

4) выбрать уровень значимости;

5) по таблице квантилей распределения хи-квадрат по данным k и χ_q^2 определить вероятность $P(\chi^2 > \chi_q^2)$. Если эта вероятность меньше принятого уровня значимости, то гипотеза отвергается, если больше — принимается.

Если вариационный ряд непрерывен, то проверка гипотезы о нормальном распределении сводится к следующему алгоритму:

1) вычислить выборочное среднее и выборочное среднее квадратичное отклонение, причем вместо вариант x_i^* взять среднее арифметическое концов интервала $x_i^* = (x_i + x_{i+1}) / 2$;

2) нормировать случайную величину X , т. е. перейти к новой случайной величине $Y = (X - X^*)/y_{\text{выб}}^*$, причем наименьшее значение приравнять к $-\infty$, а наибольшее — к $+\infty$;

3) вычислить теоретические вероятности попадания Y в интервалы $]y_i - y_{i+1}[$:

$$P(y_i < Y < y_{i+1}) = \Phi(y_{i+1}) - \Phi(y_i), \quad (2.94)$$

где $\Phi(y)$ — функция Лапласа;

$$\Phi(y) = \int_{-\infty}^y \varphi(u) du;$$

$$\varphi(y) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-y^2/2};$$

4) вычислить

$$\chi_q^2 = \sum_{i=1}^r \frac{(m_i - n \cdot p_i)^2}{n \cdot p_i}, \quad (2.95)$$

где n — объем выборки;

5) найти число степеней свободы $k = s - 3$, где s — число интервалов выборки;

6) выбрать уровень значимости;

7) по таблице квантилей (табл. 7) распределения хи-квадрат с помощью данных k и χ_q^2 определить вероятность $P(\chi^2 > \chi_q^2)$. Если эта вероятность меньше принятого уровня значимости, то гипотеза отвергается, если больше — принимается.

Таким образом, обработка статистических данных выборочным методом предполагает:

1) составление вариационного ряда наблюдаемых значений изучаемой величины;

2) построение эмпирической кривой (полигона) распределения;

3) вычисление характеристик эмпирического распределения;

4) определение по виду графика эмпирической кривой распределения теоретического распределения, к которому приближается эмпирическая кривая;

5) оценку близости эмпирического распределения к предполагаемому теоретическому.

В случае непрерывных СВ обработку статистических данных можно провести также по следующей схеме:

- 1) составление вариационного ряда;
- 2) определение эмпирической функции;
- 3) построение графика эмпирической функции;
- 4) построение графика теоретической функции распределения путем замены ломаной линии на кривую;
- 5) определение уравнения кривой распределения;
- 6) определение дифференциального закона распределения.

Критерий Колмогорова. Критерий согласия Колмогорова применяется для проверки гипотез о законах распределения только непрерывных случайных величин. Отличие от критерия согласия хи-квадрат состоит в том, что сравниваются эмпирическая функция $F^*(x)$ и теоретическая функция $F(x)$ при известных параметрах распределения.

В качестве меры расхождения между теоретическим и эмпирическим распределениями рассматривается максимальное значение модуля разности $D = \max |F^*(x) - F(x)|$.

А.Н. Колмогоров доказал, что какова бы ни была функция распределения $F(x)$ непрерывной случайной величины A , при неограниченном увеличении числа независимых наблюдений вероятность неравенства $P(D \cdot \sqrt{n} \geq \lambda)$ стремится к пределу:

$$P(\lambda) = 1 - \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \cdot e^{-2 \cdot n^2 \cdot \lambda^2}. \quad (2.96)$$

Уровень значимости α принимается чаще всего в пределах 0,10–0,20. Проверку гипотезы с помощью критерия Колмогорова проводят в следующем порядке:

- 1) располагают результаты наблюдений по возрастанию их значений в виде интервального вариационного ряда;
- 2) находят эмпирическую функцию распределения $F^*(x)$;
- 3) вычисляют, пользуясь предполагаемой функцией $F(x)$, значения теоретической функции распределения, соответствующие наблюдаемым значениям случайной величины X ;
- 4) находят для каждого x_i модуль разности между эмпирической и теоретической функциями распределения;
- 5) определяют величину;
- 6) находят критические значения λ_α в зависимости от уровня значимости из табл. 8.

Квантили χ^2 в зависимости от k и p

Число степеней свободы (k)	$p = 0,99$	0,98	0,95	0,90	0,80	0,70	0,50	0,30	0,20	0,10	0,05	0,02	0,01
1	0,0001	0,0006	0,0003	0,0158	0,0642	0,148	0,455	1,074	1,642	2,706	3,841	5,412	6,635
2	0,0201	0,0404	0,103	0,211	0,446	0,713	1,386	2,408	3,219	4,605	5,991	7,824	9,210
3	0,115	0,185	0,352	0,584	1,005	1,424	2,366	3,665	4,642	6,251	7,815	9,837	11,341
4	0,297	0,429	0,711	1,064	1,649	2,195	3,357	4,878	5,989	7,779	9,488	11,668	13,277
5	0,5134	0,752	1,145	1,610	2,343	3,000	4,351	6,064	7,289	9,236	11,070	13,388	15,086
6	0,872	1,134	1,635	2,204	3,070	3,828	5,348	7,231	8,558	10,645	12,592	15,033	16,812
7	1,239	1,564	2,167	2,833	3,822	4,671	6,346	8,383	9,803	12,077	14,067	16,622	18,475
8	1,646	2,032	2,733	3,490	4,594	5,727	7,344	9,524	11,030	13,362	15,507	18,168	20,090
9	2,038	2,532	3,325	4,168	5,380	6,393	8,343	10,656	12,242	14,684	16,919	19,679	21,666
10	2,558	3,059	3,940	4,865	6,179	7,267	9,342	11,781	13,442	15,987	18,307	21,161	23,209
11	3,053	3,609	4,575	5,578	6,989	8,148	10,341	12,899	14,631	17,275	19,675	22,618	24,725
12	3,571	4,178	5,226	6,304	7,807	9,034	11,340	14,011	15,812	18,549	21,026	24,054	26,217
13	4,107	4,765	5,892	7,042	8,634	9,926	12,340	15,119	16,985	19,812	22,362	25,472	27,688
14	4,660	5,368	6,571	7,790	9,467	10,821	13,339	16,222	18,151	21,064	23,685	26,873	29,141
15	5,229	5,985	7,261	8,547	10,307	11,721	14,339	17,332	19,311	22,307	24,996	28,259	30,578
16	5,612	6,614	7,962	9,312	11,152	12,624	15,338	18,418	20,465	23,542	26,296	29,633	32,000
17	6,408	7,255	8,672	10,085	12,002	13,531	16,338	19,511	21,615	24,769	27,587	30,995	33,409
18	7,015	7,906	9,390	10,865	12,857	14,440	17,338	20,601	22,760	25,989	28,869	32,346	34,805
19	7,663	8,567	10,117	11,651	13,716	15,352	18,338	21,689	23,900	27,204	30,144	33,687	36,191
20	8,260	9,237	10,851	12,443	14,578	16,266	19,337	22,775	25,038	28,412	31,410	35,020	37,566
21	8,897	9,915	11,591	13,240	15,445	17,182	20,337	23,858	26,171	29,615	32,671	36,343	38,932
22	9,542	10,600	12,338	14,041	16,314	18,101	21,337	24,939	27,301	30,813	33,924	37,659	40,289
23	10,196	11,293	13,091	14,848	17,187	19,021	22,337	26,018	28,429	32,007	35,172	38,968	41,638
24	10,856	11,992	13,848	15,659	18,062	19,943	23,337	27,096	29,553	33,196	36,415	40,270	42,980
25	11,284	12,697	14,611	16,473	18,940	20,867	24,337	28,172	30,675	34,382	37,652	41,566	44,314
26	12,198	13,409	15,379	17,292	19,820	21,792	25,336	29,246	31,795	35,563	38,885	42,856	45,642
27	12,879	14,125	16,151	18,114	20,703	22,719	26,336	30,319	32,912	36,741	40,113	44,140	46,963
28	13,565	14,847	16,928	18,939	21,588	23,647	27,336	31,391	34,027	37,916	41,337	45,419	48,278
29	14,256	15,574	17,708	19,768	22,475	24,577	28,336	32,461	35,139	39,087	42,557	46,693	49,588
30	14,953	16,306	18,493	20,599	23,364	25,508	29,336	33,530	36,250	40,256	43,773	47,962	50,892

Таблица 8

Критические значения λ_α

α	0,50	0,40	0,30	0,20	0,10	005	0,02	0,01	0,001
λ_α	0,828	0,895	0,974	1,073	1,224	1,358	1,510	1,627	1,950

Если опытное значение $\alpha \geq \lambda_\alpha$, то гипотеза о согласии теоретического закона распределения с данными выборки опровергается. Если $\alpha \leq \lambda_\alpha$, то гипотеза принимается.

ПРИМЕР. Результаты измерения 1000 деталей помещены в табл. 9.

Таблица 9

Результаты измерения 1000 деталей

i	x_i	m_i	i	x_i	m_i	i	x_i	m_i
1	98,0	21	5	100,0	181	8	101,5	97
2	98,5	47	6	100,5	201	9	102,0	41
3	99,0	87	7	101,0	142	10	102,5	25
4	99,5	158						

Пользуясь критерием согласия Колмогорова, проверить следующую гипотезу: СВ X подчиняется нормальному закону с математическим ожиданием $M(x) = a = 100,25$ мм и средним квадратичным отклонением $\sigma = 1$ мм при уровне значимости $\alpha = 0,05$.

Решение. Результаты наблюдений в порядке возрастания их значений помещены в табл. 10.

Таблица 10

Результаты наблюдений в порядке возрастания их значений

i	$x_i - a$	$1/2\Phi(x_i - a)$	$F(x_i)$	$F^*(x_i)$	$ F^*(x_i) - F(x_i) $
1	-2,25	-0,4877	0,0123	0,0105	0,0018
2	-1,75	-0,4599	0,0401	0,0445	0,0044
3	-1,25	-0,3944	0,1056	0,1115	0,0059
4	-0,75	-0,2734	0,2266	0,2340	0,0074
5	-0,25	-0,0987	0,4013	0,4035	0,0022
6	0,25	0,0987	0,5987	0,5945	0,0042
7	0,75	0,2734	0,7734	0,7660	0,0074
8	1,25	0,3944	0,8944	0,8855	0,0089
9	1,75	0,4599	0,9599	0,9545	0,0054
10	2,25	0,4877	0,9877	0,9875	0,0002

Эмпирическую функцию распределения $F^*(x)$ вычисляем по формуле

$$F^*(x_k) = \sum_{i=1}^k m_i / 1000. \quad (2.97)$$

Теоретическую функцию распределения $F(x)$ определяем по формуле

$$F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \Phi(x - a). \quad (2.98)$$

где Φ — функция Лапласа:

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^x \varphi(u) du ;$$

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-x^2/2} .$$

Составляем для каждого значения x_i разности $|F^*(x_i) - F(x_i)|$. Результаты вычислений помещены в табл. 10.

Из табл. 10 выбираем наибольшую из разностей $|F^*(x_i) - F(x_i)| = D = 0,0089$. Определяем $\lambda = D \cdot \sqrt{n} = 0,0089 \cdot \sqrt{1000} = 0,281$. По значению $\alpha = 0,05$ находим из таблицы $\lambda_\alpha = 1,073$. Видим, что $\lambda < \lambda_\alpha$, следовательно, гипотеза о согласии наблюдений с законом нормального распределения с параметрами $a = 100,25$ и $\sigma = 1$ не опровергается.

Особенностью критерия согласия Колмогорова является то, что он применим только к непрерывным случайным величинам и только в том случае, если параметры теоретического закона распределения не определяются по данной выборке, а принимаются из каких-либо теоретических соображений или определены из других опытов.

Критерий Смирнова. Близким по идее к критерию согласия Колмогорова является критерий согласия Смирнова, предложенный им для проверки предположения о том, что законы распределения случайных величин, значения которых получены в двух независимых выборках, одинаковы.

Предположим, что получено n_1 независимых значений x_1, x_2, \dots, x_{n_1} случайной величины X и n_2 независимых значений случайной величины Y , по которым определены статистические функции распределения $F_x(x)$ и $F_y(y)$. Примем в качестве меры расхождения $\chi = D_{n_1 n_2}$

максимальное значение модуля разности $F_x(x)$ и $F_y(y)$ при одинаковых аргументах, т. е. положим

$$D_{n_1 n_2} = \max |F_x(x) - F_y(y)|. \quad (2.99)$$

Н. В. Смирновым установлено, что случайная величина

$$\lambda = \frac{\sqrt{n_1 \cdot n_2} \cdot D_{n_1 n_2}}{\sqrt{n_1 + n_2}} \quad (2.100)$$

удовлетворяет закону распределения Колмогорова, если $n_1 \rightarrow \infty$, $n_2 \rightarrow \infty$.

При использовании данного критерия на практике необходимо построить совместно графики статистических функций распределения $F_x(x)$ и $F_y(y)$, найти наибольшее расхождение $D_{n_1 n_2} = \max |F_x(x) - F_y(y)|$

для данных выборок, вычислить параметр $\lambda = \frac{\sqrt{n_1 \cdot n_2} \cdot D_{n_1 n_2}}{\sqrt{n_1 + n_2}}$ и по таб-

лице, составленной для закона распределения Колмогорова, определить λ из формулы

$$P(\lambda \geq \lambda_\alpha) = \alpha. \quad (2.101)$$

Если $\lambda < \lambda_\alpha$, то предположение об одинаковом распределении величин X и Y не противоречит данным испытания.

Коэффициент точности. При помощи теоретического закона вычисляются вероятности того, что изучаемая случайная величина принимает значения, заключенные в интервалах эмпирического распределения, для которых даны числа случаев. Умножая полученные вероятности на общее число наблюдений, получаем теоретические численности c . Сравнение этих чисел с численностями Θ , полученными из наблюдений, может показать, насколько наблюдаемое распределение близко к теоретическому.

Коэффициент точности H вычисляется по формуле

$$H = \frac{1}{s-1} \cdot \sum_{k=1}^s \left[\frac{(\Theta - c)^2}{c} \right]_k, \quad (2.102)$$

где s — число интервалов эмпирического распределения. Можно показать, что математическое ожидание H равно единице. Поэтому построенное теоретическое распределение близко к эмпирическому, если H близко к единице.

Критерий Стьюдента. При нахождении оценок параметров гипотетического распределения случайной величины X важную роль играет распределение Стьюдента (t -распределение).

Пусть Y, Y_1, Y_2, \dots, Y_n — независимые случайные величины, имеющие нормальное распределение с параметрами $M(Y) = M(Y_1) = \dots = M(Y_n) = 0$ и $\sigma_{Y_1} = \sigma_{Y_2} = \dots = \sigma_{Y_n} = 1$.

Случайная величина

$$t = \frac{Y}{\sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n Y_i^2}} = \frac{Y}{\sqrt{\frac{1}{n} \cdot \chi_n^2}} \quad (2.103)$$

являющаяся функцией нормально распределенных случайных величин, имеет распределение Стьюдента, а ее плотность

$$f(t) = S(t, \nu) = \frac{\Gamma(\frac{\nu+1}{2})}{\sqrt{\pi \cdot \nu} \cdot \Gamma(\frac{\nu}{2})} \cdot \left(1 + \frac{t^2}{\nu}\right)^{-(\nu+1)/2} \quad (2.104)$$

В формуле (2.104) буквой ν обозначено число слагаемых в подкоренном выражении соотношения (2.103), т. е. $\nu = n$.

Можно показать, что математическое ожидание и дисперсия случайной величины t имеют следующий вид:

$$M(t) = 0, D(t) = \nu / (\nu - 2), \nu > 2. \quad (2.105)$$

Из формулы (2.104) видно, что распределение случайной величины t зависит только от одного параметра — ν . При $\nu = 1$ распределение Стьюдента является распределением Коши, плотность распределения вероятностей которого задается выражением

$$f(t) = \frac{1}{\pi \cdot (1 + t^2)}. \quad (2.106)$$

Если $\nu \rightarrow \infty$, то

$$(1 + t^2 / \nu)^{-(\nu+1)/2} \rightarrow e^{-t^2/2}, \frac{\Gamma(\frac{\nu+1}{2})}{\Gamma(\nu/2) \cdot \sqrt{\pi \cdot \nu}} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}}. \quad (2.107)$$

Это означает, что последовательности плотностей распределения вероятностей случайных величин, имеющих распределение Стьюдента, при неограниченном увеличении числа степеней свободы сходятся к стандартизованному нормальному распределению.

В табл. 11 приведены значения квантилей распределения Стьюдента $t_{\alpha/2, \nu}$ в зависимости от числа ν степеней свободы и заданного уровня вероятности α , найденные из решения уравнения

$$P(|t| > t_{\alpha/2; \nu}) = 2 \cdot \int_{t_{\alpha/2; \nu}}^{\infty} f(t) dt = \alpha. \quad (2.108)$$

Таблица 11

Критические значения $t_{\alpha/2, \nu}$, удовлетворяющие условию

$$P(|t| > t_{\alpha/2; \nu}) = 2 \cdot \int_{t_{\alpha/2; \nu}}^{\infty} f(t) dt = \alpha$$

ν / α	0,40	0,30	0,20	0,10	0,050	0,025	0,010	0,005	0,001	0,0005
1	0,325	0,727	1,376	3,078	6,314	12,71	31,82	63,66	318,3	636,6
2	0,289	0,617	1,061	1,886	2,920	4,303	6,965	9,921	22,33	31,60
3	0,277	0,584	0,978	1,638	2,353	3,182	4,541	5,841	10,22	12,94
4	0,271	0,569	0,941	1,533	2,132	2,776	3,747	4,604	7,173	8,610
5	0,267	0,559	0,920	1,476	2,015	2,571	3,365	5,032	5,893	6,859
6	0,265	0,553	0,906	1,440	1,943	2,447	3,143	3,707	5,208	5,959
7	0,263	0,549	0,896	1,415	1,895	2,365	2,998	3,499	4,785	5,405
8	0,262	0,546	0,889	1,397	1,860	2,306	2,896	3,355	4,501	5,041
9	0,261	0,543	0,883	1,383	1,833	2,262	2,821	3,250	4,297	4,781
10	0,260	0,542	0,879	1,372	1,812	2,228	2,764	3,169	4,144	4,587
11	0,260	0,540	0,876	1,363	1,796	2,201	2,718	3,106	4,025	4,437
12	0,259	0,539	0,873	1,356	1,782	2,179	2,681	3,055	3,930	4,318
13	0,259	0,538	0,870	1,350	1,771	2,160	2,650	3,012	3,852	4,221
14	0,258	0,537	0,868	1,345	1,761	2,145	2,624	2,977	3,787	4,140

ν / α	0,40	0,30	0,20	0,10	0,050	0,025	0,010	0,005	0,001	0,0005
15	0,258	0,536	0,866	1,341	1,753	2,131	2,602	2,947	3,733	4,073
16	0,258	0,535	0,865	1,337	1,746	2,120	2,583	2,921	3,686	4,015
17	0,257	0,534	0,863	1,333	1,740	2,110	2,567	2,898	3,646	3,965
18	0,257	0,534	0,862	1,330	1,734	2,101	2,552	2,878	3,611	3,922
19	0,257	0,533	0,861	1,328	1,729	2,093	2,539	2,861	3,579	3,883
20	0,257	0,533	0,860	1,325	1,725	2,086	2,528	2,845	3,552	3,850
21	0,257	0,532	0,859	1,323	1,721	2,080	2,518	2,831	3,527	3,819
22	0,256	0,532	0,858	1,321	1,717	2,074	2,508	2,819	3,505	3,792
23	0,256	0,532	0,858	1,319	1,714	2,069	2,500	2,807	3,485	3,767
24	0,256	0,531	0,857	1,318	1,711	2,064	2,492	2,797	3,467	3,745
25	0,256	0,531	0,856	1,316	1,708	2,060	2,485	2,787	3,450	3,725
26	0,256	0,531	0,856	1,315	1,706	2,056	2,479	2,779	3,435	3,707
27	0,256	0,531	0,855	1,314	1,703	2,052	2,473	2,771	3,421	3,690
28	0,256	0,530	0,855	1,313	1,701	2,048	2,467	2,763	3,408	3,674
29	0,256	0,530	0,854	1,311	1,699	2,045	2,462	2,756	3,396	3,659
30	0,256	0,530	0,854	1,310	1,697	2,042	2,457	2,750	3,385	3,646
40	0,255	0,529	0,851	1,303	1,684	2,021	2,423	2,704	3,307	3,551
50	0,255	0,528	0,849	1,298	1,676	2,009	2,403	2,678	3,262	3,495
60	0,254	0,527	0,848	1,296	1,671	2,000	2,390	2,660	3,232	3,460
80	0,254	0,527	0,846	1,292	1,664	1,990	2,374	2,639	3,195	3,415
100	0,254	0,526	0,845	1,290	1,660	1,984	2,365	2,626	3,174	3,389
200	0,254	0,525	0,843	1,286	1,653	1,972	2,345	2,601	3,131	3,339
500	0,253	0,525	0,842	1,283	1,648	1,965	2,334	2,586	3,106	3,310
∞	0,253	0,524	0,842	1,282	1,645	1,960	2,326	2,576	3,090	3,291

Критерий Кохрена. Переход от ошибки опытов к ошибке экспериментов обычно связан с усреднением дисперсий ошибок, а это возможно только в случае однородности дисперсий (иначе нарушаются требования регрессионного анализа). Дисперсии неоднородны, если хотя бы одна из них по величине значительно отличается от других.

Проверяют однородность дисперсий с помощью критерия Кохрена (G), который равен отношению максимальной («выделяющейся») дисперсии к сумме всех дисперсий:

$$G = \frac{s_{\max}^2}{\sum_{i=1}^N s_i^2}, \quad (2.109)$$

где N — число опытов (количество дисперсий).

Критерий Кохрена применяют, когда при оценке всех дисперсий учитывается одинаковое число наблюдений ($n = \text{const}$).

Дисперсии можно считать однородными, если расчетные значения критерия Кохрена меньше табличных, приведенных в табл. 12. Табличные значения критерия относятся к доверительной вероятности $p = 0,95$ при разном числе сравниваемых дисперсий ошибок опытов (N) и различном числе степеней свободы ($f = n - 1$).

Т а б л и ц а 12

Таблица критических значений критерия Кохрена G

(N)	Число степеней свободы (f)							
	4	5	6	7	8	9	10	17
$P = 0,95$								
3	0,798	0,746	0,707	0,677	0,653	0,633	0,617	0,547
4	0,684	0,629	0,589	0,560	0,537	0,518	0,502	0,437
5	0,589	0,544	0,507	0,478	0,456	0,439	0,424	0,365
6	0,532	0,480	0,445	0,418	0,398	0,382	0,368	0,314
7	0,480	0,431	0,397	0,373	0,354	0,338	0,326	0,276
8	0,438	0,391	0,359	0,336	0,319	0,304	0,293	0,246
10	0,373	0,331	0,303	0,282	0,267	0,254	0,244	0,203
12	0,326	0,288	0,262	0,244	0,230	0,219	0,210	0,174
15	0,276	0,242	0,219	0,203	0,191	0,182	0,144	0,143
20	0,220	0,192	0,174	0,160	0,150	0,142	0,136	0,111
$P = 0,99$								
3	0,883	0,834	0,793	0,761	0,734	0,711	0,691	0,606
4	0,781	0,721	0,676	0,641	0,613	0,590	0,570	0,4^8
5	0,696	0,633	0,588	0,553	0,526	0,504	0,485	0,409
6	0,626	0,564	0,520	0,487	0,461	0,440	0,423	0,353
7	0,569	0,508	0,466	0,435	0,411	0,391	0,375	0,310
8	0,521	0,463	0,423	0,393	0,370	0,352	0,337	0,278
10	0,447	0,393	0,357	0,331	0,311	0,295	0,281	0,230
12	0,392	0,343	0,310	0,286	0,268	0,254	0,242	0,196
15	0,332	0,288	0,259	0,239	0,223	0,210	0,200	0,161
20	0,265	0,229	0,205	0,188	0,175	0,165	0,157	0,125

Приводимый пример связан с оценкой однородности пяти дисперсий ($N = 5$) ошибки опытов при пяти повторениях каждого опыта

($f = 5 - 1 = 4$). Значения дисперсий ($s_{\text{ош}}^2$) были равны: 3,80; 1,70; 1,30; 0,92 и 0,84. Первая дисперсия больше всех остальных; поэтому ее сравнивали с суммой всех дисперсий:

$$G_{\text{расч}} = \frac{3,80}{3,80 + 1,70 + 1,30 + 0,92 + 0,84} = 0,443.$$

Табличные значения критерия Кохрена находят из табл. 12.

Все дисперсии можно считать однородными, так как при $G_{\text{табл}} = 0,629 G_{\text{расч}} < G_{\text{табл}}$ (при доверительной вероятности 0,95).

Когда необходима проверка однородности дисперсий при различном числе наблюдений в отдельных опытах, рекомендуется применять критерий Бартлетта.

Иногда при оценке однородности дисперсий можно использовать и критерий Фишера. Здесь, в случае рассмотрения однородности многих дисперсий ($N > 2$), из общего числа дисперсий берут только две — максимальную и минимальную. Если с помощью критерия Фишера установлена однородность этих двух дисперсий, то принимается, что однородными являются все остальные дисперсии, так как их значения являются промежуточными.

На практике часто приходится встречаться со случаями, когда по мере увеличения расхода упрочняющих полимеров или гидрофобизаторов, точность измерения постепенно возрастает. Это вынуждает сужать диапазон значений изучаемого фактора и переносить эксперимент в ту область, где дисперсии однородны (рис. 16).

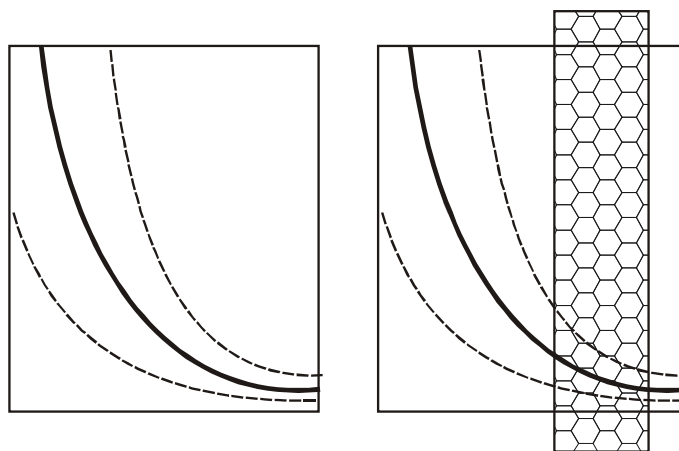


Рис. 16. Пример перемещения области исследований при проведении эксперимента с неоднородными дисперсиями

Критерий Фишера. Это распределение употребляется при сравнении дисперсий нормальных распределений, вычисленных на основании выборочных данных (табл. 13).

Пусть случайные величины X_1, X_2, \dots, X_m и Y_1, Y_2, \dots, Y_n независимы и имеют нормальное распределение. Тогда безразмерная случайная величина

$$F = \frac{n \cdot \sum_{i=1}^m X_i^2}{m \cdot \sum_{j=1}^n Y_j^2} \quad (2.110)$$

имеет распределение Фишера с плотностью распределения вероятностей

$$f(F) = \left(\frac{v_1}{v_2} \right)^{v_1/2} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{v_1 + v_2}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{v_1}{2}\right) \cdot \Gamma\left(\frac{v_2}{2}\right)} \cdot \frac{F^{v_1/2 - 1}}{\left(1 + \frac{v_1}{v_2} \cdot F\right)^{\frac{v_1 + v_2}{2}}}, \quad (2.111)$$

где v_1 — число степеней свободы числителя; v_2 — число степеней свободы знаменателя.

Из формулы следует, что распределение F зависит от двух параметров — чисел степеней свободы.

В статистических таблицах приведены значения квантилей F -распределения в $F_{(\alpha; v_1; v_2)}$ зависимости от уровня значимости и степеней свободы большей и меньшей дисперсий.

Значения квантилей найдены из решения уравнения

$$P(F > F_{\alpha; v_1; v_2}) = \int_{F_{\alpha; v_1; v_2}}^{\infty} f(F) dF = \alpha. \quad (2.112)$$

Таблица 13

Квантили предельного распределения Фишера

$v_1 \backslash v_2$	1	2	3	4	5	6	8	12	24	∞
1	61,45	199,50	215,72	224,57	230,17	233,97	238,89	243,91	249,04	254,32
2	18,512	18,999	19,163	19,248	19,298	19,329	19,371	19,414	19,453	19,496
3	10,129	9,552	9,276	9,118	9,014	8,941	8,844	8,744	8,638	8,527
4	7,710	6,945	6,591	6,388	6,257	6,164	6,041	5,912	5,774	5,628
5	6,607	5,786	5,410	5,192	5,050	4,950	4,818	4,678	4,527	4,365

$v_1 \backslash v_2$	1	2	3	4	5	6	8	12	24	∞
6	5,987	5,143	4,756	4,534	4,388	4,284	4,147	4,000	3,841	3,669
7	5,591	4,737	4,347	4,121	3,972	3,866	3,725	3,574	3,410	3,230
8	5,317	4,459	4,067	3,838	3,688	3,580	3,438	3,284	3,116	2,928
9	5,117	4,256	3,863	3,633	3,482	3,374	3,230	3,073	2,900	2,707
10	4,965	4,103	3,708	3,478	3,326	3,217	3,072	2,913	2,737	2,538
11	4,844	3,982	3,587	3,357	3,204	3,094	2,948	2,788	2,609	2,405
12	4,747	3,885	3,490	3,259	3,106	2,999	2,848	2,686	2,505	2,296
13	4,667	3,805	3,410	3,179	3,025	2,915	2,767	2,604	2,420	2,207
14	4,600	3,739	3,344	3,112	2,958	2,848	2,699	2,534	2,349	2,131
15	4,543	3,683	3,287	3,056	2,901	2,790	2,641	2,475	2,288	2,066
16	4,494	3,634	3,239	3,007	2,853	2,741	2,591	2,424	2,235	2,010
17	4,451	3,592	3,197	2,965	2,810	2,699	2,548	2,381	2,190	1,961
18	4,414	3,555	3,160	2,928	2,773	2,661	2,510	2,342	2,150	1,917
19	4,381	3,522	3,127	2,895	2,740	2,629	2,477	2,308	2,114	1,878
20	4,351	3,493	3,098	2,866	2,711	2,599	2,447	2,278	2,083	1,843
21	4,325	3,467	3,072	2,840	2,685	2,573	2,421	2,250	2,054	1,812
22	4,301	3,443	3,049	2,817	2,661	2,549	2,397	2,226	2,028	1,783
23	4,279	3,422	3,028	2,795	2,640	2,528	2,375	2,203	2,005	1,757
24	4,260	3,403	3,009	2,777	2,621	2,508	2,355	2,183	1,984	1,733
25	4,242	3,385	2,991	2,759	2,603	2,490	2,337	2,165	1,965	1,711
26	4,225	3,369	2,975	2,743	2,587	2,474	2,321	2,148	1,947	1,691
27	4,210	3,354	2,961	2,728	2,572	2,459	2,305	2,132	1,930	1,672
28	4,196	3,340	2,947	2,714	2,558	2,445	2,292	2,118	1,915	1,654
29	4,183	3,328	2,934	2,702	2,545	2,432	2,278	2,104	1,901	1,638
30	4,171	3,316	2,922	2,690	2,534	2,421	2,266	2,092	1,887	1,622
40	4,085	3,232	2,839	2,606	2,449	2,336	2,180	2,004	1,793	1409
60	4,001	3,151	2,758	2,525	2,368	2,254	2,097	1,918	1,700	1,389
120	3,920	3,072	2,680	2,447	2,290	2,175	2,106	1,834	1,608	1,254
∞	3,841	2,996	2,605	2,372	2,214	2,098	1,938	1,752	1,517	1,000

Критерий Неймана*. Если требуется проверить гипотезу о том, что дисперсии, вычисленные для k выборочных совокупностей, взятых из k генеральных совокупностей, равны между собой, то можно

* Критерий основан на распределении величин отношений средних геометрических дисперсий к среднеарифметическим дисперсиям

воспользоваться критерием Неймана – Пирсона, основанным на распределении

$$L_1 = \frac{[(\sigma_1'^2)^{n_1} \cdot (\sigma_2'^2)^{n_2} \dots (\sigma_k'^2)^{n_k}]^{\frac{1}{N}}}{\frac{1}{N} \cdot [n_1 \cdot \sigma_1'^2 + n_2 \cdot \sigma_2'^2 + \dots + n_k \cdot \sigma_k'^2]}, \quad (2.113)$$

где $N = n_1 + n_2 + \dots + n_k$ — общая численность наблюдений.

Величина L_{1t} , как правило, меньше единицы; может быть равна единице только в случае равенства выборочных дисперсий:

$$\sigma_1'^2 = \sigma_2'^2 = \sigma_3'^2 = \dots \sigma_k'^2. \quad (2.114)$$

Исходя из этого, следует иметь в виду, что если дисперсии k совокупностей равны, то L_1 может отличаться от единицы лишь по причине колебания самого выборочного наблюдения.

Критерий Бартлетта. Критерий Бартлетта основан на модификации критерия Неймана – Пирсона. Этот критерий обозначается M и вычисляется по формуле

$$M = (N - k) \cdot \ln \frac{\sum_{i=1}^k (n_i - 1) \cdot \hat{\sigma}_i^2}{N - k} - \sum_{i=1}^k (n_i - 1) \cdot \ln \hat{\sigma}_i^2, \quad (2.115)$$

где $\hat{\sigma}_i$ — исправленная выборочная дисперсия $\hat{\sigma}_i = \frac{n}{n-1} \cdot \sigma_i'$; k — число выборочных совокупностей.

Критерий Бартлетта подчиняется распределению хи-квадрат с $k-1$ степенями свободы.

Критерий Хартли. Если выборки объема n взяты из нормально распределенной совокупности, то переменная $u^* = \ln \sigma^2$ имеет распределение, близкое к нормальному с дисперсией $V(u^*) = \frac{2}{n-2}$.

На этом факте и основан данный критерий (табл. 14).

Критерий Хартли вычисляется как отношение дисперсии максимальной (σ_{\max}^2) к дисперсии минимальной (σ_{\min}^2):

$$Q = \frac{\sigma_{\max}^2}{\sigma_{\min}^2}. \quad (2.116)$$

Этот критерий предназначен для оперативной проверки гипотезы о равенстве дисперсий. Он является весьма приближенным. Преимущество его заключается в том, что данный критерий позволяет быстро решить вопрос, принимается или отвергается гипотеза о равенстве дисперсий. Для его применения требуется соблюдение условия равенства объемов выборочных совокупностей. В том случае, когда объемы выборок неодинаковы, следует, так же как и для критерия Неймана – Пирсона, применять его к выборкам с объемами, равными $n = \frac{N}{k}$ ($N = n_1 + n_2 + \dots + n_k$ — общая численность наблюдений; k — число выборок из генеральных совокупностей).

Т а б л и ц а 14

Сравнение нескольких дисперсий: критерий Хартли

k/n	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Доверительный уровень $\alpha = 0,05$											
2	39,0	87,5	142	202	266	333	403	475	550	626	704
3	15,4	26,6	36,8	46,9	55,1	63,8	72,1	80,5	87,4	93,7	101
4	9,6	14,8	19,2	23,1	26,7	29,9	33,2	36,2	38,5	40,9	43,4
5	7,2	10,4	12,9	15,3	17,3	19,1	20,7	22,2	23,6	25,0	26,0
6	5,8	8,1	10,0	11,6	12,9	14,1	15,0	16,1	17,0	17,8	18,5
7	5,0	6,8	8,1	9,3	10,3	11,1	11,9	12,6	13,2	13,7	14,4
8	4,4	5,9	7,0	7,9	8,6	9,3	9,9	10,4	10,8	11,4	11,8
9	4,0	5,2	6,1	6,9	7,6	8,1	8,6	8,9	9,3	9,7	10,1
10	3,7	4,8	5,5	6,2	6,7	7,2	7,6	7,9	8,2	8,5	8,9
12	3,3	4,1	4,7	5,2	5,6	5,9	6,2	6,5	6,7	7,0	7,2
15	2,9	3,5	3,9	4,3	4,6	4,9	5,1	5,2	5,4	5,6	5,8
20	2,5	2,9	3,3	3,5	3,7	3,9	4,0	4,1	4,3	4,4	4,5
30	2,1	2,4	2,6	2,8	2,9	3,0	3,1	3,2	3,2	3,3	3,4
60	1,7	1,8	1,9	2,0	2,1	2,2	2,2	2,3	2,3	2,3	2,3
∞	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
Доверительный уровень $\alpha = 0,10$											
2	19,0	42,5	68,9	98,0	128	161	196	232	269	307	347
3	9,3	16,4	23,1	29,4	35,4	41,2	46,9	52,4	57,8	61,2	68,2
4	6,4	10,2	13,5	16,4	19,0	21,5	23,9	26,0	28,2	30,2	32,2
5	5,1	7,6	9,6	11,4	13,0	14,5	15,8	17,2	18,2	19,3	20,4
6	4,3	6,2	7,7	9,0	10,1	11,0	12,0	12,8	13,6	14,3	15,0
7	3,8	5,3	6,5	7,4	8,3	9,0	9,7	10,3	10,9	11,4	11,8

k/n	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
8	3,4	4,7	5,6	6,4	7,1	7,7	8,2	8,5	9,	9,5	9,9
9	3,2	4,2	5,0	5,7	6,2	6,7	7,1	7,5	7,9	8,2	8,5
10	3,0	3,9	4,6	5,1	5,6	6,0	6,4	6,7	7,0	7,3	7,5
12	2,7	3,4	4,0	4,4	4,8	5,	5,3	5,6	5,8	6,0	6,2
15	2,4	3,0	3,4	3,7	4,0	4,2	4,4	4,6	4,8	4,9	5,0
20	2,1	2,6	2,9	3,1	3,3	3,4	3,6	3,7	3,8	3,9	4,0
30	1,8	2,1	2,3	2,5	2,6	2,7	2,8	2,9	3,0	3,0	3,1
60	1,5	1,7	1,8	1,9	2,0	2,0	2,1	2,1	2,1	2,2	2,2
∞	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0

Если расчетное значение критерия Хартли превышает табличное, то гипотеза о равенстве дисперсий отвергается для заданного доверительного уровня значимости.

Критерий знаков. Пусть имеется 10 пар данных о содержании двуокиси серы в отходящих газах дымовой трубы для двух различных степеней измельчения топлива A и B (см. табл. 15).

Проверим предположение, что в обоих случаях степень загрязнения диоксидом серы одинакова.

Таблица 15

Процентное содержание диоксида серы

Степень измельчения	№ выборки									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
A	2,4	2,7	2,0	1,9	2,2	22,3	2,3	2,1	2,4	2,6
B	2,6	2,6	2,0	1,8	2,0	2,0	2,4	2,1	2,1	2,5
Знак $A - B$	-	+	0	+	+	+	-	0	+	+

Было получено 6 плюсов и 2 минуса. Если нулевые разницы разделить поровну между положительными и отрицательными, то будем иметь (r — число минусов, $n - r$ — число плюсов):

$$r = 3; n - r = 10 - 3 = 2.$$

Затем с помощью оценочной таблицы для биномиального распределения накопленных вероятностей вычисляется

$$P\{r \leq 3\} = P\{r = 0\} + P\{r = 1\} + P\{r = 2\} + P\{r = 3\} = \\ = 0,001 + 0,010 + 0,044 + 0,117 = 0,172.$$

При уровне значимости α , равном $0,05 \alpha / 2 = 0,025$. Так как $0,172 \gg 0,025$, то нулевая гипотеза принимается.

В табл. 16 приводятся критические значения r , необходимые для того, чтобы отвергнуть гипотезу для различных критических областей.

При пользовании оценочной таблицей нулевые разности следует отбросить.

В данном случае $n = 10$; $r = 2$, а критическое значение r_α при $\alpha = 0,05$ равно 2.

Таким образом, $r > r_\alpha$ и гипотеза принимается.

Т а б л и ц а 16

Критические значения r для критерия знаков (α — уровень значимости)*

n	α для двустороннего критерия				n	α для двустороннего критерия			
	0,01	0,05	0,10	0,25		0,01	0,05	0,10	0,25
n	α для одностороннего критерия				n	α для одностороннего критерия			
	0,005	0,025	0,05	0,125		0,05	0,025	0,05	0,125
1	—	—	—	—	46	13	15	16	18
2	—	—	—	—	47	14	16	17	19
3	—	—	—	0	48	14	16	17	19
4	—	—	—	0	49	15	17	18	19
5	—	—	0	0	50	15	17	18	20
6	—	0	0	1	51	15	18	19	20
7	—	0	0	1	52	16	18	19	21
8	0	0	1	1	53	16	18	20	21
9	0	1	1	2	54	17	19	20	22
10	0	1	1	2	55	17	19	20	22
11	0	1	2	3	56	17	20	21	23
12	1	2	2	3	57	18	20	21	23
13	1	2	3	3	58	18	21	22	24
14	1	2	3	4	59	19	21	22	24
15	2	3	3	4	60	19	21	23	25
16	2	3	4	5	61	20	22	23	25
17	2	4	4	5	62	20	22	24	25
18	3	4	5	6	63	20	23	24	26
19	3	4	5	6	64	21	23	24	26
20	3	5	5	6	65	21	24	25	27
21	4	5	6	7	66	22	24	25	27
22	4	5	6	7	67	22	25	26	28
23	4	6	7	8	68	22	25	26	28
24	5	6	7	8	69	23	25	27	29
25	5	7	7	9	70	23	26	27	29
26	6	7	8	9	71	24	26	28	30

n	α для двустороннего критерия				n	α для двустороннего критерия			
	0,01	0,05	0,10	0,25		0,01	0,05	0,10	0,25
	α для одностороннего критерия					α для одностороннего критерия			
	0,005	0,025	0,05	0,125		0,05	0,025	0,05	0,125
27	6	7	8	10	72	24	27	28	30
28	6	8	9	10	73	25	28	29	31
29	7	8	9	10	74	25	28	29	31
30	7	9	10	11	75	25	28	29	32
31	7	9	10	11	76	26	28	30	32
32	8	9	10	12	77	26	29	30	32
33	8	10	11	12	78	27	29	31	33
34	9	10	11	13	79	27	30	31	33
35	9	11	12	13	80	28	30	32	34
36	9	11	12	14	81	28	31	32	34
37	10	12	13	14	82	28	31	33	35
38	10	12	13	14	83	29	32	33	35
39	11	12	13	15	84	29	32	33	36
40	11	13	14	15	85	30	32	34	36
41	11	13	14	16	86	30	33	34	37
42	12	14	15	16	87	31	33	35	37
43	12	14	15	17	88	31	34	35	38
44	13	15	16	17	89	31	34	36	38
45	13	15	16	18	90	32	35	36	39

* Для значений n , больших 90, приближенные значения r можно найти как ближайшее целое число, меньшее, чем $(n - 1) / 2 - k \cdot \sqrt{n + 1}$, где коэффициент k равен 2,28790; 0,9800; 0,8224; 0,5752 для 1,5, 10, 25%-ных значений соответственно.

2.1.3.8. Оценка значимости различий технологических режимов

ПРИМЕР. На заводе по химической переработке пластмасс проводились испытания прочности изделий в зависимости от 6 вариантов технологического режима. Через каждые 10 мин проверялись 5 проб образцов, и были получены следующие результаты (см. табл. 17). Можно ли считать, что все 6 вариантов мало отличаются между собой (т. е. дисперсии близки друг другу).

Результаты измерений качества образцов

№ пробы	Пробы по вариантам технологического режима					
	1	2	3	4	5	6
1	13,1	12,8	12,7	13,6	13,5	10,0
2	11,0	12,9	13,7	14,7	14,5	13,7
3	12,8	11,5	14,1	13,5	14,2	14,0
4	14,0	12,5	14,0	14,0	14,7	14,7
5	12,3	12,3	14,5	14,0	15,0	14,1
σ'^2	97,84	24,80	36,80	17,84	26,11	282,80
σ^{*2}	122,3	31,0	46,0	22,3	32,7	353,5

σ^{*2} — исправленная выборочная дисперсия $\sigma^* = \frac{n}{n-1} \cdot \sigma'$.

По критерию Неймана – Пирсона $L_1 = 0,59$ ($k = 6$; $n_1 = 5$).

По критерию Бартлетта

$$M = 24 \cdot \ln \left[\frac{\sum (n_i - 1) \cdot \sigma_i^{*2}}{24} - \sum (n_i - 1) \cdot \ln \sigma_i^{*2} \right] = 12,72. \quad (2.117)$$

При $k = 6$ по таблице хи-квадрат находим $\chi^2 = 12,83$.

По критерию Хартли $Q = \frac{\sigma_{\max}^2}{\sigma_{\min}^2} = \frac{353}{22,3} = 15,0$. По табл. 14, $Q_5 = 17,3$;

$Q_{10} = 12,9$. Таким образом, $Q_{10} < Q < Q_5$, и гипотеза о значимости различий дисперсий отвергается.

Теорема Байеса, или теорема о вероятности гипотез, дает возможность судить о величине вероятности какого-либо предположения после опыта, давшего определенный результат. Она формулируется следующим образом: вероятность гипотезы i после испытания, приведшего к осуществлению события A , равна произведению вероятности этой гипотезы до испытания на вероятность события по этой гипотезе, деленному на полную вероятность события A , т. е. на сумму таких произведений для всех гипотез:

$$P_{\Gamma(i)} = \frac{P_{\Gamma(i)} \cdot P_{A(i)}}{\sum P_{\Gamma(i)} \cdot P_{A(i)}}, \quad (2.118)$$

где $P_{\Gamma(i)}$ — вероятность i -й гипотезы после испытания (апостериорная); $p_{\Gamma(i)}$ — вероятность i -й гипотезы до испытания (априорная); $p_{A(i)}$ — вероятность события A при предположении, что данная гипотеза осуществилась.

Для использования теоремы Байеса удобно пользоваться следующей схемой (табл. 18).

Т а б л и ц а 18

Схема расчетов при использовании теоремы Байеса

№	Гипотеза	Вероятность гипотезы до испытания $p_{\Gamma(i)}$	Вероятность события A по каждой гипотезе $p_{A(i)}$	$p_{\Gamma(i)} \cdot p_{A(i)}$	Вероятность гипотезы после испытания $P_{\Gamma(i)}$
1	$\Gamma(1)$	$p_{\Gamma(1)}$	$p_{A(1)}$	$p_{\Gamma(1)} \cdot p_{A(1)}$	$P_{\Gamma(1)}$
1	$\Gamma(2)$	$p_{\Gamma(2)}$	$p_{A(2)}$	$p_{\Gamma(2)} \cdot p_{A(2)}$	$P_{\Gamma(2)}$
1	$\Gamma(3)$	$p_{\Gamma(3)}$	$p_{A(3)}$	$p_{\Gamma(3)} \cdot p_{A(3)}$	$P_{\Gamma(3)}$
...
k	$\Gamma(k)$	$p_{\Gamma(k)}$	$p_{A(k)}$	$p_{\Gamma(k)} \cdot p_{A(k)}$	$P_{\Gamma(k)}$
		$\Sigma p_{\Gamma(i)} = 1$		$\Sigma p_{\Gamma(i)} \cdot p_{A(i)}$	$\Sigma P_{\Gamma(i)}$

Байесовский постулат и подход. При практической реализации теоремы Байеса в случае попытки суждения о генеральной совокупности по результатам наблюдения возникают трудности вычисления апостериорных вероятностей, вызванные необходимостью привлечения для этой цели априорных вероятностей, обычно нам не известных.

Для разрешения задачи Байес предположил (постулат Байеса) считать все априорные вероятности одинаковыми. В ряде случаев при выяснении, какое из событий будет иметь место, используют байесовский подход, состоящий в предположении, что таким событием будет апостериорное событие, вероятность которого максимальна. Это эквивалентно предположению о максимуме совместной вероятности. Требование обращения в максимум условной вероятности приводит к принципу максимального правдоподобия.

2.1.3.9. Пример статистической обработки результатов измерений. Для статистической обработки вариационных рядов в лабораторный практикум включены 5 специально сформированных идеализированных выборок.

Как можно видеть из табл. 19–23, смещение на гистограммах моды вправо от медианы в статистических характеристиках наиболее

существенно изменяет значения асимметрии в сторону их уменьшения с переходом в отрицательную область; когда мода от медианы отстоит влево, то асимметрия значительно изменяет значения от нуля в положительной области; островершинность гистограмм вызывает возрастание значений эксцесса, плосковершинность приводит к отрицательным значениям эксцесса; распределения, близкие к Гауссову, имеют значения асимметрии и эксцесса в окрестности нуля.

Т а б л и ц а 19

Гистограмма и статистические характеристики результатов измерений гранулометрического состава сточной воды с нормальным законом распределения выборочной совокупности

Начальное значение	Конечное значение	Частота	Накопл. частота	Гистограмма
2,000	2,778	4	4	****
2,778	3,556	4	8	****
3,556	4,333	7	15	*****
4,333	5,111	13	28	*****
5,111	5,889	18	46	*****
5,889	6,667	17	63	*****
6,667	2,444	9	72	*****
2,444	8,222	4	76	****
8,222	9,000	2	78	**

О к о н ч а н и е т а б л . 19

Статистические характеристики	Значения
Математическое ожидание	5,49744
Мода случайной величины	5,50550
Медиана случайной величины	5,65000
Дисперсия случайной величины	2,13876
Среднеквадратическое отклонение	1,46245
Стандартная ошибка среднего	0,16559
Асимметрия случайной величины	-0,16199
Эксцесс случайной величины	0,04168
Стандартная ошибка асимметрии	0,26870
Стандартная ошибка эксцесса	0,50429
Коэффициент вариации	26,60240
Геометрическое среднее	5,27700
Гармоническое среднее	5,01719
Границы доверительного интервала	5,17954 5,81532

Распределение нормальное

**Левосторонняя асимметричная гистограмма и статистические
характеристики результатов измерений гранулометрического
состава сточной воды**

Начальное значение	Конечное значение	Частота	Накопл. частота	Гистограмма
2,000	2,778	4	4	****
2,778	3,556	11	15	*****
3,556	4,333	18	33	*****
4,333	5,111	14	47	*****
5,111	5,889	11	58	*****
5,889	6,667	8	66	*****
6,667	2,444	6	72	*****
2,444	8,222	4	76	****
8,222	9,000	2	78	**

О к о н ч а н и е т а б л . 20

Статистические характеристики	Значения
Математическое ожидание	4,96410
Мода случайной величины	3,94750
Медиана случайной величины	4,90000
Дисперсия случайной величины	2,64577
Среднеквадратическое отклонение	1,62658
Стандартная ошибка среднего	0,18417
Асимметрия случайной величины	0,43015
Экссесс случайной величины	-0,51428
Стандартная ошибка асимметрии	0,26870
Стандартная ошибка эксцесса	0,50429
Коэффициент вариации	32,76692
Геометрическое среднее	4,70046
Гармоническое среднее	4,43863
Границы доверительного интервала	4,61053 5,31766

Распределение
отличается от нормального

**Правосторонняя асимметричная гистограмма и статистические
характеристики результатов измерений гранулометрического
состава сточной воды**

Начальное значение	Конечное значение	Частота	Накопл. частота	Гистограмма
2,000	2,778	2	2	**
2,778	3,556	5	7	*****
3,556	4,333	9	16	*****
4,333	5,111	12	28	*****
5,111	5,889	14	42	*****
5,889	6,667	17	59	*****
6,667	2,444	13	72	*****
2,444	8,222	4	76	****
8,222	9,000	2	78	**

О к о н ч а н и е т а б л . 21

Статистические характеристики	Значения
Математическое ожидание	5,63141
Мода случайной величины	6,28450
Медиана случайной величины	5,70000
Дисперсия случайной величины	2,11059
Среднеквадратическое отклонение	1,45279
Стандартная ошибка среднего	0,16450
Асимметрия случайной величины	-0,19627
Эксцесс случайной величины	-0,16499
Стандартная ошибка асимметрии	0,26870
Стандартная ошибка эксцесса	0,50429
Коэффициент вариации	25,79793
Геометрическое среднее	5,42056
Гармоническое среднее	5,17425
Границы доверительного интервала	5,31562 5,94720
	Распределение отличается от нормального

Плосковершинная асимметричная гистограмма и статистические характеристики результатов измерений гранулометрического состава сточной воды

Начальное значение	Конечное значение	Частота	Накопл. частота	Гистограмма
2,000	2,778	3	3	***
2,778	3,556	8	11	*****
3,556	4,333	9	20	*****
4,333	5,111	12	32	*****
5,111	5,889	12	44	*****
5,889	6,667	12	56	*****
6,667	2,444	10	66	*****
2,444	8,222	9	75	*****
8,222	9,000	3	78	***

Окончание табл. 22

Статистические характеристики	Значения
Математическое ожидание	5,60513
Мода случайной величины	4,72650
Медиана случайной величины	5,70000
Дисперсия случайной величины	2,90627
Среднеквадратическое отклонение	1,70478
Стандартная ошибка среднего	0,19303
Асимметрия случайной величины	-0,10542
Экссесс случайной величины	-0,80927
Стандартная ошибка асимметрии	0,26870
Стандартная ошибка эксцесса	0,50429
Коэффициент вариации	30,41464
Геометрическое среднее	5,31733
Гармоническое среднее	4,99625
Границы доверительного интервала	5,23456 5,97569
	Распределение отличается от нормального

**Острове́ршинная асимметричная гистограмма и статистические
характеристики результатов измерений гранулометрического
состава сточной воды**

Начальное значение	Конечное значение	Частота	Накопл. частота	Гистограмма
2,000	2,778	1	1	*
2,778	3,556	2	3	**
3,556	4,333	3	6	***
4,333	5,111	19	25	*****
5,111	5,889	28	53	*****
5,889	6,667	19	72	*****
6,667	2,444	3	75	***
2,444	8,222	2	77	**
8,222	9,000	1	78	*

О к о н ч а н и е т а б л . 23

Статистические характеристики	Значения
Математическое ожидание	5,52821
Мода случайной величины	5,50550
Медиана случайной величины	5,50000
Дисперсия случайной величины	1,05218
Среднеквадратическое отклонение	1,02578
Стандартная ошибка среднего	0,11614
Асимметрия случайной величины	0,05864
Эксцесс случайной величины	3,03293
Стандартная ошибка асимметрии	0,26870
Стандартная ошибка эксцесса	0,50429
Коэффициент вариации	18,55501
Геометрическое среднее	5,42321
Гармоническое среднее	5,29369
Границы доверительного интервала	5,305238 5,751172
	Распределение отличается от нормального

2.1.4. Обучающая компьютерная программа «StatExp»

2.1.4.1. Программа предназначена для изучения характера распределения случайных величин с графическим представлением данных о распределении, а также формированием отчета и проверки гипотезы о нормальности закона распределения выборочной совокупности по критерию Колмогорова и центральным моментам и позволяет выполнять следующие операции:

- ввод исходных данных, представляющих собой результаты измерений исследуемой характеристики объекта или процесса;
- распределение исходных данных по интервалам значений, число которых задается пользователем;
- изменение данных либо путем корректировки их значений, либо с помощью операции «перетаскивания» значений из одного интервала в другой;
- вычисление параметров полученного распределения значений;
- отображение гистограммы распределения вероятностей, а также функции как фактического, так и теоретического (нормального) распределений;
- проверка распределения на его соответствие нормальному закону по двум критериям;
- сохранение отчета о результатах проведенного анализа.

2.1.4.2. Перечень и назначение основных файлов программного пакета

<i>StatExp.exe</i>	Главный исполняемый файл тренажера
<i>Eco.hlp</i>	Файл помощи
<i>Eco.cnt</i>	Файл оглавления
<i>Stat.dat</i>	Файл данных для расчета рабочего примера

2.1.4.3. Основные принципы использования программы. Система меню и команд построена на основе технологии операционной системы Windows: многооконность, вложенность и дублирование основных команд пиктограммами. Для того чтобы понять принципы взаимодействия с системой, вначале целесообразно загрузить рабочий пример, выбрав команду «Загрузить» из меню «Программа». В появившемся диалоговом окне щелкнуть левой клавишей мыши (ЛКМ) по названию файла *stat.dat*, содержащего описание рабочего примера. Ввод данных

производится в левой верхней части главного диалогового окна. Количество интервалов можно менять в процессе ввода и обработки данных. Соответствующие графические и числовые характеристики полученного распределения автоматически корректируются после каждого введенного числа или после каждой коррекции количества интервалов.

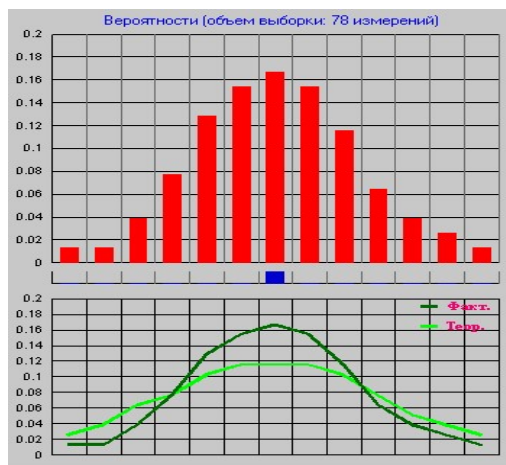
Следует отметить, что, «запустив» программу и обратившись к меню «Помощь» стартового (главного) окна, можно получить много дополнительной информации о параметрах статистической обработки данных, а также познакомиться с практическими примерами обработки информации. В частности, в одном из примеров анализируется обработка результатов 78 измерений гранулометрического состава частиц осадка взвешенных веществ в каждом образце сточной воды. С чисто учебными целями для статистической обработки там же предложены для исследования 5 выборок. Примеры содержат следующую итоговую информацию: гистограмму распределения вероятностей, значения статистических характеристик распределения, выводы о соответствии распределения нормальному закону. На рис. 17 показаны и прокомментированы элементы окна с полученными результатами. Из этого же рисунка видна структура интерфейса.

На рис. 18 и 19 приведены в качестве пояснения числовые значения характеристик полученных распределений и соответствующие им графические зависимости. В обоих случаях использовался критерий Колмогорова. В первом — распределение соответствует нормальному, во втором — нет.

Отличительная особенность тренажера состоит в том, что он не является еще одной программой для статистического анализа результатов измерений, а дает возможность обучаемым в процессе вычислительных экспериментов научиться визуально оценивать связь табличной и графической информации, а также позволяет выработать навыки корректного использования статистических формул, выведенных только для выборок, подчиняющихся нормальному закону предельного распределения Гаусса. Важную роль в тренажере выполняет оригинально и динамично формируемый график эмпирического и теоретического распределений с синхронной проверкой гипотезы о соответствии опытных данных закону Гаусса. Причем проверка гипотезы осуществляется одновременно несколькими методами — с использованием центральных статистических моментов и критерия согласия Колмогорова.

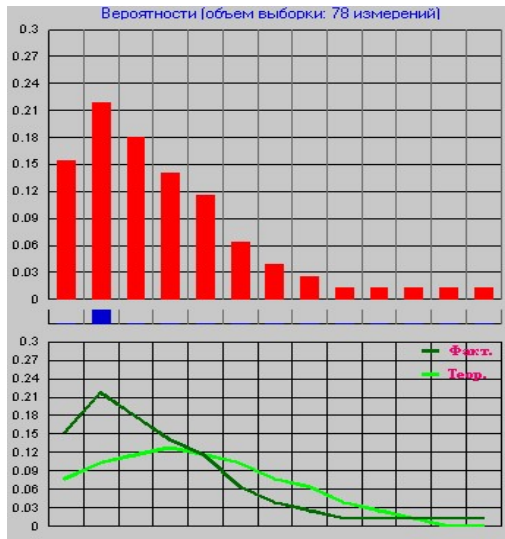


Рис. 17. Рабочий интерфейс компьютерной программы



Параметр	Значение
Мат. ожидание	5,769
Мода	5,792
Медиана	5,666
Дисперсия	2,535
Среднеквадр. отклонение	2,239
Станд. ошибка среднего	0,140
Ассиметрия	-0,066
Эксцесс	0,029
Станд. ошибка асимметрии	0,078
Станд. ошибка эксцесса	0,003
Коэффициент вариации (в %)	22,473
Геометрическое среднее	5,628
Гармоническое среднее	5,472
Доверительный интервал	[5,500;6,039]
Максимальная разность	2,000
Критерий согласия Колмогорова	0,226
Функция Колмогорова	2,000

Рис. 18. Гистограмма рабочего варианта вычислительного эксперимента по статистическому анализу опытной выборки



Параметр	Значение
Матем. ожидание	4,481
Мода	3,664
Медиана	4,162
Дисперсия	2,342
Среднеквадр. отклонение	2,158
Станд. ошибка среднего	0,131
Ассиметрия	2,322
Экссесс	2,624
Станд. ошибка асимметрии	0,078
Станд. ошибка эксцесса	0,003
Коэффициент вариации (в %)	25,846
Геометрическое среднее	4,354
Гармоническое среднее	4,244
Доверительный интервал	[4,229;4,733]
Максимальная разность	12,000
Критерий Колмогорова	2,925
Функция Колмогорова	0,009

Рис. 19. Пример иллюстрирует отличие распределения от нормального

2.1.5. Использование программного модуля «EcoGame» в качестве источника информации для статистической обработки результатов измерений

Поскольку компьютерный программный модуль «EcoGame» имитирует в динамике функционирование территориального производственного комплекса, его можно использовать в качестве примера как источник информации для освоения приемов организации получения математического описания моделируемых технологических процессов.

Для этого необходимо:

1) в окне главного меню программного модуля «EcoGame» активировать кнопки «Формирование варианта» «Ok» — «Требования к качеству продукции» «Ok» — «Выбор режима игры» — «Автономная работа системы» «Ok».

Появится окно «Текущее качество продукции» (рис. 20а);

2) дать возможность производственному комплексу поработать некоторое время в созерцательном режиме, после чего нажать кнопки «Пауза» и «Качество продукции». Появится окно «Качество продукции» (рис. 20б);

а)

$$F(b) > F(a), \quad (2.13)$$

б)

$$P(a < x < b) = F(b) - F(a), \quad (2.14)$$

в)

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < a \\ 1 & \text{при } x > b \end{cases} \quad (2.15)$$

Рис. 20. Последовательность вызова окон при совместном использовании программных модулей «EcoGame» и «Statistica»

3) в окне (рис. 20б) выделить и поместить в буфер обмена текущее значение выбранного для статистической обработки показателя качества продукции с тем, чтобы это значение из буфера обмена поместить в соответствующую ячейку таблицы «Данные» программного модуля «StatExp» (рис. 20в);

4) многократное повторение пунктов (рис. 20а, б и в) позволяет сформировать выборочную совокупность и использовать ее для освоения приемов статистической обработки результатов наблюдений, организации вычислительных экспериментов и интерпретации полученных результатов.

2.2. КОМПЛЕКСНАЯ ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ПРОДУКЦИИ ПО НЕСКОЛЬКИМ ПРИЗНАКАМ

Для того чтобы оценить качество продукции по нескольким признакам, в качестве оценочного критерия может быть использована функция желательности, позволяющая преобразовать массив выходных величин большой размерности в один столбец обобщенных результатов наблюдений.

Эталон комплекса требуемых показателей качества может быть составлен из любого набора значений по каждому признаку.

Функция желательности полезна везде, где требуется получить обобщенную, комплексную оценку в виде одной численной величины по нескольким признакам одновременно.

2.2.1. Теоретические основы комплексной оценки качества продукции по нескольким признакам

Формирование функции желательности начинается с изображения декартовой системы координат, ордината которой представляет собой безразмерную равномерную шкалу частных функции желательности, изменяющихся от нуля до единицы и характеризующих качество продукции по каждому показателю (рис. 21).

Оси абсцисс представляют собой натуральные равномерные шкалы значений тех показателей, по которым оценивается качество продукции. Чтобы увеличить эффективность алгоритма, шкалы показателей качества должны иметь возможность перемещаться в двух

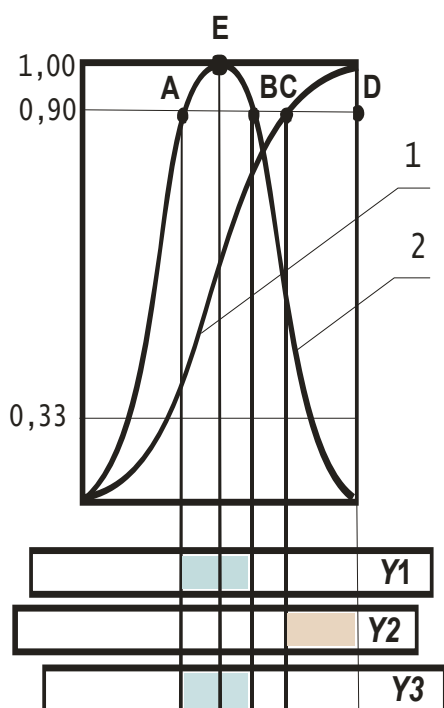


Рис. 21. Система координат для формирования настраиваемой функции желательности

направлениях в горизонтальной плоскости, сжиматься и растягиваться до необходимой степени, с тем чтобы можно было зафиксировать любую шкалу в любом положении относительно любой из двух экспоненциальных кривых, расположенных в координатном пространстве и имеющих ограничения с одной или с двух сторон.

Кривая, ограниченная с одной стороны, используется в тех случаях, когда за значения показателей качества продукции будут приниматься все такие, которые больше или меньше определенной установленной величины.

Кривая с двухсторонними ограничениями используется тогда, когда качество продукции располагается в определенном диапазоне значений показателей, причем изменения значений показателя в обе стороны от установленных границ считаются явлением нежелательным.

2.2.2. Подготовка исходных данных и методика расчета

Организация подготовки исходных данных должна осуществляться по следующим правилам.

Каждый показатель качества следует соотнести с одной из двух экспоненциальных кривых, по которым будет осуществляться настраивание функции желательности. Если изменения значений показателя в одну сторону приводят к закономерному увеличению или уменьшению частной функции желательности, то для настраивания следует выбрать асимметричную кривую (1) с односторонними ограничениями. Например, чем меньше запылен воздух, тем выше его качество. Если изменения в одну сторону замеренных значений показателя приводят сначала к улучшению частной функции желательности, а затем к ее ухудшению, то настраивать этот показатель нужно по сим-

метричной экспоненциальной кривой (2) с двухсторонними ограничениями. Например, изменения температуры воздуха в квартире в зимнее время от 10°C до 40°C вызовут закономерные изменения функции желательности сначала в сторону ее повышения, а затем приведут к ухудшению, выделив наиболее комфортный диапазон с центром 22°C . Отклонения в обе стороны от идеала сопровождаются уменьшением значений частной функции желательности.

2.2.3. Правила настраивания функции желательности по кривой с односторонними ограничениями

Вся ось ординат от нуля до единицы условно делится на несколько участков, например, при $d \leq 0,33$ качество продукции должно рассматриваться как брак и регламентироваться соответствующим ГОСТом, а качество окружающей среды при таких значениях d считается недопустимым; значение $d = 0,33$ получается тогда, когда на оси абсцисс этому значению d соответствует ПДК загрязняющего вещества. Диапазон $0,33 \leq d \leq 0,50$ будет характеризовать удовлетворительное качество, диапазон $0,5 \leq d \leq 0,75$ — хорошее, а при $d \geq 0,75$ качество объекта можно оценить на отлично.

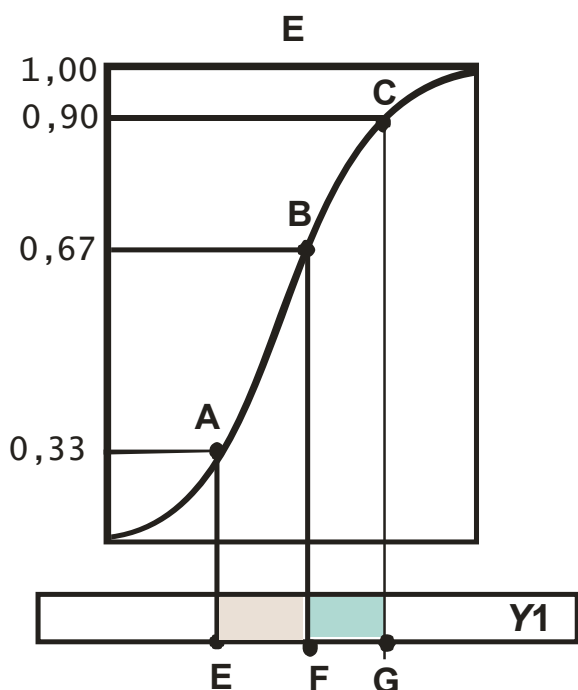


Рис. 22. Настраивание функции желательности по кривой с односторонними ограничениями

На подвижной оси абсцисс, на которой будут фиксироваться результаты измерения качества по рассматриваемому показателю, путем перемещения непрерывной равномерной шкалы в любую сторону значение ПДК (или другого ГОСТ-го ограничения) совмещается с проекцией точки на кривой d , соответствующей $d = 0,33$ (точка E на рис. 22).

Теперь необходимо определить и зафиксировать идеальное реально достижимое значение показателя качества при $d = 0,95$ (единица в этом случае есть лишь асимптотически при

ближаемое значение функции). Указанное действие иллюстрирует точка G на рис. 22. Зафиксировав путем сжимания или растягивания шкалы абсцисс значения показателя качества, соответствующие $d = 0,33$ и $d = 0,95$, можно определить цену деления шкалы абсцисс и ее рабочий диапазон (отрезок EG на рис. 22). Теперь для любого измеренного значения показателя качества легко графически определяется соответствующее значение d .

2.2.4. Правила настраивания функции желательности по кривой с двухсторонними ограничениями

Первое правило настраивания функции желательности по кривой с двухсторонними ограничениями аналогично первому правилу настраивания функции желательности по кривой с односторонними ограничениями.

На подвижной оси абсцисс, где будут фиксироваться результаты измерения качества по рассматриваемому показателю, путем перемещения непрерывной равномерной шкалы в любую сторону идеальное значение показателя качества совмещается с проекцией точки H , соответствующей $d = 1,0$, на ось абсцисс (точка O на рис. 23).

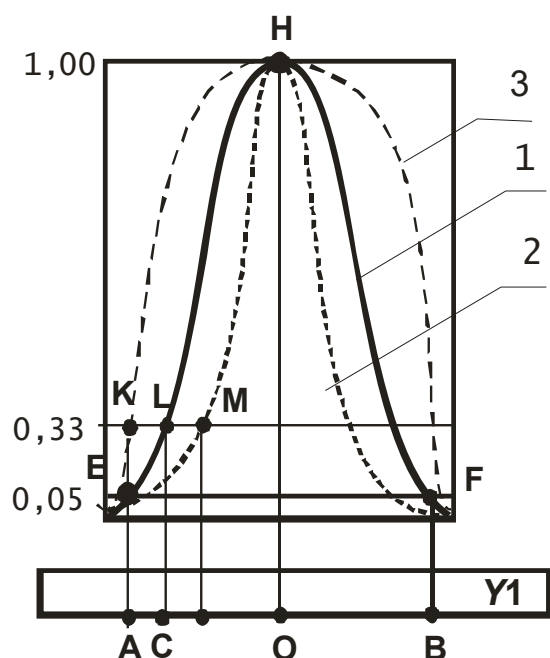


Рис. 23. Настраивание функции желательности по кривой с двухсторонними ограничениями

Чтобы определить цену деления шкалы абсцисс, на ней необходимо отметить такое значение оцениваемого показателя, которое соответствует $d = 0,05$ (точка A на рис. 23), т. е. все значения d , оказавшиеся ниже этого предела, будут просто проигнорированы, как не представляющие интереса (это фактически нулевое качество). Поскольку экспоненциальная кривая с двухсторонними ограничениями является симметричной, то положение точки B и рабочий диапазон шкалы AB можно определить прибавлением к значению показателя качества при $d = 1$ отрезка AO .

Зная положения и значения показателей в точках A, O, B , частную функцию желательности еще нельзя считать настроенной и зафиксированной в факторном пространстве. Через три точки A, H, B можно провести бесконечное множество экспоненциальных кривых с одинаковыми двухсторонними ограничениями, но с различной степенью островершинности (кривые 1, 2, 3). Единственность расположения кривой и определенность требований по каждому обобщаемому показателю будут определяться степенью крутизны кривой, которую характеризуют координаты точки C .

Координаты точки C целесообразно определять по тем же правилам, которые мы сформулировали для настраивания функции желательности по кривой с односторонними ограничениями. Это обеспечит одинаковость оценок по обеим кривым, унифицирует процедуру настройки функций и интерпретации результатов.

Степень крутизны кривой задается определением и фиксацией координаты проекции точки секущей при $d = 0,33$ (например K, L, M) на ось абсцисс. Значения $0,05 \leq d \leq 0,33$ характеризуют неприемлемость качества по рассматриваемому показателю, но представляют чисто познавательный интерес (это — плохо, но насколько плохо?)

Асимметричная кривая 1 с односторонним ограничением описывается уравнением

$$d_{ij} = e^{-e^{(b_0 + b_1 \cdot Y_{ij})}}, \quad (2.119)$$

где d_{ij} — частные функции желательности для j -го показателя качества; Y_{ij} — i -тые текущие (измеренные) значения j -го показателя качества; b_0 и b_1 — эмпирические коэффициенты.

Эмпирические коэффициенты b_0 и b_1 в (2.119) определяются из выражений

$$b_1 = \frac{\ln |\ln |D2_j|| - \ln |\ln |D1_j||}{K2_j - K1_j}; \quad (2.120)$$

$$b_0 = \ln |\ln |D1_j|| - b_1 \cdot K1_j, \quad (2.121)$$

где $K1_j$ и $D1_j$, $K2_j$ и $D2_j$ — попарные элементы массивов, являющиеся координатами двух точек на кривой 1, для каждого показателя; $(K1_j)$ — проекция точки на ось абсцисс, соответствующей $d = 0,33$; $(K2_j)$ — идеальное реально достижимое значение показателя качества при $d = 0,995$.

При двухсторонних ограничениях кривая 2 задается выражением

$$d_{ij} = e^{-|Y_{ij}'|)^N}, \quad (2.122)$$

где $N = \left| \ln \left| \frac{\ln(1/0,33)}{\ln(Y0_j)} \right| \right|$; $|Y_{ij}'| = \frac{2 \cdot Y_{ij} - (Y2_j + Y1_j)}{Y2_j - Y1_j}$; N ха-

рактеризует крутизну и островершинность кривой 2; $Y1_j$ и $Y2_j$ — нижние и верхние границы диапазона значений j -го показателя, внутри которого качество должно соответствовать нижнему (нулевому) уровню; $Y0_j$ — значение j -го показателя качества, соответствующего значению 0,33 частной функции желательности.

Обобщенный критерий качества вычисляется по формуле

$$D_i = \left(\prod_{j=1}^p d_{ij}^{\delta_j} \right)^{1/\sum_{j=1}^p \delta_j}, \quad (2.123)$$

где p — количество обобщаемых показателей качества продукции; d_{ij} — частные функции желательности i -го образца по j -му показателю; δ_j — статистический вес (важность) j -го показателя качества ($0 \leq \delta_j \leq 1$).

2.2.5. Пример настраивания функции желательности

Обобщаемые показатели качества воздуха в помещении (табл. 24):

$Y(1)$ — температура, °С (измеренное значение $Y(1) = 17^\circ\text{C}$);

$Y(2)$ — содержание CO, мг·м⁻³ (измеренное значение $Y(2) = 0,025$ мг·м⁻³).

Т а б л и ц а 24

Пример настраивания функции желательности

№	$Y(i)$	Настраивание по кривой с односторонними ограничениями			Настраивание по кривой с двухсторонними ограничениями				
		δ	$K1_{d=0,33}$	$K2_{d=0,95}$	δ	$Y1_{d=0,05}$	$Y0_{d=0,33}$	$Y_{d=1}$	$Y2 = Y + (Y - Y1)$
	$Y(1)$				0,9	3	15	23	43
	$Y(2)$	0,85	0,03	0,005					
	$Y(3)$								

$$b_1 = \frac{\ln|\ln|D2_j|| - \ln|\ln|D1_j||}{K2_j - K1_j} = \frac{\ln|\ln(0,95)| - \ln|\ln(0,33)|}{0,005 - 0,03} = 188,1321.$$

$$b_0 = \ln|\ln|D1_j|| - b_1 \cdot K1_j = \ln|\ln(0,33)| - 188,1321 \cdot 0,03 = -5,54081.$$

$$d_{ij} = e^{-e^{-(b_0 + b_1 \cdot Y_{ij})}} = e^{-e^{-(-5,54081 + 188,1321 \cdot 0,025)}} = 0,6487.$$

$$N = \left| \ln \left| \frac{\ln(1/0,33)}{\ln(Y0_j)} \right| \right| = \ln \left| \ln(1/0,33) / \ln(15) \right| = 0,0381.$$

$$\left| Y'_{ij} \right| = \frac{2 \cdot Y_{ij} - (Y2_j + Y1_j)}{Y2_j - Y1_j} = \frac{2 \cdot 17 - (43 + 3)}{43 - 3} = -0,3.$$

$$d_{ij} = e^{-\left| Y'_{ij} \right|^N} = e^{-|-0,3|^{0,0381}} = 0,3845.$$

$$D_i = \left(\prod_{j=1}^p d_{ij}^{\delta_j} \right)^{\frac{1}{\sum_{j=1}^p \delta_j}} = (0,6487^{0,85} \cdot 0,3847^{0,90})^{\frac{1}{0,85+0,90}} = 0,4959.$$

2.2.6. Программный модуль «Summary Order»

2.2.6.1. Назначение и области использования программного модуля. Программный модуль предназначен для вычисления комплексной оценки качества продукции или окружающей среды по нескольким признакам с использованием настраиваемой функции желательности.

2.2.6.2. Перечень и назначение файлов программного пакета

Summary.exe	Главный исполняемый файл программного модуля
Summary.hlp	Файл помощи
Summary.cnt	Файл оглавления
Summary.sa1	Файл данных для расчета рабочего примера
Summary.sav	Файл данных для расчета рабочего примера
Summary.sg1	Файл данных для расчета рабочего примера
Summary.sgr	Файл данных для расчета рабочего примера
Summary.sti	Файл данных для расчета рабочего примера

2.2.6.3. Рабочий интерфейс и структура программного модуля.

Рабочее поле программного модуля формируется пятью закладками:

- объекты;

- признаки;
- нормирование признака;
- результаты измерений;
- оценка.

2.2.6.4. Запуск и управление работой программного модуля. При начальном запуске задачи должно появиться главное рабочее окно, с заголовком «Комплексная оценка качества окружающей среды». В этом окне размещены следующие управляющие элементы.

Главное меню программы

Файл — меню состоит из операций сохранения, открытия файлов программы, а также операции создания нового исследования. Операция создания нового исследования подразумевает уничтожение всех созданных объектов, групп объектов, признаков, нормировок признаков, фактических данных и названия исследования. Сохранение и открытие файлов программы должно осуществлять эти операции с файлами, содержащими вышеперечисленные данные. Работа с файлами производится в стандартных диалогах (рис. 24–26).

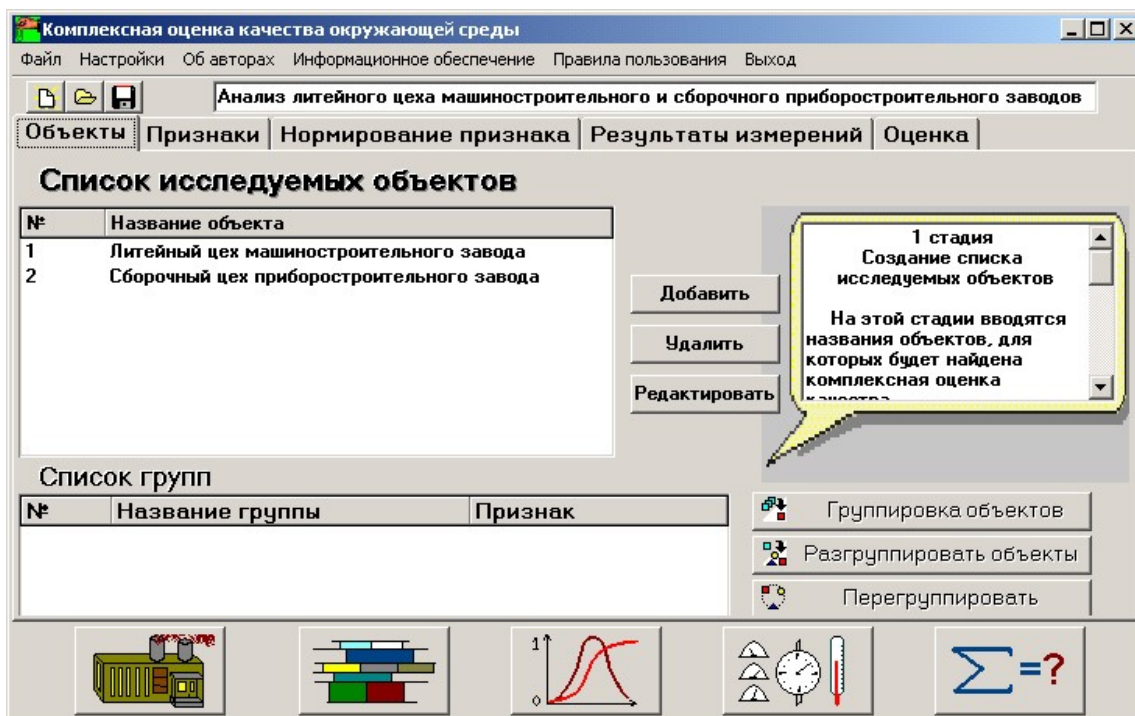


Рис. 24. Окно «Объекты» компьютерного программного модуля

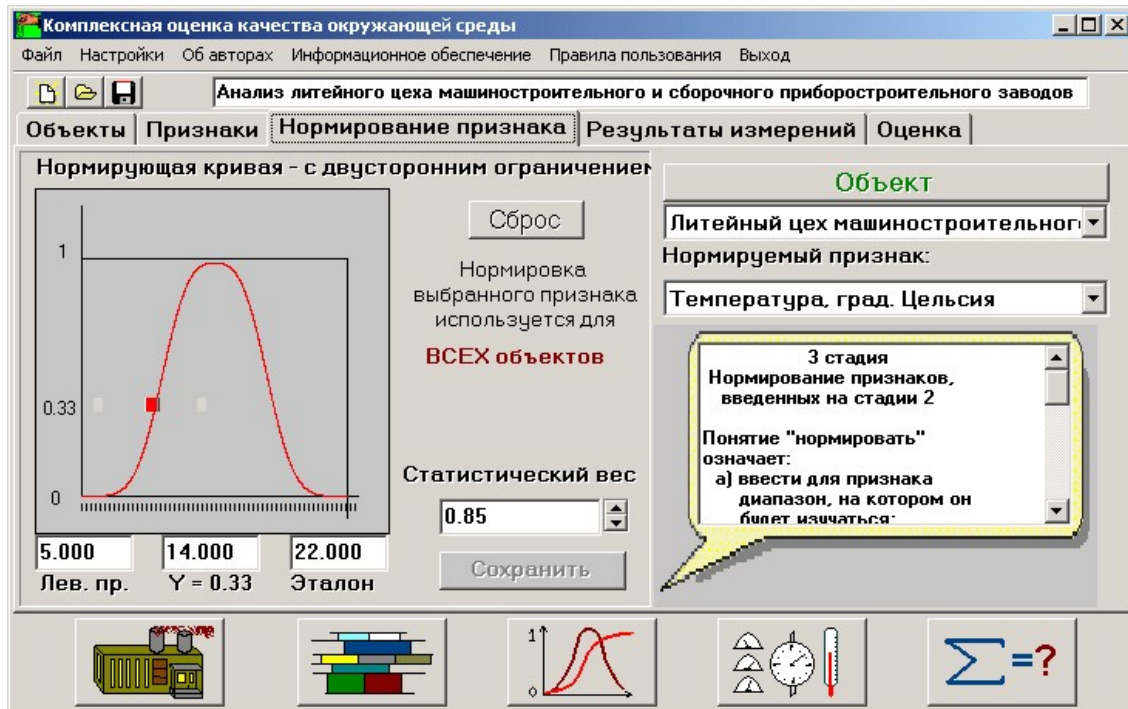


Рис. 25. Окно «Нормирование» признака компьютерного программного модуля

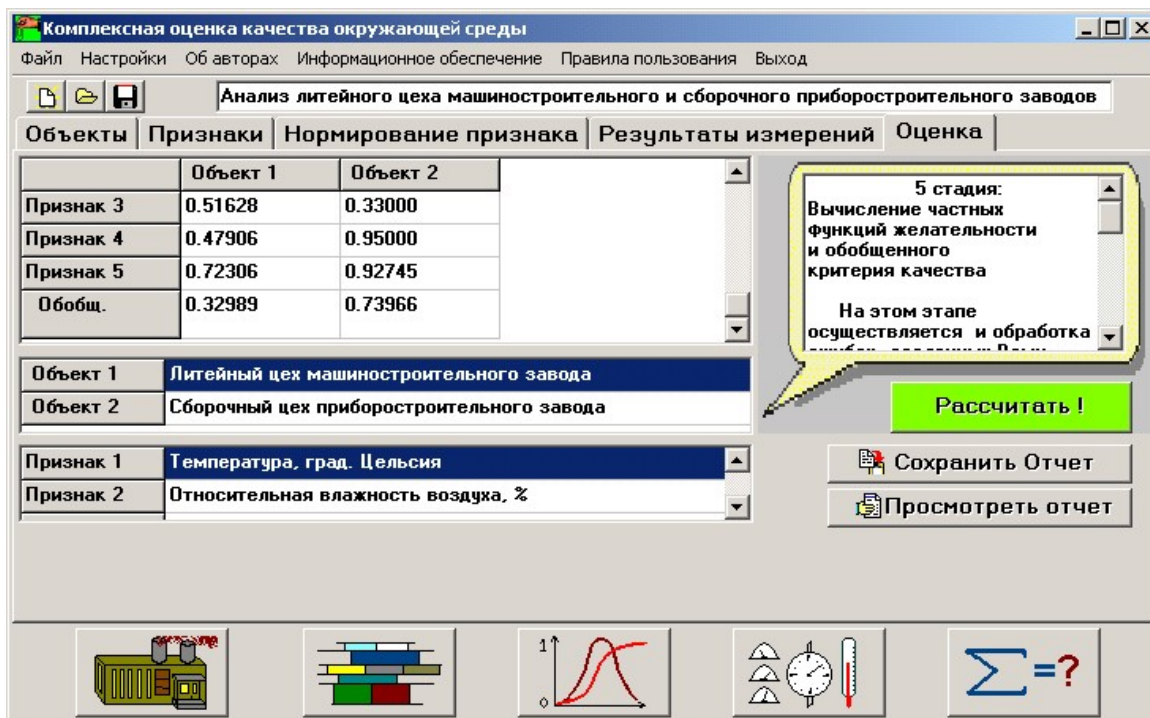


Рис. 26. Окно «Оценка» компьютерного программного модуля

Настройки — в этом пункте меню располагаются настройки программы, а также подпункт сохранения настроек. При выборе подпункта меню общие настройки появляется диалоговое окно, в котором должна производиться настройка следующих параметров:

- включить/выключить всплывающие подсказки;
- включить/выключить статические подсказки;
- включить/выключить запрос на сохранение результатов работы в файле при выходе из программы;
- включить/выключить добавление в список о допущенных ошибках предупреждений;
- включить/выключить автоматическое сохранение настроек программы при выходе из нее.

При выборе подпункта «Сохранение настроек» все установленные значения будут сохранены в системном реестре.

Вспомогательные кнопки для быстрого осуществления работы с файлами.

Поле ввода, где можно ввести название текущего исследования.

Закладки

Закладка «Объекты» содержит следующие элементы:

- список исследуемых объектов, содержащий порядковый номер и название оцениваемого объекта. Двойной щелчок левой кнопкой мыши на объекте в списке должен быть эквивалентен нажатию кнопки «Переименовать»;

- 3 кнопки, осуществляющие работу над объектами в списке исследуемых объектов — «Добавить», «Удалить», «Переименовать». При нажатии на кнопку «Добавить» необходимо реализовать ввод названия нового объекта и добавление его в список, «Удалить» — удаление выделенного объекта из списка, «Переименовать» — переименование выделенного в списке объекта;

- список групп объектов, содержащий порядковый номер группы, название группы и признак, по которому эта группа создана;

- 3 кнопки, осуществляющие работу над группами объектов в списке групп — «Группировка объектов», «Разгруппировать объекты», «Перегруппировать». Нажатие на кнопку «Группировка объектов» вызовет появление диалогового окна, где можно настроить новую группу, т. е. установить название группы, признак группировки и

объекты, входящие в группу. При нажатии на «Перегруппировать» произойдет вызов такого же окна, но с введенными для редактирования настройками выделенной в списке группы. Кнопка «Разгруппировать объекты» вызовет удаление текущей группы из списка;

- статическую подсказку — небольшое окно, содержащее краткую информацию о текущей стадии исследования.

Закладка «Признаки» содержит:

- список признаков оценки объектов, введенных на предыдущей стадии. Он должен содержать порядковый номер признака, название признака, флаг общей нормировки и тип нормирующей кривой. Двойной щелчок левой кнопкой мыши на признаке в списке должен быть эквивалентен нажатию кнопки «Редактировать»;

- 3 кнопки, осуществляющие работу над признаками в списке — «Добавить», «Удалить», «Редактировать». При нажатии кнопки «Добавить» будет добавлен в список новый признак. Для этого вызвать диалоговое окно и в нем установить следующие параметры: название признака, тип нормирующей кривой и флаг общей нормировки. Кнопка «Редактировать» должна вызывать то же самое окно, но с загруженными в него данными о выделенном признаке для их изменения. Кнопка «Удалить» приведет к удалению текущего признака;

- статическую подсказку.

Закладка «Нормирование признака» содержит:

- изображение нормирующей кривой с бегунком для визуальной установки значения $Y = 0,33$;

- поля ввода значений левого предела нормировки, $Y = 0,33$, $Y = 0,95$ и статистического веса;

- кнопку «Сброс», при нажатии на которую происходит обнуление всех установленных значений нормировки;

- кнопку «Сохранить» для запоминания введенных значений нормировки;

- окна выбора текущего нормируемого объекта (или группы объектов в зависимости от состояния кнопки с соответствующим названием) и признака;

- статическую подсказку.

Закладка «Результаты измерений» содержит:

- список фактически измеренных величин для текущего объекта.

В этом списке должны отражаться названия признаков, диапазон нор-

мировки, а также следует предусмотреть ввод фактических значений по каждому признаку;

- окно выбора текущего объекта, для которого будут вводиться фактически измеренные значения по каждому признаку;
- кнопку «Сброс», при нажатии на которую происходит обнуление всех установленных значений признаков для текущего объекта;
- кнопку «Сохранить» для запоминания введенных значений;
- статическую подсказку.

Закладка «Оценка» содержит:

- таблицу с результатами расчета, выполненного по данным из предыдущих стадий. В таблице должны быть выведены результаты частных функций желательности и обобщенный критерий качества для каждого объекта;
- 2 информационные таблицы, описывающие названия признаков и объектов;
- окно сообщений об ошибках – в это окно попадает список ошибок и предупреждений (в зависимости от настроек программы), которые были совершены в результате прохождения первых четырех стадий;
- кнопку «Рассчитать», при нажатии на которую выполняется расчет таблицы результатов;
- кнопки «Отчет» и «Просмотр отчета» для создания и просмотра текстового файла отчета с указанным именем и расширением *.rep*.
- кнопку «Результаты в DBF» для вывода результатов расчета в *dbf*-файл, из которого выбирались исходные данные. Если данные не брались из *dbf*-файла, то нажатие на эту кнопку приведет к сообщению об этом;
- кнопку «Просмотреть карту», работающую только при установленной на рабочем компьютере программе «ArcExplorer», которую можно проинсталлировать вместе с программой «Summary». Эта кнопка загружает программу «ArcExplorer» для отображения карты местности с выводом на нее результатов расчета из *dbf*-файла;
- статическую подсказку.

2.2.7. Описание рабочего примера

В качестве промышленных объектов, в которых предстоит оценить качество воздуха в производственных помещениях, выбраны два цеха:

- литейный машиностроительного завода;

- сборочный приборостроительного завода.

В качестве обобщаемых показателей качества воздуха в этих помещениях предлагается выбрать следующие признаки:

- 1) температуру, °С;
- 2) относительную влажность воздуха, %;
- 3) содержание кислорода, объемн. %;
- 4) содержание пыли, мг · м⁻³;
- 5) содержание диоксида углерода, объемн. %.

Условия контрольного примера приведены в табл. 25. Результаты расчетов по контрольному примеру иллюстрированы в табл. 26, 27.

Т а б л и ц а 2 5

Условия обобщения признаков контрольного примера

Показатели качества	Ст. вес	Координаты точек натуральных шкал			
		$D = 0,00$	$D = 0,33$	$D = 0,95$	Кривая
Температура, °С	0,85	5	14	22	2
Отн. влажн. воздуха, %	0,75	35	50	65	2
Содерж. кислорода, объемн. %	0,95	16	21	26	2
Содерж. пыли, мг · м ⁻³	0,45	80	40	2,5	1
Содерж. СО ₂ , объемн. %	0,90	5	2,5	0,5	1

Т а б л и ц а 2 6

Результаты измерений качества окружающей среды

Обобщаемые показатели	Измеренные значения признаков	
	Цех ПО «Интеграл»	Цех МТЗ
Температура, °С	22,000	26,000
Отн. влажн. воздуха, %	70,000	88,000
Содерж. кислорода, объемн. %	21,000	21,800
Содерж. пыли, мг · м ⁻³	2,500	35,000
Содерж. диоксида углерода, объемн. %	0,750	1,700

Т а б л и ц а 2 7

Результаты программного расчета

Обобщаемые признаки	Частные функции желательности	
	Цех ПО «Интеграл»	Цех МТЗ
Температура, °С	0,86765	1,00000
Отн. влажн. воздуха, %	0,01949	0,95824
Содерж. кислорода, объемн. %	0,51628	0,33000
Содерж. пыли, мг · м ⁻³	0,47906	0,95000
Содерж. диоксида углерода, объемн. %	0,72306	0,92745
Обобщенный критерий качества	0,32989	0,73966

2.3. КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ АНАЛИЗ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

2.3.1. Теоретические основы корреляционного анализа

Вероятность того, что вероятности распределения совокупности двух случайных величин примут значения в промежутках от x_1 до x_2 и от y_1 до y_2 соответственно, определится по очевидной формуле, представляющей обобщение аналогичной формулы одномерной задачи:

$$P \left\{ \begin{array}{l} x_1 \leq X \leq x_2 \\ y_1 \leq Y \leq y_2 \end{array} \right\} = \int_{y_1}^{y_2} \int_{x_1}^{x_2} f(x, y) dx dy. \quad (2.124)$$

Для каждой из величин X и Y рассматриваемой совокупности теоретические средние (математические ожидания) определяются следующими формулами:

$$\bar{x} = E(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot f(x, y) dx dy; \quad (2.125)$$

$$\bar{y} = E(Y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y \cdot f(x, y) dx dy. \quad (2.126)$$

Точка с координатами (\bar{x}, \bar{y}) называется центром распределения. Обобщением этих понятий является математическое ожидание функции $\psi(X, Y)$ рассматриваемых величин:

$$E[\psi(X, Y)] = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, y) f(x, y) dx dy. \quad (2.127)$$

Плотность вероятности распределения совокупности двух случайных величин должна быть функцией, из которой множителем может быть выделена плотность вероятности каждой из величин в отдельности:

$$f(x, y) = f_1(x) \cdot f_2(y) \cdot \varphi(x, y). \quad (2.128)$$

Величины X и Y взаимно независимы тогда и только тогда, когда

$$\varphi(x, y) = 1. \quad (2.129)$$

Следовательно, характер корреляционной связи полностью определяется функцией $\varphi(x, y)$.

Условные математические ожидания случайных величин X при $Y = y$ и Y при $X = x$ определяются формулами

$$m_1(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \varphi_1(x/y) dx; \quad (2.130)$$

$$m_2(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} y \cdot \varphi_2(y/x) dy. \quad (2.131)$$

Линии на плоскости $Q(x, y)$, определяемые уравнениями

$$\begin{aligned} x &= m_1(y); \\ y &= m_2(x), \end{aligned} \quad (2.132)$$

называются линиями регрессии, а сами уравнения (2.132) — уравнениями регрессии.

Распределение двух случайных величин называется нормальным, если каждое из них подчиняется закону Гаусса, когда значение другой заключено в произвольно малом промежутке.

Плотность вероятности нормального двухмерного распределения определяется выражением

$$f(\alpha, \beta) = \frac{1}{2\pi \cdot \sqrt{1 - R^2} \sigma_\alpha \sigma_\beta}; \quad (2.133)$$

$$F(\alpha, \beta) = f(\alpha, \beta) \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2(1 - R^2)} \left[\frac{\alpha^2}{\sigma_\alpha^2} - 2R \frac{\alpha}{\sigma_\alpha} \cdot \frac{\beta}{\sigma_\beta} + \frac{\beta^2}{\sigma_\beta^2} \right] \right\}, \quad (2.134)$$

где $\alpha = x - \bar{x}$; $\beta = y - \bar{y}$; $\sigma_\alpha, \sigma_\beta$ — стандартные выборочные отклонения отдельно X и отдельно Y .

Параметр R в выражении (2.134) есть коэффициент корреляции, который можно вычислить следующим образом:

$$R_{(x,y)} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} . \quad (2.135)$$

Линии регрессии являются прямыми, представленными уравнениями

$$\alpha = R_{(x,y)} \frac{\sigma_\alpha}{\sigma_\beta} \cdot \beta, \quad \beta = R_{(x,y)} \frac{\sigma_\beta}{\sigma_\alpha} \cdot \alpha . \quad (2.136)$$

Коэффициент парной корреляции $R_{(x,y)}$ характеризует уклонение корреляционной связи от линейной функциональной зависимости.

Величина коэффициента корреляции может изменяться в пределах от нуля до плюс-минус единицы. При $R_{(x,y)} = 0$ случайные величины X и Y взаимонезависимы. При $R_{(x,y)} = 1$ одна величина однозначно и полностью определяет другую, одна полностью выражается через другую, изменения одной полностью объясняются и описываются изменениями другой.

2.3.2. Программный модуль «Korr»

2.3.2.1. Назначение, области использования и функциональные возможности программного модуля. Программа предназначена для корреляционного анализа химико-технологических систем, расчета коэффициентов парной корреляции между признаками при синхронной фиксации их значений.

Коэффициент парной корреляции характеризует уклонение корреляционной связи от линейной функциональной зависимости.

Программа может использоваться для выявления и оценки причинно-следственных связей между уровнем загрязнения окружающей среды и его источниками.

Компьютерный обучающий тренажер позволяет:

- осуществлять ввод и редактирование до 15 наименований признаков, оцениваемых по 25 результатам наблюдений;
- вычислять значения коэффициентов парной корреляции статистической выборки;

- организовывать вычислительный эксперимент по рациональному природоохранному проектированию путем целенаправленного изменения значений элементов в матрице наблюдений;
- формировать, редактировать, копировать и распечатывать файл отчета вычислительного эксперимента с целью анализа ситуации и выработки управленческих решений.

2.3.2.2. Перечень и назначение файлов программного пакета

<i>Korr.exe</i>	Главный исполняемый файл тренажера
<i>Korr.lpd</i>	Файл данных для расчета рабочего примера
<i>Korr.hlp</i>	Файл помощи
<i>Korr.cnt</i>	Файл оглавления

2.3.2.3. Запуск и управление работой программного модуля

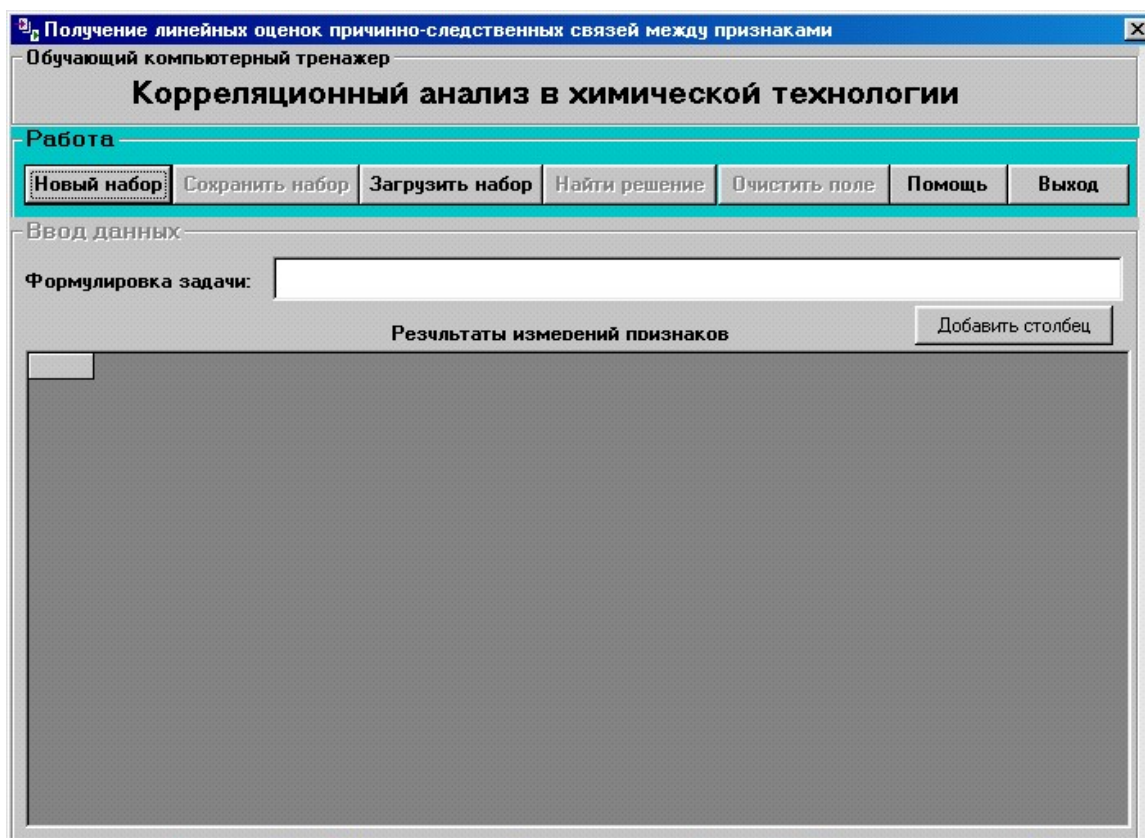


Рис. 27. Рабочий интерфейс программного модуля «Korr»

- Рабочее поле интерфейса тренажера состоит из двух областей (рис. 27):
- панель информационного обеспечения и управления работой тренажера;
 - фрейм ввода и коррекции исходных данных.

Работа с тренажером не может осмысленно осуществляться без предварительной подготовки путем ознакомления с теоретическим материалом и рекомендациями, помещенными в разделах информационного обеспечения и справочной системе, вызываемой командной кнопкой «Помощь» на верхней панели «Работа».

На рабочей панели тренажера для старта активны две командные кнопки: «Новый набор» и «Загрузить набор». Это обеспечивает выбор и дает возможность использовать тренажер в двух вариантах:

- создавать свой сценарий;
- воспользоваться рабочим примером, предлагаемым разработчиками.

Если пользователь выбрал первый вариант, то вызывается диалоговое окно, где задаются параметры нового сценария тренажера.

Когда завершен ввод информации с пульта или для работы был выбран вариант «Загрузить набор», можно продолжить заполнение матрицы новыми данными, нажимая кнопку «Добавить столбец» на рабочей панели программного модуля.

2.3.2.4. Ввод исходных данных

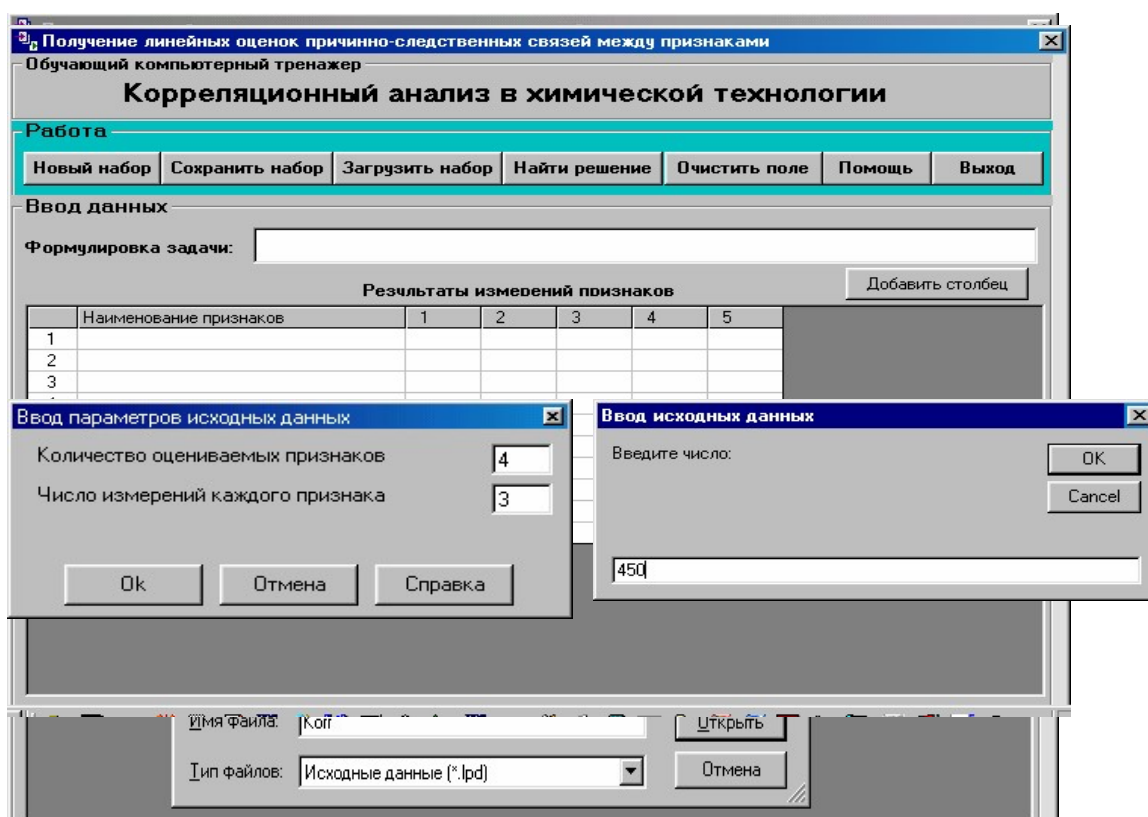


Рис. 28. Ввод исходных данных с пульта

$$\lim_{x \rightarrow 0} F(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow 0} F(x) = 1, \quad (2.6)$$

Рис. 29. Ввод исходных данных из файла

2.3.2.5. Исполнение расчетов



Рис. 30. Окно результата

2.3.2.6. Сохранение файла результатов

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1. \quad (2.18)$$

Рис. 31. Сохранение файла результатов

2.3.3. Описание рабочего примера

В качестве примера использования корреляционного анализа рассмотрим взаимосвязь между концентрацией диоксида серы в атмосфере города N и грузопотоками серосодержащего сырья и топлива, поступающих в течение года по месяцам:

1) поступление серы на химический завод (т/мес.):

38, 45, 64, 57, 35, 39, 53, 60, 21, 74, 59, 33;

2) поступление мазута на ТЭЦ-2 (т/мес.):

300, 240, 360, 300, 360, 240, 240, 360, 360, 300, 240, 360;

3) поступление мазута для котельной микрорайона (т/мес.):

19, 25, 28, 17, 31, 18, 28, 30, 25, 19, 14, 30;

4) поступление мазута на ТЭЦ-1 (т/мес.):

360, 420, 420, 360, 300, 420, 300, 360, 420, 300, 300, 420;

5) средняя концентрация SO_2 в городе ($mg \cdot m^{-3}$ по месяцам):

5,7; 6,4; 6,8; 4,9; 7,5; 5,5; 6,7; 7,3; 6,5; 5,7; 4,0; 7,4.

В реальных условиях объем перерабатываемой информации многократно больше, поэтому справиться с задачей выявления виновника и обоснования степени его вины, достаточно трудно.

Однако, если воспользоваться выражением (2.134) и получить корреляционную матрицу, то картина становится существенно яснее (табл. 28).

Т а б л и ц а 28

Корреляционная матрица оцениваемых признаков

Признаки	Признаки				
	1	2	3	4	5
1	1	-0,20408	-0,25125	-0,43981	-0,30792
2	-0,20408	1	0,60020	0,21495	0,63210
3	-0,25125	0,60020	1	0,17553	0,97314
4	-0,43981	0,21495	0,17553	1	0,23586
5	-0,30792	0,63210	0,97314	0,23586	1

Если обратить внимание на последнюю строку, то взаимосвязь концентрации SO₂ (пятый признак) со всеми другими признаками получает количественную оценку. Причем наиболее тесно с загрязнением среды коррелирует поступление мазута для котельной микрорайона (третий признак), $R_{(x,y)} = 0,97314$. На первый взгляд, это может показаться странным и неправдоподобным. Но если учесть, что современные ТЭЦ и химический завод должны быть оборудованы автоматикой для управления технологическим процессом и высокой дымовой трубой, тогда, как маломощная котельная сжигает мазут под органолептическим управлением и выбрасывает газы в атмосферу на малой высоте.

2.3.4. Использование программного модуля «EcoGame» в качестве источника информации для корреляционного анализа функционирования производственного комплекса

Поскольку компьютерный тренажер «EcoGame» имитирует в динамике функционирование территориального производственного комплекса, его можно использовать в качестве источника информации для освоения приемов корреляционного анализа химико-технологических процессов.

Для этого необходимо:

I. В окне главного меню программного модуля «EcoGame» активировать кнопки «Формирование варианта» — «Ok» — «Требования к качеству продукции» — «Ok» — «Выбор режима игры» — «Автономная работа системы» — «Ok».

Появится окно «Текущее качество продукции» (рис. 32).

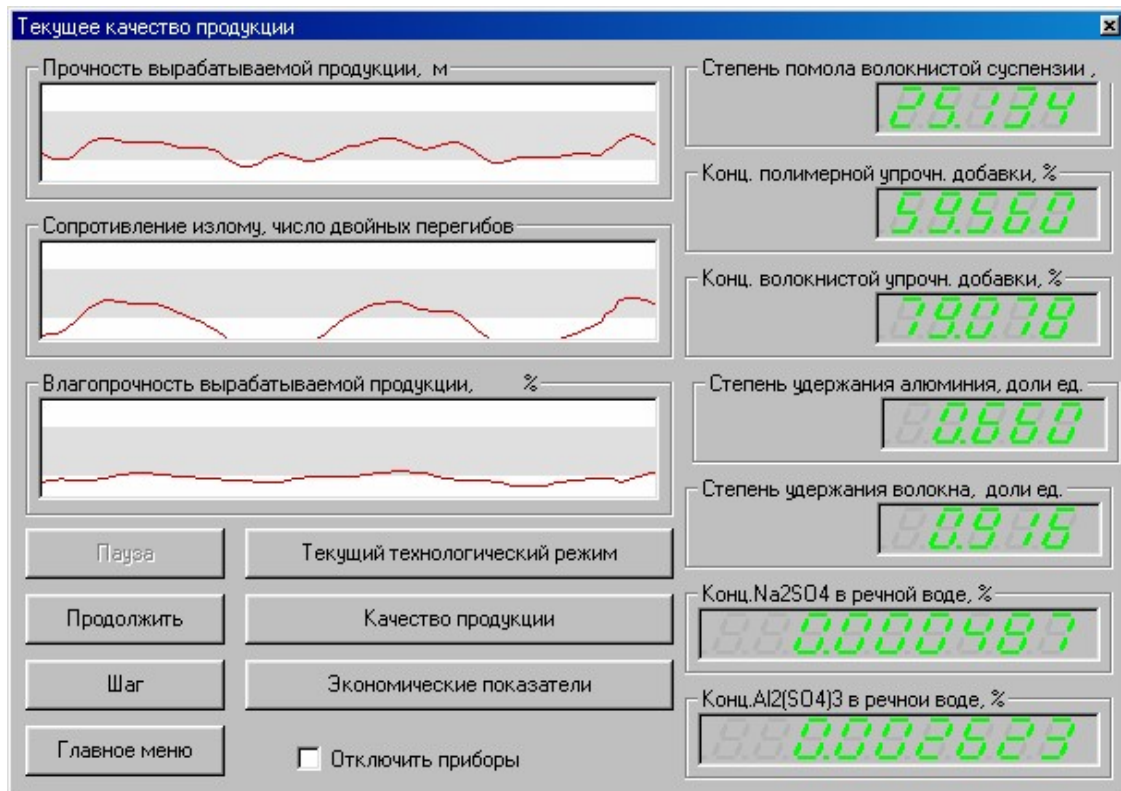


Рис. 32. Окно «Текущее качество продукции» программного модуля «EcoGame»

II. Дать возможность производственному комплексу поработать некоторое время в созерцательном режиме, после чего нажать кнопки «Пауза» и «Качество продукции». Появится окно «Качество продукции» (рис. 33).

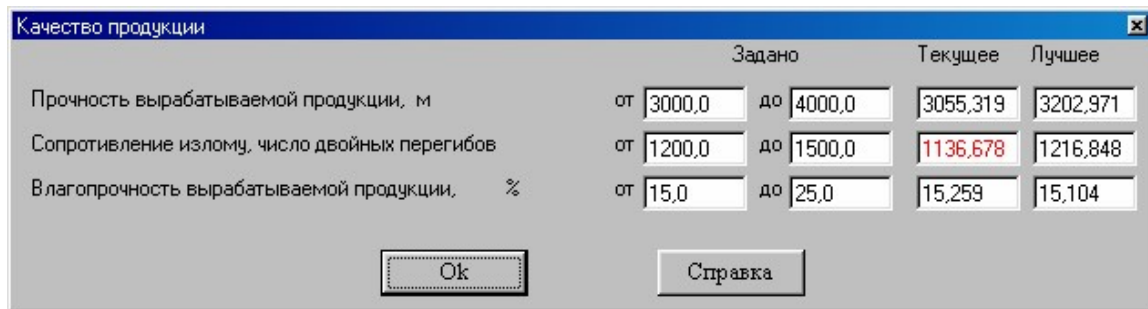


Рис. 33. Окно «Качество продукции» программного модуля «EcoGame»

III. В окне рис. 32 выделить, взять в буфер обмена, а потом поместить в соответствующие ячейки программного модуля «Kont» (рис. 34) текущие значения признаков.

1. Степень помола волокнистой суспензии.
2. Концентрация полимерной упрочняющей добавки.

3. Концентрация волокнистой упрочняющей добавки.
4. Степень удержания алюминия.
5. Степень удержания волокна.
6. Концентрация Na_2SO_4 в речной воде.
7. Концентрация $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$ в речной воде.

IV. Из диалогового окна рис. 33 взять в буфер обмена и поместить в соответствующие ячейки программного модуля «Корг» текущие значения показателей качества продукции:

8. Прочность вырабатываемой продукции.
9. Сопротивление излому.
10. Влагопрочность.

Многократное повторение пунктов I – IV и постепенное заполнение соответствующих ячеек таблицы «Данные» программного модуля «Корг» (рис. 34) позволяет сформировать выборочную совокупность и использовать ее для получения корреляционной матрицы, выявления причинно-следственных связей между признаками, организации вычислительных экспериментов и интерпретации полученных результатов.

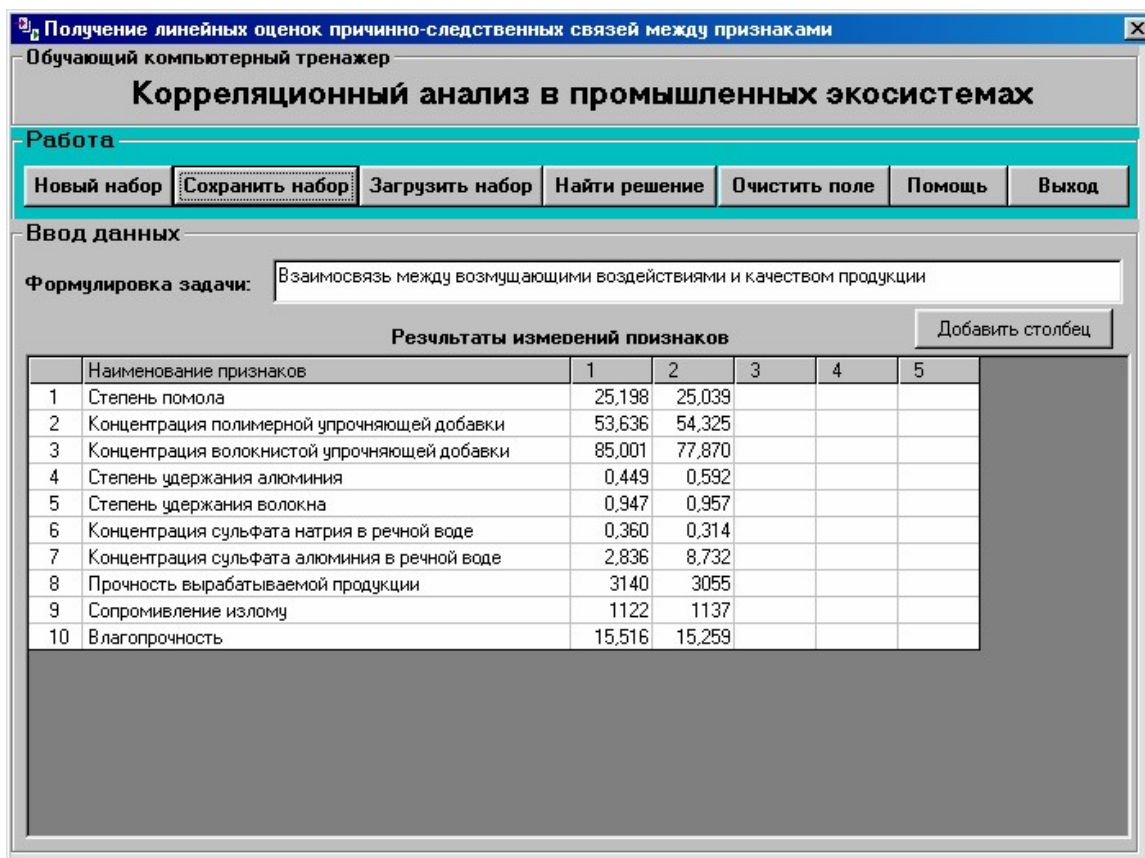


Рис. 34. Окно интерфейса программного модуля «Корг» для ввода значений признаков

2.3.5. Рекомендации по использованию программного модуля

С точки зрения использования корреляционного анализа в природоохранной деятельности представляет интерес установить связь между несколькими признаками и одним оценочным параметром. Например, определить виновника загрязнения атмосферы города Минска среди нескольких предприятий, находящихся на его территории. На основе анализа корреляционных матриц можно выявить и оценить причинно-следственные связи между качеством окружающей среды и ее возможными загрязнителями.

Следует предостеречь пользователей от механического применения корреляционного подхода к решению практических задач. Метод хорош лишь в тех случаях, когда между признаками можно уверенно предположить линейную взаимосвязь. Поэтому фактически тесно взаимосвязанные признаки могут привести к получению низких значений коэффициентов парной корреляции лишь потому, что математическое описание их взаимосвязанности отличается от линейной зависимости. С другой стороны, несомненно, не связанные друг с другом факторы могут привести к получению высоких значений. Например, если рассмотреть за одно и то же календарное время число пролетевших аистов и количество родившихся детей.

2.4. ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ПРОГНОЗИРОВАНИЯ *

2.4.1. Термины и определения

Прогноз и предсказание объединяет наличие неопределенности, связанной с будущей ситуацией. Будущую неопределенность полностью устранить невозможно. Поэтому при принятии решения в условиях неопределенности достаточно удовлетвориться хорошим (или наилучшим) выбором из множества допустимых вариантов. В этом случае прогнозирование будет выступать в качестве инструмента выбора.

* В работе над разделом принимал участие А.В. Овсянников

Понятия «прогнозирование» (forecasting) и «предсказание» (prediction) отличаются друг от друга.

Под «предсказанием» понимается искусство суждения о будущем состоянии объекта, основанное на субъективном «взвешивании» большого числа качественных и количественных факторов.

Под «прогнозированием» понимается некоторый исследовательский процесс, в результате которого вычисляются вероятностные оценки будущего состояния прогнозируемого объекта.

Между прогнозами существуют различия с точки зрения объективности их характера. Решение о том, брать или не брать с собой зонт при отсутствии дождя в момент выхода из дома, мы принимаем, как правило, субъективно. Решение о проектировании и строительстве предприятия должно приниматься на основе научно обоснованного объективного прогноза о наличии ресурсов, степени возможного загрязнения окружающей среды и потребности в его продукции на перспективу.

«Прогнозирующая система» — это система, включающая математические, логические, эвристические элементы, на вход которой поступает имеющаяся к настоящему времени информация о прогнозируемом объекте, а на выходе получают данные о будущем состоянии этого объекта (прогноз).

Прогноз может быть качественным (будет ясная погода) и количественным (в интересующем нас году загрязнение диоксидом серы в районе первого стационарного поста наблюдений Белгидромета в городе Минске будет таким-то).

Организация процесса прогнозирования начинается с обработки результатов измерений качества окружающей среды на участке наблюдения, затем вычисляются будущие значения интересующих параметров в упрежденной точке. Оценивается математическое ожидание случайной величины (точечный прогноз) и доверительный интервал, в который с заданной вероятностью попадает результат прогноза (интервальный прогноз).

Первым естественным требованием к качеству прогноза является его точность. От прогнозирующей системы нельзя требовать, чтобы она точно «угадала» количество произведенных в Белоруссии минеральных удобрений в 2010 году, но правомерно потребовать, чтобы оценка будущего производства находилась в определенном

диапазоне. Чем уже требуемый диапазон величины оценки прогноза, тем более точна и совершенна прогнозирующая система.

Вторым весьма важным требованием к прогнозирующей системе является ее способность гибкого реагирования на изменения, происходящие в объекте прогнозирования.

Иногда от прогнозирующей системы требуют получение результата с высоким быстродействием.

2.4.2. Общая схема прогнозирования

Основой для прогнозирования является информация о прошлом. Узловым вопросом исследовательского процесса прогнозирования выступает определение закономерностей в поведении объекта прогнозирования. Когда закономерность будет установлена, можно приступить к построению математической модели прогнозируемого объекта. На выбор модели оказывают влияние цель и задачи прогнозирования, а также временной интервал, на который настраивается прогнозирование.

2.4.3. Понятие модели прогнозируемого объекта

Если мы имеем дело с вполне определенным физическим процессом и его вид априорно известен, задача прогнозирования может стать тривиальной. Например, не представляет труда прогнозирование солнечных и лунных затмений.

Если вид модели априорно неизвестен, процесс является детерминированным и информация о нем не искажена, то задача прогнозирования также может быть решена успешно и однозначно. Легко предсказать числа, которые появятся в следующих последовательностях:

5, 5, 5, 5, 5

1, 2, 3, 4, 5

1, 3, 5, 7, 9

1, 4, 9, 16

Более сложную задачу представляет определение модели процесса при наличии лишь ограниченной информации о нем, типа «процесс является стационарным», или «такая-то характеристика процесса является неубывающей функцией времени» и т. п.

Наконец, в тех случаях, когда о процессе ничего не известно, а поступающая информация искажена помехами, задача выбора модели становится сложной и требует искусства и опыта исследователя.

2.4.4. Методы прогнозирования

Математические методы прогнозирования в зависимости от вида описания объектов подразделяются на методы моделирования процессов движения (развития) и методы экстраполяции (статистические методы).

К первой группе относятся методы, использующие в качестве модели дифференциальные уравнения с заданными начальными условиями. Задача прогнозирования сводится к решению дифференциальных уравнений для заданного момента времени в будущем.

В качестве математического аппарата для определения неизвестных параметров модели при статистическом прогнозировании наиболее часто используется метод максимального правдоподобия и, в частности, его разновидность – метод наименьших квадратов.

Весь процесс математического прогнозирования можно условно разделить на следующие этапы:

- сбор и обработка исходных данных;
- выбор и обоснование математической модели прогнозируемого объекта;
- обработка статистических данных для определения неизвестных параметров модели и получения зависимости, связывающей подлежащие прогнозированию характеристики объекта со временем;
- собственно прогнозирование, т. е. вычисление значений интересующих характеристик объекта в заданный момент времени.

Процессы, подлежащие прогнозированию, могут быть непрерывными и дискретными. Задача прогнозирующей системы состоит в определении пространственных координат будущего положения движущегося объекта или в прогнозе общего количества импульсов (например, количества результатов измерений загрязнения атмосферы диоксидом серы, превышающих ПДК) за определенный (заданный) отрезок времени в будущем.

Сбор и подготовка данных о прогнозируемом объекте (первый этап прогнозирования), как правило, подвержены влиянию разнооб-

разных случайных возмущений, искажающих истинные значения прогнозируемого процесса.

Второй этап заключается в выборе и обосновании модели прогнозируемого процесса и может успешно завершиться лишь в том случае, если от момента окончания наблюдений до момента времени, для которого делается прогноз, не меняется закон, положенный в основу модели.

Третий этап статистического прогнозирования предусматривает «очистку» имеющихся данных от искажающих шумов в последующем определении зависимостей, по которым будет осуществляться прогнозирование.

Четвертый этап, собственно прогнозирование, требует обоснования заданных значений точечного и интервального прогнозов в интересующий момент времени в будущем, а также обоснования выбора метода вычисления прогнозных характеристик.

В моделях, наиболее часто используемых при прогнозировании, величина Y явно выражается через другие параметры модели в следующем общем виде:

$$Y = f(\vec{a}, \vec{x}) + \eta . \quad (2.137)$$

Функция $f(\vec{a}, \vec{x})$ является детерминированной основой прогнозируемой величины Y . Она характеризует значения, которые имела бы «действительная» величина Y , если бы она не подвергалась воздействию случайной помехи η .

Модель, в которой помеха складывается с детерминированной основой, (аддитивное воздействие), является наиболее распространенной при решении практических задач прогнозирования.

2.4.5. Прогнозирование характеристик стационарных случайных процессов

На практике часто приходится иметь дело с прогнозированием случайных величин, непрерывно изменяющихся в процессе наблюдения, т. е. с задачей прогнозирования случайных функций.

Случайная функция $x(\tau)$ называется стационарной, если все ее вероятностные характеристики не меняются при сдвиге аргументов, от которых они зависят, по оси τ .

Главной характеристикой случайной функции является ее математическое ожидание $M[x(\tau)]$, представляющее собой неслучайную функцию времени, которая при всяком значении τ равна математическому ожиданию случайной функции $x(\tau)$ в данном сечении.

Другой важной характеристикой случайной функции является ее корреляционная функция $R(\tau, \tau')$, характеризующая степень зависимости значений случайной функции в сечениях, относящихся к различным τ .

Корреляционная функция $R(\tau, \tau')$ представляет собой неслучайную функцию двух аргументов τ и τ' , которая при каждой их паре значений равна математическому ожиданию произведений центрированных значений случайной функции (ковариации) соответствующих сечений.

Методику прогнозирования качества окружающей среды можно разрабатывать для стационарных случайных процессов, обладающих эргодичностью.

Свойство эргодичности заключается в том, что «средние значения по совокупности», т. е. средние значения, определенные на основании наблюдений за многими подобными процессами в один и тот же момент времени, равны средним значениям, определенным на основании наблюдений за одним из процессов в течение достаточно большого интервала времени. Это значит, что одна реализация стационарного случайного процесса, обладающего эргодическим свойством, достаточно полно представляет все совокупности возможных реализаций.

2.4.6. Прогнозирование временных рядов

Известным подходом к решению задачи прогнозирования временных рядов является подход, основанный на знании математической модели, параметров и характеристик изучаемого процесса.

В случае детерминированных моделей, известных характеристик и параметров задача прогнозирования сводится к получению численных значений процесса путем подстановки в модель аргумента τ^* — исследуемого момента времени.

В рассматриваемой задаче случайный процесс прогнозирования качества окружающей среды $v(\tau)$ в широком смысле следует считать

нестационарным, поскольку его характеристики зависят от времени. Кроме того, нельзя судить об эргодичности процесса вследствие невозможности получить реализации случайного процесса с того же начального момента времени.

Прогнозирование целесообразно проводить на основе анализа спектрального состава реализации случайного процесса.

Можно выделить следующие этапы решения задачи:

- оценка наиболее «устойчивых» периодических составляющих реализации. В случае их существенного отличия друг от друга можно судить о «неслучайности» (закономерности) наиболее мощных составляющих;
- отфильтровывание отмеченных «мощных» составляющих спектра;
- получение аналитической зависимости отфильтрованной последовательности на интервале времени $(\tau_n - \tau_k)$;
- получение прогноза и его вероятностной ошибки.

В качестве оценки спектральной плотности случайного процесса $v(\tau)$ можно принять величину $G_y \approx |S(f_i)|^2$, где $S(f_i)$ — дискретное преобразование Фурье последовательности

$$f_i = i / (N \cdot \Delta\tau), \quad (2.138)$$

где N — количество дискрет на интервале $(\tau_n - \tau_k)$; $\Delta\tau$ — шаг дискретизации, $I = 1, \dots, N$.

Частотный фильтр характеризуется комплексным коэффициентом передачи $W(j\omega)$, где j — комплексное число; ω — частота.

Связь между спектральной плотностью после фильтрации СП и до нее определяется выражением

$$G_x = |W(j\omega)|^2 G_y. \quad (2.139)$$

Проводя обратное дискретное преобразование Фурье спектра G_x , получаем временные дискретные отсчеты профильтрованной реализации. Эти отсчеты в виде временного ряда представляют собой выделенный «неслучайный» тренд исходного нестационарного случайного процесса.

Для построения модели тренда нецелесообразно использовать интерполяцию или аппроксимацию, так как за пределами интервала, на котором осуществляются указанные процедуры модель может иметь существенные выбросы. Поэтому разработку модели тренда проводят, используя авторегрессионные разностные уравнения.

2.4.7. Выявление тренда

Спектральный состав (рис. 35) полученной реализации (результаты измерений загрязнения атмосферы города Минска за одиннадцатилетний период), может быть определен с помощью дискретного преобразования Фурье (ДПФ) временной последовательности $x(\beta\Delta) = x(b)$; $t_p = \beta\Delta\tau$, $\beta = 1, \dots, n$:

$$S(i) = \frac{\Delta\tau}{N} \sum_{\beta=1}^N x(\beta) \cdot \exp\{-j \cdot 2\pi(i-1)(\beta-1) / N\}. \quad (2.140)$$

Обратное (ДПФ):

$$x(\beta) = \frac{1}{\Delta\tau} \sum_{i=1}^N S(i) \cdot \exp\{j \cdot 2\pi(i-1)(\beta-1) / N\}, \quad (2.141)$$

где $S(i) = S(f_i)$, $f_i = i/N\Delta\tau$; β — номер временной последовательности; j — мнимая часть комплексного числа; $\Delta\tau$ — шаг дискретизации по времени; N — количество дискрет на временном участке ($\tau_n - \tau_k$).

Для анализа спектрального состава временного ряда представляет интерес модуль текущего спектра (ТС) $|S(f_i)|$.

При расчете ТС количество дискретных точек преобразования Фурье было выбрано равным $N = 8192$. Исходная реализация случайного процесса и ее текущий спектр приведены на рис. 35.

Анализ текущего спектра реализации случайного процесса показывает, что, во-первых, исследуемый процесс является низкочастотным и при нормированных частотах более 120 (33,2 сут) практически равен нулю (пересчет нормированных частот во время осуществляется по формуле $T_{\text{сут}} = (\tau_k - \tau_n) / (f \cdot 24)$, где τ_k — конечное время реализации случайного процесса, τ_n — начальное время реализации случайного процесса; f — нормированная частота); во-вторых, главные максимумы текущего спектра (кроме частоты $f = 0$) расположены на частотах, которым соответствуют следующие временные периоды (табл. 29).

Т а б л и ц а 29

Временные периоды основных максимумов

Основные максимумы	I	II	III	IV	V
Величина максимума	0,61	0,62	0,29	0,24	0,23
Частота	9	36	73	89	100
Период (сут)	443	101	54	44	40

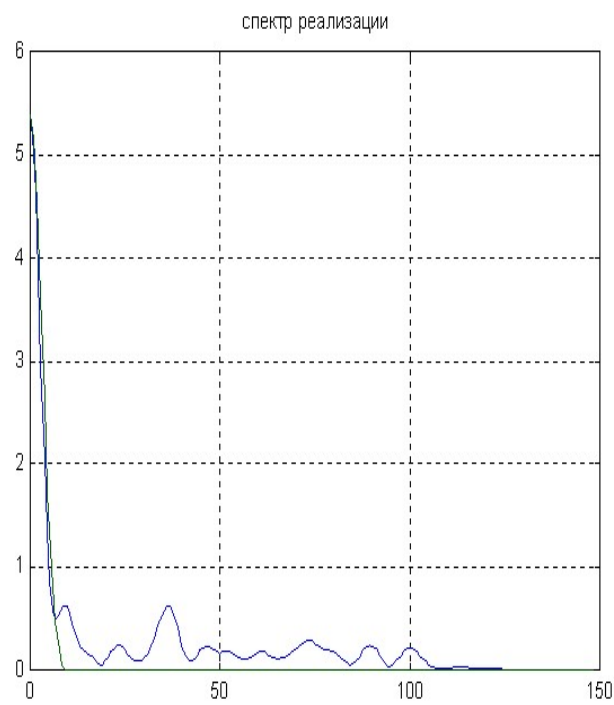
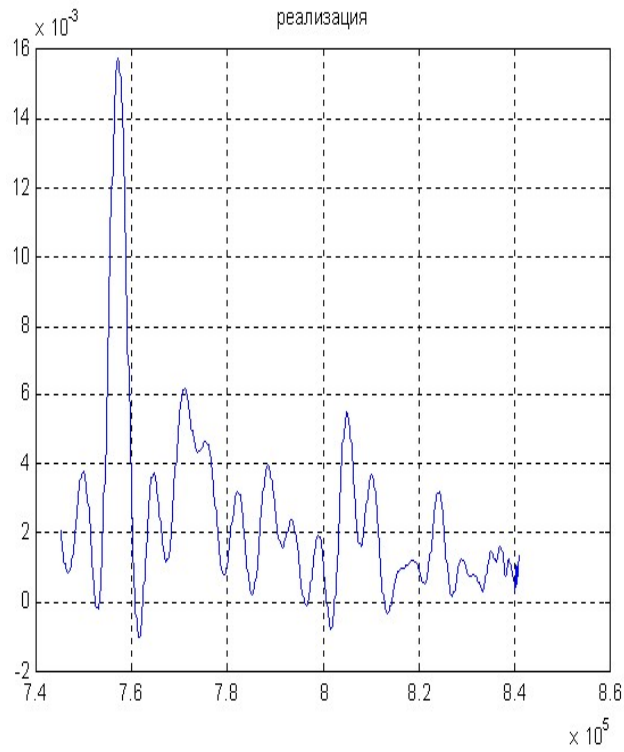


Рис. 35. Исходная реализация случайного процесса и ее текущий спектр

Наряду с мощной низкочастотной составляющей для анализа периодичности представляют интерес два первых максимума (I, II). Их учет в модели тренда может повысить эффективность прогноза.

Главный максимум можно выделить с помощью низкочастотного дискретного нерекурсивного фильтра, описываемого конечно-разностным уравнением вида

$$y(n) = b(1)x(n) + b(2)x(n-1) + \dots + b(nb+1)x(n-nb), \quad (2.142)$$

где nb — коэффициент, характеризующий порядок фильтра.

Амплитудные характеристики рассчитанного по формуле (2.142) фильтра имеют пульсации Гиббса, наблюдаемые в полосах пропускания и задерживания, происхождение которых обусловлено медленной сходимостью ряда Фурье.

В целях уменьшения пульсаций Гиббса можно использовать функции окна. В качестве функции окна целесообразно использовать окно Кайзера. Привлекательное свойство окна Кайзера состоит в том, что коэффициент пульсации можно изменять непрерывно от малого значения, соответствующего окну Блэкмана, до больших значений в случае прямоугольного окна, изменяя только параметр α . Кроме этого, ширина главного лепестка в спектре может регулироваться подбором числа отсчетов N .

Окно Кайзера описывается формулой

$$\omega(n\Delta\tau) = \begin{cases} I_0(\beta)/I_0(\alpha) & \text{при } |n| \leq (N-1)/2; \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases} \quad (2.143)$$

где $I_0(\cdot)$ — функции Бесселя первого рода нулевого порядка; $\beta = \alpha\sqrt{1 - (2n/(N-1))^2}$.

Частотная характеристика нерекурсивного фильтра с использованием окна Кайзера определяется z -преобразованием произведения

$$\omega(n\Delta\tau) \cdot h(n\Delta\tau), \quad (2.144)$$

где $h(n\Delta\tau)$ — импульсная характеристика фильтра

$$W(z) = \frac{Y(z)}{X(z)} = b(1) + b(1)z^{-1} + \dots + b(n_b+1)z^{-n_b}, \quad (2.145)$$

где $z = e^{-j\omega\Delta\tau}$.

Расчет коэффициентов $b(1), \dots, b(n_b+1)$ фильтра выполняется по методу наименьших квадратов.

После пропуска исходного временного ряда через низкочастотный фильтр с выбранной частотной характеристикой получим низкочастотный тренд временного ряда.

2.4.8. Авторегрессионная модель тренда

Авторегрессионная модель низкочастотного тренда описывается уравнением общего вида

$$y(k+n) = a_n y(k+n-1) + a_{n-1} y(k+n-2) + \dots + a_1 y(k), \quad (2.146)$$

где n — порядок авторегрессионной модели; $a(i)$ — коэффициенты авторегрессионной модели, рассчитываемые с помощью метода наименьших квадратов; $k = 1, \dots, N+m$ (m — глубина прогноза, количество шагов прогноза).

Порядок используемой авторегрессионной модели для прогнозирования определялся из условия минимума среднего квадрата ошибки между моделью и выявленным трендом. Среднеквадратическое отклонение модели от тренда на интервале $k = 1, \dots, N$

$$\text{СКО} = \sqrt{\sum_{k=1}^N (y_{k(*)} - y_{k(**)})^2 / (N-1)}, \quad (2.147)$$

где $y_{k(*)}$, $y_{k(**)}$ — значения $y(k)$, вычисленные по формулам (2.142) и (2.146) соответственно.

Наилучшей моделью низкочастотного тренда является модель с $n = 2, 4$.

Адекватность разработанной модели тренда может быть оценена по критерию Фишера

$$F = D_y / D_{\text{ост}}, \quad (2.148)$$

где $D_y = 1,499 \cdot 10^{-6}$ — дисперсия разработанной модели; $D_{\text{ост}} = [\text{СКО}]^2$ — дисперсия отклонений модели тренда от исходной зависимости.

В результате расчетов получено $F = 0,057$.

Сравнивая полученный результат с табличным $F_p(u_1, u_2) = 2,25$, где $p = 0,01$ — выбираемый уровень значимости; $u_1 = 47$, $u_2 = 30$ — степени свободы, видим, что, согласно критерию, модель можно считать адекватной.

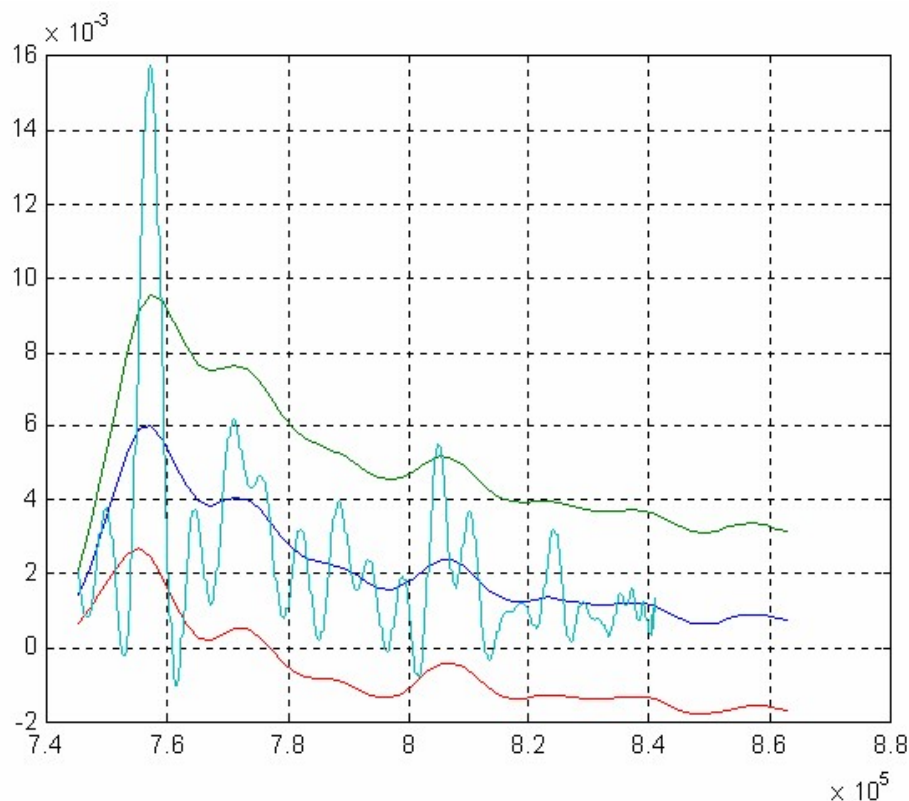


Рис. 36. Прогноз загрязнения окружающей среды г. Минска до 2010 года

Таким образом, в качестве модели тренда следует принять авторегрессионную модель 18-го порядка. Эту модель можно использовать для прогноза тренда на m шагов вперед.

На рис. 36. приведен прогноз глубиной 2925 сут.

2.5. ПОСТРОЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ПОЛЕЙ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В ПРИЗЕМНЫХ СЛОЯХ АТМОСФЕРЫ ОТ ВЫБРОСОВ ТОЧЕЧНЫХ ИСТОЧНИКОВ. ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ «PDV»

2.5.1. Назначение и области использования программного модуля

Программный модуль предназначен для оформления текста пояснительной записки курсовых и дипломных проектов, связанных с определением предельно допустимого выброса в атмосферу загрязняющих веществ от множества точечных источников с построением карты-схемы концентрационных полей исследуемой территории пу-

тем расчета рассеивания вредных примесей в приземном слое атмосферы по равномерной круговой розе ветров или по заданному направлению преобладающего ветра с заданной скоростью.

2.5.2. Функциональные возможности программного модуля

Программный продукт позволяет осуществлять расчеты концентраций индивидуального загрязняющего вещества (одного наименования) от нескольких источников в двухметровом слое над поверхностью земли. Степень опасности загрязнения атмосферного воздуха характеризуется наибольшим рассчитанным значением концентрации, соответствующим неблагоприятным метеорологическим условиям, в том числе опасной скорости ветра. Для оценки качества атмосферы, загрязненной каждым веществом другой природы, присутствующим на рассматриваемой территории, требуется перезапуск и перенастройка программы на это вещество со сменой положения источников загрязнения и значений фоновой концентрации и норматива предельно допустимой концентрации этого вещества.

2.5.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

<i>Pdv.exe</i>	Главный исполняемый файл программного модуля
<i>Pdv.dat</i>	Файл данных для расчета рабочего примера
<i>Help1.txt</i>	Файл помощи
<i>Help2.txt</i>	Файл помощи
<i>Help3.txt</i>	Файл помощи
<i>Pdv_hlp.txt</i>	Файл помощи

2.5.4. Теоретические основы программного модуля

Расчет выполняется для установления предельно допустимых выбросов (ПДВ) веществ, переносимых воздушными потоками от стационарных источников с учетом различного механизма и математического аппарата описания рассеивания вредных примесей в атмосфере от холодных и нагретых источников (рис. 37).

В состав программного модуля вошли программные решения:

- расчет величины опасной скорости ветра на уровне флюгера, при которой имеет место наибольшее значение приземной концентрации вредных веществ в атмосферном воздухе;
- расчет величины максимальной приземной концентрации вредных веществ от одиночного источника с круглым устьем для выброса холодной и нагретой газовой смеси при неблагоприятных метеорологических условиях;
- расчет расстояния от источника выброса, на котором достигается максимальная приземная концентрация вредного вещества;
- расчет полей концентраций загрязняющих веществ и построение карты-схемы загрязнения территории промплощадки химических и энергетических предприятий.

Расчет распределения наибольших значений приземной концентрации от одиночного точечного источника загрязнения в зависимости от координат X и Y промплощадки при неблагоприятных условиях стратификации атмосферы осуществляется в следующей последовательности:

- определяются значения максимальной концентрации загрязняющего вещества при неблагоприятных условиях стратификации и расстояния от источника, на котором достигается эта концентрация;
- начало системы координат находится в плоскости (X, Y) , горизонтальной подстилающей поверхности, и совпадает с проекцией источника на эту плоскость, ось X ориентирована по направлению ветра, а ось Y направлена перпендикулярно к оси X ;
- определяются безразмерные величины $S1$ и $S2$, описывающие изменение концентрации вдоль и поперек оси факела;

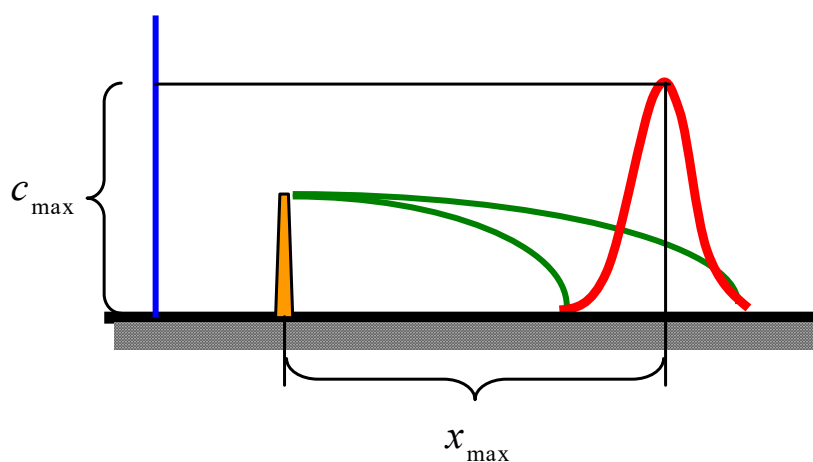


Рис. 37. Схема рассеивания вредных примесей в атмосфере

- клеточное матричное поле, размер которого определяется Пользователем, заполняется рассчитанными значениями концентрации загрязняющего вещества в приземном слое атмосферы от нескольких источников загрязнения;

- средствами компьютерной графики строится карта-схема полей концентрации для ее экологического анализа и принятия обоснованных управленческих решений.

В результате расчета имеется возможность вычислить максимальную приземную концентрацию загрязняющего вещества и расстояние, на котором она достигается.

Если бы из трубы выбрасывалась газоздушная смесь не превышающая ПДК, то надобность в подобных расчетах отпала бы сама собой. Вся методика базируется на учете разбавления выбросов воздушными массами, происходящего за время их полета до земли.

2.5.4.1. Расчет максимальной приземной концентрации загрязняющих веществ. ПДВ является научно-техническим нормативом, устанавливаемым для каждого конкретного источника загрязнения атмосферы при условии, что выбросы вредных веществ от него с учетом их рассеивания и превращений не создадут приземных концентраций, превышающих установленные нормативы качества воздуха. Критериями качества воздуха, используемыми при расчетах, являются предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в атмосферном воздухе населенных мест.

Рассеивание вредных примесей в атмосфере от холодных и нагретых источников происходит по-разному. Мерой нагретости газоздушной смеси служит разность температур выброса при выходе из устья источника и окружающего воздуха:

$$\Delta T = T_{\Gamma} - T_{\text{в}}, \quad (2.149)$$

где T_{Γ} — температура газоздушной смеси, °С ; $T_{\text{в}}$ — температура окружающего воздуха, °С.

Коэффициент, учитывающий скорость перемещения температурного фронта:

$$V_m = \begin{cases} 0,65 \cdot \sqrt[3]{V_1 \cdot \Delta T / H} & \text{при } \Delta T \leq T_a, \\ 1,3 \cdot W_0 \cdot D / H & \text{при } \Delta T > T_a, \end{cases} \quad (2.150)$$

где V_1 — объем газовойоздушного выброса, $\text{м}^3 \cdot \text{с}^{-1}$; H — высота источника выброса, м; D — диаметр устья источника выброса, м; W_0 — скорость выхода смеси из устья, $\text{м} \cdot \text{с}^{-1}$.

$$W_0 = V_1 / (3,14 \cdot D^2). \quad (2.151)$$

Ускорение перемещения фронта охлаждения смеси учитывает параметр f :

$$f = \frac{10^3 \cdot W_0^2 \cdot D}{H^2 \cdot \Delta T}, \quad \frac{\text{м}}{\text{с}^2 \cdot \text{град}}. \quad (2.152)$$

Для выброса холодной и нагретой газовойоздушной смеси безразмерный коэффициент d определяется по формулам

$$d = \begin{cases} 4,95 \cdot V_m \cdot (1 + 0,28 \cdot \sqrt[3]{f}) & \text{при } V_m \leq 2, \Delta T > T_a; \\ 7 \cdot \sqrt{V_m} \cdot (1 + 0,28 \cdot \sqrt[3]{f}) & \text{при } V_m > 2, \Delta T > T_a; \\ 11,4 \cdot V_m & \text{при } V_m \leq 2, \Delta T < T_a; \\ 16,1 \cdot \sqrt{V_m} & \text{при } V_m > 2, \Delta T < T_a. \end{cases} \quad (2.153)$$

Величина опасной скорости ветра U_m на уровне флюгера (обычно 10 м от уровня земли), при которой имеет место наибольшее значение приземной концентрации вредных веществ в атмосферном воздухе C_m вычисляется по соотношениям

$$U_m = \begin{cases} 0,5 & \text{при } V_m \leq 0,5, \Delta T > T_a; \\ V_m & \text{при } 0,5 < V_m \leq 2, \Delta T > T_a; \\ V_m \cdot (1 + \sqrt{f}) & \text{при } V_m > 2, \Delta T > T_a; \\ 2,2 \cdot V_m & \text{при } V_m > 2, \Delta T < T_a. \end{cases} \quad (2.154)$$

Безразмерные коэффициенты m и n , учитывающие условия выхода газовойоздушной смеси из устья источника выброса, находятся по формулам

$$m = \frac{1}{0,67 + 0,1 \cdot \sqrt{f} + 0,34 \cdot \sqrt[3]{f}}, \quad (2.155)$$

$$n = \begin{cases} 3 & \text{при } V_m \leq 0,3; \\ 3 - \sqrt{(V_m - 0,3) \cdot (4,34 - V_m)} & \text{при } 0,3 < V_m \leq 2; \\ 1 & \text{при } V_m > 2. \end{cases} \quad (2.156)$$

Величина максимальной приземной концентрации вредных веществ от одиночного источника с круглым устьем для выброса нагретой газовой смеси при неблагоприятных метеорологических условиях определяется по формуле

$$c_m = \frac{A \cdot M \cdot F \cdot m \cdot n \cdot \eta}{H^2 \cdot \sqrt[3]{V_1 \cdot \Delta T}}, \quad (2.157)$$

где A — характеризует неблагоприятные климатические метеорологические условия (для Беларуси $A = 160$); M — количество вредного вещества, выбрасываемого в атмосферу в единицу времени, г/с; F — безразмерный коэффициент; для газообразных вредных веществ и мелкодисперсных аэрозолей, скорость упорядоченного оседания наиболее крупных фракций которых не превышает 3–5 см/с $F = 1$; для крупнодисперсной пыли и золы при степени очистки $> 90\%$ $F = 2$ при степени очистки 75–90% $F = 2,5$; при степени очистки $< 75\%$ $F = 3$; если выбросы пыли сопровождаются выделением водяного пара и его конденсацией и коагуляцией пылевых частиц $F = 3$; η — безразмерный коэффициент, принимается $\eta = 1$, если в радиусе 50 высот труб H от источника перепад отметок местности не превышает 50 м на 1 км; в других случаях поправка на рельеф устанавливается на основе анализа картографического материала.

Величина максимальной приземной концентрации вредных веществ c_m для выброса холодной газовой смеси из круглого устья одиночного источника при неблагоприятных метеорологических условиях определяется по формуле

$$c_m = \frac{A \cdot M \cdot F \cdot n \cdot \eta}{\sqrt[3]{H^4}} \cdot \frac{D}{8 \cdot \sqrt{V_1}}. \quad (2.158)$$

Все обозначения даны выше.

Расстояние от источника выброса, на котором достигается максимальная приземная концентрация вредного вещества

$$x_m = \begin{cases} d \cdot H & \text{при } F < 2; \\ (5 - F) \cdot d \cdot H & \text{при } F \geq 2. \end{cases} \quad (2.159)$$

2.5.4.2. Расчет предельно допустимого выброса (ПДВ) вредных веществ в атмосферу. Основными критериями качества атмосферного воздуха при установлении ПДВ являются предельно допустимые концентрации (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населенных мест. При этом требуется выполнение соотношения

$$\frac{c}{\text{ПДК}} \leq 1, \quad (2.160)$$

где c — расчетная концентрация примесей в приземном слое атмосферы от всей совокупности источников.

В тех случаях, когда при определении ПДВ для источника необходимо учитывать значение фона CF , т. е. концентрацию примеси в атмосфере от остальных источников, в (2.161) вместо C следует принимать $C + CF$. Величина ПДВ (г/с) для выбросов нагретой газовой смеси из одиночного источника с круглым устьем или группы таких близко расположенных одинаковых источников в случаях, когда фоновая концентрация CF рассматриваемой примеси установлена не зависящей от направления и скорости ветра и постоянной по всей территории промплощадки, определяется по формуле

$$\text{ПДВ} = \frac{(\text{ПДК} - CF) \cdot H^2 \cdot \sqrt[3]{V_1 \cdot \Delta T}}{A \cdot F \cdot m \cdot n \cdot \eta}. \quad (2.161)$$

Величина ПДВ для случая выброса холодной газовой смеси при прочих условиях, одинаковых с рассмотренными выше, определяется по формуле

$$\text{ПДВ} = \frac{(\text{ПДК} - CF) \cdot \sqrt[3]{H^4} \cdot 8 \cdot \sqrt{V_1}}{A \cdot F \cdot n \cdot \eta} \cdot \frac{1}{D}. \quad (2.162)$$

2.5.4.3. Расчет концентраций загрязняющего вещества в любой точке оцениваемой территории. Распределение наибольших значений приземной концентрации от одиночного точечного источника

загрязнения в зависимости от координат X и Y промплощадки при неблагоприятных условиях стратификации атмосферы ведется в следующей последовательности.

В зависимости от соотношения $RU = U/U_m$ (где U — текущая скорость ветра) вычисляются вспомогательные величины r и p :

$$r = \begin{cases} 0,67 \cdot RU + 1,67 \cdot RU^2 - 1,34 \cdot RU^3 & \text{при } RU \leq 1; \\ 3 \cdot RU / (2 \cdot RU^2 - RU + 2) & \text{при } U > 1; \end{cases} \quad (2.163)$$

$$p = \begin{cases} 3 & \text{при } RU < 0,25; \\ 8,43 \cdot (1 - RU)^5 + 1 & \text{при } 0,25 \leq RU \leq 1; \\ 0,32 \cdot RU + 0,68 & \text{при } RU > 1. \end{cases} \quad (2.164)$$

Определяются значения максимальной концентрации c_{mu} загрязняющего вещества при неблагоприятных условиях стратификации и расстояния x_{mu} от источника, на котором достигается эта концентрация

$$\begin{aligned} c_{mu} &= r \cdot c_m; \\ x_{mu} &= p \cdot X_m. \end{aligned} \quad (2.165)$$

При этом полагается, что начало системы координат находится в плоскости (X, Y) горизонтальной подстилающей поверхности и совпадает с проекцией источника на эту плоскость, ось X ориентирована по направлению ветра, а ось Y направлена перпендикулярно к оси X .

Безразмерная величина $S1$, описывающая изменение концентрации вдоль оси факела, рассчитывается в зависимости от соотношения $PX = X/x_{mu}$ по формулам

$$S1 = \begin{cases} 3 \cdot PX^4 - 8 \cdot PX^3 + 6 \cdot PX^2 & \text{при } PX \leq 1; \\ 1,13 / (0,13 \cdot PX^2 + 1) & \text{при } 1 < PX \leq 8; \\ PX / (3,56 \cdot PX^2 - 35,2 \cdot PX + 120) & \text{при } PX > 8, F = 1; \\ 1 / (0,1 \cdot PX^2 + 2,47 \cdot PX - 17,8) & \text{при } PX > 8, F \geq 2. \end{cases} \quad (2.166)$$

$$S2 = \frac{1}{(1 + 8,4 \cdot U \cdot (Y/X)^2) \cdot (1 + 28,2 \cdot U^2 \cdot (Y/X)^4)}. \quad (2.167)$$

Формула для расчета максимальной приземной концентрации в любой точке территориального прямоугольника в зависимости от X и Y выглядит следующим образом:

$$c = c_{mi} \cdot S1 \cdot S2. \quad (2.168)$$

2.5.5. Рабочий интерфейс и структура программного модуля

Поле программного модуля разделено на 4 области (рис. 38):

- панель информационного обеспечения;
- область для характеристик загрязняющего вещества и обследуемой территории;
- область для характеристик источников загрязнения;
- панель инструментов.

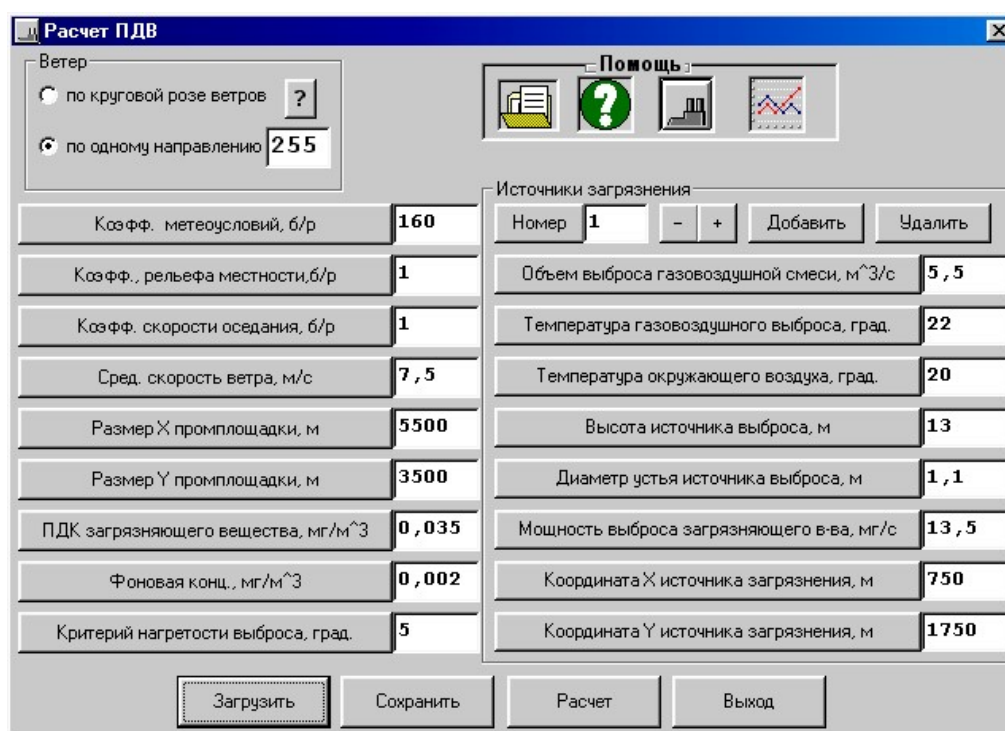


Рис. 38. Рабочий интерфейс программного модуля

2.5.6. Запуск и управление работой программного модуля

Списки параметров выполнены в виде командных кнопок, при нажатии на которые на экран выводится текст помощи, полезный для заполнения окон численными значениями параметров (рис. 39).

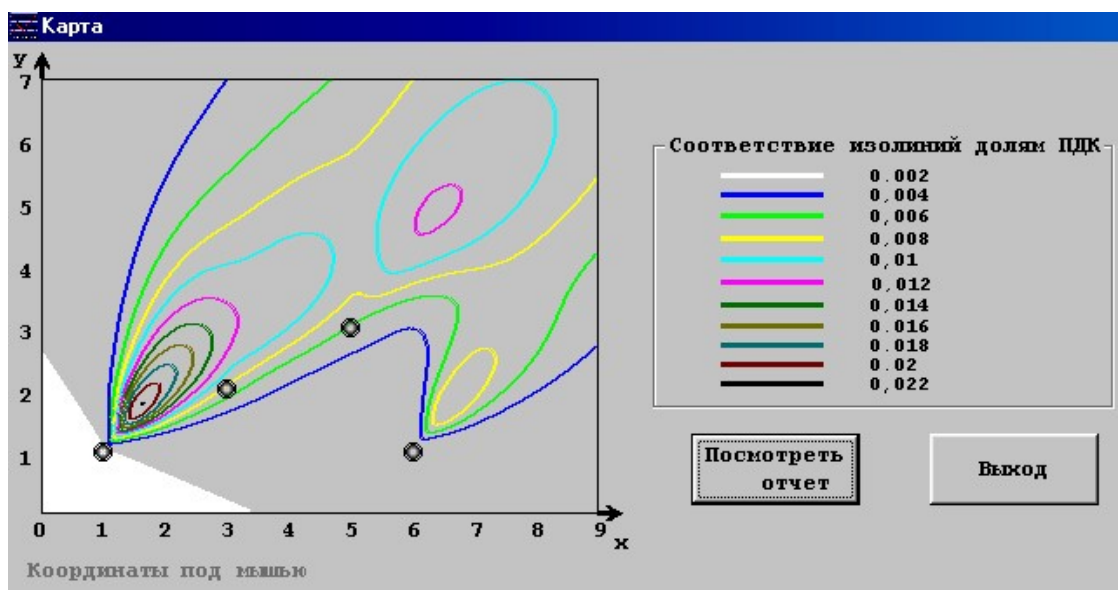


Рис. 39. Карта-схема концентрационных полей загрязняющего вещества

2.6. ИДЕНТИФИКАЦИЯ И РАНЖИРОВАНИЕ ИСТОЧНИКОВ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ВЫДЕЛЕННОЙ ЗОНЫ ТЕРРИТОРИИ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ЕДИНИЧНЫХ И МНОГОКРАТНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ. ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ «ЭКСПЕРТ»

2.6.1. Назначение и области использования программного модуля

Программа предназначена для идентификации и ранжирования источников загрязнения выделенной зоны территории по результатам единичных измерений, определения вероятностной оценки виновности источников загрязнения воздушного бассейна.

2.6.2. Функциональные возможности программного модуля

- Формирование функции полезности.
- Установка приоритетов критериев.
- Расчет априорных вероятностей виновности источников.
- Расчет условных вероятностей источников загрязнений.
- Вычисление штрафных оценок.
- Расчет априорных вероятностей виновности источников.
- Расчет условных вероятностей виновности источников.
- Расчет оценок штрафа для различных комбинаций (сочетаний) труб.

2.6.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

<i>Expert.exe</i>	Главный исполняемый файл программного модуля
<i>Expert.dat</i>	Файл данных для расчета
<i>Expert.hlp</i>	Файл помощи
<i>Expert.cnt</i>	Файл оглавления

2.6.4. Методические основы программного модуля

Пусть на некоторой территории расположены источники промышленного загрязнения I_1, I_2, \dots, I_n , а в выделенной локальной зоне этой территории Z произведены замеры концентрации загрязняющих веществ, представленных вектором $X = (x_1, x_2, \dots, x_m)$. Допускается, что некоторые или даже все результаты измерений окажутся выше ПДК. Требуется установить виновников загрязнения окружающей среды в выделенной зоне и степень их вины.

Задачу будем решать при следующих условиях:

- известны объемы и мощности газо-воздушных выбросов каждого загрязняющего вещества из каждого источника загрязнения;
- имеется модель рассеивания вредных примесей в приземных слоях атмосферы;
- количество измерений должно быть не менее одного, причем чем больше измерений, тем точнее будет осуществлена экологическая инспекция.

В результате будут вычислены некоторые оценки $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$, определяющие систему предпочтений в установлении виновника, при этом $\sum \beta_i = 1$ и если $\beta_p > \beta_s$, то объективно вина источника I_p оценивается выше чем I_s .

2.6.4.1. Описание проблемы и этапов ее решения. Допустим, что на территории города за счет функционирования промышленных предприятий может возникнуть n кластеров (доменов, зон) с различной степенью загрязнения, характеризующихся векторами концентраций $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$, создаваемыми I_1, I_2, \dots, I_n источниками загрязнения. Пусть $P(\omega_i | x)$ – условная вероятность того, что наблюдаемый вектор x относится к домену ω_i . В силу теоремы Байеса получим

$$P(\omega_i | x) = \frac{P(\omega_i) \cdot P(x | \omega_i)}{P(x)}, \quad (2.169)$$

где $P(x)$ — вероятность фактического наблюдения вектора x с данными значениями концентраций загрязняющих веществ; $P(\omega_i)$ — априорная вероятность того, что виновник загрязнения — домен ω_i ; $P(x|\omega_i)$ — вероятность того, что домен ω_i мог привести к появлению вектора x ; ω_i — идентификатор домена.

Рассматриваются следующие домены:

ω_0 — ни один из источников не является виновником;

ω_1 — 1-й источник виновен, остальные — нет;

.....

ω_m — m -й источник виновен, остальные — нет;

ω_{m+1} — 1-й и 2-й источники виновны, остальные нет;

.....

ω_n — все n источников виновны.

Введем штрафную оценку

$$r_j(x) = \sum_{i=0}^n L_{ij} \cdot P(\omega_i|x), \quad (2.170)$$

где L_{ij} — штраф, который следует заплатить за ошибочную классификацию виновника I_i вместо фактического I_j .

С учетом (2.169) перепишем (2.170) в виде

$$r_j = \frac{1}{P(x)} \cdot \sum_{i=1}^n L_{ij} \cdot P(\omega_i) \cdot P(x|\omega_i). \quad (2.171)$$

Теперь, приняв $L_{kk} = 0$ и $L_{ij} = L_{ji} = 1$ (для всех $i, j, i \neq j$), получим окончательно

$$r_j = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n P(\omega_i) \cdot P(x|\omega_i). \quad (2.172)$$

Формула (2.172) служит основой для принятия решений.

Введя соотношение

$$\beta_j = \frac{r_j}{\sum_{i=1}^n r_j}, \quad (2.173)$$

можно утверждать, что наименьшему значению β_i будет соответствовать источник с наименьшим подозрением на виновность.

Применение формулы (2.172) потребует нескольких упрощающих допущений.

Во-первых, будем считать, что при условии соблюдения технологического регламента источником I_i измерение концентрации в зоне Z не может указать на нарушение экологических норм.

Во-вторых, предельные распределения значений концентраций газоздушных выбросов от каждого источника загрязнения должны подчиняться многомерному нормальному закону.

Априорную вероятность $P(\omega_i)$ того, что виновником загрязнения является источник I_i , можно определить на основе теории выбора многокритериальных решений с использованием функции полезности.

Для оценки вероятности $P(x)$ необходимо определить вероятность $P(x | \omega_i)$ фактического наблюдения вектора x , значимо не отличающегося от результатов расчета рассеивания вредных примесей в атмосфере, что повлечет за собой необходимость спланировать специальный вычислительный эксперимент с построением информационной сети через проективные геометрии и поля Галуа.

Таким образом, методика расчетов сводится к определению членов формулы (2.172). Для определения множителей $P(\omega_i)$ используется техника многокритериальной оценки на основе процедуры Саати, где в качестве альтернатив рассматриваются домены ω_i , а критериями являются факторы, обуславливающие априорные значения $P(\omega_i)$. Для оценки значений $P(x|\omega_i)$ проводится серия вычислительных экспериментов, целью которых является получение математического ожидания и среднеквадратического отклонения векторов загрязнений в домене ω_i .

2.6.4.2. Оценка априорной вероятности того, что виновником загрязнения территории в точке отбора пробы может быть рассматриваемое предприятие. Значение искомой вероятности можно получить путем математической обработки экспертных оценок специалистов с привлечением теории многокритериальных решений и функции полезности.

Значения d_{ij} частных функций полезности, присваиваемые экспертами каждому предприятию, могут располагаться в диапазоне $[0, 1]$. Чем d_{ij} ближе к единице, тем, по мнению эксперта, вероятнее соответствие факта нарушения j -го критерия i -му предприятию.

Для выявления возможного предприятия-нарушителя выбраны следующие критерии:

T_1 — степень устарелости технологии и оборудования на i -м предприятии;

T_2 — склонность к экологическим нарушениям в прошлом на i -м предприятии;

T_3 — соответствие характера экологического нарушения типу технологического процесса на i -ом предприятии;

T_4 — недостаточность административных мер для повышения ответственности за экологические нарушения на i -м предприятии.

Для получения обобщенной, комплексной оценки вероятности по p критериям одновременно необходимо определить коэффициенты δ_j , характеризующие значимость, приоритеты (статистические веса) каждого критерия. Для этой цели используется алгоритм Саати, по которому строится матрица приоритетов Δ (табл. 30–31).

Т а б л и ц а 3 0

Матрица приоритетов

	T_1	T_2	T_3	T_4
T_1	1	δ_{12}	δ_{13}	δ_{14}
T_2	δ_{21}	1	δ_{22}	δ_{24}
T_3	δ_{31}	δ_{32}	1	δ_{34}
T_4	δ_{41}	δ_{42}	δ_{43}	1

Для каждой строки находим

$$\Lambda_{st} = \prod_{j=1}^p \delta_{sj} . \quad (2.174)$$

Откуда

$$\mu_s = \frac{\Lambda_s}{\sum_{i=1}^p \Lambda_s} . \quad (2.175)$$

Найденные значения статистических весов считаются согласованными, если выполняется условие Саати:

$$0 \leq \frac{(\lambda_{\max} - p)/(n-1)}{x} \leq 0,2, \quad (2.176)$$

где $\lambda_{\max} = \sum_{j=1}^p \mu_j \cdot \sum_{i=1}^p \delta_{ij} .$

Т а б л и ц а 3 1

Значения параметра x для различных размеров матриц

Размер матрицы	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
x	0	0	0,58	0,90	1,12	1,24	1,32	1,41	1,45	1,49

Обобщенную оценку вероятности виновности источника I_i можно вычислить по формуле

$$q(I_i) = \left(\prod_{j=1}^p d_{ij}^{\mu_j} \right)^{1/\sum_{j=1}^p \mu_j}, \quad (2.177)$$

где p — количество обобщаемых признаков; d_{ij} — частные функции полезности i -го объекта по j -му критерию; μ_j — статистический вес (важность) j -го критерия ($0 \leq \mu_j \leq 1$).

Величины $q(I_i)$ используются следующим образом. Находим, например, $P(\omega_R)$ — оценку априорной вероятности того, что виновны источники 1-й, 2-й, а остальные четыре источника — 3-й, 4-й, 5-й, 6-й — нет: $P(\omega_R) = q(1) \cdot q(2) \cdot (1 - q(3)) \cdot (1 - q(4)) \cdot (1 - q(5)) \cdot (1 - q(6))$.

Отметим, что эта и подобные формулы получаются из общей формулы Бернулли для вероятности сложного события.

2.6.4.3. Определение вероятности того, что фактическое измерение загрязнения территории в контрольной точке значимо не будет отличаться от результатов расчета рассеивания вредных примесей в атмосфере от источника I_i . Каждый источник загрязнения характеризовался по следующим параметрам:

- координата X_i -го источника загрязнения;
- координата Y_i -го источника загрязнения;
- высота i -го источника загрязнения;
- диаметр устья устройства выброса i -го источника загрязнения;
- нижняя граница диапазона значений объема выбрасываемой газовой смеси;
- верхняя граница диапазона значений объема выбрасываемой газовой смеси;
- нижняя граница диапазона значений мощности выброса j -го загрязняющего вещества i -го источника загрязнения;
- верхняя граница диапазона значений мощности выброса j -го загрязняющего вещества i -го источника загрязнения.

Величина максимальной приземной концентрации вредных веществ от одиночного источника с круглым устьем для выброса нагретой газовой смеси при неблагоприятных метеорологических условиях, расстояния, на котором эта концентрация достигается, а также расчеты приземной концентрации в любой точке территории

ального прямоугольника в зависимости от координат X и Y осуществлялись по стандартной лицензионной методике ОНД-86.

2.6.4.4. Оценка вероятности того, что источник I_i мог привести к загрязнению выделенной зоны территории. Предельные распределения значений концентраций загрязняющих веществ от каждого источника загрязнения должны подчиняться многомерному нормальному закону:

$$P(x|\omega_i) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{m}{2}} \cdot |c_i|^{\frac{1}{2}}} \cdot e^{-\frac{1}{2}(x-m_i)^T \cdot c_i^{-1} \cdot (x-m_i)}, \quad (2.178)$$

где m_i — вектор математических ожиданий концентраций загрязняющих веществ от источника I_i ; m — размерность вектора x ; c_i — ковариационная матрица векторов концентраций загрязняющих веществ; c_i^{-1} — обратная матрица c_i ; $|c_i|$ — определитель матрицы c_i .

Для определения элементов ковариационной матрицы используется соотношение

$$c_{kl} = \left(\frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} x_k^j \cdot x_l^j \right) - m_k \cdot m_l. \quad (2.179)$$

2.6.5. Рабочий интерфейс и структура программного модуля

Расчетная часть включает:

- формирование функции полезности;
- установку приоритетов критериев;
- расчет априорных вероятностей виновности источников;
- расчет условных вероятностей источников загрязнений;
- вычисление штрафных оценок.
- Основными разделами являются:
 - расчет априорных вероятностей виновности источников;
 - расчет условных вероятностей виновности источников;
 - расчет оценок штрафа для различных комбинаций (19 сочетаний) труб.

Расчет априорных вероятностей виновности труб реализуется на базе алгоритма Саати.

Расчет условных вероятностей виновности источников производится на основе алгоритма минимизации функции штрафа неправильной классификации на базе байесовской стратегии распознавания.

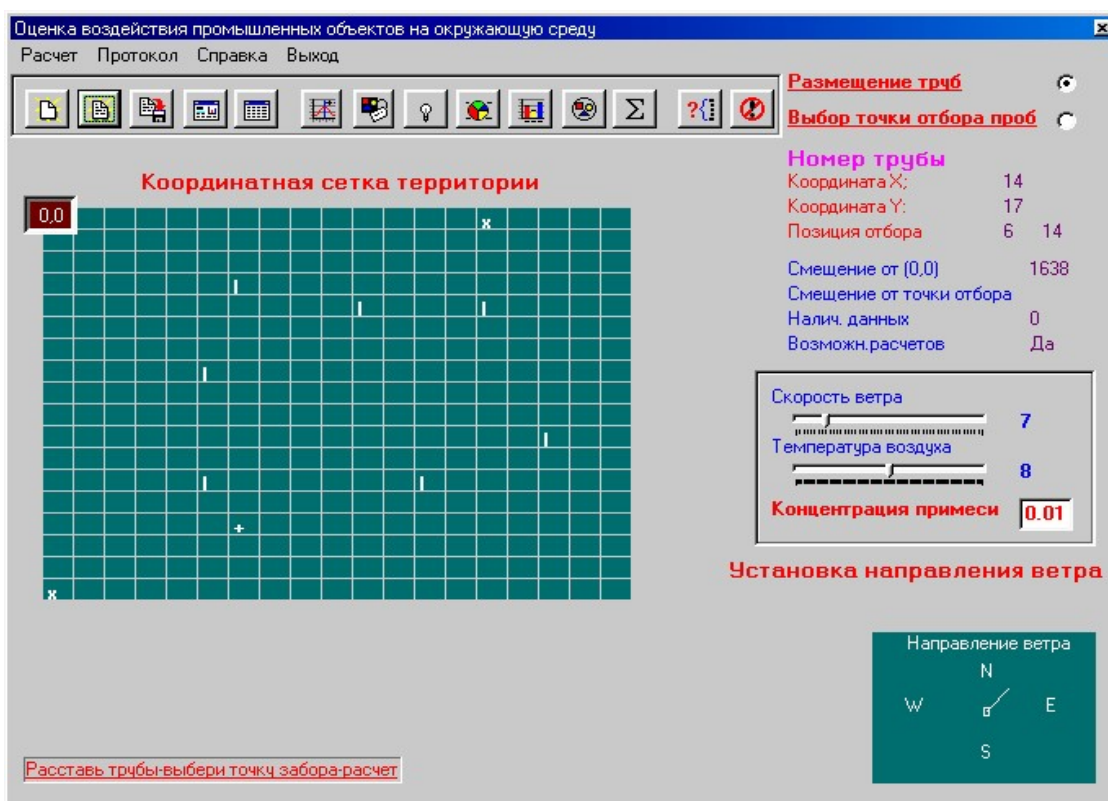


Рис. 40. Рабочий интерфейс программного модуля «Expert»



Рис. 41. Ввод информации об источниках загрязнения

Вычисление итоговых штрафных оценок возможно только после осуществления расчета условных вероятностей виновности источников. Результатом работы программы является таблица или диаграмма степени виновности сочетаний источников загрязнения, спровоцировавших выброс (рис. 40).

2.6.5.1. Запуск и управление работой программного модуля. Запуск программного модуля следует начинать с установки флажка на кнопке «Размещение труб». Тогда можно по на-

жатию ЛКМ в соответствующих ячейках планшета под курсором размещать положение источников загрязнения.

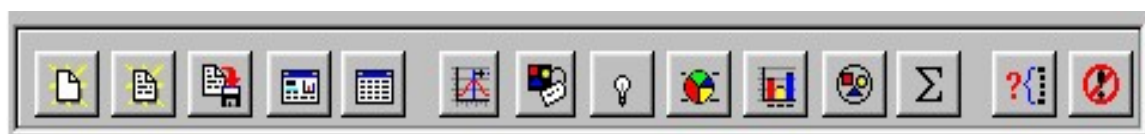
Положение места измерений можно определить, если установить флажок на кнопке «Выбор точки отбора проб».

Двойное нажатие ЛКМ на ячейке, где установлена труба, или кнопки № 4 на панели управления позволит ввести характеристики источника загрязнения.

С помощью компонента *TrackBar* можно задать значения паспортные характеристики трубы и текущие значения измеренных параметров.

С помощью выпадающих списков можно установить нужные экспертные оценки состояния оборудования.

2.6.5.2. Панель управления программного модуля



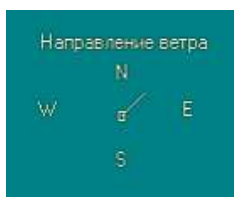
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14

1. Создать.
2. Открыть.
3. Сохранить.
4. Ввод данных по трубам.
5. Характеристика источников загрязнения.
6. Формирование функций полезности.
7. Приоритеты Саати.
8. Выход в главное меню.
9. Результаты в виде круговой диаграммы.
10. Результаты в виде гистограммы.
11. Расчет на основе восьмирумбовой круговой розы ветров.
12. Расчет на основе единичных измерений.
13. Помощь.
14. Выход.

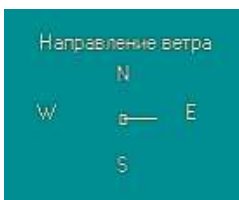
2.6.5.3. Управление направлением ветра



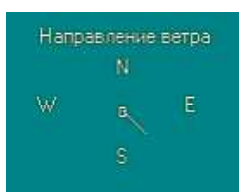
Северный ветер. Азимут 0 градусов



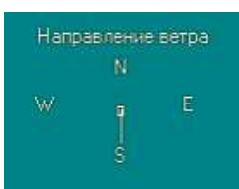
Северо-восточный ветер. Азимут 45 градусов



Восточный ветер. Азимут 90 градусов



Юго-восточный ветер. Азимут 135 градусов



Южный ветер. Азимут 180 градусов

2.6.6. Описание рабочего примера

Т а б л и ц а 3 2

Условия рабочего примера

Оценка воздействия промышленных объектов на окружающую среду														
Расчет Протокол Справка Выход														
	Номер	X-коор	Y-коор	Высота	Диамет	Мощно	Темпер	Скор.в	тех.сос	Экомон	Санкци	Соотве	Вероят	Объем
тр#1	6	6	3	1327	87	66	87	126	Износ[2 notavail	Не ред	[40-60%	0.56	299	
тр#2	7	10	4	1633	77	77	97	126	Износ[2 notavail	Не ред	[60-80%	0.76	235	
тр#3	8	16	10	1735	107	82	51	150	Износ[2 notavail	Единиц	[60-80%	0.72	612	
тр#4	9	5	7	2444	206	144	150	104	Износ[2 notavail	Единиц	[20-40%	0.30	1389	
тр#5	10	5	12	1222	167	133	56	82	Износ[2 notavail	Единиц	[40-60%	0.41	722	
тр#6	11	12	12	5444	128	94	133	108	Износ[2 notavail	Не ред	[40-60%	0.56	556	
тр#7	12	14	4	2889	150	83	83	138	Износ[2 notavail	Единиц	[20-40%	0.34	972	
тр#8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
тр#9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
тр#10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
тр#11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
тр#12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
тр#13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
тр#14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

Результаты, полученные по этим условиям:



Рис. 42. Круговая диаграмма совокупной виновности источников загрязнения

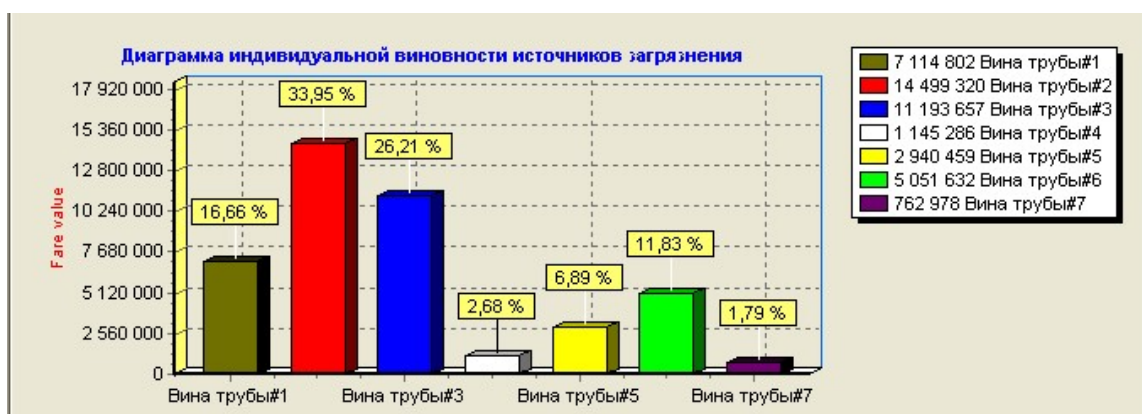


Рис. 43. Линейная гистограмма индивидуальной виновности источников загрязнения

Следует обратить внимание пользователей на то, что переход от круговой диаграммы к гистограмме и наоборот можно осуществлять с помощью ПКМ (рис. 42–43).

На круговой диаграмме запись 0100110 означает, что вычисленная совокупная доля загрязнения образуется второй, пятой и шестой трубами; остальные трубы в загрязнении не участвуют.

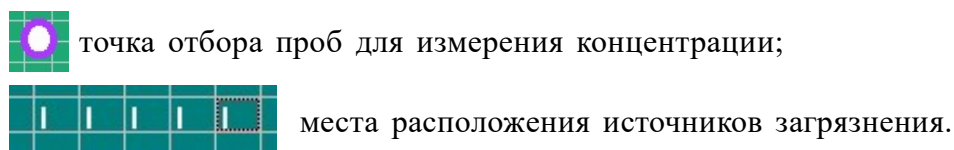
2.6.7. Рекомендации по использованию программного модуля

Для работы с программной обеспечивается возможность создания сценария путем размещения на планшете мест расположения труб и ввода их рабочих характеристик, а затем осуществляются

расчеты, по результатам которых выдается диаграмма вероятных комбинаций виновников и гистограмма индивидуальной вины каждого источника (рис. 44).



Рис. 44. Пример формализации условий проведения экспертизы:



Текущий вариант расположения на планшете источников загрязнения относительно точки отбора проб при северо-восточном ветре (азимут 30–50 градусов) должен позволить выявить виновника или группу виновников, поскольку все выбросы при таком ветровом режиме так или иначе окажутся в районе измерения концентрации. Если направление ветра в момент оценки качества воздуха в избранной точке будет зафиксировано в пределах 100–250 градусов, то виновников среди рассматриваемых источников может не оказаться.

При единичном измерении концентрации в избранной точке и в случаях направления ветра в пределах 100–250 градусов виновников среди рассматриваемых источников может не оказаться. Однако, если измерения проводить длительно при разных ветровых режимах, то процесс идентификации и ранжирования источников загрязнения должен осуществляться по условиям круговой розы ветров, поэтому вероятность выявления виновников загрязнения резко возрастает.

3. ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

3.1. ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА С КАЧЕСТВЕННЫМИ (ДИСТРИБУТИВНЫМИ) ФАКТОРАМИ

3.1.1. Неполноблочные планы для учета влияния свойств различных видов сырья, химикатов, типа оборудования

На практике часто возникает необходимость в эксперименте в условиях, когда все или некоторые из рассматриваемых факторов являются качественными (различные виды сырья, типы реагентов и т. д.). В таком случае целесообразно применять неполноблочные планы (блок-схемы). Аналогичные планы используют и при проведении эксперимента в условиях неоднородностей (различие в партиях сырья, исполнителях, машинах, приборах и т. д.), т. е. при отсутствии возможности реализовать все вероятные варианты. Блок-схемы позволяют оценить влияние неоднородностей и снизить ошибку эксперимента, росту которой эти неоднородности способствуют. Наконец, блок-схемы полезны и при экспертных оценках (проверка значимости различий сортов и т. п.).

Блоками называются различные источники неоднородности. В задаче, например, может потребоваться учесть пять блоков, если имеются пять различных партий сырья. Блоки могут содержать разное число элементов, т. е. иметь различные размеры. Так, если для каждой из пяти партий сырья применять четыре различных способа переработки, то блоки содержат по четыре элемента.

План называется полноблочным, если в процессе эксперимента в каждом блоке изучают все элементы. Примером полноблочного плана является факторный эксперимент. Когда в блоках изучают лишь

некоторые их элементы, имеют дело с неполноблочным планом, который экономичнее, а поэтому заслуживает внимания.

При размещении элементов в неполноблочных планах учитывают правила, определяющие частоту появления элементов и их пар. В связи с этим различают: число блоков b , число элементов v , число единиц в блоке q , число повторений в строке r , число повторений каждой пары элементов λ и общее число опытов N . Ни один из блоков неполноблочного плана не содержит всех элементов.

План, в котором каждый элемент и каждая пара элементов принадлежат к одному и тому же числу блоков, называется сбалансированным планом, или ВІВ-схемой (уравновешенной неполной схемой). Такие планы представляют интерес, поскольку характерные для них свойства уравновешенности позволяют применять одну и ту же стандартную ошибку при сравнении каждой пары элементов. Неполноблочность дает возможность уменьшать число опытов (благодаря уменьшению размеров блока).

Таким образом, в ВІВ-схеме каждый блок B_i содержит одинаковое число элементов q , каждый элемент a_i принадлежит одному и тому же числу блоков (r) и для каждой пары элементов a_i и a_j число блоков, содержащих эту пару, равно λ . При этом обеспечиваются следующие соотношения:

$$N - bq = vr; \quad (3.1)$$

$$r(q - 1) = \lambda(v - 1). \quad (3.2)$$

Неполноблочные планы называются симметричными, если $b = v$ и $r = q$. Подобные планы носят название SBІВ-схемы.

При обработке экспериментальных данных, полученных с использованием неполноблочных сбалансированных планов, применяют дисперсионный анализ.

Статистический анализ при рассмотрении ВІВ-схем может быть внутри- и междублочным.

3.1.2. Пример неполноблочной схемы при экспертной оценке качества продукции

Десять экспертов оценивали качество шести видов продукции по 14-балльной системе, причем каждый эксперт имел возможность

оценить качество трех видов продукции, а каждый вид продукции оценивали пять экспертов.

В случае применения блок-схем в экспертных оценках рекомендуется обеспечить выполнение следующих требований: каждый эксперт оценивает одно и то же число объектов; каждый объект проверяется одинаковым числом экспертов; каждую пару объектов один эксперт должен сравнивать одно и то же число раз. Все эти требования выполняются при использовании сбалансированного неполноблочного плана. В примере использовалась ВІВ-схема со следующими параметрами: $b = 10$; $v = 6$; $q = 3$; $r = 5$; $\lambda = 2$; $N = vr = 30$.

Целью экспертной оценки (по баллам) являлось определение вида продукции лучшего качества и установление значимых различий между разными видами продукции. Неполноблочный план и результаты экспертной оценки y_{ij} помещены в табл. 33.

Т а б л и ц а 33

Сбалансированный неполноблочный план

Элементы (виды продукции)	Блоки (эксперты)										Итоги (T_i)
	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	B_6	B_7	B_8	B_9	B_{10}	
a_1	2	5	4	7	6	–	–	–	–	–	24
a_2	3	4	–	–	–	3	4	7	–	–	21
a_3	–	–	8	9	–	6	7	–	9	–	39
a_4	–	–	8	–	9	5	–	1	–	9	38
a_5	8	–	–	–	13	–	10	–	12	14	57
a_6	–	10	–	12	–	–	–	11	11	13	57
Итоги (B_j)	13	19	20	28	28	14	21	25	32	36	$G = 236$
B_j^2	169	361	400	784	784	196	441	625	1024	1296	6080

После подсчета B_j (по блокам) и T_i (по элементам) проводили вычисления, результаты которых приведены в табл. 34.

Т а б л и ц а 34

Результаты вычислений

a_i	T_i	$B_{(i)}$	Q_i	ω_i	T_i''	$T_{i\text{cp}}$	T_i^2	Q_i^2
a_1	24	108	–36	4	24,3	4,86	576	1296
a_2	21	92	–29	75	26,8	5,36	441	841
a_3	39	115	2	14	40,1	8,02	1521	4
a_4	38	123	–9	–29	35,7	7,14	1444	81
a_5	57	130	41	–7	56,5	11,30	3249	1681
a_6	57	140	31	–57	52,6	10,52	3249	961
Сумма	236	708	0	0	236	47,20	10480	4864

Величина $B_{(i)}$ — сумма итогов по тем блокам, в которых появляется элемент a_i ; в нашем случае это сумма пяти итогов по блокам ($r = 5$). В частности, для элемента a_i

$$B_{(i)} = \sum_1^5 B_j = 13 + 19 + 20 + 28 + 28 = 108. \quad (3.3)$$

Значения $B_{(i)}$ учитывали при расчете величин Q_i (внутриблоковых эффектов элементов), с помощью которых оценивается внутренняя информация по элементам:

$$Q_i = q \cdot T_i - B_{(i)} = 3 \cdot B_{(i)}. \quad (3.4)$$

Сумма величин Q_i в матрице должна быть равна нулю.

Когда определены T_i , $B_{(i)}$ и Q_i приступают к расчету, необходимому для оценки скорректированных итогов по элементам с учетом межблоковой и внутриблоковой информации:

$$T_i'' = T_i + \tilde{\mu} \cdot \omega_i, \quad (3.5)$$

где ω_i — величина, которая обеспечивает учет блоковых эффектов; $\tilde{\mu}$ — весовой коэффициент.

Значения ω_i и $\tilde{\mu}$ находят по следующим формулам (для плана без повторных опытов):

$$\omega_i = (v - q) \cdot T_i - (v - 1) \cdot B_{(i)} + (q - 1) \cdot G; \quad (3.6)$$

$$\tilde{\mu} = \frac{(b - 1) \cdot (E_b - E_e)}{v \cdot (q - 1) \cdot (b - 1) \cdot E_b + (v - q) \cdot (b - v) \cdot E_e}, \quad (3.7)$$

где $G = \sum_1^v T_i$; E_b — средний квадрат для блоков, скорректированных от эффектов элементов; E_e — внутриблоковая ошибка.

Если E_b меньше E_e , то принимают $\tilde{\mu} = 0$. В нашем случае $G = 236$. С учетом этого

$$\omega_i = 3 \cdot T_i - 5 \cdot B_{(i)} + 2 \cdot G. \quad (3.8)$$

При вычислениях учитывается величина относительной внутриблоковой информации (фактор эффективности), определяемая из соотношения

$$E = \frac{v \cdot (q - 1)}{q \cdot (v - 1)} \quad (3.9)$$

В нашем случае $E = 0,80$.

Тот же метод, который рассмотрен выше для случая экспертной оценки качества продукции, может быть использован, если, например, ведется выбор материала наилучшего вида (с учетом устойчивости в различных средах). При этом число блоков эквивалентно числу сред (воздух, вода, кислота, щелочи и т. д.), а число блоков — количеству сравниваемых материалов. После сравнения элементов определяется материал, который наиболее устойчив в иных средах. Сравнением эффектов по блокам можно оценить агрессивность рассматриваемых сред в отношении материалов.

3.1.3. Греко-латинские квадраты, кубы, параллелепипеды

Латинским квадратом называется план в виде квадратной таблицы из n элементов, в которой каждый элемент встречается один раз в строке и один раз в столбце. План имеет n^2 ячеек, в которые помещены v элементов (числа или буквы).

Два латинских квадрата являются ортогональными, если при их наложении одного на другой каждый элемент одного квадрата встречается с каждым элементом другого квадрата одинаковое число раз.

Иногда применение латинских квадратов затруднено тем, что все факторы должны иметь одинаковое число уровней. Поэтому целесообразнее использовать латинские прямоугольники (квадраты Юдена), которые строят путем вычеркивания из латинских квадратов определенного числа столбцов. Квадраты Юдена — неполноблочные планы, сбалансированные по отношению к столбцам и строкам; они характеризуются свойствами ВІВ-схем.

Е $\delta \epsilon \zeta \eta \theta \iota \kappa \lambda \mu \nu \xi \omicron \pi \rho \sigma \tau \upsilon \phi \chi \psi \omega$ 4×4 имеют, например, следующий вид (рис. 45):

<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>
<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>A</i>
<i>C</i>	<i>D</i>	<i>A</i>	<i>B</i>
<i>D</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>

δ	α	β	γ
γ	δ	α	β
β	γ	δ	α
α	β	γ	δ

Рис. 45. Ортогональные латинские квадраты 4×4

Из ортогональных латинских квадратов можно получить ортогональный греко-латинский квадрат (рис. 46):

<i>Aγ</i>	<i>Bδ</i>	<i>Cα</i>	<i>Dβ</i>
<i>Cδ</i>	<i>Dγ</i>	<i>Aβ</i>	<i>Bα</i>
<i>Bβ</i>	<i>Aα</i>	<i>Dδ</i>	<i>Cγ</i>
<i>Dα</i>	<i>Cβ</i>	<i>Bγ</i>	<i>Aδ</i>

Рис. 46. Ортогональный греко-латинский квадрат 4×4

3.1.4. Ортогональные греко-латино-арабские гиперкубы, совмещенные с факторными шкалами

Множество целых чисел $0, 1, \dots, s - 1$, расположенных в виде кубической решетки ($s \times s \times s$), называется кубом размера s . Куб называется латинским первого порядка, если каждое целое встречается ровно s раз в каждой плоскости, параллельной некоторой грани куба. Два куба называются ортогональными, если при наложении их друг на друга каждая упорядоченная пара целых чисел встречается ровно s раз.

Если множество целых чисел одного из ортогональных латинских кубов заменить латинскими буквами, множество целых чисел другого латинского куба — греческими, то такая пара ортогональных латинских кубов называется греко-латинским кубом (рис. 47). Система более чем из двух попарно ортогональных латинских кубов называется греко-латинским гиперкубом.

3.1.5. Пример плана эксперимента для разработки режима упрочнения листовых волокнистых материалов

В качестве примера формализации задачи планирования эксперимента можно привести разработку рецептуры смеси для.

Первый фактор (латинская буква) — природа полимерной упрочняющей добавки.

- A (0) — бутадиенстирол;
- B (1) — акрилонитрил;
- C (2) — изопрен;
- D (3) — винилиденхлорид.

Второй фактор (греческая буква) — природа коллоидно-химического регулятора.

$\alpha (0)$ — резинат натрия;

$\beta (1)$ — оксибензилглюкопираноза;

$\gamma (2)$ — оксиэтилированный алкилфенол;

$\delta (3)$ — фосфат аммония.

Третий фактор (арабская буква) — природа перезаряжающего агента.

ك (0) — кристаллогидрат сульфата алюминия;

ع (1) — четвертичное аммониевое основание;

خ (2) — полиамино-эпихдоргидринный полиэлектролит;

ك (3) — меламиноформальдегидный комплекс.

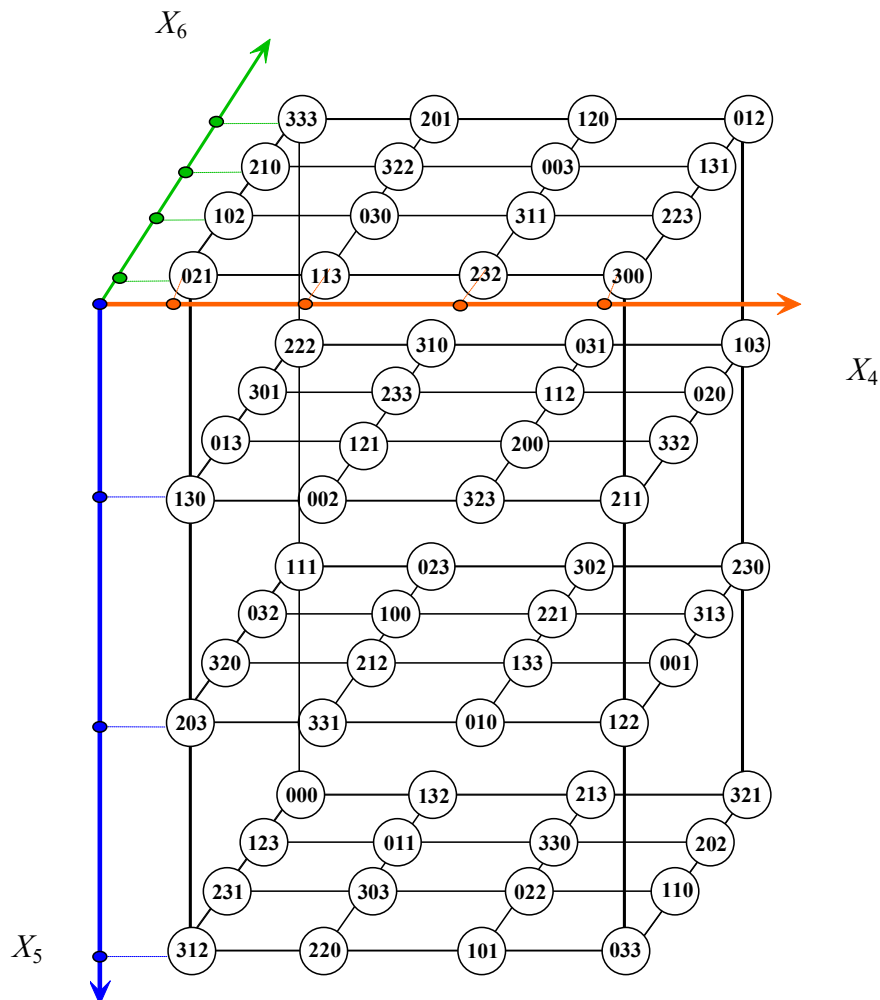


Рис. 47. Ортогональный греко-латино-арабский гиперкуб, совмещенный с факторными шкалами: X_4 — расход полимерной упрочняющей добавки;

X_5 — расход коллоидно-химического регулятора;

X_6 — расход перезаряжающего агента

Четвертый фактор (абсцисса) — удельный расход полимерной упрочняющей добавки.

Пятый фактор (ордината) — удельный расход коллоидно-химического регулятора.

Шестой фактор (аппликата) — *удельный расход перезаряжающего агента.*

3.2. ФАКТОРНОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

3.2.1. Нормирование переменных, ПФЭ и дробные реплики

При планировании эксперимента обычно исходят из того, что неизвестная исследователю функция отклика аппроксимируется полиномом той или иной степени, коэффициенты которого оценивают по результатам эксперимента. На первой стадии работы рассматривается возможность описать функционирование объекта линейной моделью.

При построении линейной модели находят численные значения линейных коэффициентов уравнения

$$\hat{y} = b_0 + \sum_1^k b_i \cdot x_i, \quad (3.10)$$

где \hat{y} — значения критерия; b_i — линейные коэффициенты.

Точность и надежность оценок коэффициентов полиномиальной модели зависят от свойств применяемого плана эксперимента, поэтому правильный выбор плана имеет большое значение.

Выбор плана связан с определением числа экспериментальных точек и такого их расположения в факторном пространстве, которое позволяет при минимальном числе опытов получить необходимую для принятия решения информацию. При выборе плана составляют матрицу планирования — стандартного вида таблицу, где указываются условия проведения всех опытов, образующих выбранный план. Обычно в матрице планирования строки соответствуют различным опытам, а столбцы — отдельным факторам.

Построение линейных моделей связано с проведением полного факторного эксперимента (ПФЭ) или его части — дробного факторного эксперимента.

ПФЭ — это эксперимент, в котором реализуются все возможные комбинации рассматриваемых уровней варьирования факторов, а результаты оцениваются с помощью статистического анализа. Число опытов в полном факторном эксперименте определяют из соотношения

$$N = p^k, \quad (3.11)$$

где N — число опытов; p — число уровней варьирования; k — число факторов.

Факторы варьируют на двух уровнях. Именно поэтому планирование эксперимента и связано с использованием факторных планов типа 2^k .

При сравнительно большом числе факторов, когда полный факторный эксперимент требует значительного числа опытов, используют дробный факторный эксперимент (ДФЭ). Матрицу такого эксперимента называют дробной репликой.

При составлении матрицы ПФЭ или дробных реплик учитывают кодированные значения факторов.

В процессе кодирования факторов осуществляется линейное преобразование координат факторного пространства с переносом начала координат в нулевую точку и выбором масштабов по осям в единицах интервалов варьирования факторов.

Используют отношение

$$x_i = \frac{c_i - c_{oi}}{\lambda}, \quad (3.12)$$

где x_i — кодированное значение фактора (безразмерная величина); c_0 и c_{oi} — натуральные значения фактора (соответственно его текущее значение и значение на нулевом уровне); 1 — натуральное значение интервала варьирования фактора.

В матрице планирования при варьировании факторов на двух уровнях ($+1$; -1) указывают только знаки ($+$ или $-$).

Дробные реплики различают регулярные и нерегулярные. Регулярная дробная реплика образуется из матрицы ПФЭ делением ее на число частей, кратное 2 в какой-либо степени (на 2, 4, 8, 16 и т. д.).

В матрице ПФЭ в первом столбце указывают кодированное значение псевдопеременной ($x_0 = +1$), ее «оценка» дает величину сво-

бодного члена (b_0) в уравнении регрессии. Число столбцов матрицы равно числу учитываемых факторов. Иногда добавляют столбцы, соответствующие взаимодействиям факторов

При любом числе факторов для построения матрицы ПФЭ нужно повторить матрицу планирования для случая ($k-1$); сначала при значениях нового (k -го) фактора на верхнем уровне, а затем на нижнем уровне.

Т а б л и ц а 3 5

Матрицы планирования полного факторного эксперимента

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4
1	+	+	+	+	+
2	+	-	+	+	+
3	+	+	-	+	+
4	+	-	-	+	+
5	+	+	+	-	+
6	+	-	+	-	+
7	+	+	-	-	+
8	+	-	-	-	+
9	+	+	+	+	-
10	+	-	+	+	-
11	+	+	-	+	-
12	+	-	-	+	-
13	+	+	+	-	-
14	+	-	+	-	-
15	+	+	-	-	-
16	+	-	-	-	-

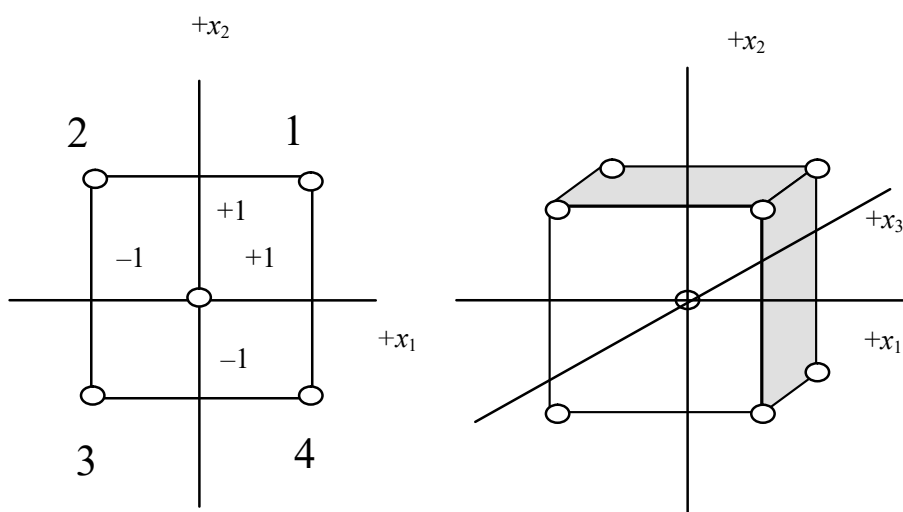


Рис. 48. Расположение точек в факторном пространстве для ПФЭ при $k = 2$ и $k = 3$

Расположение экспериментальных точек в факторном пространстве для ПФЭ при $k=2$ и $k=3$ показано на рис. 48. Как видим, точки плана 2^2 задаются координатами вершин квадрата (ограничивающего область эксперимента), а точки плана 2^3 — координатами вершин куба. По аналогичному принципу располагаются экспериментальные точки при $k > 3$.

По результатам ПФЭ находят значения коэффициентов уравнения регрессии, в том числе свободного члена и коэффициентов, характеризующих линейные эффекты и эффекты взаимодействия факторов всех порядков. Для случая $k=3$, например, коэффициенты уравнения определяются

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3, \quad (3.13)$$

где b_{123} — коэффициент, характеризующий тройное взаимодействие факторов; b_{12} , b_{13} , b_{23} — коэффициенты двойного (парного) взаимодействия; b_0 — свободный член; b_1 , b_2 , b_3 — линейные коэффициенты.

В некоторых публикациях указывалось, что по величине линейных коэффициентов можно судить о степени влияния отдельных факторов на величину зависимой переменной. Чем больше величина b_i для соответствующего фактора, тем сильнее его влияние. Важно учитывать также знак этих коэффициентов: если коэффициент имеет положительный знак, то увеличение соответствующего фактора должно способствовать росту значения выходной величины; наоборот, при отрицательном знаке линейного коэффициента увеличение значения соответствующего фактора будет снижать величину критерия оптимизации.

Это утверждение имеет силу в тех случаях, когда в уравнении присутствуют только линейные кодированные независимые переменные. Во всех остальных случаях его использование может привести к принятию ошибочных решений.

На практике часто встречаются ситуации, когда отдельные эффекты взаимодействия не являются существенными, особенно эффекты тройного взаимодействия и выше. Это принимается во внимание при построении дробных реплик, так как столбец плана, соответствующий незначимому взаимодействию, может быть использован для нового фактора. В связи с этим при построении дробных реплик строки матрицы ПФЭ не распределяют на группы механически. Нельзя, например, при построении полуреплики просто разделить

план ПФЭ на две любые равные части. Дробные реплики находят с учетом насыщенности планов.

Насыщенной называется реплика, получаемая при замене всех эффектов взаимодействия факторов линейными эффектами новых факторов. Тогда эксперимент содержит минимальное число опытов, но затрудняется анализ экспериментальных данных.

Для сравнительной оценки дробных реплик используют специальный критерий — разрешающую способность. Под разрешающей способностью понимается число линейных эффектов, которые не смешаны в данном плане. Смешивание ведет к корреляции отдельных столбцов плана путем замены части эффектов взаимодействия линейными эффектами.

Прямая оценка разрешающей способности дробных реплик затруднена в случае многофакторных зависимостей, так как тогда требуется перебор большого числа эффектов. Поэтому дробные реплики оценивают косвенно с помощью генерирующих соотношений и определяющих контрастов.

Генерирующим соотношением называется выражение, которое показывает, с каким из эффектов смешан данный эффект. Например, при замене тройного взаимодействия $x_1x_2x_3$ фактором x_4 генерирующее соотношение имеет вид $x_1x_2x_3 = x_4$. Увеличение числа символов в генерирующем соотношении соответствует повышению разрешающей способности дробной реплики.

Определяющий контраст получается умножением генерирующего соотношения на соответствующий фактор. Для случая, когда $x_1x_2x_3 = x_4$, определяющий контраст имеет вид $I = x_1x_2x_3x_4$.

После построения матрицу планирования обычно преобразуют в рабочую матрицу, заменяя кодированные значения переменных соответствующими именованными величинами. Затем с помощью рабочей матрицы осуществляется эксперимент. Получив экспериментальные данные, вновь возвращаются к матрице планирования, преобразуя ее в расчетную. Далее определяют значения коэффициентов регрессии.

Линейные коэффициенты регрессии рассчитывают по формуле

$$b_i = \frac{\sum_1^N x_{iu} \cdot y_u}{\sum_1^N x_{iu}^2} = \frac{\sum_1^N x_{iu} \cdot y_u}{N}, \quad (3.14)$$

где x_{iu} — значение фактора x_i в u -м опыте; y_u — значение параметра оптимизации в том же опыте; N — число опытов в матрице.

При определении свободного члена в уравнении регрессии (b_0) берут среднее арифметическое всех значений параметра оптимизации в матрице:

$$b_0 = \frac{\sum_1^N y_u}{N}. \quad (3.15)$$

Коэффициенты регрессии, характеризующие парные взаимодействия факторов, находят по формуле

$$b_{ij} = \frac{\sum_1^N x_{iu} \cdot x_{ju} \cdot y_u}{\sum_1^N x_{iu}^2} = \frac{\sum_1^N x_{iu} \cdot x_{ju} \cdot y_u}{N}. \quad (3.16)$$

После определения коэффициентов линейной модели оценивают их значимость и проверяют адекватность модели.

Разделение эксперимента на блоки практикуют в тех случаях, когда необходимо учесть влияние временного дрейфа оцениваемого параметра (его нестационарного изменения под влиянием неуправляемых факторов). Под дрейфом понимают зависимость параметра от времени при постоянных значениях управляемых факторов.

3.2.2. Ортогональное планирование второго порядка

В первых работах, связанных с применением планирования эксперимента при построении моделей второго порядка, использовалось ортогональное планирование.

Соотношение

$$\sum_{u=1}^N x_{iu} \cdot x_{ju} = 0 \quad \text{при } i \neq j; i, j = 0, 1, \dots, k, \quad (3.17)$$

соответствующее условию ортогональности плана, не соблюдается, если использовать обычный план второго порядка в предположении, что функция отклика должна быть представлена полиномом с квадратичными членами.

Полную ортогональность плана второго порядка можно обеспечить, если преобразовать переменные и специальным образом выделить координаты «звездных» точек:

$$(x^*_{iu})^2 = x_{iu}^2 - \frac{\sum_1^N x_{iu}}{N} = x_{iu}^2 - \bar{x}_{iu}^2. \quad (3.18)$$

Тогда соблюдается условие

$$\sum_1^N x_0 \cdot x^*_{iu} = 0. \quad (3.19)$$

Матрицу планирования при различном числе факторов (k) получают достраиванием соответствующего плана ПФЭ или полуреплики (если $k \leq 5$) с введением нулевой точки и необходимого числа «звездных» точек. Общее число опытов и величина «звездного» плеча при различных k указаны в табл. 36.

Т а б л и ц а 36

Общее число опытов и величина «звездного плеча»

Число точек «ядра» (n_α)	Число «звездных» точек (n_α)	Число нулевых точек (n_0)	Величины плеча «звездных» точек (α)	Общее число опытов (N)
4	4	1	1,000	9
8	6	1	1,215	15
16	8	1	1,414	25
16	10	1	1,414	27
32	12	1	—	45

В связи с принятыми преобразованиями величину коэффициента b_0 в уравнении регрессии определяют по формуле

$$b_0 = b'_0 - b_{11} \cdot \bar{x}_1^2 - b_{22} \cdot x_2^2 - \dots - b_{kk} \cdot x_k^2 \quad (3.20)$$

и оценивают с дисперсией, равной

$$s_{\{b_0\}}^2 = s_{\{b'_0\}}^2 + \bar{x}_1^2 \cdot s_{\{b_{11}\}}^2 + \bar{x}_2^2 \cdot s_{\{b_{22}\}}^2 + \dots + \bar{x}_k^2 \cdot s_{\{b_{kk}\}}^2. \quad (3.21)$$

Остальные коэффициенты находят с помощью обычных формул для ортогонального планирования.

3.2.3. Ротатабельное планирование второго порядка

Ротатабельное планирование второго порядка используют на практике в тех случаях, когда линейного приближения недостаточно для математического описания объекта исследования с нужной точностью, поэтому возникает необходимость в построении моделей в виде полиномов второй степени. При описании поверхности отклика уравнением второго порядка нельзя ограничиться варьированием факторов только на двух уровнях, так как это не позволяет получить потребную информацию об объекте исследований. В связи с этим переходят к планированию, которое связано с варьированием факторов на трех или пяти уровнях и является рациональным с учетом общепринятых критериев оптимальности планов.

Зачастую полезными и весьма эффективными являются ротатабельные планы второго порядка (планы Бокса). Подобные планы заслуживают особого внимания при $k = 3$ и $k = 5$ в условиях композиционного планирования.

При ротатабельном планировании второго порядка достраивают план ПФЭ или его регулярную дробную реплику (обычно полуреплику) до плана второго порядка добавлением к «ядру» определенного количества «звездных» и нулевых точек. Матрицу ПФЭ рекомендуется использовать в качестве «ядра» ротатабельного плана второго порядка при $k \leq 5$, а полуреплику при $k \geq 3,2$. «Звездные» точки строят на осях координат, определяя величину «звездного» плеча a (расстояния от нулевой точки до «звездной» по оси координат); при этом принимается во внимание условие ротатабельности (для «ядра» в виде плана ПФЭ):

$$\alpha = 2^{k/4}. \quad (3.22)$$

Если «ядром» ротатабельного плана является дробная реплика типа 2^{k-p} , то учитывают другое соотношение:

$$\alpha = 2^{(k-p)/4}. \quad (3.23)$$

Вообще условия ротатабельности определяются следующими соотношениями:

$$\sum_1^N x_{iu}^2 = N \cdot \lambda_2 \quad \text{при } i = 1, 2, 3, \dots, k; \quad (3.24)$$

$$\sum_1^N x_{iu}^4 = 3 \cdot \sum_1^N x_{iu}^2 \cdot x_{ju}^2 = 3 \cdot N \cdot \lambda_4 \quad \text{при } i = 1, 2, 3, \dots, k, \quad (3.25)$$

где λ_2, λ_4 — константы. При $k = 2$ (или 4) эти константы, например, связаны соотношением

$$\lambda_4^* = \frac{\lambda_4}{\lambda_2^2} = \frac{k \cdot C}{k + 2}, \quad (3.26)$$

где C определяется по формуле

$$C = \frac{N}{N - n_0}. \quad (3.27)$$

Условия (3.24) и (3.25) обеспечивают инвариантность плана к вращению координат.

При выборе числа нулевых точек (точек в центре эксперимента) учитывают, что они необходимы для проверки адекватности модели, оценки ошибки эксперимента и создания условий, при которых обеспечивается равномерное планирование.

Все данные, нужные для построения матриц ротатабельного планирования при $k \leq 7$, приведены в табл. 35. Такое планирование является центральным, поскольку все экспериментальные точки располагаются симметрично относительно центра эксперимента (рис. 49).

Общее число опытов N при ротатабельном планировании определяется из соотношения

$$N = 2^k + 2k + n_0 = n_\alpha + n_\alpha + n_0. \quad (3.28)$$

Матрицы ротатабельных планов второго порядка показаны в табл. 37.

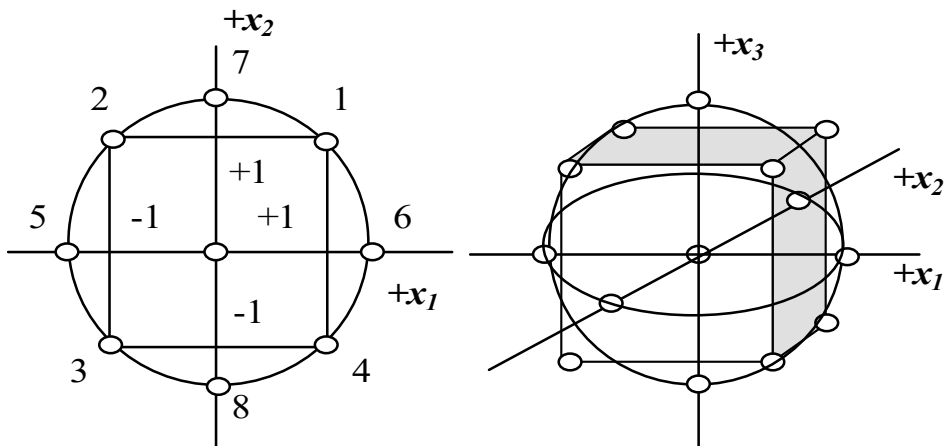


Рис. 49. Расположение точек ротатабельного плана второго порядка при $k = 2$ и $k = 3$

Матрицы ротатабельных планов второго порядка

Число факторов	Число точек «ядра» (n_{α})	Число «звездных» точек (n_{α})	Число нулевых точек (n_0)	Величина плеча для «звездных» точек (α)	Общее число опытов N	Примечание (о ядре плана)
2	4	4	5	1,414	13	
3	8	6	6	1,682	20	–
4	16	8	7	2,000	31	–
5	32	10	10	2,378	52	–
5	16	10	6	2,000	32	Полуреплика
6	64	12	15	2,828	91	–
6	32	12	9	2,378	53	Полуреплика
7	128	14	21	3,333	163	–
7	64	14	14	2,828	92	Полуреплика

При ротатабельном планировании второго порядка обычно велик объем вычислительной работы на стадии обработки экспериментальных данных. Поэтому расчеты рекомендуется выполнять на ЭВМ:

$$b_0 = \frac{2A}{N} [(\lambda_4^*)^2 \cdot (k+2) \cdot \sum_1^N y_u - C \cdot \lambda_4^* \cdot \sum_1^N \cdot \sum_1^k x_{iu} y_u]. \quad (3.29)$$

В таких ситуациях рекомендуется применять следующие формулы для определения коэффициентов регрессии:

$$b_i = \frac{\sum_1^N x_{iu}}{N - n_0}; \quad (3.30)$$

$$b_{ii} = \frac{A \cdot C^2}{N} [(k+2) \cdot \lambda_4^* - k] \cdot \sum_1^N x_{iu}^2 \cdot y_u + \frac{A \cdot C^2}{N} \cdot (1 - \lambda_4^*) \cdot \sum_1^N \cdot \sum_1^k x_{iu}^2 \cdot y_u - \frac{A \cdot C}{N} \cdot \lambda_4^* \cdot \sum_1^N y_u; \quad (3.31)$$

$$b_{ij} = \frac{C^2}{N \cdot \lambda_4^*} \sum_1^{n_{\alpha}} x_{iu} \cdot x_{ju} \cdot y_u, \quad (3.32)$$

где $C = \frac{N}{N - n_0}$; $A = \frac{1}{2 \cdot \lambda_4^* \cdot [(k+2) \cdot \lambda_4^* - k]}$.

3.2.4. *D*-оптимальные планы второго порядка

D-оптимальные планы привлекают внимание исследователей, так как их применение должно обеспечивать максимальную точность в оценках коэффициентов регрессии. Однако необходимость проведения при этом, как правило, повышенного числа опытов затрудняет использование указанных планов на практике.

Непрерывный *D*-оптимальный план, построенный на *k*-мерном кубе, связан с осуществлением опытов, число которых определяется из соотношения

$$N = 2^k + k \cdot 2^{k-1} + \frac{k \cdot (k-1)}{2} \cdot 2^{k-2}, \quad (3.33)$$

где *k* — число факторов.

В данном случае учитывается, что экспериментальные точки должны находиться в вершинах гиперкуба, в серединах его ребер и в центрах двумерных граней.

В работах К. Коно было уменьшено число точек непрерывного *D*-оптимального плана, построенного на гиперкубе, путем замены всех точек в центрах двумерных граней точкой, находящейся в центре гиперкуба (табл. 38). Тогда число опытов

$$N = 2^k + k \cdot 2^{k-1} + 1. \quad (3.34)$$

Т а б л и ц а 38

Матрицы планов Коно для *k* = 2 и *k* = 3

№ опыта	<i>k</i> = 2		<i>k</i> = 3		
	<i>x</i> ₁	<i>x</i> ₂	<i>x</i> ₁	<i>x</i> ₂	<i>x</i> ₃
1	+	+	0	0	0
2	–	+	+	+	+
3	–	–	+	–	+
4	+	–	–	–	+
5	+	0	–	+	+
6	0	+	+	+	–
7	–	0	+	–	–
8	0	–	–	–	–
9	0	0	–	+	–
10			+	0	+
11			0	–	+
12			–	0	+

№ опыта	$k=2$		$k=3$		
	x_1	x_2	x_1	x_2	x_3
13			+	–	0
14			–	–	0
15			–	+	0
16			+	+	0
17			0	+	+
18			+	0	–
19			0	–	–
20			–	0	–
21			0	+	–

На практике целесообразно использовать планы, которые по своим свойствам близки к D -оптимальным, но отличаются от них меньшим числом опытов. К числу таких планов относятся планы B_k и планы Хартли.

Планы B_k — это планы на кубах k -й размерности, с равным числом наблюдений в вершинах куба и в центрах $(k+1)$ -мерных граней.

С практической точки зрения, заслуживает внимания план B_4 , связанный с проведением всего 24 опытов. Указанный план включает план ПФЭ (точки в вершинах гиперкуба) и дополнительно восемь «звездных» точек, находящихся на трехмерных гранях, он симметричен. Матрица планирования показана в табл. 39.

Таблица 39

Матрица планирования B_4

№ опыта	x_1	x_2	x_3	x_4
1	–	–	–	–
2	–	–	–	+
3	–	–	+	–
4	–	–	+	+
5	–	+	–	–
6	–	+	–	+
7	–	+	+	–
8	–	+	+	+
9	+	–	–	–
10	+	–	–	+
11	+	–	+	–

№ опыта	x_1	x_2	x_3	x_4
12	+	–	+	+
13	+	+	–	–
14	+	+	–	+
15	+	+	+	–
16	+	+	+	+
17	+	0	0	0
18	–	0	0	0
19	0	+	0	0
20	0	–	0	0
21	0	0	+	0
22	0	0	–	0
23	0	0	0	+
24	0	0	0	–

Планы Хартли — это планы, включающие точки в вершинах гиперкуба (регулярную дробную реплику ПФЭ), а также «звездные» и нулевую точки. Особый интерес представляет план Na_5 ($k = 5$), который считается весьма эффективным. Соответствующая матрица планирования показана в табл. 40. Необходимое число опытов сравнительно невелико ($N = 27$).

Таблица 40

Матрица планирования Na_5

№ опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
1	+	+	+	+	+
2	–	+	+	+	–
3	+	–	+	+	–
4	–	–	+	+	+
5	+	+	–	+	–
6	–	+	–	+	+
7	+	–	–	+	+
8	–	–	–	+	–
9	+	+	+	–	–
10	–	+	+	–	+
11	+	–	+	–	+
12	–	–	+	–	–

№ опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
13	+	+	–	–	+
14	–	+	–	–	–
15	+	–	–	–	–
16	–	–	–	–	+
17	+	0	0	0	0
18	–	0	0	0	0
19	0	+	0	0	0
20	0	–	0	0	0
21	0	0	+	0	0
22	0	0	–	0	0
23	0	0	0	+	0
24	0	0	0	–	0
25	0	0	0	0	+
26	0	0	0	0	–
27	0	0	0	0	0

3.2.5. Преобразование уравнений регрессии с переходом к именованным величинам

На практике не всегда удобно пользоваться математическими зависимостями в кодированных величинах, поэтому иногда после получения адекватного уравнения регрессии его преобразуют с заменой кодированных величин именованными (фактическими). При этом учитывают соотношения, характеризующие связь рассматриваемых величин.

Допустим, получено уравнение в кодированных переменных

$$Y = 64,00 - 5,88 \cdot x_1 - 4,50 \cdot x_2 - 2,11 \cdot x_1^2. \quad (3.35)$$

С помощью введенных ранее соотношений $x_1 = (c - 1,9)/0,5$; $x_2 = (t - 70)/30$, получим

$$\begin{aligned} Y &= 64,00 - 5,88 \cdot \left(\frac{c-1,9}{0,5} \right) - 4,5 \cdot \left(\frac{t-70}{30} \right) - 2,11 \cdot \left(\frac{c-1,9}{0,5} \right)^2 = \\ &= 94,93 - 0,15 \cdot t - 9,75 \cdot c - 0,53 \cdot c^2. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Аналогично ведется преобразование уравнений во всех других случаях.

3.3. ПОСТРОЕНИЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ВЫСОКИХ ПОРЯДКОВ

Проблема создания информационной сети, не является автономной по смыслу, а чаще всего представляет собой часть или начальный этап решения более общей задачи по моделированию и оптимизации химико-технологических процессов. Поэтому, приступая к организации сбора информации, следует иметь в виду специфику, конечные цели и совокупную формулировку конкретной решаемой проблемы химической технологии.

3.3.1. Терминология

Если в N -мерном евклидовом пространстве EN u -й координате каждого вектора поставлен в соответствие u -й опыт плана D , то **контрастом** называется такой вектор $Z = (Z_1, \dots, Z_n) \in EN$, что

$$\sum_{u=1}^N Z_u = 0. \quad (3.37)$$

Вектором главных эффектов фактора F_j плана D называется контраст с равными компонентами для наблюдений, в которых фактор F_j в плане D принимает одинаковые значения.

Вектором эффектов взаимодействия $(R - 1)$ -го порядка, или вектором R -факторного эффекта взаимодействия факторов F_1, \dots, F_r плана D называется ортогональный ко всем векторам эффектов

взаимодействий вплоть до порядка $(R - 2)$ факторов F_1, \dots, F_r плана D контраст с равными компонентами для всех наблюдений, в которых факторы F_1, \dots, F_r принимают одинаковые значения.

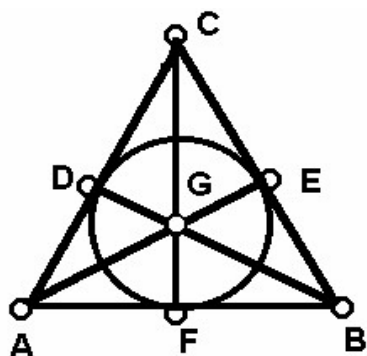


Рис. 50. Конечная проективная плоскость второго порядка

Конечным кольцом порядка s называется конечное множество из s элементов a_0, a_1, \dots, a_{s-1} , если для любой пары элементов a_i и a_j существует такой элемент a_n , притом лишь единственный, для которого выполняется равенство $a_i = a_j + a_n$.

Поле порядка s называется кольцо порядка s , если оно содержит, по крайней мере, один элемент, отличный от нуля, и для пары элементов a_i и a_j существует такой элемент a_n , притом лишь единственный, для которого выполняется равенство $a_i = a_j \cdot a_n$.

Целые числа a и b сравнимы по модулю p ($a \equiv b \pmod{p}$), если разность $a - b$ нацело делится на p .

Классом вычетов по заданному модулю p называется множество целых чисел, сравнимых по модулю p .

Поля классов вычетов по простому модулю p называются полями Галуа порядка p и обозначаются $GF(p)$.

Конечной проективной плоскостью является множество элементов, называемых точками, и подмножества этих точек, называемых прямыми, при условии, что любая прямая содержит, по крайней мере, три точки и что через любую точку проходят, по крайней мере, три прямые.

Конечная проективная плоскость имеет порядок S , если любая ее прямая содержит точно $S + 1$ точек. В проективной плоскости p существует точно $S^2 + S + 1$ точек и столько же прямых. На рис. 50 представлена графическая иллюстрация проективной плоскости $S = 2$. Она имеет 7 точек и 7 прямых. Каждая прямая содержит точно 3 точки, и через каждую точку проходят точно 3 прямые.

Конечной проективной геометрией называется конечное множество точек и подмножества этих точек, называемых прямыми, при условии, что прямая, пересекающая две стороны треугольника, пересекает также и третью сторону.

Для построения конечной проективной геометрии определяются точки конечного пространства $PG(m, S)$ размерности m как упорядоченное множество из $m + 1$ координат (x_0, x_1, \dots, x_m) , где x_i есть элементы поля Галуа $PG(S)$, не равные одновременно нулю. Общее число точек в конечном проективном пространстве $PG(m, S)$:

$$V(m, 0, S) = (S_{m+1} - 1)/(S - 1). \quad (3.38)$$

Фундаментальным симплексом называется множество точек $XPG(m, S)$ ($i = 1, \dots, m, S = p$), в котором для всех y_i координаты $x_i = 1$, а остальные координаты, включая x_0 , равны нулю.

Точки x_i называются вершинами фундаментального симплекса, а линии $x_i x_j$ ($i \neq j$) – его ребрами. Так как координаты точек $PG(m, S)$

однородны, первую координату можно положить $x_0 = 1$ и точки $EG(m, S)$ евклидова пространства задавать упорядоченными множествами элементов поля Галуа $GF(S)$. Таким образом, $EG(m, S)$ получается из $PG(m, S)$ исключением гиперплоскости $x_0 = 0$ со всеми ее плоскостями. Эти плоскости получили название плоскостей на бесконечности. Те из остающихся плоскостей, которые пересекаются только в r -плоскости на бесконечности, называются параллельными.

3.3.2. Этапы формирования информационной сети

Этапами формирования информационной сети являются:

- выбор и обоснование числа факторов;
- выбор и обоснование числа уровней варьирования каждого фактора;
- определение числа вершин фундаментального симплекса;
- составление групп координат вершин связей плоскостей на бесконечности;
- составление линейно независимых векторов;
- решение проблемы упаковки ортогональной таблицы;
- трансформирование ортогональной таблицы в информационную сеть.

3.3.3. Выбор и обоснование числа факторов и уровней их варьирования

Фактором называется управляемая независимая переменная, соответствующая одному из возможных способов воздействия на объект исследований. Фактор считается заданным, если указаны его название и область определения. В выбранной области определения он может иметь несколько значений, которые соответствуют числу его различных состояний. Выбранные для эксперимента количественные или качественные состояния фактора носят название уровней варьирования фактора.

В процессе выбора факторов рекомендуется учитывать ряд требований. В качестве факторов целесообразно выбирать такие независимые переменные, которые соответствуют одному из разумных в рассматриваемом случае воздействий на объект исследований, могут быть измерены имеющимися средствами с достаточно высокой

гарантированной точностью, являются управляемыми и однозначными, совместимы один с другим, не связаны между собой линейными корреляционными связями.

Многие затруднения при постановке задачи связаны с тем, что исследователь выбирает в качестве факторов параметры, которые являются функцией других факторов. Этого делать нельзя.

Совместимость факторов означает, что все их комбинации, возможные при планировании и проведении эксперимента, могут быть осуществлены на практике. Обстоятельство это весьма существенно, особенно если принять во внимание характерную черту планирования эксперимента, связанную с одновременным изменением сразу многих факторов. Нередкими являются случаи, когда отсутствие совместимости факторов заставляет изменять постановку задачи исследований, так как требует исключения некоторых факторов или изменения области их определения.

Вопрос о корреляции факторов заслуживает особого внимания. Существует правило — при наличии линейной корреляции между факторами эксперимент нельзя планировать. Это связано с тем, что при планировании эксперимента каждый фактор в отдельном опыте должен принимать значение, которое фиксируется независимо от уровней других факторов.

При выборе интервалов варьирования факторов в области эксперимента находят некоторую подобласть, симметричную относительно нулевой точки, которая предназначена для изучения на первой стадии эксперимента. Величина интервала варьирования не должна быть больше удвоенной квадратичной ошибки фиксирования данного фактора. Правда, и чрезмерное увеличение интервалов варьирования факторов нежелательно, так как это может привести к снижению эффективности поиска оптимума.

Очень часто на практике выбор интервала варьирования не вызывает затруднений, поскольку заранее известна область определения факторов и, более того, имеется некоторая информация о предполагаемом порядке математической модели объекта исследований.

Выбор факторов завершается составлением списка всех факторов, которые, по мнению исследователей, заслуживают внимания. При этом указываются наименование и обозначение факторов, их интервалы и уровни варьирования.

При выборе числа уровней варьирования факторов следует помнить, что для определения положения прямой линии достаточно знать координаты двух ее точек на плоскости, кубическая кривая требует информации о положении четырех точек, а чтобы аппроксимировать экспериментальные данные зависимостью четвертого порядка, фактор нужно варьировать уже не менее чем на 5 уровнях.

Если при построении информационной сети первоначально исходить из кажущейся целесообразности разместить датчики во всех узлах равномерной регулярной решетки, полученной в факторном пространстве из пересечения линий координатной сетки по каждой оси, то необходимое число опытов окажется сильно завышенным.

Между тем объем информации, необходимой для получения математической модели с заданной точностью, может быть многократно уменьшен без утраты существенности описания деталей. Значительное число датчиков можно изъять из узлов информационной сети.

3.3.4. Определение числа вершин фундаментального симплекса

Фундаментальным симплексом называется множество точек $XPG(m, S)$ ($i = 1, \dots, m, S = p$), в котором для всех y_i координаты $x_i = 1$, а остальные координаты, включая x_0 , равны нулю.

001 — фундаментальный симплекс для первого фактора;

010 — фундаментальный симплекс для второго фактора;

100 — фундаментальный симплекс для третьего фактора;

Необходимое число опытов в узлах информационной сети определяется по формуле

$$N = S^n, \quad (3.39)$$

а количество факторов, которое можно описать этим количеством опытов, находится из выражения

$$F = (S^n - 1)/(S - 1), \quad (3.40)$$

где S — число уровней варьирования; n — число вершин фундаментального симплекса.

Процедура построения, например тринадцатифакторной трехуровневой информационной сети начинается с определения (методом подбора) числа вершин фундаментального симплекса, на котором предстоит построить ортогональную таблицу.

3.3.5. Правила составления групп координат вершин связок плоскостей на бесконечности

Перед тем как приступить к составлению групп координат вершин связок плоскостей на бесконечности, нужно усвоить следующие правила:

(*) в группу входит столько координат, сколько вершин в фундаментальном симплексе;

(**) число уровней варьирования каждого фактора обозначается S и называется модулем;

(***) каждая последующая группа координат получается прибавлением единицы к младшему разряду по модулю;

(****) первая ненулевая координата не может быть больше единицы.

3.3.6. Правила составления линейно независимых векторов

Следующей операцией формирования информационной сети является заполнение элементами поля Галуа столбцов ортогональной таблицы под координатами вершин фундаментального симплекса (составление линейно независимых векторов).

Правила составления линейно независимых векторов:

- группы координат вершин фундаментального симплекса должны располагаться в первых столбцах ортогональной таблицы;

- в первом столбце элементы поля Галуа, численно равные уровням варьирования факторов, перечисляются по порядку столько раз, сколько уровней варьирования, т. е. число элементов должно быть $(0, 1, \dots, S) \cdot S$;

- во втором столбце каждый элемент, численно равный уровню варьирования, повторяется S раз подряд;

- в третьем столбце смена уровней варьирования происходит через $S \cdot S$ повторений и т. д.

3.3.7. Решение проблемы упаковки ортогональной таблицы

Решение проблемы упаковки ортогональной таблицы осуществляется путем умножения и сложения элементов поля Галуа в кольце классов вычетов по модулю S в соответствии с координатами групп вершин связок плоскостей на бесконечности.

3.3.8. Пример построения информационной сети

Процедура построения, например, тринадцатифакторной трехуровневой информационной сети начинается с определения (методом подбора) числа вершин фундаментального симплекса, на котором предстоит построить ортогональную таблицу. По формулам (3.39) и (3.40) имеем:

Для одновершинного симплекса ($n = 1$):

$$N = 3^1 = 3;$$

$$F = (3^1 - 1) / (3 - 1) = 1.$$

Для двухвершинного симплекса ($n = 2$):

$$N = 3^2 = 9;$$

$$F = (3^2 - 1) / (3 - 1) = 4.$$

Для трехвершинного симплекса ($n = 3$):

$$N = 3^3 = 27;$$

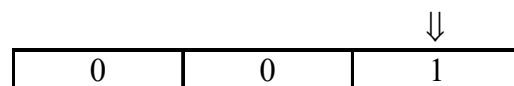
$$F = (3^3 - 1) / (3 - 1) = 13.$$

Таким образом, для описания поведения тринадцатифакторного объекта потребуется 27 опытов, (ортогональная таблица будет представлена 27 строками и 13 столбцами), а в основу построения таблицы должен быть положен трехвершинный фундаментальный симплекс.

На основании правила (**) в каждую группу вершин связок плоскостей на бесконечности будут входить 3 координаты

Для трехуровневого эксперимента значениями координат, входящих в группу вершин, будут элементы поля Галуа 0, 1, 2, модуль ортогональной таблицы будет равен числу уровней варьирования каждого фактора, т. е. $m = 3$.

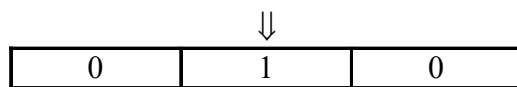
На основании правила (***) каждая последующая группа вершин получается прибавлением единицы к младшему разряду по модулю



Эта группа является первой вершиной фундаментального симплекса.

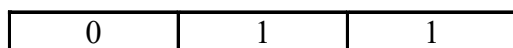
Вторая группа должна получаться из первой прибавлением единицы к младшему разряду: $1 + 1 = 2$, но на основании правила (***) первая ненулевая координата не может быть больше единицы, поэто-

му добавляемая единица обнуляет младший разряд и переходит на один разряд старше:

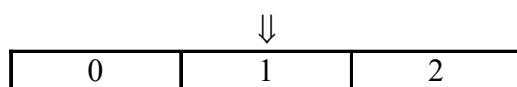


Эта группа является второй вершиной фундаментального симплекса.

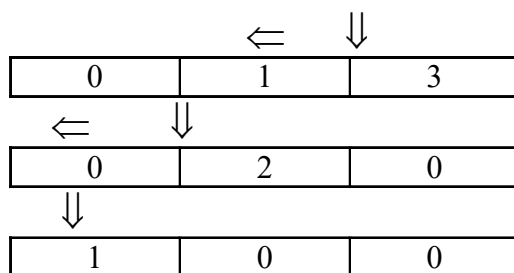
Очередное прибавление единицы к младшему разряду приводит группу к виду



И далее:



Следующее прибавление единицы к младшему разряду приведет к нарушению условия задачи, поскольку имеется только три уровня варьирования факторов, представляемых тремя элементами поля Галуа: 0, 1, 2; тройки в этом случае просто не существует, поэтому импульс опять обнулит младший разряд и увеличит на единицу предшествующий разряд, но это опять приведет к нарушению правила (***) , следовательно очередное прибавление единицы приведет к следующим изменениям вида группы:



Эта группа является третьей вершиной фундаментального симплекса.

Таким образом, для тринадцатифакторного эксперимента группы координат будут иметь вид, представленный в табл. 41.

Т а б л и ц а 41

**Группы координат вершин связей плоскостей
на бесконечности для тринадцатифакторного эксперимента**

Группы координат вершин	001	010	100	011	012	101	102	110	111	112	120	121	122
-------------------------------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

**Группы координат вершин связок плоскостей
на бесконечности и линейно независимые вектора под вершинами
фундаментального симплекса**

Координаты вершин	001	010	100	011	012	101	102	110	111	112	120	121	122
1	0	0	0										
2	1	0	0										
3	2	0	0										
4	0	1	0										
5	1	1	0										
6	2	1	0										
7	0	2	0										
8	1	2	0										
9	2	2	0										
10	0	0	1										
11	1	0	1										
12	2	0	1										
13	0	1	1										
14	1	1	1										
15	2	1	1										
16	0	2	1										
17	1	2	1										
18	2	2	1										
19	0	0	2										
20	1	0	2										
21	2	0	2										
22	0	1	2										
23	1	1	2										
24	2	1	2										
25	0	2	2										
26	1	2	2										
27	2	2	2										

Решение проблемы упаковки ортогональной таблицы осуществляется путем умножения и сложения элементов поля Галуа в кольце классов вычетов по модулю S в соответствии с группами координат вершин связок плоскостей на бесконечности.

Так, для условий табл. 42, чтобы получить элементы четвертого столбца, нужно каждый элемент второго столбца сложить с каждым элементом третьего, а элементы седьмого столбца получаются при построчном сложении элементов первого столбца с удвоенными элементами третьего, элементы последнего, тринадцатого, столбца получаются сложением первого столбца с удвоенным вторым и удвоенным третьим (табл. 43).

**Ортогональная таблица для тринадцатифакторного
трехуровневого эксперимента**

Координаты вершин связок плоскостей на бесконечности	001	010	100	011	012	101	102	110	111	112	120	121	122
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	1	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1
3	2	0	0	0	0	2	2	2	2	2	2	2	2
4	0	1	0	1	1	0	0	1	1	1	2	2	2
5	1	1	0	1	1	1	1	2	2	2	0	0	0
6	2	1	0	1	1	2	2	0	0	0	1	1	1
7	0	2	0	2	2	0	0	2	2	2	1	1	1
8	1	2	0	2	2	1	1	0	0	0	2	2	2
9	2	2	0	2	2	2	2	1	1	1	0	0	0
10	0	0	1	1	2	1	2	0	1	2	0	1	2
11	1	0	1	1	2	2	0	1	2	0	1	2	0
12	2	0	1	1	2	0	1	2	0	1	2	0	1
13	0	1	1	2	0	1	2	1	2	0	2	0	1
14	1	1	1	2	0	2	0	2	0	1	0	1	2
15	2	1	1	2	0	0	1	0	1	2	1	2	0
16	0	2	1	0	1	1	2	2	0	1	1	2	0
17	1	2	1	0	1	2	0	0	1	2	2	0	1
18	2	2	1	0	1	0	1	1	2	0	0	1	2
19	0	0	2	2	1	2	1	0	2	1	0	2	1
20	1	0	2	2	1	0	2	1	0	2	1	0	2
21	2	0	2	2	1	1	0	2	1	0	2	1	0
22	0	1	2	0	2	2	1	1	0	2	2	1	0
23	1	1	2	0	2	0	2	2	1	0	0	2	1
24	2	1	2	0	2	1	0	0	2	1	1	0	2
25	0	2	2	1	0	2	1	2	1	0	1	0	2
26	1	2	2	1	0	0	2	0	2	1	2	1	0
27	2	2	2	1	0	1	0	1	0	2	0	2	1

Результатом является ортогональная таблица, которая легко трансформируется в информационную сеть путем замены элементов поля Галуа соответствующими им значениями натуральных шкал факторов.

При формировании информационной сети следует иметь в виду, что число коэффициентов полиномиальных моделей не может быть больше числа опытов. Если факторы варьируются на двух уровнях и число опытов совпадает с числом факторов плюс единица, то можно получить модель не выше первого порядка. Если факторы варьируются на двух уровнях, а число опытов значительно больше числа фак-

торов, то можно получить модель неполного второго порядка с парными произведениями взаимодействующих факторов. Трехуровневое варьирование факторов позволяет получить нелинейную квадратическую модель. Варьирование факторов на четырех уровнях дает возможность аппроксимировать табличные данные полиномом третьей степени и т. д.

После выполнения достаточно простой процедуры замены элементов поля Галуа натуральными значениями выбранных факторов ортогональная таблица превращается в информационную сеть, а после выполнения измерений анализируемого показателя в соответствии с условиями каждой строки получаем таблично заданную функцию, которая позволяет получить математическое описание.

3.3.9. Использование тренажера «ModelBuider» для построения информационных сетей

Формирование информационной сети следует начинать с нажатия клавиши «Файл» на верхней панели инструментов компьютерного тренажера «ModelBuilder» (рис. 51).

В появившемся списке выбрать пункт «Создать». В выпадающем меню, если выбрать пункт «Сеть пользователя», можно обрабатывать результаты пассивного эксперимента по лабораторным журналам или другим источникам неупорядоченной информации (рис. 52).



Рис. 51. Верхняя панель тренажера с указанием позиции начала формирования информационной сети

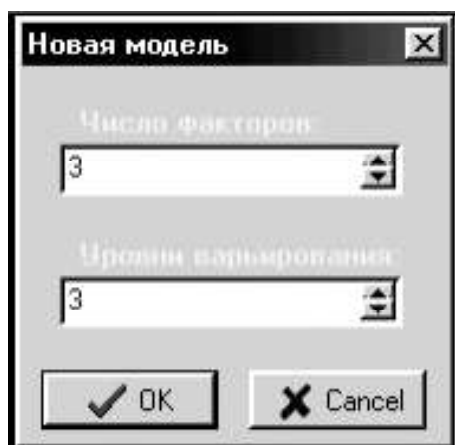


Рис. 52. Выбор параметров информационной сети

Если будет выбран пункт «Поле Галуа», то в возникшем окне можно заказать параметры создаваемой информационной сети в виде «Числа факторов» и «Числа уровней варьирования».

Очередным этапом организации сбора информации будет построение ортогональной таблицы на основании выбранных параметров сети для заданного числа факторов и заданного числа уровней их варьирования (рис. 53).

1

	Фактор 1	Фактор 2	Фактор 3	Фактор 4	Результат 1	Результат 2
1	0	0	0	0		
2	1	0	1	1		
3	2	0	2	2		
4	0	1	1	2		
5	1	1	2	0		
6	2	1	0	1		
7	0	2	2	1		
8	1	2	0	2		
9	2	2	1	0		

2

	Фактор 1	Фактор 2	Фактор 3	Фактор 4	Результат 1	Результат 2
1	0	0	0	0		
2	1	0	1	1		

3

Компьютерное моделирование процессов химической технологии

Файл Правка Панели Операции Сервис Информационное обеспечение

Новая модель

	Фактор 1	Фактор 2	Фактор 3	Фактор 4	Результат 1	Результат 2
1	0	0	0	0		
2	1	0	1	1		
3	2					
4	0					
5	1					
6	2					
7	0					
8	1					
9	0					

Ввод данных

Результат процесса

Фактор 1

OK Cancel

4

Компьютерное моделирование процессов химической технологии

Файл Правка Панели Операции Сервис Информационное обеспечение

Новая модель

	Температура	Время	Концентрация	Результат 1	Результат 2
1	0	0	0		
2	1	0	1		
3	2	0	2		
4	0				
5	1				
6	2				
7	0				
8	1				
9	2				

Формирование информационной сети

Число уровней варьирования: 3

	0	1	2
Температура			
Время			
Концентрация			

5

Формирование информационной сети

Число уровней варьирования: 3

	0	1	2
Температура	100	150	200
Время	5	10	15
Концентрация	1.5	3.0	3.5

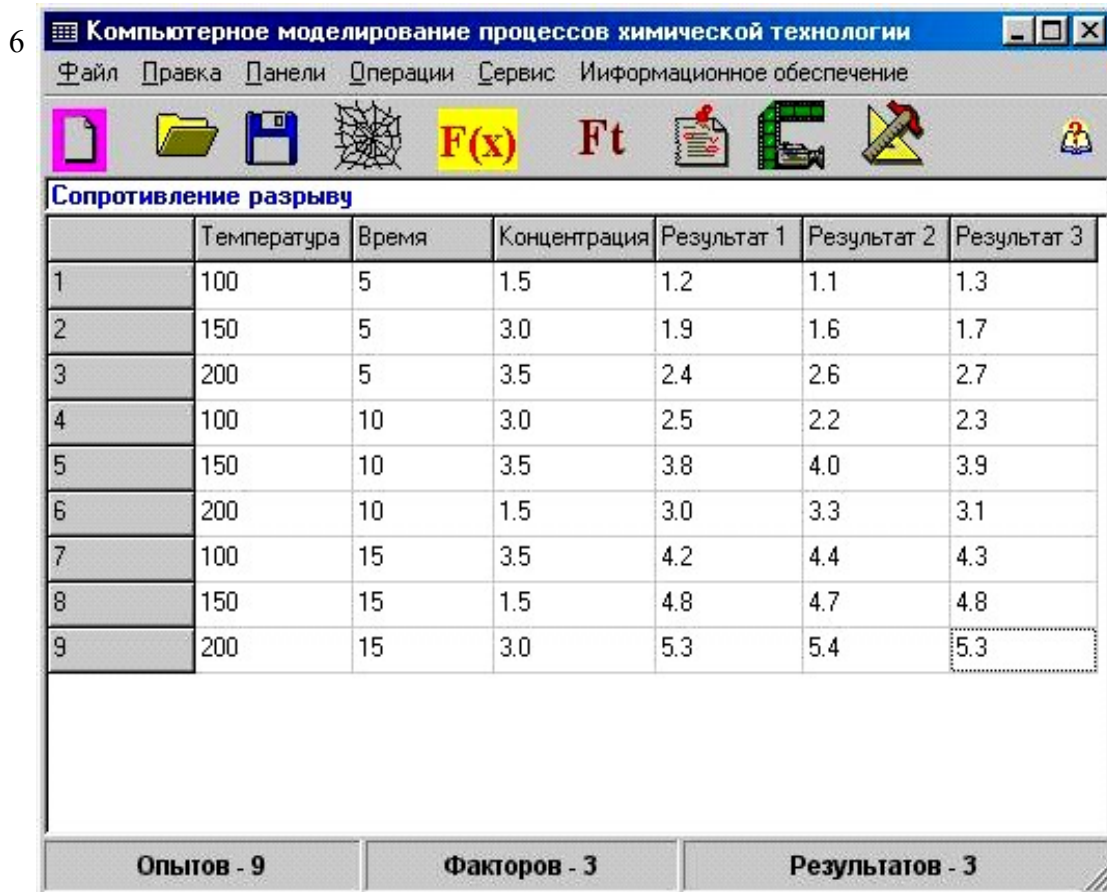


Рис. 53. Этапы построения информационной сети:

- 1 — ортогональная таблица; 2 — вызов панели редактирования;
- 3 — удаление лишнего столбца и наименование факторов;
- 4 — трансформирование ортогональной таблицы в информационную сеть;
- 5 — натуральные значения уровней варьирования;
- 6 — информационная сеть с условиями и результатами проведения эксперимента (таблично заданная функция)

4. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

4.1. ВЕРОЯТНОСТНЫЕ МОДЕЛИ

Системы химической технологии можно условно разделить на малые и большие. Малые системы однозначно определяются свойствами одного технологического процесса. Большие системы представляют собой совокупность малых систем и отличаются от них логической целостностью, наличием общих целей и назначений, большим числом выполняемых функций.

По своей природе процессы химической технологии делятся на детерминированные и стохастические. В детерминированном процессе значение выходной величины однозначно определяется значением входной величины. Стохастическим называется такой процесс, в котором изменение определяющих величин происходит беспорядочно. Для описания стохастических процессов применяются статистически-вероятностные методы.

Для больших систем химической технологии характерна замена однозначного детерминизма более свободной и многозначной вероятностной картиной связи между событиями.

При построении математической модели процесса химической технологии реальное явление упрощается, схематизируется и описывается с помощью подходящего математического аппарата. В модели должны быть учтены только наиболее существенные факторы, она не может быть загромождена множеством мелких, второстепенных факторов, которые только усложнят анализ и сделают интерпретацию результатов труднообозримой.

При анализе сложных процессов, когда не представляется возможным найти внутренние связи в системе, применяют принцип «черного ящика». Этот принцип заключается в том, что для его математического описания используют лишь зависимости выходных величин от входных.

Конечным результатом стохастического моделирования является получение математического описания в виде полиномов различного вида и порядка.

4.1.1. Теоретические основы получения полиномиальных моделей

Полиномами степени k называют многомерные степенные ряды общего вида

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^m b_i x_i + \sum_{i,j=1, i \neq j}^m b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{i=1}^m b_{ii} \cdot x_i \cdot x_i + \dots \quad (4.1)$$

Геометрическим образом уравнения (4.1) является некоторая поверхность в m -мерном пространстве, называемая поверхностью отклика, а само уравнение (4.1) соответственно называется функцией отклика.

Если начинать с простого и попытаться получить полиномиальную линейную модель вида

$$\hat{y} = b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2, \quad (4.2)$$

то последовательность решения задачи выглядит следующим образом.

Во-первых, необходимо указать, что результатом решения задачи получения модели является нахождение коэффициентов b_0, b_1, \dots .

Во-вторых, расчетные значения \hat{y} пройдут в максимально возможной близости от значений \bar{y} , полученных экспериментально в этих же условиях в том случае, если будет выполняться условие

$$F = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y}_i)^2 \rightarrow \min. \quad (4.3)$$

Можно заметить, что \hat{y} в (4.3) есть не что иное, как выражение (4.2), поэтому в (4.3) можно подставить его значение

$$F = \sum_{i=1}^n (b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 - \bar{y}_i)^2 \rightarrow \min. \quad (4.4)$$

Чтобы определить координаты x_1, x_2, \dots , при которых F принимает экстремальное (минимальное) значение, нужно составить и решить относительно b_0, b_1, b_2, \dots систему уравнений из приравненных нулю первых производных F по каждому аргументу x_1, x_2, \dots .

Система таких уравнений имеет вид

$$\begin{aligned}
 b_0 \cdot \sum x_{0_i} x_{0_i} + b_1 \cdot \sum x_{0_i} x_{1_0_i} + \dots + b_m \cdot \sum x_{0_i} x_{m_i} &= \sum x_{0_i} \cdot y_i; \\
 b_0 \cdot \sum x_{1_i} x_{0_i} + b_1 \cdot \sum x_{1_i} x_{1_i} + \dots + b_m \cdot \sum x_{1_i} x_{m_i} &= \sum x_{1_i} \cdot y_i; \\
 \dots\dots\dots & \\
 b_0 \cdot \sum x_{m_i} x_{0_i} + b_1 \cdot \sum x_{m_i} x_{1_i} + \dots + b_m \cdot \sum x_{m_i} x_{m_i} &= \sum x_{m_i} \cdot y_i.
 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Решение системы (4.5) позволяет получить лишь линейные оценки аппроксимирующих полиномов. Поскольку мир нелинеен, то ограничиваться получением математических моделей первого порядка, как правило, нельзя.

Чтобы получать аппроксимирующие полиномы более высоких порядков, пользуются приемом линеаризации, который заключается во введении в таблично заданную функцию псевдофакторов, получающихся путем комбинации исходных вектор-столбцов.

4.1.2. Решение систем нормальных алгебраических уравнений

Для формирования расширенной матрицы (4.6) из системы нормальных алгебраических уравнений (4.5) первый столбец составлен из единиц. Из соображений лаконичности размер матрицы A выбран 3×4 .

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{vmatrix}. \quad (4.6)$$

Полезно помнить, что перед всеми элементами первого столбца подразумевается множитель b_0 , перед всеми элементами второго —

b_1 , перед элементами третьего — b_2 , а перед всеми элементами четвертого столбца подразумевается знак равенства.

С учетом (4.5) элементы расширенной матрицы A представляют собой: $a_{11} = x_0 \cdot x_0$; $a_{12} = x_0 \cdot x_1$; $a_{13} = x_0 \cdot x_2$; $a_{14} = x_0 \cdot y$ и т. д.

Чтобы решить систему (4.6) методом последовательного исключения неизвестных по Гауссу, нужно расширенную матрицу (4.6) преобразовать в трапециевидную:

$$A = \left| \begin{array}{cccc} 1 & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & 1 & a_{23} & a_{24} \\ 0 & 0 & 1 & a_{34} \end{array} \right|. \quad (4.7)$$

Тогда

$$b_2 = a_{34}; \quad b_1 = a_{24} - a_{23} \cdot a_{34}; \\ b_0 = a_{14} - a_{13} \cdot a_{34} - a_{12} \cdot (a_{24} - a_{23} \cdot a_{34}).$$

Чтобы на месте a_{11} в (4.7) получить единицу, нужно все элементы первой строки (4.6) разделить на a_{11} . Ниже в общем виде приведены этапы преобразования (4.5) в (4.7):

$$b_{11} = \frac{a_{11}}{a_{11}}; \quad b_{12} = \frac{a_{12}}{a_{11}}; \quad b_{13} = \frac{a_{13}}{a_{11}}; \quad b_{14} = \frac{a_{14}}{a_{11}}; \\ b_{11} = \frac{a_{11}}{a_{11}}; \quad b_{12} = \frac{a_{12}}{a_{11}}; \quad b_{13} = \frac{a_{13}}{a_{11}}; \quad b_{14} = \frac{a_{14}}{a_{11}}. \quad (4.8)$$

$$c_{21} = -a_{21} \cdot 1 + a_{21}; \quad c_{22} = -a_{21} \cdot b_{12} + a_{22}; \quad c_{23} = -a_{21} \cdot b_{13} + a_{23}; \\ c_{24} = -a_{21} \cdot b_{14} + a_{24}.$$

$$A2 = \left| \begin{array}{cccc} 1 & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ 0 & c_{22} & c_{23} & c_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{array} \right|. \quad (4.9)$$

$$d_{22} = \frac{c_{22}}{c_{22}}; \quad d_{23} = \frac{c_{23}}{c_{22}}; \quad d_{24} = \frac{c_{24}}{c_{22}}.$$

$$A3 = \begin{vmatrix} 1 & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ 0 & 1 & d_{23} & d_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{vmatrix}. \quad (4.10)$$

$$e_{31} = -a_{31} \cdot 1 + a_{31}; \quad e_{32} = -a_{31} \cdot b_{12} + a_{32}; \quad e_{33} = -a_{31} \cdot b_{13} + a_{33}; \\ e_{34} = -a_{31} \cdot b_{14} + a_{34}.$$

$$A4 = \begin{vmatrix} 1 & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ 0 & 1 & d_{23} & d_{24} \\ 0 & e_{32} & e_{33} & e_{34} \end{vmatrix}. \quad (4.11)$$

$$g_{32} = -e_{32} \cdot 1 + e_{32}; \quad g_{33} = -e_{32} \cdot d_{23} + e_{33}; \quad g_{34} = -e_{32} \cdot d_{24} + e_{34}.$$

$$A5 = \begin{vmatrix} 1 & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ 0 & 1 & d_{23} & d_{24} \\ 0 & 0 & g_{33} & g_{34} \end{vmatrix}. \quad (4.12)$$

$$h_{33} = \frac{g_{33}}{g_{33}}; \quad h_{34} = \frac{g_{34}}{g_{33}}.$$

$$A6 = \begin{vmatrix} 1 & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ 0 & 1 & d_{23} & d_{24} \\ 0 & 0 & 1 & h_{34} \end{vmatrix}. \quad (4.13)$$

Таким образом

$$b_2 = h_{34};$$

$$b_1 = d_{24} - d_{23} \cdot b_2;$$

$$b_0 = b_{14} - b_{13} \cdot b_2 - b_{12} \cdot b_1.$$

Прежде чем приступать к проверке адекватности моделей, надо выполнить два условия.

Во-первых, следует убедиться в том, что при многократном повторении опытов в каждой точке измерений построчные дисперсии значимо не отличаются друг от друга. Это устанавливается с помощью критерия Кохрена, который вычисляется как частное от деления максимальной дисперсии на сумму всех построчных дисперсий. Если эта величина превышает табличное значение критерия Кохрена (G_T), то дисперсии неоднородны и по этим данным нельзя получать математическую модель.

Если дисперсии неоднородны, то центр факторного пространства надо переносить в другое место, сужая или расширяя его границы, или применять другие методы измерения и приборы.

Во-вторых, надо проверить и отбросить незначимые коэффициенты аппроксимирующего полинома. Проверка осуществляется с помощью критерия Стьюдента. Идея, которая положена в основу этой проверки, заключается в сопоставлении величин отношений долей дисперсии, полученных при вычислении функции отклика с зануленными коэффициентами полинома, (кроме оцениваемого), к дисперсии выходной величины, полученной со всеми коэффициентами, и критического (табличного) значения критерия Стьюдента.

Если отношение двух дисперсий для какого-нибудь коэффициента модели окажется меньше табличного, то этот коэффициент можно приравнять нулю (он статистически незначим).

4.1.3. Проверка адекватности математических моделей

Модель признается адекватной в тех случаях, когда отношение двух дисперсий — дисперсии адекватности и дисперсии воспроизводимости — не превышает величины, определяемой критерием Фишера для заданного уровня значимости при соответствующих степенях свободы обеих дисперсий.

$$F = \frac{S_y^2}{S_{\bar{y}}^2} = \frac{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2}{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_i)^2}, \quad (4.14)$$

где N — число измерений (число строк таблично заданной функции); n — число параллельных измерений в каждой строке.

Другими словами, модель хороша тогда, когда точность предсказания значимо не отличается от точности, с которой достигается измерение случайной величины. Естественно, что модель будет скомпрометирована, если точность прогноза окажется выше точности, которую могут обеспечить измерительные приборы, или при установленной точности прецизионных приборов точность прогноза окажется значительно хуже.

Таким образом, вычисленную величину F -критерия нужно сравнивать с табулированным значением критерия Фишера при соответствующих условиях.

Распределение Фишера имеет плотность распределения вероятностей:

$$f(F) = \left(\frac{v_1}{v_2}\right)^{v_1/2} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{v_1 + v_2}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{v_1}{2}\right) \cdot \Gamma\left(\frac{v_2}{2}\right)} \cdot \frac{F^{\frac{v_1}{2}-1}}{\left(1 + \frac{v_1}{v_2} \cdot F\right)^{\frac{v_1 + v_2}{2}}}, \quad (4.15)$$

где v_1 — число степеней свободы числителя; v_2 — число степеней свободы знаменателя.

Число степеней свободы дисперсии адекватности представляет собой разность

$$v_1 = k - p - 1, \quad (4.16)$$

где k — число коэффициентов полинома; p — число незначимых коэффициентов модели.

Число степеней свободы дисперсии воспроизводимости

$$v_2 = N \cdot (r - 1) - 1, \quad (4.17)$$

где N — число измерений (число строк таблично заданной функции); r — число параллельных измерений в каждой строке.

Из формулы следует, что распределение F зависит от двух параметров — чисел степеней свободы.

В статистических таблицах приведены значения квантилей F -распределения $F_{(\alpha; v_1; v_2)}$ в зависимости от уровня значимости и степеней свободы большей и меньшей дисперсий.

Значения квантилей находятся из решения уравнения

$$P(F > F_{\alpha;v_1;v_2}) = \int_{F_{\alpha;v_1;v_2}}^{\infty} f(F)dF = \alpha. \quad (4.18)$$

Адекватности модели можно добиваться увеличением степени аппроксимирующего полинома, применяя прием линеаризации (выравнивания).

Сущность линеаризации заключается во введении в таблично заданную функцию псевдофакторов, построчные значения которых получаются комбинацией известных значений измеренных факторов.

Пусть имеется таблично заданная трехфакторная функция (табл. 44).

Т а б л и ц а 44

Таблично заданная функция

№	x_0	x_1	x_2	x_3	$x_4 = x_1^2$	$x_5 = x_1 \cdot x_2$	$x_6 = 1/(x_1 - x_2 \cdot x_3)^2$	y
1	1	x_{11}	x_{12}	x_{13}				y_1
2	1	x_{21}	x_{22}	x_{23}				y_2
...	...							
n	1	x_{n1}	x_{n2}	x_{n3}				y_n

Вводя псевдофакторы, например, $x_4 = x_1^2$, $x_5 = x_1 \cdot x_2$, $x_6 = 1/(x_1 - x_2 \cdot x_3)^2$ и т. д., мы тем самым увеличиваем размерность расширенной матрицы и можем получить линейные оценки не только при исходных факторах, но и при псевдофакторах:

$$\hat{y} = b_0 \cdot x_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_3 \cdot x_3 + b_4 \cdot x_4 + b_5 \cdot x_5 + b_6 \cdot x_6. \quad (4.19)$$

С учетом выражений псевдофакторов можно записать

$$\hat{y} = b_0 \cdot x_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_3 \cdot x_3 + b_4 \cdot x_1^2 + b_5 \cdot x_1 \cdot x_2 + b_6 \cdot 1/(x_1 - x_2 \cdot x_3)^2. \quad (4.20)$$

Таким образом, не меняя методики вычисления коэффициентов полиномиальных моделей можно получать нелинейные, достаточно многообразные и сложные математические описания объектов. При этом необходимо помнить, что число оцениваемых коэффициентов не должно превышать число строк таблично заданной функции.

4.1.4. Линеаризующие преобразующие соответствия

Выражения $x_4 = x_1^2$, $x_5 = x_1 \cdot x_2$, $x_6 = 1/(x_1 - x_2 \cdot x_3)^2$ и т. п. носят названия линеаризующих преобразующих соответствий (табл. 45–48).

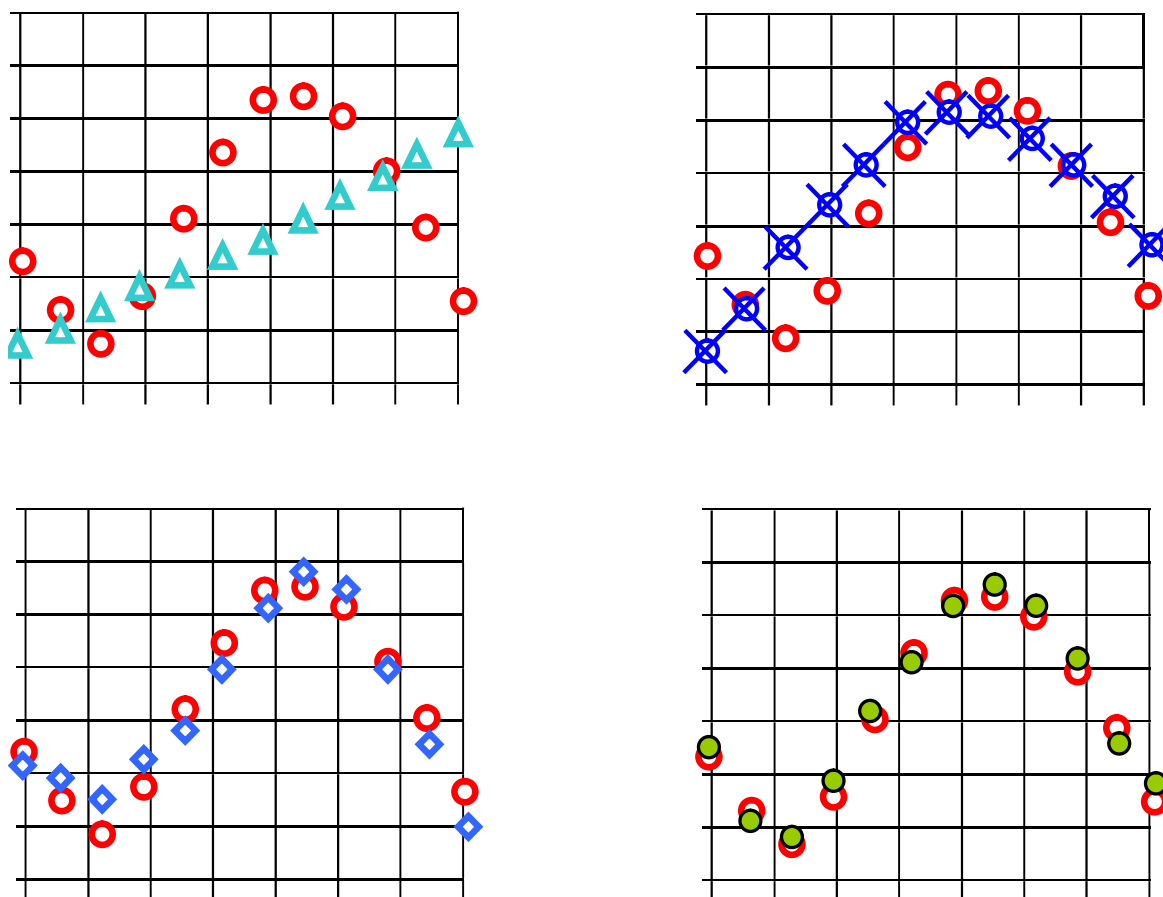


Рис. 54. Измеренные и рассчитанные значения содержания полимера в структуре образца в зависимости от расхода коллоидно-химического регулятора:

- ○ ○ — результаты измерений показателя;
- △ △ △ — аппроксимация линейным полиномом;
- ⊗ ⊗ ⊗ — аппроксимация полиномом второй степени;
- ◇ ◇ ◇ — аппроксимация полиномом третьей степени;
- ● ● — аппроксимация полиномом четвертой степени

Таблица 45

Линеаризация таблично заданной функции

	Аргумент x	Линеаризующие преобразующие соответствия				Функция y
		$x_1 = x^2$	$x_2 = x^3$	$x_3 = x^4$...	
1	1,00	1	1	1	...	4,02
2	2,00	4	8	16	...	2,51
3	3,00	9	27	81	...	1,48
4	4,00	16	64	256	...	2,97
5	5,00	25	125	625	...	5,03
6	6,00	36	216	1296	...	6,97
7	7,00	49	343	2401	...	8,40
8	8,00	64	512	4096	...	8,50
9	9,00	81	729	6561	...	7,95
10	10,00	100	1000	10000	...	6,50

Таблица 46

Сопоставительный анализ измеренных и рассчитанных по моделям порядка k значений исследуемой функции

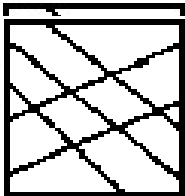
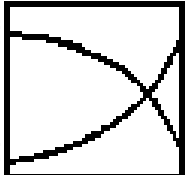
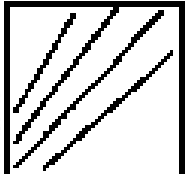
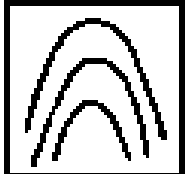
№	Измеренные значения функции	Рассчитанные значения функции по моделям порядка k			
		$k = 1$	$k = 2$	$k = 3$	$k = 4$
1	4,02	3,11	1,32	3,81	4,18
2	2,51	3,54	2,82	2,32	1,94
3	1,48	3,97	4,09	2,64	1,88
4	2,97	4,40	5,12	3,21	3,15
5	5,03	4,82	5,91	4,75	5,00
6	6,97	5,26	6,46	6,45	6,84
7	8,40	5,69	6,77	7,93	8,19
8	8,50	6,13	6,84	8,75	8,68
9	7,95	6,57	6,68	8,50	8,12
10	6,50	6,98	6,27	6,77	6,39

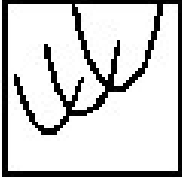
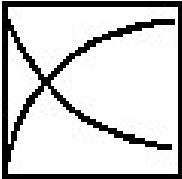
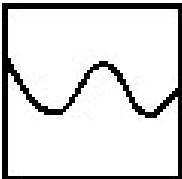
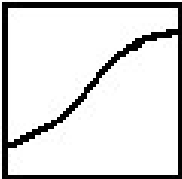
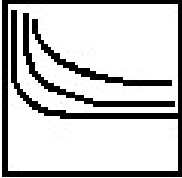
Таблица 47



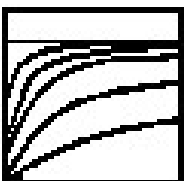
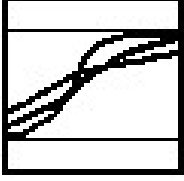
Характеристика моделей порядка k , полученных с помощью метода наименьших квадратов путем использования линеаризующих преобразующих соответствий

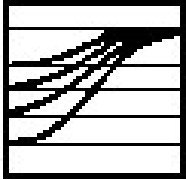
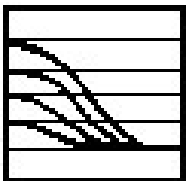
Характеристика моделей порядка k	$k = 1$	$k = 2$	$k = 3$	$k = 4$
Дисперсия воспроизводимости	0,044	0,044	0,044	0,044
Число степеней свободы д. в.	22	22	22	22
Дисперсия адекватности	4,362	3,135	0,134	0,064
Число степеней свободы д. а.	1	2	3	4
Критерий Фишера, расчетные значения	99,137	71,253	3,047	1,471
Критерий Фишера, табличные значения	5,517	3,442	3,074	2,817
Заключение об адекватности	н/а	н/а	а	н/а

Разновидности полиномиальных моделей и линеаризующие преобразующие соответствия

Пиктограмма	Краткая характеристика модели	Мнемоформула	Линеаризующее преобразующее соответствие s — число строк таблично заданной функции; f — число факторов модели
1	2	3	4
1. 	<u>Линейные модели</u> могут оказаться полезными только при малых диапазонах изменений аргументов. Вообще же мир нелинеен. Всегда найдутся причины, отклоняющие закономерность от линейности. Поэтому такими моделями нужно пользоваться очень осторожно	$y = b_0 + bx$	Не требуется
2. 	<u>Степенные модели</u> хороши тогда, когда поведение объекта нужно описать раздельной функциональной зависимостью, причем гладкими выпуклыми поверхностями, не имеющими экстремумов	$y = \exp(b_0) \cdot x^b$	$x(i, j) = \ln(x(i, j))$ $y(i) = \ln(y(i))$
3. 	<u>Парные произведения независимых переменных</u> позволяют описать криволинейные поверхности, дающие в сечениях веерообразные прямые	$y = b_0 + bx + bxx$	Модель (1) + <i>for</i> $i = 1$ <i>to</i> s $u = f$ <i>for</i> $k = 1$ <i>to</i> $f - 1$ <i>for</i> $j = 1$ <i>to</i> $f - k$ $u = u + 1$ $x(i, u) = x(i, k) \times x(i, k + j)$ <i>next</i> j <i>next</i> k <i>next</i> i
4. 	<u>Параболические модели</u> (без парных произведений) не позволяют описать перемещения парабол со сдвигом по абсциссе. При изменении третьего аргумента они перемещаются параллельно самим себе	$y = b_0 + bx + bx^2$	Модель (1) + $u = f$ <i>for</i> $i = 1$ <i>to</i> s <i>for</i> $j = 1$ <i>to</i> f $x(i, u + j) = x(i, j)^2$ <i>next</i> j <i>next</i> i

1	2	3	4
<p>5.</p> 	<p><u>Квадратические модели</u>, содержащая в своем составе парные произведения, позволяет описать перемещение парабол в факторном пространстве</p>	$y = b_0 + bx + bxx + bx^2$	<p>Модель (3) + <i>for i = 1 to s</i> <i>for j = 1 to f</i> $x(i, u + j) = x(i, j)$ <i>next j</i> <i>next i</i></p>
<p>6.</p> 	<p><u>Гиперболические модели</u> позволяют описать поведение объекта гладкими выпуклыми функциями, не имеющими экстремумов. Достоинство моделей — малое число коэффициентов аппроксимирующего полинома</p>	$y = b_0 + b/x$	$x(i, j) = 1 / x(i, j)$
<p>7.</p> 	<p><u>Синусоидальные модели.</u> Можно описать сложные многоэкстремальные зависимости простой тригонометрической функцией</p>	$y = b_0 + b \cdot \sin(x)$	$x(i, j) = \sin(x(i, j))$
<p>8.</p> 	<p><u>Тангенциальные модели.</u> Поскольку область определения функции $y = \text{tg}(x)$ имеет точки разрыва, то для аппроксимации монотонно возрастающих зависимостей рационально использовать функцию $y = \text{arctg}(x)$, где область определения — вся ось x, с горизонтальными асимптотами $\pi/2, -\pi/2$ по оси y</p>	$y = b_0 + b \cdot \text{atn}(x)$	$x(i, j) = \text{atn}(x(i, j))$
<p>9.</p> 	<p><u>Логарифмические модели</u> позволяют описать поведение объекта гладкими выпуклыми функциями, не имеющими экстремумов. Достоинство моделей — малое число коэффициентов аппроксимирующего полинома</p>	$y = b_0 + b \cdot \ln(x)$	$x(i, j) = \ln(x(i, j))$

1	2	3	4
<p>10.</p> 	<p><u>Модели высоких порядков.</u> Можно описать многообразные сложные многофакторные зависимости. Ограничивающим условием является громоздкость моделей за счет большого числа парных произведений</p>	$y = b_0 + bx + bxx + bx^2 + bx^3 + \dots$	<p>Модель (3) + $b_1 = u + 1$ <i>for g = 2 to st</i> $b_2 = b_1 + f - 1$ <i>for i = 1 to s</i> <i>for j = b_1 to b_2</i> $x(i, j) =$ $x(i, j - b_1 + 1) \wedge (g)$ <i>next j next i</i> $b_1 = b_2 + 1$ <i>next g;</i> <i>st</i> — степень полинома</p>
<p>11.</p> 	<p><u>Модели главных эффектов</u> описывают многоэкстремальные зависимости, но не дают возможности оценить перемещение экстремумов в факторном пространстве из-за отсутствия в моделях парных произведений аргументов</p>	$y = b_0 + bx + bx^2 + bx^3 + \dots$	<p>Модель (1) + $b_1 = u + 1$ <i>for g = 2 to st</i> $b_2 = b_1 + f - 1$ <i>for i = 1 to s</i> <i>for j = b_1 to b_2</i> $x(i, j) =$ $x(i, j - b_1 + 1) \wedge (g)$ <i>next j next i</i> $b_1 = b_2 + 1$ <i>next g</i></p>
<p>12.</p> 	<p><u>Комбинированные модели.</u> Крутизна экспонент будет зависеть от значений функции $Y^* = f(X)$, которая представляет собой полином с независимыми переменными, полученный по любой из 11 предыдущих подпрограмм</p>	$y = a4 - (a4 - a2) \cdot \exp(y)$	<p>$a2$ — начальное значение признака; $a4$ — значение асимптоты; $y2(i) = \ln(a4 - y2(i)) - \ln(a4 - a2)$</p>
<p>13.</p> 	<p><u>Асимптотические модели.</u> Подпрограмма таблично заданную функцию аппроксимирует логистической кривой, проходящей между двумя неподвижными асимптотами. Например, загрязнение атмосферы можно описать от фоновых значений концентраций до максимальных</p>	$y_p = f(x_1, \dots, x_n)$ $y = a2 + ((a4 - a2) \cdot \exp(y_p)) / (1 + \exp(y_p))$	<p>$a2$ — нижняя асимптота; $a4$ — верхняя асимптота; $y2(i) = \ln(\text{abs}((y2(i) - a2) / (a4 - y2(i))))$</p>

1	2	3	4
14. 	<u>Логистические модели с подвижной нижней асимптотой.</u> Подпрограмма таблично заданную функцию аппроксимирует логистической кривой с подвижной нижней асимптотой as^{x^*} . Подпрограмма эффективна для моделирования процессов, происходящих в батарее машин или химических реакторов, когда выход одной стадии становится входом другой	$yp = f(x_1, \dots, x_n)$ $x_k = x_{k-1} + ((as^e - x_{k-1})) \times e^{yp} / (1 + e^{yp})$	Роль подвижной нижней асимптоты выполняет фактор $x(i, *)$; $y2(i) = \ln(\text{abs}((y2(i) - x(i, 2)) / (a4 - y2(i))))$
15. 	<u>Логистические модели с подвижной верхней асимптотой.</u> Подпрограмма таблично заданную функцию аппроксимирует логистической кривой с подвижной верхней асимптотой as^{x^*} . Подпрограмма эффективна для моделирования процессов, происходящих в батарее машин или химических реакторов, когда выход одной стадии становится входом другой	$yp = f(x_1, \dots, x_n)$ $x_k = x_{k-1} - ((x_k - as^h \cdot e^{yp}) / (1 + e^{yp}))$	Роль подвижной верхней асимптоты выполняет фактор $x(i, *)$; $y2(i) = \log(\text{abs}((x(i, 3) - y2(i)) / (y2(i) - a2)))$

4.1.5. Программный модуль «ModelBuilder»

4.1.5.1. Назначение и области использования программного модуля. Тренажер предназначен для получения и анализа многомерных полиномиальных моделей высоких порядков, описывающих поведение систем промышленной экологии и химической технологии, с построением, визуализацией и анимацией поверхностей отклика.

4.1.5.2. Функциональные возможности программного модуля

- Формирование информационной сети и таблично заданной функции по данным лабораторных журналов (пассивный эксперимент).
- Формирование ортогональной таблицы с помощью проективных геометрий и полей Галуа.

- Трансформирование ортогональной таблицы в информационную сеть.
- Расчет коэффициентов аппроксимирующих полиномов высоких порядков более 800 разновидностей (по выбору и автоматически).
- Расчет статистических характеристик получаемых моделей.
- Проверка адекватности получаемых моделей с синхронным вычислением квантилей критерия Фишера.
- Сохранение в файле полученных моделей.
- Построение и сохранение в файле растровых изображений двумерных сечений поверхностей отклика.
- Получение анимационных видеороликов изменений поверхностей отклика в различных сечениях.

4.1.5.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

ModelBuilder.exe Главный исполняемый файл программного модуля

Terr.dat Файл данных для расчета рабочего примера

Model.hlp Файл помощи

Model.cnt Файл оглавления

4.1.5.4. Запуск и управление работой программного модуля

Формирование информационной сети. Поскольку компьютерный программный модуль «EcoGame» (см. подраздел 6.2) имитирует в динамике функционирование территориального производственного комплекса, его можно использовать в качестве источника информации для освоения приемов организации получения математического описания моделируемых технологических процессов.

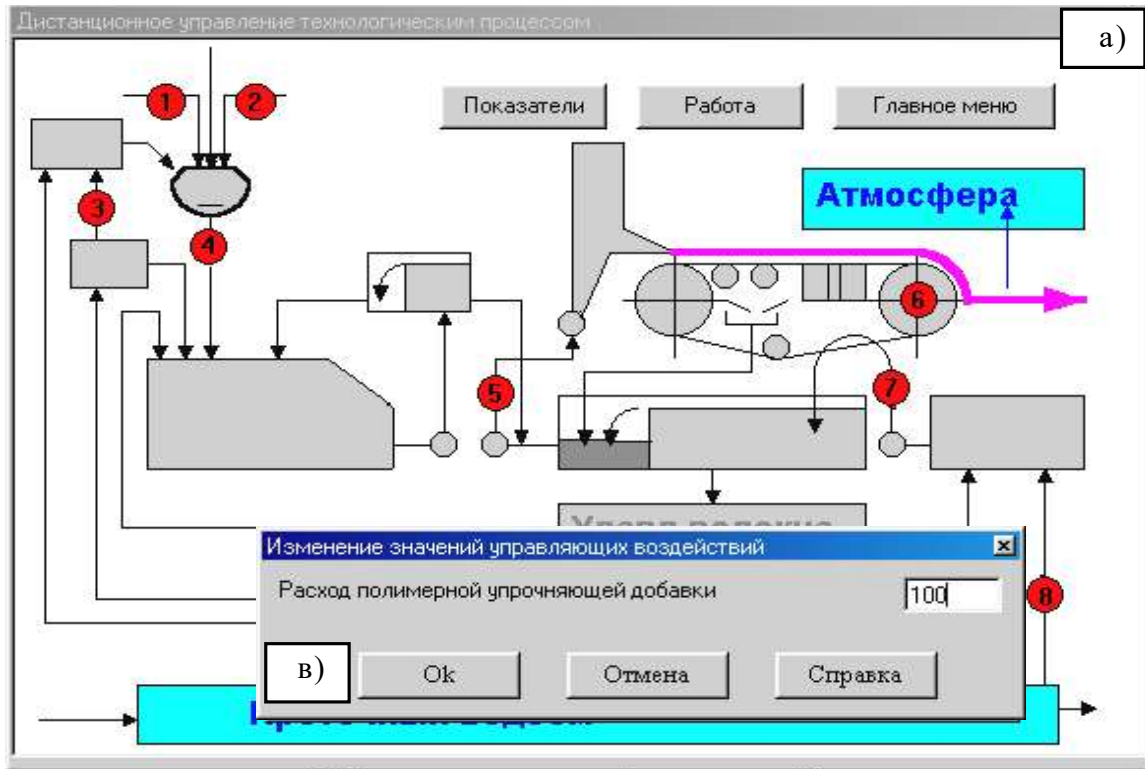
Для этого необходимо:

1. Уяснить расположение и назначение механизмов управления технологическим процессом программного модуля «EcoGame» (красные кружочки на схеме, рис. 55а).

2. Выбрать и обосновать число факторов и число уровней варьирования факторов в создаваемой информационной сети, например 3 фактора на 3 уровнях: расход волокнистой упрочняющей добавки; расход полимерной упрочняющей добавки; степень помола.

Для этого в среде «ModelBuilder» произвести следующие действия: «Файл» Ок; — «Создать» Ок; — «Поле Галуа» Ок.

3. Трансформировать полученную ортогональную таблицу в информационную сеть (рис. 55б).



Компьютерное моделирование процессов химической технологии

б)

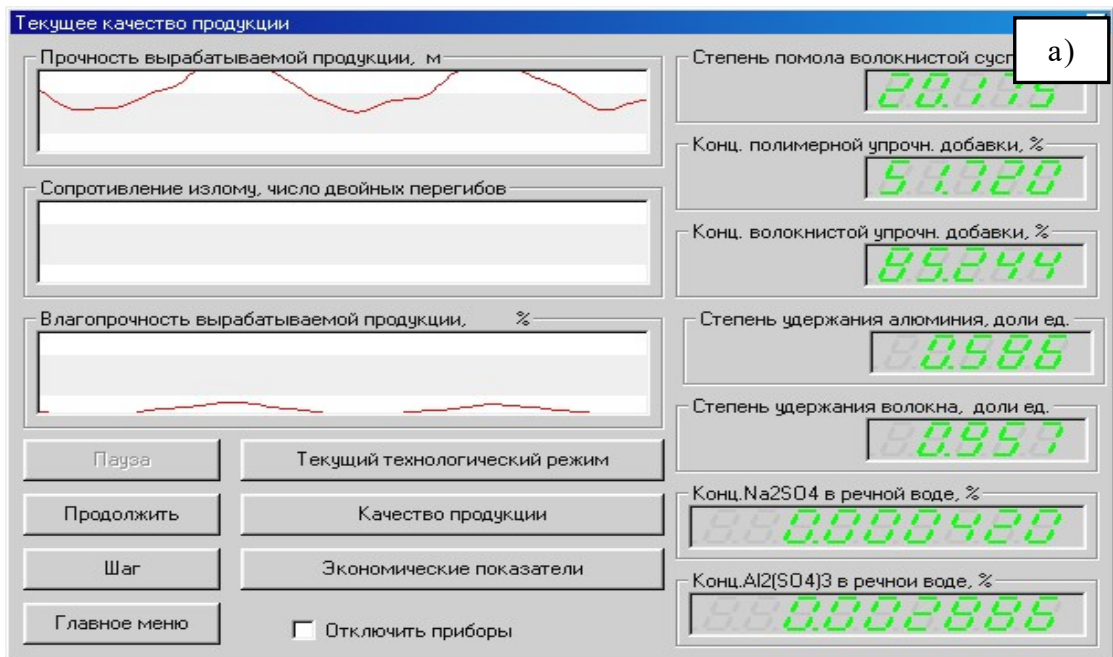
Файл Правка Панели Операции Сервис Информационное обеспечение

Новая модель

	Волокно	Полимер	Помол	Результат 1	Результат 2
1	50	100	20		
2	100	100	30		
3	150	100	40		
4	50	150	40		
5	100	150	20		
6	150	150	30		
7	50	200	30		
8	100	200	40		
9	150	200	20		

Опытов - 9 Факторов - 3 Результатов - 2

Рис. 55. Трехфакторная, трехуровневая информационная сеть



Качество продукции

	Задано	Текущее	Лу
Прочность вырабатываемой продукции, м	от 3000,0 до 4000,0	4651.442	
Сопrotивление излому, число двойных перегибов	от 1200,0 до 1500,0	2212.998	
Влагопрочность вырабатываемой продукции, %	от 15,0 до 25,0	13.334	

Ok | Справка

Компьютерное моделирование процессов химической технологии

Файл | Правка | Панели | Операции | Сервис | Информационное обеспечение

Новая модель

	Волокно	Полимер	Помол	Результат 1	Результат 2
1	50	100	20	4651.442	
2	100	100	30		
3	150	100	40		
4	50	150	40		
5	100	150	20		
6	150	150	30		
7	50	200	30		
8	100	200	40		
9	150	200	20		

Опытов - 9 | Факторов - 3 | Результаты - 2

Рис. 56. Текущие значения качества продукции в соответствии с построчными значениями факторов

4. В окне «Дистанционное управление технологическим процессом» (рис. 55а) установить текущие построчные значения факторов (рис. 55в) в соответствии с условиями информационной сети (рис. 55б).

5. В окне «Дистанционное управление технологическим процессом» (рис. 55а) нажать командную кнопку «Работа». На экране монитора появится окно «Текущее качество продукции» (рис. 56а).

6. Дать возможность производственному комплексу поработать некоторое время в созерцательном режиме, после чего нажать кнопки «Пауза» и «Качество продукции». Появится окно «Качество продукции» (рис. 56б).

7. В окне (рис. 56б) отметить и поместить в буфер обмена текущее значение показателя качества с тем, чтобы это значение из буфера обмена поместить в соответствующую ячейку информационной сети (рис. 55в).

8. После повторения пунктов 4, 5, 6, 7 столько раз, сколько строк в информационной сети, получается таблично заданная функция, которая позволяет получить требуемую разновидность полиномиальной модели.

Получение полиномиальных моделей. После нажатия командной кнопки « $F(x)$ » на панели инструментов программного модуля появляется окно выбора моделей (рис. 57).

$$M = 24 \cdot \ln \left[\frac{\sum (n_i - 1) \cdot \sigma_i^2}{24} - \sum (n_i - 1) \cdot \ln \sigma_i^2 \right] = 12,72, \quad (2.117)$$

Для примера в правое окно списка выбранных моделей включены три разновидности.

Для облегчения выбора моделей в нижней части окна предусмотрен синхронный вывод текста подсказок об особенностях каждой модели.

Характеристики всех полученных моделей выводятся на экран монитора по трем закладкам (рис. 58):

- характеристики;
- параметры;
- матрицы.

Рис. 57. Окно выбора моделей

Квадратическая

Матрицы | Параметры | Характеристики

0	1	2	3	4
1	1	0	0	10
2	2	100	0	15
3	3	200	0	20
4	4	300	0	25
5	5	400	0	30
6	6	500	0	35
7	7	0	50	35
8	8	100	50	10
9	9	200	50	15
10	10	300	50	20

0	1	2	3	4
1	36	9000	4500	810
2	9000	3300000	1125000	202500
3	4500	1125000	825000	101250
4	810	202500	101250	20850
5	1125000	412500000	206250000	24000000
6	202500	74250000	24000000	5212500
7	101250	24000000	18562500	2606250

Протокол
Модель
Стоп
OK
Помощь

Квадратическая

Матрицы | Параметры | Характеристики

Коэффициенты:

17.225
-0.0286956
0.364671
-0.0896595
0.000151294
0.00357842
-0.00866874
-0.000208657
-0.000805461

Дисперсии:

4
4
1
4
4
4
1
4
4

№ п/п Фактические Y: Расчетные Y:

№ п/п	Фактические Y:	Расчетные Y:
1	27	20.375
2	28	25.3964
3	35	31.8464
4	30	39.725
5	40	49.0321
6	75	59.7679
7	75	64.7071
8	40	31.6393
9	17	32.8661
10	30	35.5214

Протокол
Модель
Стоп
OK
Помощь

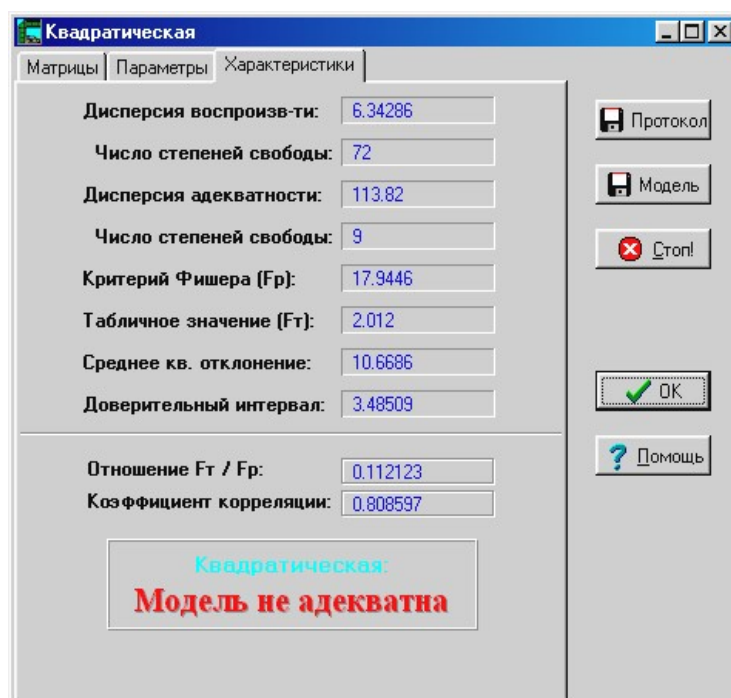
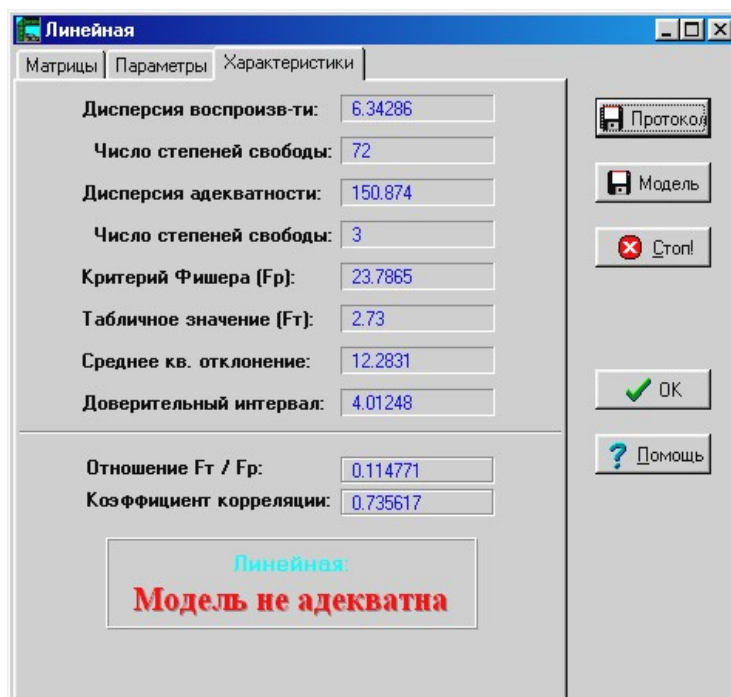



Рис. 58. Характеристики полученных моделей

Окно характеристик содержит информацию о дисперсиях, критериях Фишера и доверительных оценках полученных моделей.

Окно параметров содержит значения коэффициентов аппроксимирующих полиномов и сопоставительный анализ измеренных и рассчитанных данных.

Окно матриц содержит матрицу таблично заданной функции и расширенную матрицу системы уравнений, полученных по методу наименьших квадратов с учетом выбранных линеаризующих преобразующих соответствий.

Визуализация поверхности отклика. С помощью окон настройки графики (рис. 59), вызываемых кнопкой , можно получить двумерные сечения поверхности отклика

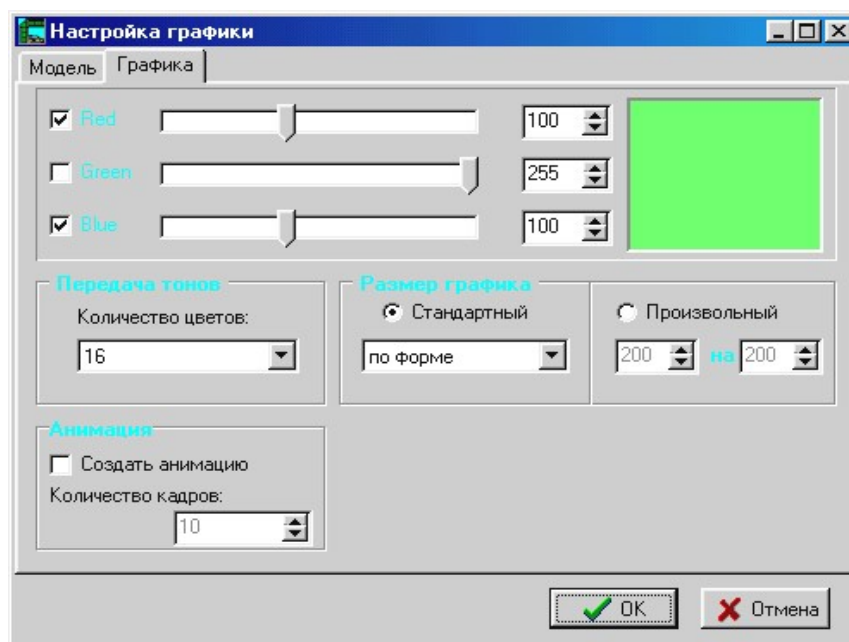
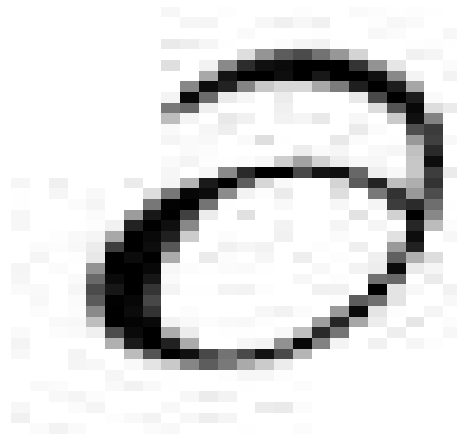


Рис. 59. Окна настройки графики

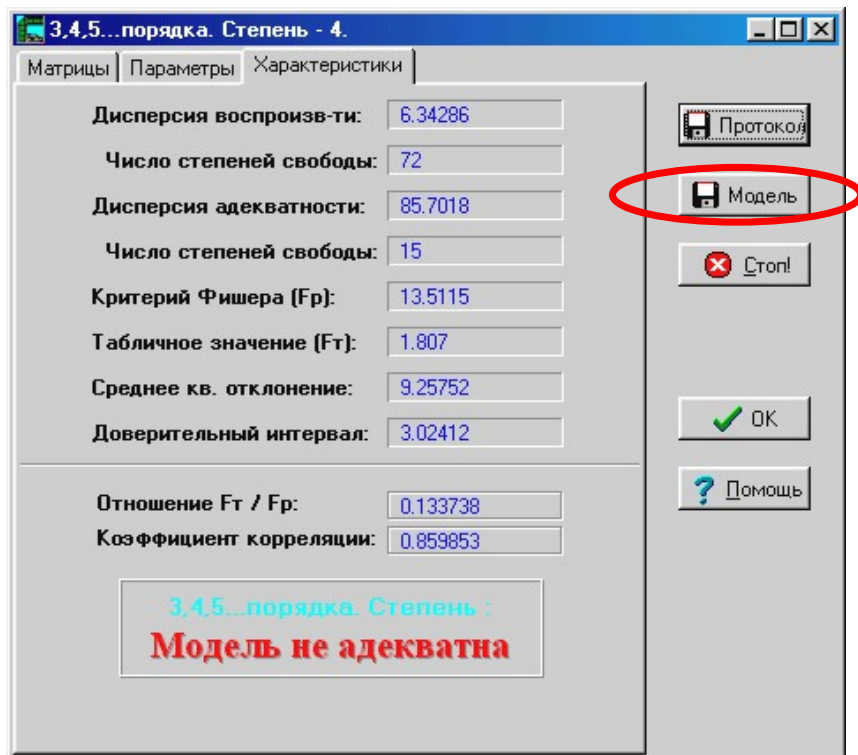


Рис. 60. Командная кнопка для сохранения модели

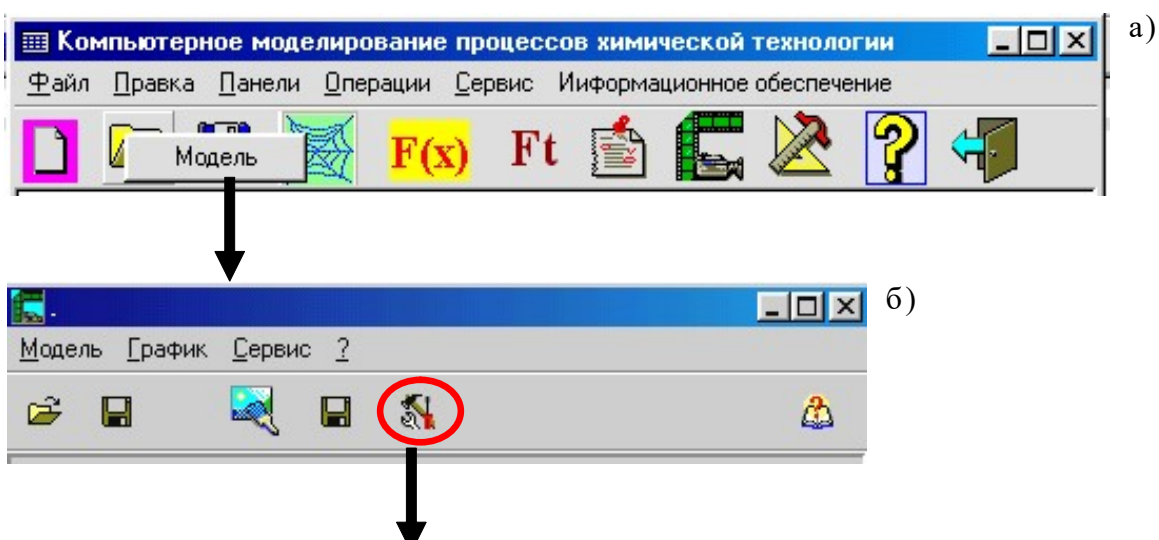
Модель сохраняется с расширением **.mdl*.

Протокол сохраняется по командной кнопке «Протокол» с расширением **.txt* (рис. 60).

Если ПКМ нажать на кнопку «Открыть файл» на панели инструментов, то появится кнопка «Модель» (рис. 61а), которая откроет окно загрузки файлов с расширением **.mdl*.

Выбор файла с соответствующим именем откроет диалоговое окно (рис. 61б). Нажатием на отмеченную (рис. 61б) кнопку вызывается окно «Настройка графики» (рис. 61в) с двумя закладками «Графика» и «Модель». Закладка «Графика» позволяет с помощью функции RGB настроить цветовое решение картинки двумерного сечения поверхности отклика. В списке «Количество цветов» можно задать число поддиапазонов, на которое будет разделен весь рабочий диапазон расчетных значений исследуемого параметра. Здесь же можно выбрать нужный размер графика.

Если не заказано получение файла анимации поверхности отклика, то на закладке «Модель» (рис. 62) необходимо определить границы факторного пространства, в которых осуществлялся эксперимент и будет исследоваться функция.



в)



Рис. 61. Настройка параметров модели

«Кадрик» в другом сечении (рис. 63) можно получить, изменив значение третьей координаты (третьего фактора). На рис. 65 — «время». Таким образом, можно получить сколько угодно «кадриков», которые будут характеризовать изменения анализируемого показателя в координатах I фактор — II фактор при различных закрепленных значениях третьего фактора.

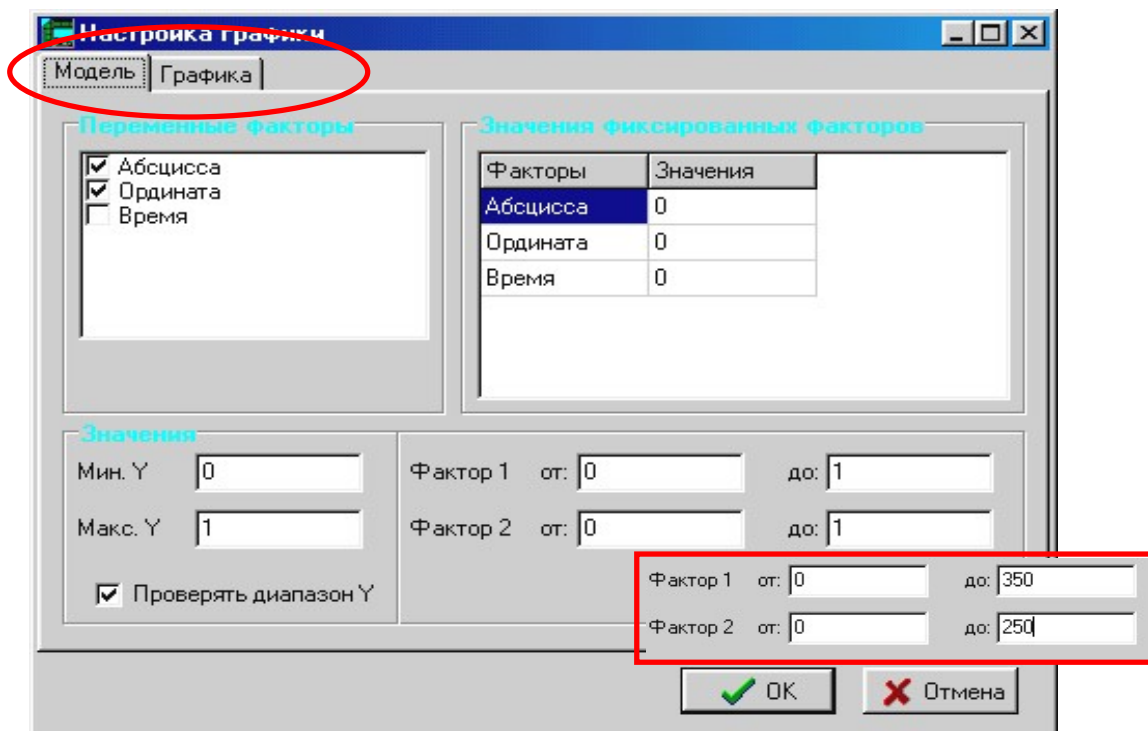


Рис. 62. Определение границ факторного пространства

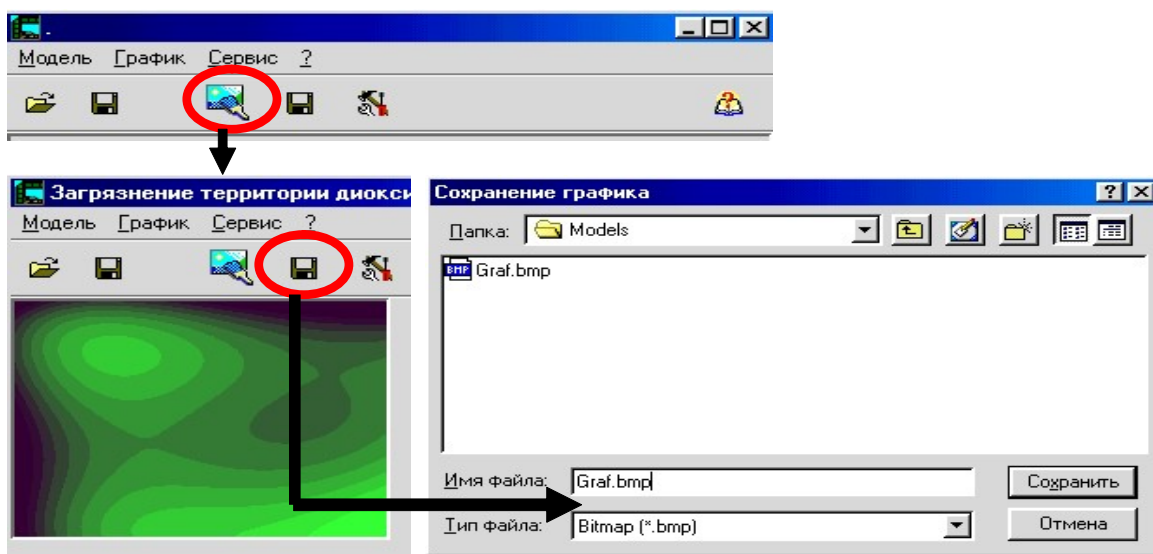


Рис. 63. Получение и сохранение одного «кадрика» сечения

Получение файла анимации. Эту процедуру можно осуществить в автоматическом режиме с целью получения файла анимации, который можно просматривать с помощью соответствующих проигрывателей как компьютерные видеофильмы.

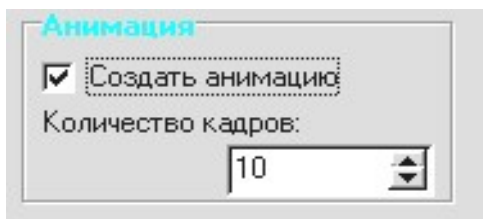


Рис. 64. Заказ режима получения файла анимации с желаемым количеством «кадриков»

Для этого в рамке «Анимация» (рис. 64) нужно поставить флажок «Создать анимацию» и заказать желаемое число «кадриков» видеофильма.

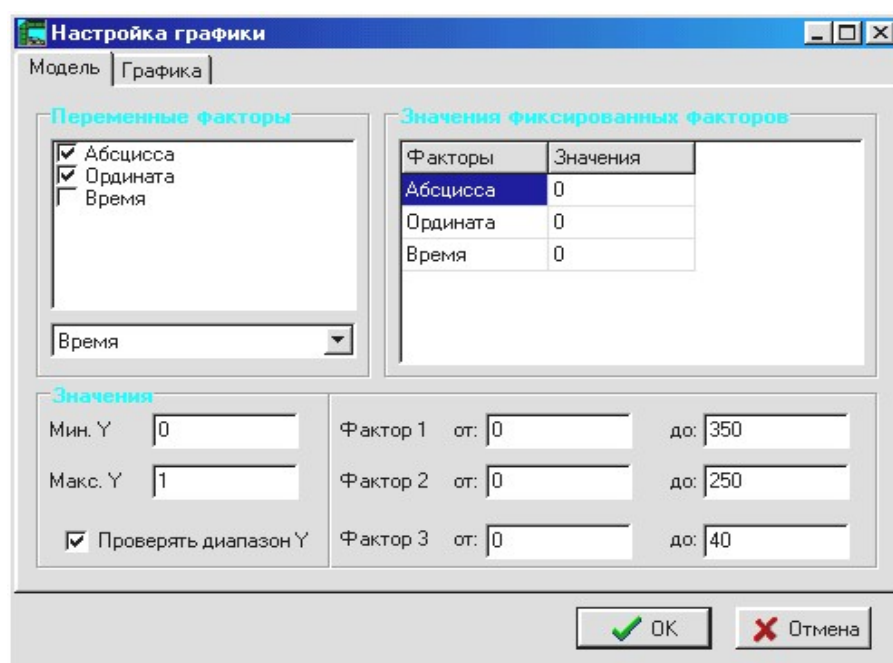


Рис. 65. Настройка процедуры получения файла анимации. В списке параметров необходимо выделить фактор, значения которого будут автоматически изменяться в пределах отмеченного диапазона

4.1.5.5. Описание рабочего примера. Для описания загрязнения приземного слоя атмосферы необходимо выбрать и обосновать лучшую разновидность полиномиальных моделей. В качестве преобразующих линеаризующих соответствий целесообразно использовать выражения логистических кривых, проходящих между двумя неподвижными асимптотами.

Нижней асимптотой рационально сделать нулевую концентрацию загрязняющего вещества, а верхней — максимальную фактически зафиксированную из всех измерений.

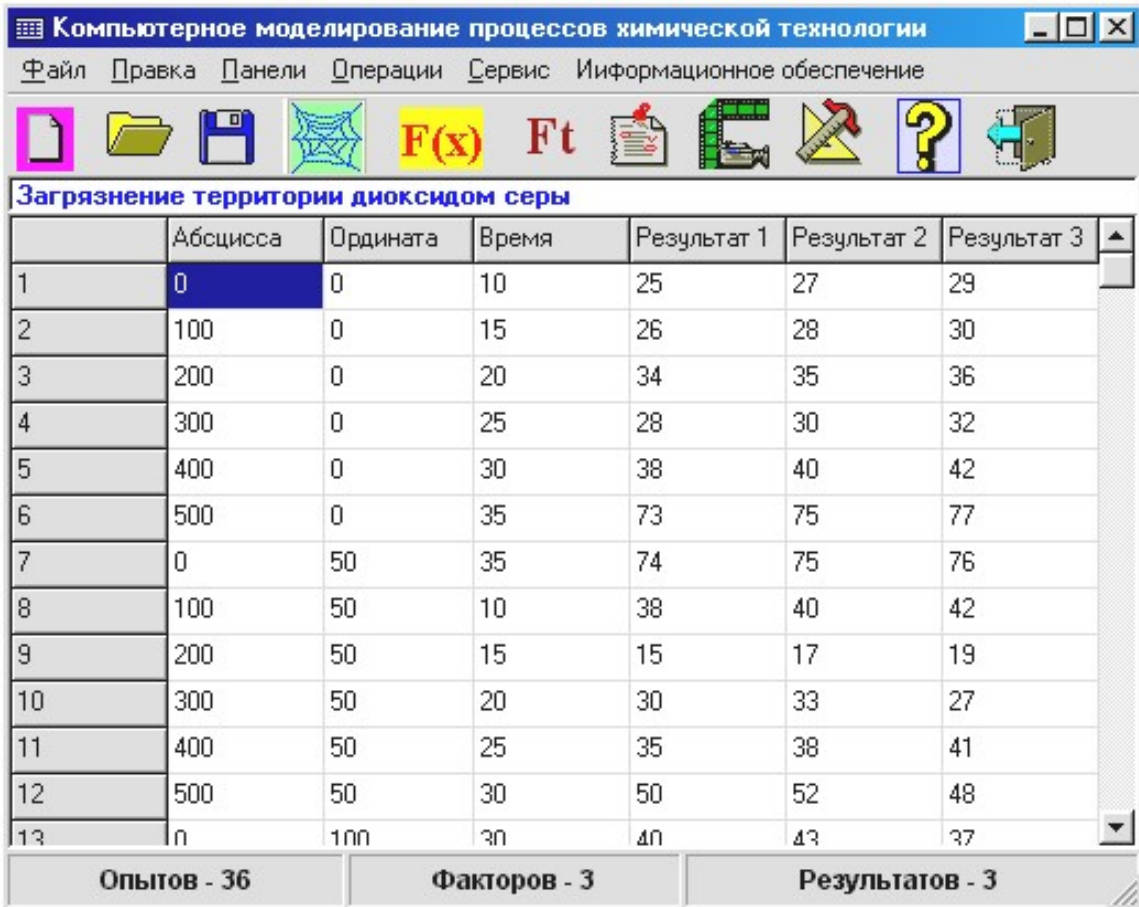
Для примера выбраны три фактора:

f_1 — абсцисса поста наблюдения;

f_2 — ордината поста наблюдения;

f_3 — время измерения показателя качества воздуха.

После того как были выбраны границы факторного пространства и число уровней варьирования факторов, формируется информационная сеть, фрагменты которой изображены в окне рабочего интерфейса (рис. 66).




The screenshot shows a software window titled "Компьютерное моделирование процессов химической технологии". The menu bar includes "Файл", "Правка", "Панели", "Операции", "Сервис", and "Информационное обеспечение". The toolbar contains icons for file operations, a network diagram, a function $F(x)$, a function Ft , a document, a 3D model, a ruler, a question mark, and a folder. The main window displays a table titled "Загрязнение территории диоксидом серы" with the following data:

	Абсцисса	Ордината	Время	Результат 1	Результат 2	Результат 3
1	0	0	10	25	27	29
2	100	0	15	26	28	30
3	200	0	20	34	35	36
4	300	0	25	28	30	32
5	400	0	30	38	40	42
6	500	0	35	73	75	77
7	0	50	35	74	75	76
8	100	50	10	38	40	42
9	200	50	15	15	17	19
10	300	50	20	30	33	27
11	400	50	25	35	38	41
12	500	50	30	50	52	48
13	n	100	30	40	43	37

At the bottom of the window, there are three summary boxes: "Опытов - 36", "Факторов - 3", and "Результатов - 3".

Рис. 66. Фрагмент информационной сети и таблично заданной функции в окне рабочего интерфейса программного модуля «ModelBuilder»

Для аппроксимации опытных данных наилучшим оказался полином 4-го порядка, двумерные сечения, полученные с его помощью, представлены на рис. 67.

И с помощью тех же окон можно получить файл анимации с расширением *.avi, и по кнопке  вызвать на экран видео-

фильм, который можно демонстрировать целиком или в покадровом режиме (рис. 68).

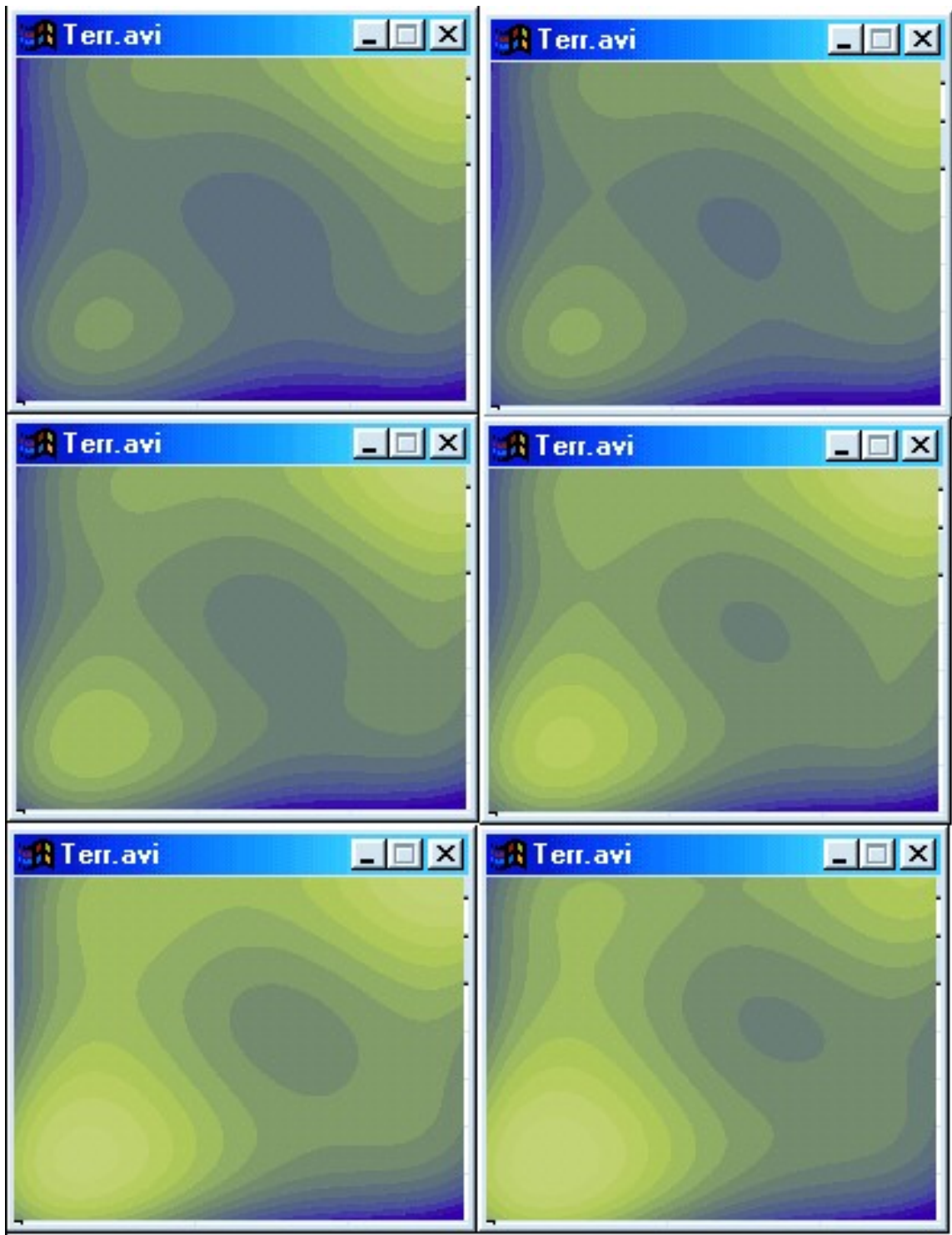


Рис. 67. Двумерные сечения поверхности отклика для разных значений фактора f_3 в координатах $f_1 - f_2$

Рис. 68. Окно программного модуля, подготовленное для демонстрации видеofilьма об изменениях поверхности отклика при различных значениях f_3

4.2. ГРАФИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Сложность химико-технологических систем, многомерность их как по количеству составляющих элементов, так и по числу выполняемых ими функций, высокая степень взаимосвязанности и параметрического взаимовлияния обуславливают возникновение при анализе и синтезе ряда принципиальных трудностей исследовательского, методологического и вычислительного характера.

Методы топологического анализа систем позволяют формальным образом устанавливать функциональную связь между технологической топологией и материальными и тепловыми нагрузками на элементы.

Топологический метод анализа основан на рассмотрении математических иконографических моделей систем, которыми являются потоковые и структурные графы, информационные, информационно-

потоковые и сигнальные мультиграфы. Применение топологических моделей позволяет большой объем существенной информации представить в компактной и наглядной форме; графические модели переводить в цифровой вид, пригодный для расчетов на ЭВМ.

4.2.1. Классификация топологических моделей химико-технологических систем

К первому классу топологических моделей относятся потоковые и структурные графы. Эти графы дают возможность устанавливать непосредственную связь между структурой и количественными характеристиками химико-технологических систем.

Ко второму классу топологических моделей принадлежат информационные и информационно-потоковые мультиграфы. Эти графы отображают характеристические особенности символических математических моделей и позволяют разрабатывать оптимальную стратегию исследования химико-технологических систем.

К третьему классу топологических моделей относятся сигнальные графы, которые графически изображают функциональные связи между переменными символических математических моделей химико-технологических систем. Сигнальные графы можно применять для определения динамических и статических характеристик систем, а также для оценки устойчивости функционирования химико-технологических систем.

4.2.2. Основные понятия и определения теории графов

Для определения графа необходимо два компонента – множество X , состоящее из элементов, и закон, позволяющий устанавливать соответствие T между каждым элементом множества X и некоторыми из его подмножеств.

Две математические величины — множество X и соответствие T определяют граф G , обозначаемый $G = (X, T)$. Элементы множества X изображаются точками и называются вершинами графа, а соответствие T — отрезками (иногда направленными), соединяющими элементы, называемыми ребрами или дугами графа. Две точки X_i и X_j называются смежными, если они определяют ребро или дугу графа.

С каждой неизолированной вершиной i графа G связано одно или несколько ребер (дуг). Эти ребра (дуги) называют инцидентными вершине i .

Две различные дуги смежны, если они имеют одну общую вершину.

Последовательность дуг, при которой конец одной дуги является началом другой, называется *путем*. Путь, в котором никакая вершина дважды не встречается, называется элементарным.

Если начальная и конечная точки пути совпадают, образуется *контур*.

Петлей называется контур единичной длины. Петля связывает точку саму с собой.

Последовательность ребер образует *цепь*. Замкнутая цепь образует *цикл*.

Понятия ребра, цепи и цикла отличаются от понятий дуги, пути и контура только тем, что для последних принимается во внимание направление (ориентация).

Граф является не геометрической, а топологической фигурой. Последней называют такую фигуру, определенные свойства которой инвариантны при взаимнонепрерывном и взаимнооднозначном пространственном преобразовании. Существенные инвариантные свойства графа отражают только число вершин, число ребер (дуг) и характер связи между вершинами. Так как граф является фигурой топологической, то один и тот же граф может быть изображен различными способами: вершины можно располагать в произвольном порядке, а соединяющие их ребра (дуги) проводить в виде прямых, кривых или ломаных линий. Независимо от способа изображения информация, содержащаяся в графе, остается одной и той же.

Два графа называются изоморфными, если они имеют одинаковое число вершин, и если каждой паре вершин, соединенных ребром в одном графе, соответствует такая же пара вершин, которые соединены ребром в другом графе.

Получение графа, изоморфного некоторому исходному, можно наглядно представить, изобразив этот исходный граф на упругой поверхности, например, на листе резины. Какой бы деформации без разрушения не подвергалась поверхность листа резины, изображенный на ней граф не претерпит топологических изменений.

Число ребер, инцидентных некоторой вершине i , называется степенью вершины и обозначается $\rho(i)$.

У ориентированного графа можно выделить дуги, входящие в некоторую вершину i , и выходящие из нее.

Информация, содержащаяся в графе, может быть представлена в виде матрицы.

Эта связь матрицы и графа имеет чрезвычайно важное значение при практическом применении топологических методов к математическому описанию химико-технологических систем, так как позволяет перевести структурные особенности системы на язык чисел, обрабатываемых компьютером.

4.2.3. Матричная форма графа

Матрицей смежности, соответствующей графу $G = (X, Y)$, который состоит из n вершин $x_i (i = 1, 2, \dots, n)$, называется матрица H порядка $(n \times n)$ с элементами:

$$h_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{если вершина } x_i \text{ не связана ребром с вершиной } x_j; \\ 1, & \text{если вершина } x_i \text{ связана ребром с вершиной } x_j. \end{cases} \quad (4.21)$$

Матрицей инцидентий, соответствующей графу $G = (k, q)$, который состоит из n вершин $k_i (i = 1, 2, \dots, n)$ и из дуг $q_j (j = 1, 2, \dots, m)$, называется матрица S порядка $(n \times m)$ с элементами

$$s_{ij} = \begin{cases} -1, & \text{если дуга } q_j \text{ выходит из вершины } k_i; \\ +1, & \text{если дуга } q_j \text{ входит в вершину } k_i; \\ 0, & \text{если дуга } q_j \text{ не инцидентна вершине } k_i. \end{cases} \quad (4.22)$$

Матрицу S называют также структурной матрицей графа.

4.2.4. Характеристика и принципы построения топологических моделей химико-технологических систем

Потоковый граф, гомоморфный рассматриваемой системе и являющийся ее топологической моделью, можно поставить в соответствие любому производственному объекту. *Потоковые графы существуют только для установившихся равновесных технологических режимов.*

Потоковые графы бывают материальные, тепловые (энергетические) и параметрические.

Материальные потоковые графы подразделены на графы по общему массовому расходу физических потоков и графы компонентов этих потоков.

Вершины материальных потоковых графов соответствуют элементам химико-технологических систем, которые выступают в качестве источников и стоков веществ физических потоков. Дуги этих графов отвечают обобщенным материальным потокам.

Основные характерные особенности материальных потоковых графов:

- ориентированность, так как движение потоков веществ и энергии в системе происходит в строго определенном направлении;
- асимметричность, потому что не все соседние элементы системы связаны между собой обратными технологическими связями;
- связность, так как все элементы в системе взаимосвязаны единой цепью потоков веществ и энергии.

В общем случае материальный или тепловой потоковый граф содержит m вершин-источников, n вершин-стоков, k промежуточных вершин, соответствующих элементам системы, и e дуг, которые отвечают обобщенным материальным или тепловым потокам.

Для каждой промежуточной вершины материального или теплового потокового графа на основе законов сохранения массы и энергии можно записать уравнения вершин для потоков по дугам графа:

$$\sum_{j=1}^e W_{jk} = 0; \quad (4.23)$$

$$\sum_{i=1}^p W_{ik} - \sum_{j=1}^{(e-p)} W_{kj} = 0, \quad (4.24)$$

где p — число дуг, входящих в k -ю вершину; W_{jk} — потоки по j -й дуге графа, инцидентной k -й вершине; W_{ik} — поток по i -й дуге, входящий в k -ю вершину; W_{kj} — поток по j -й дуге, выходящий из k -й вершины графа.

Совокупность уравнений вершин для потоков по дугам графа, которые составлены для всех промежуточных вершин, образуют систему независимых уравнений вершин потокового графа:

$$[A^*]^* [W^*] = 0, \quad (4.25)$$

где $[W^*]$ — матрица-столбец потоков по всем дугам графа, порядок которой равен $(e \times 1)$; $[A^*]$ — матрица инциденций графа, порядок которой равен $(k \times e)$.

На основе законов сохранения массы и энергии для всей системы в целом можно записать общее уравнение вершин-источников и вершин-стоков материального или теплового графа:

$$\sum_m W_m(b) - \sum_n W_n(c) = 0, \quad (4.26)$$

где $W_m(b)$ — поток по b -й дуге, инцидентной m -й вершине-источнику; $W_n(c)$ — поток по c -й дуге, инцидентной n -й вершине-стоку; m — число вершин-источников; n — число вершин-стоков.

Мультиграфом называется такой граф, в котором одна и та же пара вершин может соединяться более чем одним ребром.

Информационная связь моделей отдельных элементов между собой осуществляется через информационные потоки. Вершины информационно-потокowego мультиграфа соответствуют информационным операторам элементов, источникам и приемникам информационных переменных системы. Ветви мультиграфа отображают информационные потоки свободных и базисных переменных.

4.2.5. Программный модуль «GrafBuilder»

4.2.5.1. Назначение и области использования программного модуля. Программный модуль предназначен для анализа химико-технологических систем с помощью теории графов.

4.2.5.2. Функциональные возможности программного модуля. Тренажер позволяет сформировать и формализовать в виде потокowego графа иконографическую модель химико-технологической системы любой сложности, графическую информацию перевести в матричную форму.

На основании структурной матрицы графа формируется расширенная матрица с приведенным единственным вектор-столбцом известных величин и решается система нормальных алгебраических уравнений относительно неизвестных потоков.

4.2.5.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

<i>GrafBuilder.exe</i>	Главный исполняемый файл тренажера
<i>Graf.grf</i>	Файл данных для расчета рабочего примера
<i>Graf.hlp</i>	Файл помощи
<i>Graf.cnt</i>	Файл оглавления

4.2.5.4. Рабочий интерфейс и структура программного модуля

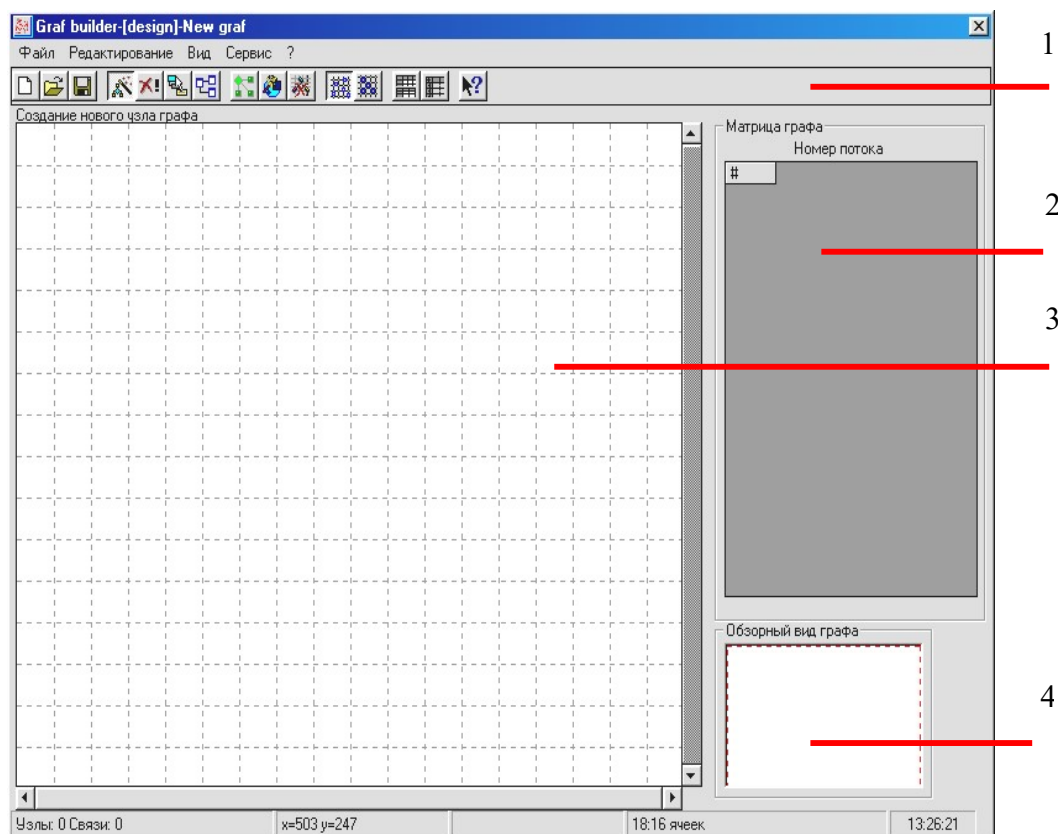


Рис. 69. Рабочий интерфейс программного модуля:

(1 — панель инструментов; 2 — окно структурной матрицы графа; 3 — планшет для формирования вершин и дуг графа; 4 — обзорный вид графа)

Пиктограммы панели инструментов














Создать новую модель химико-технологической системы



Открыть созданную ранее иконографическую модель



Сохранить созданную иконографическую модель

	Поместить на планшет новую вершину графа
	Удалить с планшета отмеченную вершину графа
	Переместить отмеченную вершину графа
	Изменить свойства вершины графа
	Создать новую дугу графа
	Задать (изменить) свойства дуги графа
	Удалить дугу графа
	Показать сетку
	Выравнить по сетке вершины графа
	Характеристика вершин и дуг графа
	Структурная матрица графа

4.2.5.5. Запуск и управление работой программного модуля. При создании новой иконографической модели запуск тренажера в работу начинается с активирования пиктограммы «Поместить на планшет новую вершину графа» на панели инструментов.



Поместить на планшет новую вершину графа

Размещение вершин графа осуществляется по местам расположения курсора нажатием ЛКМ.

Соединение вершин дугами осуществляется перемещением курсора при нажатой ЛКМ и активированной пиктограмме «Создать новую дугу графа» на панели инструментов.



Создать новую дугу графа

Информацию о потоках записывают в появившееся диалоговое окно (рис. 70) после активирования пиктограммы



Задать (изменить) свойства дуги графа

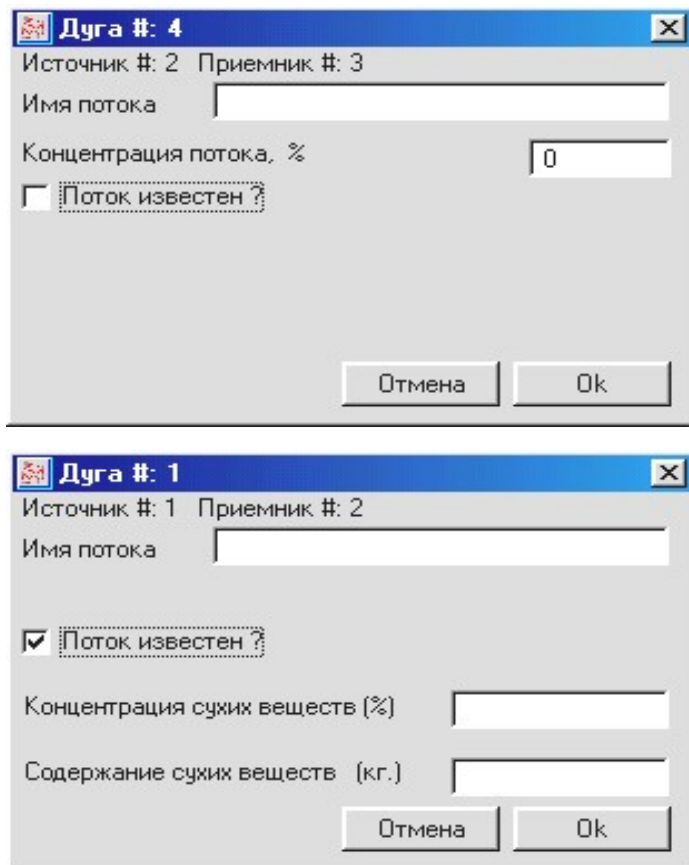


Рис. 70. Окно для ввода информации о свойствах потоков графа

При необходимости потоки можно поименовать.

Если поток неизвестен, то вводится только значение его концентрации.

Если поток известен, то необходимо ввести содержание и концентрацию сухих веществ в этом потоке.

Если две вершины (7 и 4) должны связывать две дуги, направленные в одну сторону (например, 5 и 13), то необходимо добавить еще одну вершину (8). Две дуги (13 и 14), инцидентные новой вершине, должны быть равны между собой (рис. 71).

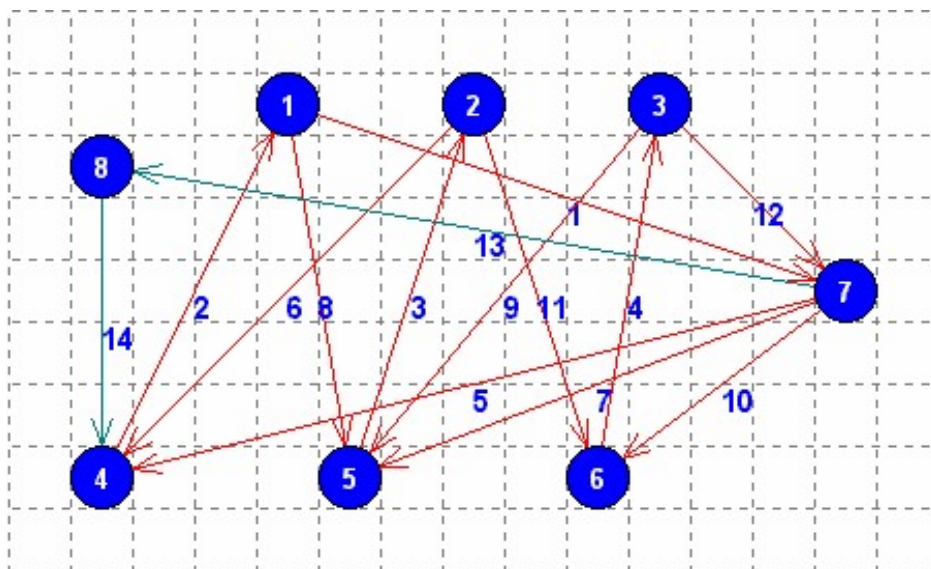


Рис. 71. Добавление псевдовершины

Матрица графа

Номер потока

#	#12	#13	Поступ	Изв.
1				
1Ch.				
2				
2Ch.				
3	-1			
3Ch.	-0.37			
4			3538.46	
4Ch.			3000.00	
5				
5Ch.				
6				
6Ch.				
7	+1	3538.46		
7Ch.	0.37	3000.00		
8			3538.46	
8Ch.			3000.00	

Структурная матрица графа

Номер (название) потока

#	#7	#8	#9	#10	#11	#12	Изв.
1		-1					
1Ch.		-0.77					
2					-1		
2Ch.					-0.57		
3			-1			-1	
3Ch.			-0.27			-0.37	
4							-13538.46
4Ch.							-88000.00
5	+1	+1					
5Ch.	0.02	0.77	0.27				
6				+1			
6Ch.				0.02	0.57		
7	-1				-1	+1	13538.46
7Ch.	-0.02				-0.02	0.37	88000.00
8							0.00
8Ch.							0.00

Нажмите кнопку "Преобразовать", чтобы сформировать вектор-столбец известных величин

Преобразовать Найти решение OK

Рис. 72. Столбцы известных величин в структурной матрице графа и приведенный столбец известных величин

В анализируемой химико-технологической системе может быть несколько известных потоков. Чтобы решить систему нормальных линейных уравнений, необходимо чтобы в матрице был единственный столбец известных величин. Поэтому все известные потоки нужно объединить и сосредоточить их в последнем правом столбце, полагая, что он будет за всеми построчными знаками равенств (рис. 72).

Достигается это активированием пиктограммы



Структурная матрица графа (рис. 73)

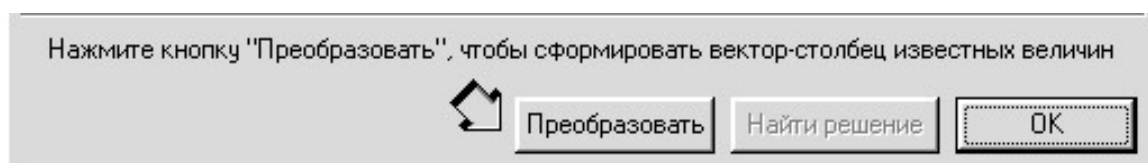


Рис. 73. Диалоговое окно «Структурная матрица графа»

и нажатием кнопки «Преобразовать» в окне «Структурная матрица графа».

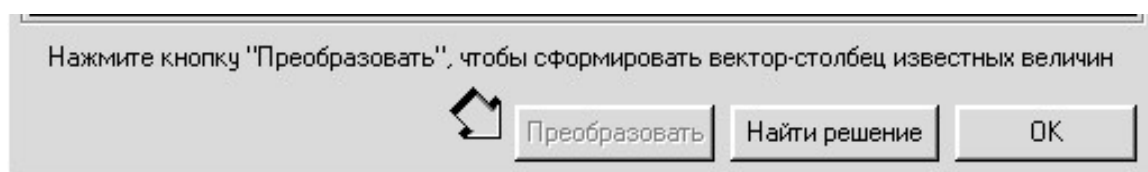


Рис. 74. Диалоговое окно «Структурная матрица графа» после формирования вектора-столбца известных величин

Решение задачи осуществляется нажатием кнопки «Найти решение» (рис. 74).

4.2.5.6. Описание рабочего примера. В качестве рабочего примера предлагается рассмотреть трехступенчатую схему очистки суспензии волокнистых отходов на вихревых очистителях (рисю 75–77).

Возможность создания различных условий очистки и получения разных результатов на однотипном оборудовании обеспечивается различной степенью разбавления суспензии.

Очищенную массу можно разделить по сортам после каждой ступени, однако рациональнее организовать очистку с использованием рециркуляции. Замкнутые химико-технологические системы постадийно не рассчитываются вообще. Поэтому расчет мгновенных материальных балансов систем, рассматриваемых как единое целое, с помощью потоковых графов представляет теоретический и практический интерес (табл. 49).

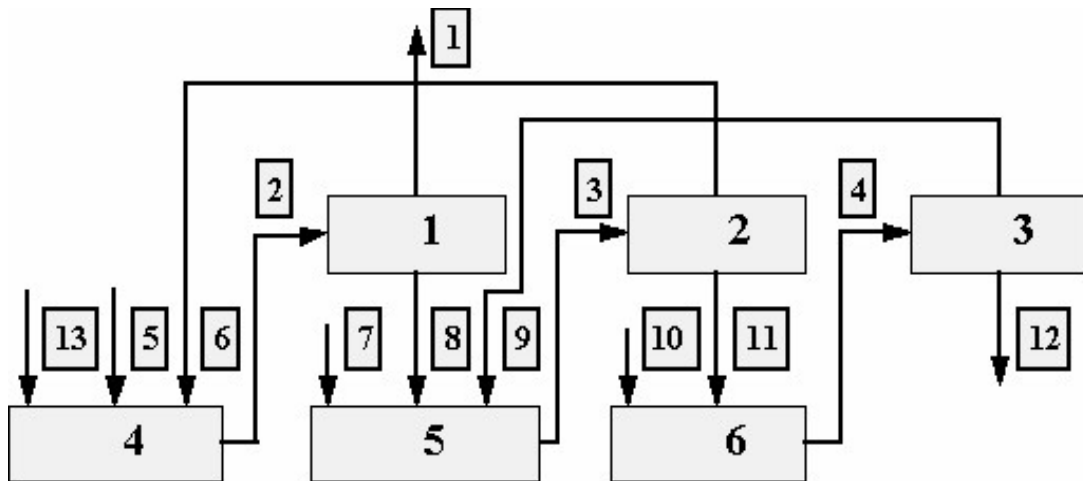


Рис. 75. Структурная блок-схема трехступенчатой очистки суспензии волокнистых отходов на вихревых очистителях

Вершины: 1, 2, 3 — ступени очистки макулатурной массы;

4, 5, 6 — сборники отходов.

Дуги: 1 — очищенная масса; 2, 3, 4 — потоки массы на I, II, III ступень очистки;

5, 7, 10 — потоки воды на разбавление перед каждой ступенью очистки

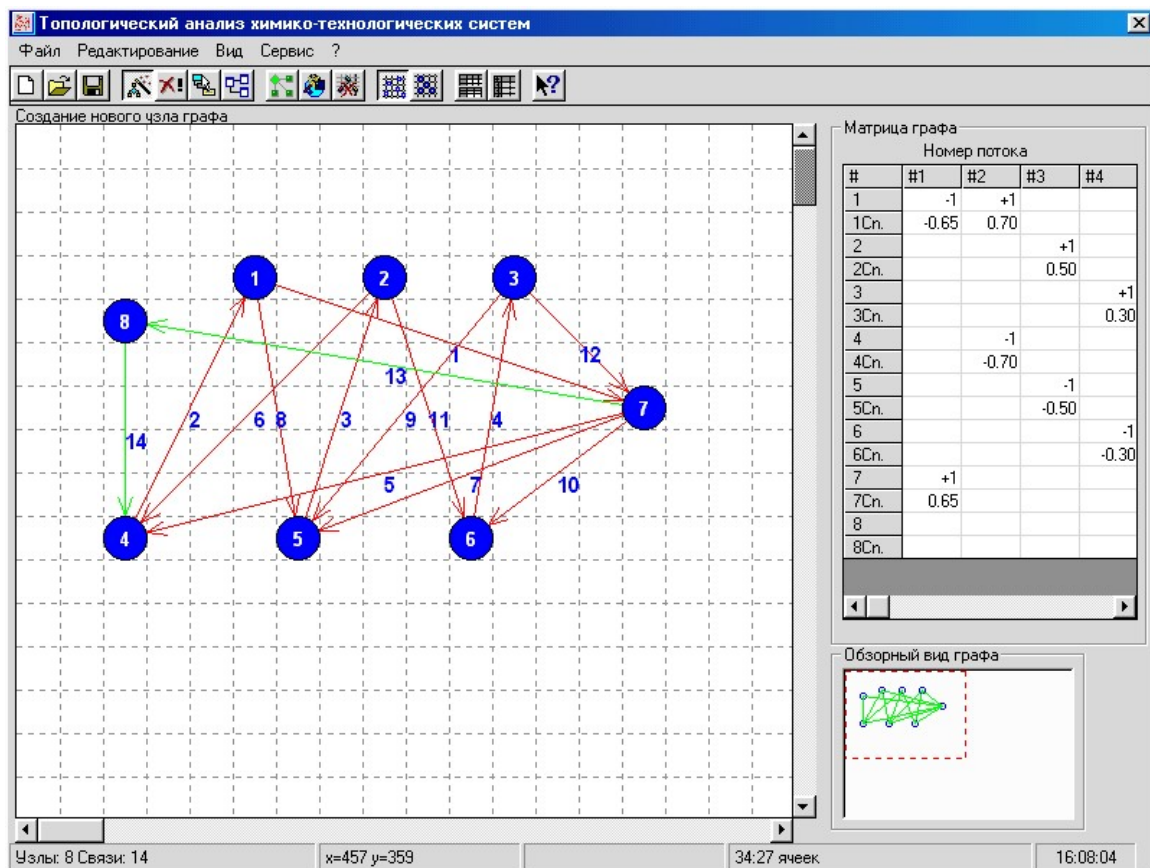


Рис. 76. Поточный граф, гомоморфный технологической схеме очистки

Структурная матрица технологической системы

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1	-1	+1	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0
2	-k1	k2	0	0	0	0	0	-k8	0	0	0	0	0
3	0	0	+1	0	0	-1	0	0	0	0	-1	0	0
4	0	0	k3	0	0	-k6	0	0	0	0	-k11	0	0
5	0	0	0	+1	0	0	0	0	-1	0	0	-1	0
6	0	0	0	k4	0	0	0	0	-k9	0	0	-k12	0
7	0	-1	0	0	+1	+1	0	0	0	0	0	0	-Q
8	0	-k2	0	0	k5	k6	0	0	0	0	0	0	-Q*k13
9	0	0	-1	0	0	0	+1	+1	+1	0	0	0	0
10	0	0	-k3	0	0	0	k7	k8	k9	0	0	0	0
11	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	+1	+1	0	0
12	0	0	0	-k4	0	0	0	0	0	k10	k11	0	0
13	-1	0	0	0	+1	0	+1	0	0	+1	0	-1	-Q
14	-k1	0	0	0	k5	0	k7	0	0	k10	0	-k12	-Q*k13

Структурная матрица графа

Структурная матрица графа

Номер (название) потока

Поток №	Общая масса (кг)	Сухие (кг)	Вода (кг)	Концентрация (%)
1	122 191,700	794,246	121 397,400	0,650
2	209 464,800	1 466,254	207 998,600	0,700
3	173 677,000	868,385	172 808,600	0,500
4	102 350,500	307,052	102 043,500	0,300
5	74 355,380	14,871	74 340,510	0,020
6	121 571,000	571,384	120 999,600	0,470
7	14 763,340	2,953	14 760,390	0,020
8	87 273,340	672,005	86 601,340	0,770
9	71 640,240	193,429	71 446,810	0,270
10	50 244,640	10,049	50 234,590	0,020
11	52 105,850	297,003	51 808,850	0,570
12	30 710,130	113,628	30 596,500	0,370
13	13 538,460	880,000	12 658,460	6,500
14	13 538,460	880,000	12 658,460	6,500

Нажмите кнопку "Преобразовать", чтобы сформировать вектор-столбец известных величин

Преобразовать Найти решение ОК

Рис. 77. Решение задачи в виде таблицы потоков по общей массе и содержания в них сухих веществ и воды

4.2.5.7. Рекомендации по использованию программного модуля.

Необходимо помнить, что в процессе работы при реальных обстоятельствах когерентной технологической системы изменение концентрации одного потока приведет к закономерному изменению (подстройке) всех остальных потоков. Вычислительный эксперимент на тренажере не имеет свойств гибкого реагирования всех потоков на изменение условий работы одного. Поэтому успешное использование тренажера может быть обеспечено в тех случаях, когда концентрации потоков измеряются непосредственно на действующем оборудовании при достижении статистически равновесного установившегося стабильного состояния всей системы.

4.3. КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И РЕАКТОРЫ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

4.3.1. Построение кинетических моделей

Для простых реакций установление кинетических уравнений и расчет констант этих уравнений не представляют особых затруднений. При сложных реакциях и, соответственно, сложных уравнениях с большим числом коэффициентов расчет становится трудоемким, а нередко и невозможным без применения вычислительных машин.

На первом этапе собирают информацию о процессе (например, фиксируют изменение концентрации исходного вещества во времени), а также анализируют имеющиеся теоретические обобщения. На втором этапе последовательно строят гипотезы о вероятном механизме реакции, исходя из теоретических и экспериментальных сведений о процессе. На третьем и четвертом этапах составляют кинетические уравнения, описывающие выбранный механизм реакции, и каким-либо способом определяют значения констант скоростей реакций, которые являются коэффициентами указанных уравнений. Затем по уравнениям находят расчетные кинетические кривые или вычисляют значения кинетических характеристик, соответствующих условиям, при которых проводились эксперименты на первом этапе.

Содержанием пятого, заключительного, этапа является проверка принятой гипотезы о механизме реакции. С этой целью сравнивают расчетные и экспериментальные данные, полученные на четвертом

и первом этапах для одних и тех же условий. Если результаты сравнения неудовлетворительные, т. е. расхождения между расчетными и экспериментальными данными недопустимо велики, то следует вернуться ко второму этапу (выбрать новую гипотезу) и повторять решение задачи до тех пор, пока не будет значимых расхождений между расчетными и экспериментальными данными. Выбор удачной гипотезы зависит как от количества и качества теоретической и экспериментальной информации, так и от опыта исследователя.

Наиболее сложным является четвертый этап, поскольку при определении константы скорости реакции нередко возникают существенные трудности. В настоящее время известны различные методы установления этого важного параметра, основанные на сочетании эксперимента и теории, которые применяются для нахождения констант скоростей реакций соответствующего типа.

4.3.2. Сравнение химических реакторов идеального перемешивания и идеального вытеснения

Сравнение химических реакторов можно проводить различными методами. В частности, с этой целью удобно выбрать какой-либо параметр, который определяет работу и экономичность реактора, и оценить значение этого параметра для рассматриваемых типов реакторов.

В качестве такого параметра чаще всего используют время пребывания τ или другую подобную характеристику.

Для сложных, а также для простых неэлементарных реакций время пребывания реагентов в химическом реакторе идеального перемешивания ($\tau_{\text{П}}$) и в химическом реакторе идеального вытеснения ($\tau_{\text{В}}$) неодинаково.

Характер зависимости между $\tau_{\text{П}}$ и $\tau_{\text{В}}$ проиллюстрируем на примере химических реакторов идеального перемешивания и идеального вытеснения, в которых при одинаковых изотермических условиях и постоянном объеме протекает простая элементарная реакция первого порядка типа $A \xrightarrow{k} S$. С этой целью установим зависимость величины $\tau_{\text{П}}/\tau_{\text{В}}$ от степени превращения X_A и проанализируем ее.

Для простой элементарной реакции типа $A \xrightarrow{k} S$ время пребывания реагентов в реакторах идеального перемешивания и идеального вытеснения выражается соответственно формулами (4.27) и (4.28):

$$\frac{\tau_{\Pi}}{\tau_{\text{В}}} = \frac{X_A}{(1 - X_A) \cdot \ln(1 - X_A)}. \quad (4.27)$$

Для вычисления значения $y = \tau_{\Pi} / \tau_{\text{В}}$ при $X_A = 0$ следует раскрыть неопределенность $0/0$ по правилу Лопиталья. Функция $y(X_A)$ — непрерывна и ограничена (X_A изменяется от 0 до 1). Такая функция имеет предел:

$$y(0) = \lim_{X_A \rightarrow 0} \frac{X_A}{(1 - X_A) \cdot \ln(1 - X_A)}. \quad (4.28)$$

Тогда

$$\begin{aligned} y(0) &= - \lim_{X_A \rightarrow 0} \frac{1}{-\ln(X_A) - (1 - X_A) \frac{1}{1 - X_A}} = \\ &= \frac{1}{\lim_{X_A \rightarrow 0} [\ln(1 - X_A) + 1]} = 1. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Время пребывания в реакторе идеального перемешивания (τ_{Π}) всегда больше, чем в реакторе идеального вытеснения ($\tau_{\text{В}}$). При этом чем выше степень превращения X_A , тем τ_{Π} больше отличается от $\tau_{\text{В}}$.

Поскольку время пребывания прямо пропорционально объему аппарата, то необходимый объем реактора идеального перемешивания всегда больше объема реактора идеального вытеснения. При равных объемах степень превращения X_A в реакторе идеального вытеснения достигает больших значений, чем в реакторе идеального перемешивания. Следует отметить, что отношение объемов реакторов увеличивается с повышением порядка реакции.

Однако некоторые реакторы идеального перемешивания достаточно широко применяются в химической технологии, особенно в виде каскадов реакторов. Это объясняется, прежде всего, простотой их изготовления, легкостью регулирования температуры, доступностью узлов аппарата, что облегчает очистку внутренних поверхностей. Последнее имеет большое значение при проведении реакций, протекающих с образованием отложений твердого вещества, например, при полимеризации и при реакциях, сопровождающихся смолообразованием.

По указанным причинам реакторы перемешивания обычно используют для непрерывных процессов сульфирования, титрования, полимеризации и др. Эти реакторы широко применяются в промышленности органического синтеза, при производстве пластических масс, взрывчатых веществ, синтетического каучука и т. п. Реакторы перемешивания применяют также там, где перемешивание предусматривается технологией, например для обеспечения диспергирования газовых пузырей или твердых частиц в жидкой фазе или диспергирования капель одной жидкости в другой (нитрование бензола или толуола).

Реакторы вытеснения широко используются для проведения гетерогенных каталитических реакций (например, синтеза аммиака, метанола, винилацетата, высших спиртов; окисления оксида серы, этилена, метанола, нафталина; конверсии метана, оксида углерода). В этом случае их наполняют зернами твердого катализатора и часто называют реакторами с неподвижным слоем твердых частиц.

4.3.3. Математическая модель каскада реакторов идеального перемешивания

В промышленной практике по технологическим соображениям нередко требуется обеспечить полное перемешивание и такую степень завершения процесса, которую в единичном реакторе достигнуть невозможно. В подобных случаях используют цепочку последовательно соединенных реакторов идеального перемешивания, или каскад реакторов.

Каскады реакторов широко применяются в химической технологии, в частности, для окисления SO_2 в SO_3 , хлорирования бензола и т. п. В промышленном исполнении каскады реакторов могут быть также в виде секционных аппаратов (например, при конверсии окиси углерода, окислении SO_2 в SO_3 , синтезе метанола, синтезе аммиака).

Изменение концентрации в каскаде реакторов (от начальной C_{A0} до C_{An}) удобно интерпретировать графически, как показано на рис. 78. Каждый реактор каскада представляет собой одну ступень изменения концентрации, так как концентрация в любом реакторе последовательной цепочки изменяется скачком (мгновенное распределение по всему реакционному объему).

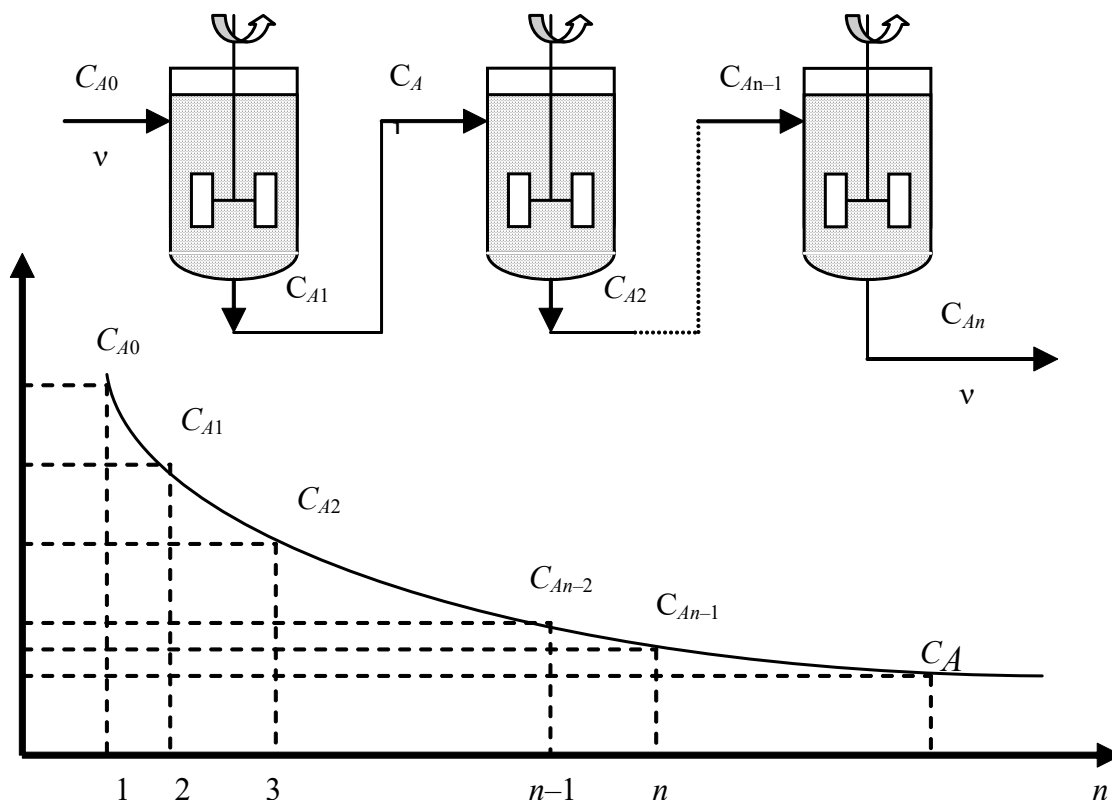


Рис. 78. График изменения концентрации в каскаде реакторов: n — число реакторов в каскаде (количество ступеней изменения концентрации); $C_{A_{i-1}}$, C_{A_i} — соответственно концентрации на выходе каждого реактора

Если соединить вершины ступеней (точки, соответствующие концентрациям на входе реакторов цепочки), то получим кривую, которая в пределе стремится к экспоненте, т. е. к кривой, характеризующей изменение концентрации в реакторе идеального вытеснения. Чем больше ступеней изменения концентрации (или чем больше аппаратов в цепочке), тем каскад реакторов ближе к режиму реактора полного вытеснения. Последнее послужило основанием рассматривать трубчатый реактор идеального вытеснения как цепочку большого числа проточных реакторов полного перемешивания того же самого суммарного объема (конструктивно — это секционные аппараты).

4.3.4. Алгебраический метод расчета каскада реакторов

Метод дает возможность определить концентрацию исходного вещества C_{A_n} на выходе последнего реактора или степень завершенности процесса (степень превращения X_{A_n}) при выбранном количе-

стве реакторов n либо найти число реакторов n , если известная степень превращения X_{An} или конечная концентрация C_{An} . При этом за основу выбирается модель идеального перемешивания, в которой скорость химического превращения $\omega_{rA} = f(C_A)$ определяется механизмом и порядком реакции. Кроме того, принимается, что питание каскада постоянно и реакционные объемы всех реакторов равны, т. е. время пребывания в каждом из них одинаково: $\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau/n$, поэтому для 1-го реактора

$$\tau_1 = \frac{C_{A_0} - C_{A_1}}{\omega_{rA_1}}; \quad (4.30)$$

для 2-го реактора

$$\tau_2 = \tau_1 \frac{C_{A_1} - C_{A_2}}{\omega_{rA_2}}; \quad (4.31)$$

для i -го реактора

$$\tau_i = \tau_1 \frac{C_{A_{i-1}} - C_{A_i}}{\omega_{rA_i}}; \quad (4.32)$$

для n -го реактора

$$\tau_n = \tau_1 \frac{C_{A_{n-1}} - C_{A_{\dots n}}}{\omega_{rA_n}}. \quad (4.33)$$

Если механизм и порядок реакции известны и, следовательно, скорость реакции ω_{rA_i} может быть определена (например, как функция C_{A_i}), то

$$C_{A_{i-1}} = C_{A_i} + \tau_1 \cdot \omega_{rA_i}, \quad (4.34)$$

где $i = 1, 2, 3, \dots, n$.

При протекании в изотермических условиях простой реакции первого порядка, скорость которой в любом реакторе каскада будет $\omega_{rA_i} = k \cdot C_{A_i}$ уравнение (4.34) для i -го реактора примет вид

$$C_{A_i} = \frac{C_{A_{i-1}}}{1 + k\tau_1}. \quad (4.35)$$

В соответствии с формулой (4.35) найдем выражения для концентраций:

в 1-м реакторе

$$C_{A_1} = \frac{C_{A_0}}{1 + k\tau_1}; \quad (4.36)$$

во 2-м реакторе

$$C_{A_2} = \frac{C_{A_1}}{1 + k\tau_1} = \frac{C_{A_0}}{(1 + k\tau_1)^2}; \quad (4.37)$$

.....

в n -м реакторе

$$C_{A_n} = \frac{C_{A_0}}{(1 + k\tau_1)^n}. \quad (4.38)$$

По формуле (4.38) можно рассчитать степень завершенности процесса в каскаде реакторов или конечную концентрацию C_{A_n} . При заданном числе реакторов n .

Если объемы реакторов разные и время пребывания $\tau_i \neq \tau_1$, то в формуле (4.38) знаменатель нужно заменить произведением

$$(1 + k\tau_1)(1 + k\tau_2)\dots(1 + k\tau_n).$$

С учетом того, что $C_{A_n} = C_{A_0} \cdot (1 - X_{A_n})$, расчетная формула (4.38) может быть преобразована к виду

$$X_{A_n} = 1 - (1 + k\tau_1)^{-n}. \quad (4.39)$$

Чтобы вычислить требуемое количество реакторов каскада при заданном значении C_{A_n} , следует использовать выражение, которое получается в результате логарифмирования и преобразования уравнения (4.38):

$$n = \frac{\ln \frac{C_{A_0}}{C_{A_n}}}{\ln(1 + k\tau_1)}. \quad (4.40)$$

Итак, расчетные формулы (4.39), (4.40) алгебраического метода для элементарной реакции первого порядка имеют простой вид и дают достаточно точные результаты.

Применение этого метода для простых реакций более высоких порядков, а также для большинства сложных реакций приводит к гро-

моздким расчетным формулам. Однако в настоящее время при наличии вычислительных машин это не является препятствием.

4.3.5. Графические методы расчета каскада реакторов

Методы применяются с целью определения необходимого числа реакторов для достижения требуемой степени завершенности процесса или решения обратной задачи.

Ранее было показано, что для любого i -го реактора каскада математическая модель имеет вид

$$\tau_i = \frac{C_{A_{i-1}} - C_{A_i}}{\omega_{rA_i}}. \quad (4.41)$$

Если реакционные объемы аппаратов каскада равны, т. е. $\tau_i = \tau_1$, то

$$\omega_{rA_i} = \frac{C_{A_{i-1}}}{\tau_i} - \frac{1}{\tau_i} C_{A_i}. \quad (4.42)$$

При известной входной концентрации $C_{A_{i-1}}$ уравнение (4.42) является линейным относительно концентрации на выходе. Графическая интерпретация уравнения (4.42) в координатах ω_{rA} , C_A — это семейство прямых линий с углом наклона α ($\text{tg}\alpha = -1/\tau_1$).

Для первого реактора каскада уравнение (4.42) принимает вид

$$\omega_{rA_1} = \frac{C_{A_0}}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_1} C_{A_1}. \quad (4.43)$$

Две точки прямой (4.43) для первого реактора определяются при $\omega_{rA_1} = 0$ ($C_{A_1} = C_{A_0}$) и при $C_{A_1} = 0$:

$$\omega_{r_1} \frac{C_{A_0}}{\tau_1}. \quad (4.44)$$

Рассматриваемый графический метод предусматривает построение кривой $\omega_r = f(C_A)$ по опытным данным и нанесение на этот же график прямой по двум точкам (рис. 79). Абсцисса точки пересечения прямой (4.35) и кривой $\omega_{rA} = f(C_A)$ определяет значение концентрации C_{A_1} на выходе из первого реактора каскада и на входе во второй. Расчет (графическое построение) повторяют для последующих реакторов каскада до тех пор, пока не будет достигнута требуемая концентрация на выходе C_{A_n} .

При одинаковых объемах реакторов время пребывания в каждом из них равно τ_1 и, следовательно, прямые параллельны. Число точек пересечения прямых с кривой $\omega_{rA} = f(C_A)$ определяет количество реакторов (на рис. 79 точки 1, 2, ...) для достижения требуемой степени завершенности процесса (C_{An}). Если объемы реакторов каскада неодинаковы, то порядок графического расчета остается тот же, только для каждого реактора вычисляется значение $\text{tg}\alpha = -1/\tau_1$, которое определяет наклон соответствующей прямой.

Другой графический метод основан на том, что если скорость реакции ω_{rAi} является функцией концентрации C_{Ai} , то и концентрация C_{Ai-1} также будет функцией C_{Ai} , т. е.

$$C_{A_{i-1}} = C_{A_i} + \tau_1 \cdot \omega_{rA_i} = f(C_{A_i}). \quad (4.45)$$

Значения этой функции графически изображены кривой $C_{A_{i-1}} = f(C_{A_i})$ на рис. 79.

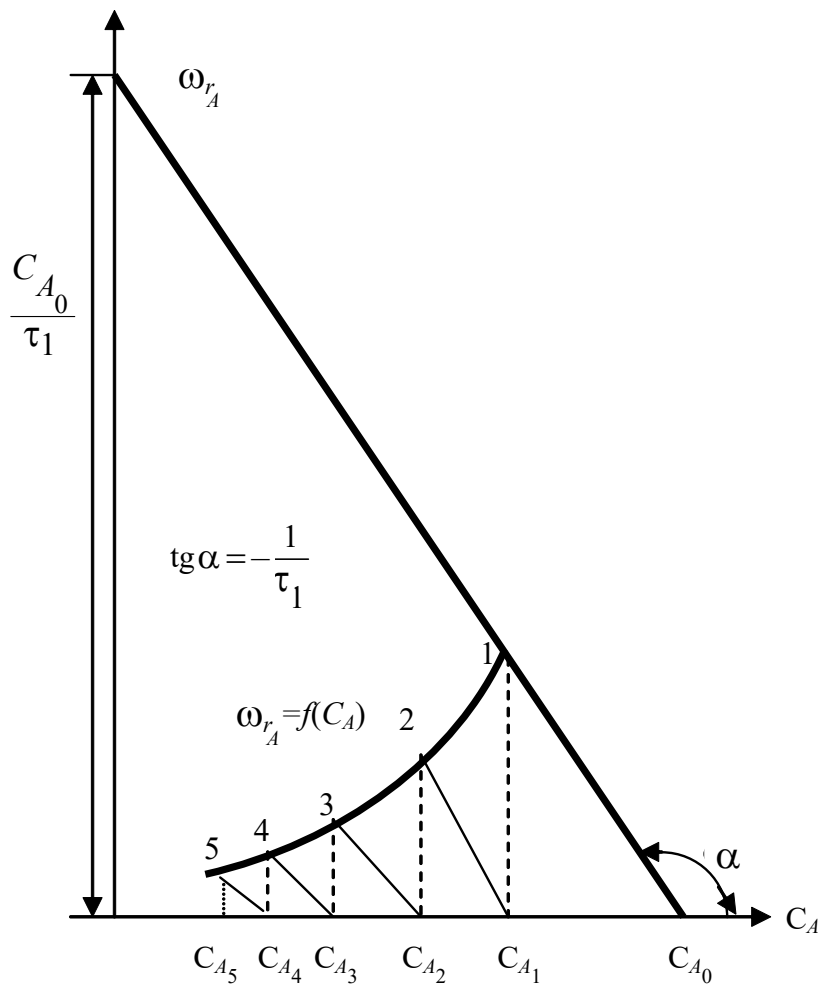


Рис. 79. Графическое определение числа реакторов n в каскаде

Поскольку вытекающий из $(i - 1)$ реактора поток является питанием i -го реактора, то значения входной концентрации $C_{A_{i-1}}$ графически могут быть найдены как ординаты точек пересечения биссектрисы угла координат с перпендикулярными линиями к оси абсцисс, проведенными из соответствующих точек кривой $f(C_{A_i})$. При этом ступени между кривой $f(C_{A_i})$ и биссектрисой отвечают последовательно соединенным реакторам каскада. Таким способом определяют число ступеней (количество реакторов n), необходимое для получения *требуемой конечной концентрации* C_{A_n} при $i = n$ или степени превращения.

$$X_{A_n} = \frac{C_{A_0} - C_{A_n}}{C_{A_0}}. \quad (4.46)$$

4.3.6. Теория рециркуляции и проблемы химической технологии

Идеальным химическим процессом можно назвать такой процесс, при котором кинетические и термодинамические негативные препятствия полностью сняты, причем сняты таким образом, что реакция протекает с максимально возможной скоростью. Это означает, что в данном случае максимально полно используются сырье, объем реактора, время и что реакция начинается и идет до конца в условиях, соответствующих ее максимальной скорости. Только такой процесс может обеспечить максимальную производительность единицы реакторного объема. Чем ближе реальный процесс будет находиться к идеальному, тем совершенней будет он с точки зрения химии и химической технологии.

Например, термодинамическая функция эксергия устанавливает предел возможности практического использования энергетических ресурсов за счет внешнего обмена.

Реализацию идеального процесса первого рода можно представить следующим образом: реакция осуществляется так, что образовавшиеся вещества без промедления удаляются и вместо них в то же мгновение добавляется такое же количество (масса) реагентов в стехиометрических соотношениях.

Процессы с «затухающей» рециркуляцией, т. е. характеризующиеся устанавливающейся мощностью реактора, в значительной степени приближают нас к идеальному процессу, но только к идеальному процессу второго рода, на котором мы остановимся позже.

Только в одном частном случае идеальный реактор второго рода обращается в идеальный реактор первого рода — это случай, когда реакция протекает без побочных образований, реагенты расходуются в эквимольных количествах и процесс ведется в реально установившемся режиме. Правда, возможен еще один случай, но он, строго говоря, нереален. Теоретически возможно свести реактор второго рода к реактору первого рода, если работать с бесконечным питанием реактора и со степенью превращения, близкой к нулю.

Развитие теоретических принципов рециркуляции привело к установлению явления, при котором ни при каких обстоятельствах не достигается установившееся состояние из-за возрастания количеств рециркулянта со скоростью, намного превышающей ее возрастание по обычной экспоненте.

Возрастание количества рециркулянта здесь происходит по экспоненте со сложным аргументом. Этот процесс можно назвать рециркуляционным процессом с «нарастающим» ускорением мощности. Это явление послужило основой для создания принципов осуществления химических процессов в пульсирующем или волновом режиме, вызванном рециркуляцией. Этой технологии суждено, очевидно, сделаться реальной в будущем, намного ближе подойти к идеальному химическому процессу первого рода и, возможно, добиться практически полной реализации его.

Теория рециркуляции для эффективного использования времени требует все реакции осуществлять в пределах кинетической области, т. е. между нулем времени и временем конца реакции. Для максимально эффективного использования реакторного пространства требуется, чтобы оно всегда было заполнено только реагентами, а продукты реакции должны отводиться в то же мгновение, когда они образовались. При этом мы получим максимум продукции с единицы реакторного объема в единицу времени, т. е. доведем до максимума удельную производительность.

Но так как мгновение — это не более, чем абстракция, то естественно, что практически мы будем иметь дело с каким-то интерва-

лом времени. Поэтому надо задать граничные условия, добиться наиболее полного использования времени реакции, объема аппаратуры, сырьевых и энергетических ресурсов. Эти проблемы решает теория рециркуляции.

Обсуждение роли теории рециркуляции в этом аспекте начнем с рассмотрения конкретного вопроса о типах реакторов. Сложность в том, что теоретически можно представить себе бесконечное число химических реакторов, которые, однако, можно свести к пяти типам идеальных реакторов: дискретный реактор идеального смешения (колба без непрерывного питания), реактор идеального смешения, дискретный реактор идеального вытеснения, проточный реактор идеального вытеснения, идеальный реактор первого и второго рода.

Из различных промежуточных типов и их сочетаний состоят все теоретически мыслимые и практически реализованные реакторы.

Рассмотрим самый простой случай — проведение жидкофазной химической реакции в колбе — дискретном реакторе смешения.

Если быть точным, то объемом химического реактора не следует называть весь объем этого аппарата, так как реакция происходит с участием определенной массы реагентов. Поэтому ***реакторным объемом будет объем, занимаемый массой реагирующих компонентов.***

Химические реакции в лабораторных условиях издавна осуществляются в колбах. Для того чтобы создать равные условия протекания реакции во всем объеме реагирующей массы, применяют мешалки, если процесс от начала до конца протекает в одной смешивающейся фазе, например в жидкой фазе. Этим добиваются состояния, при котором концентрация веществ в любой точке реактора в любой момент времени одинакова, что соответствует режиму идеального смешения. Такой тип реактора и называется дискретным реактором смешения.

С развитием работ в области химии появилась необходимость осуществления химических реакций в непрерывно действующих реакторах. Если в дискретных реакторах объем химически реагирующих веществ и время контакта — независимые факторы, то в случае реакций, протекающих в потоке, эти две величины взаимосвязаны. *Увеличение объемной скорости ($\text{см}^3/\text{с}$) при постоянном объеме реа-*

гирующих масс (постоянном объеме реактора) сокращает время контакта, и обратно. Отсюда и возникает новая проблема решения химических задач, учитывающих объем действующих масс (объем реактора) и скорость поступления реактантов. Эти величины однозначно определяют время протекания реакции.

Возможность определения времени контакта через объем реагирующих масс и поступающих в реактор реагентов в единицу времени приводит к выводу, что между дискретным реактором смешения и реактором идеального вытеснения существует определенная связь. Она позволяет результаты, полученные в одном реакторе, воспроизвести в другом, вернее, вести исследования в одном аппарате и по ним предсказать результаты, которые могут быть получены в другом. По существу реактор дискретного действия — тот же реактор идеального вытеснения, работающий с изменением объема аппарата так, чтобы, несмотря на периодическое изменение общей загрузки аппарата, обеспечить постоянство времени реакции.

Такой реактор непрерывного действия позволит, так же как и реактор дискретного (периодического) действия, самостоятельно менять и загрузку аппарата, и время реакции. Это очень важная связь между принципом работы реакторов дискретного и непрерывного действия. Мы не учитывали время запаздывания ни в том, ни в другом случаях, ибо это не имеет большого значения.

Таким образом, очевидна возможность трансформирования данных, полученных в аппарате идеального вытеснения, в данные, которые могут быть получены в смесительном аппарате дискретного действия, и наоборот. Но если это возможно, то зачем надо иметь дело с общей массой реагирующих веществ (объем реактора или его длина при заданном диаметре) и объемом вещества, поступающего в единицу времени, или с линейной скоростью потока? Для этого достаточно реакцию провести в колбе и установить относительную величину превращения и соответствующее ему время реакции. Иначе говоря, незачем для рассмотренного случая процесс проводить в непрерывном потоке, хотя учитывать объем реактора необходимо.

Однако даже для этого упрощенного случая дело оказалось не таким простым. Процесс в принципе можно изучать в колбе, но все же никак нельзя не учитывать объем реактора, объем всей одновре-

менно реагирующей массы, если мы хотим исчерпать все сырье, подвергнув его полному химическому превращению. И не просто полному превращению, а полному превращению при одновременном максимальном использовании реакторного объема в режиме, близком к работе идеального реактора.

Это достигается различными путями. Можно загрузить сырьем колбу, провести реакцию, отделить непрореагировавшее сырье и подвергнуть его реакции в другом реакторе и т. д. Объемы этих реакторов зависят от степени превращения, которая для каждого последовательно соединенного реактора остается неизменной. Конечно, эта система имеет существенный недостаток — нужно большое количество колб (реакторов). В лабораторных условиях это еще допустимо, но в условиях промышленного производства, где требуется реактор немалых размеров, да еще не один, это уже недопустимо. Естественно, возникает вопрос, почему необходимо много колб, ведь можно реакцию осуществить в одном аппарате, выгрузив содержимое колбы после реакции и загрузив ее вновь непрореагировавшим сырьем, и т. д. Здесь выявляется новый недостаток — большие затраты времени на разгрузочно-загрузочные операции. Но это не единственный недостаток, главное — в другом. Дело в том, что дискретный реактор, согласно теории рециркуляции, может работать без переполнения в установившемся режиме, по загрузке реактора, до степени превращения больше 0,5. Если же процесс надо вести при степени превращения меньше 0,5, то реактор будет переполняться, ибо объем набравшихся до установившегося состояния продуктов будет намного превышать объем реактора.

Таким образом, для полного превращения исходного сырья выход лишь один — проводить процесс в реакторе с переменным объемом или с уменьшением исходной загрузки. Это, в свою очередь, не позволяет осуществлять процесс без учета объема реактора и поступающих в него в единицу времени реактантов, количество которых определяется по законам теории рециркуляции. Следовательно, задача полного использования сырья не может решаться без рециркуляции. Но и это еще не все. Важно работать не с любой степенью превращения, а со степенью превращения, гарантирующей максимальную с практической точки зрения производительность реактора.

Итак, теория рециркуляции позволяет реально осуществлять исчерпывающе полное превращение сырья, сводить выходы побочных продуктов к минимуму или совершенно исключить их, осуществлять реакцию с большой скоростью и тем добиваться максимального использования единицы реакторного объема.

4.3.6.1. Теоретические основы химической рециркуляции. В системе с рециркуляционным контуром, образуемым непрореагировавшим сырьем, существует условие, выполнение которого позволяет вести процесс при установившемся материальном потоке. И наоборот, невыполнение его ведет к образованию потока, обладающего свойством непрерывного нарастания.

Для системы с фракционной рециркуляцией требуется доказать:

1. Если истинная скорость реакции в начале реактора больше, чем средняя во всем реакторе, то процесс относится к классу стабилизирующихся процессов. Это означает, что если начальная скорость больше средней, то реактор еще в состоянии переработать дополнительно возвращаемый рециркулят. Следовательно, при этом система имеет стабильное (установившееся) состояние, определяемое степенью превращения, но до определенного предела.

2. Если истинная скорость реакции в начале реактора меньше, чем средняя во всем реакторе, то процесс антистабилен, т. е. с течением времени средняя скорость во всем реакторе непрерывно нарастает. Это означает — процесс следует вести до полного превращения сырья при обеспечении по всей длине реактора одинаковой и самой высокой скорости реакции, что теоретически возможно только тогда, когда продукты, образующиеся в ходе реакции, немедленно отводятся из системы и в таком же порядке подводится в соответствующее сечение реактора израсходованное количество сырья. Однако система получается уже нерециркуляционная. Когда рециркуляционная система работает в антистабильном режиме она ни при каких обстоятельствах не может иметь установившееся состояние материальных потоков. Если же из системы отводить только продукты реакции и не вводить свежее сырье, то мы получим систему, которая работает в соответствии с принципом идеального процесса второго рода. Отсюда следует, что работа химического реактора может быть улучшена, если добавлять в различные точки реактора в одном случае иници-

рующие вещества, а в другом — ингибитор для подавления ненужных реакций.

Нестационарные процессы представляют особый интерес, а что касается нестационарных стадий стационарных процессов, проводимых с рециркуляцией, то математическое описание их очень важно для разработки теории пуска наладочных работ промышленных агрегатов.

Рассмотрим наиболее простой случай — реакцию первого порядка. Если время прохождения рецикла h (т. е. время, в течение которого рециркулят проходит путь от конца реактора до входа в него), то имеем

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} + \frac{g_o}{[1-f(L,t-h)]} \cdot \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} = W, \quad (4.47)$$

$$0 \leq x \leq L, 0 \leq t \leq \infty.$$

Граничное условие: $f(0, t) = 0$.

Начальное условие задается при $t \leq 0$ и определяется кинетическим уравнением реакции. Уравнение (4.47), являясь дифференциальным уравнением в частных производных с запаздывающим аргументом, аналитически не может быть решено. Для его решения можно использовать метод сеток. Если производные аппроксимировать разностями

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = \frac{f(x,t+\Delta t) - f(x,t)}{\Delta t}, \quad (4.48)$$

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial x} = \frac{f(x,t) - f(x-\Delta x,t)}{\Delta x},$$

то (4.48) будет аппроксимировано следующим разностным уравнением:

$$\frac{f(x,t+\Delta t) - f(x,t)}{\Delta t} + \frac{g_o}{f(L,t-h)} \cdot \frac{f(x,t) - f(x-\Delta x,t)}{\Delta x} = W. \quad (4.49)$$

После преобразований имеем

$$f(x, t + \Delta t) = W \cdot \Delta t + f(x, t) \cdot [1 - a(t)] + \\ + a(t) \cdot f(x - \Delta x, t), \quad (4.50)$$

где $a(t) = \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \frac{g_0}{f(L, t - h)}$.

Значения $f(x, \tau)$ определяются последовательно по слоям. При каждом фиксированном τ вычисляется $f(\Delta x, \tau), (2 \cdot \Delta x, \tau), \dots, f(L, \tau)$.

Так как при любом t необходимо иметь значения функции $f(L, t - h)$, то должно выполняться условие $h = n \cdot \Delta t$, где $n = 1, 2, \dots$.

Точность решения уравнения (4.49) в значительной степени зависит от выбора сетки. С уменьшением Δt и Δx решение уравнения (4.50) приближается к точному, т. е. к решению уравнения (4.47).

Решив уравнение (4.47), можно определить степень превращения для установившегося состояния, момент времени t , при котором процесс можно считать установившимся.

Кроме того, решая (4.47) совместно с тепловым уравнением и уравнением движения потока, можно решить задачу достижения установившегося состояния оптимальным образом в том или ином смысле (например, в смысле минимума времени перехода).

Когда невозможно или невыгодно работать вблизи идеального цикла первого рода, можно добиться улучшения процесса изменением профиля некоторых параметров системы (в частности, температуры). Этот вывод касается идеального цикла второго рода, но не всегда. Если реагенты находятся в эквимолекулярных соотношениях, надобность в поиске температурного профиля отпадает.

4.3.6.2. Использование теории рециркуляции для развития химической технологии. Теоретической основой для количественной оценки выходов продуктов химической реакции во времени и в условиях равновесия являются такие статистические дисциплины, как химическая кинетика и химическая термодинамика. Однако без теории рециркуляции с помощью одной только кинетики или термодинамики невозможно найти наилучшие условия, позволяющие свести к минимуму выход побочных продуктов и обес-

печить абсолютно полное превращение исходного сырья. Препятствуют этому ограничения, налагаемые кинетикой и термодинамическим равновесием. Тем более нельзя без теории рециркуляции определить потенциальные возможности химической реакции в указанном аспекте при одновременном максимальном использовании единицы реакторного объема. Эти вопросы стали особенно актуальными в связи с ростом мощностей химических производств. Они связаны с экономичностью использования сырьевых и энергетических ресурсов, затратами металла и наилучшим использованием времени.

Достижение наибольшей селективности и стопроцентного превращения сырья при осуществлении химического процесса с максимальной скоростью, т. е. обеспечение максимальной удельной мощности реактора, — новая задача, обусловленная быстрым ростом химической индустрии.

Процесс, осуществляемый в соответствии с принципом идеального химического процесса первого рода, должен начинаться и завершаться при соотношении реактантов и условиях режима, обеспечивающих максимальную скорость реакции. Это возможно при мгновенном отводе продуктов превращения и восполнении израсходованного сырья. Таким образом, реактор в любой момент времени оказывается заполненным исключительно реагирующими веществами в соотношениях, обеспечивающих самую высокую скорость протекания реакции.

В теории рециркуляции для уменьшения размерности задачи используется метод декомпозиционного решения. Наряду с декомпозицией для упрощения применяют линеаризацию некоторых элементов задачи, которая в целом является нелинейной. На основе чисто химико-технологических соображений глобальная статическая оптимизация разбита на три части: декомпозиционная глобальная, региональная и локальная оптимизации.

Задачи, связанные с оптимизацией, носят в основном детерминированный характер, но не исключена возможность появления среди них стохастических или индетерминированных элементов. Это вполне вероятно, ибо пока природа того или иного явления в деталях нам неизвестна, мы всегда его считаем стохастическим, или индетерминированным. Поэтому по мере того как мы познаем явления, число

так называемых «случайных» явлений, особенно индетерминированных, сокращается.

Применяя теорию рециркуляции, можно решить проблему устойчивости работы химического реактора. В частности, решена проблема устойчивости температурного режима реактора в системе с применением рециркуляции непрореагировавшего сырья. Саморегулирование с помощью рециркуляции непрореагировавшего сырья, по сравнению с саморегулированием путем возврата части всей общей массы продуктов, выходящих из реактора, приводит к несравненно лучшим результатам. Значительно повышается производительность реактора и уменьшается выход побочных продуктов.

Теория рециркуляции в настоящее время выделилась как самостоятельный раздел химической технологии, обладающий собственной теоретической базой и экспериментальными методами. Теория рециркуляции настолько разносторонне развита, что только несколько ее разделов составляют такую сложную теорию, как системный анализ химических процессов. Эта часть теории разработана в наиболее общей форме и вполне может служить основой для системного анализа в других областях науки и техники. К этой проблеме относятся разделы, посвященные теории максимального использования теплоты отходящих потоков, выбору наилучших элементов всей комплексной системы, оптимальной дислокации всех элементов комплекса и определению наилучших размеров и расположения связывающих их коммуникаций. Как видно, решается проблема оптимального использования всех видов ресурсов многих одновременно и сопряженно действующих заводских установок. Появляются новые возможности для повышения эффективности процессов по сравнению с процессами, проводимыми в отдельных автономно работающих установках.

Теория рециркуляции открывает совершенно новое поле научной деятельности для исследований различных режимов пульсирующего потока — осцилляторного, импульсного, роторного, каждый из которых может осуществляться в реакторах различной конструкции. Иными словами, мы имеем дело с реакцией, протекающей в некотором волновом потоке. Волновой поток бывает монотонным, спокойно нарастающим или ударным.

Теория рециркуляции может служить основанием для разработки нового типа химической технологии – квазистационарной технологии. Цель ее — достижение полного превращения исходного сырья за один проход через реактор при предельно высокой его производительности по целевому продукту, максимальной селективности, характерных для бесконечно малого превращения, когда процесс протекает с наибольшей скоростью и полученные продукты не успевают участвовать в побочных реакциях. Таким образом, становится в значительной мере реальным практическое приложение принципов, заложенных в основу идеального химического процесса первого рода.

В самой общей форме мы здесь встречаемся с двумя формами стабильности: первая — материальные потоки, вторая — энергетические (например, температурные). Несмотря на то, что вопросы стабильности этих потоков, как правило, взаимозависимы, тем не менее пути ее достижения могут быть совершенно различными, если начальные и граничные условия существенно изменяются. Поэтому стабильность материальных потоков в теории рециркуляции называется установившимся состоянием, стационарность энергетического состояния — стабильностью, а обе вместе — устойчивостью.

Следует отметить, что в настоящее время существуют два, коренным образом отличающихся, методологических подхода к ведению научно-исследовательских работ, одним из которых является раздробление объекта на мельчайшие части с последующим их исследованием. Другим методом является рассмотрение объекта исследования как некоторого комплекса или системы. В химической технологии этот метод, предложенный теорией рециркуляции, имеет иное назначение, чем теория систем в детерминированных методах оптимизации или управления. Детерминированными методами нельзя исследовать комплексный процесс и понять многие трудности, возникающие вследствие взаимодействия отдельных элементов сложной химико-технологической системы.

Таким образом, ясно, что ни метод раздробления, ни детерминированные методы не владеют средствами (теоретическими принципами, экспериментальными методами), достаточными для глубокого понимания многообразия природных явлений.

Теория рециркуляции предусматривает изучение процесса на любом уровне с учетом особенностей связей, специфических явлений (синергизм, саморегулирование материальных и энергетических

ресурсов и др.). Эта особенность теории рециркуляции проявляется в специальных методах экспериментального исследования сложных процессов и в теоретических принципах.

В итоге отметим, что для теории рециркуляции характерна установление взаимного влияния элементов, создающих единую организованную систему.

Эти взаимодействия отдельных частей системы могут быть бесчисленными в зависимости от их расположения, компоновки и т. д.

4.3.7. Программный модуль «Reaktor»

4.3.7.1. Назначение и области использования программного модуля. Программный модуль предназначен для исследования работы химического реактора с целью определения условий, при которых достигается максимальная степень превращения сырья в готовую продукцию на основе учета закономерностей кинетики, термодинамики, конъюнктуры рынка продукции и цен на сырье, химикаты, речную воду, энергию и стоимость захоронения образующихся отходов.

В реакторе осуществляется идеализированная, простая, гомогенная, необратимая, эндотермическая реакция второго порядка с сепарированием и рециркуляцией непрореагировавших компонентов.

4.3.7.2. Функциональные возможности программного модуля. Программный модуль позволяет анализировать влияние кинетических и термодинамических условий и ценовой ситуации на рынке ресурсов (рис. 80–84):

- баланс материальных потоков реактора;
- степень превращения сырья в готовую продукцию;
- прибыль от реализации продукции.

4.3.7.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

<i>Reaktor_00.exe</i>	Главный исполняемый файл модуля
<i>R_00.hlp</i>	Файл помощи
<i>R_01.hlp</i>	Файл помощи
<i>R_02.hlp</i>	Файл помощи
<i>R_03.hlp</i>	Файл помощи
<i>R_01.cnt</i>	Файл оглавления
<i>R_02.cnt</i>	Файл оглавления
<i>R_03.cnt</i>	Файл оглавления

4.3.7.4. Запуск и управление работой программного модуля

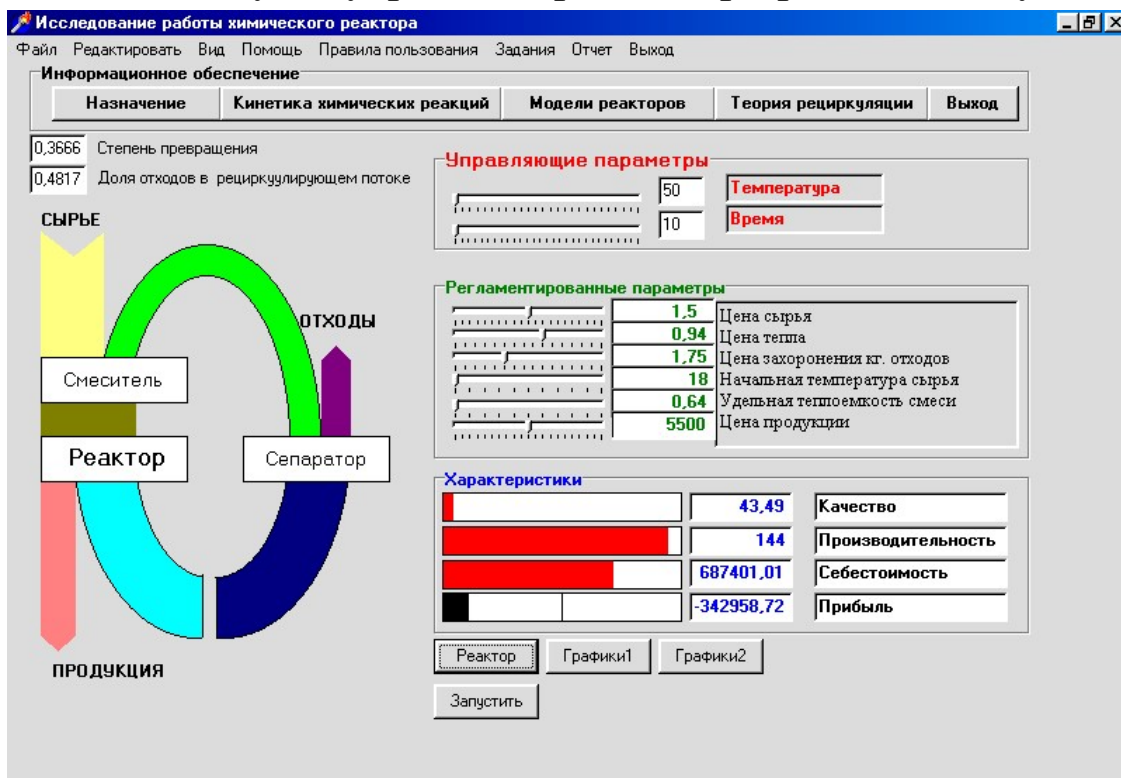


Рис. 80. Окно рабочего интерфейса программного модуля с диаграммой материальных потоков химического реактора

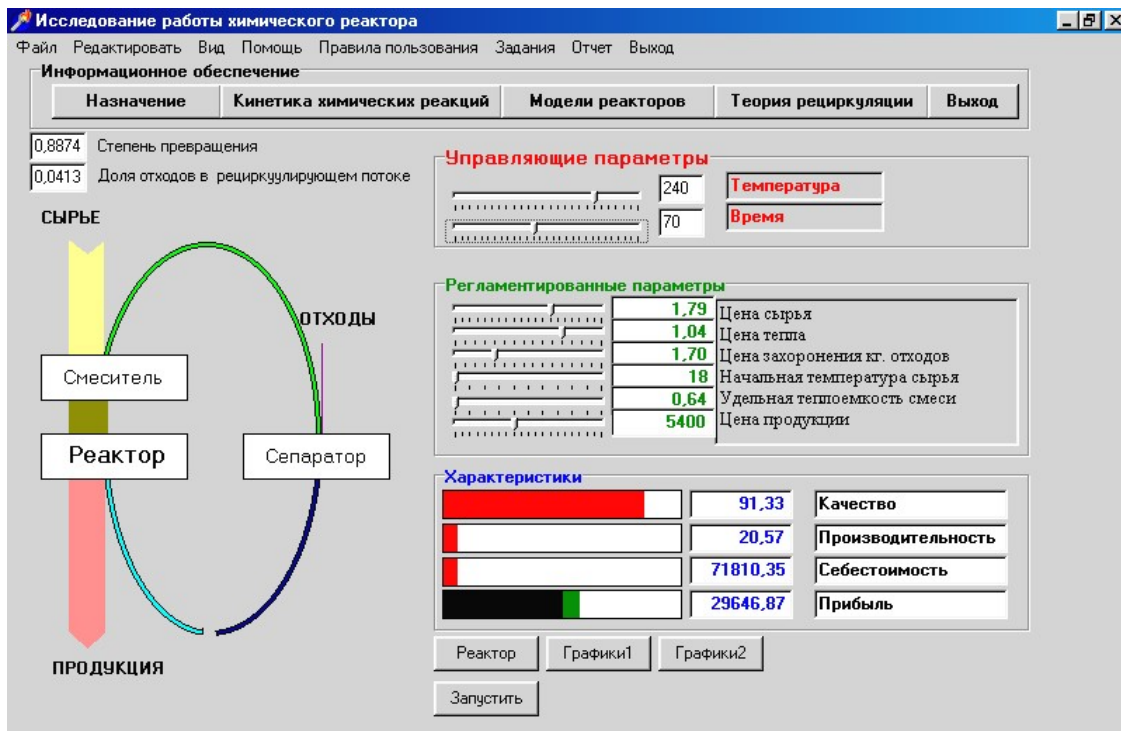


Рис. 81. Окно рабочего интерфейса программного модуля с диаграммой материальных потоков химического реактора при увеличенных значениях температуры и времени реакции

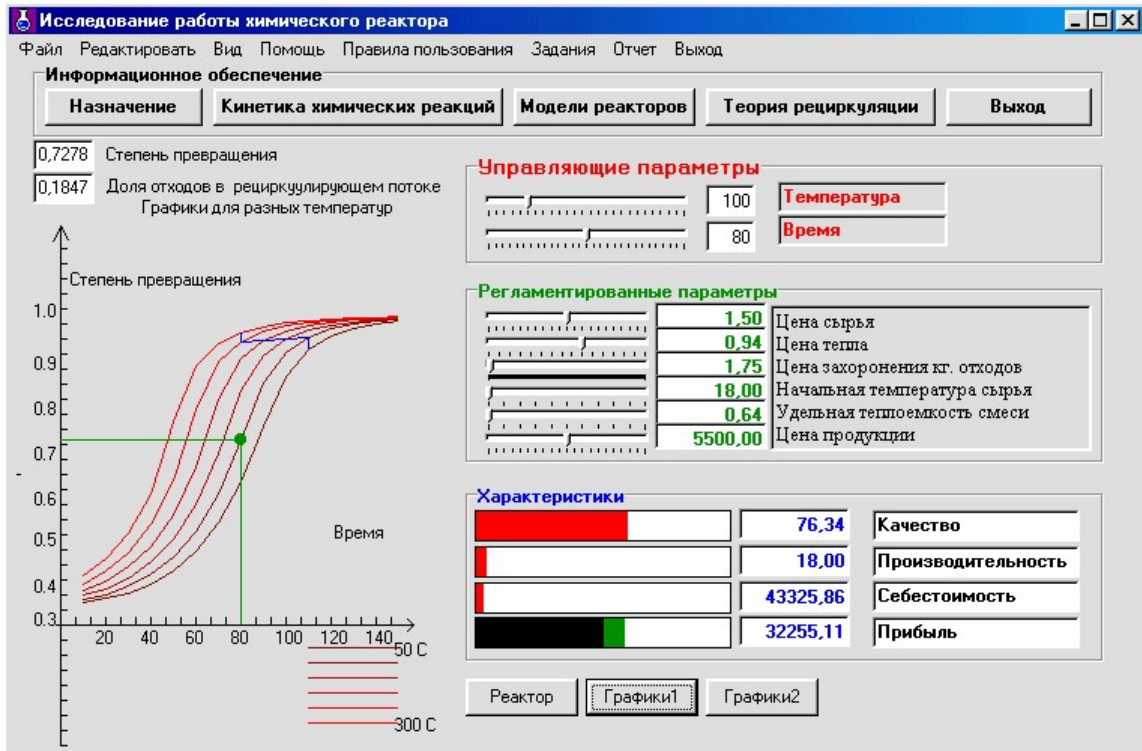


Рис. 82. Окно рабочего интерфейса программного модуля с графиками кривых степени превращения реагентов при различных значениях температуры и времени реакции

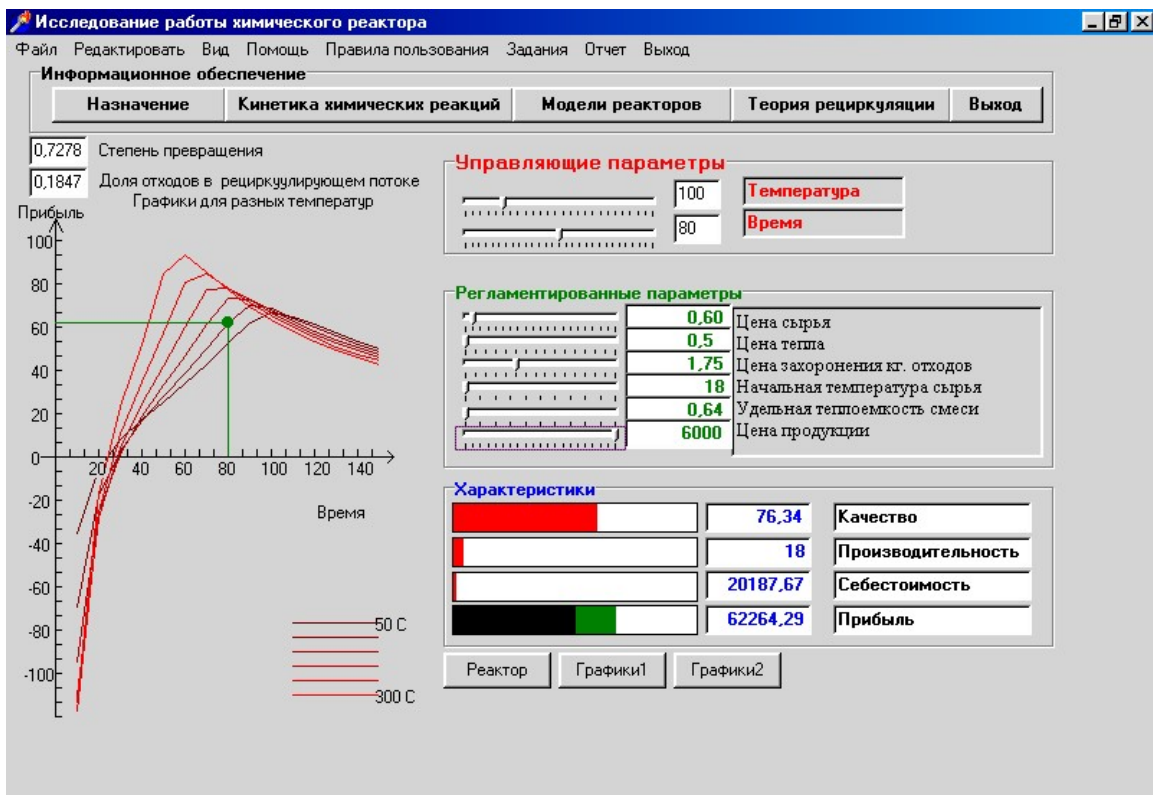


Рис. 83. Окно рабочего интерфейса программного модуля с графиками кривых прибыли при низких значениях стоимости сырья и энергии

Линия в выделенном прямоугольнике, пересекающая кривые, получена путем соединения точек максимальной прибыли при соответствующих условиях рис. 78 и 79. Эта линия свидетельствует о том, что добиваться максимальной степени превращения сырья оказывается экономически невыгодно. Наилучшим с экономической точки зрения является диапазон степени превращения 0,9–0,95.

При дешевом сырье и дешевой энергии оказывается выгоднее проводить процесс при более высокой температуре, но при малом времени реакции (при максимальной производительности).

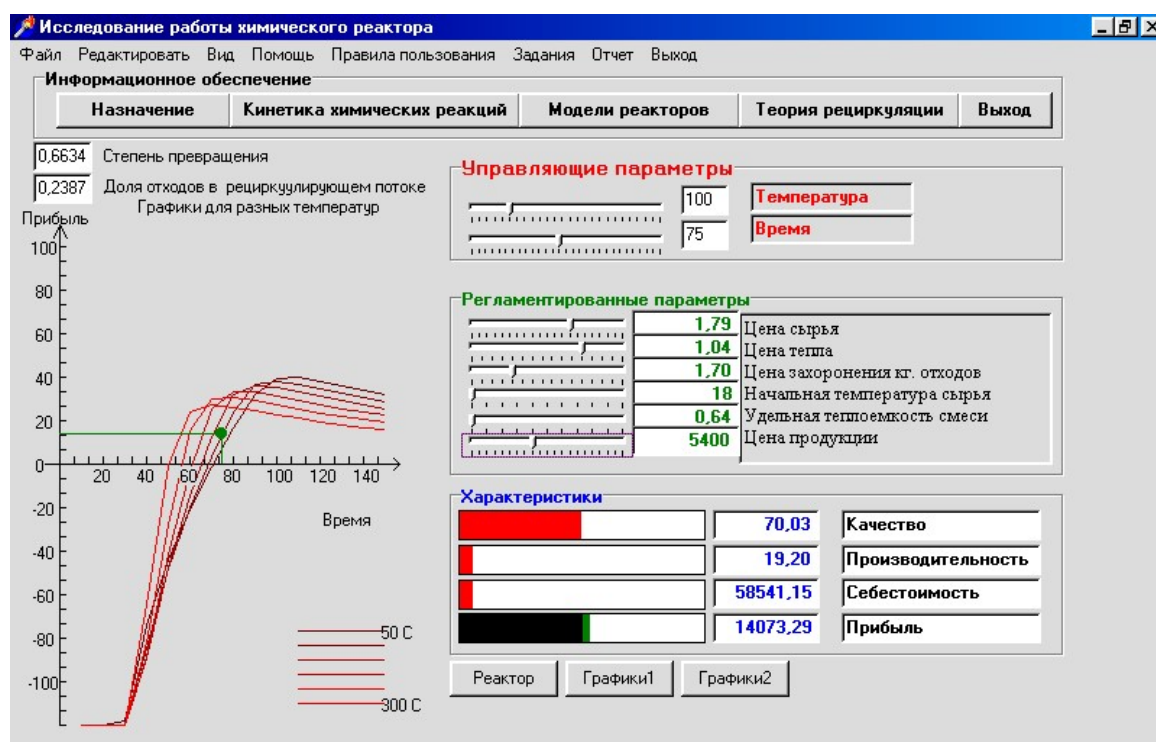


Рис. 84. Окно рабочего интерфейса программного модуля с графиками кривых прибыли при высоких значениях стоимости сырья и энергии

При дорогом сырье и дорогой энергии оказывается выгоднее проводить процесс при низкой температуре, но при большом времени реакции. Снижение производительности компенсируется большим выходом продукции из единицы сырья.

5. ОПТИМИЗАЦИОННЫЕ ЗАДАЧИ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

5.1. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ КОМПРОМИССНЫХ ОПТИМИЗАЦИОННЫХ ЗАДАЧ

В химической технологии наиболее характерной формулировкой оптимизационных задач является следующая.

Найти такие значения управляющих воздействий x_1, x_2, \dots, x_n , которые удовлетворяют математическим моделям

$$\begin{aligned} Y(1) &= f_1(x_1, x_2, \dots, x_n); \\ Y(2) &= f_2(x_1, x_2, \dots, x_n); \\ &\dots\dots\dots \\ Y(M) &= f_m(x_1, x_2, \dots, x_n), \end{aligned} \tag{5.1}$$

обеспечивают получение продукции заданного качества:

$$\begin{aligned} Y1(1) &\leq Y(1) \leq Y2(1); \\ Y1(2) &\leq Y(2) \leq Y2(2); \\ &\dots\dots\dots \\ Y1(M) &\leq Y(M) \leq Y2(M) \end{aligned} \tag{5.2}$$

и минимизируют функцию цели

$$S = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \tag{5.3}$$

в заданной области факторного пространства:

$$\begin{aligned} A_1 &\leq X_1 \leq B_1; \\ A_2 &\leq X_2 \leq B_2; \\ &\dots\dots\dots \\ A_n &\leq X_n \leq B_n. \end{aligned} \tag{5.4}$$

Практически все известные методы решения оптимизационных задач реализуют один и тот же общий принципиальный алгоритм (рис. 85).

Все многообразие методов оптимизации создается различными путями генерирования нового набора значений независимых переменных x_1, x_2, \dots, x_n .

5.1.1. Общая схема решения оптимизационных задач

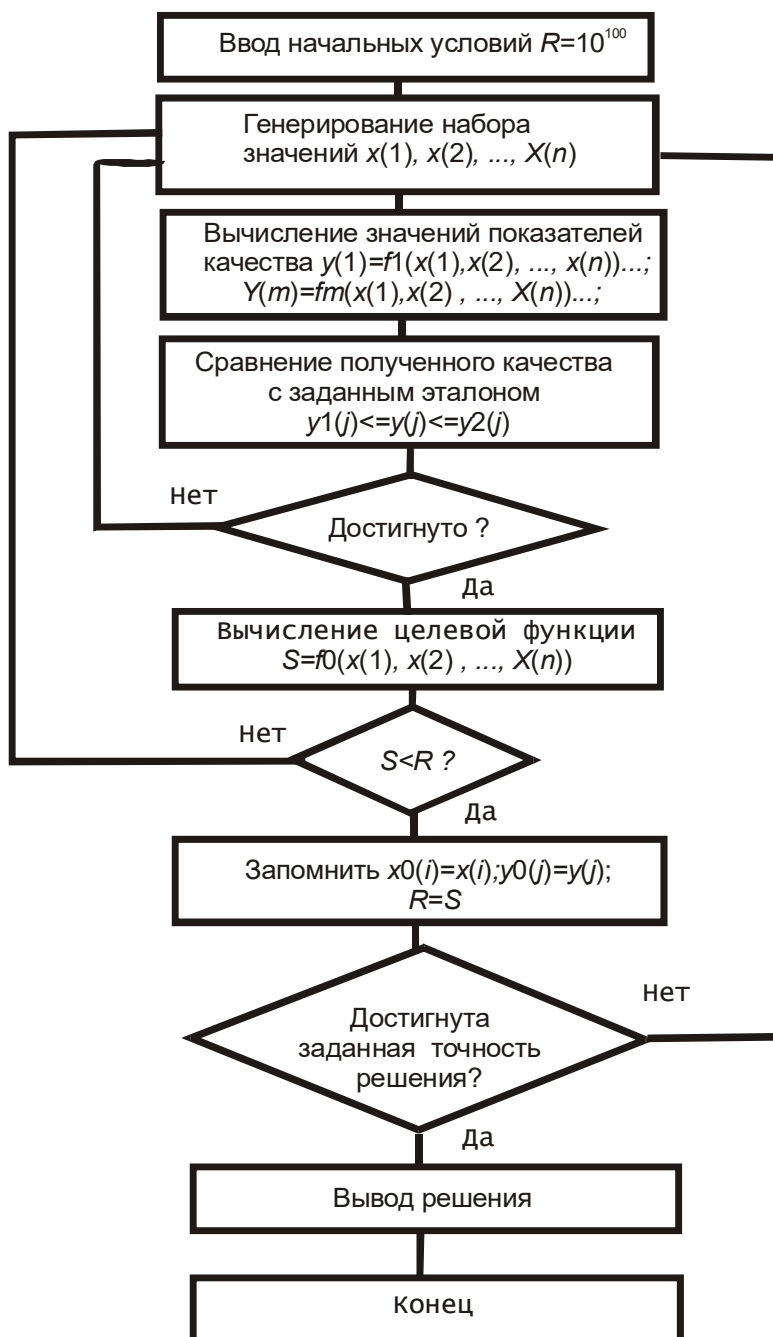


Рис. 85. Общая схема решения оптимизационных задач

5.1.2. Методы решения оптимизационных задач

Для поиска экстремума целевой функции в условиях неполной информации об объекте исследований применяют разнообразные методы, большинство из которых можно подразделить на три основные группы:

- градиентные методы;
- безградиентные методы;
- методы случайного поиска.

Известны также комбинированные методы, сочетающие некоторые достоинства отдельных методов из различных групп. К числу комбинированных методов относится, например метод поиска, применяемый в случае движения к оптимуму при наличии «оврагов».

Градиентные и некоторые безградиентные методы в научных исследованиях чаще всего используют на стадии движения в область оптимума. Часто применяют, к примеру, градиентный метод крутого восхождения или безградиентный метод последовательного симплекс-планирования.

Методы случайного поиска оказались эффективными при изучении факторного пространства в области оптимума, особенно при рассмотрении компромиссных задач, связанных с учетом линейных целевых функций.

Выбор подходящих методов поиска ведется обычно в зависимости от особенностей решаемой задачи в каждом конкретном случае.

5.1.2.1. Градиентные методы решения оптимизационных задач.

Градиентные методы поиска оптимальных решений основаны на учете приближенных математических зависимостей, определяющих функцию цели, и на анализе производных этой функции. В данном случае принимается во внимание, что производная от целевой функции по некоторому направлению из исходной точки в многофакторном пространстве характеризует скорость изменения этой функции в выбранном направлении.

Производная от целевой функции по направлению нормали к поверхности постоянного уровня этой функции равна по алгебраической величине вектору, который называется градиентом целевой функции в рассматриваемой точке.

Для случая одномерного поиска при движении из исходной точки по градиенту координаты следующих точек, лежащих на нем, мож-

но определить, если умножить величину интервалов варьирования на величину тангенса угла Θ между осью данного фактора и направлением известной линии регрессии, так как значения $\operatorname{tg}\Theta$ по величине и знаку соответствуют частным производным целевой функции по соответствующим факторам.

В случае многомерного поиска при движении по градиенту в N -мерном пространстве кратчайший путь к оптимуму из некоторой исходной точки связан с движением в направлении нормали к поверхности постоянного уровня, проходящей через данную точку.

Движение по градиенту обычно является многошаговым.

Разнообразие известных градиентных методов объясняется стремлением найти оптимум за наименьшее количество шагов при движении к оптимуму в различных конкретных ситуациях.

Эффективность градиентных методов существенно зависит от характера изучаемой поверхности отклика, от выбранного шага движения, от величины ошибок эксперимента и других факторов.

Особые трудности возникают при выборе шага, так как эта процедура является произвольной. Допустимая величина шага (приращения фактора при очередном движении к оптимуму) ограничивается, с одной стороны, кривизной целевой функции в рассматриваемой точке и, с другой — точностью вычисления значений целевой функции.

Некоторые градиентные методы основаны на изменении величины шага в процессе движения к оптимуму, так как это способствует повышению эффективности поиска.

Иногда при выборе величины шага на начальной стадии работы сначала принимают шаг, который в 4–6 раз больше ошибки измерений.

После определения частной производной снижают значение шага в два раза и повторяют вычисления. Если различие производных не существенно, то оставляют первоначальный шаг, а если существенно, то еще раз уменьшают его в два раза и т. д.

В основе градиентных методов определения оптимума лежат процедуры вычисления и анализа производных целевой функции $R(x)$. Поэтому, прежде чем перейти к описанию различных методов, необходимо рассмотреть вопрос о расчете производных $\partial R / \partial x_j$.

Если аналитический вид целевой функции известен, вычисление производных $\partial R / \partial x_j$ ($j = 1, \dots, n$) чаще всего не составляет особого

труда, хотя иногда и может привести к довольно громоздким выражениям. Если же зависимость $R(x)$ в явном аналитическом виде нельзя записать или же вид этой зависимости настолько сложен, что аналитические выражения для производных $\partial R / \partial x_j$ получаются слишком сложными для практического использования в расчетах, то единственным способом определения производных $\partial R / \partial x_j$ является численный метод. Значение производной $\partial R / \partial x_j$ при этом вычисляется по приближенному соотношению

$$\frac{\partial R(x)}{\partial x_j} \approx \frac{\Delta R}{\Delta x_j} = \frac{R(x_1, \dots, x_j + \Delta x_j, \dots, x_n) - R(x_1, \dots, x_j, \dots, x_n)}{\Delta x_j}, \quad (5.5)$$

где Δx_j — величина приращения независимой переменной x_j , от которого существенно может зависеть точность определения значения производной.

При применении нормализованных переменных x_j в алгоритме оптимизации необходимо принимать во внимание соотношение нормировки при вычислении приращения целевой функции R , если она выражена через значения исходных физических переменных y_j . Приращение физической переменной Δy_i связано с приращением нормализованной переменной Δx_j соотношением

$$\Delta y_j = d_j \Delta x_j. \quad (5.6)$$

Для вычисления производных $\partial R / \partial x_j$ ($j = 1, \dots, n$) удобно давать одно и то же приращение γ по всем независимым переменным x_j , т. е.

$$\Delta x_j = \gamma, \quad j = 1, \dots, n. \quad (5.7)$$

В этом случае приращение соответствующих значений физических переменных Δy_j определяется как

$$\Delta y_j = \gamma \cdot d_j, \quad j = 1, \dots, n \quad (5.8)$$

и величина γ имеет смысл доли диапазона изменения переменной y_j .

Если значения целевой функции вычисляются через исходные физические переменные y_j , т. е. $R = R(y)$, то с учетом выражений (5.7) и (5.8) формула для приближенного расчета производных (5.5) запишется в виде

$$\frac{\partial R(x)}{\partial x_j} \approx \frac{R^*(y_1, \dots, y_j + \gamma \cdot d_j, \dots, y_n) - R^*(y_1, \dots, y_j, \dots, y_n)}{\gamma}. \quad (5.9)$$

Как отмечалось выше, формулы (5.5) и (5.8) дают лишь приближенное к истинному значение производной $\partial R / \partial x_j$. Точность этого приближения зависит от величины приращения независимой переменной Δx_j или γ . Однако априорных способов предсказания наилучшего значения γ не существует. Можно лишь заметить, что допустимая величина указанного приращения, с одной стороны, ограничена по максимуму кривизной целевой функции в исследуемой точке, а с другой — по минимуму используемой точности вычисления значений целевой функции.

Практически для определения приемлемого значения γ (в особенности в начале поиска, когда производные еще ни разу не находились) используется метод дробления γ .

Например, вычисляется значение производной с приращением, равным γ , и расчет повторяется с $\gamma/2$. Если полученные значения производных различаются существенно, расчет повторяется с $\gamma/4$ и т. д., пока не будет найдено оптимальное значение приращения Δx_j . Разумеется, что на последующих шагах это значение может уточняться.

Метод релаксации. Метод релаксации основан на движении к оптимуму в направлении осей координат, вдоль которых функция цели изменяется (уменьшается или возрастает) наиболее существенно. Слово «релаксация», обозначающее ослабление, в данном случае учитывает постепенный переход от учета влияния наиболее сильных факторов к учету влияния факторов, которые в незначительной степени сказываются на величине критерия оптимизации.

Для этого в начальной точке поиска определяются производные оптимизируемой функции по всем независимым переменным. Осевому направлению с наибо́льшим убыванием целевой функции, очевидно, соответствует наибольшая по модулю производная. Если знак производной отрицательный, то целевая функция убывает в направлении оси, если положительный, то в обратном направлении. По направлению убывания целевой функции производятся шаги до тех пор, пока не будет получено минимальное значение по выбранному осевому направлению. Тогда вновь определяются производные по всем переменным за исключением той, по которой осуществлялся спуск, и снова находится осевое направление наибо́льшего убывания функции цели, по которому производятся дальнейшие шаги, и т. д.

Критерием окончания поиска оптимума является достижение такой точки, при движении из которой по любому осевому направлению дальнейшего убывания функции цели не происходит. На практике в качестве признака оптимума часто применяется условие, которое при $\delta \rightarrow 0$ превращается в точное условие равенства нулю производных в точке оптимума:

$$\sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial R}{\partial x_j} \right)^2 < \delta. \quad (5.10)$$

Разумеется, что условие (5.10) может быть использовано только в том случае, если оптимум лежит внутри допустимой области изменения независимых переменных x . Если же оптимум попадает за границы области x , то критерий типа (5.10) непригоден и вместо него следует применять условие положительности всех производных по допустимым осевым направлениям. При этом допустимым осевым будет только направление внутрь области x . Обратное направление по той же оси ведет за пределы области x , если, конечно, рассматриваемая ось не является в данной точке касательной к границе области x .

Алгоритм спуска для выбранного осевого направления может быть записан в виде

$$x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)} - h^{(k)} \operatorname{sgn} \frac{\partial R(x^{(p)})}{\partial x_j}, \quad (5.11)$$

где $x_j^{(k)}$ — значение изменяемой переменной на k -м шаге спуска; $h^{(k)}$ — величина k -го шага, которая может изменять свое значение в зависимости от номера шага; $\operatorname{sgn} z$ — функция знака; $x^{(p)}$ — вектор точки, в которой последний раз производилось вычисление производных целевой функции.

Графическое изображение движения от исходного состояния к оптимуму показано на рис. 86. Очевидно, что скорость движения к минимуму зависит от того, насколько удачно выбран шаг $h^{(k)}$ изменения независимых переменных. При очень малой величине шага изменения факторов значительно увеличивается число шагов, необходимых для достижения оптимума, а чрезмерная величина шага ведет к «рысканью» вблизи оптимума и затрудняет попадание в него. В связи с этим в последнее время применяют релаксационный поиск с переменным шагом.

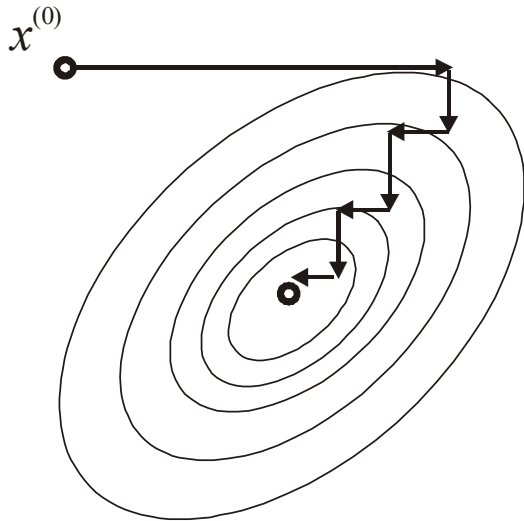


Рис. 86. Характер движения к оптимуму в методе релаксации

Поэтому представляют интерес специальные приемы изменения величины шага в процессе поиска.

Простейший алгоритм изменения шага состоит в том, что в начале спуска по одному из осевых направлений задается некоторый шаг $h^{(0)}$, равный, например, 0, 1, что соответствует изменению значения физической переменной y_j на 10% от принятого диапазона d_j . С этим шагом производится спуск по выбранному осевому направлению до тех пор, пока для двух последующих вычислений значений целевой функции выполняется условие

$$R(x^{(k+1)}) < R(x^{(k)}), \quad R(x^{(k+1)}) < R(x^{(k)}). \quad (5.12)$$

При нарушении условия на каком-либо L -м шаге направление спуска по оси изменяется на обратное и спуск продолжается из последней рассчитанной точки с уменьшенной вдвое величиной шага. Формульная запись этого алгоритма имеет вид

$$h^{(k+1)} = \left\{ \begin{array}{l} h^{(k)} R(x^{(k)}) \leq R(x^{(k-1)}) \\ -\frac{h^{(k)}}{2} R(x^{(k)}) > R(x^{(k-1)}) \end{array} \right\}. \quad (5.13)$$

В результате использования такой стратегии шаг спуска по осевому направлению будет уменьшаться в районе минимума целевой функции по этому направлению и поиск минимума можно прекратить когда величина шага $h^{(k)}$ станет меньше заданной точности определения минимума ϵ в осевом направлении. Затем отыскивается новое осевое направление, в котором функция изменяется наиболее сильно. Начальный шаг в новом направлении уже можно выбрать не как заданную долю диапазона изменения независимой переменной, а как заданную долю расстояния, пройденного вдоль предыдущего осевого направления. Это позволяет автоматически уменьшать начальный шаг по каждому следующему осевому направлению при

приближении к оптимуму целевой функции, в районе которого спуск по каждой оси происходит на небольшое расстояние.

Можно применить и другие стратегии изменения шага в процессе поиска. Хорошие результаты, например, могут быть получены с использованием алгоритма изменения шага, основанного на свойствах чисел Фибоначчи.

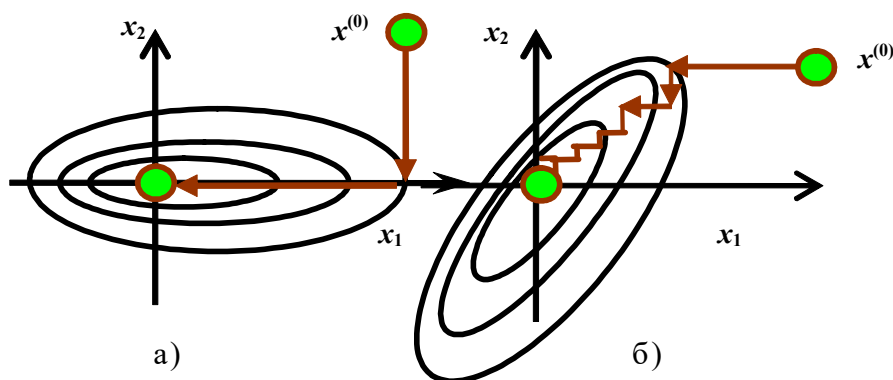


Рис. 87. Зависимость времени поиска оптимума методом релаксации от ориентации системы координат

Существенной особенностью метода релаксации является зависимость времени поиска от ориентации системы координат. На рис. 87 показаны линии постоянного уровня одной и той же целевой функции в системах координат, отличающихся между собой поворотом осей.

Если в случае, изображенном на рис. 87 а, для достижения минимума целевой функции необходимо только два цикла движения вдоль осевых направлений, то для случая, приведенного на рис. 87 б, число таких циклов возрастает весьма существенно.

Метод градиента. Как говорит само название метода, в нем используется градиент целевой функции. В отличие от метода релаксации в методе градиента шаги совершаются в направлении наиболее быстрого уменьшения целевой функции, что, естественно, ускоряет процесс поиска оптимума.

Поиск оптимума при использовании метода градиента также производится в два этапа. На первом находят значения частных производных по всем независимым переменным, которые определяют направление градиента в рассматриваемой точке. На втором этапе осуществляется шаг в направлении, обратном направлению градиента, т. е. в направлении наиболее быстрого убывания целевой функции.

При выполнении шага одновременно изменяются значения всех независимых переменных. Каждая из них получает приращение, пропорциональное соответствующей составляющей градиента по данной оси.

По существу в методе градиента применяется та же информация о целевой функции, что и в методе релаксации при выборе осевого направления, однако спуск производится оптимально.

В общем виде алгоритм градиентного метода может быть записан следующим образом:

$$x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)} - h^{(k)} \frac{\frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_j}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_i} \right)^2}}. \quad (5.14)$$

В алгоритме (5.14) для градиентного поиска применяется нормализованный вектор градиента, указывающий лишь направление наиболее быстрого изменения целевой функции, но не указывающий скорости ее изменения по этому направлению. При использовании нормализованного вектора-градиента шаг спуска определяется величиной $h^{(k)}$, стратегию изменения которой можно строить независимо от абсолютной величины градиента.

Иногда применяется алгоритм градиентного поиска в виде

$$x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)} - h^{(0)} \frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_j} \quad j = 1, \dots, n. \quad (5.15)$$

В этом случае величина шага $\Delta x_j^{(k)}$ при постоянном значении параметра $h^{(0)}$ изменяется автоматически в соответствии с изменением абсолютной величины градиента. Длина шага определяется выражением

$$\Delta x_j^{(k)} = -h^{(0)} \frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_j}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (5.16)$$

Алгоритм (5.15) обладает тем достоинством, что при приближении к оптимуму длина шага $\Delta x_j^{(k)}$ автоматически уменьшается.

Вообще задача выбора стратегии изменения величины шага в градиентном поиске более важна, чем в методе релаксации. Это объясняется тем, что после каждого шага здесь находятся производные це-

левой функции, расчет которых связан с вычислением n значений целевой функции. Если, с одной стороны, размер шага слишком мал, то движение к оптимуму будет долгим из-за необходимости расчета целевой функции в очень многих точках. С другой стороны, если, например, в алгоритме (5.15) шаг $h^{(0)}$ выбран слишком большим, в районе оптимума может возникнуть «рыскание», которое либо не затухает, либо затухает слишком медленно.

Характер поиска оптимума при малой и большой величинах шага показан на рис. 88.

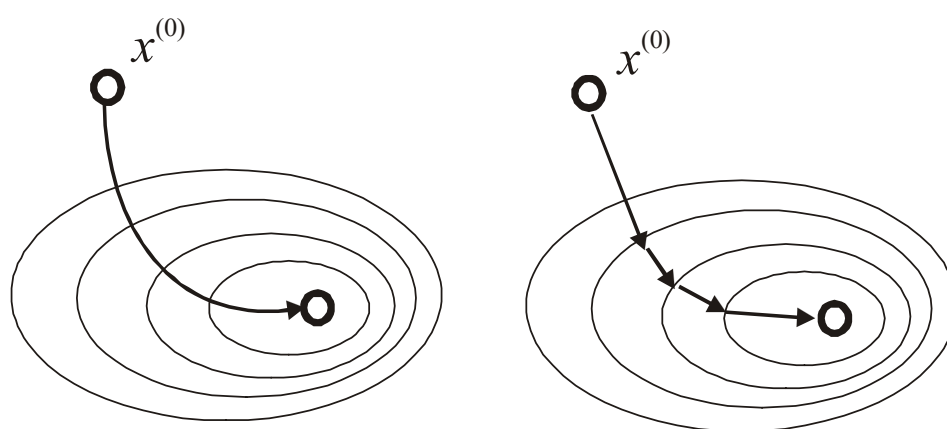


Рис. 88. Характер движения к оптимуму в методе градиента с малой (а) и большой (б) величиной шага

В методе градиента направление шага обуславливается величинами частных производных оптимизируемой функции в рассматриваемой точке. Всегда следует иметь в виду, что градиент ортогонален к поверхности постоянного уровня функции цели только в точке его вычисления, да и то с определенным приближением, поскольку производные обычно находятся с помощью приближенной формулы (5.5).

В точке $x^{(k+1)}$, получаемой после выполнения шага от точки $x^{(k)}$, градиент $\nabla R(x^{(k)})$ уже не ортогонален поверхности постоянного уровня целевой функции, проходящей через точку $x^{(k+1)}$. Другими словами, градиенты $\nabla R(x^{(k)})$ и $\nabla R(x^{(k+1)})$ отличаются по направлению, что может быть использовано в стратегии изменения шага. Например, в алгоритме (5.14) изменение шага Dx_j можно производить в соответствии с правилом

$$h^{(k+1)} = \left\{ \begin{array}{l} 2h^{(k)}, \alpha^{(k)} < \alpha_{\min} \\ h^{(k)}, \alpha_{\min} < \alpha^{(k)} < \alpha_{\max} \\ \frac{1}{3}h^{(k)}, \alpha^{(k)} > \alpha_{\max} \end{array} \right\}, \quad (5.17)$$

где $\alpha^{(k)}$ — угол поворота градиента на k -м шаге, определяемый выражением

$$\cos \alpha^{(k)} = \frac{\sum_{j=1}^n \frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial R(x^{(k-1)})}{\partial x_j}}{\sqrt{\sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_j} \right)^2 \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial R(x^{(k-1)})}{\partial x_j} \right)^2}}, \quad (5.18)$$

где $\alpha_{\min}, \alpha_{\max}$ — допустимые пределы угла поворота градиента.

Достоинством алгоритма изменения шага (5.17) является то, что при его использовании возможно как увеличение, так и уменьшение величины шага. При этом увеличение и уменьшение шага Δx_j производятся не в кратном соотношении для того, чтобы уменьшить вероятность возникновения «рыскания» при резких изменениях направления градиента.

Можно также применять алгоритм изменения шага, рассмотренный для метода релаксации. Однако он обладает недостатком, не позволяющим увеличивать шаг в процессе поиска.

Момент окончания поиска определяется по выполнении некоторых предварительно заданных условий. Один из возможных вариантов окончания поиска для случая, когда оптимум находится внутри области x , заключается в проверке на каждом шаге соотношения (5.10).

Другой вариант определения момента окончания поиска заключается в следующем. После каждой серии с заданным числом s шагов запоминается значение целевой функции. Число шагов s в серии выбирается таким, чтобы при выполнении серий на начальных этапах поиска происходило заметное изменение значения целевой функции. Если последующая серия шагов дает меньшее значение целевой функции, то поиск продолжается. Если же при выполнении следующей серии меньшее значение целевой функции не находится, то поиск

прекращается и полученное наименьшее значение рассматривается как искомый оптимум.

Недостатком градиентного поиска является то, что при его использовании можно обнаружить только локальный минимум целевой функции. Для того чтобы найти у функции другие локальные минимумы, необходимо производить поиск из других начальных точек. Таким образом, с помощью метода градиента каждый локальный минимум целевой функции можно охарактеризовать некоторой областью «притяжения», обладающей тем свойством, что при задании начального состояния в границах этой области метод градиента всегда приводит в один и тот же локальный минимум.

Метод наискорейшего спуска. Сочетание основных идей методов релаксации и градиента дает метод наискорейшего спуска, который заключается в следующем.

После того как в начальной точке найден градиент оптимизируемой функции и тем самым определено направление ее наискорейшего убывания в указанной точке, в данном направлении делается шаг спуска. Если значение функции в результате этого шага уменьшилось, то производится очередной шаг в том же направлении, и так до тех пор, пока в этом направлении не будет найден минимум, после чего вычисляется градиент и определяется новое направление наискорейшего убывания целевой функции.

В сопоставлении с методом градиента метод наискорейшего спуска оказывается более выгодным из-за сокращения объема вычислений. По существу метод наискорейшего спуска по вычислительным затратам эквивалентен методу релаксации, однако выгодно отличается от него тем, что, по крайней мере, первые шаги после определения градиента производятся в оптимальном направлении. Очевидно, что чем менее резко изменяется направление градиента целевой функции, тем выгоднее использовать метод наискорейшего спуска по сравнению с методом градиента, т. е. вдали от оптимума. Вблизи оптимума направление градиента меняется резко, поэтому указанный метод автоматически переходит в метод градиента, так как минимум по каждому направлению находится за небольшое число шагов.

На рис. 89 показаны возможные траектории движения к оптимуму при применении метода наискорейшего спуска и траектория движения к оптимуму при использовании метода градиента.

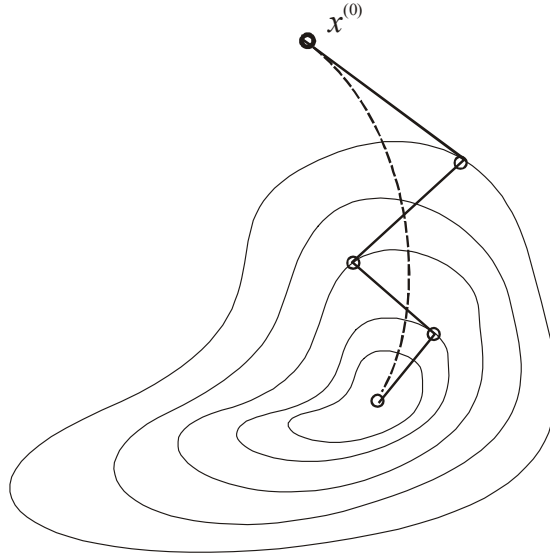


Рис. 89. Характер движения к оптимуму в методе наискорейшего спуска и методе градиента

Важной особенностью метода наискорейшего спуска является то, что при его применении каждое новое направление движения к оптимуму ортогонально предшествующему. Это объясняется тем, что движение в одном направлении производится до тех пор, пока направление движения не окажется касательным к какой-либо линии постоянного уровня.

Тем самым метод наискорейшего спуска имеет сходство с методом релаксации, для которого новое направление также ортогонально предшествующему, однако в отличие от метода релаксации скорость сходимости к оптимуму не зависит от ориентации системы координат.

В качестве критерия окончания поиска могут использоваться те же условия, что и в рассмотренных методах. Кроме того, можно также применять условие окончания поиска в форме соотношения

$$\sqrt{\sum_{j=1}^n (x_j^{(A)} - x_j^{(B)})^2} < \varepsilon, \quad (5.19)$$

где $x_j^{(A)}$ и $x_j^{(B)}$ — координаты начальной и конечной точек последнего отрезка спуска.

Этот же критерий может использоваться в сочетании с контролем значений целевой функции в точках $x_j^{(A)}$ и $x_j^{(B)}$:

$$\left| R(x^{(A)}) - R(x^{(B)}) \right| < \varepsilon. \quad (5.20)$$

Совместное применение условий (5.19) и (5.20) оправдано в тех случаях, когда оптимизируемая функция имеет резко выраженный минимум.

Относительно выбора стратегии изменения шага остаются справедливыми все рекомендации, приведенные для метода релаксации. Рассмотрим еще один метод выбора величины шага в заданном направлении, в котором используется информация, полученная на предыдущих шагах по этому же направлению. Сущность метода заключается в том, что в процессе движения вдоль заданного направления характер изменения целевой функции аппроксимируется по результатам трех последних шагов полиномом второго порядка.

При движении по заданному направлению целевая функция может считаться функцией переменного параметра h , характеризующего положение точки x на заданной прямой. Рассмотрим значения целевой функции при трех последовательных значениях h : h_1 , h_2 и h_3 (рис. 90).

Через три точки $R(h_1)$, $R(h_2)$ и $R(h_3)$ можно провести параболу:

$$\begin{aligned} R'(h_1) &= R(h_1), & R'(h_2) &= R(h_2), & R'(h_3) &= R(h_3), \\ R'(h) &= a(h - h_1)^2 + b(h - h_1) + c, \end{aligned} \quad (5.21)$$

коэффициенты a , b , c которой определяются решением системы уравнений и равны:

$$\left. \begin{aligned} a &= \frac{R(h_3) \cdot (h_2 - h_1) - R(h_2) \cdot (h_3 - h_1) + R(h_1) \cdot (h_3 - h_2)}{(h_3 - h_2) \cdot (h_3 - h_1) \cdot (h_2 - h_1)}; \\ b &= \frac{[R(h_3) - R(h_1)] \cdot (h_2 - h_1)^2 - [R(h_2) - R(h_1)] \cdot (h_3 - h_1)^2}{(h_3 - h_2) \cdot (h_3 - h_1) \cdot (h_2 - h_1)}; \\ c &= R(h_1). \end{aligned} \right\} \quad (5.22)$$

Уравнение (5.23) позволяет найти значение h_{\min} , при котором достигается минимум $R(h)$:

$$h_{\min} = h_1 - \frac{b}{2a}. \quad (5.23)$$

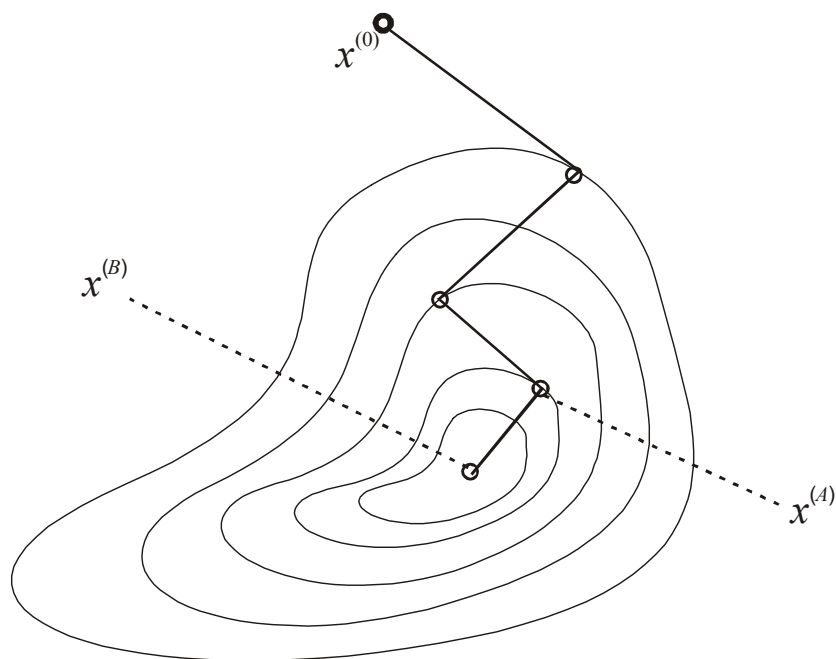


Рис. 90. К определению окончания поиска в методе наискорейшего спуска

Полученное таким образом значение h_{\min} применяется в качестве задаваемого следующего значения h_4 . Так как минимум $R(h)$, вообще говоря, не совпадает с минимумом $R(h_1)$, то при определении следующего значения h_5 используется новая аппроксимация для точек h_2 , h_3 , h_4 и т. д.

Изложенный метод расчета величины шага в некоторых случаях значительно ускоряет поиск оптимума. Его можно также применять и в методе релаксации при поиске минимума для осевого направления.

Метод крутого восхождения. Особенность метода крутого восхождения заключается в том, что в данном случае движению по градиенту предшествует локальное описание поверхности отклика с помощью полного или дробного факторного эксперимента.

В процессе проведения экспериментов с помощью метода крутого восхождения осуществляется шаговый процесс движения. Сначала выбирают исходную точку и интервалы варьирования факторов, далее ставится полный или дробный эксперимент, а затем по его результатам рассчитывают несколько мысленных опытов, соответствующих наиболее крутому направлению для движения в область оптимума. Реализация части мысленных опытов дает возможность сделать несколько шагов в направлении оптимума. После этого ведется

оценка создавшейся ситуации. Если оптимум не найден, то часто условия эксперимента меняются и вновь ставится новый полный или дробный факторный эксперимент, чтобы найти новое направление крутого восхождения к оптимуму.

Некоторые исследователи успешно применяют при выборе порядка выполнения мысленных опытов метод «ножниц», который основан на захвате оптимума в «вилку». В этом случае сначала ставят крайние опыты, а затем уточняют место оптимума внутри рассматриваемой области.

При расчете условий мысленных опытов часто обнаруживается быстрое достижение границы возможного варьирования одних факторов при условии, что другие имеет смысл продолжать изменять. В таких ситуациях рекомендуется зафиксировать одни факторы на оптимальном уровне и продолжать движение с учетом изменения других факторов. Крутое восхождение прекращается, если исследователь считает, что поиск привел к оптимуму, или при условиях, когда ограничения на факторы делают дальнейшее движение невозможным.

При оценке эффективности поиска методом крутого восхождения следует учитывать, что этот метод служит лишь для поиска области оптимума и обычно не решает вопроса о самой лучшей точке факторного пространства.

Чаще о достижении области оптимума судят по величине и характеру изменения критерия оптимизации в серии мысленных опытов.

Оптимум найден, если при поиске максимума критерий оптимизации после возрастания до некоторого предела начинает снижаться в следующих мысленных опытах. Иногда, чтобы убедиться в достоверности результатов, в районе оптимума делают ряд шагов меньшей величины, т. е. используется процедура, которая описана выше для метода наискорейшего спуска.

Положение усложняется, если область оптимума далека от рассматриваемой области факторного пространства или если вместо одноэкстремальной задачи исследователь решает многоэкстремальную задачу, особенно при наличии «оврагов» или «гребней».

В ряде случаев поиск оптимума методом крутого восхождения усложняется из-за неконтролируемого временного дрейфа критериев оптимизации, который не поддается управлению. Это возможно,

например, в результате разрушения катализатора, старения аппаратуры, изменения качества сырья и т. д. Известны методы, позволяющие снизить степень влияния временного дрейфа на эффективность поиска. Один из таких методов основан на планировании эксперимента ортогонально к дрейфу.

Планирование ортогонально к дрейфу связано с разделением обычного факторного эксперимента на группы опытов, образующих ортогональные блоки, в пределах которых величина дрейфа примерно постоянна.

5.1.2.2. Безградиентные методы. До сих пор рассматривались методы поиска оптимума, в которых для определения величины и направления шага поиска применялся предварительный анализ производных оптимизируемой функции по всем независимым переменным задачи. Нахождение производных при наличии трудновычислимого критерия оптимальности связано с необходимостью выполнения большого объема вычислений, что может привести к существенному увеличению времени поиска, особенно при большом числе независимых переменных.

Существует другая группа методов — безградиентные методы, использующие в процессе поиска информацию, получаемую не при анализе производных, а от сравнительной оценки величины критерия оптимальности в результате выполнения очередного шага.

Некоторые из этих методов целесообразно применять в сочетании с градиентными методами, что позволяет иногда построить довольно эффективные алгоритмы для решения задач нелинейного программирования.

Безградиентные методы, кроме того, по характеру наиболее пригодны для оптимизации действующих промышленных и лабораторных установок в условиях отсутствия математического описания объекта оптимизации.

Метод сечений. Простейшим безградиентным методом поиска оптимума является метод Гаусса – Зейделя (его иногда называют также методом сечений или методом поочередного изменения переменных). Этот метод поиска интуитивно применяют на практике многие исследователи.

Основан он на том, что поочередно варьируют одну из переменных при фиксированных значениях остальных. После достижения ло-

кального оптимума по изменяемой переменной значение последней фиксируют на оптимальном уровне и переходят к поиску оптимума варьированием следующей переменной.

Указанный метод имеет много общего с методом релаксации, но отличается от него тем, что здесь очередность варьирования факторов является произвольной, а поиск ведется без учета осевых направлений наиболее сильного изменения функции цели. Для случая поиска в двухмерном пространстве оба сравниваемых метода дают одинаковый эффект, но при увеличении числа факторов метод релаксации, как правило, позволяет быстрее найти область оптимума. В отличие от метода релаксации, рассматриваемый метод требует меньшего объема вычислений, так как не нужно находить производную целевой функции при переходе от варьирования одного фактора к варьированию другого. Однако это преимущество нейтрализуется большим временем поиска из-за увеличения числа шагов.

Опыт практического применения метода сечений показывает, что он эффективен лишь тогда, когда линии постоянного уровня имеют вид эллипсов или окружностей с осями, параллельными осям координат, т. е. в ситуациях, когда незначимы эффекты взаимодействия факторов. Такие ситуации встречаются сравнительно редко. Метод совершенно непригоден при поиске, связанном с движением на поверхности с крутым «гребнем» или «оврагами».

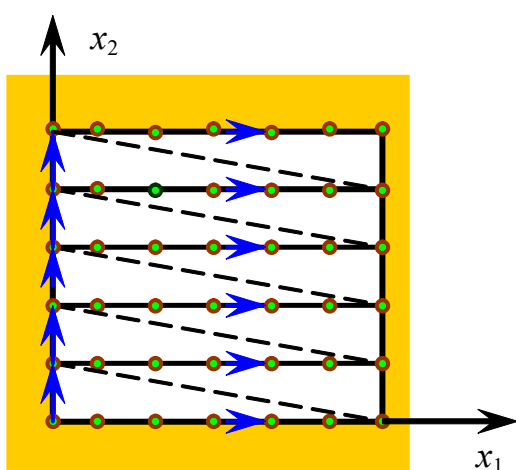


Рис. 91. Характер поиска методом сканирования

Метод сканирования. Метод сканирования заключается в последовательном просмотре значений критерия оптимальности в ряде точек, принадлежащих области изменения независимых переменных, и нахождении среди этих точек такой, в которой критерий оптимальности имеет минимальное (максимальное) значение. Точность метода, естественно, определяется тем, насколько «густо» располагаются выбранные точки в допустимой области изменения независимых переменных.

Основным достоинством метода сканирования является то, что при его использовании с достаточно «густым» расположением исследуемых точек всегда гарантируется отыскание глобального оптимума, так как анализируется вся область изменения независимых переменных. Другое достоинство — независимость поиска от вида оптимизируемой функции.

К недостаткам метода относится, в первую очередь, необходимость вычисления значений целевой функции для большого числа точек. Это должно гарантировать, что оптимум не будет пропущен при применении данного метода поиска.

Общий недостаток градиентных методов оптимизации, за исключением, может быть, метода «тяжелого шарика», состоит в том, что все они «застревают» в ближайшем локальном оптимуме, в область «притяжения» которого попадает выбранная начальная точка спуска. В отличие от этих методов метод сканирования никак не связан с наличием локальных оптимумов целевой функции. Поэтому его можно использовать иногда для предварительного грубого установления границ областей «притяжения» указанных оптимумов, после чего могут уже применяться градиентные методы спуска для измерения точной «глубины» каждого локального оптимума.

Наиболее простой алгоритм поиска оптимума методом сканирования, называемый еще иногда поиском на сетке переменных, заключается в том, что по каждой из независимых переменных даются приращения в соответствующем порядке, обеспечивающем заполнение всей области изменения этих переменных равномерной и достаточно густой сеткой. В простейшем случае двух переменных x_1 и x_2 сканирование сводится к просмотру значений критерия оптимальности при заданном значении одной переменной x_2 для ряда значений другой x_1 , которые определяются как отстоящие друг от друга на величину шага Δx_1 по переменной x_1 . После того как весь диапазон изменения переменной x_1 при заданном значении x_2 исследован и для него найдено минимальное значение критерия оптимальности, изменяется значение переменной x_2 на величину некоторого шага Δx_2 по этой переменной и т. д. Графическое представление поиска методом сканирования при двух переменных показано на рис. 91.

Для произвольного числа независимых переменных шаг по каждой следующей переменной производится после того, как полностью завершён цикл по предыдущей.

Особенно просто обстоит дело, если ограничения заданы в виде неравенств, когда приемлемость точки решается простой проверкой этих условий. Однако метод сканирования можно применить также и в случае, если ограничения имеют вид равенств. Наиболее простой путь при этом состоит в замене ограничения типа (5.24) ограничением (5.25):

$$\varphi(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 ; \quad (5.24)$$

$$\varphi(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq \delta , \quad (5.25)$$

определяющим некоторую ε -окрестность гиперповерхности, описываемой уравнением (5.24), где и используется метод сканирования.

Другой прием, который может быть применен при ограничениях типа равенств, используется тогда, когда ограничение (5.24) представляется в виде

$$x_j = \Psi(x_1, \dots, x_j, x_{j+1}, \dots, x_n) . \quad (5.26)$$

При этом сканирование ведется по $n - 1$ переменным, а соответствующее значение переменной x_j рассчитывается из выражения (5.26). Разумеется, что найденное значение x_j также должно проверяться на допустимый диапазон изменения, который для нормализованных переменных, например, равен $[0, 1]$.

Нетрудно получить оценку вычислительных затрат при применении метода сканирования. Так, в случае поиска оптимума целевой функции при условии, что точность определения положения этого оптимума равна Δ , т. е. искомые значения нормализованных переменных не должны отличаться от истинного положения оптимума на величину, большую, чем Δ , число рассчитываемых значений целевой функции составит

$$S = \left(\frac{l}{\Delta} \right)^n , \quad (5.27)$$

где n — число независимых переменных решаемой задачи (размерность задачи).

Для отыскания оптимума функции двух переменных $R(x_1, x_2)$ с точностью $\Delta = 10^{-3}$ по формуле (5.27) находим: $S = (10^3)^2 = 10^6$.

Для отыскания оптимума функции трех переменных $R(x_1, x_2, x_3)$ с той же точностью получим: $S = (10^3)^3 = 10^9$.

Таким образом, число вычислений критерия оптимальности при определении положения оптимума методом сканирования возрастает в показательной зависимости от размерности решаемой задачи. Поэтому эффективное применение данного метода в основном ограничивается задачами невысокой размерности, если используется простейший алгоритм поиска, рассмотренный выше, для отыскания оптимума с невысокой точностью.

Существуют различные модификации метода сканирования, применяемые в основном для сокращения объема вычислений. Одна из таких модификаций заключается в том, что используется алгоритм с переменным шагом сканирования. Вначале величина шага выбирается достаточно большой, по возможности значительно превышающей требуемую точность определения положения оптимума, и выполняется грубый поиск, который локализует область нахождения глобального оптимума. После того как эта область определена, производится поиск с меньшим шагом только в пределах указанной области. Практически можно организовать целый ряд таких процедур последовательного уточнения положения оптимума.

Необходимый объем вычислений значений целевой функции при этом существенно сокращается и может быть подсчитан по формуле

$$S = k^{rn} \cdot \left(\frac{1}{\Delta}\right)^n + r \cdot (2k)^n, \quad (5.28)$$

где n — размерность задачи; Δ — точность отыскания оптимума; r — число этапов уточнения поиска, на которых шаг поиска уменьшается в k раз.

Начальный шаг сетки переменных в данном случае определяется формулой

$$\Delta_0 = k^r \cdot \Delta. \quad (5.29)$$

Для функции трех переменных $R(x_1, x_2, x_3)$ соответственно можно найти

$$S = 10^{-6} \cdot (10^3) + 2 \cdot (20)^3 = 17\,000,$$

т. е. выигрыш по сравнению с применением постоянного шага еще более значителен.

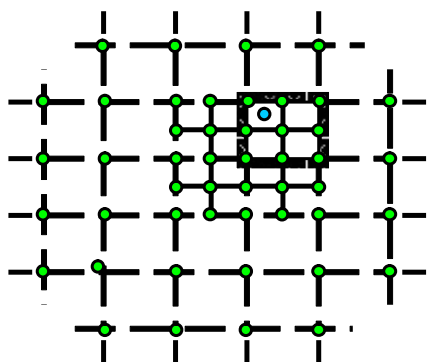


Рис. 92. Поиск методом сканирования с переменным шагом

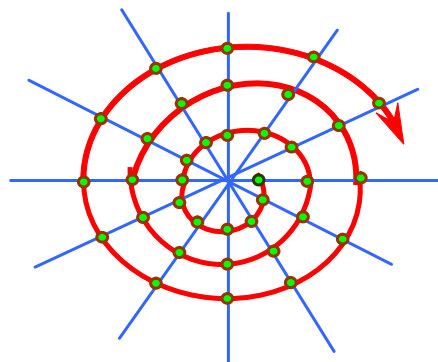


Рис. 93. Сканирование по спирали

На рис. 92 показан поиск с переменным шагом для функции двух переменных.

Важнейшим моментом при использовании метода сканирования с переменным шагом является выбор начального грубого шага поиска. Если начальная величина шага Δ_0 выбрана слишком большой, то может возникнуть опасность пропуска глобального оптимума. Если же начальный шаг выбран слишком малым, то может быть велик необходимый для поиска объем вычислений. При выборе величины начального шага существенную помощь может оказать информация о поведении целевой функции, наличии локальных экстремумов и т. д. имеются и другие модификации метода сканирования, например сканирование по спирали (рис. 93), за счет чего также удастся сократить объем вычислений. При этом можно иногда предположить, что если при очередном витке спирали меньшее значение функции цели не найдено, то оптимум расположен внутри данного витка.

Положение оптимума может быть уточнено, если перенести центр сканирования в определенную на предыдущем этапе точку наименьшего значения функции цели и новое сканирование проводить с уменьшенным приращением радиуса витка.

Следует отметить, что сканирование по спирали удобно применять лишь для случая двух независимых переменных, так как при большем числе переменных расчеты положения очередной проверяемой точки существенно усложняются. Например, для трех переменных исследуемыми точками нужно покрывать уже сферическую поверхность.

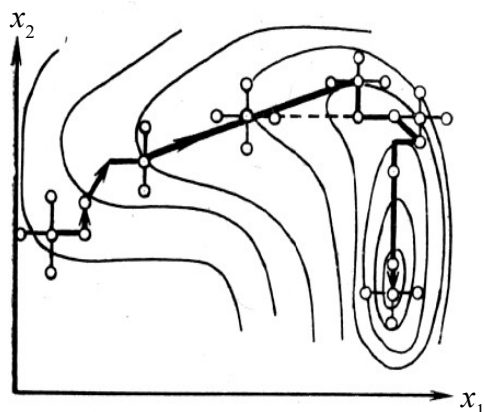


Рис. 94. Схема движения к оптимуму методом конфигураций

Метод конфигураций. Известны примеры успешного применения на практике методов поиска, основанных на шаговом движении по поверхности отклика по «гребню», метода конфигураций, метода вращающихся координат и др.

Метод конфигурации связан с движением, которое определяется независимым изменением каждого фактора.

Из исходной, произвольно выбранной точки делают два шага в направлении, параллельном одной из осей координат. Получают пару базовых точек, которые определяют первую конфигурацию. Дальнейший поиск ведут из той базовой точки, которая оказалась лучшей (по сравнению со второй базовой и исходной точками).

Если обе базовых точки оказались плохими, то поиск продолжают из исходной точки, но по следующей независимой переменной (в направлении, которое параллельно другой оси координат). При переходе к новым базовым точкам предполагают, что направление движения к оптимуму, найденное на предыдущем этапе, сохраняется постоянным. В таких случаях отказываются от пробных шагов вблизи очередной точки, а сразу делают двойной шаг в выбранном направлении, что приводит к вершине новой конфигурации точек. Из указанной вершины вновь делают пробные шаги и находят новые базовые точки. Далее опять делают двойной шаг в выбранном направлении и т. д. Метод конфигурации дает наибольший эффект, если поиск ведется вдоль прямолинейных «гребней» (такой случай показан на рис. 94). По мере приближения к оптимуму рекомендуется постепенно сокращать длину пробных шагов.

Метод вращающихся координат отличается от метода конфигураций тем, что до начала движения ориентируют систему координат так, чтобы одна из ее осей совпадала с направлением предполагаемого «гребня» на поверхности отклика (направление «гребня» определяют на основании предыдущей серии опытов). После этого отпадает необходимость в пробных шагах, и сразу начинают движение вдоль

«гребня». Завершив серию шагов, вновь поворачивают оси и т. д. Это способствует ускорению поиска.

Симплекс-планирование. Симплекс — это простейшая выпуклая геометрическая фигура, образованная множеством $(n+1)$ независимых точек в n -мерном пространстве и обладающая минимальным количеством вершин (вершинами называются точки, образующие симплекс).

В n -мерном пространстве число вершин симплекса равно $n + 1$. Примером симплекса в двухмерном пространстве, т. е. на плоскости, является треугольник (рис. 95а). В трехмерном пространстве симплексом будет любая четырехгранная пирамида, имеющая четыре вершины, каждая из которых образована пересечением трех плоскостей — граней пирамиды (рис. 95б). Отметим одно свойство симплекса: против любой из вершин симплекса S_j расположена только одна грань, на которой можно построить новый симплекс, отличающийся от прежнего расположением новой вершины S_j , тогда как остальные вершины обоих симплексов совпадают. Вершина нового S_j симплекса, вообще говоря, может находиться и по другую сторону грани от вершины S_j . Именно это свойство симплекса и обусловило возможность его применения при решении оптимальных задач, в которых требуется отыскать экстремальные точки целевых функций.

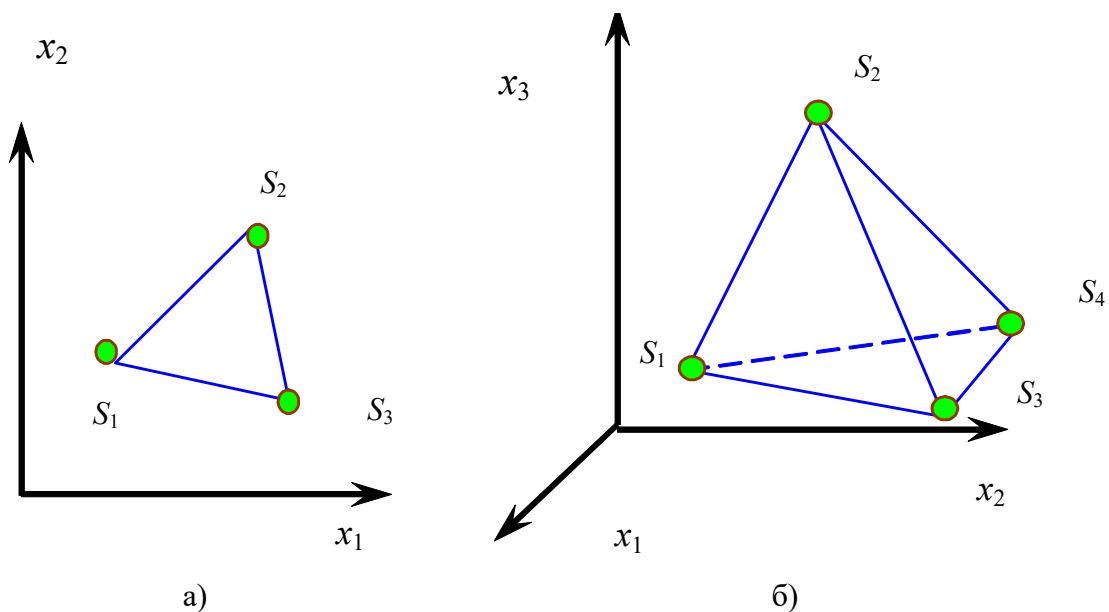


Рис. 95. Примеры симплексов на плоскости (а) и в пространстве (б)

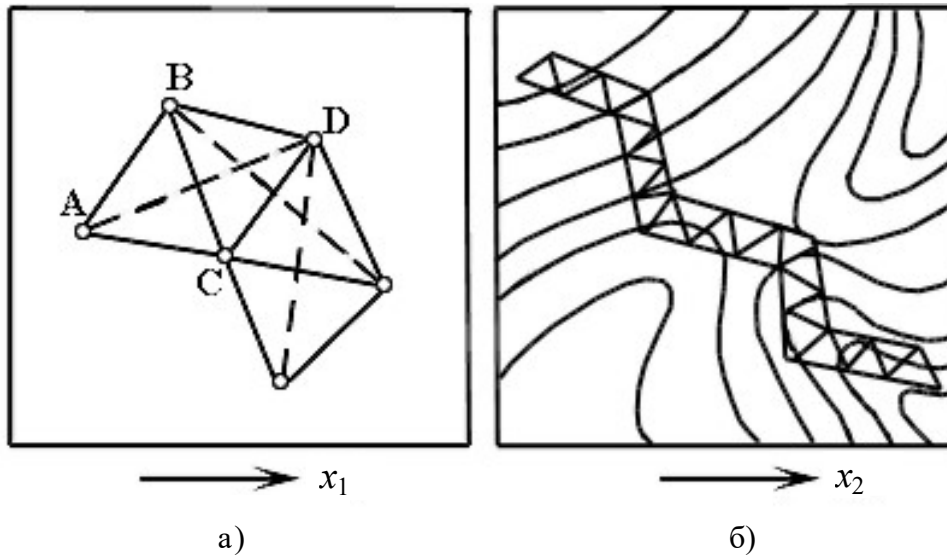


Рис. 96. Траектория поиска оптимума методом отражения наихудшей точки

Метод последовательного симплекс-планирования (или просто симплекс-планирование) относится к числу безградиентных методов поиска оптимума в многомерном пространстве. В отличие от градиентных методов, он не требует вычисления производных функции цели, 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 функции цели (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 функции.

Следовательно, сравнивая эту величину в трех точках A , B , C (рис. 96а), можно определить, в какой из них содержится наибольшее (наихудшее). На рис. 96а 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 рис. 96б показан пример поиска оптимума целевой функции с помощью этого метода. Координаты вершины нового симплекса определяются по следующему алгоритму:

$$x^{(j+1)} = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^{N+1} x_i - \left(1 - \frac{2}{n}\right) x^{(j)}. \quad (5.30)$$

Дальнейшее совершенствование этого метода отражено в алгоритмах деформируемого многогранника и скользящего допуска.

Важным достоинством симплекс-планирования является возможность успешного применения метода при движении в тех случаях, когда надо учитывать одновременно несколько критериев оптимизации (при решении компромиссных задач). Для одноэкстремальных задач этот метод часто приводит в область оптимума так же быстро, как метод крутого восхождения.

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.

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 не после серии опытов, как по методу крутого восхождения, а после каждого 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.

Перемещение из центра каждого симплекса через грань, противоположную вершине с минимальным значением параметра опти-

мизации, обычно совпадает с направлением крутого восхождения, рассчитанного по результатам опытов, выполненных в вершинах симплекса. В связи с этим движение дает максимальный эффект для единичного шага, если направление крутого восхождения перпендикулярно одной из граней симплекса.

Стратегия симплекс-планирования определяется правилами, знание которых позволяет правильно решить три задачи:

- записать исходный симплекс;
- найти координаты следующих точек при движении;
- своевременно закончить движение.

Фрагмент программы записи исходного симплекса:

m — число независимых переменных;
 $x0()$ — массив начальных значений параметров;
 $xa()$ — массив интервалов варирования переменных;
 $m1$ — число вершин симплекса;

```

m1 = m+1
For j = 1 To m1
  For i = 1 To m
    If j < i Then z(i, j) = sqrt(1/(2 * i * (i + 1)))
    If j = i + 1 Then z(i, j) = 0
  Next i
Next j
For j = 1 To m1
  For i = 1 To m
    x(i, j) = x0(i) + xa(i) * z(j, i)
  Next i
Next j

```

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 сим-

плекса 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.

Влияние ошибок эксперимента на ориентацию симплекса не является опасным также и из-за того, что симплексы не имеют обычно постоянно повторяющихся направлений движения.

Установлено, что влияние ошибок эксперимента на эффективность симплекс-планирования снижается при увеличении числа рассматриваемых факторов.

Эффективность симплекс-планирования в минимальной степени зависит от наличия временного дрейфа параметра оптимизации или независимых переменных, потому что при каждом следующем шаге используется наиболее свежая, а значит самая достоверная информация.

Под влиянием ошибок эксперимента симплекс может прекратить поступательное движение; при этом начинается его вращение вокруг одной из вершин. Данное явление называется зацикливанием симплекса.

Причиной зацикливания симплекса могут быть не только ошибки эксперимента; чаще оно 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 зацикливание, 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 разме-

ра симплекса заикливание наступает опять, то иногда еще раз уменьшают симплекс и т. д., пока интервалы варьирования факторов не будут соизмеримы с ошибкой измерений.

Метод симплекс-планирования является одним из наиболее эффективных методов поиска оптимума. Этот метод часто дает лучшие результаты по сравнению с методами градиента и случайного поиска.

При симплекс-планировании центр эксперимента перемещается после каждого опыта, так же как и при методе случайного поиска. Правда, в отличие от последнего, направление движения не случайное, а близкое к направлению градиента.

Сравнение симплекс-планирования и метода крутого восхождения показало, что и там, и там направление движения обычно совпадает, близким является и число опытов, необходимых для достижения области оптимума. Однако вблизи оптимума при симплекс-планировании экспериментальные точки начинают концентрироваться, а при крутом восхождении движение продолжается по прямой.

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 рис. 97.

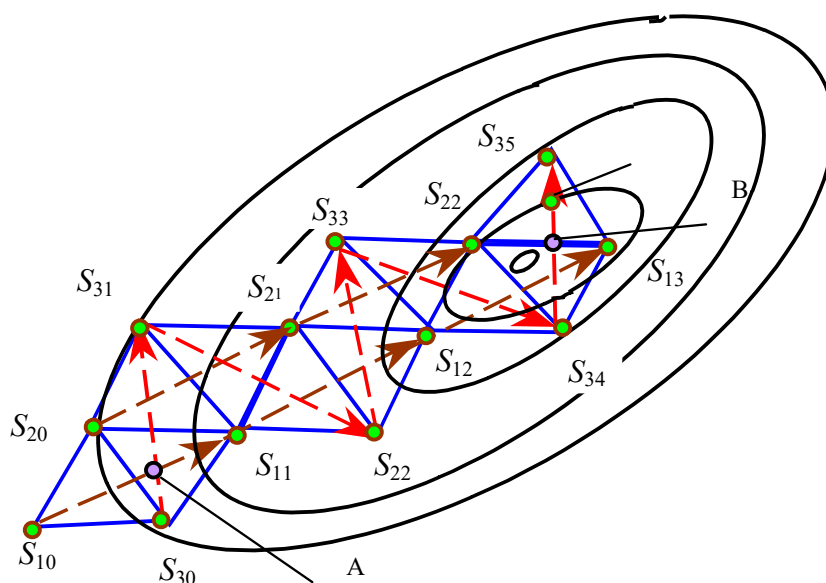


Рис. 97. Поиск оптимума симплексным методом

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 рис. 97 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 S_{10} относительно центра грани симплекса, находящейся против вершины S_{10} . Для варианта, изображенного на рис. 97, 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 рис. 97 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.

Случай 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.

Рассмотрим порядок построения нового симплекса для задач произвольной размерности n .

Пусть вершинам S_i ($i = 1, \dots, n+1$) исходного симплекса отвечают координаты

$$x^{(i)} = (x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}), \quad i = 1, \dots, n+1. \quad (5.31)$$

Предположим, что наибольшее значение целевой функции соответствует вершине S_j . Определим координаты вершины S_j , нового симплекса.

Согласно правилу построения вершины нового симплекса, вершина S_j располагается в точке, симметричной вершине S_j относительно центра грани, находящейся против вершины S_j .

Координаты центра этой грани $x^{(A)}$ могут быть определены по формуле

$$x^{(A)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1, i \neq j}^{n+1} x^{(i)}, \quad (5.32)$$

где суммирование ведется только по тем векторам $x^{(i)}$, которые отвечают вершинам $S^{(i)}$, образующим грань $u = x^{(A)} - x^{(i)}$. Вектор u , характеризующий расстояние от вершины S_j до центра противоположной грани, в данном случае будет

$$\tilde{x}^{(j)} = x^{(A)} - x^{(j)}. \quad (5.33)$$

Для того чтобы найти координаты вершины \check{S}_j нового симплекса, следует воспользоваться выражением

$$\tilde{x}^{(j)} = \frac{2}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n+1} x^{(i)} - \left(1 + \frac{2}{n}\right) \cdot x^{(j)}, \quad (5.34)$$

подставляя в которое значение $x^{(A)}$ из формулы (5.32), в окончательном виде получим формулу

$$\tilde{x}^{(j)} = x^{(A)} + \frac{1}{2} \cdot u = \frac{3}{2} \cdot x^{(A)} - \frac{1}{2} \cdot x^{(j)}, \quad (5.35)$$

определяющую координаты вершины S_j нового симплекса.

Если в процессе применения симплексного метода возникает закливание, то для уменьшения размеров симплекса вместо формулы (5.34) можно пользоваться выражением

$$\tilde{x}^{(j)} = \frac{3}{2n} \cdot \sum_{i=1}^{n+1} x^{(i)} - \frac{1}{2} \cdot \left(1 + \frac{3}{n}\right) \cdot x^{(j)}. \quad (5.36)$$

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.

Метод деформируемого многогранника. Данный алгоритм предназначен для оптимизации целевой функции при условии, что ограничения на независимые переменные отсутствуют.

Начальные условия: $N + 1$ точек (N — количество переменных) задают исходный многогранник, на основе которого будет производиться поиск. Основная его идея — замена наихудших точек в многограннике более лучшими, т. е. дающими меньшее значение целевой функции (в случае, если требуется исследовать функцию на максимум, она умножается на -1 , и исследование сводится к поиску минимума). Эта замена производится путем применения, в зависимости от ряда условий, к вершинам многогранника операций отражения, растяжения, сжатия и редукции.

Таким образом, на некотором шаге алгоритма имеется многогранник $(X(1), X(2), \dots, X(N + 1))$.

1. Для каждого из них вычисляются значения целевой функции $F(X(K))$. Среди них отмечаются наилучшее (F_{\min}), наихудшее (F_{\max}) и наихудшее среди наилучших, т. е. второе по величине значение целевой функции — F_{\max}' .

2. Вычисляется значение центра тяжести всех вершин многогранника, за исключением наихудшей. Эта точка $(X(N + 2))$ будет служить центром проектирования наихудшей вершины.

3. Точка $(X(N + 2))$ отражается относительно центра тяжести и переходит в новую точку $X(N + 3)$.

4. В найденной точке вычисляется значение целевой функции $F(X(N + 3))$ — и сравнивается с F_{\min} . Если оно не хуже (т. е. меньше либо равно), то осуществляется переход к шагу 5. Иначе — к шагу 6.

5. Отраженная точка $X(N + 3)$ растягивается с некоторым коэффициентом относительно центра тяжести $(X(N + 2))$. Значение целевой функции в полученной точке $X(N + 4)$ сравнивается с F_{\min} . Если оно оказывается лучше него, то наихудшая точка многогранника заменяется на $X(N + 4)$ и осуществляется переход к шагу *End*. В противном случае наихудшую точку замещает $X(N + 3)$ и также осуществляется переход к шагу *End*.

6. Значение $F(X(N + 3))$ сравнивается с F_{\max} . Если оно хуже его, то осуществляется переход к шагу 7. В противном случае — к шагу 8.

7. Наихудшая вершина заменяется точкой $X(N + 5)$, которая получается путем сжатия последней относительно центра тяжести с некоторым коэффициентом. После этого осуществляется переход к шагу *End*.

8. Значение $F(X(N + 3))$ сравнивается с F_{\max} . Если оно лучше него, то наихудшая точка замещается точкой, полученной в результате операции редукции всех точек многогранника относительно наилучшей.

В противном случае наихудшая точка заменяется на $X(N + 3)$.

Алгоритм завершается в том случае, если:

- многогранник выродился в точку;
- значение целевой функции уменьшилось до некоторого числа;
- количество попыток улучшения целевой функции достигло некоторой критической отметки.

В этом случае решением считается последняя наилучшая точка.

В случае, если ни один из этих пунктов на текущем шаге не выполняется, осуществляется переход к шагу 1 с увеличением значения счетчика попыток.

Достоинства:

- пригоден для оптимизации любых целевых функций вне зависимости от их вида;
- метод учитывает характер изменения целевой функции;
- скорость решения практически не зависит от местонахождения исходной (базовой) точки для поиска, на основе которой строится начальный многогранник;
- скорость продвижения к оптимальной точке варьируется в зависимости от ее удаленности от текущей;
- алгоритм построен таким образом, что практически отсутствуют бесполезные попытки улучшения целевой функции.

Недостатки:

- пригоден только для решения задач без ограничений;
- существует некоторая вероятность того, что наилучшая точка не будет найдена (если, например, имеется несколько изолированных зон, значения в которых весьма близки, но сами они значительно удалены друг от друга);
- большинство задач решается медленнее, чем методом случайного локального поиска (если в последнем удачно выбрана стартовая точка).

Метод скользящего допуска. Метод является одним из самых эффективных при оптимизации целевых функций с наличием ограничений. Для него практически не имеют значения ни вид функций (целевой или ограничений), ни количество переменных, ни характер ограничений (равенства или неравенства).

Для метода имеет значение количество ограничений типа равенств: их количество не должно превышать число независимых переменных, так как разность между этими числами определяет степень свободы целевой функции (R).

В основе метода лежит минимизация функции допуска F_x , определяющей степень нарушения ограничений на переменные:

$$F_x = \text{sqrt}(1(Gk(X)) + \text{sqr}(Hl(X))), \quad (5.37)$$

где sqrt — функция извлечения корня квадратного; sqr — функция возведения в квадрат; $1(f(X))$ — функция Хевисайда (единичного скачка); Gk — ограничения в виде неравенств; Hl — ограничения в виде равенств.

Функция допуска минимизируется любым из известных методов минимизации при отсутствии ограничений. Полученная точка становится основой для многогранника, который также минимизируется методом деформируемого многогранника.

Перед началом вычислений необходимо иметь следующую информацию:

- исходные данные;
- параметры метода;
- точность допуска F_x — значение допуска, при котором расчеты прекращаются и результат считается достигнутым;
- максимальное количество попыток улучшения допуска и целевой функции. Оно определяет число изменений, производимых в многограннике целевой функции, для которого делаются попытки уменьшения допуска.

Методы случайного поиска. Методы случайного поиска основаны на шаговом движении в область оптимума в условиях, когда направление движения при каждом шаге выбирают как случайное из совокупности возможных движений. Перемещение в факторном пространстве осуществляется от одной случайной точки к другой; координаты случайных точек обычно находят с помощью известных сово-

купностей случайных чисел, равномерно распределенных в определенном интервале.

Из известного многообразия методов случайного поиска чаще всего на практике применяют метод слепого поиска, различные варианты метода случайных направлений (поиск с обратным шагом, поиск с пересчетом и т. д.) или метод движения с «наказанием случайностью».

Достоинство методов случайного поиска заключается в том, что они не требуют знания формы поверхности отклика при выборе направления движения, могут успешно использоваться при решении многоэкстремальных задач и эффективны при существенных ошибках опытов. Эти методы часто позволяют решать компромиссные задачи, связанные с нелинейными ограничениями на факторы и независимые переменные. Когда, например, метод случайного поиска применяется для поиска оптимума при ограничениях в виде неравенств, появляется лишь большое число неудачных точек, так как шаг считается неудачным, если он ведет к нарушению ограничений. В таких ситуациях движение не останавливается, а просто делают из той же точки другой шаг с учетом используемой стратегии случайного поиска.

Методы случайного поиска являются одними из основных при решении компромиссных задач, которые связаны с рассмотрением системы нелинейных уравнений при нелинейных ограничениях на зависимые переменные и критерии оптимизации. Часто эти методы успешно сочетают с другими методами. Так, при движении в область оптимума в случае очень большого числа учитываемых независимых переменных сначала применяют случайный поиск (здесь на первой стадии он весьма эффективен), а затем используют градиентные методы. Сочетание случайного поиска с «овражным» методом зачастую позволяет преодолеть значительные затруднения при движении по «оврагам». Метод слепого поиска связан с движением в случайных направлениях, когда каждый следующий шаг выбирается независимо от остальных. Метод основан на сравнении значений функции цели в новых случайных точках и в точках, которые были найдены ранее. После нахождения точки с более «хорошими» свойствами ее запоминают (фиксируют значение критерия оптимизации и координаты точки), а затем продолжают случайный поиск более близкого приближения к оптимуму.

Основная идея методов случайного поиска заключается в том, чтобы перебором случайных совокупностей значений независимых переменных найти оптимум целевой функции или направление движения к нему.

Существует значительное число методов случайного поиска, из которых далее описаны лишь некоторые, наиболее распространенные. Общим для всех методов случайного поиска является применение случайных чисел в процессе поиска:

$$\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n). \quad (5.38)$$

Введем понятие случайного вектора, определенного в n -мерном пространстве относительно вектора a . Предположим, что он с равной вероятностью может принимать любое направление в n -мерном пространстве и имеет длину, равную 1. Такой вектор может быть получен из последовательности случайных чисел β_j ($j = 1, \dots, n$), равномерно распределенных на числовом интервале $[-b, b]$.

Для нахождения случайного вектора α с помощью последовательности случайных чисел β_j выразим компоненты случайного вектора α соотношениями

$$\alpha_j = \frac{\beta_j}{\sqrt{\sum_{k=1}^n \beta_k^2}} \quad j = 1, \dots, n. \quad (5.39)$$

При таком способе определения случайного вектора α его длина будет равна 1, так как в силу соотношений (5.39) можно записать очевидное равенство:

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j^2 = 1. \quad (5.40)$$

Таким образом, вектор α , компоненты которого рассчитываются по формуле (5.39), характеризует случайное направление в n -мерном пространстве.

Кроме понятия выбора случайного направления в n -мерном пространстве, определим также понятие выбора случайной точки в заданной области этого пространства. Под случайным выбором некоторой точки в заданной области пространства в дальнейшем понима-

ется случайный выбор с вероятностью попадания в заданную окрестность любой точки указанной области, равной отношению объема окрестности точки к объему всей области.

Координаты случайной точки в n -мерном пространстве $\xi_j (j = 1, \dots, n)$ также могут быть найдены с помощью совокупности случайных чисел $\beta_j (j = 1, \dots, n)$, равномерно распределенной на интервале $[-b, b]$.

Слепой поиск. При использовании слепого поиска в допустимой области изменения независимых переменных случайным образом выбирается точка, в которой вычисляется значение целевой функции. Далее аналогично выбирается другая точка, где также рассчитывается значение функции цели и сравнивается с полученным ранее. Если новое значение функции цели оказывается меньше (больше) предыдущего, то это значение запоминается вместе с координатами точки, для которой оно было вычислено. Затем продолжается выборка случайных точек и сравнение значений целевой функции в этих точках с уже найденным. Каждый раз, когда получается меньшее значение целевой функции, оно запоминается вместе с соответствующими значениями координат, после чего продолжается поиск лучшего приближения к оптимуму.

Теоретически при применении такой стратегии и достаточно большом числе испытаний можно достигнуть сколь угодно высокой степени точности в определении положения оптимума. Однако на практике использование слепого поиска существенно ограничивается размерностью решаемой задачи и сложностью вычисления значений целевой функции. Так, например, если требуется найти положение оптимума с точностью Δ , определяемой как допустимое отклонение координат от истинной точки оптимума, то при выборке случайных точек необходимо хотя бы один раз попасть в Δ -окрестность точки оптимума.

Пусть допустимая область изменения переменных X имеет объем V_x , равный 1, а объем Δ -окрестности точки оптимума $M = S$.

Тогда вероятность попадания случайной точки в Δ -окрестность точки оптимума будет

$$p_{\Delta}^{(1)} = \frac{V_{\Delta}}{V_x} = \Delta^n. \quad (5.41)$$

Если теперь производится s выборок случайных точек, то вероятность попадания хотя бы одной из них в заданную Δ -окрестность оп-

тимума $p\Delta(s)$ в соответствии с правилами исчисления вероятностей составляет:

$$p_{\Delta}^{(s)} = 1 - [1 - p_{\Delta}^{(1)}]^s = 1 - (1 - \Delta^n)^s; \quad (5.42)$$

$$s = \frac{\ln(1 - p_{\Delta})}{\ln(1 - \Delta^n)} \approx \left(\frac{1}{\Delta}\right)^n \ln \frac{1}{1 - p_{\Delta}}.$$

Из формулы (5.42) определяется число выборов случайных точек s , необходимое для того, чтобы с вероятностью $p\Delta$ можно было утверждать, что найденное по этим точкам положение оптимума с точностью до Δ соответствует истинному: $s = (10^3)^2 \cdot \ln 2 = 1,4 \cdot 10^6$.

Таким образом, в методе слепого поиска число требуемых вычислений значений целевой функции весьма резко увеличивается с возрастанием размерности решаемой задачи. Подобные проблемы уже встречались при рассмотрении поиска оптимума методом сканирования, где для устранения трудностей с размерностью иногда может использоваться поиск с переменным шагом сканирования. Точно такой же прием можно применить и в методе слепого поиска, если после выполнения определенной серии проб дальнейший поиск (уточнение) производить в некоторой суженной области, охватывающей найденную в предыдущей серии точку наименьшего (наибольшего) значения функции цели. При этом вероятность попадания в заданную Δ -окрестность оптимума возрастает, за счет чего можно существенно сократить общий объем вычислений.

Метод случайных направлений. Алгоритм этого метода заключается в том, что из точки n -мерного пространства, для которой значение $R(x^{(k)})$ функции цели уже рассчитано, производится шаг в случайном направлении, определяемом случайным вектором $\alpha^{(k)}$. Величина шага задается параметром h . В результате находится новая точка, в которой вычисляется значение функции цели:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + h_{\alpha}^{(k+1)}. \quad (5.43)$$

Если при выполнении случайного шага $h_{\alpha}^{(k)}$, приводящего в точку $x^{(k+1)}$, получается меньшее (большее) значение функции цели, то он считается удачным и новое значение $R(x^{(k+1)})$ запоминается со-

вместно с координатами точки $x^{(k+1)}$. Затем делается новый шаг $h_\alpha^{(k+1)}$ в случайном направлении и т. д.

Если же случайный шаг $h_\alpha^{(k)}$ оказывается неудачным, то производится выборка следующего случайного вектора b и из точки $x^{(k)}$ снова выполняется шаг. Пробные шаги из точки $x^{(k)}$ делаются до тех пор, пока не будет найдена точка $x^{(k+1)}$, в которой функция цели имеет меньшее (большее) значение, после чего пробные шаги выполняются уже из точки $x^{(k+1)}$.

Поиск заканчивается, если после выполнения серии из s шагов меньшего (большого) значения функции цели найти не удастся. Для практических расчетов число шагов в серии s часто принимается равным размерности решаемой задачи n .

Можно несколько изменить изложенный выше алгоритм поиска, используя шаг $h^{(k)}$ переменной величины. При этом эффективность поиска может несколько возрасти вследствие применения более крупного шага поиска вдали от оптимума. В данном случае после выполнения серии из s неудачных шагов поиск не заканчивают, а уменьшают только величину шага $h^{(k)}$, вслед за чем отсчет шагов в серии возобновляется. Критерием окончания поиска служит минимальный размер шага h_{\min} , которым и задается точность определения оптимума.

Метод случайных направлений с обратным шагом. Этот метод случайного поиска по существу представляет собой улучшение алгоритма, рассмотренного выше. Отличительной его особенностью является то, что при неудачном шаге $h_\alpha^{(k)}$ из точки $x^{(k)}$ сразу производится шаг в обратном направлении $-h_\alpha^{(k)}$. При достаточном удалении от оптимума такая стратегия поиска оказывается весьма эффективной. Если и обратный шаг оказывается неудачным, то можно либо сделать новый случайный шаг из точки $x^{(k)}$, либо перейти к поиску с уменьшенным размером шага также из точки $x^{(k)}$. В последнем случае существует опасность замедления поиска вдали от оптимума, особенно когда оптимизируемая функция имеет «овраги».

Метод случайных направлений с пересчетом. Эта модификация метода случайных направлений может использоваться, если кривизна оптимизируемой функции относительно невысока, и в пределах одного шага поиска изменение целевой функции можно аппроксимировать линейной формой.

Основная особенность алгоритма состоит в том, что после неудачного шага из исходной точки $x^{(k)}$ в случайном направлении из той же точки делается шаг в противоположном направлении, как и в методе с обратным шагом, но значение целевой функции в точке $x^{(k)} - h_\alpha^{(k)}$ не определяется, а в соответствии с вычисленными значениями $R(x^{(k)})$ и $R(x^{(k)} + h_\alpha^{(k)})$ пересчитывается в предположении линейности целевой функции по формуле

$$R(x^{(k+1)}) = R(x^{(k)} - h_\alpha^{(k)}) = 2R(x^{(k)}) - R(x^{(k)} + h_\alpha^{(k)}), \quad (5.44)$$

и дальнейший поиск производится из точки $x^{(k+1)}$.

Метод спуска «с наказанием случайностью». Этот метод по существу представляет собой аналог метода наискорейшего спуска или метода релаксации с той разницей, что направление спуска выбирается случайным образом. После того как шаги в выбранном «удачном» направлении приводят в точку минимума (максимума) функции цели по данному направлению и следующий шаг оказывается неудачным, находится новое случайное направление, по которому спуск продолжается.

Следует заметить, что эффективность такого спуска вряд ли превышает эффективность методов случайных направлений, рассмотренных выше, в которых на каждом шаге определяется новое направление. Это объясняется тем, что вычислительные затраты на поиск направления на каждом шаге и спуск шагами по одному направлению отличаются лишь наличием или отсутствием выбора случайного вектора, а по сравнению с расчетом одного значения целевой функции объем вычислений, необходимый для указанного выбора, может оказаться незначительным. Поэтому метод спуска «с наказанием случайностью» целесообразно использовать тогда, когда для нахождения значения целевой функции не требуется больших вычислительных затрат.

Метод случайного локального поиска. Методы случайного поиска отличаются от детерминированных методов оптимизации намеренным введением элемента случайности. Это означает, что в одной и той же обстановке решение о направлении и величине рабочего шага будет разным.

Такое поведение является не только целесообразным, но в большом числе случаев и более эффективным.

Метод случайного поиска является прямым развитием известного метода проб и ошибок, когда решение ищется случайно и при удаче принимается, а при неудаче отвергается с тем, чтобы немедленно снова обращаться к случайности как к источнику возможностей. Такое поведение разумно опирается на уверенность, что случайность содержит в себе все возможности, в том числе и искомое решение во всех его вариантах.

В отличие от линейной тактики случайного поиска, когда в виде поощрения система сохраняет найденные случайным образом удачные варианты управления, другая разновидность алгоритма — случайный локальный поиск — не зависит от предыстории. В условиях сложной нелинейности часто бывает нецелесообразно повторять удачные шаги, так как обстановка при таких перемещениях может существенно изменяться. Чтобы исправлять ошибки такого рыскания, в качестве поощрения системе предоставляется возможность использовать еще одну случайность, в противном случае она возвращается на исходный рубеж (в прежнюю точку факторного пространства).

Поскольку целевая функция в химической технологии чаще всего представляет собой линейную форму, а система ограничений состоит из неравенств второго порядка, то мощные градиентные методы оптимизации оказываются непригодными, в то время как метод случайного локального поиска является в этом отношении универсальным. Он также успешно преодолевает и такие трудности, в которых могут застрять другие алгоритмы, например, если выражения зависимых переменных содержат элементы высоких порядков и являются неунимодальными, с множеством локальных экстремумов.

Перед началом вычислений необходимо иметь следующую информацию:

- точность шага в % — относительное значение шага для каждой независимой переменной, при достижении которого вычисления прекращаются;
- количество попыток — количество попыток изменения значений переменных с текущим шагом для улучшения целевой функции. Если в процессе поиска не удастся улучшить функцию, то шаг уменьшается;
- изменение шага в % — относительное сохранение значения следующего шага относительно предыдущего в случае невозможности улучшения функции.

В начале вычислительного процесса значение каждой независимой переменной устанавливается равным половине диапазона ее варьирования. В это же значение устанавливается и шаг для каждой из них.

Затем в течение некоторого количества попыток независимым переменным присваиваются значения:

$$X_i = X_i + \text{rand} \cdot \text{Step}_i, \quad (5.45)$$

где X_i — новое значение i -й переменной; X_i — значение i -й переменной при лучшем значении функции; rand — случайная величина из диапазона $[-1; +1]$; Step_i — текущее значение шага для i -й переменной.

В случае если значение функции при заданных значениях независимых переменных удовлетворяет всем ограничениям, а также является лучшим по отношению к предыдущему значению, то текущие значения переменных и функции фиксируются, и поиск продолжается с новой точки.

В противном случае увеличивается значение счетчика попыток и, возможно, уменьшается шаг варьирования переменных.

Достоинства:

- высокая скорость расчетов;
- обладает широкими возможностями настройки путем изменения параметров;
- не зависит от вида целевой функции и ограничений.

Недостатки:

- непригоден для задач с ограничениями типа равенств;
- вследствие недетерминированности алгоритма результаты нескольких последовательных вычислений не обязательно совпадают;
- существует вероятность того, что найденное оптимальное значение будет локальным.

5.1.3. Программный модуль «Optimization»

5.1.3.1. Назначение и области использования программного модуля. Программный модуль предназначен для решения многомерных компромиссных оптимизационных задач методами Монте-Карло, деформируемого многогранника и скользящего допуска с визуализацией траектории поиска (рис. 98–99).

5.1.3.2. Функциональные возможности программного модуля

- Программный модуль может работать с любыми системами ограничений на зависимые и независимые переменные.
- Математические модели, входящие в структуру оптимизационной задачи, могут быть линейные и нелинейные, полиномы в виде отрезка ряда Тейлора могут быть любого порядка.
- Программный модуль может работать с экспоненциальными и трансцендентными зависимостями любой сложности.
- Целевые функции могут быть как линейными, так и нелинейными любой сложности.

5.1.3.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

- Opt1.exe* Главный исполняемый файл программного модуля
- Ecotech.dat* Файл данных для рабочего примера
- Opt1.hlp* Файл помощи
- Opt1.cnt* Оглавление файла помощи

5.1.3.4. Рабочий интерфейс и структура программного модуля



В

Рис. 98. Рабочий интерфейс программного модуля «Optimization»

Esotech.opt - Решение компромиссных оптимизационных задач

Программа Вид Помощь

Новый Открыть Сохранить Сохранить как Параметры Выход О программе Помощь

№	Описание
01	Расход полимера
02	Расход волокна
03	Степень помола
04	Доля пресной воды

Нижняя граница 50.000000
Верхняя граница 250.000000

x_1

+ Добавить - Удалить

Независимые переменные / Зависимые переменные / Ограничения / Целевые функции / Вычисления / Готово

Esotech.opt - Решение компромиссных оптимизационных задач

Программа Вид Помощь

Новый Открыть Сохранить Сохранить как Параметры Выход О программе Помощь

№	Описание
01	Цена полимера
02	Цена волокна
03	Цена энергии
04	Расход энергии
05	Прочность бумаги
06	Влагопрочность

$y_1 = +0.33479 - 0.012262 * x_1 - 0.0125 * x_2 + 0.072531 * x_3$

+ Добавить - Удалить

Независимые переменные / Зависимые переменные / Ограничения / Целевые функции / Вычисления / Готово

Esotech.opt - Решение компромиссных оптимизационных задач

Программа Вид Помощь

Новый Открыть Сохранить Сохранить как Параметры Выход О программе Помощь

№	Описание
01	Ограничение № 01
02	Ограничение № 02

$7.5y_1 \leq 18$

+ Добавить - Удалить

Независимые переменные / Зависимые переменные / Ограничения / Целевые функции / Вычисления / Готово

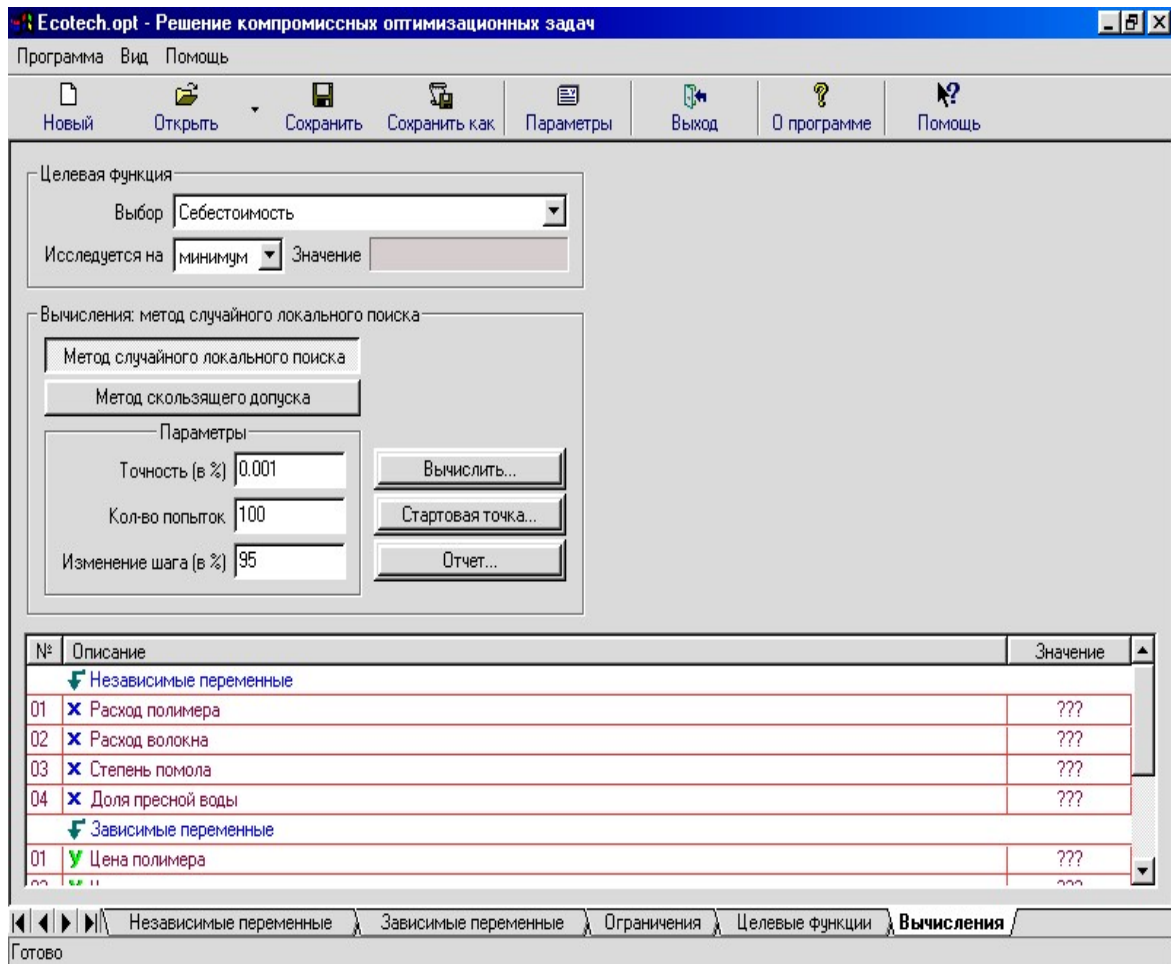
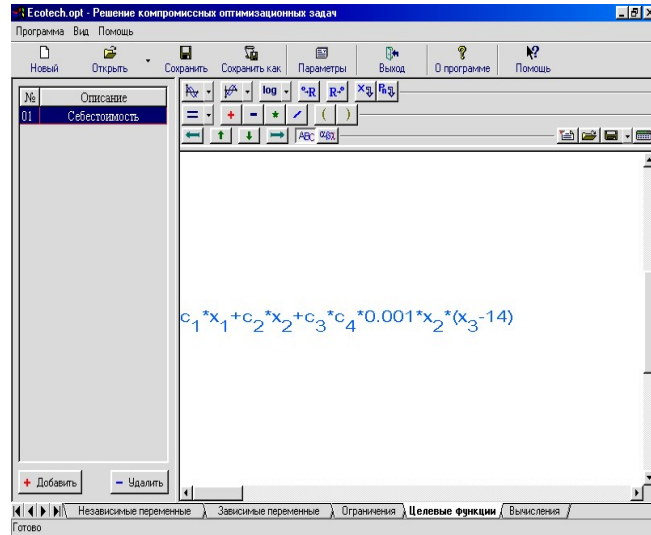


Рис. 99. Рабочие окна интерфейса программного модуля на 5 закладках

5.1.3.5. Запуск и управление работой программного модуля. Выполнение расчетов осуществляется на закладке «Вычисления».

Результат работы программы — значение целевой функции, достигаемое при оптимальных значениях независимых переменных. Результат работы можно сохранить в отчете.

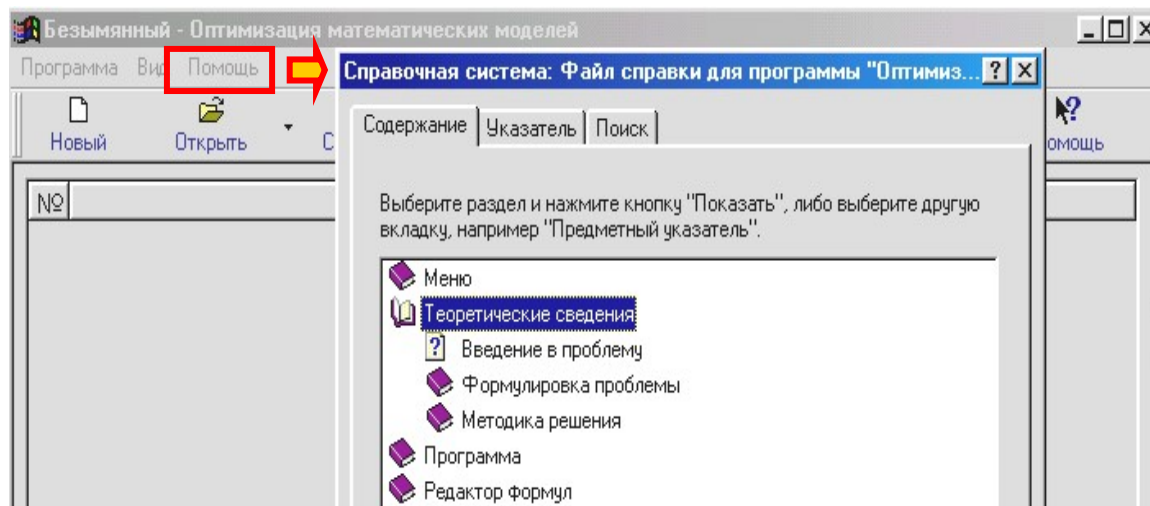


Рис. 100. Диалоговое окно «Помощь»

Работу с тренажером можно организовать в следующем порядке:

1. Ознакомиться со структурой программного модуля, интерфейсом, приемами работы с окнами и закладками, функциональными возможностями, обратив особое внимание на:

- кнопку «Помощь» верхней панели меню (рис. 100);
- возможность контекстной помощи;
- закладки, помещенные на нижней панели (рис. 101);
- просмотр изменений планшета экрана при нажатии на кнопку «Добавить» на всех закладках, кроме последней;
- ознакомление с редактором формул на II, III и IV закладках (рис. 102–103).

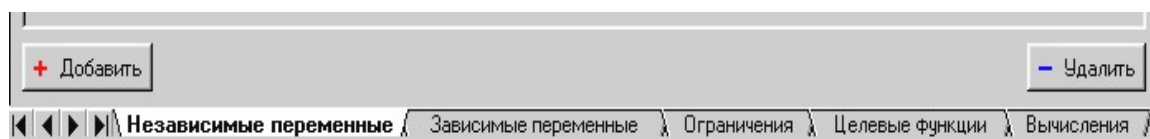


Рис. 101. Закладки на нижней панели программного модуля

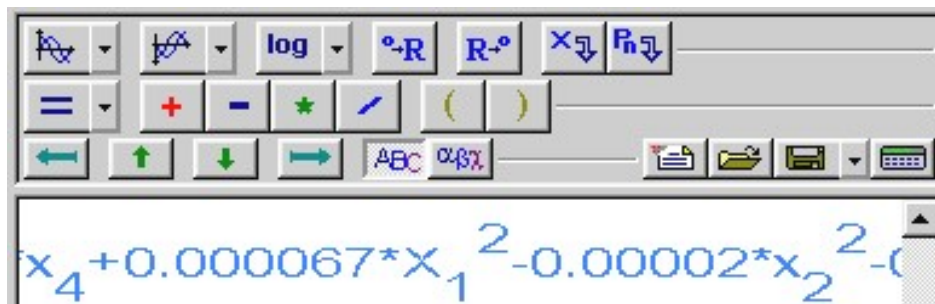


Рис. 102. Диалоговое окно редактора формул

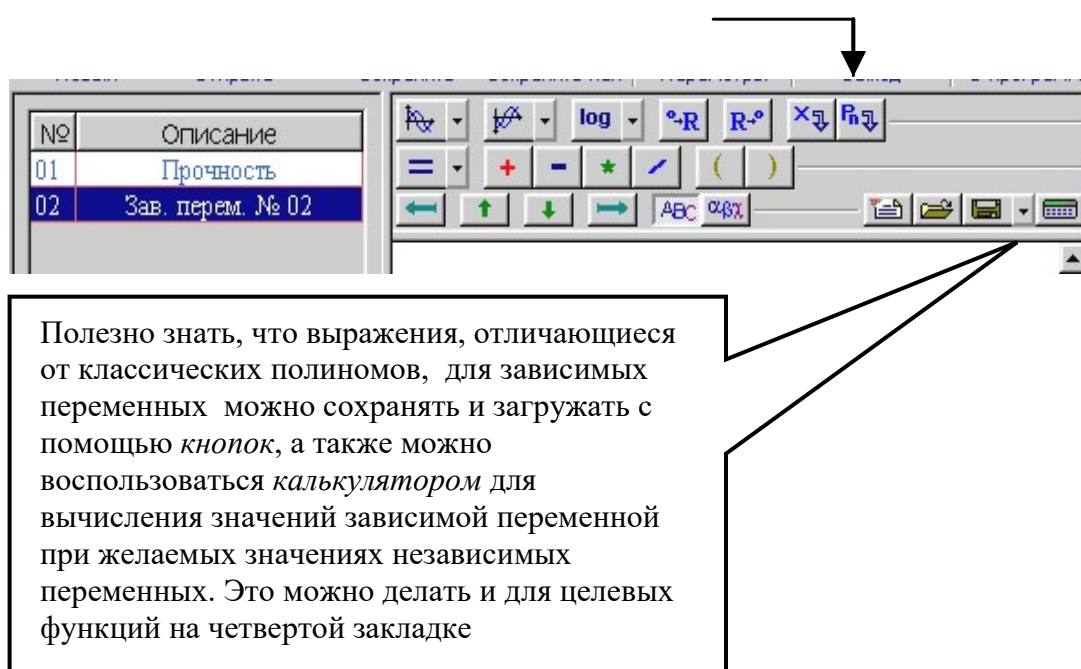


Рис. 103. Командные кнопки редактора формул

Одновременно можно порекомендовать пользоваться записью формул в одну строку, типа

$$Y1 = x1^2 + x2^2 + \text{EXP}(-x3/(x1 * x2)) \text{ и т. д., это проще.}$$

При работе с закладкой «Независимые переменные» в графе «Описание» надо ввести наименования переменных, не забыв определить границы факторного пространства в строках «Нижняя граница» и «Верхняя граница» для каждого переменного.

Следует помнить, что в графе «Описание» независимые переменные выступают под номером, а не под именем. Имя переменной необходимо присвоить в окне «Выражений». Под этим именем переменная будет обрабатываться программой.

Подобным же образом поступить при работе с закладкой «Зависимые переменные», только здесь надо иметь в виду, что выражения (полиномиальные модели) для некоторых переменных, полученные на предыдущем этапе по программе «ModeBuilder» с расширением *.mdl, могут вставляться не вручную, а из файла при нажатии на кнопку

При формализации системы ограничений затруднений практически не должно быть, поскольку требования к качеству выражаются простыми записями типа $25 \leq Y1 \leq 45$.

Наибольшая сложность освоения приемов работы на тренажере связана содержанием последней закладки «Вычисления».

2. Вникнуть в смысл рабочего примера, который загружается из файла с именем *Ecotech.opt*, уяснив что конкретно относится к системе ограничений на независимые переменные, к системе ограничений на зависимые переменные, из чего складывается выражение целевой функции, каковы границы факторного пространства. Короче говоря, нужно расписать структуру оптимизационной задачи.

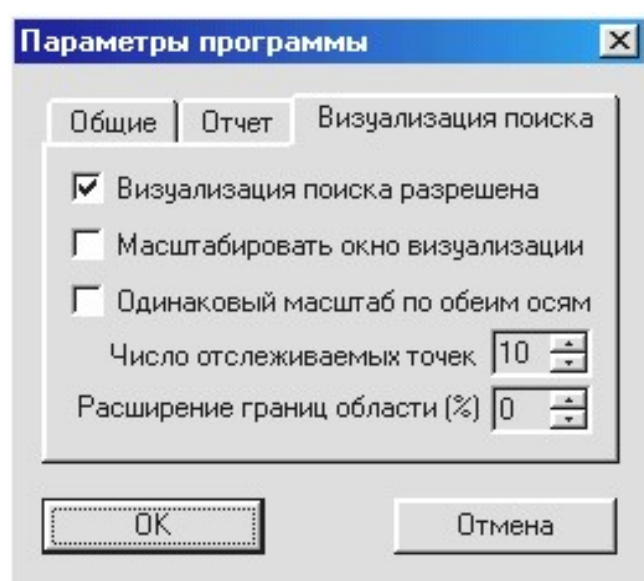


Рис. 104. Диалоговое окно «Параметры»

Перед тем как запускать программу на исполнение, нужно проверить настройки в разделе «Параметры» верхней панели меню (рис. 104).

Если поставить флажки на окошечки «Масштабировать окно визуализации» и «Одинаковый масштаб по обеим осям», то процесс решения сильно затянется, поскольку для каждого удачного шага поиска будет перерисовываться область визуализации.

3. Проанализировать процесс поиска решения обоими методами оптимизации, обратив внимание на специфику траектории поиска и на изменения размера шага поиска на разных стадиях процесса решения.

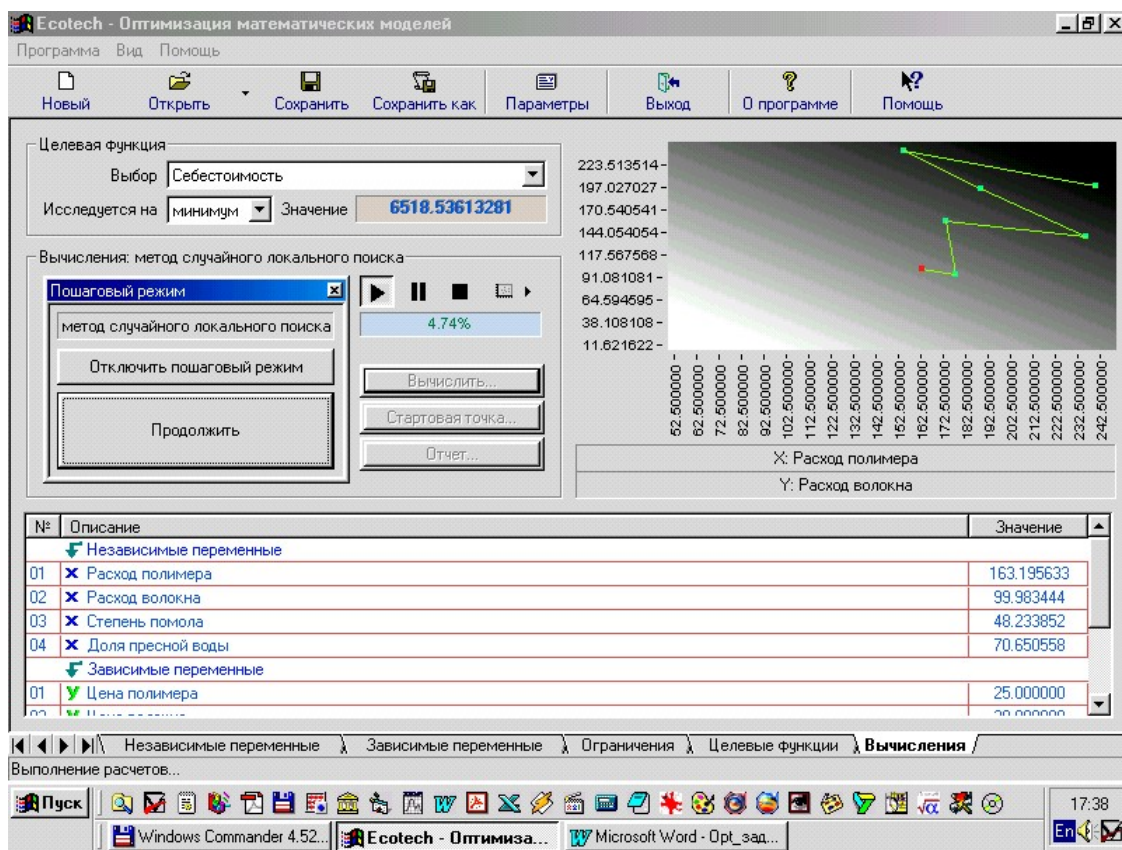


Рис. 105. Этап решения задачи методом случайного локального поиска

В окне визуализации можно заметить разную степень черноты поверхности отклика целевой функции. Поскольку целевая функция в данном случае линейна, то окно монотонно (линейно) осветляется от правого верхнего угла к нижнему левому (рис. 105–106). Это связано с уменьшением значений целевой функции от черного к светлому. Казалось бы, что решение должно находиться в начале системы координат. Так бы и было, если бы не было ограничений на зависимые переменные. В более светлые области траекторию решения не пускают нарушения требований к качеству продукции.

Обязательно следует помнить, что на экран не выведена процедура «рыскания», куда попадали значения независимых переменных при неудачных шагах перед тем, как вернуться в точку поиска на очередном этапе.

При этом надо не забыть проследить за динамикой накопления результата в окне «Описание — Значение» с синхронными изменениями значений целевой функции. Надо несколько раз запустить программу из разных стартовых точек, а затем сравнить результаты решения, полученные разными методами оптимизации.

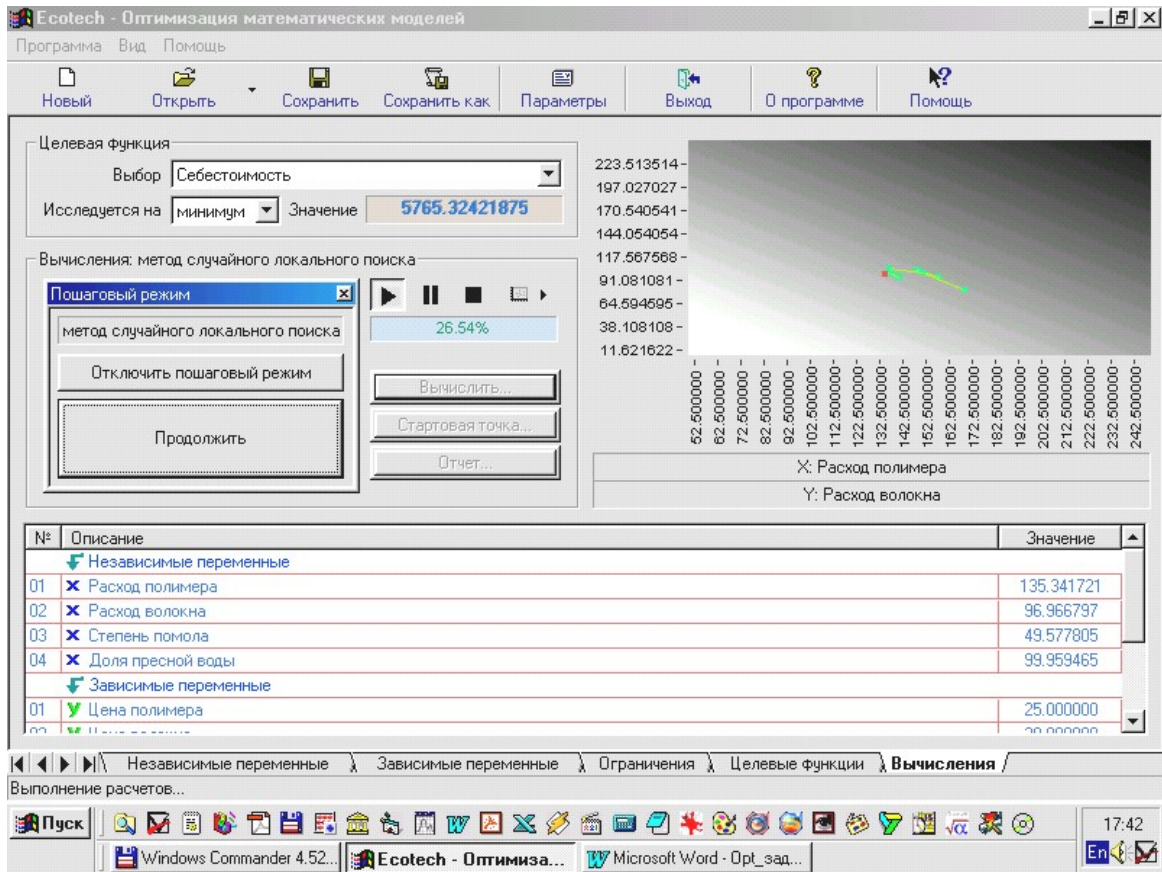


Рис. 106. Этап решения задачи методом случайного локального поиска в стадии уменьшения шага

Если задача решается методом скользящего допущения, то можно заметить, что траектория поиска осуществляется с двух сторон — со стороны, где качество не обеспечивается, шаг осуществляется в сторону, где качество есть, т. е. алгоритм как бы скользит по поверхности ограничений или заштопывает порванный материал с помощью нитки и иглки, при этом значение шага постепенно уменьшается до тех пор, пока не будет достигнута заданная точность.

Представляет интерес просмотр траектории поиска решения в разных сечениях поверхности отклика.

Это можно осуществить, приостановив процесс решения клавишей, а затем выбрать интересующее сечение.

4. Организовать многовариантный вычислительный эксперимент.

Важные наблюдения и выводы можно сделать, если при изменении настроек параметров следить за изменением полученных результатов (рис. 107–108), несколько раз запуская программу на исполне-

ние даже при одних и тех же начальных условиях, не говоря уже о том, что будет происходить с результатом, если программу запускать из разных стартовых точек.

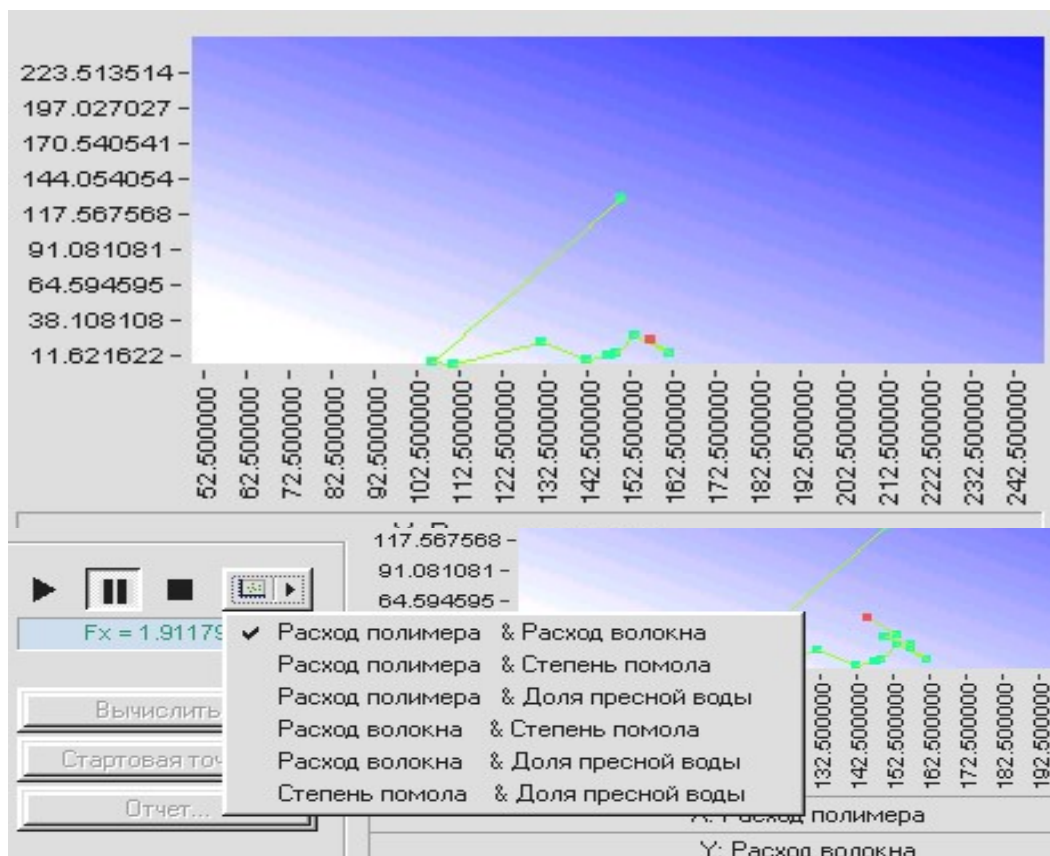


Рис. 107. Настройка окна визуализации на просмотр траектории поиска в разных сечениях факторного пространства

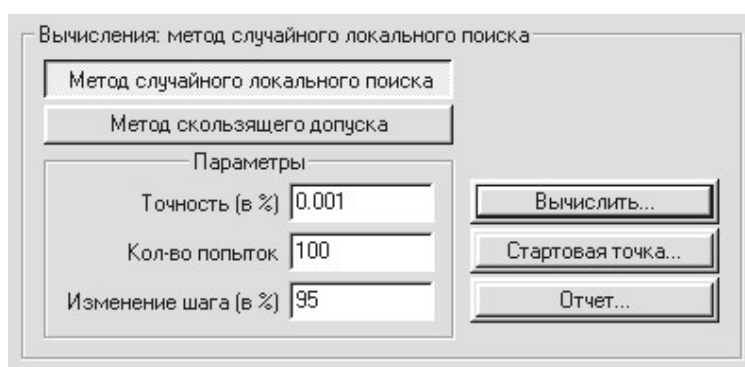


Рис. 108. Панель изменения настроек параметров поиска

Полезно знать, что в нижней строке программного модуля выводится время, затраченное на решение задачи (рис. 109).



Рис. 109. Нижняя строка интерфейса программного модуля с выводом времени, затраченного на расчет

Таким образом, можно количественно анализировать точность и быстродействие решения в зависимости от настроек параметров.

5.2. ИССЛЕДОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ СВОЙСТВ СМЕСЕЙ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

5.2.1. Теоретические основы построения диаграмм «Состав – свойство»

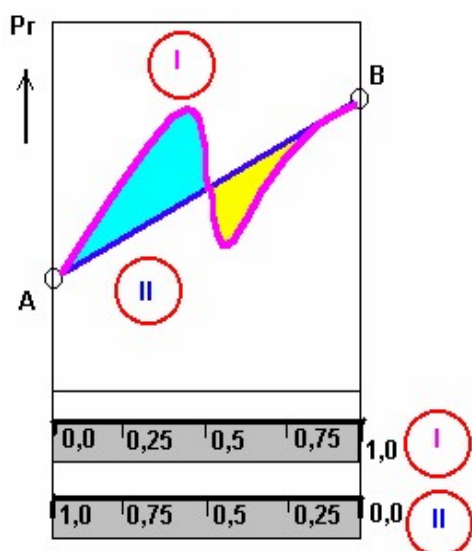


Рис. 110. Свойства двух двухкомпонентных смесей, обладающих (I) и не обладающих (II) аддитивностью

В состав смесей могут входить вещества, не взаимодействующие друг с другом (аддитивные смеси), и вещества, свойства смесей которых резко изменяются в зависимости от соотношения компонентов. Свойства смесей могут обуславливаться как синергизмом, так и антагонизмом исходных веществ. Причем токсичность продуктов таких взаимодействий в воздухе и в воде может многократно превосходить токсичность тех учитываемых веществ, которые попадают в окружающую среду от отдельных предприятий.

Аддитивными химические вещества можно считать тогда, когда свойства их смесей располагаются на прямой AB (рис. 110), соединяющей точки индивидуальных исходных компонентов.

Свойства смесей аддитивных веществ нетрудно вычислять по простой пропорциональной зависимости. При этом не требуется проведения экспериментальных исследований.

Не аддитивные смеси для оценки свойств нуждаются в проведении специально спланированных экспериментов.

С точки зрения постановки проблем эксперименты можно разделить на задачи построения математических моделей и задачи поиска оптимума (оптимального состава) путем графической оптимизации.

5.2.2. Особенности методов построения диаграмм. Свойства смесей традиционно сопровождаются явлениями синергизма и антагонизма компонентов, что является следствием их неаддитивности.

Токсичность смесей рационально оценивать с помощью диаграмм «состав – свойство» в барицентрической системе координат.

При исследовании смесевых систем на переменные накладывается ограничение

$$\sum_{i=1}^S x_i = \text{const} . \quad (5.46)$$

Ограничения типа (5.46) характерны для смесей S компонентов. Сумма компонентов чаще всего нормируется (смесь выступает как единое целое), поэтому const принимает значение 1, а x_i — относительное содержание i -го компонента в смеси.

Ввиду того что переменные в сложных системах, содержащих смеси компонентов, не являются независимыми, оценка коэффициентов обычной полиномиальной модели в виде ряда Тейлора оказывается невозможной из-за вырожденности информационной матрицы, поэтому к решению таких задач требуется специфический подход.

Первый путь решения таких задач сводится к выражению одного *из компонентов через остаток отобщей суммы и вследствие этого* — к исключению его из рассмотрения. Тогда оставшиеся переменные могут варьироваться уже независимо друг от друга, а эффект исключенного фактора окажется распределенным по вычисленным коэффициентам традиционного полинома.

Второй путь оказывается предпочтительнее, поскольку позволяет получить зависимость от всех S смесевых переменных. Это становится возможным потому, что область определения всех исследуемых переменных представляет собой многогранник, высекаемый в k -мерном факторном пространстве двухсторонними ограничениями на $k - S$ режимные переменные и условием (5.46).

Широкое применение диаграмм «состав – свойство» началось после публикации результатов работы Шеффе. Им предложены предельно простые решетчатые планы экспериментов с очень малым количеством опытов, которые располагаются в узлах легко создаваемой сетчатой структуры. Шеффе также вывел несложные формулы для расчета коэффициентов аппроксимирующих полиномов специального вида, что позволяет широкому кругу специалистов применять его методы, даже не имея в своем распоряжении мощные вычислительные машины.

5.2.3. Методика Шеффе

Число экспериментальных точек на $\{S, n\}$ -решетках совпадает с числом коэффициентов аппроксимирующих полиномов степени n и вычисляется по формуле

$$N = C_{S+n-1}^n. \quad (5.47)$$

5.2.3.1. Бариецентрическая система координат. Чтобы воспользоваться формулами (5.48) – (5.51), нужно договориться о маркировке экспериментальных точек, значения показателя в которых подставляются в выражения для вычисления коэффициентов полиномиальных моделей.

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.

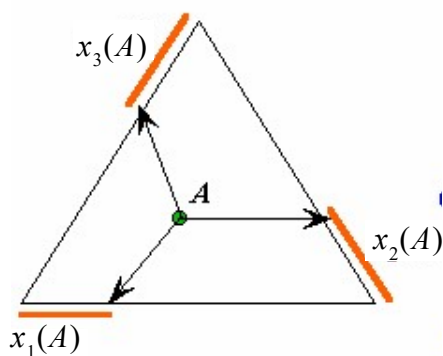


Рис. 111. Бариецентрическая система координат

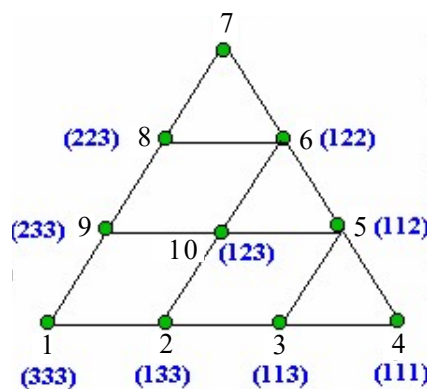


Рис. 112. $\{S, n\}$ -решетка Шеффе $\{S, n\} = \{3, 3\}$

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.

5.2.3.2. Виды моделей и расчет коэффициентов. Коэффициенты аппроксимирующих полиномов представляют собой комбинации значений изучаемого показателя, полученных в узлах симплексных решеток для S -компонентных смесей n -го порядка.

Виды моделей и формулы для расчета коэффициентов:

а) модель второго порядка для трехкомпонентной смеси

$$Y = b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_3 \cdot x_3 + b_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + b_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + b_{23} \cdot x_2 \cdot x_3. \quad (5.48)$$

$$b_1 = E_{11}; b_2 = E_{22}; b_3 = E_{33}; b_{12} = 4 \cdot E_{12} - 2 \cdot E_{11} - 2 \cdot E_{22};$$

$$b_{13} = 4 \cdot E_{13} - 2 \cdot E_{11} - 2 \cdot E_{33}; b_{23} = 4 \cdot E_{23} - 2 \cdot E_{22} - 2 \cdot E_{33};$$

б) модель второго порядка для S -компонентной смеси

$$Y = \sum_{1 \leq i \leq s} b_i \cdot x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq s} b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j. \quad (5.49)$$

$$b_i = E_{ii}; b_{ij} = 4 \cdot E_{ij} - 2 \cdot E_{ii} - 2 \cdot E_{jj};$$

в) модель третьего порядка для S -компонентной смеси

$$Y = \sum_{1 \leq i \leq j} b_i \cdot x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq s} b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{1 \leq i < j < k \leq s} c_{ij} \cdot x_i \cdot x_j \cdot (x_i - x_j) + b_{ijk} \cdot x_i \cdot x_j \cdot x_k. \quad (5.50)$$

$$b_i = E_{iii}; b_{ij} = 9/4 \cdot (E_{ijj} + E_{ijj} - E_{iii} - E_{jjj});$$

$$c_{ij} = 9/4 \cdot (3 \cdot E_{ijj} - 3 \cdot E_{ijj} - E_{iii} - E_{jjj});$$

$$b_{ijk} = 27 \cdot E_{ijk} - 27/4 \cdot (E_{ijj} + E_{ijj} + E_{iik} + E_{ikk} + E_{jjk} + E_{jkk}) + 9/2 \cdot (E_{iii} + E_{jjj} + E_{kkk});$$

г) модель четвертого порядка для S -компонентной смеси

$$\begin{aligned}
\widehat{Y} = & \sum_{1 \leq i \leq s} b_i \cdot x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq s} b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{1 \leq i < j \leq s} c_{ij} \cdot x_i \cdot x_j \cdot (x_j - x_i) + \\
& + \sum_{1 \leq i < j \leq s} d_{ij} \cdot x_i \cdot x_j \cdot (x_i - x_j)^2 + \sum_{1 \leq i < j < k \leq s} b_{ijk} \cdot x_i^2 \cdot x_j \cdot x_k + \\
& + \sum_{1 \leq i < j < k \leq s} b_{ijk} \cdot x_i \cdot x_j^2 \cdot x_k + \\
& + \sum_{1 \leq i < j < k \leq s} b_{ikk} \cdot x_i \cdot x_j \cdot x_k^2 + \sum_{1 \leq i < j < k < l \leq s} b_{ijkl} \cdot x_i \cdot x_j \cdot x_k \cdot x_l.
\end{aligned} \tag{5.51}$$

$$b_i = E_{iiii}; \quad b_{ij} = 4E_{ijij} - 2E_{iiii} - 2E_{jjjj};$$

$$c_{ij} = 8/3(-E_{iiii} + 2E_{ijij} - 2E_{jjjj} + E_{jjjj});$$

$$d_{ij} = 8/3(-E_{iiii} + 4E_{ijij} - 6E_{jjjj} + 4E_{jjjj} - E_{jjjj});$$

$$\begin{aligned}
b_{ijk} = & 32(3E_{ijk} - E_{ijk} - E_{ijk}) + 8/3(6E_{iiii} - E_{jjjj} - E_{kkkk}) - 16(E_{ijij} + E_{iikk}) - \\
& - 6/3(5E_{ijij} + 5E_{iikk} - 3E_{jjjj} - 3E_{kkkk} - E_{jjjk} - E_{jkkk});
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{ijk} = & 32(3E_{ijk} - E_{ijk} - E_{ijk}) + 8/3(6E_{jjjj} - E_{iiii} - E_{kkkk}) - 16(E_{ijij} + E_{jjkk}) - \\
& - 16/3(5E_{ijij} + 5E_{jjkk} - 3E_{ijij} - 3E_{jkkk} - E_{iikk} - E_{iikk});
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{ijk} = & 32(3E_{ijk} - E_{ijk} - E_{ijk}) + 8/3(6E_{kkkk} - E_{iiii} - E_{jjjj}) - \\
& - 16(E_{iikk} + E_{jjkk}) - 16/3(5E_{iikk} + 5E_{jjkk} - 3E_{iikk} - 3E_{jjkk} - E_{ijij} - E_{ijij});
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{ijkl} = & 256E_{ijkl} - 32(E_{ijij} + E_{ijil} + E_{iikl} + E_{ijjk} + E_{ijjl} + E_{jjkl} + E_{ijkk} + \\
& + E_{ikkkl} + E_{jkkkl} + E_{ijll} + E_{jkl} + E_{ikll}) + 32/3(E_{ijij} + E_{iikk} + E_{iiii} + E_{ijij} + \\
& + E_{jjjk} + E_{jjjl} + E_{iikk} + E_{jkkk} + E_{kkkl} + E_{iiii} + E_{jjll} + E_{kkll}).
\end{aligned}$$

5.2.3.3. Матричная форма решеток Шеффе

Т а б л и ц а 50

Матрицы планирования эксперимента для исследования свойств смесей на различных симплексных решетках

№ точки	Состав смеси для решетки $\{S, n\} = 4, 4$				Части компонентов смесей для решеток					
	x_1	x_2	x_3	x_4	$\{S, n\}$	$\{S, n\}$	$\{S, n\}$	$\{S, n\}$	$\{S, n\}$	$\{S, n\}$
					4, 4	4, 3	4, 2	3, 4	3, 3	3, 2
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	1,00	0,00	0,00	0,00	1111	333	33	3333	333	33
2	0,75	0,25	0,00	0,00	1112	222	13	1333	133	13

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
3	0,75	0,00	0,25	0,00	1113	111	11	1133	113	11
4	0,75	0,00	0,00	0,25	1114	444	12	1113	111	12
5	0,50	0,50	0,00	0,00	1122	122	22	1111	112	22
6	0,50	0,25	0,25	0,00	1123	133	23	1112	122	23
7	0,50	0,25	0,00	0,25	1124	144	44	1122	222	
8	0,50	0,00	0,50	0,00	1133	233	14	1222	223	
9	0,50	0,00	0,25	0,25	1134	144	24	2222	233	
10	0,50	0,00	0,00	0,50	1144	344	34	2223	123	
11	0,25	0,75	0,00	0,00	1222	112		2233		
12	0,25	0,50	0,25	0,00	1223	113		2333		
13	0,25	0,50	0,00	0,25	1224	114		1223		
14	0,25	0,25	0,50	0,00	1233	223		1233		
15	0,25	0,25	0,25	0,25	1234	224		1123		
16	0,25	0,25	0,00	0,50	1244	334				
17	0,25	0,00	0,75	0,00	1333	123				
18	0,25	0,00	0,50	0,25	1334	234				
19	0,25	0,00	0,25	0,50	1344	134				
20	0,25	0,00	0,00	0,75	1444	124				
21	0,00	1,00	0,00	0,00	2222					
22	0,00	0,75	0,25	0,00	2223					
23	0,00	0,75	0,00	0,25	2224					
24	0,00	0,50	0,50	0,00	2233					
25	0,00	0,50	0,25	0,25	2234					
26	0,00	0,50	0,00	0,50	2244					
27	0,00	0,25	0,75	0,00	2333					
28	0,00	0,25	0,50	0,25	2334					
29	0,00	0,25	0,25	0,50	2344					
30	0,00	0,25	0,00	0,75	2444					
31	0,00	0,00	1,00	0,00	3333					
32	0,00	0,00	0,75	0,25	3334					
33	0,00	0,00	0,50	0,50	3344					
34	0,00	0,00	0,25	0,75	3444					

5.2.4. Выделение локальных областей

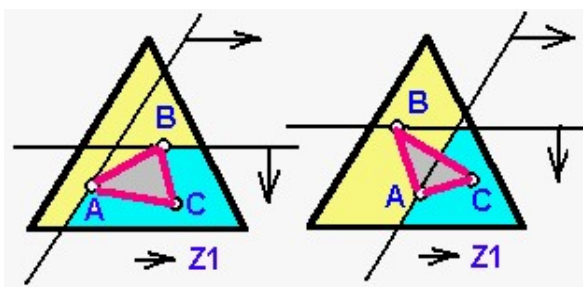


Рис. 113. Иллюстрация правил выделения локальных областей

При выделении локальной области (рис. 113) следует придерживаться основных правил:

- точка (A) может располагаться в любом месте внешнего факторного треугольника;
- точка (B) должна быть вершинной точкой треугольника ABC и не может располагаться ниже точки (A);
- точка (C) должна располагаться правее точки (A);
- обегание вершин в треугольнике ABC должно осуществляться по часовой стрелке: $(A) \Rightarrow (B) \Rightarrow (C)$;
- точка (D) в четырехкомпонентном симплексе должна занимать самое верхнее положение (координата Z_4 точки D должна быть максимальной).

Допустим, что нам предстоит оптимизировать смесь для производства силикатного кирпича, состоящую из нескольких компонентов — извести, песка и воды. Если за основу взять симплекс третьего порядка (рис. 112), то становится самоочевидно, что проведение эксперимента в первой, четвертой и седьмой точках решетки практически исключается, так как смеси, содержащие только индивидуальные компоненты, для достижения цели совершенно непригодны.

В этих случаях исследования нужно проводить в локальных областях факторного пространства, т. е. внутри внешнего симплекса надо выделять внутренний. Естественно, что 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. Их положение фиксируется с помощью матриц. Элементами каждой строки являются координаты одной точки (вершины) внутреннего симплекса в единицах внешнего симплекса.

Для перевода координат относительных единиц внутреннего симплекса в натуральные единицы внешнего симплекса следует использовать следующие формулы:

а) для трехкомпонентного симплекса

$$\begin{aligned} Z_1 &= Z(1,1) + (Z(3,1) - Z(1,1)) \cdot X(I,1) + (Z(2,1) - Z(1,1)) \cdot X(I,2); \\ Z_2 &= Z(3,2) + (Z(2,2) - Z(3,2)) \cdot X(I,2) + (Z(1,2) - Z(3,2)) \cdot X(I,3); \\ Z_3 &= R - Z_1 - Z_2; \end{aligned} \quad (5.52)$$

б) для четырехкомпонентного симплекса

$$\begin{aligned}
 Z1 &= Z(1,1) + (Z(3,1) - Z(1,1)) \cdot X(I,1) + (Z(2,1) - Z(1,1)) \cdot X(I,2) \\
 &\quad + (Z(4,1) - Z(1,1)) \cdot X(I,4); \\
 Z2 &= Z(3,2) + (Z(2,2) - Z(3,2)) \cdot X(I,2) + (Z(1,2) - Z(3,2)) \cdot X(I,3) \\
 &\quad + (Z(4,2) - Z(3,2)) \cdot X(I,4); \\
 Z3 &= Z(2,3) + (Z(1,3) - Z(2,3)) \cdot X(I,3) + (Z(3,3) - Z(2,3)) \cdot X(I,1) \\
 &\quad + (Z(4,3) - Z(2,3)) \cdot X(I,4); \\
 Z4 &= R - Z1 - Z2 - Z3.
 \end{aligned}
 \tag{5.53}$$

5.2.5. Рабочий пример получения диаграммы «Состав – свойство»

Наименование свойства: Сопротивление разрыву композиционного волокнистого материала, полученного с применением трехкомпонентной смеси полимерных упрочняющих добавок (рис. 114)

Наименования компонентов:

x_1 — бутадиенстирол;

x_2 — винилиденхлорид;

x_3 — изопрен.

Границы локальной области:

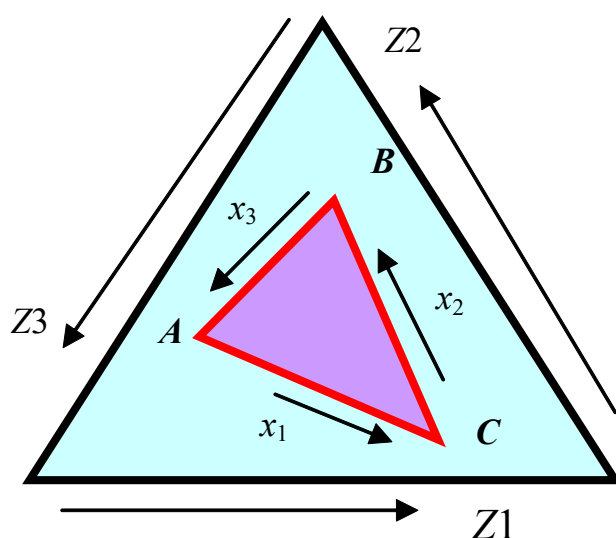


Рис.114. Факторный треугольник с выделенной локальной областью и матрица границ локальной области

	Z1	Z2	Z3
A	170	330	500
B	320	560	120
C	740	110	150

Образцы смесей должны готовиться из расчета 1000 г каждый.

Математическое описание свойств смесей решено получать с помощью решетки Шеффе для трехкомпонентного симплекса третьего порядка.

Чтобы на основании матрицы границ локальной области и матрицы эксперимента в относительных единицах внутреннего симплекса вычислить долю каждого компонента, входящего в рецептуру опытных образцов смесей в натуральных единицах внешнего симплекса, нужно воспользоваться формулами пересчета:

$$Z1 = Z(1,1) + (Z(3,1) - Z(1,1)) \cdot X(I,1) + (Z(2,1) - Z(1,1)) \cdot X(I,2);$$

$$Z2 = Z(3,2) + (Z(2,2) - Z(3,2)) \cdot X(I,2) + (Z(1,2) - Z(3,2)) \cdot X(I,3);$$

$$Z3 = R - Z1 - Z2.$$

Для опытного образца по условиям первой строки:

$$Z1 = 170 + (740 - 170) \cdot 0 + (320 - 170) \cdot 0 = 170;$$

$$Z2 = 110 + (560 - 110) \cdot 0 + (330 - 110) \cdot 1 = 330;$$

$$Z3 = 1000 - 170 - 330 = 500.$$

Для опытного образца по условиям третьей строки:

$$Z1 = 170 + (740 - 170) \cdot 0,67 + (320 - 170) \cdot 0 = 358,1;$$

$$Z2 = 110 + (560 - 110) \cdot 0 + (330 - 110) \cdot 0,33 = 551,9;$$

$$Z3 = 1000 - 358,1 - 551,9 = 265,5.$$

Для опытного образца по условиям десятой строки:

$$Z1 = 170 + (740 - 170) \cdot 0,33 + (320 - 170) \cdot 0,33 = 407,6;$$

$$Z2 = 110 + (560 - 110) \cdot 0,33 + (330 - 110) \cdot 0,33 = 331,1;$$

$$Z3 = 1000 - 407,6 - 331,1 = 261,3.$$

Поступая подобным образом для всех десяти точек матрицы планирования эксперимента, получим табл. 51.

Таблица 51

Условия и результаты эксперимента для построения диаграммы «состав — свойство»: x_{ij} — значения шкал внутреннего симплекса; Z_{ij} — значения шкал внешнего симплекса

x_{1i}	x_{2i}	x_{3i}	$Z1_i$	$Z2_i$	$Z3_i$	Y_i
0	0	1	170,0	330,0	500,0	4,59
0,33	0	0,67	358,1	257,4	384,5	3,50
0,67	0	0,33	551,9	182,6	265,5	3,86
1	0	0	740,0	110,0	150,0	3,60
0,67	0,33	0	601,4	258,5	140,1	4,00
0,33	0,67	0	458,6	411,5	129,9	2,99

x_{1i}	x_{2i}	x_{3i}	Z_{1i}	Z_{2i}	Z_{3i}	Y_i
0	1	0	320,0	560,0	120,0	2,78
0	0,67	0,33	270,5	484,1	245,4	3,30
0	0,33	0,67	219,5	405,9	374,6	3,58
0,333	0,333	0,333	407,6	331,1	261,3	3,65

Модель третьего порядка для трехкомпонентной смеси (5.54) нужно конкретизировать из формулы в общем виде (5.53):

$$Y = \sum_{1 \leq i \leq j} b_i \cdot x_i + \sum_{1 \leq i \leq j \leq s} b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{1 \leq i \leq i \leq s} c_{ij} \cdot x_i \cdot x_j \cdot (x_i - x_j) + \sum_{1 \leq i \leq j \leq k \leq s} b_{ijk} \cdot x_i \cdot x_j \cdot x_k. \quad (5.54)$$

$$Y = B_1 \cdot x_1 + B_2 \cdot x_2 + B_3 \cdot x_3 + B_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + B_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + B_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 + C_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot (x_1 - x_2) + C_{13} \cdot (x_1 - x_3) + C_{23} \cdot (x_2 - x_3) + B_{123} \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3. \quad (5.55)$$

Формулы для расчета коэффициентов модели удобно использовать с учетом маркировки симплексной решетки Шефе:

$$b_i = E_{iii};$$

$$b_{ij} = 9/4 \cdot (E_{ijj} + E_{iji} - E_{iii} - E_{jjj});$$

$$c_{ij} = 9/4 \cdot (3 \cdot E_{ijj} - 3 \cdot E_{iji} - E_{iii} - E_{jjj});$$

$$b_{ijk} = 27 \cdot E_{ijk} - 27/4 \cdot (E_{ijj} + E_{iji} + E_{iik} + E_{ikk} + E_{jjk} + E_{jkk}) + 9/2 \cdot (E_{iii} + E_{jjj} + E_{kkk}).$$

E_{111} — измеренное значение свойства в 4-й точке симплекса.

E_{222} — измеренное значение свойства в 7-й точке симплекса.

E_{333} — измеренное значение свойства в 1-й точке симплекса.

E_{112} — измеренное значение свойства в 5-й точке симплекса.

E_{113} — измеренное значение свойства в 3-й точке симплекса.

E_{122} — измеренное значение свойства в 6-й точке симплекса.

E_{133} — измеренное значение свойства в 2-й точке симплекса.

E_{223} — измеренное значение свойства в 8-й точке симплекса.

E_{233} — измеренное значение свойства в 9-й точке симплекса.

E_{123} — измеренное значение свойства в 10-й точке симплекса.

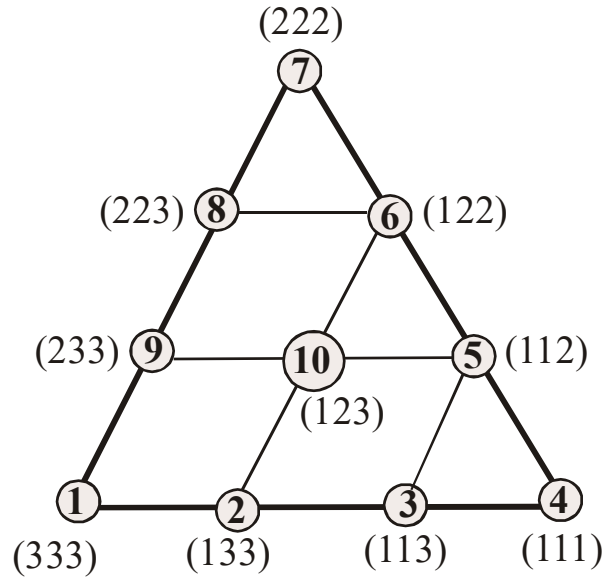


Рис. 115. Решетка Шеффе для трехкомпонентного симплекса третьего порядка

Если нумерацию коэффициентов и значения свойства в каждой точке оформить в виде одномерных массивов, то формализация процедуры вычисления коэффициентов еще более упростится:

$$B(1) = T(4) = 3,60; B(2) = T(7) = 2,78; B(3) = T(1) = 3,86;$$

$$B(4) = 9 \cdot (T(5) + T(6) - T(4) - T(7)) / 4 = 9 \cdot (4,00 + 2,99 - 3,60 - 2,78) / 4 = 1,3725;$$

$$B(5) = 9 \cdot (T(3) + T(2) - T(4) - T(1)) / 4 = 9 \cdot (3,86 + 3,50 - 3,60 - 4,59) / 4 = -1,8675;$$

$$B(6) = 9 \cdot (T(8) + T(9) - T(7) - T(1)) / 4 = 9 \cdot (3,30 + 3,58 - 2,78 - 4,59) / 4 = -1,1025;$$

$$B(7) = 9 \cdot (3 \cdot T(5) - 3 \cdot T(6) - T(4) + T(7)) / 4 = 9 \cdot (3 \cdot 4,00 - 3 \cdot 2,99 - 3,60 + 2,78) / 4 = 4,9725;$$

$$B(8) = 9 \cdot (3 \cdot T(3) - 3 \cdot T(2) - T(4) + T(1)) / 4 = 9 \cdot (3 \cdot 3,86 - 3 \cdot 3,50 - 3,60 + 4,59) / 4 = 4,6575;$$

$$B(9) = 9 \cdot (3 \cdot T(8) - 3 \cdot T(9) - T(7) + T(1)) / 4 = 9 \cdot (3 \cdot 3,30 - 3 \cdot 3,58 - 2,78 + 4,59) / 4 = 2,1825;$$

$$B(10) = 27 \cdot T(10) - 7 \cdot (T(5) + T(6) + T(2) + T(3) + T(8) + T(9)) / 4 + 9 \cdot (T(4) + T(7) + T(1)) / 2 = 27 \cdot 3,65 - 7 \cdot (4,00 + 2,99 + 3,50 + 3,30 + 3,58) / 4 + 9 \cdot (3,60 + 2,78 + 4,59) / 2 = 98,55 + 30,3975 + 49,365 = 178,305.$$

Таким образом, модель третьего порядка, полученная на основе результатов эксперимента, имеет вид

$$Y = 3,60 \cdot x_1 + 2,78 \cdot x_2 + 3,86 \cdot x_3 + 1,3725 \cdot x_1 \cdot x_2 - 1,8675 \cdot x_1 \cdot x_3 - 1,1025 \cdot x_2 \cdot x_3 + 4,9725 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot (x_1 - x_2) + 4,6575 \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot (x_1 - x_3) + 2,1825 \cdot x_2 \cdot x_3 \cdot (x_2 - x_3) + 178,305 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3.$$

Располагая возможностью вычисления по модели значений свойства в любых точках факторного треугольника, после сканирования с заданным шагом можно определить наименьшее и наибольшее значения рабочего диапазона свойств.

Теперь, если весь рабочий диапазон разделить на поддиапазоны, и каждому поддиапазону присвоить код цвета или символа (рис. 116), то при повторном сканировании симплекса можно определять, в какой поддиапазон попадает рассчитанное значение свойства в текущей точке, и выводить соответствующий этому поддиапазону цвет или символ в этой точке факторного пространства (рис. 117).

Чтобы облегчить чтение диаграмм, при формировании цвета поддиапазонов можно применить аналогию с физическими географическими картами, на которых горы и возвышенности изображаются оттенками коричневого, низинные части суши – зеленым цветом разной интенсивности, а для рельефа дна морей и океанов используется сине-голубая область спектра.

	• 2,530677 – 2,679873	Разновидности синего (впадины)
	• 2,679873 – 2,829068	
	• 2,829068 – 2,978264	
	• 2,978264 – 3,127460	
	• 3,127460 – 3,276655	
	• 3,276655 – 3,425851	
	• 3,425851 – 3,575047	Центральная (срединная) часть
	• 3,575047 – 3,724242	Разновидности коричневого (горы)
	• 3,724242 – 3,873438	
	• 3,873438 – 4,022634	
	• 4,022634 – 4,171829	
	• 4,171829 – 4,321025	
	• 4,321025 – 4,470221	

Рис. 116. Пример возможных поддиапазонов значений свойства и соответствующих им цветов диаграммы

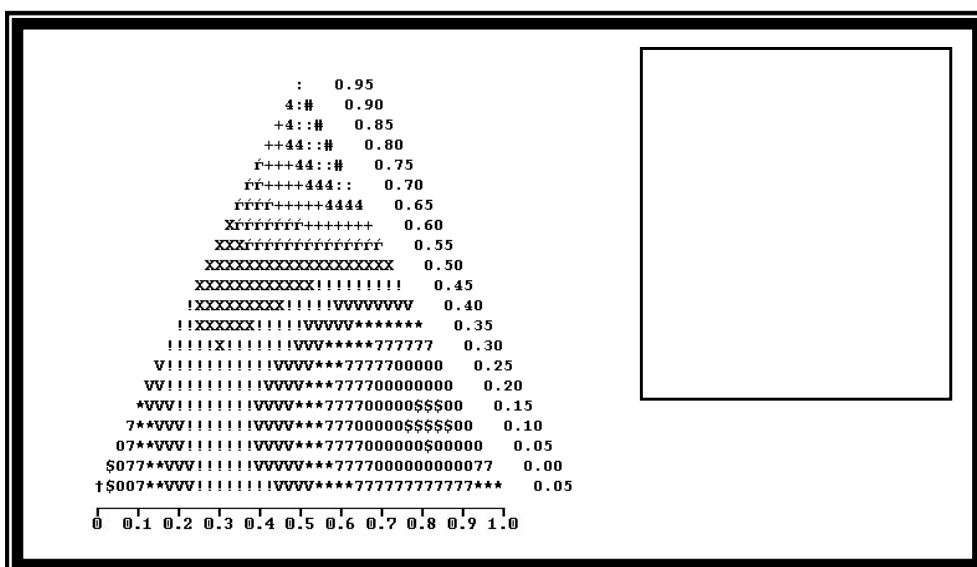
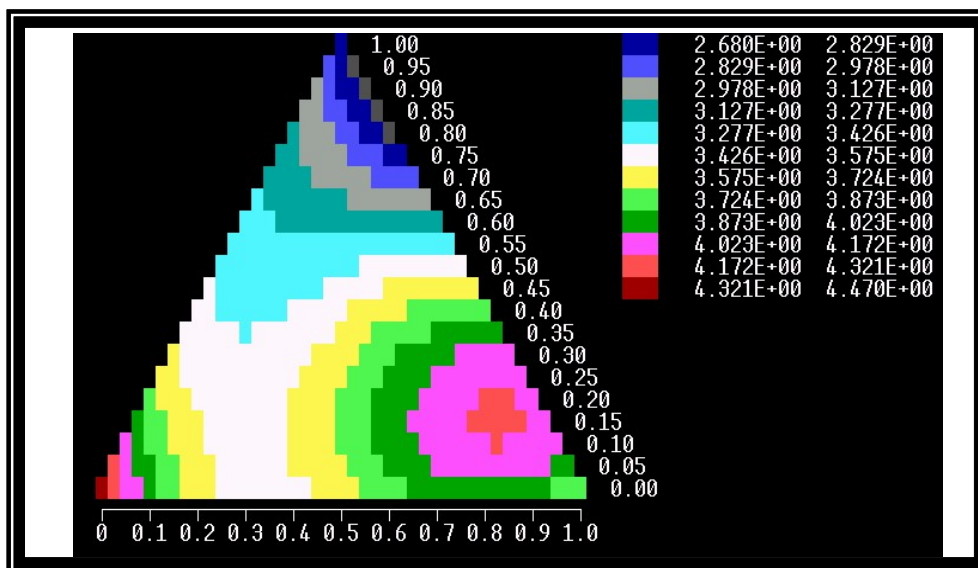


Рис. 117. Цветной и символьный варианты диаграммы «состав – свойство», полученные средствами компьютерной графики

5.2.6. Программный модуль «Mixture»

5.2.6.1. Назначение и области использования программного модуля. Программный модуль предназначен для построения и анализа диаграмм «состав — свойство».

5.2.6.2. Функциональные возможности программного модуля. Разработанный компьютерный программный модуль реализует алгоритм симплекс-решетчатого планирования эксперимента Шеффе и позволяет:

- строить и исследовать диаграммы «состав — свойство» двух-, трех- и четырехкомпонентных смесей с получением математических моделей второго, третьего и четвертого порядков;
- выделять и исследовать произвольные внутренние локальные области диаграмм;
- решать оптимизационные задачи по поиску самых дешевых рецептур, обеспечивающих свойства смесей в заданном диапазоне значений;
- осуществлять вычислительный эксперимент путем перебора значений цен компонентов и уровней требований к качеству продукции.

5.2.6.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

<i>Mixture.exe</i>	Главный исполняемый файл программного модуля
<i>Exp34.mix</i>	Файл данных для расчета рабочего примера
<i>Exp43.mix</i>	Файл данных для расчета рабочего примера
<i>Exp44.mix</i>	Файл данных для расчета рабочего примера
<i>Mixture.hlp</i>	Файл помощи

5.2.6.4. Рабочий интерфейс и структура программного модуля

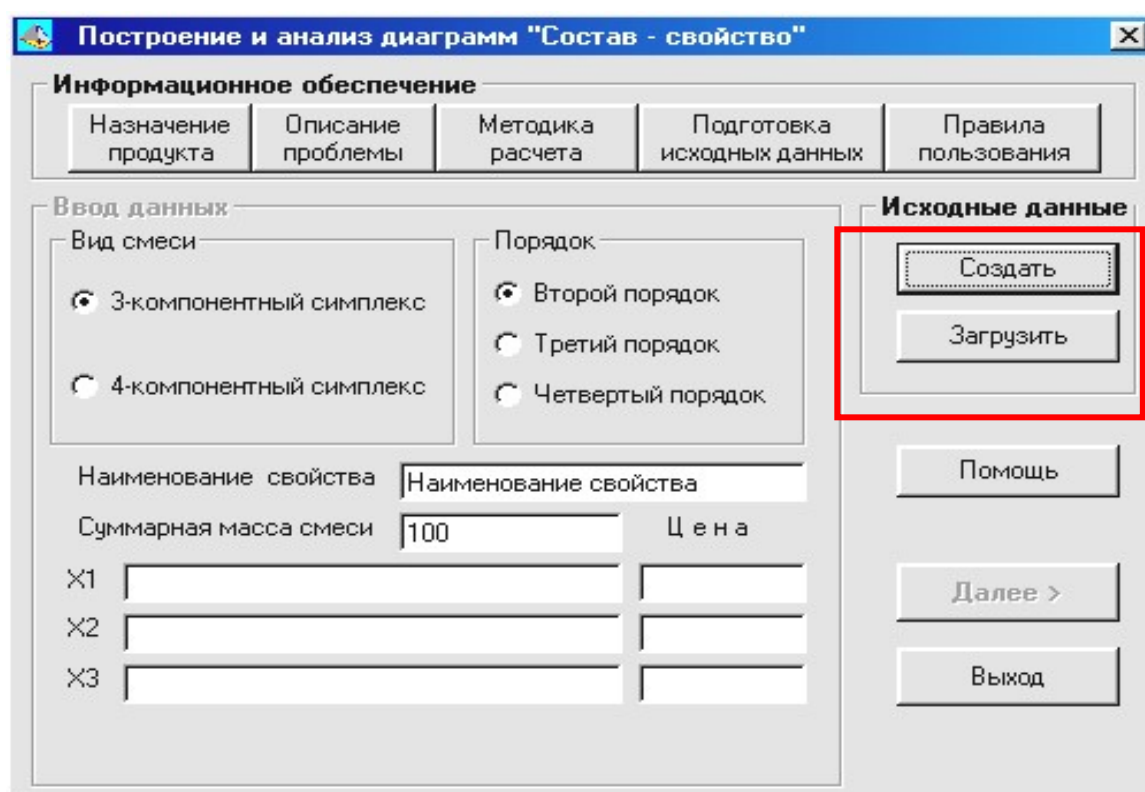
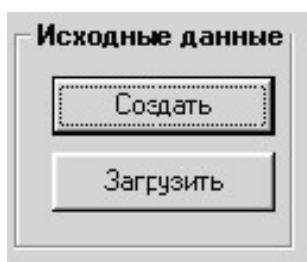


Рис. 118. Рабочий интерфейс программного модуля

В структуру программного модуля (рис. 118) включены блоки:

- информационное обеспечение;
- выбор вида смеси (число компонентов);
- выбор порядка аппроксимирующего полинома (2–4);
- ввод наименований и рыночных цен компонентов;
- выделение локальной области факторного симплекса;
- создание и обработка матрицы эксперимента;
- графическое обеспечение результатов расчетов.

5.2.6.5. Запуск и управление работой программного модуля



1. Ознакомиться с содержанием разделов блока «Информационное обеспечение».

2. В блоке «Исходные данные» сделать выбор «Создать» или «Загрузить». Если установить режим «Загрузить набор», то после открытия файла с исходными данными, записанными ранее, можно осуществить с ними вычислительный эксперимент по поиску оптимальной рецептуры после нажатия клавиши «Далее».

3. Если выбран режим «Новый набор», то в блоке «Вид смеси» поставить переключатель в положение «трехкомпонентный симплекс», если предполагается исследовать свойства трехкомпонентной смеси, или в положение «четырёхкомпонентный симплекс», если будет строиться диаграмма «состав — свойство» для четырехкомпонентной смеси.

4. В блоке «Порядок» выбрать требуемую точность математического описания свойств смеси путем заказа соответствующей степени аппроксимирующего полинома второго, третьего или четвертого порядков.

5. В текстовом окне «Наименование свойства» написать, какое свойство смеси предполагается исследовать.

6. В текстовом окне «Суммарная масса смеси» откорректировать значение массы смеси (в килограммах), которую предполагается составлять для практического использования.

7. В нижние текстовые окна ввести наименования компонентов смеси и их соответствующие цены.

8. Когда все окна Главного меню будут заполнены необходимой информацией, станет доступной кнопка «Далее», которая откроет следующую форму для выделения внутренней локальной области.

9. Для трехкомпонентных смесей внутренней локальную область можно обозначить путем расстановки точек A, B, C в факторном треугольнике с помощью левой клавиши мыши. При этом следует иметь в виду возможность перетаскивания точек по листу при нажатой левой клавиши.

10. Для четырехкомпонентных смесей локальная область выделяется с помощью матрицы координат четырех точек A, B, C, D в единицах внешнего симплекса.

11. Выделение локальных областей осуществляется по правилам, изложенным в разделе «Подготовка исходных данных».

12. Командная кнопка «Далее» откроет третью форму программного модуля, где в каждую строку подготовленной таблицы условий составления смесей для каждой экспериментальной точки симплекса необходимо ввести значение измеренного свойства.

13. После заполнения последней строки откроется кнопка «Далее» и возникнет четвертая форма программного продукта, где в отведенном окне будет построена треугольная диаграмма.

14. Форму диаграммы в блоке «Выбор графика» можно менять, установив флажок в положение «Цвет» или «Линии уровня».

15. Детальность прорисовки поверхности отклика можно настраивать с помощью текстового окна «Число линий уровня», но при этом после ввода нового значения нужно нажать клавишу «Enter», а потом командную кнопку «Обновить».

16. Координаты диаграммы и рассчитанные значения свойства в соответствующих точках автоматически выводятся на экран при перемещении курсора по поверхности диаграммы.

17. Для четырехкомпонентного симплекса путем перемещения рычажка слайдера имеется возможность просмотреть свойства смесей (сечения тетраэдра) при различных значениях содержания в смеси четвертого компонента.

18. Установив в блоке «Эталон свойства» значения Min и Max требуемого диапазона свойства, а затем нажав клавишу «Решение», в блоке «Оптимальная рецептура» можно прочитать информацию о том, сколько нужно взять каждого компонента, чтобы получить смесь, обеспечивающую требуемое значение свойства и обладающую минимальной стоимостью.

5.2.6.6. Выделение локальных областей. Во многих случаях, когда эксперимент спланирован таким образом, что в узлах решетки $x_1 = 1$,

$x_2=1, x_3=1$ будут содержать только исходные компоненты, результаты, как правило, получаются весьма грубыми и неинформативными.

Гораздо полезнее оказывается внутри факторного пространства выделить локальную область, в которой спланировать и осуществить эксперимент. В этом случае область окажется исследованной более детально, а результаты будут обладать большей объективной ценностью.

Для конкретности допустим, что нам предстоит оптимизировать композиционный состав типографской бумаги, который должен включать сульфитную беленую целлюлозу ($Z1$), сульфатную беленую целлюлозу ($Z2$) и древесную массу ($Z3$).

В качестве исходных условий предлагается принять следующие требования:

- в одной тонне (1000 кг) типографской бумаги может содержаться от 140 до 390 кг сульфитной целлюлозы;
- в одной тонне (1000 кг) типографской бумаги может содержаться от 125 до 400 кг сульфатной целлюлозы;
- содержание древесной массы определяется как разность $1000 - (Z1 + Z2)$.

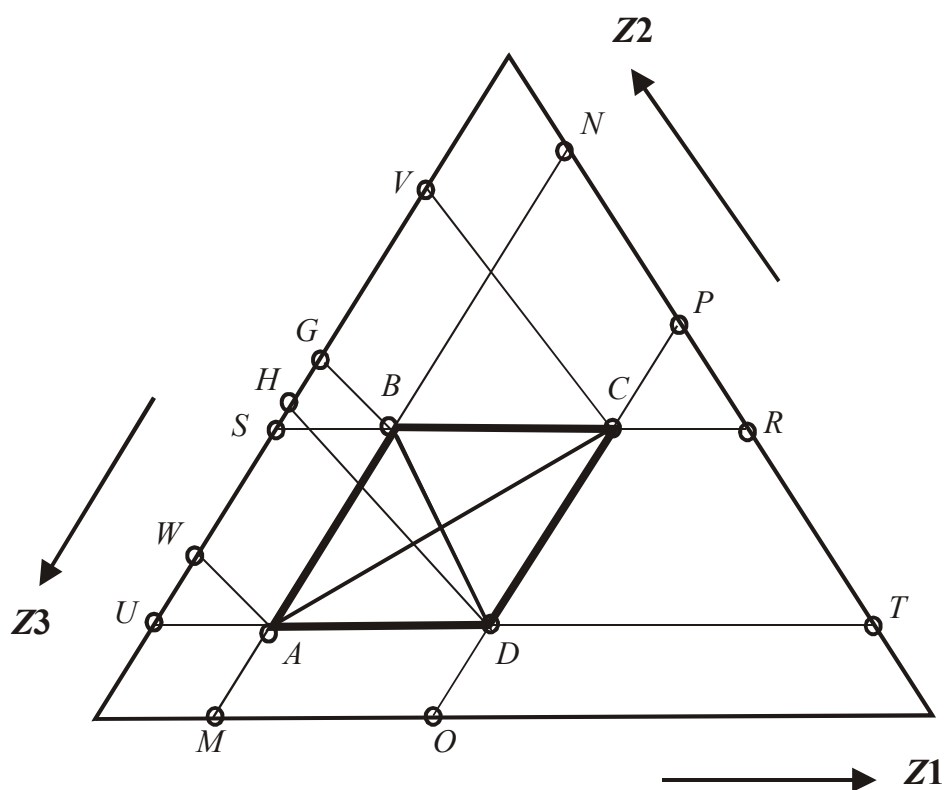


Рис. 119. Формализация процедуры выделения локальных областей факторного пространства

Многоугольники $MNPO$, $TUSR$ на рис. 119 характеризуют допустимые области эксперимента по каждому компоненту индивидуально, а пересечение многоугольников образует параллелограмм $ABCD$, в котором обеспечиваются заданные требования в совокупности и по $Z1$, и по $Z2$.

Ясно, что эксперимент надо планировать внутри области параллелограмма, при этом можно обратить внимание на то, что эксперимент можно спланировать по четырем вариантам, каждый из которых имеет свои особенности.

Первый вариант (рис. 121). В основу симплексной решетки положен треугольник ABC . Основные особенности варианта:

- полоса исследуемых значений $Z3$ (древесная масса) имеет максимальную ширину VW . Диапазон значений $Z3$ составляет 210 – 735 кг;
- повышение плотности экспериментальных точек решеток Шеффе достигается в области больших значений содержания компонента $Z1$ (сульфитной целлюлозы) в смеси;
- повышение плотности экспериментальных точек решеток Шеффе достигается в области больших значений содержания компонента $Z2$ (сульфатной целлюлозы) в смеси.

Второй вариант (рис. 122). В основу симплексной решетки положен треугольник ACD . Основные особенности варианта:

- полоса исследуемых значений $Z3$ (древесная масса) имеет максимальную ширину VW . Диапазон значений $Z3$ составляет 210 – 735 кг;
- повышение плотности экспериментальных точек решеток Шеффе достигается в области меньших значений содержания компонента $Z1$ (сульфитной целлюлозы) в смеси;
- повышение плотности экспериментальных точек решеток Шеффе достигается в области меньших значений содержания компонента $Z2$ (сульфатной целлюлозы) в смеси.

Третий вариант. В основу симплексной решетки положен треугольник ABD . Основные особенности варианта:

- полоса исследуемых значений $Z3$ (древесная масса) сдвинута в область больших значений и имеет ширину WG . Диапазон значений $Z3$ составляет 460 – 735 кг;
- повышение плотности экспериментальных точек решеток Шеффе достигается в области больших значений содержания компонента $Z1$ (сульфитной целлюлозы) в смеси;

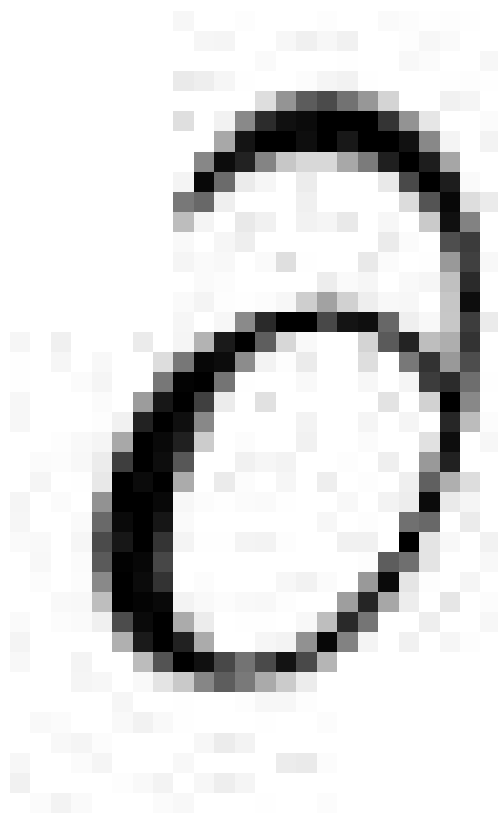


Рис. 120. Возможные варианты выделения локальных областей

- повышение плотности экспериментальных точек решеток Шеффе достигается в области меньших значений содержания компонента Z_2 (сульфатной целлюлозы) в смеси.

Четвертый вариант. В основу симплексной решетки положен треугольник DBC . Основные особенности варианта:

- полоса исследуемых значений Z_3 (древесная масса) сдвинута в область меньших значений и имеет ширину VH . Диапазон значений Z_3 составляет 210–435 кг;

- повышение плотности экспериментальных точек решеток Шеффе достигается в области больших значений содержания компонента Z_1 (сульфитной целлюлозы) в смеси;

- повышение плотности экспериментальных точек решеток Шеффе достигается в области больших значений содержания компонента Z2 (сульфатной целлюлозы) в смеси.

Возможные варианты выделения локальных областей показаны на рис. 120.

5.2.6.7. Описание рабочего примера

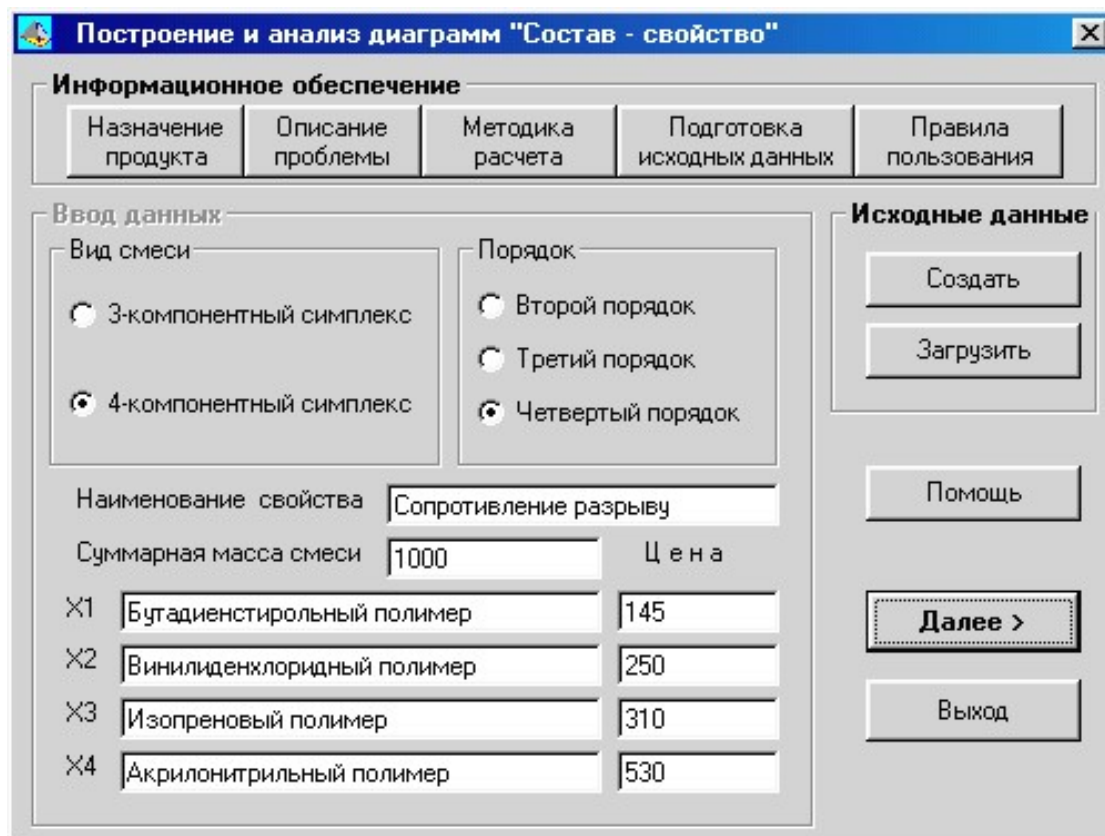


Рис. 121. Пример формализации первого этапа построения и анализа диаграмм «состав — свойство»

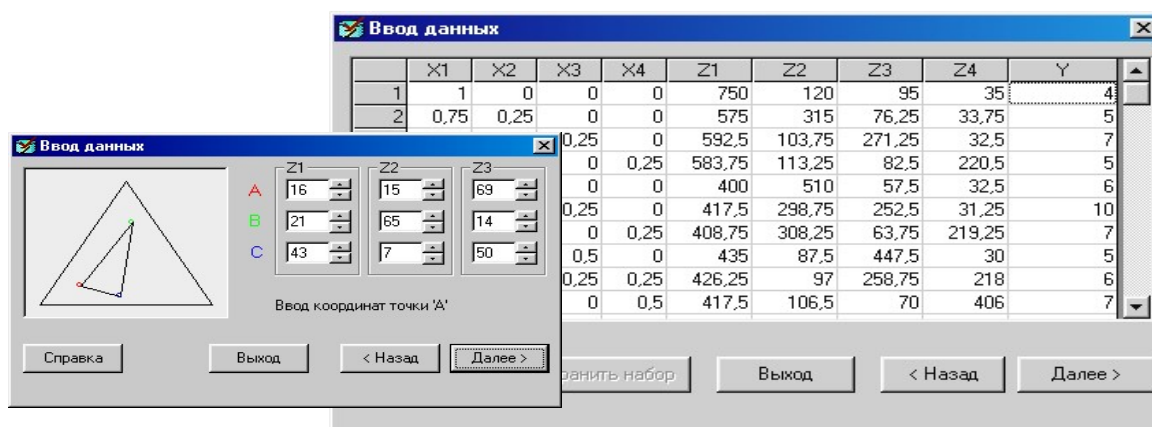


Рис. 122. Пример формализации второго этапа построения и анализа диаграмм «состав — свойство»

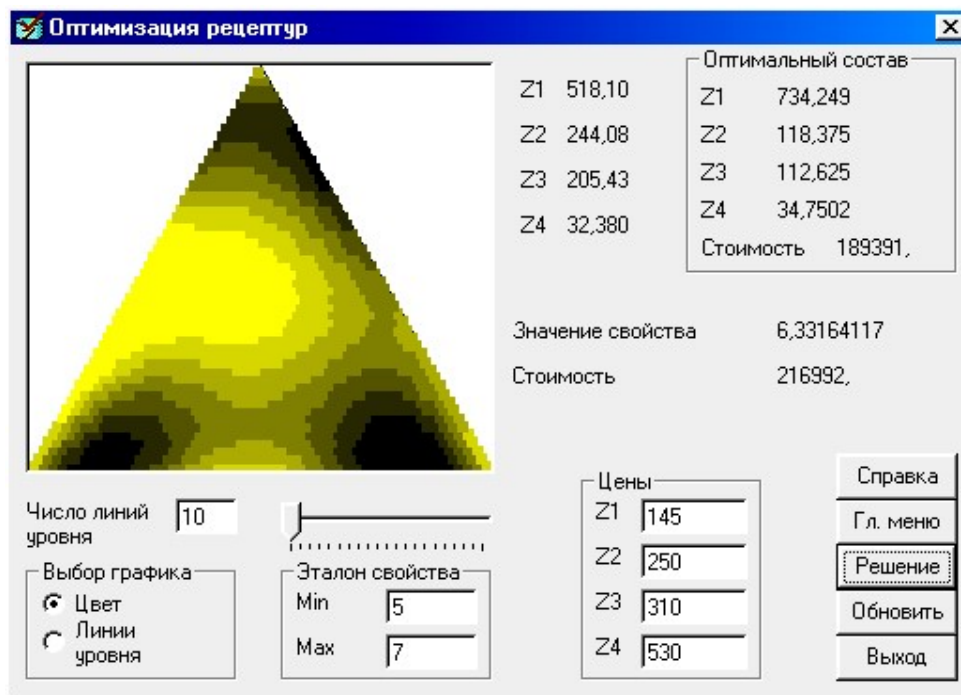


Рис. 123. Графическое обеспечение программного модуля

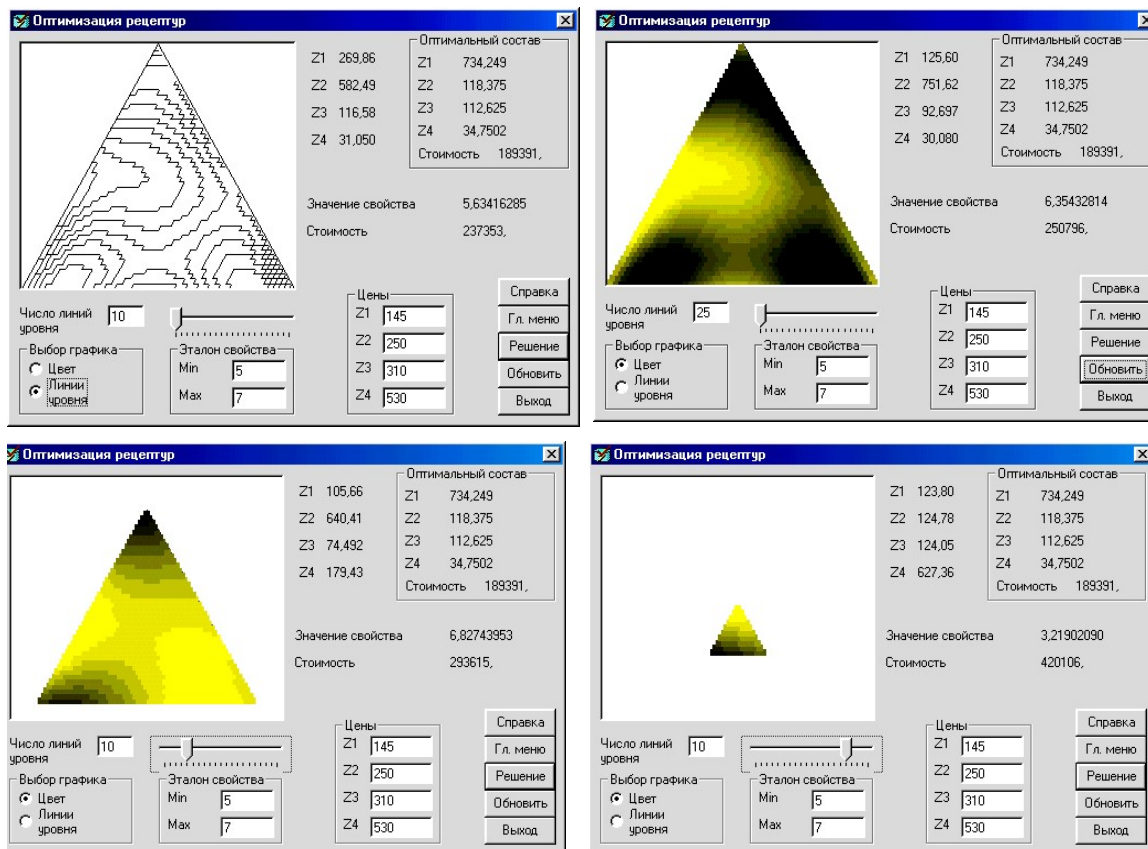


Рис. 124. Варианты анализа диаграммы «состав — свойство»

5.2.6.8. Организация вычислительных экспериментов. Путем многовариантного выбора и обоснования комбинации допустимых значений границы диапазона свойства и возможных рыночных цен компонентов смеси можно организовать вычислительный эксперимент по определению оптимальной стратегии управления свойствами смеси с учетом стоимости, дефицитности и вредности компонентов.

5.3. ПРИНЯТИЕ УПРАВЛЕНЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ И РИСКА

5.3.1. Источники неопределенности

Источник неопределенности может возникать по двум причинам: сознательное противодействие разумного противника и недостаточная осведомленность об условиях, сопровождающих операцию, связанная с элементом случайности. Случаи второго рода в теории статистических решений рассматриваются как действия некоторой незаинтересованной инстанции, поведение которой неизвестно, но, во всяком случае, не содержит сознательного злонамеренного противодействия нашим планам.

Задачами о принятии решений в условиях неопределенности занимается математическая теория матричных игр.

В теории игр анализируются ситуации, в которых сталкиваются две или более враждующие стороны, преследующие различные цели, причем результат любого мероприятия каждой из сторон зависит от того, какой образ действий выберет противник. Такие ситуации называются конфликтными. Упрощенная, схематизированная модель конфликтной ситуации называется игрой. Игра ведется по вполне определенным правилам. Стороны, участвующие в конфликте, условно именуется противниками, а исход конфликта — выигрышем.

5.3.2. Теория парных матричных игр с нулевой суммой

Игра называется парной, если в ней сталкиваются противоположные интересы только двух сторон. Игра называется игрой с нулевой суммой, если один игрок выигрывает ровно столько, сколько проигрывает другой.

Обозначим a — выигрыш игрока A , b — выигрыш игрока B в игре с нулевой суммой. Так как $a = -b$, то при анализе такой игры нет

необходимости рассматривать обе стороны, достаточно следить за выигрышем одного из игроков. Обычно это бывает игрок A и эта сторона именуется «мы», а сторона B именуется «противник».

Развитие игры во времени осуществляется рядом последовательных этапов, или «ходов». Ходом в теории игр называется выбор одного из предусмотренных правилами игры действий и его осуществление. Ходы бывают личные и случайные. Личным ходом называется сознательный выбор игроком одного из возможных вариантов действий и его осуществление. Случайным ходом называется выбор из ряда возможностей, осуществляемый не решением игрока, а каким-либо механизмом случайного выбора (бросание монеты, выбор карты из колоды и т. п.). Для каждого случайного хода должно быть определено распределение вероятностей возможных исходов.

Стратегией игрока называется совокупность правил, определяющих выбор варианта действий при каждом личном ходе этого игрока в зависимости от ситуации, сложившейся в процессе игры.

Оптимальной называется такая стратегия игрока, которая при многократном повторении игры обеспечивает данному игроку максимально возможный средний выигрыш.

Предположим, что каждая сторона выбрала определенную стратегию: мы выбрали A_i , противник — B_j , при этом наш выигрыш или его математическое ожидание составляет a_{ij} . Эти значения можно записать в виде прямоугольной матрицы A , строки которой соответствуют нашим стратегиям (A_i), а столбцы — стратегиям противника (B_j). Такая матрица называется платежной матрицей или матрицей игры.

5.3.3. Платежная матрица

Таблица 52

Платежная матрица

	B_1	B_2	...	B_n
A_1	a_{11}	a_{12}	...	a_{1n}
A_2	a_{21}	a_{22}	...	a_{2n}
...
A_m	a_{m1}	a_{m2}	...	a_{m3}

Рассмотрим игру $m \times n$ с матрицей табл. 52. Проанализируем последовательно каждую нашу стратегию A_1, A_2, \dots, A_m . Выбирая A_i , мы должны рассчитывать, что противник ответит на нее той из своих стратегий B_j , для которой наш выигрыш минимален:

$$\alpha_i = \min_j a_{ij}. \quad (5.56)$$

Выпишем α_i (минимумы строк) рядом с матрицей справа и β_j (максимумы столбцов) внизу в виде добавочного столбца и строки (табл. 53).

Т а б л и ц а 53

Платежная матрица с добавлением строки и столбца

	B_1	B_2	\dots	B_n	α_i
A_1	a_{11}	a_{12}	\dots	a_{1n}	α_1
A_2	a_{21}	a_{22}	\dots	a_{2n}	α_2
\dots	\dots	\dots	\dots	\dots	\dots
A_m	a_{m1}	a_{m2}	\dots	a_{mn}	α_m
	β_1	β_2		β_n	

Естественно, мы должны предпочесть другим ту стратегию, для которой α_i максимально:

$$\alpha = \max_i \alpha_i, \quad (5.57)$$

или, принимая во внимание (5.56)

$$\alpha = \max_i \min_j a_{ij}. \quad (5.58)$$

Величина α называется нижней ценой игры или максимином. Та стратегия A_i , которая соответствует максимину α , называется максиминной стратегией. Очевидно, если мы будем придерживаться максиминной стратегии, то при любом поведении противника нам гарантирован выигрыш, не меньший α . Это наш гарантированный минимум.

Рассуждая аналогично за противника, можно утверждать, что при просмотре своих стратегий, приводящих к максимальному нашему выигрышу

$$\beta_j = \max_i a_{ij}, \quad (5.59)$$

он должен стремиться обратить их в минимум, т. е. из всех своих стратегий он должен выбрать такую, которая минимизирует наш максимальный выигрыш:

$$\beta = \min_j \max_i a_{ij}. \quad (5.60)$$

Величина β называется верхней ценой игры или минимаксом, а соответствующая стратегия противника называется минимаксной стратегией. Придерживаясь минимаксной стратегии, противник гарантирован, что в любом случае не проиграет больше β .

Принцип осторожности, диктующий игрокам выбор максиминной и минимаксной стратегий, является в теории игр основным и называется принципом минимакса. Он вытекает из предположения о разумности каждого игрока, стремящегося достигнуть цели, противоположной цели противника.

5.3.4. Решение парных матричных игр

Игры, для которых нижняя цена равна верхней ($\alpha = \beta$), называются играми с седловой точкой. Общее значение нижней и верхней цены игры $v = \alpha = \beta$ называется чистой ценой игры. Седловой точке соответствует пара минимаксных стратегий, называемых оптимальными, а их совокупность — решением игры. Решение игры обладает одним замечательным свойством: если один из игроков придерживается своей оптимальной стратегии, то для другого игрока не может быть выгодным отклонение от своей оптимальной стратегии. Любое отклонение только ухудшает положение.

Среди конечных игр наиболее типичными являются такие, в которых нижняя и верхняя цены игры различны, т. е. не имеют седловой точки. При этом возникает вопрос: нельзя ли гарантировать себе выигрыш, больший α , если применять не одну единственную стратегию, а чередовать случайным образом несколько стратегий? Такие стратегии в теории игр называются смешанными стратегиями.

5.3.4.1. Решение матричной игры в смешанных стратегиях методом линейного программирования. Решение любой конечной игры $m \times n$ может быть сведено к задаче линейного программирования.

Результатом решения игры являются две оптимальные смешанные стратегии игроков A и B : $S_a = (P_1, P_2, \dots, P_m)$; $S_b = (R_1, R_2, \dots, R_n)$,

друг против друга свои стратегии. Эксперимент состоит из последовательности отдельных «партий» данной игры. Начинается он с того, что один из игроков, скажем, A , или «мы», выбирает произвольно одну из своих стратегий A_i . Противник отвечает той из своих стратегий B_j , которая наименее выгодна для нас.

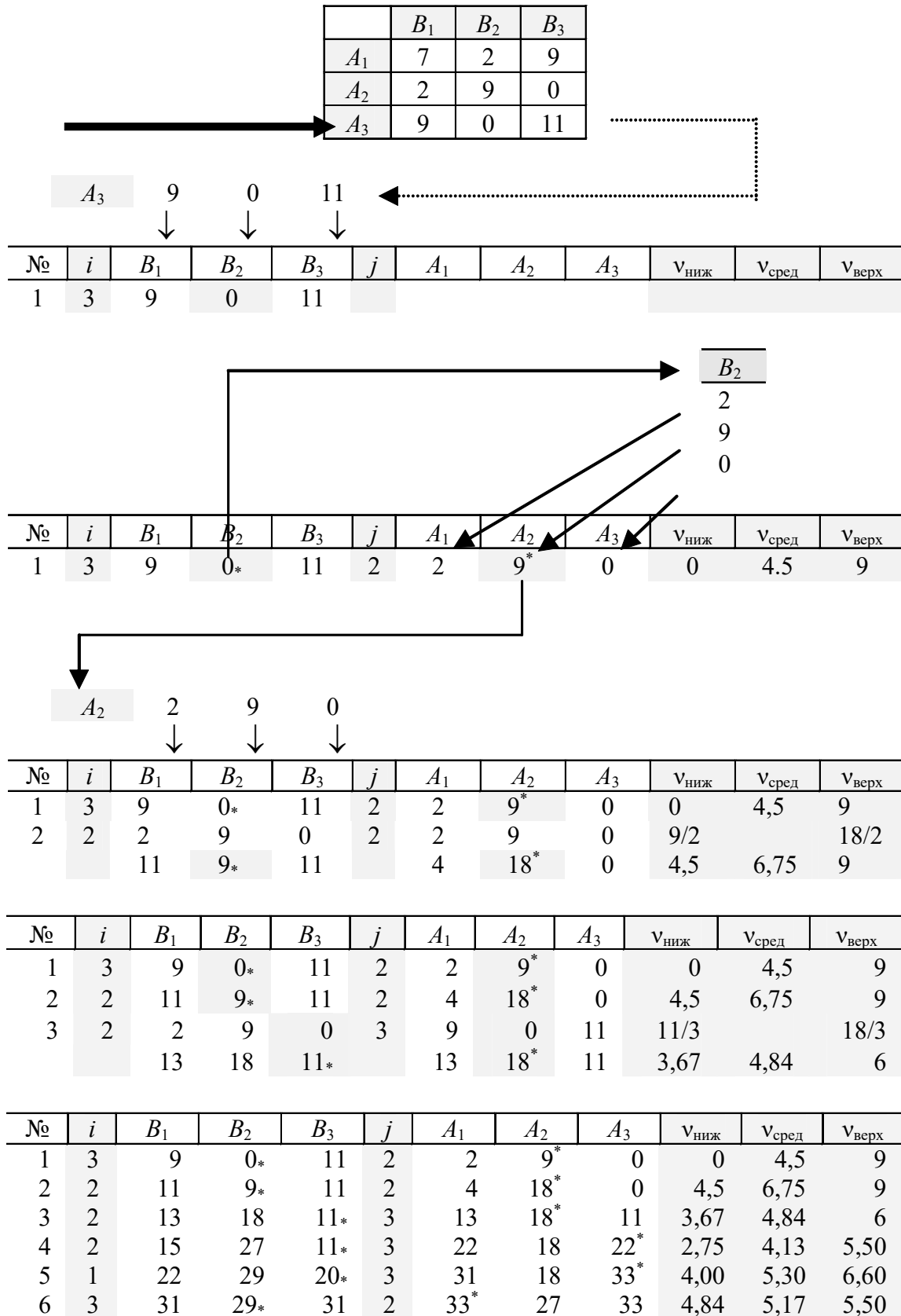
На этот ход мы отвечаем стратегией A_k , которая дает максимальный выигрыш при стратегии противника B_j , и т. д. Если такую чередующуюся последовательность партий продолжать достаточно долго, то средний выигрыш, приходящийся на одну партию, будет стремиться к цене игры, а частоты, с которыми применялись стратегии, будут приближаться к вероятностям в оптимальных смешанных стратегиях.

Этапы решения парной матричной игры методом итераций приведены в табл. 54.

В табл. 54 приведены первые 30 шагов процесса итераций. В первом столбце дан номер партии (пары выборов) k , во втором — номер i выбранной в данной партии стратегии игрока A . В последующих трех столбцах — «накопленный выигрыш» за первые k партий при тех стратегиях, которые применяли оба игрока в предыдущих партиях, при стратегии A_i игрока A в данной партии и при стратегиях B_1, B_2, B_3 игрока B в данной партии. Из этих накопленных выигрышей помечен знаком (*) минимальный. Отмеченное число определяет собой наивыгоднейшую стратегию игрока B в данной партии — она соответствует номеру той стратегии B_j , для которой достигается минимум накопленного выигрыша (если таких минимумов несколько, берется любой из них, например, случайным розыгрышем). Таким образом, проставляется в следующем столбце номер оптимальной ответной стратегии противника j . В последующих трех столбцах приводится накопленный выигрыш за k партий соответственно при стратегиях A_1, A_2, A_3 игрока A . Из этих значений выбрано максимальное; оно отмечено знаком (*) и определяет собой выбор стратегии игрока A в следующей партии (следующей строке таблицы). $v_{\text{ниж}}$ — минимальный накопленный выигрыш, деленный на число партий k ; $v_{\text{верх}}$ — максимальный накопленный выигрыш, деленный на число партий k ; $v_{\text{сред}}$ — их среднее арифметическое.

Подсчитывая число случаев применения игроком каждой стратегии и деля его на число партий k , получим приближенные значения вероятностей, с которыми применяются стратегии при оптимальном смешивании.

Этапы решения парной матричной игры методом итераций



№	i	B_1	B_2	B_3	j	A_1	A_2	A_3	$v_{\text{ниж}}$	$v_{\text{сред}}$	$v_{\text{верх}}$
7	1	38	31*	40	2	35	36*	33	4,43	4,79	5,14
8	2	40	40*	40	2	37	45*	33	5,00	5,30	5,61
9	2	42	49	40*	3	46*	45	44	4,45	4,78	5,11
10	1	49	51	49*	1	53	47	53*	4,90	5,10	5,30
11	3	58	51*	60	2	55	56*	53	4,64	4,87	5,09
12	2	60	60	60	2	57	65*	53	5,00	5,20	5,41
13	2	62	69	60*	3	66*	65	64	4,61	4,84	5,07
14	1	69*	71	69	1	73	67	73*	4,93	5,07	5,21
15	3	78	71*	80	2	75	76*	73	4,74	4,90	5,06
16	2	80	80*	80	2	77	85*	73	5,00	5,16	5,31
17	2	82	89	80*	3	86*	85	84	4,71	4,69	5,07
18	1	89*	91	89	1	93*	87	93	4,95	5,06	5,17
19	3	98	91*	100	2	95	96*	93	4,79	4,93	5,06
20	2	100	100*	100	2	97	105*	93	5,00	5,15	5,31
21	2	102	109	100*	3	106*	105	104	4,76	4,90	5,04
22	1	109*	111	109	1	113	107	113*	4,97	5,05	5,14
23	3	118	111*	120	2	115	116*	113	4,83	4,94	5,04
24	2	120	120*	120	2	117	125*	113	5,00	5,10	5,20
25	2	122	129	120*	3	126*	125	124	4,80	4,92	5,04
26	1	129	131	129	1	133	127	133*	4,96	5,04	5,11
27	3	138	131*	140	2	135	136*	133	4,86	4,95	5,04
28	2	140	140*	140	2	137	145*	133	5,00	5,10	5,09
29	2	142	149	140*	3	146*	145	144	4,84	4,94	5,04
30	2	149*	151	149	1	153	147	153*	4,97	5,04	5,10

По поводу табл. 54 можно сделать еще одно замечание. В ней встречаются строки (например, восьмая, двенадцатая, двадцатая и т. д.), где все три значения выигрышей одинаковы; это означает, что достигнуто «положение равновесия», при котором любое поведение противника дает нам один и тот же выигрыш, а именно, цену игры v .

Преимущество метода итераций состоит в том, что громоздкость вычислений сравнительно мало возрастает с увеличением размера таблицы $m \times n$, чего нельзя сказать о задаче линейного программирования.

5.3.5. Статистические методы принятия решений в условиях неопределенности

В случаях, когда игроком B выступает не сознательный противник, а непредсказуемая «природа», первоначально может показаться, что решать такие задачи проще, поскольку в поведении «приро-

ды» не содержится осмысленного противодействия. Однако в традиционной игровой конфликтной ситуации диаметрально противоположность интересов противников как бы снимает часть неопределенности. Если противоположности интересов нет, неопределенность сказывается в гораздо более сильной степени.

5.3.5.1. Матрица рисков. Выигрыш может оказаться выше не за счет того, что мы выбрали более удачную стратегию, а просто за счет того, что состояние природы Π_j в тот момент оказалось выгоднее для нас, чем Π_i . Поэтому условия игры и исходные данные для анализа ситуации и принятия решения иногда бывает полезно описывать не с точки зрения выигрыша, а с точки зрения удачности или неудачности выбора стратегии при конкретных обстоятельствах. С этой целью введено важное понятие риска.

Риском игрока при использовании стратегий A_i в условиях Π_j называется разность между выигрышем, который он получил бы, если бы знал Π_j , и выигрышем, который он получит в тех же условиях, применяя стратегию A_i . Через r_{ij} обозначается риск игрока при его стратегии A_i в условиях Π_j . Очевидно, что если бы игрок знал заранее состояние природы Π_j , он выбрал бы ту стратегию, которой соответствует максимальный выигрыш в данном столбце (максимум столбца β_j), поэтому

$$r_{ij} = \beta_j - a_{ij}, \quad (5.65)$$

где $\beta_j = \max_i a_{ij}$.

Матрица рисков (r_{ij}) часто дает более наглядную картину неопределенной ситуации, чем матрица выигрышей (a_{ij}) (платежная матрица). Наиболее просто решается задача выбора решения в условиях неопределенности, когда нам хотя и неизвестны состояния природы $\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_n$, но известны их вероятности: $Q_1 = P(\Pi_1); Q_2 = P(\Pi_2), \dots, Q_n = P(\Pi_n)$ ($\sum Q_j = 1$).

В этом случае в качестве показателя эффективности, который мы должны обратить в максимум, естественно взять математическое ожидание выигрыша:

$$\bar{A}_i = \sum_{j=1}^n Q_j \cdot a_{ij}. \quad (5.66)$$

Принятое с помощью такого приема решение является оптимальным не в каждом отдельном случае, а в среднем.

При выборе оптимальной стратегии в неизвестных условиях с известными вероятностями можно пользоваться не только средним

выигрышем, но и средним риском, который нужно обратить не в максимум, а в минимум:

$$\bar{R}_i = \sum_{j=1}^n Q_j \cdot r_{ij}. \quad (5.67)$$

5.3.5.2. Критерий Вальда, критерий Сэвиджа. В играх с природой для выбора оптимальной стратегии иногда пользуются критерием крайнего пессимизма Вальда, гарантирующим при любых условиях выигрыш, не меньший, чем максимин:

$$W = \max_i \min_j a_{ij} \quad (5.68)$$

или критерием минимаксного риска Сэвиджа:

$$S = \min_i \max_j R_{ij}. \quad (5.69)$$

Этот критерий худшим объявляет не минимальный выигрыш, а максимальную потерю выигрыша, если не будет угадано соответствующее состояние природы.

5.3.5.3. Критерий Гурвица. Критерий Гурвица при выборе решения рекомендует не пользоваться ни крайним пессимизмом, ни легкомысленным оптимизмом, а в выражение критерия предлагается ввести коэффициент k как меру пессимизма исследователя:

$$H = \max_i \left[k \min_j a_{ij} + (1 - k) \max_j a_{ij} \right]. \quad (5.70)$$

При $k = 1$ критерий Гурвица превращается в пессимистический критерий Вальда, а при $k = 0$ — в критерий крайнего оптимизма Льюиса.

Анализ матрицы игры с природой под углом зрения разных критериев часто дает лучшее представление о ситуации, о достоинствах и недостатках каждого решения, чем непосредственное рассмотрение матрицы, особенно при больших m и n .

5.3.6. Программный модуль «MatrGame»

5.3.6.1. Назначение и области использования программного модуля. Программный модуль (рис. 125) предназначен для принятия управленческих решений в условиях неопределенности и риска на основе теории парных матричных игр с нулевой суммой.

Программа может использоваться для формализации, моделирования, анализа и решения парных матричных игр $m \times n$ с нулевой суммой.

5.3.6.2. Функциональные возможности программного модуля.

Программа позволяет:

- организовывать игры с сознательным противником;
- решать игры в смешанных стратегиях методом итераций;
- максимизировать средний вероятный выигрыш;
- принимать решения в условиях неполной информации по статистическим критериям:
 - Вальда, обеспечивающим максимальный выигрыш в худших условиях;
 - Сэвиджа, минимизирующим максимальный риск;
 - Гурвица, допускающим разумный риск.

5.3.6.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

MatrGame.exe Главный исполняемый файл программного модуля

MatrGame.mgd Файл данных для расчета рабочего примера

MatrGame.hlp Файл помощи

5.3.6.4. Рабочий интерфейс и структура программного модуля

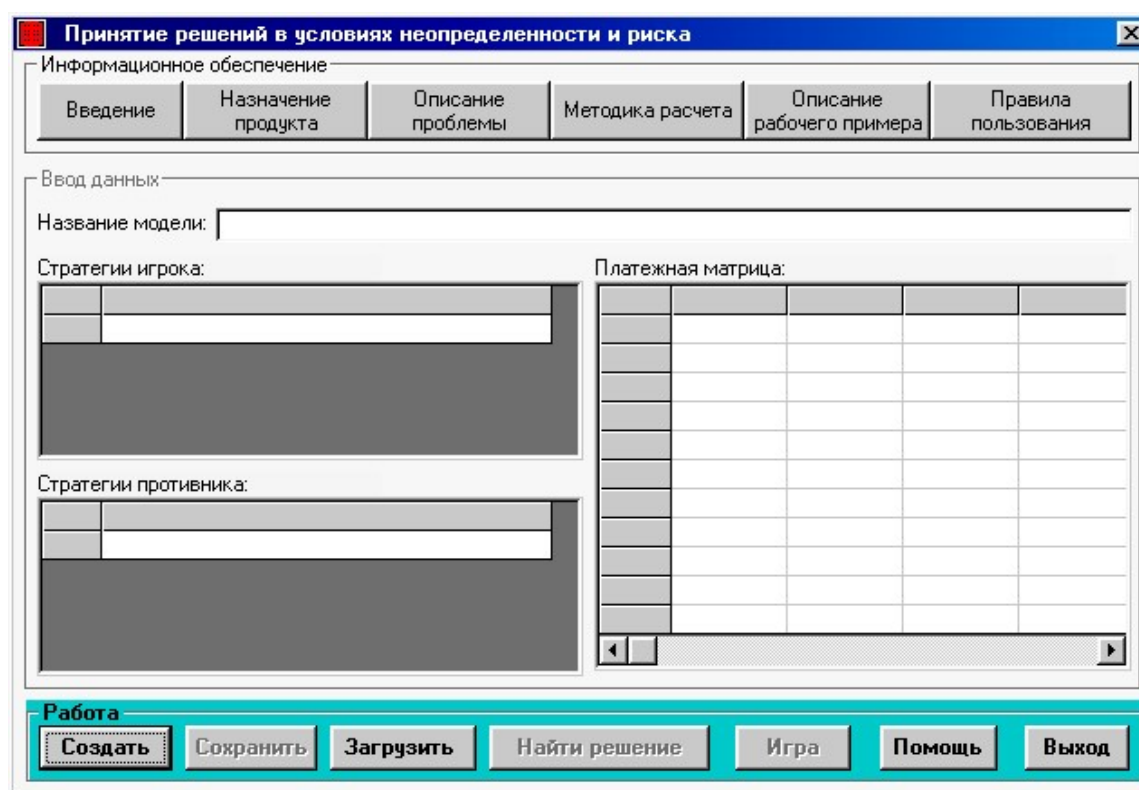


Рис. 125. Рабочий интерфейс программного модуля «MatrGame»

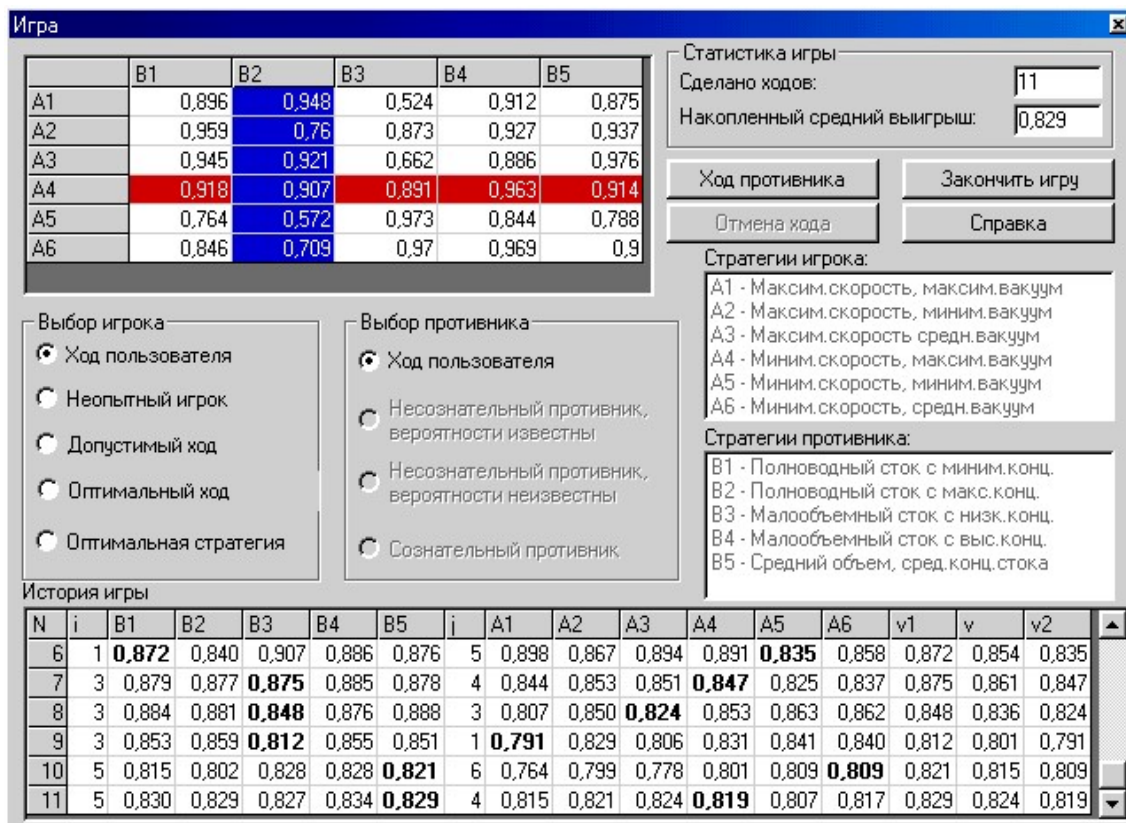
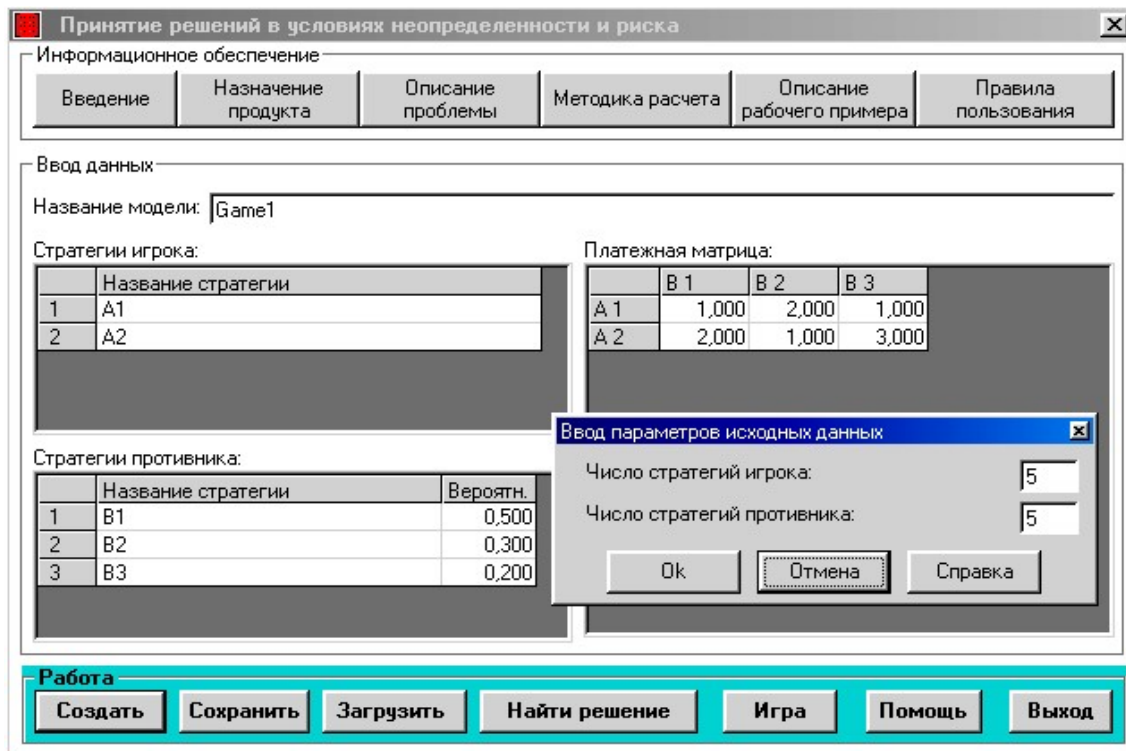


Рис. 126. Формирование стратегий, платежной матрицы и проведение игры методом личных ходов

5.3.7. Запуск и управление работой программного модуля

1. Ознакомиться с содержанием разделов блока информационного обеспечения программного модуля путем нажатия командных кнопок в верхней части интерфейса (Главного меню).

2. В блоке «Работа» в нижней части интерфейса установить требуемый режим работы – «Новый набор» или «Загрузить набор».

3. Если выбран режим «Новый набор», в соответствующие текстовые окна и ячейки платежной матрицы загрузить исходную информацию.

4. Если выбран режим «Загрузить набор», то система готова к продолжению работы, которое может выполняться в двух вариантах:

- «Игра»;
- «Найти решение».

Вариант «Игра» вызывает на экран новую интерактивную оболочку, которая позволяет разыграть «мысленный эксперимент», в котором стороны A и B применяют друг против друга свои стратегии. Эксперимент состоит из последовательности отдельных «партий» данной игры. Начинается он с того, что один из игроков, скажем A или «мы», выбирает произвольно одну из своих стратегий A_i . В зависимости от того, какого противника выбрал Пользователь — а) сознательного, б) несознательного, но с известными вероятностями ходов или в) несознательного, о возможном поведении которого ничего предварительно не известно, программа по кнопке «Ход» сама генерирует ответный ход выбранного противника. На этот ход нам нужно ответить стратегией A_k , которая дает максимальный выигрыш при стратегии противника B_j , и т. д. Если в качестве партнера выбран сознательный противник, то при условии правильных шагов с нашей стороны накопленный выигрыш должен стремиться к цене игры. Наши неумелые действия в этом случае приведут к катастрофически низким результатам. Если противник несознательный, то при удачно подобранной стратегии ответных ходов можно получить накопленный выигрыш, значительно превышающий цену игры. Но если в погоне за максимальным выигрышем отойти от оптимальной стратегии и начать «рыскать», то можно не получить и гарантированного выигрыша. Анализ хода игры и ее результатов осуществляется с помощью обозначенных цветом стратегий игрока и противника на платежной

матрице и таблицы, фиксирующей историю игры. Выделенные жирным шрифтом минимальные и максимальные значения текущих выигрышей позволяют обоснованно выбрать лучший очередной ход, а также указать студенту на ошибочность выбора. Критерием оценки правильности принятия решения в условиях неопределенности служит значение накопленного выигрыша, помещенного в блоке «Статистика игры».

Вариант «Найти решение» выводит в появляющееся текстовое окно решение игры в смешанных стратегиях, полученного по методу итераций, а также рекомендации по выбору оптимальной стратегии с помощью статистических критериев Вальда, при котором в худших условиях выигрыш максимален, минимаксного критерия Сэвиджа, *минимизирующего максимальный риск, и критерия пессимизма* — оптимизма Гурвица, допускающего разумный риск.

5.3.8. Описание рабочего примера

Демонстрационным примером, иллюстрирующим применение теории матричных игр с нулевой суммой для решения некоторых прикладных экологических проблем, предлагается поиск решения о выборе стратегии очистки сточных вод от взвешенных веществ на вакуум-фильтрах Вако. Источником неопределенности является отсутствие информации об объеме и концентрации сточных вод, поступающих на очистку (табл. 55).

При технологическом управлении стихийным изменениям качества сточной воды противостоят шесть условно выделенных стратегий игрока, связанных с различной скоростью вращения вакуумного барабана и различными значениями разряжения в отсасывающей камере (табл. 56).

В качестве оценки размера платежа выступает степень очистки воды.

Стратегии игрока:

A_1 — Максимальная скорость — максимальный вакуум.

A_2 — Максимальная скорость — минимальный вакуум.

A_3 — Максимальная скорость — средний вакуум.

A_4 — Минимальная скорость — максимальный вакуум.

A_5 — Минимальная скорость — минимальный вакуум.

A_6 — Минимальная скорость — средний вакуум.

Список стратегий противника и распределение их вероятностей

Стратегии противника	Вероятности
Π_1 — Полноводный сток с минимальной концентрацией	0,29000
Π_2 — Полноводный сток с максимальной концентрацией	0,19000
Π_3 — Малообъемный сток с низкой концентрацией	0,08000
Π_4 — Малообъемный сток с высокой концентрацией	0,06000
Π_5 — Малообъемный сток со средней концентрацией	0,38000
Мера Вашего оптимизма	0,40

Платежная матрица

	Π_1	Π_2	Π_3	Π_4	Π_5
A_1	0,89600	0,94800	0,52400	0,91200	0,87500
A_2	0,95900	0,76000	0,87300	0,92700	0,93700
A_3	0,94500	0,92100	0,66200	0,88600	0,97600
A_4	0,91800	0,90700	0,89100	0,96300	0,91400
A_5	0,76400	0,57200	0,97300	0,84400	0,78800
A_6	0,84600	0,70900	0,97000	0,96900	0,90000

5.3.9. Решение рабочего примера парной матричной игры методом итераций

Накопленный средний выигрыш	0,8848336
Число итераций	30
Частоты стратегий игрока	Частоты стратегий противника
1 0,033333340	1 0,000000000
2 0,000000000	2 0,300000000
3 0,033333340	3 0,700000000
4 0,900000000	4 0,000000000
5 0,033333340	5 0,000000000
6 0,000000000	
Нижняя цена игры	0,89100
Верхняя цена игры	0,94800
Максимальный выигрыш	0,97600

5.3.10. Рекомендации по выбору оптимальной стратегии в условиях неопределенности и риска с точки зрения различных подходов и критериев

1. Стратегия, обращающая в максимум средний вероятный выигрыш.

- A_3 Максимальная скорость — средний вакуум.
Средний вероятный выигрыш 0,92604.
2. *Стратегия, при которой в худших условиях выигрыш максимален (по максиминному критерию Вальда).*
- A_4 Минимальная скорость — максимальный вакуум.
Гарантированный выигрыш 0,89100.
3. *Стратегия, минимизирующая максимальный риск по минимаксному критерию Сэвиджа.*
- A_4 Минимальная скорость — максимальный вакуум.
Минимальная из максимальных потерь 0,12500.
4. *Стратегия, допускающая разумный риск по критерию пессимизма — оптимизма Гурвица.*
- A_4 Минимальная скорость — максимальный вакуум.
Возможный выигрыш 0,91980.

5.3.11. Организация вычислительных экспериментов

Путем направленных изменений значений критерия в ячейках платежной матрицы можно нарабатывать навыки принятия управленческих решений в условиях неопределенности и риска. Можно сформировать платежную матрицу с седловой точкой и проанализировать полученные результаты.

5.4. РАЦИОНАЛЬНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ОГРАНИЧЕННЫХ РЕСУРСОВ

5.4.1. Общая задача линейного программирования

Линейное программирование — это наука о методах исследования и отыскания наибольших и наименьших значений линейной функции, на неизвестные которой наложены линейные ограничения.

Пусть необходимо исследовать на экстремум линейную функцию $z = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ при линейных ограничениях

$$\begin{aligned}
f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0; \\
f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0; \\
&\dots\dots\dots \\
f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0.
\end{aligned}
\tag{5.71}$$

Так как z — линейная функция, то в общем случае $dz/dx_j = 0$ ($j = 1, 2, \dots, n$), следовательно, внутри области экстремальных точек не существует. Таким образом, наибольшие и наименьшие значения линейной функции находятся на границе области, которая образована системой ограничений.

В задачах линейного программирования имеются система m линейных алгебраических уравнений с n неизвестными x_1, x_2, \dots, x_n

$$\begin{aligned}
a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + \dots + a_{1n} \cdot x_n &= b_1; \\
a_{21} \cdot x_1 + a_{22} \cdot x_2 + \dots + a_{2n} \cdot x_n &= b_2; \\
&\dots\dots\dots \\
a_{m1} \cdot x_1 + a_{m2} \cdot x_2 + \dots + a_{mn} \cdot x_n &= b_m
\end{aligned}
\tag{5.72}$$

и линейная функция

$$z = c_1 \cdot x_1 + c_2 \cdot x_2 + \dots + c_n \cdot x_n . \tag{5.73}$$

Требуется найти такое неотрицательное решение заданной системы, при которой z принимает минимальное (максимальное) значение:

$$x_1 \geq 0 \quad x_2 \geq 0, \dots, x_n \geq 0. \tag{5.74}$$

Система (5.72) — это система ограничений данной задачи. Система, в которой все ограничения представляют собой уравнения, называется системой канонического вида.

В математической постановке основной задачи линейного программирования выделяются три составные части: целевая функция, система ограничений и условия неотрицательности переменных.

Во многих задачах ограничения, которые наложены на переменные, задаются в виде системы неравенств.

Любую задачу линейного программирования с ограничениями в виде неравенств можно привести к ограничениям в виде равенств.

Для этого добавим к левой части первого неравенства некоторую неотрицательную величину x_{n+1} к левой части второго — неотрица-

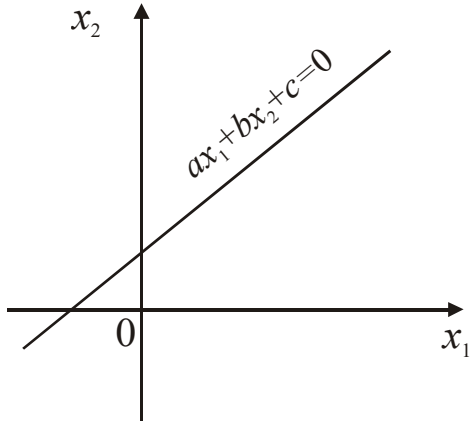


Рис. 127. Прямая, задаваемая уравнением $a_1x_1 + b_1x_2 + c_1 = 0$

Истолковывая x_1 и x_2 как координаты точки на плоскости, поставим вопрос: какую область на плоскости определяет, например, первое неравенство системы (5.76). В этом случае рассматривается прямая, задаваемая уравнением $a_1x_1 + b_1x_2 + c_1 = 0$. В прямоугольной системе координат она разбивает всю плоскость на две полуплоскости, в одной из которых выполняется неравенство $a_1x_1 + b_1x_2 + c_1 \leq 0$, а в другой $a_1x_1 + b_1x_2 + c_1 \geq 0$. Сама прямая считается принадлежащей каждой из этих полуплоскостей (рис. 127).

Область решений каждого неравенства определим подстановкой начала координат. Если какая-либо пара чисел (x_1, x_2) удовлетворяет всем неравенствам системы (5.76), то соответствующая точка $A(x_1, x_2)$ принадлежит пересечению полуплоскостей P_1, P_2, \dots, P_m . Пересечение конечного числа полуплоскостей есть многоугольная область M , которая в прямоугольной системе координат может располагаться по-разному (рис. 128).

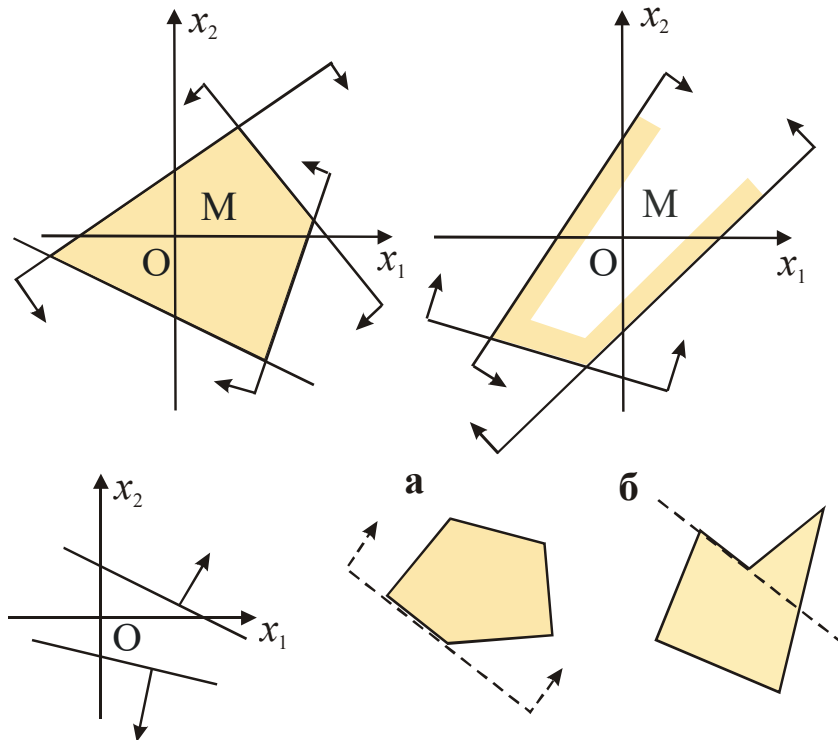


Рис. 128. Многоугольные области пересечения полуплоскостей

Возможен случай, когда нет ни одной точки, принадлежащей одновременно всем рассматриваемым полуплоскостям, т. е. область «пуста». Это означает, что система несовместна.

Область решений M является выпуклой, т. е. если взять любой из отрезков, ограничивающих область M , то она будет располагаться по одну сторону от прямой, на которой лежит взятый отрезок.

5.4.1.2. Графический метод решения задач линейного программирования для случая с двумя неизвестными. Пусть имеем систему m линейных неравенств с двумя неизвестными x_1 и x_2 :

$$\begin{aligned} a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + b_1 &\geq 0; \\ a_{21} \cdot x_1 + a_{22} \cdot x_2 + b_2 &\geq 0; \\ &\dots\dots\dots \\ a_{m1} \cdot x_1 + a_{m2} \cdot x_2 + b_m &\geq 0, \end{aligned} \tag{5.77}$$

а также линейную форму

$$Z = c_1 \cdot x_1 + c_2 \cdot x_2. \tag{5.78}$$

Требуется среди всех неотрицательных решений системы (5.77) выбрать такое, которое обращает линейную форму (5.78) в минимум.

Область решений систем (5.76) при $x_1 \geq 0$ и $x_2 \geq 0$ есть некоторая выпуклая многоугольная область на плоскости.

Приравняем выражение для Z какой-либо постоянной:

Уравнение (5.78) на плоскости определяет прямую линию, в точках которой функция принимает одно и то же фиксированное значение c . Такая прямая называется прямой уровня функции Z , отвечающей значению c . Если для Z принять другую постоянную, получим другую линию уровня.

Равенство (5.78) геометрически представляет собой семейство параллельных прямых. Будем перемещать прямую MN параллельно самой себе в направлении увеличения Z (или в направлении уменьшения Z , если требуется вычислить минимум линейной формы). При этом возможны два случая.

Параллельное перемещение приводит прямую в такое положение, когда у нее окажется одна общая точка с многоугольником – вершина. Координаты точки B дают максимум функции (5.78). Может оказаться, что прямая будет параллельна одной из сторон многоугольника. В таком случае экстремум достигается во всех точках соответствующей стороны BC многоугольника (рис. 129).

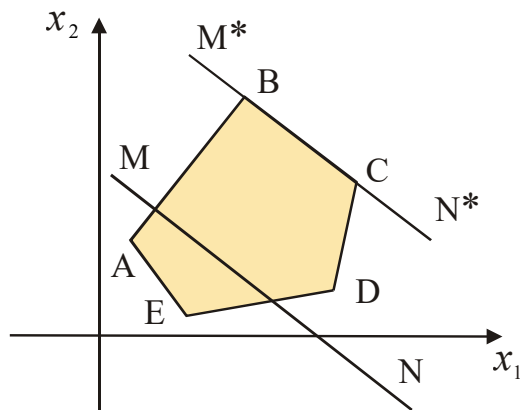


Рис. 129. Перемещение прямой уровня целевой функции параллельно самой себе для определения максимума (минимума) линейной формы

Задача 1. Предприятие располагает производственными мощностями четырех видов в следующем количестве: $M_1 = 16$, $M_2 = 10$, $M_3 = 6$, $M_4 = 7$. Нормы затрат мощностей каждого вида составляют на единицу продукции № 1: 2, 1, 0, 1; на единицу продукции № 2: 1, 1, 1, 0.

Прибыль от одной единицы продукции № 1 равна 3 руб., от одной единицы продукции № 2 — 4 руб. Составить план производства продукции двух видов, при котором доход предприятия от реализации всей продукции оказался бы максимальным.

Решение. Обозначим через x_1 количество продукции № 1, а через x_2 — продукции № 2, производство которых должно принести максимальную прибыль предприятию. Так как прибыль от одной единицы продукции № 1 составляет 3 руб., доход предприятия от x_1 единиц продукции — $3x_1$ руб. Далее, поскольку доход от одной единицы № 2 равен 4 руб., то прибыль от производства продукции № 2 — $4x_2$ руб. Таким образом, общая прибыль задается линейной формой $Z = 3x_1 + 4x_2$.

Переменные количества x_1 и x_2 не могут быть произвольными. Во-первых, x_1 и x_2 не должны быть отрицательными. Во-вторых, мощность, необходимая для производства продукции № 1 и № 2, не должна превышать имеющийся запас. На каждую единицу № 1 идет 2 единицы мощности вида M_1 , 1 единица мощности M_2 и 1 единица мощности M_4 . Тогда на x_1 единиц продукции № 1 израсходуется мощности M_1 — $2x_1$, от M_2 — $1x_1$ и от M_4 — $1x_1$.

Аналогично для производства продукции № 2 израсходуется от мощности M_1 — $1x_2$, от M_2 — $1x_2$ и от M_3 — $1x_2$. Так как имеющаяся производственная мощность ограничена, и ее расход на производ-

ство продукции № 1 и № 2 не должен превышать имеющегося запаса, мы пришли, таким образом, к следующей задаче: максимизировать линейную форму $Z = 3x_1 + 4x_2$ при условии, что

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 \leq 16; \\ x_1 + x_2 \leq 10; \\ x_2 \leq 6; \\ x_1 \leq 7; \\ x_1 \geq 0; \\ x_2 \geq 0. \end{cases} \quad (5.79)$$

Чтобы решить поставленную задачу, построим выпуклый многоугольник, соответствующий системе неравенств. С этой целью на плоскости x_1Ox_2 построим прямые линии:

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 = 16; \\ x_1 + x_2 = 10; \\ x_2 = 6; \\ x_1 = 7. \end{cases} \quad (5.80)$$

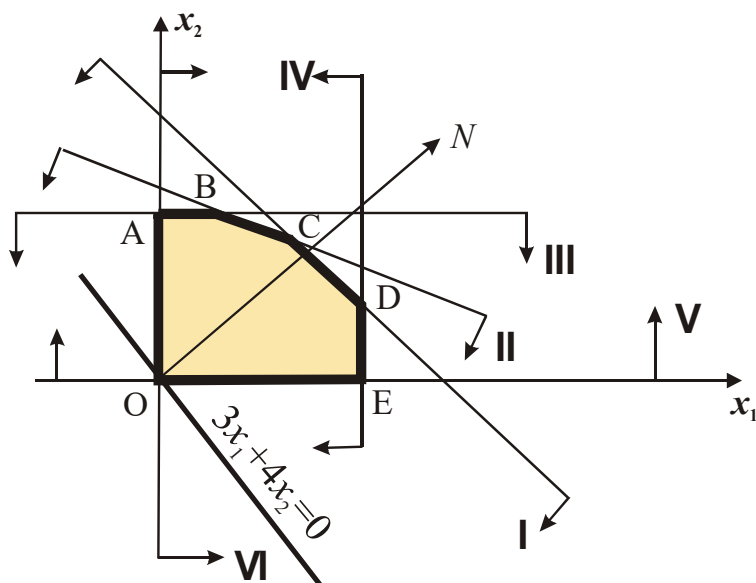


Рис. 130. Схема графического решения системы линейных неравенств

Определим некоторые свойства решений задачи, с которыми очень часто придется встречаться. Будем называть решением (планом) задачи линейного программирования вектор $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, удовлетворяющий системе ограничений задачи и условию $x_j \geq 0, j = 1, 2, \dots, n$. План задачи, для которого линейная форма достигает минимума (или максимума), является оптимальным.

Предполагается, что рассматриваемая задача обладает планами и содержит m векторов, из которых составляется единичная матрица порядка m . Исходным планом задачи в базисе системы единичных векторов P_1, P_1, \dots, P_m будет план вида $X_1 = (x_1, x_2, \dots, x_m, 0, \dots, 0)$. Если для плана X все $x_i > 0 (i = 1, 2, \dots, m)$, такой план будет невырожденным; если же один или несколько коэффициентов $x_i = 0$, план будет вырожденным.

Оптимальное решение (план) связано с узловыми точками многогранника решений, т. е. с опорными планами, каждый из которых определяется системой m линейно независимых векторов, содержащихся в данной системе из n ограничений. Верхняя граница количества опорных планов, содержащихся в данной задаче, определяется числом сочетаний C_n^m . При больших m и n найти оптимальный план, перебирая все опорные планы, очень трудно. Поэтому необходимо иметь схему, позволяющую осуществлять упорядоченный переход от одного опорного плана к другому. Такой схемой является симплексный метод, который позволяет, исходя из известного опорного плана задачи, за конечное число шагов получить ее оптимальный план. Каждый из шагов (итераций) состоит в нахождении нового опорного плана, которому соответствует меньшее значение линейной целевой функции по сравнению со значением этой же функции в предыдущем плане.

Базисом n -мерного векторного пространства называется любая совокупность n линейно независимых векторов этого же пространства. Поэтому в двухмерном пространстве за базис могут быть взяты *два любых неколлинеарных вектора*, в *трехмерном пространстве* — три некопланарных вектора, в пространстве с $n > 3$ — система из n линейно независимых векторов.

Отыскание оптимального плана задачи возможно только тогда, когда система совместна и имеет не единственное неотрицательное решение. Это выполнимо в случае, если ранг системы (число линейно независимых уравнений) меньше числа неизвестных $n (r < n)$.

Случай ($r > n$) вообще невозможен, а при $r = n$ система допускает единственное решение, и вопрос о выборе оптимального решения отпадает.

В случае $r < n$ система векторов a_1, \dots, a_n будет содержать максимальную независимую подсистему — базис. Базисов может быть несколько. При этом каждый базис состоит точно из r векторов. Переменные, соответствующие r векторам базиса, называются базисными. Вся их совокупность — это базис системы переменных, остальные $n - r$ переменных называют свободными.

Для примера один из базисов пусть составляет первые r векторов a_1, \dots, a_r . Этому базису соответствуют базисные переменные x_1, \dots, x_r и свободные переменные $x_{(r+1)}, \dots, x_n$. Понятно, что другому базису системы векторов соответствует и другой набор базисных, и свободных переменных.

С учетом сказанного систему можно преобразовать (например, методом исключения неизвестных) к виду

$$x_i = b_{i0} - \sum_{j=1}^{n-r} b_{ij} \cdot x_{r+j} \quad (i = 1, \dots, r), \quad (5.82)$$

т. е. базисные переменные x_1, \dots, x_r выразить линейно через свободные переменные $x_{(r+1)}, \dots, x_n$. В данном случае система разрешена относительно базиса x_1, \dots, x_r .

Частное решение, полученное при нулевых значениях свободных переменных, называют базисным решением системы. Если в базисном решении все базисные переменные принимают неотрицательные значения, то его называют опорным. Опорный план, содержащий точно r отличных от нуля компонент, называется невырожденным.

Планы задач линейного программирования можно геометрически трактовать как точки многогранника. Опорные планы оказываются вершинами таких многогранников. Так как каждой вершине многогранника соответствует опорный план, то оптимальный план будет совпадать по крайней мере с одним из опорных планов системы. Такое заключение позволяет наметить принципиальный путь решения задач линейного программирования: проверить все опорные планы и выделить тот, при котором целевая функция достигает экстремума.

Решение задачи (5.81) симплексным методом в общем виде начинаем с составления первой итерации, предварительно обозначив $b_i = x_i$; $a_{ij} = x_{ij}$.

Т а б л и ц а 57

Первая итерация

i	Базис	c_i	X_i	c_1	c_2	...	c_m	c_{m+1}	...	c_k	...	c_n
				P_1	P_2	...	P_m	P_{m+1}	...	P_k	...	P_n
1	P_1	c_1	x_1	1	0	...	0	$x_{1,m+1}$...	x_{1k}	...	x_{1n}
2	P_2	c_2	x_2	0	1	...	0	$x_{2,m+1}$...	x_{2k}	...	x_{2n}
...
r	P_r	c_r	x_r	0	0	...	0	$x_{r,m+1}$...	x_{rk}	...	x_{rn}
...
m	P_m	c_m	x_m	0	0	...	1	$x_{m,m+1}$...	x_{mk}	...	x_{mn}
$m+1$	$Z_j - c_j$	$Z_0 = \sum_{i=1}^m c_i \cdot x_i$	$Z_1 - c_1$	$Z_2 - c_2$...	$Z_m - c_m$	$Z_{m+1} - c_{m+1}$...	$Z_k - c_k$...	$Z_n - c_n$	

В $(m + 1)$ -й строке значения Z_0 и Z_j можно определить по формулам:

$$Z_0 = \sum_{i=1}^m c_i \cdot x_i, \quad Z_j = \sum_{i=1}^m c_i \cdot x_{ij} \quad (j = 1, 2, \dots, n). \quad (5.83)$$

Критерием оптимальности плана задачи является выполнение условия $(Z_j - c_j) \leq 0$. Если же это условие не выполняется, т. е. для некоторого номера j $(Z_j - c_j) > 0$, тогда следует отыскать новый план, который лучше (по крайней мере, не хуже) предшествующего. Базис нового плана будет содержать $(m - 1)$ векторов первоначального базиса и новый вектор, вводимый в базис. Чтобы определить, какой вектор следует ввести в базис, просматривают $(m + 1)$ -ную строку. Вектор, соответствующий максимальному значению разности, $\max(Z_j - c_j)$, вводится в базис, причем максимальное значение разности берется по всем индексам j ($j = 1, 2, \dots, n$).

Предположим, что $\max(Z_j - c_j) = Z_k - c_k > 0$. Вектор P_k следует ввести в новый базис. Столбец, соответствующий вектору P_k , является разрешающим (табл. 57).

Невырожденный план задачи должен содержать ровно m положительных компонент, поэтому необходимо определить, какой вектор нужно вывести из базиса. Для этого вычисляют минимальное отношение координат x_i исходного плана соответственно к положительным элементам x_{ik} разрешающего столбца, т. е.

$$\Theta_0 = \min_i \frac{x_i}{x_{ik}} = \frac{x_r}{x_{rk}}. \quad (5.84)$$

Значит, вектор P_r следует исключить из базиса. Строка, соответствующая вектору P_r , является разрешающей. Элемент x_{rk} , стоящий на пересечении разрешающей строки и разрешающего столбца, называется ключевым, или разрешающим. (В первой итерации разрешающий столбец и строка взяты в рамку.)

Таким образом, новый базис содержит $(m - 1)$ векторов старого базиса и вектор P_k .

В этом базисе вычисляют новый план $X_2 = (x_1, x_2, \dots, x_m, 0, \dots, 0)$ и разлагают векторы, не входящие в базис, причем единственным образом, по векторам базиса. Составляющие x_i^* нового плана определяются из соотношений

$$\begin{cases} x_i^* = x_i - \frac{x_r}{x_{rk}} x_{ik} & (i = 1, \dots, r-1, r, r+1, \dots, m); \\ x_k^* = \frac{x_r}{x_{rk}}; \end{cases} \quad (5.85)$$

элементы x_{ij}^* из соотношений

$$\begin{cases} x_{ij}^* = x_{ij} - \frac{x_{rj}}{x_{rk}} x_{ik} & (i = 1, \dots, r-1, r, r+1, \dots, m); \\ x_{rj}^* = \frac{x_{rj}}{x_{rk}}. \end{cases} \quad (5.86)$$

Формулы (5.85) и (5.86) удобно проиллюстрировать схемой (рис. 131)

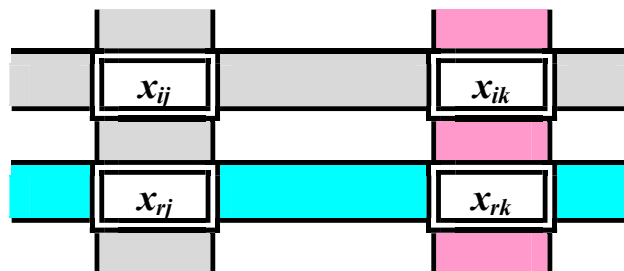


Рис. 131. Схема получения элементов нового плана: k — номер вектора, который нужно ввести в базис; r — номер вектора, который нужно вывести из базиса; x_{rk} — ключевой (разрешающий) элемент системы; $x_{ik} - x_{rk}$ — разрешающий столбец; $x_{ij} - x_{rj}$ — разрешающая строка

Получают новый план $X_2 = (x_1, \dots, x_k, \dots, x_m, 0, \dots, 0)$ и новое разложение векторов по базису (вторую итерацию (табл. 58)).

Вторая итерация

i	Базис	c_i	X_i	c_1	c_2	...	c_m	c_{m+1}	...	c_k	...	c_n
				P_1	P_2	...	P_m	P_{m+1}	...	P_k	...	P_n
1	P_1	c_1	x_1^*	1	0	...	0	$x_{1,m+1}^*$...	0	...	x_{1n}^*
2	P_2	c_2	x_2^*	0	1	...	0	$x_{2,m+1}^*$...	0	...	x_{2n}^*
...
r	P_r	c_r	x_r^*	0	0	...	0	$x_{r,m+1}^*$...	1	...	x_{rn}^*
...
m	P_m	c_m	x_m^*	0	0	...	1	$x_{m,m+1}^*$...	0	...	x_{mn}^*
$m+1$	$Z_j^* - c_j$	$Z_0^* = \sum_{i=1}^m c_i \cdot x_i^*$		$Z_1^* - c_1$	$Z_2^* - c_2$...	$Z_m^* - c_m$	$Z_{m+1}^* - c_{m+1}$...	$Z_k^* - c_k$...	$Z_n^* - c_n$

Если в $(m + 1)$ -й строке второй итерации все разности $(Z_j^* - c_j) < 0$, получен оптимальный план; если же хотя бы одна из разностей $(Z_j^* - c_j) > 0$, вторую итерацию необходимо провести аналогично первой. Процесс продолжается до тех пор, пока не будет получен оптимальный план, т. е. все разности $(Z_j - c_j) < 0$.

Может встретиться случай, что одна или несколько разностей $(Z_j - c_j) > 0$, а столбцы, соответствующие этим разностям, не содержат положительных элементов ($x_{ik} \leq 0$ для какого-то k и всех i). Тогда линейная форма задачи не ограничена.

Если первоначальная задача связана с максимизацией, можно использовать следующий критерий оптимальности плана: подсчитываются разности $Z_j - c_j$ и выбирается новый вектор, соответствующий $\min (Z_j - c_j)$; оптимальный план в этом случае будет достигнут, когда все разности $(Z_j - c_j) \geq 0$.

ПРИМЕР. Найти максимум линейной формы $Z = 4 \cdot x_1 + 2 \cdot x_2$ при следующих ограничениях:

$$\begin{cases} x_1 \leq 5; \\ 2 \cdot x_1 + x_2 \leq 14; \\ x_1 + x_2 \leq 10; \\ x_2 \leq 8; \\ x_1 \geq 0, \quad x_2 \geq 0. \end{cases} \quad (5.87)$$

Решение. Приведем задачу к каноническому виду:

$$\begin{cases} x_1 + x_3 = 5; \\ 2 \cdot x_1 + x_2 + x_4 = 14; \\ x_1 + x_2 + x_5 = 10; \\ x_2 + x_6 = 8; \end{cases} \quad (5.88)$$

$$x_j \geq 0, \quad (j = 1, 2, 3, 4, 5, 6).$$

$$Z = 4 \cdot x_1 + 2 \cdot x_2 + 0 \cdot x_3 + 0 \cdot x_4 + 0 \cdot x_5 + 0 \cdot x_6.$$

Систему ограничений в векторной форме можно записать так:

$$P_1x_1 + P_2x_2 + P_3x_3 + P_4x_4 + P_5x_5 + P_6x_6 = P_0 \text{ или } PX, \quad (5.89)$$

где

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{pmatrix} \quad P_0 = \begin{pmatrix} 5 \\ 14 \\ 10 \\ 8 \end{pmatrix} \quad P_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad P_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad P_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad P_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$P_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad P_6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.90)$$

Поскольку отыскивается максимум задачи, оптимальный план будет достигнут когда все разности $(Z_j - c_j) \geq 0$.

Составляем исходный план задачи (табл. 59).

Таблица 59

Исходный план X_1

i	Базис	c_i	X_1	4	2	0	0	0	0
				P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_6
1	P_3	0	5	1	0	1	0	0	0
2	P_4	0	14	2	1	0	1	0	0
3	P_5	0	10	1	1	0	0	1	0
4	P_6	0	8	0	1	0	0	0	1
5	$Z_j - c_j$	$Z_0 = 0$		-4	-2	0	0	0	0

Исходный базис состоит из векторов P_3, P_4, P_5, P_6 ; ему соответствует план $X_1 = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = (0, 0, 5, 14, 10, 8)$. Поскольку c_3, c_4, c_5, c_6 равны нулю, значение линейной формы $Z_0 = 0$.

В базис вводится вектор, который соответствует $\min (Z_j - c_j)$. Такой разностью является $Z_1 - c_1 = -4$; ей соответствует вектор P_1 , следовательно, вектор P_1 нужно ввести в базис. Чтобы определить, какой вектор необходимо вывести из базиса, вычислим:

$$\Theta_0 = \min_i \frac{x_i}{x_{i1}} = \min\left(\frac{5}{1}, \frac{14}{2}, \frac{10}{1}\right) = 5. \quad (5.91)$$

Вектор P_3 нужно вывести из базиса. Получаем разрешающую строку и разрешающий столбец (в таблице выделено рамкой).

Преобразовав план X_1 по формулам (5.86), получим новый план (табл. 60): $X_2 = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = (5, 0, 0, 4, 5, 8)$.

Т а б л и ц а 60

П л а н X_2

i	Базис	c_i	X_1	4	2	0	0	0	0
				P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_6
1	P_1	4	5	1	0	1	0	0	0
2	P_4	0	4	0	1	-2	1	0	0
3	P_5	0	5	0	1	-1	0	1	0
4	P_6	0	8	0	1	0	0	0	1
5	$Z_j^* - c_j$	$Z_0^* = 20$	0	0	-2	4	0	0	0

В этом случае значение линейной формы, $Z_0^*(X_2) = 20$.

Для плана X_2 критерий оптимальности не выполняется. Среди разностей $Z_j^* - c_j$ имеются разности меньше нуля. Такой разностью является $Z_j^* - c_j = -2 < 0$, следовательно, вектор P_2 нужно ввести в базис. Определяем, какой вектор следует исключить из базиса:

$$\Theta_0 = \min\left(\frac{4}{1}, \frac{5}{2}, \frac{8}{1}\right) = 4, \quad (5.92)$$

значит, вектор P_4 подлежит исключению из базиса. Получили вторую разрешающую строку и новый разрешающий столбец.

Преобразовав план X_2 , получим новый план $X_3 = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = (5, 4, 0, 0, 1, 4)$.

Таблица 61

План X_3									
i	Базис	c_i	X_1	4	2	0	0	0	0
				P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_6
1	P_1	4	5	1	0	1	0	0	0
2	P_4	0	4	0	1	-2	1	0	0
3	P_5	0	1	0	0	1	-1	1	0
4	P_6	0	4	0	0	2	-1	0	1
5	$Z_j^* - c_j$	$Z_0^* = 28$		0	0	0	2	0	0

Очевидно, для плана X_3 (табл. 61) критерий оптимальности выполняется, все $Z_j^* - c_j > 0$. Следовательно, не существует нового допустимого решения системы линейных уравнений, при котором линейная форма принимала бы большее значение, чем $Z_0(X_3) = 28$, т. е. максимум линейной формы $Z_{\max} = 28$ достигается при плане $X_3 = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = (5, 4, 0, 0, 1, 4)$.

5.4.3. Программный модуль «Resurs»

5.4.3.1. Назначение и области использования программного модуля. Тренажер предназначен для вычислительных экспериментов по рациональному распределению ограниченных сырьевых, материальных, энергетических, водных, людских и территориальных ресурсов с определением допустимых производственных мощностей проектируемы предприятий и максимизацией прибыли на уровне территориального административного района.

Компьютерный тренажер может быть использован для решения следующих классов задач:

- задача оптимального распределения ограниченных ресурсов;
- задача об оптимальном плане перевозок;
- задача об оптимальном размещении производства;
- задача динамики производства и создания запасов;
- стохастическая задача комплектования очистного оборудования;

- задача составления рациона;
- задача об оптимальном составе смесей химической обработки земельных угодий;
- задача о внесении удобрений при максимальной экономии моторного топлива.

5.4.3.2. Функциональные возможности программного модуля.

Компьютерный обучающий тренажер позволяет:

- осуществлять ввод и редактирование до 35 наименований ограниченных ресурсов и до 25 наименований предприятий, для которых предназначаются эти ресурсы;
- осуществлять ввод и редактирование значений удельных норм расхода каждого ресурса для каждого предприятия;
- создавать систему ограничений в виде равенств и неравенств на переменные;
- формировать вектор-столбец запасов каждого вида ресурсов;
- осуществлять ввод коэффициентов линейной целевой функции.
- симплексным методом линейного программирования разрешать систему ограничений относительно неизвестных;
- организовывать вычислительный эксперимент по рациональному распределению ограниченных ресурсов в природоохранном проектировании путем целенаправленного изменения значений удельных норм расхода и запасов ресурсов;
- осуществлять тестирование решения путем сопоставления выделенных ресурсов и израсходованных и выявлять лимитирующие признаки;
- осуществлять тестирование условия неразрешимости системы ограничений;
- формировать, редактировать, копировать и распечатывать файл отчета вычислительного эксперимента с целью анализа ситуации и выработки управленческих решений.

5.4.3.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

<i>Resurs.exe</i>	Главный исполняемый файл тренажера
<i>Resurs.lpd</i>	Файл данных для расчета
<i>Resurs.hlp</i>	Файл помощи
<i>Resurs.cnt</i>	Файл оглавления

5.4.3.4. Рабочий интерфейс и структура программного модуля

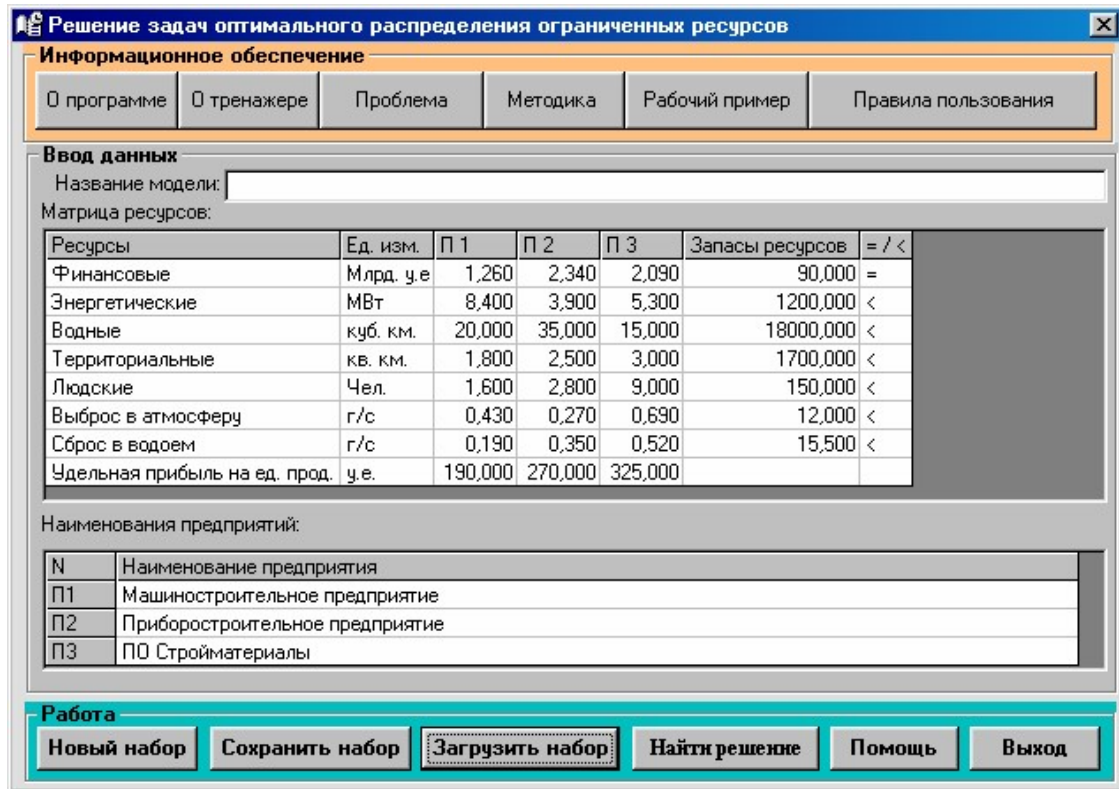


Рис. 132. Рабочий интерфейс программного модуля

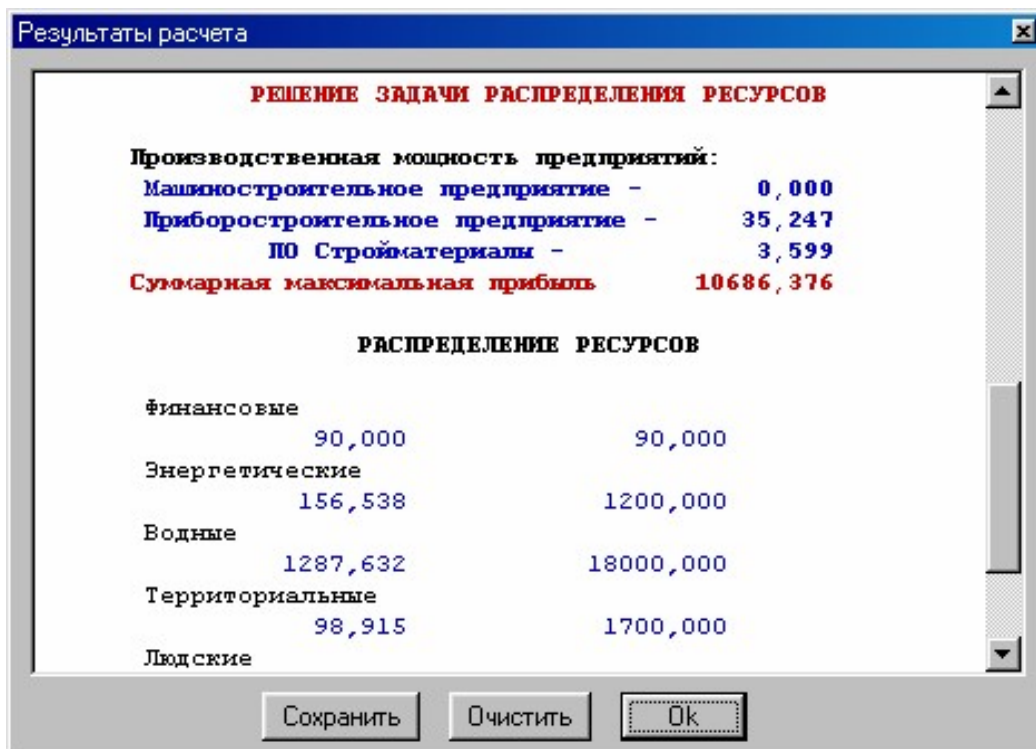


Рис. 133. Окно вывода результатов расчета

5.4.4. Описание рабочего примера

Для проектирования и строительства нескольких химических предприятий, намеренных выпускать продукцию разного наименования и разной стоимости, выделены ограниченные ресурсы, которые нужно оптимальным образом использовать.

Для размещения предприятий отведена промплощадка, ограниченная по размерам. Имеются свободные ресурсы воды, электроэнергии, пара. Можно рассчитывать на привлечение к работе на этих предприятиях не более того количества людей, которые проживают в этом регионе и к моменту окончания строительства завершают свое образование. Известны удельные нормы расхода всех ресурсов на единицу каждого вида продукции. Известны также удельные величины загрязнения окружающей среды при выработке тонны каждого вида товарной продукции.

Требуется найти такие оптимальные значения производственных мощностей проектируемых предприятий, при функционировании которых не будет превышен допустимый предел загрязнения выделенной территории и будет обеспечена максимальная прибыль от реализации выработанной продукции.

Перед нами классический вариант задачи линейного программирования (табл. 62).

Таблица 62

Исходные данные

№	Вид ресурсов	Единицы измерения	Удельные нормы-расхода ресурсов для разных предприятий			Запасы ресурсов
			П1	П2	П3	
1.	Финансовые	тыс. у. е.	1,26	2,34	2,09	90 000
2.	Энергетические	МВт	8,4	3,9	5,3	1200
3.	Водные	км ³	20	35	15	18 000
4.	Территориальные	км ²	1,8	2,5	3,0	1700
5.	Людские	чел.	1,6	2,8	9,0	1850
6.	Выброс в атмосферу	т/год	0,043	0,027	0,069	1206
7.	Сброс в водоем	т/год	0,019	0,035	0,052	3325
	Удельная прибыль на единицу	у. е.	190	270	325	

Протокол вычислительного эксперимента

Производственная мощность предприятий:

П1 — 0,000

П2 — 35,247

П3 — 3,599

Суммарная максимальная прибыль составит
14,208

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РЕСУРСОВ

Финансовые	90000	90 000
Энергетические	156,538	1200,000
Водные	1287,632	18 000,000
Территориальные	98,915	1700,000
Людские	131,083	150,000
Выброс в атмосферу	12,000	12,000
Сброс в водоем	14,208	15,500

В результате решения задачи по приведенным условиям устанавливается предельная производственная мощность для предприятия Р2 в размере 35,247 тыс. т в год и предприятия Р3 в размере 3,599 тыс. т в год с максимальной прибылью 14 млн. 208 тыс. руб. Организовывать производство соответствующих видов продукции на предприятии Р1 оказывается экономически и экологически нецелесообразно. Лимитирующим признаком выступает ресурс выброса загрязняющих веществ в атмосферу. Значит, с учетом всех требований, зафиксированных в системе ограничений, установлено, что производить продукцию можно только на двух предприятиях в количестве не более 4,5 % от потребности. Таким образом, найдено, что спрос на рассматриваемые виды продукции в границах региона за счет внутренних ресурсов полностью удовлетворить нельзя. Импорт этих товаров извне неизбежен.

6. СИСТЕМНЫЕ ОБЪЕКТЫ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

6.1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ СИСТЕМНЫХ ОБЪЕКТОВ

Современная наука о сложных системах развивается в трех направлениях:

- создание концептуальных и методологических основ;
- формирование и формализация новых задач;
- разработка методов и алгоритмов решения.

Любое научное исследование связано с установлением зависимости *воздействие — результат*. Воздействие подается на вход объекта, *результат фиксируется на выходе*.

Классические точные науки занимаются разработкой моделей, которые выражают строгую однозначную зависимость между состоянием входа X и состоянием выхода Y , заданную при помощи переходной функции

$$Y = R(X), \quad (6.1)$$

где R — оператор преобразования.

Операция преобразования называется R -преобразованием. Раньше R -преобразование понималось только как однозначная детерминированная функция. Позднее R -преобразование получило вероятностное толкование. Соответственно стали говорить о детерминированных S_1 -системах и стохастических S_2 -системах и о детерминированном R_1 и стохастическом R_2 -преобразовании.

Функциональные (феноменологические) свойства модели характеризуются R -преобразованием, поэтому R -преобразование называется *функциональным описанием системы*.

R -преобразование может задаваться алгебраическим, логическим, дифференциальным, интегро-дифференциальным оператором; скалярным, векторным или матричным; составленным на основании измерения внешних характеристик или на основании знания устройства системы (*морфологического описания*).

Предположение об однозначности R -преобразования лежит в основе естественнонаучной концепции понятия систем и целенаправленной деятельности, которая всегда опирается на явный или скрытый детерминизм.

Точные науки занимаются исследованием и таких моделей, которые не содержат R -преобразования. Примером может служить инженерная экология, тесно связанная с изменчивостью свойств окружающей среды по климатическим и погодным условиям. Это модели хаотические, слабоорганизованные, слабоструктуризованные, неустойчивые, обычно недолговечные, в которых сталкивается множество независимых событий, не имеющих устойчивых распределений вероятностей, обладающих большим и нестабильным весом, изменяющимися параметрами, отображающие такой уровень знания систем, при котором невозможно составление устойчивых морфологического и функционального описаний.

Такие системы называются S_3 -системами. К количественному описанию S_3 -систем наука пришла через понятия организации, дезорганизации и энтропии.

Энтропия позволяет оценить не только уровень неупорядоченности, но и тенденцию ее изменения во времени. Применение энтропии к S_1 -, S_2 -системам дает количественное представление о степени детерминизма и характере стохастичности. Формульное выражение энтропии позволяет связать термодинамические процессы с понятием состояния системы и предсказанием его изменения:

$$E = \int_V \frac{dQ}{T} = -k \cdot \int_V p \cdot \log_2 p \cdot dp, \quad (6.2)$$

где E — энтропия; V — объем объекта в некотором функциональном пространстве; Q — тепло; T — абсолютная температура; p — вероятность состояния; k — постоянный коэффициент.

Науки, которые получили наименование наблюдательных и описательных, имеют дело с моделями, в которых входы и выходы труд-

ноопределимы, а установление устойчивых закономерностей — сравнительно редкая и большая удача. Уровень этих наук таков, что они располагают большей частью морфологическими данными об изучаемых системах, иногда эти данные сводятся только к классификации.

Приступая к изучению всякой новой системы, мы не знаем, с чем имеем дело. Поэтому описание всякой системы следует начинать с трех точек зрения: функциональной, морфологической, информационной, т. е. необходимо составить три описания.

6.1.1. Проблемы математического описания систем

Морфологическое, функциональное, информационное описания выражают принцип подхода к познанию системы.

В наибольшей степени морфологические свойства связаны с распределением вещества, функциональные — с преобразованием энергии, а информационные — с организацией.

Конечно, распределение вещества и энергетические преобразования взаимосвязаны и зависят от организации.

6.1.2. Функциональное описание системных объектов

Функциональное описание исходит из того, что всякая система выполняет некоторые функции — просто существует, служит областью обитания другой системы, обслуживает систему более высокого порядка, является контрольной для некоторого класса систем, служит средством или исходным материалом для создания более совершенной системы и т. д.

Система может быть однофункциональной или многофункциональной. В зависимости от степени воздействия на внешнюю среду и характера взаимодействия с другими системами функции можно распределить по возрастающим рангам примерно следующим образом:

- пассивное существование, материал для других систем;
- обслуживание системы более высокого порядка;
- противостояние другим системам, среде (выживание);
- поглощение (экспансия) других систем и среды;
- преобразование других систем и среды.

Во многом оценка функций системы зависит от точки зрения того, кто ее оценивает.

Функцию камня на дороге, канавы, дождя и ультрафиолетовой радиации по-разному воспринимают водитель автомобиля, турист, геофизик и командир стрелкового взвода, движущегося походной колонной.

Функциональное описание иерархично. Обычно функция системы выполняется, если параметры системы и процессы ограничены определенными пределами, вне которых система разрушается либо радикально меняет свои свойства.

Функционал, количественно или качественно описывающий деятельность системы, называют функционалом эффективности. Если функционал эффективности больше некоторого условного порога, то считается, что функция выполняется, если меньше, – не выполняется. Введение порога выражает позицию того, кто составляет описание. Несмотря на все бесконечное разнообразие возможных систем и функций, характер зависимости эффективности от произвольного параметра довольно типичен. Зависимость включает три характерные области: слабой и сильной связи и насыщения. В каждой из областей зависимость может быть регулярной или нерегулярной (скачки в неустойчивых системах). Обычно в пределах работоспособности системы и наложенных ограничений зависимости регулярны.

Существует область, где система подавляется средой, где она соревнуется с ней, и область, где система становится малочувствительной к внешним влияниям. Если функция системы состоит в сохранении своего состояния, например температуры, а внешне влияние включает приток тепла, то система противостоит этому влиянию при помощи теплопроводности и выравнивания температуры. В более общем виде идея противодействия любой системы внешнему влиянию выражена принципом Лешателье. В соответствии с правилом Лешателье поддержание стабилизирующего процесса требует некоторого уменьшения эффективности по сравнению с первоначальным состоянием.

Функциональное описание системы S_ϕ можно задать семеркой

$$S_\phi = \{T, x, C, Q, y, \phi, \eta\}, \quad (6.3)$$

где T — множество моментов времени; x — множество мгновенных значений входных воздействий; $C = \{c : T \rightarrow x\}$ — множеств допустимых входных воздействий; Q — множество состояний; y — множество значений выходных величин; $Y = \{u : T \rightarrow y\}$ — множество выходных величин; $\varphi = \{T \cdot T \cdot T \cdot c \rightarrow Q\}$ — переходная функция состояния; $\eta : T \cdot Q \rightarrow y$ — выходное отображение; c — отрезок входного воздействия; u — отрезок выходной величины.

Такое описание системы, весьма общее, охватывает широкий диапазон свойств. Функциональное описание должно отражать такие принципиальные характеристики сложных и слабо познанных систем, как параметры, процессы и иерархия.

Эффективность системы зависит от огромного количества внешних и внутренних факторов, представить эту зависимость в явной форме чрезвычайно сложно, а практическая ценность такого представления незначительна из-за многомерности и многосвязности.

Рациональный путь формирования функционального описания состоит в применении такой многоуровневой иерархии описаний, при которой описание более высокого уровня будет зависеть от обобщенных и факторизованных переменных низшего уровня. Иерархия создается поуровневой факторизацией процессов $\{F_i\}$ при помощи *обобщенных параметров* $\{Q_j\}$, являющихся функционалами $\{F_i\}$. Предполагается, что число параметров значительно меньше числа переменных, от которых зависят процессы.

Такой способ описания позволяет построить мост между свойствами взаимодействующих со средой элементами и эффективностью системы.

Системный подход к проблеме отсчета времени усложняется как из-за возможности релятивистских скоростей, так и потому, что однотипные вещественно-энергетические процессы могут протекать с различной скоростью. Для жизнедеятельности системы важно число циклов соответствующих процессов, а не лабораторное время.

Если предположить, что относительная скорость информационных процессов способна породить изменение относительного масштаба времени, то величину негэнтропии системы можно рассматривать как показатель этого изменения; чем больше негэнтропия, тем инерционнее система к внешнему воздействию.

6.1.3. Морфологическое описание системных объектов

Морфологическое описание должно дать представление о строении системы. Оно не может быть исчерпывающим, глубина описания, уровень детализации, т. е. выбор элементов, внутрь которых описание не проникает, определяются назначением описания. Морфологическое описание иерархично. Конкретизация морфологии дается на стольких уровнях, сколько их требуется для создания представления об основных свойствах системы. В иерархии описания может существовать такая ступень, где прежние описания, применявшиеся на более высоких ступенях, становятся непригодными и необходимо применить принципиально новый способ описания.

Изучение морфологии начинается с элементного состава. Под элементом в данном случае понимается подсистема, внутрь которой описание не проникает. Элементный состав может быть гомогенным (содержать однотипные элементы), гетерогенным (содержать *разнотипные элементы*) и *смешанным*.

Однотипность не означает полной идентичности и определяет только близость основных свойств. Гомогенности, как правило, сопутствуют избыточность и наличие скрытых возможностей, дополнительных, неиспользованных ресурсов. Гетерогенные элементы специализированы, они экономичны и могут быть эффективными в узком диапазоне внешних условий, но быстро теряют эффективность вне этого диапазона.

Важным признаком морфологии является назначение элементов.

Морфологические свойства системы существенно зависят от характера связей. Прежде всего необходимо выделить информационные, энергетические, вещественные связи, определив их в том смысле, в каком были определены информационные, энергетические, вещественные свойства. Энергетические связи предназначены для переноса энергии между элементами, а информационные — для переноса информации. Связи для передачи материала переносят вещество, но одновременно — энергию и информацию, так что характер связи определяется удельным весом соответствующего компонента. Возможны и смешанные связи.

Выделим прямые, обратные и нейтральные связи. Прямые связи предназначены для передачи вещества, энергии, информации или

комбинаций от одного элемента к другому в соответствии с последовательностью выполняемых функций. Качество связи определяется ее пропускной способностью и надежностью. Обратные связи в основном имеют функцию управления процессами. Наиболее распространены информационные обратные связи. Обратная связь предполагает некоторое преобразование компонента, поступающего по прямой связи, и передачу результата преобразования обратно, т. е. в направлении, противоположном функциональной последовательности к одному из предыдущих элементов системы.

Преобразование может быть тождественным или нетождественным. Системы, способные адаптироваться или целенаправленно влиять на окружающую среду, должны иметь обратные связи. Нейтральные связи не связаны с функциональной деятельностью системы, непредсказуемы или случайны. Вместе с тем нейтральные связи могут сыграть определенную роль при адаптации, служить исходным ресурсом для формирования прямых и обратных связей, резервом. В определенных условиях возможно преобразование связей (прямых в обратные или нейтральные и т. д.). Морфологическое описание может включать указание на наличие и виды связей, содержать общую характеристику связей либо их качественные и количественные данные.

Структурные свойства систем определяются характером и устойчивостью отношений между элементами. По характеру отношений между элементами структуры делятся на многосвязные, иерархические и смешанные. Пространственное расположение элементов и область пространственной локализации системы также описывается структурой. Наиболее устойчивы детерминированные структуры, такие, в которых отношения либо неизменны, либо изменяются по некоторому закону. Если отношения между элементами описываются вероятностными законами, структура называется вероятностной. Существуют также хаотические структуры, в которых элементы вступают в отношения непредсказуемым образом. Возможны смешанные структуры, в которых пределы и направления образования нестабильностей определены и ограничены заложенным в структуру детерминизмом. Свойства структуры зависят от действия внутренних сил, свойств элементов и связей.

Композиционные свойства систем определяются способом объединения элементов в подсистемы. Различаются подсистемы: эффекторные, рецепторные и рефлексивные, способные воспроизводить внутри себя процессы на информационном уровне, генерировать *информацию*.

6.1.4. Информационное описание системных объектов

Информационное описание должно давать представление об организации системы.

Организованность, упорядоченность системы — способность предопределять свою перспективу, свое будущее.

Таким образом, негентропию (меру организованности) можно понимать как потенциальную меру предсказуемости будущего системы, количественную характеристику возможности экстраполяции поведения системы. Информация об организации системы — это количественная характеристика возможности экстраполяции ее поведения на соответствующем уровне детализации системы. Потенциальная ошибка экстраполяции определяется энтропией системы. Информация об организации системы составляет часть ее внутренней информации.

Теория информации в ее современном виде занимается проблемами обработки и передачи информации с учетом избыточности, шумов, потерь и кодирования. Ценность информации рассматривается с позиций априорной цели, эффективности решения априорной задачи. Предполагается, что информация возникает или приобретает ценность посредством отбора. Всякую комбинацию частиц, веществ или умственных конструкций можно считать кодом «чего-то». Следовательно, все, что нас окружает, есть в каком-то смысле «информация». Однако далеко не вся подобная информация имеет одинаковое влияние на свойства окружающего мира.

Для любой системы ценность имеет то, что определяет дальнейшую судьбу системы — ее существование, поведение, развитие. Этот критерий можно применить и к информации: если закодировать расположение «элементов» системы и отделить ту часть кода, которая определяет перспективу системы, то ее можно назвать «полезной информацией» и оценивать полезность степенью влияния на перс-

пективу. Такой подход вытекает из единства энтропии и информации и не требует сторонней оценки и участия в ней надсистемы. Таким образом, информация выражает свойства организации. Особенно ценна та информация, которая, образовавшись в результате случайного взаимодействия или привнесенная извне, способна к самосохранению и самопрограммированию, т. е. увеличению влияния на перспективу системы.

Наивысшую ценность имеет та информация, которая делает любое событие «почти» достоверным при условии, что при отсутствии информации оно «почти» невозможно.

Отображающая информация — концептуальное понятие, ценность информации — конкретное понятие, относящееся к конкретной задаче.

Чтобы система действовала и взаимодействовала со средой, она должна потреблять информацию из среды и сообщать информацию *среде*. Этот процесс называется *информационным метаболизмом*, он совместно с вещественным и энергетическим метаболизмом образует полный метаболизм.

Передача информации требует энергии, перенос энергии также невозможен без информации; важно только отметить, что из них превалирует. Расход энергии в системах электрической связи ничтожен по сравнению с переносом энергии по линиям электропередачи, а количество информации, которое переносится силовыми потоками электронов, ничтожно по сравнению с тем, которое передается средствами связи.

Информационные элементы предназначены для приема, запоминания и преобразования информации. Это преобразование может состоять в изменении вида энергии, который несет информацию, в изменении способа кодирования информации, в сжатии информации сокращением избыточности и, наконец, принятии решений.

Следует различать обратимые и необратимые преобразования информации. Обратимыми называют преобразования, не связанные с потерей или созданием информации. Накопление информации (запоминание) является обратимым преобразованием в том случае, если не происходит потерь информации в течение времени хранения. Принятие решения связано с потерей информации.

6.1.5. Структура системных объектов

Структурой называется множество всех возможных отношений между подсистемами и элементами внутри системы. Формирование структуры предполагает декомпозицию системы, расчленение ее на подсистемы. Членение можно производить по различным признакам. Замена одной или нескольких подсистем структуры другими подсистемами не изменяет отношения между замененными подсистемами и остальными подсистемами системы. Следовательно, основным фактором формирования структуры является задание структурных отношений. Если структурные отношения и состав подсистем заданы, систему можно построить при помощи композиции (объединения).

Для осуществления композиции необходимо, чтобы уровень и подробность описания отношений и подсистем взаимно соответствовали. Аналогично для декомпозиции необходимо, чтобы способ членения и способ определения отношений взаимно соответствовали.

Взаимодействие подсистем может быть непосредственным и посредственным, при котором оно осуществляется через промежуточные подсистемы, участвующие во взаимодействии. По характеру метаболизма между подсистемами можно ввести упорядоченность. Для двух непосредственно взаимодействующих подсистем, одна из которых является выходной, а другая входной, первая называется предшествующей, вторая — следующей.

Отношение следования существует и при посредственном взаимодействии и может осуществляться по одной или нескольким компонентам метаболизма, причем по одной компоненте подсистема может быть предшествующей, а по другой — следующей. Отношения следования по всем трем компонентам метаболизма называются полным следованием Промежуточные и внешние подсистемы, выходные компоненты которых однозначно зависят от любых выходных компонент предшествующих подсистем, называются подчиненными, а предшествующие подсистемы — управляющими.

Существуют три класса структур, иерархические, неиерархические и смешанные. Для иерархических структур характерно наличие управляющих подсистем. В неиерархических структурах управляющие функции распределены между всеми элементами или группами эле-

ментов. Как правило, наличие иерархии является признаком высокого уровня организации, хотя могут существовать и неиерархические высокоорганизованные структуры. В функциональном отношении иерархические структуры более экономны. Избыточность структуры свидетельствует о нецелесообразном расходе ресурсов, расточительности, которая оправдана только в том случае, если целью являются дальнейшее развитие системы, ее морфологическая перспектива.

Для описания структур применяются графы. Важной особенностью структурного графа является число возможных путей, по которым можно пройти от одной вершины к другой. Чем больше таких путей, тем совершеннее структура, но тем она избыточнее. Избыточность обеспечивает надежность структуры.

Наличие петель означает нерациональное расходование ресурсов. Обследование большого числа структур различных систем показало, что наличие петель — не такое редкое явление, как может показаться на первый взгляд. Обычно петли могут изыматься из структуры без всякого ущерба для ее функциональных и информационных свойств, это наиболее безболезненное «сокращение штата». Множество подсистем, входящих в петлю, образует изолированную подсистему.

Иерархической называется структура, удовлетворяющая следующим условиям:

- каждая подсистема является либо управляющей, либо подчиненной, либо то и другое одновременно;
- существует, по крайней мере, одна только подчиненная подсистема;
- существует одна и только одна управляющая подсистема;
- любая подчиненная подсистема непосредственно взаимодействует с одной и только одной управляющей.

Обычно считается, что управляющая подсистема имеет две или более подчиненных. Иерархическую структуру, в которой имеется, по крайней мере, одна управляющая и одновременно подчиненная подсистема, называют многоуровневой.

Для многоуровневых иерархических структур справедливы следующие положения:

- подсистема более высокого уровня имеет дело с более широкими аспектами поведения системы в целом;

- время преобразования входных компонент метаболизма в выходные увеличивается с увеличением уровня управляющей подсистемы;
- подсистемы более высоких уровней иерархической структуры имеют дело с более медленными аспектами поведения системы;
- с повышением уровня подсистем увеличивается удельный вес информационной компоненты метаболизма и ее роль в функциональной деятельности системы.

Неиерархические структуры являются производными от много-связной структуры, в которой каждая подсистема непосредственно взаимодействует с любой другой. Неиерархическими называются структуры, удовлетворяющие следующим условиям:

- существует, по крайней мере, одна подсистема, которая не является ни управляющей, ни подчиненной;
- не существует подсистемы, которая является только управляющей; не существует подсистемы, которая является только подчиненной;
- любая подчиненная подсистема непосредственно взаимодействует более чем с одной управляющей.

Важная особенность неиерархической структуры состоит в том, что в ней нет подсистем, принимающих независимые от других подсистем решения. Кроме того, неиерархическая структура обычно обладает следующими свойствами:

- любая подсистема может влиять на все аспекты поведения системы;
- время преобразования входных компонент метаболизма в выходные слабо зависит от положения подсистемы в структуре;
- функции подсистем более конформны и легче изменяются в процессе взаимодействия.

Рассмотрение степени влияния подсистем на другие подсистемы в неиерархической структуре приводит к важному понятию лидерства.

Лидирующей называется подсистема, удовлетворяющая следующим требованиям:

- подсистема не имеет детерминированного взаимодействия ни с одной подсистемой;
- подсистема является управляющей по отношению к части подсистем;
- подсистема либо не является управляемой (подчиненной), либо управляется наименьшим числом подсистем.

Смешанные структуры представляют собой различные комбинации иерархических и неиерархических структур. Стабильность структуры характеризуется временем ее изменения. Структура может изменяться без преобразования класса или преобразованием одного класса в другой. В частности, возникновение лидера в неиерархической структуре может привести к преобразованию ее в иерархическую, а возникновение лидера в иерархической структуре – к установлению ограничивающей, а затем детерминированной связи между лидирующей подсистемой и подсистемой высшего уровня, в результате чего подсистема высшего уровня заменяется лидирующей подсистемой, либо объединяется с ней, либо иерархическая структура преобразуется в смешанную.

Равновесными называются неиерархические структуры без лидеров. Чаще всего равновесными бывают многосвязные структуры. Равновесность не означает покомпонентной идентичности метаболизма, речь идет только о степени влияния на принятие решений.

Понятие структуры включает также конфигурацию, которая описывает общие геометрические свойства системы.

6.1.5.1. Организация структуры системных объектов. Проблема исследования организации состоит в выявлении и описании эффективных механизмов формирования обратных связей и тезауруса, разработки такой методики формирования схемы обратных связей, при которой получается требуемая реакция при заданном воздействии. При определенном размере тезауруса реакция перестает быть функцией только воздействия, система приобретает принципиально новое качество — выбор поведения.

6.1.5.2. Связи в системных объектах. Структура реализуется при помощи связей. Связями называются подсистемы (элементы), осуществляющие непосредственное взаимодействие между другими подсистемами (элементами) и не принимающие решений. Связи переносят компоненты метаболизма из одной пространственной области в другую, при этом возможны некоторые преобразования этих компонент. Связи подразделяются на прямые и обратные.

Прямые связи подразделяются на следующие подклассы:

- усиливающие (ослабляющие);
- ограничивающие;
- запаздывающие;

- селектирующие;
- преобразующие.

Частным случаем преобразующих связей являются шумящие, среди которых важное значение имеют аддитивные и мультипликативные. При наличии прямого контакта между взаимодействующими подсистемами взаимодействие может осуществляться без подсистемы связи.

Применяются различные формальные описания связей. В частности, предлагается следующая модель связей, содержащая:

- модель сети связей;
- модель согласования сигналов между передающими и принимающими элементами;
- модель преобразования сигнала в канале;
- модель поведения элемента под воздействием сигнала.

Открытие принципа обратной связи явилось выдающимся в развитии техники и имело исключительно важные последствия. Процессы управления, адаптации и самоорганизации самым непосредственным образом связаны с применением обратной связи, без нее немислимо существование живых систем. Только сейчас мы начинаем постигать истинную роль обратных связей в технике, биологических процессах и обществе. Обратная связь является динамическим фактором.

Прежде всего необходимо отметить положительную и отрицательную обратные связи. Положительная обратная связь усиливает исходный процесс, отрицательная — ослабляет. В технике положительная обратная связь широко применяется для повышения чувствительности приборов, создания устойчивых колебательных процессов, поддержания какого-то процесса на заданном уровне.

Положительная обратная связь может играть как организующую, так и дезорганизующую роль. Появление положительной обратной связи между случайными процессами создает ситуацию, при которой часть процессов будет стимулироваться. В результате может самопроизвольно возникнуть эффективная организация. С другой стороны, возникновение обратной связи в хорошо организованных системах может привести к противоположному результату. Начиная от невинных и малозначительных событий, таких, как лавинообразное распространение моды в обществе, и кончая развитием необуздан-

ных экстремистских социальных тенденций крайне отрицательного характера, везде в какой-либо форме в значительной мере проявилась положительная обратная связь.

Если положительную обратную связь можно назвать стимулирующим фактором, то отрицательная обратная связь является регулирующим фактором. Отрицательная обратная связь тормозит исходный процесс, не дает ему чрезмерно нарастать, но ослабляет свое действие, как только основной процесс спадает. В результате основной процесс поддерживается в каких-то пределах. В технике отрицательная обратная связь применяется очень широко, а в автоматизированных системах управления это, вероятно, основной рабочий фактор.

Совместное действие положительной и отрицательной обратной связи может оказать сильное формирующее влияние на процессы для поддержания их уровня при случайных внешних воздействиях. Такие схемы могут оказывать как стимулирующее, так и тормозящее действие, они способны быстро ликвидировать возникающие флуктуации, поэтому часто применяются в технике, в частности в электронике, химической технологии, автоматике.

Положительные и отрицательные обратные связи могут быть гладкими и пороговыми. Гладкие обратные связи действуют во всем диапазоне изменения выходного процесса. Пороговая обратная связь действует, когда процесс превышает некоторое значение или не достигает допустимого значения. Пока процесс не достиг нижнего порога (или не превысил верхний), обратной связи как бы не существует. Возможна двухпороговая схема, когда обратная связь действует в пределах нахождения выходного процесса между нижним и верхним порогами и не действует за пределами порогов.

Следующая группа обратных связей отличается по времени воздействия. Обратные связи могут быть запаздывающими, опережающими и мгновенными. Все эти виды обратных связей используются в технике, биологии, общественных отношениях.

Динамика действия запаздывающих обратных связей разнообразна и может приводить к неожиданным последствиям. В частности, они могут вызвать периодические процессы или оказать тормозящее действие. Смысл опережающей обратной связи состоит в прогностическом влиянии. Расхождение между реальным процессом и прогнозом вызывает отклонение, которое может привести к дестабилизации

системы. Одним из примеров опережающей обратной связи является контроль и планирование производственных процессов. Анализ хода производства выявляет прогрессивные тенденции, которые в будущем могут дать положительный эффект. Обратная связь состоит в устранении вероятных препятствий. Бюрократизм, рутинность, консерватизм могут сыграть роль опережающей отрицательной обратной связи. В других вопросах консерватизм, действующий как отрицательная опережающая обратная связь, может сыграть положительную роль, например, при необоснованных структурных изменениях.

От способности прогнозирования зависит организация опережающих действий, которые парализуют или ослабляют не только принятые и частично реализованные решения, но и те, которые будут приняты в дальнейшем, исходя из складывающейся ситуации.

Мгновенные обратные связи действуют без запаздывания и без опережения. Термин «мгновенные» применяется условно и означает, что величина смещения во времени не имеет практического значения. Для реализации мгновенной обратной связи необходимо, чтобы время выявления изменений процесса было пренебрежимо мало. Обычно такие схемы применяются там, где нужно реагировать на быстрые флуктуации.

Большой интерес представляет исследование и использование комплекса запаздывающих, опережающих и мгновенных обратных связей, реагирующих на различные свойства процесса для стимулирования одних подпроцессов и подавления других. Совместное действие такого комплекса дает широкий диапазон возможностей для организации действий технических устройств, живых организмов и социальных систем.

Замечательное свойство обратных связей состоит в том, что они позволяют формировать повторяющиеся (циркулирующие) процессы, создавать непрерывные процессы, имитировать определенные свойства внешних по отношению к системе процессов, моделировать реакции, воздействия, процессы, явления.

Обратные связи дают возможность синтезировать процессы. Эта возможность лежит в основе отображения среды в системе и самоотображения и является фундаментальной для организации.

Путем объединения в единую систему нескольких обратных связей можно сформировать следующие функции:

- усиление (ослабление) процессов;
- стабилизация процессов;
- задержку процесса на постоянное (или зависящее от каких-то характеристик процесса) время;
- запоминание процесса;
- воспроизведение и многократное повторение процесса;
- преобразование процесса;
- анализ — выделение подпроцессов;
- синтез — объединение подпроцессов;
- сравнение процессов и запоминание различающего подпроцесса;
- распознавание процессов.

Принятие решений основано на комбинации перечисленных функций.

6.1.6. Классификация систем

6.1.6.1. Физические системы. Существует три различных способа описания процессов в макросистемах.

Во-первых, можно использовать уравнения движения микрокомпонент системы. В уравнениях движения компонент должно содержаться полное описание системы. Уравнения такого типа обратимы.

Во-вторых, можно использовать обычные феноменологические макросоотношения типа уравнений классической гидродинамики, электропроводности или уравнений Максвелла.

Третий способ описания использует уравнения переноса или кинетические уравнения, например, уравнение Больцмана для классического разреженного газа и квантовомеханическое основное кинетическое уравнение Паули. Эти уравнения описывают систему в динамических переменных и инвариантны относительно обращения времени.

Кинетические уравнения «предсказывают стремление» неравновесной системы к равновесному состоянию при весьма общих начальных условиях. Лишь в простейших случаях можно описать процесс установления равновесия в системе. И нет уверенности, что этот процесс, особенно в более сложных случаях, является единственно возможным. Описание конечного состояния равновесия не включа-

ет время в качестве аргумента, т. е. конечное состояние не зависит от времени; это положение соответствует идее необратимости.

Уравнения переноса отражают тот элементарный факт, что при взаимодействии двух микроэлементов системы результат качественно не зависит от количественных значений переменных и повторение взаимодействия ничего не меняет, поскольку микроэлементы остаются самими собой. Когда же речь идет о взаимодействии ансамблей, больших групп микроэлементов, то этого сказать нельзя. В результате взаимодействия может измениться состав групп, свойства групп, и если каждую группу рассматривать как подсистему, то происходит качественное изменение: изменяется элементный состав системы.

Изменение макроэлементного состава вероятно в условиях неравновесности. Эти соображения вплотную приводят к идее связи теории неравновесных состояний с эргодической теорией. Эргодическая теория показывает, что для замкнутой системы среднее значение некоторой физической величины по времени равно ее среднему значению по ансамблю микроэлементов. Если удастся при помощи уравнений переноса описать поведение неравновесной системы во времени, то можно найти значение физической величины при достижении равновесия. Равенство полученной величины среднему по ансамблю доказывает эргодичность процесса для данного частного случая. Свойство эргодичности позволяет легче понять назначение усреднения. В процессе усреднения «поглощаются» малые вероятности и явно выражается основная тенденция, соответствующая функциональному описанию системы.

6.1.6.2. Технические системы. Технические системы обычно можно рассчитывать на основании эмпирических зависимостей. Однако ряд процессов, особенно в новых конструкциях, нельзя рассчитывать на основании опытных данных, а идеализированная теория не всегда справляется с конкретными трудностями.

Технические системы совершенствуются в двух направлениях: повышение КПД в преобразованиях энергии и увеличение универсальности, т. е. расширение области применения. Оба направления взаимосвязаны и стимулируют друг друга.

Самым простым путем получения целенаправленного движения тепла или химической реакции явилось централизованное преобразование первичной энергии в электрическую, доставка ее на место

потребления и повторное преобразование в требуемый вид энергии в нужном количестве. Универсальность получалась максимальной и КПД мог быть высоким, если первичное преобразование осуществлялось с малыми потерями энергии. Паровой двигатель оказался неперспективным, двигатель внутреннего сгорания ограниченным по мощности, а турбина стала играть ведущую роль. В дальнейшем область применения турбины расширилась, следовательно, повысилась универсализация.

Оптимизацию технических систем можно проводить программными регуляторами, связывающими входные датчики и некоторые переменные величины, которые зависят от входных и выходных сигналов. Регуляторы, выбрав соответствующий входной сигнал, должны обеспечить оптимальный режим. Более совершенный метод состоит в применении обратной связи, что дает возможность автоматизировать выбор оптимального режима. Выходной сигнал системы преобразуется, формирует управляющий сигнал и, воздействуя на вход, настраивает систему на оптимальный режим. Автоматическая оптимизация применяется в подклассах технических систем более высокого уровня. Автомат оптимизации является замкнутой системой.

Управляемых входов может быть несколько, однако принципиальным условием является детерминированность входов, а практическим условием реализации — небольшое их число. Основной особенностью автомата оптимизации является то, что он использует модель для определения зависимости между входом и выходом и не требует знания ни формы связи между входом и выходом, ни количественных данных. Обязательным условием является наличие характеристики с экстремумом, который должен найти автомат.

К модели прикладывается переменный поисковый сигнал, изменяющий состояние входа в пределах поисковой зоны. Поисковый сигнал управляется от выхода. Ширина поисковой зоны должна быть такой, чтобы искомый экстремум оказался внутри нее. Однако чем шире поисковая зона, тем больше уровень помех. В результате воздействия помех возможно отклонение от оптимума или неустойчивость в работе модели. Помехоустойчивость модели — одна из проблем автоматической оптимизации.

Морфологическое описание при помощи логических символов имеет определенное преимущество в обозримости, однако уступает

описанию при помощи уравнений в оперативности. Следует отметить, что функциональная оптимизация не всегда влечет за собой улучшение информационных свойств: повышению эффективности может сопутствовать увеличение скорости нарастания энтропии (система быстрее изнашивается).

В простых технических системах наиболее явно заметны единство морфологического и функционального описаний и их взаимная связь.

6.1.6.3. Кибернетические системы. Характерное свойство кибернетических систем — большое число устойчивых состояний и способность самостоятельно приходить к устойчивому состоянию при нарушении равновесия (гомеостат). Поэтому в качестве первого примера рассмотрим гомеостат Эшби.

Гомеостат положил начало возникновению ряда идей кибернетики. Гомеостат способен сам искать условие равновесия, и имеет неограниченную изменчивость, очень большое число устойчивых состояний, из которых он легко может выйти под влиянием изменения параметров любого элемента. Гомеостат представляет собой модель самоорганизующейся системы, целью которой является самоорганизация.

Второй пример — автомат фон Неймана, построенный из простых автоматов. Наряду с гомеостатом эта модель является одной из основных частей кибернетических систем.

Фон Нейман использовал основные элементы для синтеза надежных систем из ненадежных компонент. Из этих же элементов можно построить обучающиеся системы и системы, программирующие программы. Ненадежная система быстро повышает свою энтропию из-за выхода из строя элементов. Создание структуры с высокой надежностью означает уменьшение скорости нарастания энтропии посредством организации. Повышение организации равносильно увеличению тезауруса. Замечание относительно ограниченной памяти нетривиально. Оно определяет практические пределы применимости системы, если основные элементы заданы конкретными конструкциями.

При функциональном описании некоторых кибернетических систем можно использовать булеву алгебру, хотя она не охватывает всех функций, получаемых в обычной алгебре. Кроме того, при большом количестве операций накапливаются ошибки и образуются шумы, следовательно, увеличивается энтропия.

6.2. СИСТЕМНЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Технология утилизации волокнистых отходов базируется на технологии бумаги и картона и обладает всеми признаками самого сложного типа моделируемых систем.

Во-первых, она состоит не из однотипных процессов и поэтому не обладает свойством аддитивности (в отличие, допустим, от набора одинаковых ткацких станков).

Во-вторых, в системе присутствуют рециклы и байпасы, делающие зависимой работу каждого элемента от функционирования всех остальных. Следовательно, по структуре она должна быть отнесена к классу когерентных систем, обязывающему при изучении рассматривать все явления в их диалектической противоречивости, взаимосвязанности, цельности и единстве.

В-третьих, работа системы имеет ярко выраженный динамический характер, в ее материальных потоках способны в процессе эксплуатации накапливаться такие компоненты и загрязнения, которые влияют на протекание принципиально важных процессов основной технологической линии. Накопление этих веществ в потоках приводит к необходимости закладывать в разрабатываемую модель принципы самообучения или самонастройки.

Важнейшее значение имеет выбор оптимальной технологической структуры для моделирования технологии. Вследствие большой размерности решаемой задачи не имеет смысла класть в основу модели подробную технологическую схему. Путем агрегирования переменных, для того чтобы избежать анализа всех возможных исходов, при синтезе оптимальной схемы чаще всего применяют эвристический метод и используют предшествующий технологический опыт, получая в результате упрощенную блок-схему моделируемого процесса, которая сохраняет все принципиальные особенности функционирования реального объекта, выделяет главные свойства системы и затушевывает второстепенные.

В основу системной математической модели технологии бумаги и картона целесообразно положить мультипликативный принцип расчета многокомпонентных материальных балансов технологической системы через любые наперед заданные промежутки времени, например через отрезок времени, равный времени выработки одной тонны продукции.

Связь состава потоков с режимными параметрами осуществляет комплекс полиномиальных моделей, описывающих зависимость степени удержания каждого компонента бумажной массы в структуре бумажного полотна при отливе от степени помола, композиции, содержания сульфата алюминия в массе до введения в нее проклеивающих веществ и т. п.

Зависимость свойств готовой продукции от состава материальных потоков описывает второй комплекс полиномиальных моделей. Таким образом, в одной системной математической модели объединяются расходные и режимные управляющие параметры с качеством готовой продукции в условиях, имитирующих динамические. Имеется возможность получить количественную информацию о содержании любого компонента в любом материальном потоке через любой промежуток времени с момента запуска бумагоделательной машины одновременно с информацией о качестве вырабатываемой продукции в этот же момент времени.

Поскольку сам факт накопления вредных загрязнений во времени, например сульфата алюминия в оборотной воде, оказывает влияние на протекание технологического процесса коагуляции упрочняющей добавки в волокнистой массе, то, очевидно, возникает необходимость в постоянной оптимальной подстройке системы управления. Поэтому в алгоритм целесообразно ввести оптимизирующий блок, в котором поступающая информация обрабатывалась бы и в случае рассогласования фактической ситуации с заданными условиями решалась компромиссная задача оптимизации с выдачей необходимых управляющих импульсов на исполнительные механизмы и с учетом величины выбранного критерия, например минимальной суммы энерготехнологических затрат.

Мультипликативный принцип формализации работы системы в динамике удобно продемонстрировать на диаграммном фрагменте технологической схемы рис. 134.

Потоки № 2, 4, 5 являются составными частями главного контура циркуляции оборотных вод.

Для функционирования фрагмента технологической системы в номинальном режиме необходимо, прежде всего, обеспечить равномерное растекание волокнистой массы по всей ширине движущейся непрерывной сетки. Это требование выполняется только в том случае,

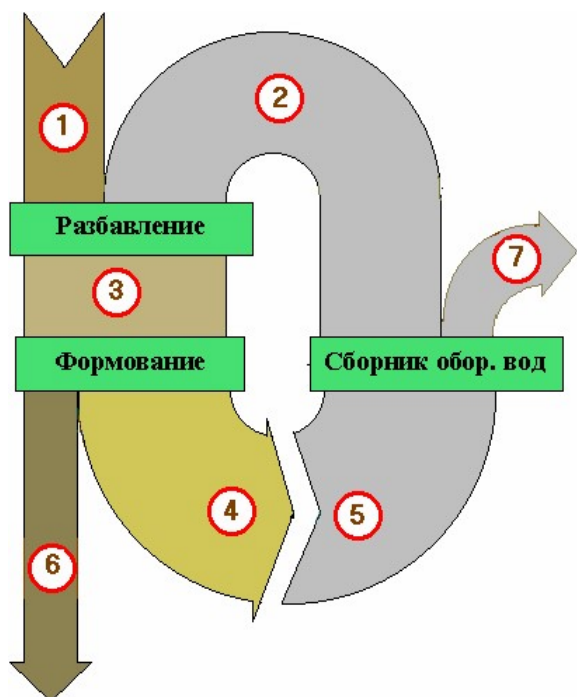


Рис. 134. Фрагмент технологической системы с обратной связью

когда масса, выпускаемая на сетку (поток № 3), достаточно сильно разбавлена. Разбавление осуществляется водой (поток № 2). При запуске машины сборник регистровых вод пуст, поэтому проблема может быть решена единственным путем — использованием для разбавления свежей речной воды. Значит, на первом такте расчета поток № 5 — это свежая речная вода с известной характерной для данной реки концентрацией электролитов Na_2SO_4 и $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$. Как только машина запущена в рабо-

ту, в регистровой части освобождается большое количество избыточной воды (поток № 4), которая собирается в сборнике регистровых вод, т. е. поток № 5 заменяется потоком № 4. Надобность в свежей речной воде отпадает, и она перекрывается на все последующее время работы машины. Но качество оборотной воды потока № 5 отличается от качества свежей речной воды. В регистровой воде оказываются мелкие волокна и частицы полимерной упрочняющей добавки. Зная механизм удержания волокна, каучука и электролитов в структуре бумаги, можно рассчитать содержание этих компонентов в потоке № 4, а затем на каждом последующем такте расчета материального баланса значения покомпонентных концентраций потока № 4 переписывать покомпонентным концентрациям потока № 5, обеспечивая таким образом описание поведения химико-технологической системы в условиях псевдодинамики.

Таким образом, один водооборот будет совпадать с временем выработки того количества продукции, которое получится после расчета всей схемы на накате бумагоделательной машины при заданном расходе волокнистых полуфабрикатов. Корректируя на каждом цик-

ле величину расхода целлюлозы по простой пропорции, имеем возможность подстраивать систему таким образом, чтобы она на выходе давала значения, близкие к 1000 кг.

Поэтому масштабной единицей времени будет выступать время выработки одной тонны продукции. Эта величина будет осуществлять связь с реальным масштабом времени с учетом ширины бумагоделательной машины, ее скорости и массы одного квадратного метра бумаги или элементарного слоя картона.

Полезно обратить внимание на то, что в подсистему поток № 1 входит с меньшей концентрацией, чем поток № 6, выходящий из системы. Поэтому в системе образуется избыток жидкости, который должен быть удален с потоком № 7.

Для формализации процедуры расчета материальных балансов в динамике и лаконичности изложения учебного материала все технологические потоки предлагается закодировать в виде двумерного массива с именем Q . Первой координате (вектор строкам) поставить в соответствие номера материальных потоков, под которыми они выступают в технологической схеме, второй координате — цифровые индексы компонентов в этих потоков.

Если мерой времени выбрать число тактов расчета или число мультипликационных «кадрик» мгновенного материального баланса системы, то, пользуясь известными закономерностями формальной кинетики, можно записать выражение для определения константы скорости изменения концентрации регистровой воды на основании данных измерений разности ее значений через заданное число «кадрик».

Таким образом, объектами движения в описываемых условиях псевдинамики являются компоненты материальных потоков, значение их концентраций, степени помола целлюлозы в бумажной массе, поступающей на отлив, и в оборотной воде, а также разрывная длина вырабатываемой бумаги, сопротивление ее излому и влагопрочность. Источником движения служит информация о механизме удержания компонентов материальных потоков в структуре бумажного полотна, на основании чего можно рассчитать концентрацию предшествующей части разорванного потока и переприсвоить это значение последующей его части при организации расчета очередного «кадрика».

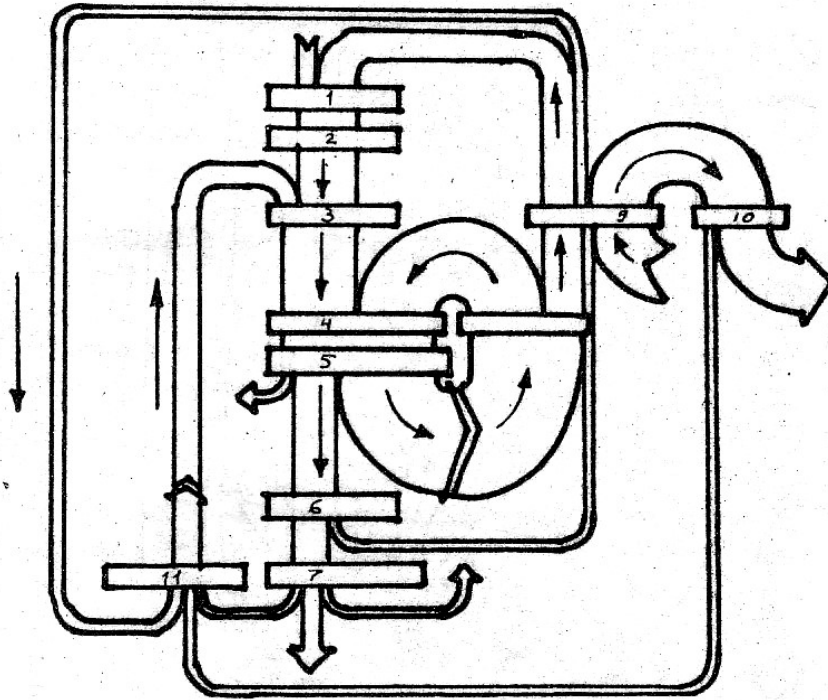


Рис. 135. Диаграмма материальных потоков

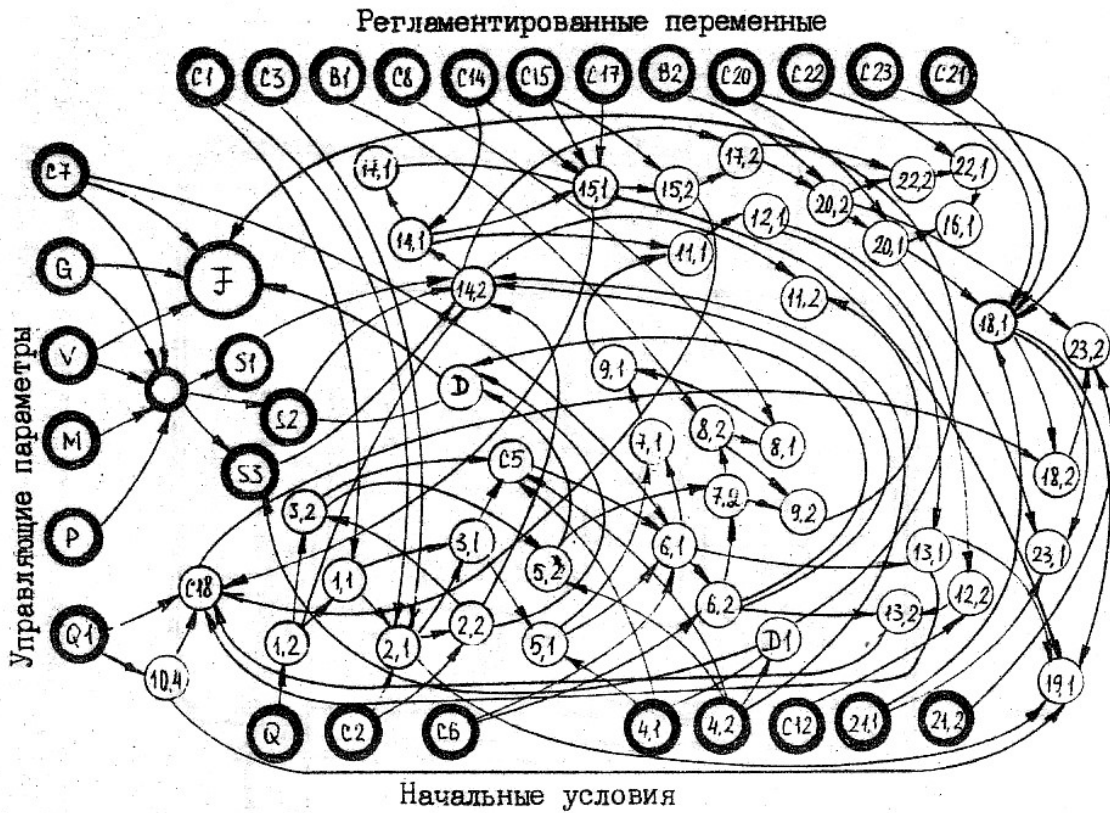


Рис. 136. Информационно-поточный мультиграф технологической системы утилизации волокнистых отходов

Центральной частью математического обеспечения компьютерных тренажеров является многократный расчет материальных балансов по специально организованной циклической программе. В отличие от традиционного приема вычисления технологических потоков с конца, с известного значения товарной продукции, настоящей методикой предлагается естественная последовательность расчета материальных балансов с начала, следуя от операции к операции, превращающей сырье в готовую продукцию.

Описанная идея иллюстрируется более сложным примером. Расчет по аналогичной методике позволяет получить и проанализировать диаграмму материальных потоков (рис. 135) и информационно-поточковый мультиграф (рис. 136), который является системной математической моделью технологической системы утилизации волокнистых отходов.

Рис. 136 позволяет наглядно представить взаимосвязь и единство расходных, режимных, регламентированных, управляющих проектных переменных и случайных воздействий с качеством готовой продукции, экономикой и экологией. Изображенный на рис. 136 граф можно представить как электрическую модель системы и закомутировать ее на аналоговой ЭВМ, причем управляющие параметры «под отвертку» позволяют получать на осциллографе изменения состояния объекта или отдельных его элементов в любой момент времени.

6.2. ОПЕРАТИВНОЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ ПРОИЗВОДСТВЕННЫМ КОМПЛЕКСОМ НА ПРИМЕРЕ ИМИТАЦИОННОЙ СИСТЕМНОЙ МОДЕЛИ УТИЛИЗАЦИИ ВОЛОКНИСТЫХ ОТХОДОВ. ЭКОЛОГО-ЭКОНОМИЧЕСКАЯ ДЕЛОВАЯ ИГРА «ECOGAME»

6.2.1. Назначение и функциональные возможности программного модуля

Модуль предназначен для организации и проведения эколого-экономической деловой игры путем имитирования оперативного технологического управления производственным комплексом с выводом на экран монитора текущих значений качества продукции, экономических показателей и уровня загрязнения окружающей среды. Может быть полезен для студентов старших курсов втузов, изучающих

промышленную экологию, химическую технологию, конкретную экономику, менеджмент и маркетинг, техническую кибернетику, организацию и управление производством.

Возможности программного средства обусловлены следующим:

- математический аппарат, программная реализация модели и интерактивная оболочка позволяют имитировать в динамике функционирование промышленного объекта и производить вычислительные эксперименты;

- программный продукт способен выступать в качестве имитационной модели комплекса, автономно и объективно, в режиме реального времени, реагировать на текущие управляющие воздействия, сделанные пользователем, а также на естественное «покачивание» параметров, происходящее за счет случайных изменений погодных условий, солевого состава речной воды, ветрового режима и накопления загрязнений в рециркулирующих потоках;

- программа позволяет генерировать, формализовать и моделировать технические, экономические и экологические аспекты проблемы, возникающие в процессе функционирования промышленного комплекса, осуществлять выбор вариантов их решения, учитывать возможные последствия реализации, выводить несостоятельные альтернативы, проверять допустимость и целесообразность принятых решений путем организации вычислительных экспериментов;

- программа позволяет изменять условия работы в виде директивных предписаний, ценовой и правовой политики и осуществлять технологическое управление в шести режимах: от ручного управления с пульта до оперативного оптимального — с помощью «встроенной» управляющей ЭВМ.

Возможности программного модуля позволяют автоматически выводить на экран монитора в режиме реального времени текущие значения следующих показателей:

- качества продукции;
- параметров технологического режима, связанных со случайными возмущающими воздействиями, оказывающими влияние на систему в текущий момент;
- экономических показателей, связанных с изменениями обстановки в рассматриваемый момент времени;
- содержания всех компонентов в каждом материальном потоке;

- приземных концентраций загрязняющих веществ и ПДВ от каждого источника загрязнения и расстояния, на которых они достигаются;
- текущие оценки качества проточного водоема, принимающего сточные воды по лимитирующим признакам.

6.2.2. Перечень и назначение файлов программного пакета

<i>EcoGame.exe</i>	Главный исполняемый файл
<i>PDS.dat</i>	Файл данных для расчета ПДС
<i>PDV.dat</i>	Файл данных для расчета ПДВ
<i>R6.2.dat</i>	Файл коэффициентов модели качества продукции
<i>R2.dat</i>	Файл коэффициентов модели качества продукции
<i>R3.dat</i>	Файл коэффициентов модели качества продукции
<i>Trymod.dat</i>	Файл начальных условий функционирования комплекса
<i>Factors.hlp</i>	Файл помощи по описанию факторов технологического процесса
<i>Law.hlp</i>	Файл помощи по юридическому обеспечению тренажера
<i>Misc.hlp</i>	Файл помощи по вводным понятиям тренажера
<i>Rules.hlp</i>	Файл помощи по правилам пользования
<i>Stages.hlp</i>	Файл помощи по описанию стадий технологического процесса
<i>Streams.hlp</i>	Файл помощи по описанию технологических потоков

6.2.3. Базовые теоретические положения

В основу функционирования тренажера положен территориальный промышленный комплекс утилизации волокнистых отходов типа макулатуры. В качестве основного вида продукции, изготовленной из утилизируемой макулатуры, предложено выбрать обойную бумагу. Такой выбор хорош тем, что выводит макулатуру из многократного повторного использования.

Проблемная ситуация связана с необходимостью упрочнения утилизированных материалов из макулатуры, поскольку волокна, уже однажды прошедшие размол, отлив и сушку, отбухли, ороговели и в значительной степени утратили свои бумагообразующие свойства.

Требуемый комплекс свойств бумаге может обеспечить применение полимерных связующих.

Смысловым ядром программного средства является системная математическая модель, объединяющая режимные и расходные факторы с качеством готовой продукции, экономикой и экологией.

Технология, положенная в основу программного модуля, обладает всеми признаками самого сложного типа моделируемых систем. Во-первых, она состоит не из однотипных процессов, и поэтому не обладает свойством аддитивности (в отличие, допустим, от набора одинаковых ткацких станков). Во-вторых, в системе присутствуют рециклы и байпасы, делающие зависимой работу каждого элемента от функционирования всех остальных. Следовательно, по структуре она должна быть отнесена к классу когерентных систем, обязывающему при изучении рассматривать все явления в их диалектической противоречивости, взаимосвязанности, цельности и единстве. В-третьих, работа системы имеет ярко выраженный динамический характер, в ее материальных потоках способны в процессе эксплуатации накапливаться такие компоненты и загрязнения, которые влияют на протекание принципиально важных процессов основной технологической линии. Накопление этих веществ в потоках приводит к необходимости закладывать в разрабатываемую модель принципы самообучения или самонастройки.

Упрочнение волокнистого композиционного материала целесообразно осуществлять с помощью водных дисперсий бутадиен-стирольных полимеров (каучуковых латексов).

В микрогетерогенной водной коллоидной системе взаимодействуют разнородные, разновеликие и разнопотенциальные микроскопические частицы волокон и каучуковых глобул. Эти частицы имеют одноименный электроотрицательный статический заряд, поэтому они не слипаются при контактах и требуют введения внешнего электролитного коагулянта, роль которого чаще всего выполняет сульфат алюминия $Al_2(SO_4)_3$. При этом в результате взаимодействия гидродисперсии полимера с электролитом частицы осадка каучука получают очень крупными (преимущественной формой коагуляции является гомокоагуляция — процесс слипания однородных мелкодисперсных частиц). В то время как целесообразной формой коагуляции латекса в водно-волокнистой суспензии является гетероадагуляция (процесс слипания разнородных разновеликих частиц или процесс налипания мелких частиц ка-

учука на макроповерхность волокон). Крупные частицы осадка раздвигают волокна, разрыхляют структуру листового материала и ослабляют межволоконные связи, тогда как фиксация мелкодисперсных частиц упрочняющих добавок на поверхности волокон заменяет жесткие связи волокно — волокно на пластичные волокно — полимер — волокно. В результате получается продукция, выдерживающая большое число двойных перегибов (высокое сопротивление излому), обладающая значительной влагопрочностью и повышенным сопротивлением истиранию.

Надо также обратить внимание на то, что при обеспечении гетероадагуляции для достижения высокого качества листовых материалов требуемые расходы упрочняющих полимеров оказываются значительно меньшими, чем при гомокоагуляции. При этом фиксация полимера на волокнах предотвращает попадание химических веществ в сточные воды и снижает загрязнение окружающей среды.

Главным условием обеспечения гетероадагуляции следует считать предельное, достаточно малое содержание электролитов в волокнистой суспензии до введения в нее упрочняющих добавок. Это условие трудно выполнить в реальных производственных условиях, поскольку добавляемый для коагуляции сульфат алюминия накапливается в рециркулирующих потоках оборотной воды и ухудшает характеристики всей технологии.

Соблюдение требований обеспечения высокого качества продукции, приемлемых экономических показателей технологии и допустимого уровня загрязнения окружающей среды наталкивается на совершенно естественные противоречия.

С одной стороны, необходимо максимально использовать оборотную воду для уменьшения объема стоков, но это приведет к удорожанию продукции за счет увеличения расхода упрочняющей полимерной добавки, так как в оборотной воде будет накапливаться содержание сульфата алюминия, вредно влияющее на характер коагуляции латекса.

С другой стороны, если оборотную и сточную воду подвергнуть глубокой очистке, например термической деминерализации, то экологические и технологические требования будут удовлетворены. Качество продукции будет достигаться меньшими расходами гидродисперсии полимера и сточные воды не будут вредно влиять на экологию водоема, но финансовые затраты на деминерализацию приведут к банкротству предприятия по экономическим причинам.

Таким образом, для оптимального оперативного технологического управления необходимо решать компромиссную задачу оптимизации, результатом которой должны быть найдены такие значения управляющих воздействий, которые обеспечивают получение продукции заданного качества при допустимом уровне загрязнения окружающей среды и минимизируют функцию цели, стоимость энерго-технологических затрат или максимизируют прибыль от реализации продукции.

В основу системной математической модели положен мультипликативный принцип расчета многокомпонентных материальных балансов технологической системы через любые наперед заданные промежутки времени, например через отрезок времени, равный времени выработки одной тонны продукции. Связь состава потоков с режимными параметрами осуществляет комплекс полиномиальных моделей, описывающих зависимости степени удержания каждого компонента в структуре полотна от степени помола, композиции, содержания сульфата алюминия в массе до введения в нее проклеивающих веществ и т. п.

Зависимость свойств готовой продукции от состава материальных потоков описывает второй комплекс полиномиальных моделей. Таким образом, в одной системной математической модели объединяются расходные и режимные управляющие параметры с качеством готовой продукции. Имеется возможность получить количественную информацию о содержании любого компонента в любом материальном потоке через любой промежуток времени с момента запуска бумагоделательной машины одновременно с информацией о качестве вырабатываемой продукции в этот же момент времени.

Поскольку сам факт накопления вредных загрязнений (например, сульфата алюминия в оборотной воде) во времени оказывает влияние на протекание технологического процесса коагуляции упрочняющей добавки в волокнистой массе, то, очевидно, возникает необходимость в постоянной оптимальной подстройке системы управления. Поэтому в алгоритм введен оптимизирующий блок, в котором поступающая информация обрабатывается и в случае рассогласования фактической ситуации с заданными условиями, решается компромиссная задача оптимизации с выдачей необходимых управляющих импульсов на «исполнительные механизмы» тренажера с учетом выбранного критерия, например минимальной суммы энерго-технологических затрат.

Центральной частью математического обеспечения компьютерного программного модуля является многократный расчет материальных балансов по специально организованной циклической программе. В отличие от традиционного приема вычисления технологических потоков с известного значения товарной продукции, методика использует естественную последовательность расчета материальных балансов сначала, следуя от операции к операции, превращающей сырье в готовую продукцию. В математической модели задействованы 49 факторов, которые оказывают влияние на протекание технологического процесса, качество продукции, экономику и экологию.

6.2.4. Рабочий интерфейс и структура программного модуля

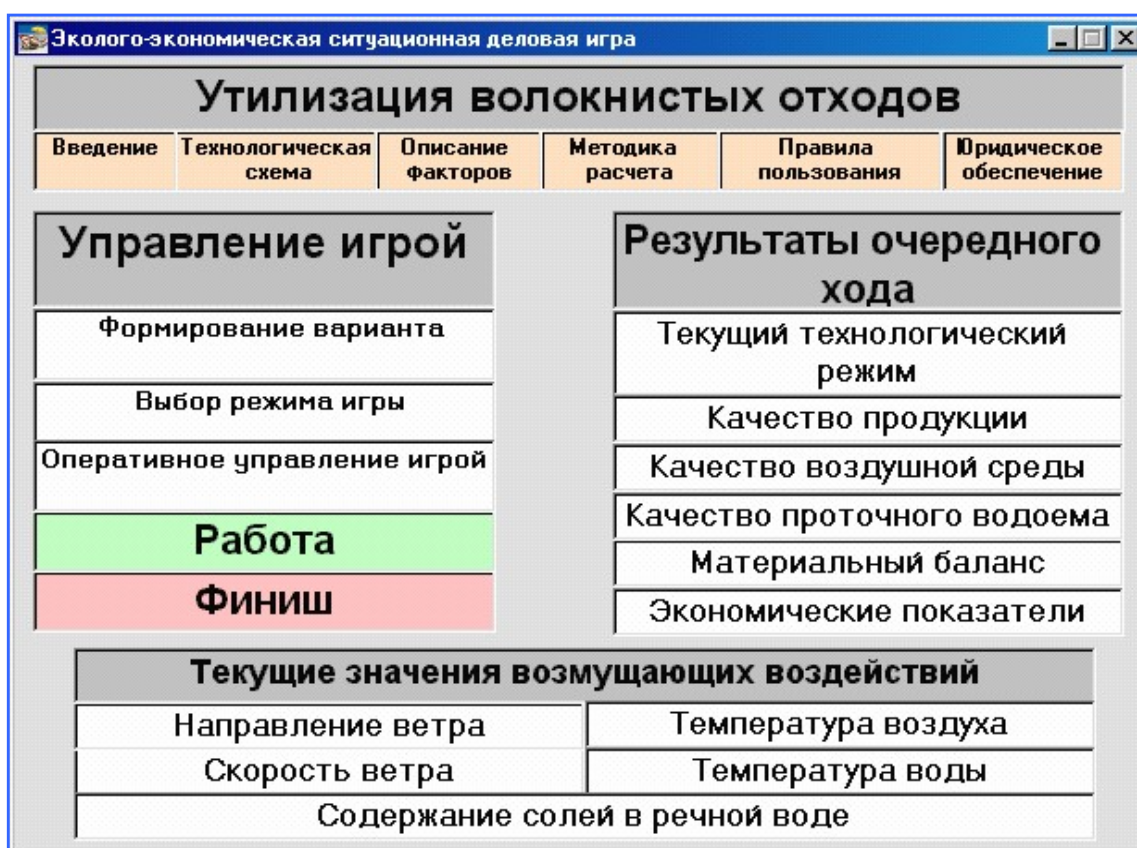


Рис. 137. Рабочий интерфейс программного модуля «EcoGame»

Окно интерфейса представлено на рис. 137.

Структура программного модуля включает в себя четыре основные раздела:

- информационное обеспечение игры;

- управление игрой;
- анализ очередного хода;
- фиксация текущих значений возмущающих воздействий.

Информационное обеспечение включает подразделы:

- введение;
- описание технологической схемы;
- описание факторов;
- описание системной математической модели и методики расчетов;
- правила пользования;
- юридическое обеспечение.

6.2.5. Технологическая схема

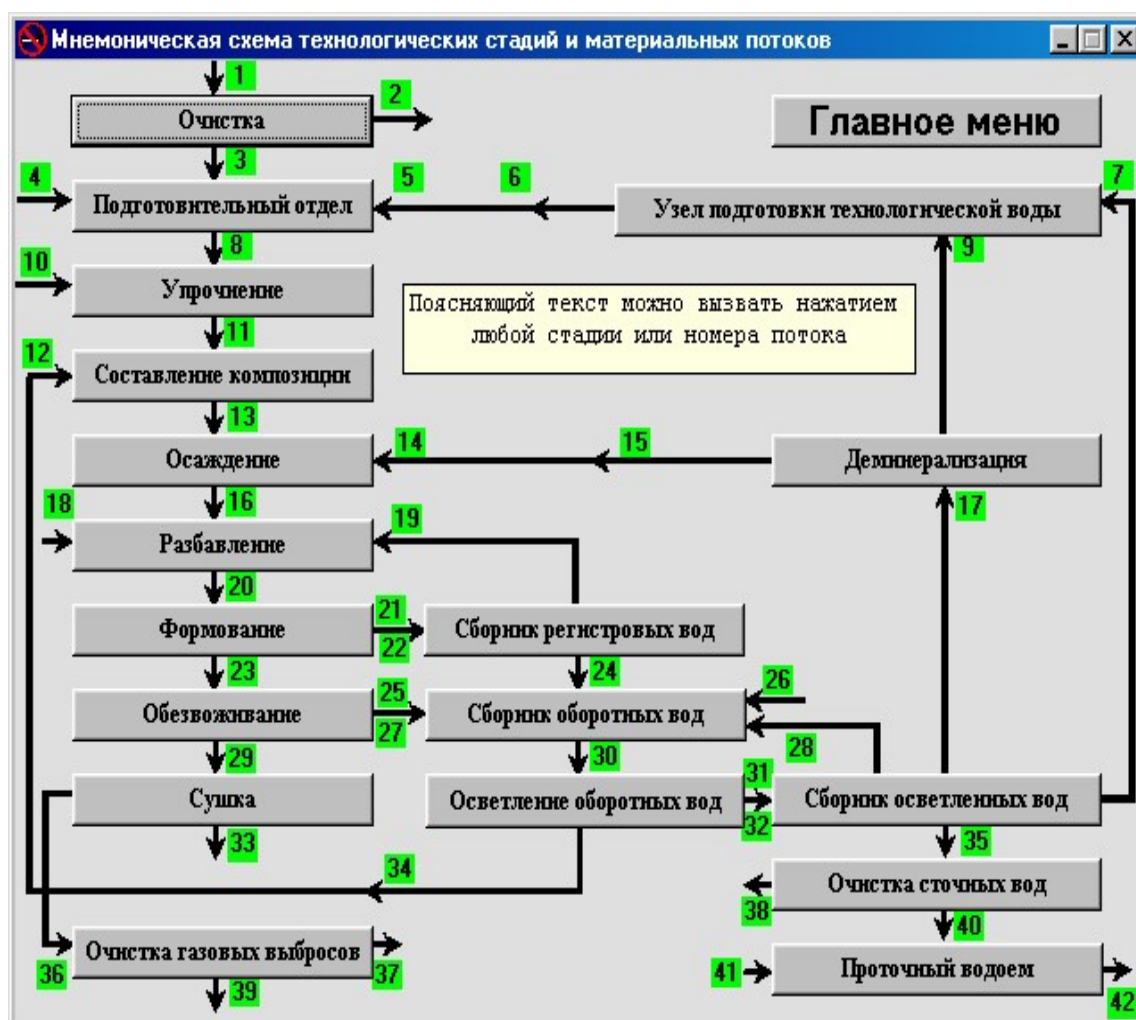


Рис. 138. Структурная технологическая схема утилизации волокнистых отходов

В технологической схеме (рис. 138) технологические операторы и материальные потоки выполнены в виде командных кнопок, при нажатии на которые (при инициализации) появляется поясняющий текст о назначении и особенностях использования этих параметров (так называемая *контекстно-связанная подсказка*).

6.2.6. Управление эколого-экономической деловой игрой

Работой химико-технологической системы можно управлять вручную с пульта, а можно на определенных этапах деловой игры подключать оптимизирующий блок, позволяющий постоянно осуществлять автоматический поиск наилучшего технологического режима для текущих условий.

Структура потоков в технологической схеме представляет собой гипертекстовую мнемосхему, в которой технологические операции и номера материальных потоков выполнены в виде *командных кнопок*, при нажатии на которые на экране монитора возникает поясняющий текст о теоретическом предназначении операции или потока и практическом их использовании. Таким образом, технологическая схема фактически является учебником по технологии с акцентированием внимания на процессах размола и коллоидно-химических взаимодействиях разнородных, разновеликих, разнотенциальных и разноименно заряженных компонентов микрогетерогенной системы с тем, чтобы обеспечить фиксацию (гетероадагуляцию) мелкодисперсных частиц полимерных упрочняющих добавок на макроповерхности волокон.

6.2.7. Описание факторов

Все факторы (выше отмечалось об использовании 49 факторов) не только подробно описаны в help-файле, но и задействованы в теле программы, поэтому описание факторов можно рассматривать и как учебный материал, снабженный текстовым сопровождением с рисунками, таблицами, графиками, диаграммами, и как средство активизации творческого участия обучаемых в освоении приемов оперативного ситуационного управления производством за счет коррекции значений факторов в процессе игры. На основании последующего аналитического разбора реакции системы на эти коррекции, можно принять лучшее решение об очередном ходе.

6.2.7.1. Факторы, определяющие вариант эколого-экономической деловой игры. В диалоговом окне (рис. 139) содержится список параметров, изменение значений которых определяет облик игры и ее целевое назначение.

Параметр	Единица измерения	Значение
Мощность водотока (дебет реки)	м ³ /с	12,5
Цена полимерной добавки	у.е./кг	2,6
Цена волокнистой добавки	у.е./кг	1,7
Цена 1 квтч электроэнергии	у.е./квтч	0,067
Цена 1 куб.м речной воды	у.е./м ³	0,65
Цена 1 тонны волокнистых отходов	у.е./т	50,0
Цена выброса в атмосферу 1 кг стирола	у.е./кг	0,55
Цена сброса 1 кг вещества со сточной водой	у.е./кг	0,29
Цена 1 тонны готовой продукции	у.е./т	3500,0
Цена коагулянта	у.е./кг	0,13
Удельный расход энергии на размол волокон	квтч/(т*гр)	950,0
Удельный расход энергии на деминерализацию	квтч/м ³	715,0
Удельный расход энергии на очистку г-в выбросов	квтч/кг	28,0
Удельный расход энергии на очистку сточных вод	квтч/м ³	14,5

Рис. 139. Окно выбора начальных условий

6.2.7.2. Показатели качества продукции с заданным диапазоном свойств. К их числу относятся следующие:

- прочность продукции;
- пластичность продукции;
- влагопрочность продукции.

Диалоговое окно «Требования к качеству продукции» (рис. 140) позволяет производить изменения уровней требований к качеству и определять экономические и технические возможности обеспечения конкурентной способности выпускаемой продукции.

Параметр	Единица измерения	От	До
Прочность вырабатываемой продукции	м	3000,0	4000,0
Сопротивление излому, число двойных перегибов		1200,0	1500,0
Влагопрочность вырабатываемой продукции	%	15,0	25,0

Рис. 140. Диалоговое окно «Требования к качеству продукции»

6.2.8. Выбор режима игры

Пользователю предоставляется возможность путем установки флажка выбрать один режим из списка:

- автономная работа системы;
- оперативное управление с пульта;
- поиск режима, обеспечивающего качество;
- оптимизация очередного хода;
- оптимизация технологического режима;
- оперативное оптимальное управление.

6.2.8.1. Автономная работа системы

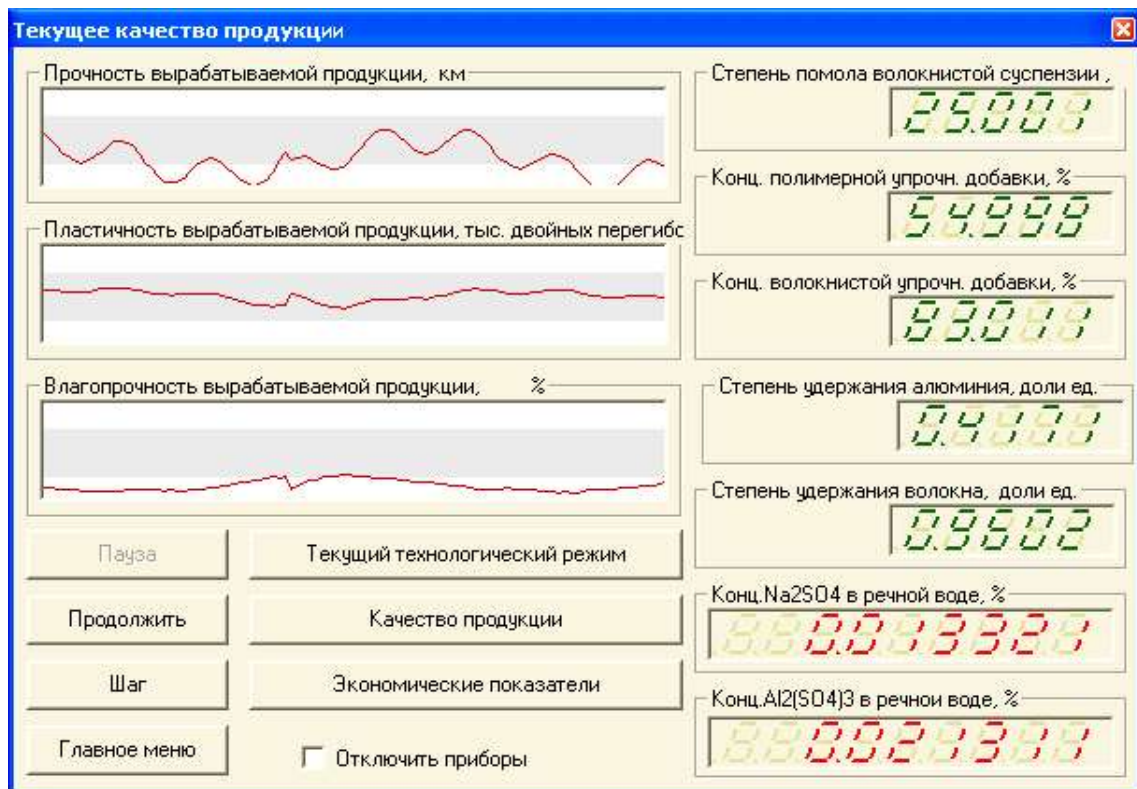


Рис. 141. Окно текущего состояния технологического процесса и качества продукции

Первый выбранный режим представляет собой активный со-зерцательный вариант анализа работы технологической системы (рис. 141).

После нажатия командной кнопки «Работа» на экране монитора возникает диалоговое окно с тремя движущимися диаграммными лен-

тами, на которых отражается динамика изменения качества продукции (рис. 141). Изменения во времени показателей качества связаны с нестабильностью условий производства. Регистрируемые, но не регулируемые параметры в виде возмущающих воздействий («покачиваний») оказывают влияние на механизм протекания технологических операций (стадий технологического процесса) и на свойства получаемой продукции. Этот режим является наиболее характерным для формирования инженерного опыта в определении причин отклонения качества продукции от эталона, предусмотренного требованиями соответствующих стандартов. Для облегчения выявления причинно-следственных связей осуществляется синхронный съем информации с «приборов», регистрирующих текущие значения возмущающих воздействий. Показания приборов выведены на специальный пульт.

Наряду с показаниями приборов, фиксирующих текущие значения возмущающих воздействий, для оценки обстановки и выработки решения программный продукт позволяет привлекать конкретную числовую информацию об основных параметрах технологического режима и свойствах продукции, вырабатываемой в настоящий момент.

6.2.8.2. Оперативное управление с пульта

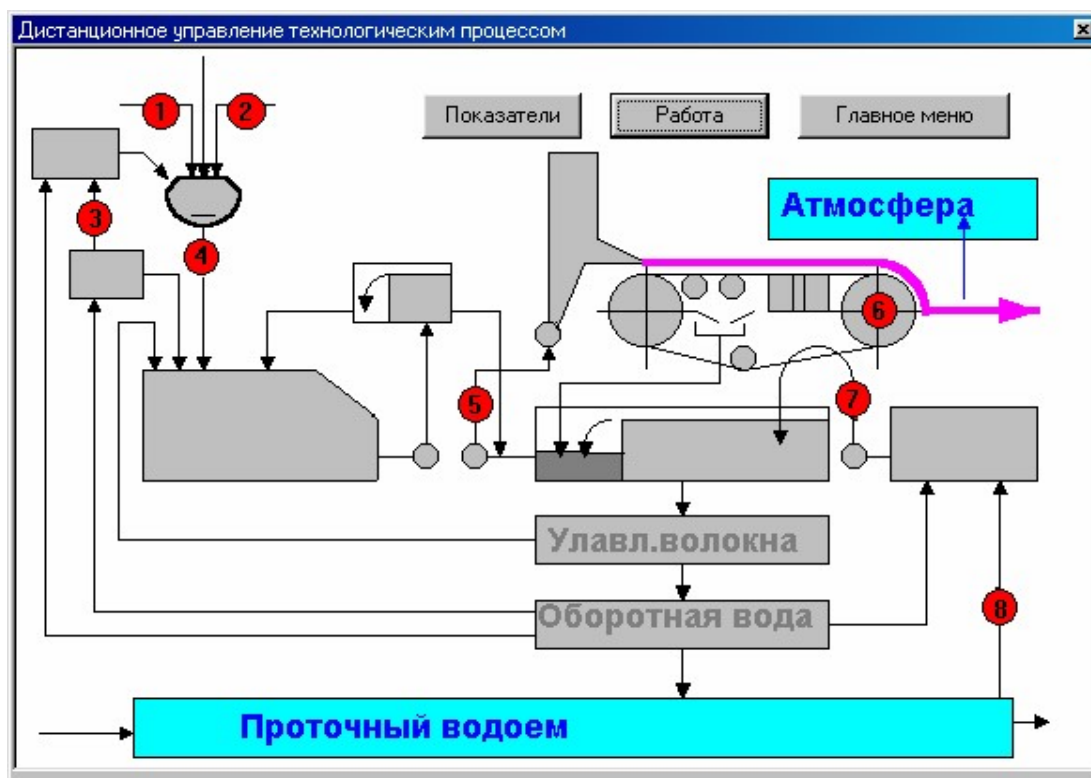


Рис. 142. Схема оперативного технологического управления

Основными факторами оперативного управления с пульта являются:

- расход полимерной упрочняющей добавки;
- расход волокнистой упрочняющей добавки;
- степень помола целлюлозы;
- расход свежей речной воды;
- общий расход воды на промывку одежды машины;
- расход деминерализованной воды;
- степень очистки газоздушных выбросов;
- степень очистки сточных вод;
- концентрация массы при отливе;
- скорость бумагоделательной машины.

На рис. 142 представлена схема оперативного технологического управления производством (имитация элементов пульта). Нумерованные кружки с красной заливкой представляют собой исполнительные механизмы типа рукояток настройки, регулирующих вентилей или задвижек на трубопроводах. Если остановить курсор на любом кружке с номером, то возникает всплывающая подсказка с рекомендациями дальнейших действий в виде названия регулируемого параметра и его текущего значения. Если по номеру щелкнуть левой клавишей мыши (ЛКМ), то возникает еще одно диалоговое окно. Оно позволяет корректировать значения параметров. Большую помощь может оказать справочная информация, если щелкнуть по кнопке «Справка». Кнопка «Показатели» дает возможность просмотреть синхронные с текущими условиями производства значения параметров технологического режима, качество получаемой продукции и экономические параметры.

6.2.8.3. Поиск режима, обеспечивающего качество. Режим предназначен для тех случаев, когда с пульта интуитивно, «вручную» за много пробных ходов не удается отыскать режим, обеспечивающий качество продукции.

6.2.8.4. Оптимизация очередного хода. Выбор этого режима позволяет проследить за траекторией поиска лучших вариантов технологического режима, которые не только обеспечивали бы заданное качество продукции, но и минимизировали бы затраты на ее производство. Анализ последовательности найденных режимов и объяснение целесообразности перехода от одного к другому будет способствовать повышению квалификации инженера.

6.2.8.5. Оптимизация технологического процесса. Выбор единственного (оптимального) технологического режима по этому игровому режиму осуществляется автоматически. Здесь исключаются варианты привлечения к работе недостаточно компетентных специалистов, нет возможности совершить ошибку в управлении технологическим процессом из-за неопытности исполнителей. Ясно, что ответом на изменившиеся макроэкономические условия функционирования предприятия окажется единственно правильный (самый дешевый технологический режим). По этому режиму появляется возможность проанализировать в логической связке две проблемы «Условия — результат». Например, какие изменения должны произойти в технологии в ответ на конкретное увеличение стоимости энергии, цены речной воды, возмещения ущерба, нанесенного окружающей среде, и т. д. Одновременно можно определить произошедшие изменения в структуре себестоимости продукции и размере прибыли. Режим требует многократного повторения. Тогда могут быть найдены условия, при которых загрязнение окружающей среды окажется экономически невыгодно (предположив, что наказание за причиненный ущерб неизбежно) или при которых предприятие оказывается нерентабельным.

6.2.8.6. Оперативное оптимальное управление. Использование этого режима имитирует работу технологической системы, в состав которой «включена» управляющая ЭВМ с оптимизирующим блоком. «Приборы» контролируют текущие условия производства и качество выпускаемой продукции, и как только фиксируется рассогласование с заданным эталоном, включается алгоритм поиска режима, обеспечивающего требуемое качество с минимальными затратами.

6.2.9. Главные управляющие факторы, текущие значения которых могут определяться автоматически с помощью оптимизационного блока программного комплекса

6.2.9.1. Расход полимерной упрочняющей добавки. Будучи по природе своей резиной, латексы придают бумаге свойства влагостойкости, пластичности и растяжимости. Они существенно упрочняют бумагу из макулатуры, а добавки к ним таких веществ, как жидкое стекло, способны обеспечить устойчивость тисненого рельефа при выклейке обоев.

Синтетические каучуковые латексы являются наиболее эффективными упрочняющими добавками при низких (до 35° Ш–Р) степенях помола волокнистых суспензий. Связи «полимер — волокно» по прочности не могут конкурировать со связями «волокно — волокно». Но последние не могут конкурировать с полимерами по приданию бумаге свойств влагопрочности и пластичности. Необходимо также иметь в виду, что при увеличении расхода латекса показатели качества вырабатываемой бумаги проходят через максимум, повышаясь вначале и понижаясь в конце. Наибольшее влияние полимерные добавки оказывают на влагопрочность бумаги и сопротивление ее излому. Для каждого сочетания условий существует уникальная величина оптимального расхода полимерной упрочняющей добавки, которая определяется направленным поиском в процессе деловой игры.

6.2.9.2. Расход волокнистой упрочняющей добавки. Для повышения прочности продукции, изготовленной из макулатуры, кроме полимеров, типа каучуковых латексов, часто применяются волокнистые добавки из размолотой сульфатной целлюлозы, которые в структуре бумажного листа создают упрочняющий каркас.

Необходимо помнить, что сама по себе волокнистая добавка не является упрочняющей. Упрочняющие свойства волокнистой добавки проявляются только в случае отыскания оптимального значения степени помола массы для конкретных условий деловой игры, сложившихся к текущему моменту.

6.2.9.3. Степень помола целлюлозы. Результаты процесса размола могут быть охарактеризованы двумя крайними показателями — волокна целлюлозы при размоле можно измельчить вдоль и поперек.

Измельчение вдоль волокон называется гидратацией и измеряется степенью помола, выражаемой в градусах Шоппер — Ригглера. Не размолотая целлюлоза чаще всего имеет 14–16° Ш–Р, высокоразмолотая — 65–95° Ш–Р. Массовые сорта бумаги вырабатываются из целлюлозы со степенью помола 25–45° Ш–Р.

Измельчение волокон поперек называется рубкой и измеряются длиной волокна. Чаще всего длина волокна характеризуется косвенной величиной — весовым показателем, изменяющимся от 500–700 мг для неразмолотых волокон до 35–45 мг для размолотых, сильно укороченных волокон.

Чем выше степень помола длинных волокон, тем прочнее межволоконные связи в бумаге, но тем неравномернее по структуре бумажный лист. Из коротких волокон можно получить равномерный по структуре бумажный лист (с «молочным» просветом), но он не будет прочным.

При увеличении степени помола показатели качества бумаги проходят через максимум, повышаясь вначале и понижаясь в конце.

Поэтому для каждого вида бумаги существует оптимальное соотношение между длиной волокна и степенью помола.

Найденные значения управляющих воздействий передаются на «исполнительные механизмы», которые автоматически корректируют технологический режим. Диалоговое окно, соответствующее этому режиму, показано на рис. 143.

Таким образом, при пошаговом режиме работы можно сопоставлять результаты интуитивных логических исследований условий производства и принятое решение на этой основе сравнивать с результатами решения оптимизационных задач с использованием математических методов и вычислительной техники.

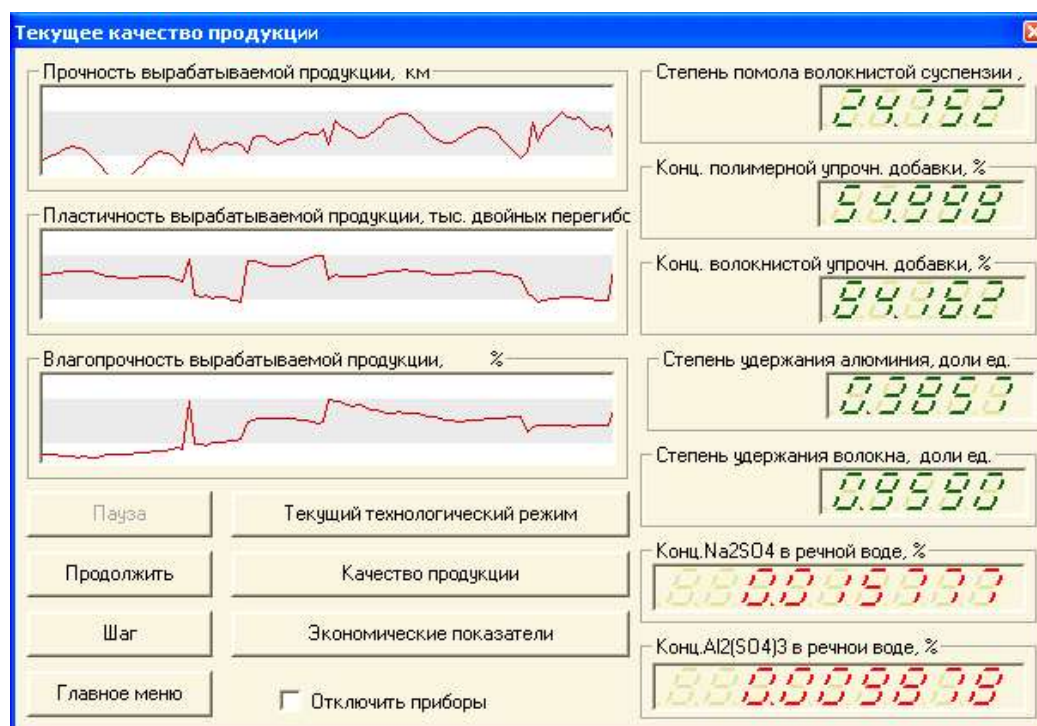


Рис. 143. Информация о качестве выпускаемой продукции в текущий момент времени в режиме оперативного оптимального технологического управления

Может представлять интерес определение эффективности использования средств автоматизации для оперативного оптимального управления технологическим процессом по сравнению с ручным управлением, основанном на личной квалификации и опыте работы персонала.

6.2.10. Раздел «Результаты очередного хода»

Получение соответствующих показателей инициируется нажатием соответствующей кнопки в окне на рис. 143.

6.2.10.1. Текущий технологический режим

Значения параметров		Текущее	Лучшее
Расход полимерной упрочняющей добавки, кг/т		71,602	77,407
Расход волокнистой упрочняющей добавки, кг/т		76,579	70,521
Степень помола волокнистой суспензии, град.Ш-Р		25,18	24,928
Концентрация электролитов до введения упрочняющих добавок, %		0,005	0,004
Концентрация массы при отливе, %		0,7	0,7
Скорость бумагоделательной машины, м/мин		150,0	150,0
Расход свежей речной воды, кг/т		15000,0	15000,0
Общий расход воды на промывку маш., кг/т		120000,	120000,
Сумма энерго-технологических затрат, у.е.		688,915	684,877

Ok Справка

Рис. 144. Информация о текущих значениях параметров технологического процесса

6.2.10.2. Качество продукции

	Задано		Текущее	Лучшее
	от	до		
Прочность вырабатываемой продукции, м	3000,0	4000,0	3136,114	3222,848
Сопротивление излому, число двойных перегибов	1200,0	1500,0	1110,238	1212,954
Влагопрочность вырабатываемой продукции, %	15,0	25,0	14,87	15,731

Ok Справка

Рис. 145. Информация о текущих значениях показателей качества готовой продукции

6.2.10.3. Качество воздушной среды. Оценка качества воздушной среды предусматривается в двух вариантах: краткий и полный отчеты. При выборе краткого отчета в диалоговое окно выводятся результаты расчетов только трех параметров рассеивания вредной примеси в приземных слоях атмосферы для всех девяти источников загрязнения: максимальная приземная концентрация, C_m , расстояние, на котором достигается C_m , величина предельно допустимого выброса, г/с.

Если необходим полный отчет об оценке качества воздушной среды, то расчет осуществляется по полной программе методики ОНД-86 с формированием текста отчета, пригодного для брошюрования, например, в пояснительные записки курсовых или дипломных проектов. В этом случае строится карта-схема рассеивания загрязнения атмосферы от всех источников в масштабе промплощадки с изображением концентрационных полей в зависимости от погодных условий и ветрового режима (см. рис. 146), которые условиями игры могут по желанию пользователя изменяться в определенном им направлении и на любую желаемую величину.

Результаты оценки качества воздушной среды жестко связаны с текущим технологическим режимом и полностью определяются значениями расхода полимерной упрочняющей добавки, скоростью бумагоделательной машины, условиями осуществления гетероадагуляции и т. д. Таким образом, для каждого момента времени качество атмосферного воздуха изменяется в соответствии с заказанным качеством продукции, расходами речной воды и другими параметрами технологического процесса, экономической конъюнктурой и экологическими требованиями.

$$P(v \text{ успехов в } n \text{ испытаниях}) = b_{n,p}(v) = \binom{n}{v} \cdot p^v \cdot q^{n-v}. \quad (2.51)$$

Рис. 146. Карта-схема концентрационных полей загрязнения территории от точечных источников

6.2.10.4. Качество проточного водоема. При использовании этого режима осуществляется полный расчет уровня загрязнения проточного водоема и автоматически формируется текст предварительной экологической экспертизы санитарных условий сброса сточных вод. Здесь тоже необходимо подчеркнуть, что результаты расчета величины ПДС и качество водоема, принимающего стоки, касаются именно тех конкретных режимных технологических и погодных условий, которые сложились к текущему моменту.

6.2.10.5. Материальный баланс. Инициализация кнопки «Материальный баланс» (см. рис. 147) позволяет получить графическую (в виде диаграмм материальных потоков, как это показано на рис. 147) и табличную информацию о текущем содержании каждого компонента в каждом материальном потоке при нажатии на кнопку с номером потока.

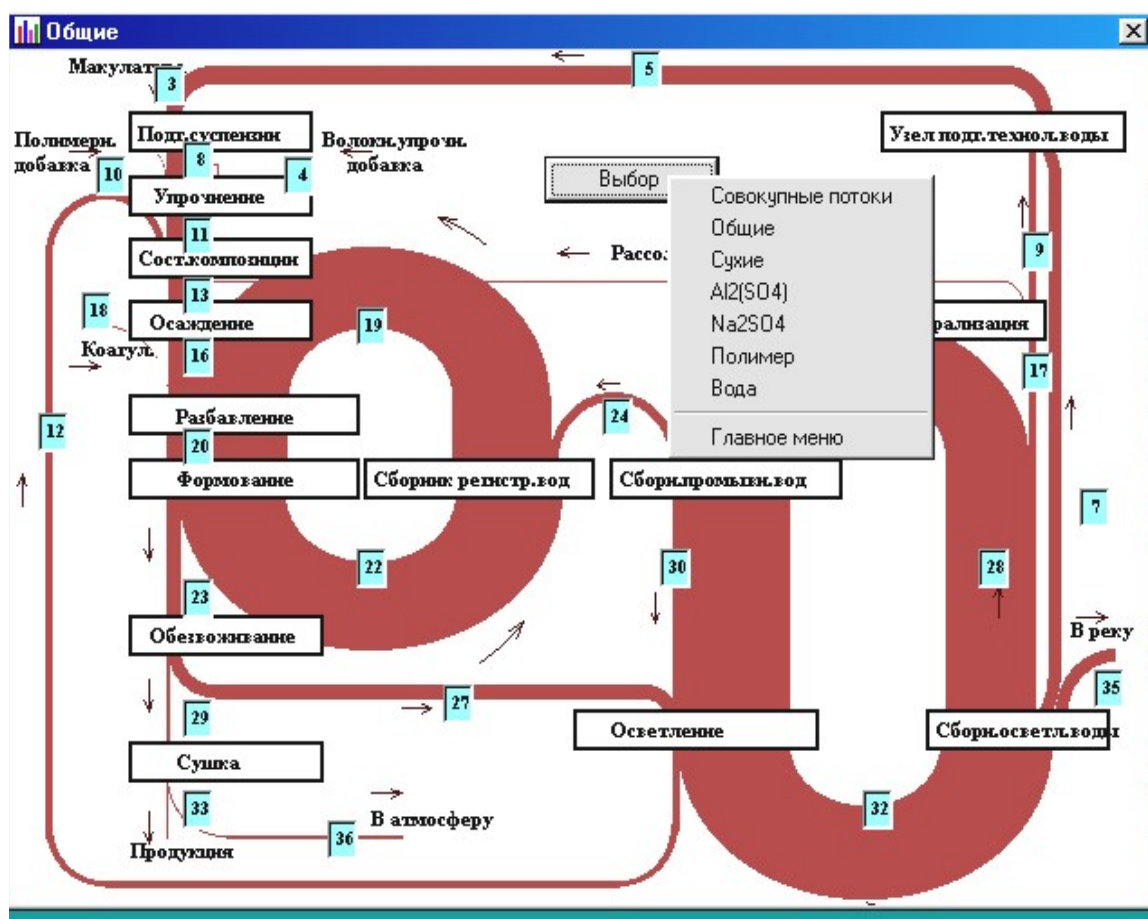


Рис. 147. Диаграмма материальных потоков в текущий момент времени

Диаграммы материальных потоков выполнены в масштабе, соответствующем массе соответствующего компонента, причем, если щелкнуть ЛКМ по номеру потока, возникнет окно с информацией о конкретном значении массы этого потока. Результаты расчета многокомпонентного материального баланса постоянно синхронно обновляются в соответствии с конкретными текущими условиями функционирования территориального промышленного комплекса. Необходимо указать на возможность получения важной информации при нажатии кнопки «Выбор». Открывающийся список позволяет вызвать на экран диаграммы материального баланса по всем компонентам всех потоков и определить количество загрязняющих веществ, выбрасываемых в атмосферу и сбрасываемых в водоем.

6.2.11. Текущие значения возмущающих воздействий

6.2.11.1. Направление и скорость ветра. При выборе расчета по преимущественному направлению ветра настройка расчета на конкретное направление ветра осуществляется присвоением значения угла ветра (откуда он дует на источник), исходя из следующих условий:

0–45 и 315 – 360 градусов — северный ветер;

45–135 — восточный ветер;

135–225 — южный ветер;

225–315 — западный ветер.

В разделе «Текущие значения возмущающих воздействий» есть возможность по своему усмотрению установить последовательность интересующих значений направления и скорости ветра (для любых конкретных условий, сложившихся на момент анализа оценки качества воздушной среды). След от факела рассеивания вредных примесей в атмосфере закономерно будет изменять свои размеры и положение на территории промышленного комплекса. Это даст возможность пользователю определить зоны благоприятной и неблагоприятной экологической обстановки в любой точке карты-схемы, а также определить наиболее опасный ветровой режим с тем, чтобы принимать соответствующие меры в случае получения тревожной метеосводки.

6.2.11.2. Температура воздуха. Задавая различные значения температуры воздуха, можно проследить изменения условий рассеивания

вредных примесей в атмосфере за счет изменений условий ее стратификации. При этом можно отметить закономерные изменения экологической обстановки на территории промышленного комплекса.

6.2.11.3. Температура воды. Температура воды влияет на условия перемешивания сточных вод в реке за счет диффузии и конвекции при изменении вязкости воды при различных температурах. Следовательно, можно избежать штрафов за сверхнормативное загрязнение реки или, наоборот, «нарваться» на непредусмотренный штраф, если не учитывать температурные условия проточного водоема. Температура также оказывает влияние на лабильное адсорбционное равновесие коллоидно-химического регулятора в микрогетерогенной системе, что приводит к изменению соотношения гомокоагуляция: гетероадагуляция полимерных упрочняющих добавок. Поэтому может измениться требуемый (оптимальный) расход гидродисперсии полимера.

6.2.11.4. Содержание солей в речной воде. В период выпадения дождей с поверхности полей, лугов, пашен и территории города в реку смываются различные химические вещества типа пестицидов, минеральных и органических удобрений, поверхностно-активных веществ и поваренной соли, которой посыпают улицы и тротуары в зимнее время. Присутствие ионов одновалентных и двухвалентных металлов, попадающих в производственные материальные потоки с речной водой, снижает упрочняющее действие полимеров, поэтому требуют соответствующего реагирования со стороны игрока путем подстройки режима с помощью оперативных управляющих параметров.

6.2.12. Запуск, управление работой и рекомендации по использованию программного модуля

Программный модуль подготавливается к работе после того как определены начальные условия функционирования производственного комплекса: установлены цены на ресурсы, степень наукоемкости технологии в виде удельных расходов энергии на отдельные виды технологических операций, а также требования к качеству вырабатываемой продукции. В зависимости от этого осуществляется выбор параметров в разделах «Формирование варианта», «Выбор режима игры», а также инициализация режима «Работа».

Задачей пользователя является определение очередного хода в виде соответствующих наборов значений управляющих факторов с тем, чтобы по реакции системы определить удачность или неудачность выбранного варианта и откорректировать очередной ход. Все это позволит нарабатывать навыки принятия управленческих решений на основе практического использования теоретических химических, технических, юридических, биологических и гуманитарных знаний.

Обучающий компьютерный тренажер можно рассматривать как модель реального технологического процесса и использовать его как источник информации для приобретения опыта в организации планирования вычислительных промышленных экспериментов и получения математического описания многофакторного производственного объекта.

6.3. ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОБЛЕМ ВЗАИМОСВЯЗИ ТЕХНОЛОГИИ, ЭКОЛОГИИ И ЭКОНОМИКИ НА ПРИМЕРЕ ОДНОГО ПРОМЫШЛЕННОГО ПРЕДПРИЯТИЯ. ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ «ЕСОТЕСН»

6.3.1. Назначение и области использования программного модуля

Компьютерный обучающий тренажер предназначен для организации вычислительных экспериментов и анализа взаимосвязей между технологией, экологией, экономикой и юриспруденцией в природопользовании на примере промышленной экосистемы утилизации волокнистых отходов.

6.3.2. Функциональные возможности программного модуля

- Формирование вариантов вычислительных экспериментов и анализ взаимосвязей между технологией и экологией в природопользовании на примере промышленной экосистемы утилизации волокнистых отходов.
- Многократное автоматическое решение оптимизационной задачи, в результате которой определяются значения управляющих факторов в соответствии с изменившимися условиями на рынке сырья,

химикатов и продукции, а также требованиями по возмещению ущерба, нанесенного окружающей среде.

- Расчет материальных балансов потоков промышленной экосистемы утилизации волокнистых отходов в режиме псевдинамики и вывод информации о содержании основных компонентов в каждом материальном потоке.

- Расчет загрязнения атмосферы в районе расположения промышленного предприятия синхронно с условиями его функционирования;

- Расчет загрязнения проточного водоема, принимающего стоки промышленного предприятия в соответствии с режимом его работы.

- Расчет экономических показателей функционирования промышленного комплекса.

- Оперативное получение технической, экономической и природоохранной справочной информации на любой стадии использования программного модуля.

6.3.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

EcoTech.exe Главный исполняемый файл программного модуля

EcoTech.hlp Файл помощи

EcoTech.cnt Файл оглавления

Trainer.ini Файл исходных данных

6.3.4. Концепция организации охраны окружающей среды

На ранних этапах промышленной цивилизации в условиях изобилия природных благ и малой степени загрязненности биосферы вопросы экономии ресурсов и охраны природы вообще не рассматривались. Основное внимание уделялось построению таких моделей развития экономики, которые удовлетворяли бы все более высокие требования населения в товарах и услугах. Экологические проблемы решались силами самой природы, ее способностью противостоять вредным антропогенным воздействиям, компенсировать, сглаживать и со временем ликвидировать их последствия.

Высокие темпы последующего индустриального развития, сопровождаемого уничтожением невозобновимых природных ресурсов, и

достигнутые масштабы загрязнения окружающей среды за счет производственной деятельности привели к необходимости пересмотра концепции экологических требований к технологическим процессам.

Сейчас противоречия между природой и производительными силами стремятся разрешить путем правового надзора за исполнением ограничительных требований специально разработанной системы показателей предельно допустимых концентраций (ПДК). В связи с этим инженерные обязанности пополнились необходимостью не только обеспечить выпуск заданного количества продукции заданного качества, но и определить условия, при которых уровень техногенного загрязнения окружающей среды не превысит ее самоочистительной способности. Это достигается расчетом предельно допустимых выбросов (ПДВ) вредных веществ в атмосферу и предельно допустимых сбросов (ПДС) в водоемы. Кроме того, при выборе места строительства и производственной мощности проектируемых промышленных предприятий необходимо учесть фоновые концентрации загрязнителей и экологическую емкость территории.

Использование нормирования загрязнения окружающей среды на современном уровне промышленного развития — это только перенесение катастрофы на более поздний срок, но не выход из экологического кризиса.

Решение проблемы заключается в предотвращении образования отходов и вредных промежуточных веществ химических реакций, в создании чистых наукоемких технологий, в которых равновесные процессы термодинамически сдвинуты в сторону в сторону получения максимального выхода полезной продукции из единицы массы перерабатываемого сырья. Необходимо так организовать материальные и информационные потоки, чтобы производство стало максимально замкнутой системой со своими внутренними контурами циркуляции воды и воздуха без стоков, газовых выбросов и отходов.

Решение экологических проблем с юридической и экономической точек зрения заключается в отыскании и законодательной фиксации условий, при которых загрязнение окружающей среды стало бы разорительным для предприятия. Имеются в виду размер платы за сырьевые, водные и энергетические ресурсы, а также за возмещение ущерба, нанесенного природе производственной деятельностью.

6.3.5. Идеи, положенные в основу программного модуля

- Проблема взаимодействия технологии и экологии возникает тогда, когда возникает потребность людей в товарах и услугах (рыночный спрос на продукцию).

- Удовлетворение потребности порождает необходимость в создании технологии.

- Технология, появившись, не может не загрязнять окружающую среду.

- Необходимо организовать технологию и определить допустимые пределы загрязнения окружающей среды.

- Удовлетворение спроса никто не будет делать себе в ущерб; нужны выгода в организации производства, прибыль от реализации продукции.

- Прибыль тесно связана с себестоимостью продукции и рыночной ценой.

- Себестоимость и цена связаны с качеством продукции.

- Качество связано с загрязнением окружающей среды.

- За загрязнение окружающей среды тоже надо платить; другое дело сколько; поэтому возмещение ущерба природе тоже входит в себестоимость продукции.

- И снижение экологической нагрузки на окружающую среду, и ресурсосбережение (минимизация себестоимости продукции) в конечном итоге определяются степенью наукоемкости технологии.

Чтобы обо всем судить предметно, а не решать проблемы голосованием, необходимо обеспечить получение количественных ответов на все поставленные вопросы.

С этой целью в модуль введено программное средство, имитирующее функционирование производства на основании системной математической модели, и оптимизирующий блок, позволяющий вычислять необходимые расходы химикатов и энергии и минимизировать себестоимость продукции при текущих условиях.

Возможность направленной комбинации текущих условий является основой программного модуля.

Математическое обеспечение позволяет определить затраты и уровень загрязнения окружающей среды в зависимости от изменений качества продукции, конъюнктуры рынка и юридических норм природопользования.

Управление модулем сводится к созданию и анализу различных вариантов функционирования производства.

Путем изменения положения ползунков на приборных панелях можно технологический процесс сделать полностью безотходным (по материальным потокам), установив рычажок на панели «Степень превращения» в крайнее правое положение, когда все сырье превращается в кондиционную продукцию, а рычажок на панели «Процент отходов» установить в крайнее левое положение (неперерабатываемых отходов нет совсем).

Если степень превращения сырья в готовую продукцию сделать нулевой и исключить образование отходов в отвал, то производство будет работать вхолостую; все сырье будет превращаться в оборотный брак. Если некондиционную продукцию нельзя повторно переработать, то производство будет работать не на рынок, а на свалку, все сырье превращать в отходы.

Естественно, что между этими крайними позициями существует бесконечное множество промежуточных вариантов взаимодействия технологии и экологии, которые пользователю предлагается сформировать и проанализировать.

6.3.6. Источники и причины проблем

6.3.6.1. Что было вначале?

Вначале сотворил Бог небо и землю.

Земля же была безвидна и пуста, и тьма над бездною:

И Дух Божий носился над водою.

И сказал Бог: да будет свет. И стал свет.

И сказал Бог: да будет твердь посреди воды, и да отделяет она воду от воды. И стало так.

И сказал Бог: да соберется вода, которая под небом, в одно место, и да явится суша. И стало так.

И сказал Бог: да произрастит земля зелень, траву, сеющую семя по роду ее, и дерево, приносящее плод, в котором семя по роду его.

И увидел Бог, что это хорошо.

И сказал Бог: да произведет вода пресмыкающихся, душу живую; и птицы да полетят по тверди небесной. И увидел Бог, что это хорошо.

И сказал Бог: да произведет земля душу живую по роду ее, скотов и гадов, и зверей земных по роду их. И стало так.

И благословил их Бог, говоря: плодитесь и размножайтесь, и наполняйте воды в морях, и птицы да размножаются на земле.

И сотворил Бог человека по образу Своему, по образу Божию сотворил его; мужчину и женщину сотворил их.

И благословил их Бог, и сказал им Бог: плодитесь и размножайтесь, и наполняйте землю, и обладайте ею, и владычествуйте над рыбами морскими, и над птицами небесными, и над всяким животным, пресмыкающимся по земле.

*Библия. Книги Священного Писания.
Первая книга Моисеева. Бытие. Гл. 1,
стих. 1–28.*

6.3.6.2. Что было потом?

Что было потом?

— Потом была жизнь в раю.

Все что нужно было, тут же исполнялось естественно, само собой. Для дыхания сколько угодно чистейшего воздуха.

Для питья сколько угодно чистейшей воды.

Сколько угодно высококачественной пищи.

Тепло, комфортно.

Изысканное общество. Верная жена, ангелы и сам Создатель.

Где сидишь, стоишь или лежишь — там и жилище.

Технология создания всех благ — под патронажем Всевышнего.

Бессмертны (пока еще) оба живущих.

На, бери все, что хочется!

А чего можно хотеть?

И тут появляется Искуситель.

И появляется искушение.

Ведь знали, что нельзя есть плодов с древа познания добра и зла.

Но очень хотелось!

Свершилось!

Впервые был нарушен экологический закон.

Расплата – изгнание из рая.

Нет больше бессмертия у людей.

Потом и кровью вынуждены добывать они хлеб свой насущный.

Надо думать, как обеспечивать существование.

Надо думать, как наполнять землю и обладать ею, и владычествовать над рыбами морскими, и над птицами небесными, и над всяким животным, пресмыкающимся по земле.

Мы, нынешние потомки наших прародителей, вправе напомнить им об ответственности перед нами за свои решения и действия.

Ведь прояви они благоразумие в свое время, мы бы сейчас могли не думать о смерти.

Могли бы жить в раю.

И нам надо быть готовыми предстать перед судом наших потомков, наших детей и внуков, за то, что мы натворим на нашей Планете.

На ранних этапах промышленной цивилизации в условиях изобилия природных благ и малой степени загрязненности биосферы вопросы экономии ресурсов и охраны природы вообще не рассматривались. Основное внимание уделялось построению таких моделей развития экономики, которые удовлетворяли бы все более высокие потребности населения в товарах и услугах. Экологические проблемы решались силами самой природы, ее способностью противостоять вредным антропогенным воздействиям, компенсировать, сглаживать, и со временем, ликвидировать их последствия.

6.3.6.3. Что стало теперь? Заповеди Господни надо выполнять неукоснительно.

А Бог заповедал людям размножаться.

Сколько же людей накопилось на Земном Шаре за много тысячелетий со времени сотворения мира?

Пишущий эти строки в 1950 году учился в 8 классе средней школы. Было доподлинно известно, что одновременно с ним на планете Земля в то время жили 3,5 миллиарда человек.

С тех пор прошло пятьдесят лет. За этот кратчайший исторический миг население Земли практически удвоилось.

Сколько же нас будет еще через 50 лет, если сохранятся такие же темпы прироста?

Каждому живущему нужен воздух, нужна вода, нужна пища, нужно жилище . . . Нужно, нужно, нужно, . . .

А сколько чего кому нужно?

А сколько есть сейчас в наличии всего того, что людям нужно?

Хватит ли того, что есть на всех, каждому по столько, сколько ему хочется?

Недостаточность природных ресурсов для одновременного удовлетворения всех потребностей всех членов общества определяет объективную абсолютную ограниченность ресурсов.

Абсолютная ограниченность ресурсов превращается в относительную благодаря выбору потребностей, подлежащих удовлетворению. Нужна ревизия потребностей.

И строгая, научно обоснованная стратегия рационального использования природных ресурсов.

Высокие темпы индустриального развития, сопровождаемого уничтожением невозобновимых природных ресурсов, и достигнутые масштабы загрязнения окружающей среды за счет производственной деятельности привели к необходимости пересмотра концепции экологических требований к технологическим процессам.

Сейчас противоречия между природой и производительными силами стремятся разрешить путем правового надзора за исполнением ограничительных требований специально разработанной системы показателей предельно допустимых концентраций (ПДК). В связи с этим инженерные обязанности дополнились необходимостью не только обеспечить выпуск заданного количества продукции заданного качества, но и определить условия, при которых уровень техногенного загрязнения окружающей среды не превысит ее самоочищающей способности. Это достигается расчетом предельно допустимых выбросов (ПДВ) вредных веществ в атмосферу и предельно допустимых сбросов (ПДС) в водоемы. Кроме того, при выборе места строительства и производственной мощности проектируемых промышленных предприятий необходимо учесть фоновые концентрации загрязнителей и экологическую емкость территории.

Использование нормирования загрязнения окружающей среды на современном уровне промышленного развития – это только перенесение катастрофы на более поздний срок, но не выход из экологического кризиса.

6.3.6.4. Что может быть? Современная энергетика, транспорт и химическая промышленность базируются на использовании невозобновимых энергетических ресурсов — нефти, каменного угля, природного газа.

Уже сейчас ощущается острый дефицит этих ресурсов. Высокие темпы их потребления очень скоро приведут к тому, что их запасы будут полностью исчерпаны.

Что тогда?

Для химической промышленности единственным безвариантным выбором оказывается использование в качестве исходного химического сырья биомассы деревьев.

Лесной покров Земли — один из планетных аккумуляторов биосинтезируемого органического вещества, поддерживающего уровень кислородного и углеродного баланса в атмосфере. Лес выполняет главную экологическую функцию, обеспечивая саму возможность зарождения и существования жизни.

Древесина — ценное сырье для химической, целлюлозно-бумажной и микробиологической промышленности.

Нарушение равновесия «Прирост — потребление» может привести не только к истощению ресурсов, но и создать реальную угрозу исчезновения всей цивилизации. Поэтому определение допустимых объемов лесозаготовок и разработка путей рационального, полного и комплексного использования всей биомассы древесины являются задачами не только важными в глобальном масштабе, но и конкретными для любого региона, делающими обязательным участие в их решении каждого инженера.

Чтобы обеспечить хозяйское, заботливое отношение к лесным богатствам, необходимо умело координировать усилия науки, техники, воспитания в разработке принципов увеличения степени гармоничной интеграции промышленного производства с окружающей средой на основе фундаментальных экологических законов, а не стремиться переделать природу для удовлетворения необоснованно высоких потребностей.

6.3.6.5. Чего может не быть? Представим себе, что некто управляет движением троллейбуса.

И в данный момент ему нужно повернуть направо. Ему так хочется.

Но направо даже улицы нет, не говоря уж о контактной сети, которой, естественно, тоже нет.

Да, он может сейчас повернуть руль направо.

Ну и что?

В результате он может не только угробить технику, но и покалечить себя и пассажиров.

Он может захотеть повернуть на юг северные реки.

Он может захотеть на берегу Свислочи построить завод, который должен снабжать целлюлозой, бумагой и картоном всю Европу.

Его самодурства и невежества может хватить на то, чтобы спровоцировать глобальную экологическую катастрофу.

При каких условиях таких ужасных событий может не быть?

Всего этого может не быть, если к решению экологических проблем не допускать бездуховных, деспотичных, неподготовленных, необразованных людей.

Надо научиться хотеть только того, чего можно хотеть.

Надо научиться жить в гармонии с природой, а не навязывать ей свою злую волю.

Надо научиться жить по экологическим законам.

Для этого экологические законы надо изучать.

6.3.6.6. Что должно быть? Любая производственная деятельность связана с организацией превращения сырья в готовую продукцию. Чем полнее произойдет превращение, тем выше окажется степень безотходности (экологичности) технологии.

Абсолютное большинство химических реакций не протекает мгновенно и не идет до конца. Причем взаимодействия исходных реагентов и полупродуктов, получающихся в процессе реакции, осуществляются с разными скоростями, а иногда и разнонаправленными. Выход полезного продукта реакции из единицы массы сырья определяется состоянием термодинамического равновесия. Для управления кинетикой и термодинамикой химических реакций в любой технологии и разрабатываются научные принципы, определяющие степень наукоемкости технологии. Для воплощения в жизнь научных принципов в технологии разрабатывается соответствующее оборудование (орудия труда). Чем совершеннее конструкция оборудования, тем более оно энергосберегающее, что тоже характеризует научный уровень технологии. И, наконец, успешное решение технологических и экологических проблем может быть достигнуто только с помощью компетентных, высокообразованных специалистов. Поэтому залогом экологического благополучия населения является забота о подготовке кадров высококвалифицированных преподавателей, оснащении ВУЗов современным научным оборудованием, отбором талантливых учеников и о престиже и материальном обеспечении научных работников.

Решение проблемы охраны окружающей среды в промышленной экологии заключается в предотвращении образования отходов и вредных промежуточных веществ химических реакций, создании чистых наукоемких технологий, в которых равновесные процессы термодинамически сдвинуты в сторону получения максимального выхода полезной продукции из единицы массы перерабатываемого сырья. Необходимо так организовать материальные и информационные потоки, чтобы производство стало максимально замкнутой системой со своими внутренними контурами циркуляции воды и воздуха без стоков, газовых выбросов и отходов. Решение экологических проблем с юридической и экономической точек зрения заключается в создании наукоемких технологий, отыскании и законодательной фиксации условий, при которых загрязнение окружающей среды стало бы разорительным для предприятия. Имеется в виду размер платы за сырьевые, водные и энергетические ресурсы, а также за возмещение ущерба, нанесенного природе производственной деятельностью.

6.3.7. Научная проблема

Соблюдение требований обеспечения высокого качества продукции, приемлемых экономических показателей технологии и допустимого уровня загрязнения окружающей среды наталкивается на совершенно естественные противоречия.

С одной стороны, необходимо максимально использовать оборотную воду для уменьшения объема стоков, но это приведет к удорожанию продукции за счет увеличения расхода упрочняющей полимерной добавки, так как в оборотной воде будет накапливаться содержание сульфата алюминия, вредно влияющее на характер коагуляции латекса.

С другой стороны, если оборотную и сточную воду подвергнуть глубокой очистке, например термической деминерализации, то экологические и технологические требования будут удовлетворены. Качество продукции будет достигаться меньшими расходами гидродисперсии полимера и сточные воды не будут вредно влиять на экологию водоема, но финансовые затраты на деминерализацию приведут к банкротству предприятия по экономическим причинам.

6.3.8. Математические основы и методическая структура программного модуля

В основу системной математической модели промышленного комплекса положен мультипликативный принцип расчета многокомпонентных материальных балансов технологической системы через любые наперед заданные промежутки времени, например через отрезок времени, равный времени выработки одной тонны продукции.

Поскольку факт накопления вредных загрязнений в оборотной воде оказывает влияние на протекание технологического процесса, то, очевидно, возникает необходимость в постоянной оптимальной подстройке системы управления. Поэтому в алгоритм введен оптимизирующий блок, в котором поступающая информация обрабатывается и в случае рассогласования фактической ситуации с заданными условиями решается компромиссная задача оптимизации с выдачей необходимых управляющих импульсов на исполнительные механизмы с учетом величины выбранного критерия, например минимальной суммы энерготехнологических затрат (рис. 148).



Рис. 148. Методическая структура программного модуля

Для формализации процедуры расчета материальных балансов в динамике все технологические потоки закодированы в виде двумерного массива. Первой координате поставлены в соответствие номера материальных потоков, под которыми они выступают в технологической схеме, второй координате — цифровые индексы компонентов этих потоков.

Если мерой времени выбрать число тактов расчета мгновенного материального баланса системы, то, пользуясь известными закономерностями формальной кинетики, можно записать выражения для определения константы скорости изменения концентрации материальных потоков.

Таким образом, объектами движения в описываемых условиях псевдинамики являются компоненты материальных потоков. Источником движения служит информация о механизме удержания компонентов материальных потоков в структуре продукции, на основании чего можно рассчитать концентрацию предшествующей части потока и переприсвоить это значение последующей.

Оптимизирующий блок в тренажере выступает в роли квалифицированного коллектива инженеров и рабочих основного производства, который в ответ на изменившиеся условия рынка, предписания руководящих органов или требования по охране окружающей среды отыскивает адекватное решение в виде нового наилучшего технологического режима. Причем квалификация этого коллектива позволяет ему никогда не ошибаться в выборе ответа на изменившиеся обстоятельства.

Если, например, в ответ на конкретное увеличение цены на энергоносители в результате решения задачи оптимизации потребуется изменить расходы упрочняющих добавок или степень помола волокна на вычисленную величину, то можно не сомневаться, что поиск вручную другого решения окажется пустой тратой времени.

6.3.9. Проблемные ситуации

Оперативными переменными, определяющими облик очередной проблемной ситуации, являются:

- конкурентоспособность технологии (качество и себестоимость продукции, коммерческий спрос на нее и рыночная цена);

- степень безотходности технологии (степень превращения сырья в готовую продукцию, процент перерабатываемых отходов);
- степень бессточности технологии (доля пресной воды в составе производственной, доля речной воды в составе пресной);
- степень наукоемкости технологии (удельные расходы энергии на каждую технологическую операцию, на деминерализацию оборотной воды, очистку сточной воды от взвешенных и растворенных веществ, очистку газовых выбросов);
- ценовую ситуацию на рынке ресурсов;
- юридические основы рационального природопользования (цена сброса в реку и выброса в атмосферу загрязняющих веществ, цена вывоза отходов на свалку).

6.3.9.1. Конкурентоспособность технологии (качество и себестоимость продукции, коммерческий спрос на нее и рыночная цена). При анализе текущей ситуации следует исходить из того, что в переживаемое нами время «рынок продавца», диктующего свои цены покупателю, постепенно превращается в «рынок покупателя», в котором производитель утрачивает диктаторский статус.

При рыночной экономике покупатель всегда реализует право свободного выбора своей потребительской выгоды.

Поэтому всегда следует обращать внимание на качество продукции и ее рыночную цену с учетом того, что подобную же продукцию может предложить покупателю другой производитель, который предусмотрел увеличение доли интенсивной составляющей технологии.

6.3.9.2. Степень безотходности технологии. Степень безотходности является главной характеристикой, отражающей уровень наукоемкости технологии. Полнота превращения сырья в готовую продукцию зависит от научных разработок по управлению термодинамическим равновесием и кинетикой химических реакций, которые, как правило, обратимы и не идут до конца.

Но малая степень превращения сырья в продукцию еще не говорит о том, что все сырье, не превратившееся в продукцию, является отходами.

Часть его может рассматриваться как оборотный брак, способный к повторной переработке. Однако существует и часть сырья, не превратившегося в продукцию, которая не может (пока) быть направ-

лена на повторное использование. Вот это и есть настоящие отходы, подлежащие вывозу на свалку.

Следует иметь в виду, что любая технологическая линия имеет паспортную производительность, поэтому увеличение доли оборотного брака будет вызывать пропорциональное уменьшение доли сырья, поступающего на первую стадию. В предельном случае может оказаться, что продукция должна делаться не из сырья, а из оборотного брака. В калькуляции все статьи расходов относятся к тонне продукции, готовой к продаже.

Псевдобезотходная технология

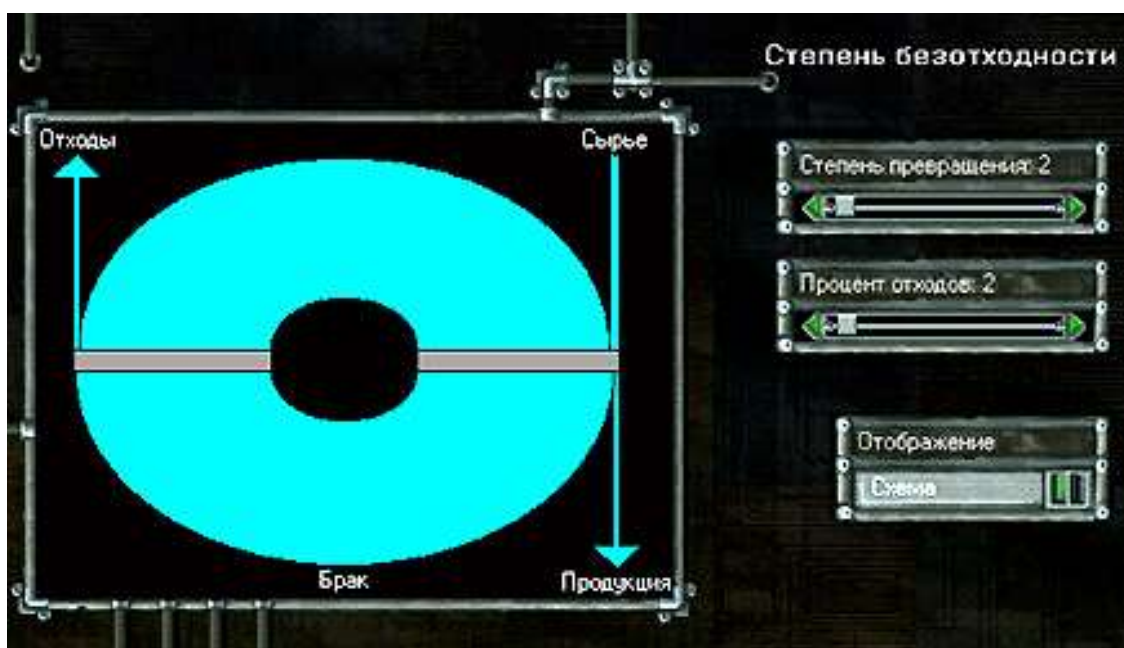


Рис. 149. Псевдобезотходная технология

Видимость благополучия. Ведь отходов-то нет. Отчетные рапорты красивые. Окружающую среду не загрязняем!

А какая же затратная технология! – Страшно подумать!

Но если эти затраты не из своего кармана . . .

Кто платит? За что платит? Сколько платит?

Вам это ничего не напоминает?

Технология с максимальным количеством отходов

Полностью беспомощная технология. Людей, связанных с такой технологией, и специалистами назвать нельзя. Они ничего не ценят и не понимают. Даже комментировать стыдно действия таких организаторов производства (рис. 150).

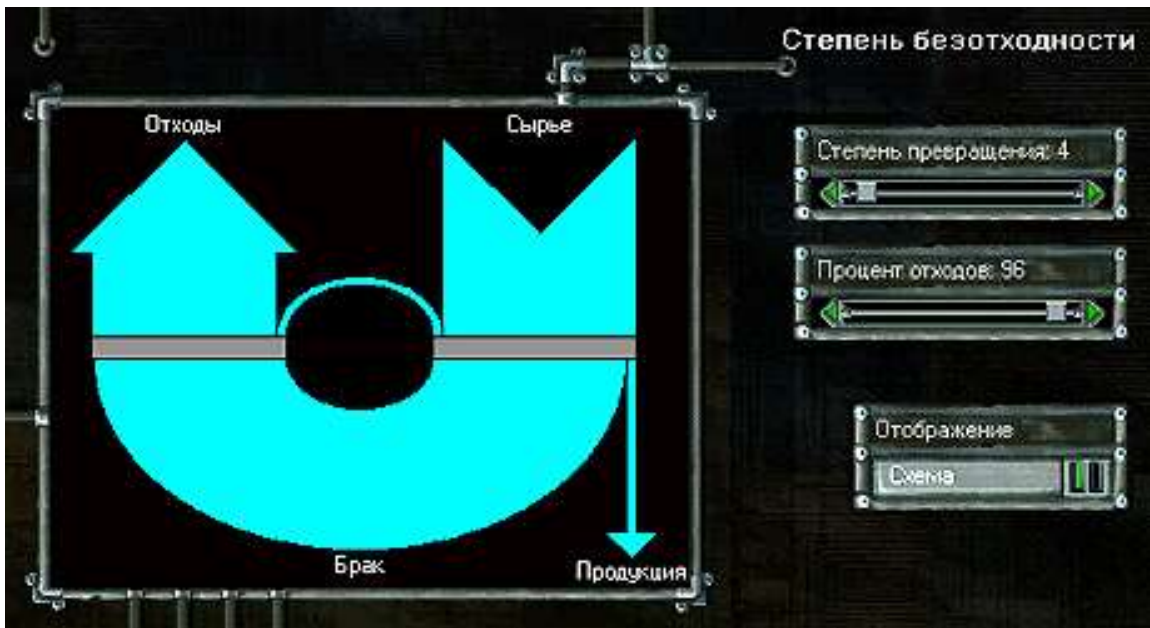


Рис. 150. Технология с максимальным количеством отходов

Идеальная безотходная технология

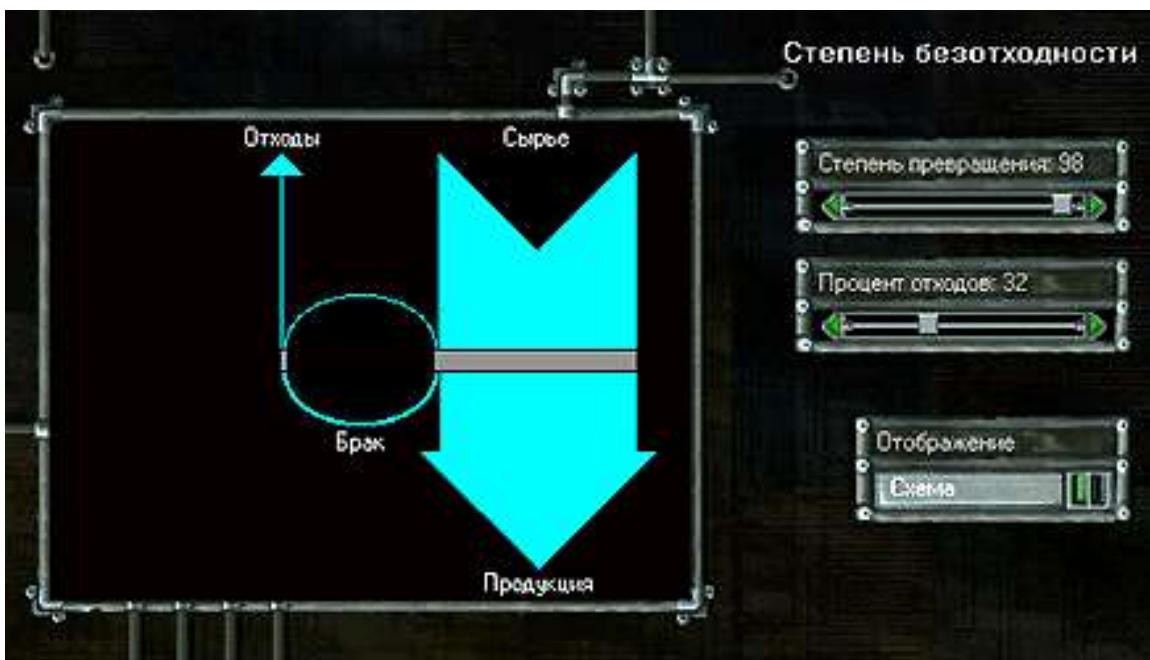


Рис. 151. Идеальная безотходная технология

Юному, энергичному, умному поколению, патриотам своей страны, детям своего народа. С наилучшими пожеланиями (рис. 151).

Реальная малоотходная технология

Эта картинка адресуется тем, кто любит и умеет рассуждать (рис. 152).

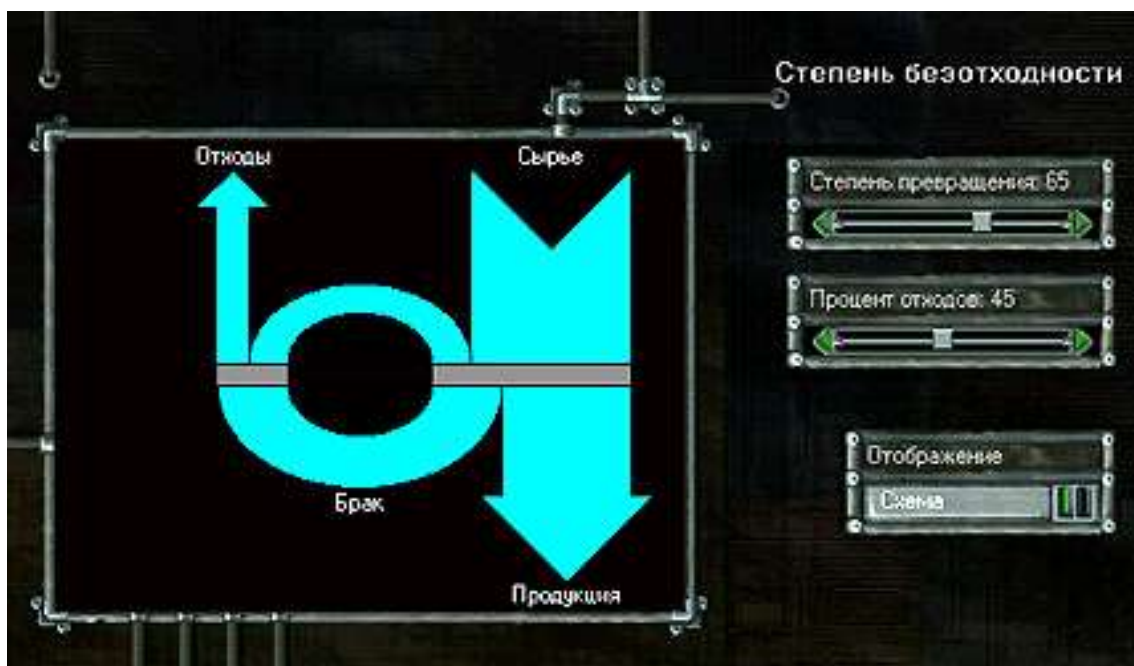


Рис. 152. Реальная малоотходная технология

6.3.9.3. Степень бессточности технологии. Технически бессточную технологию осуществить несложно — просто отказаться от использования речной воды, а все производство перевести на оборотную. Но при увеличении степени водооборота в рециркулирующих потоках будут накапливаться загрязнения, которые приведут к ухудшению качества продукции. Чтобы добиться требуемого качества придется увеличивать расходы упрочняющих добавок, а это будет удорожать продукцию (рис. 153).

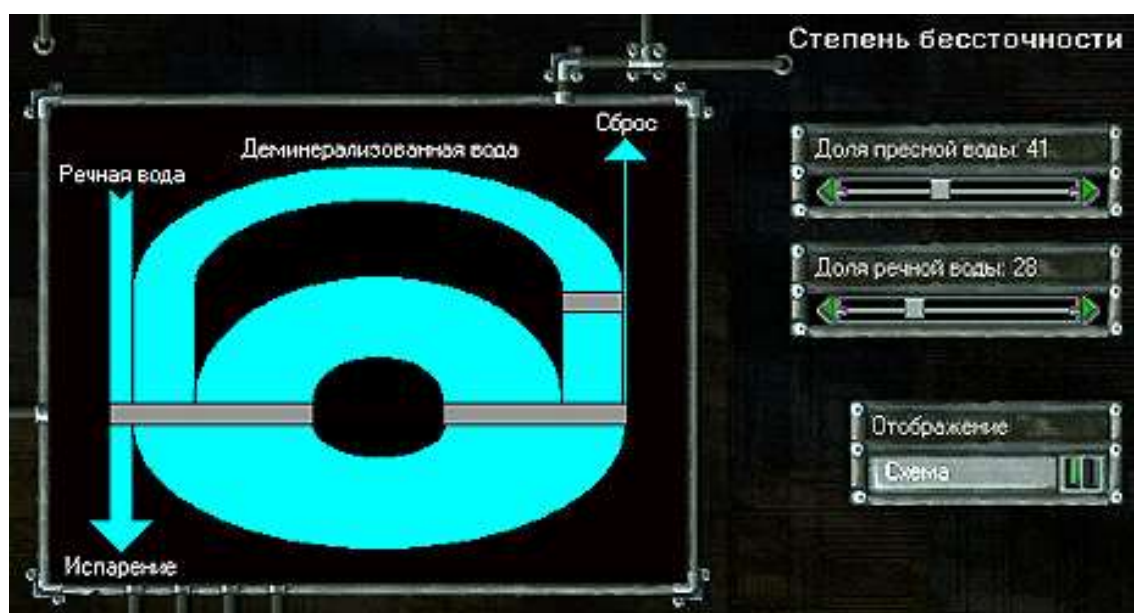


Рис. 153. Реальная бессточная технология

Следует обратить внимание на то, что качество продукции зависит только от доли пресной воды в составе производственной. Но пресная вода бывает не только речной. Такую воду можно получать из оборотной путем ее деминерализации. Значит, снижения качества продукции можно избежать даже при отказе от использования речной воды. Вот это и будет настоящая бессточная технология, основанная на научных исследованиях, оптимизации условий производства и применении современного оборудования.

Создать бессточную технологию по настоящей программе можно путем приравнивания нулю доли пресной воды в составе производственной и доли речной воды в составе пресной.

Бессточная технология I типа

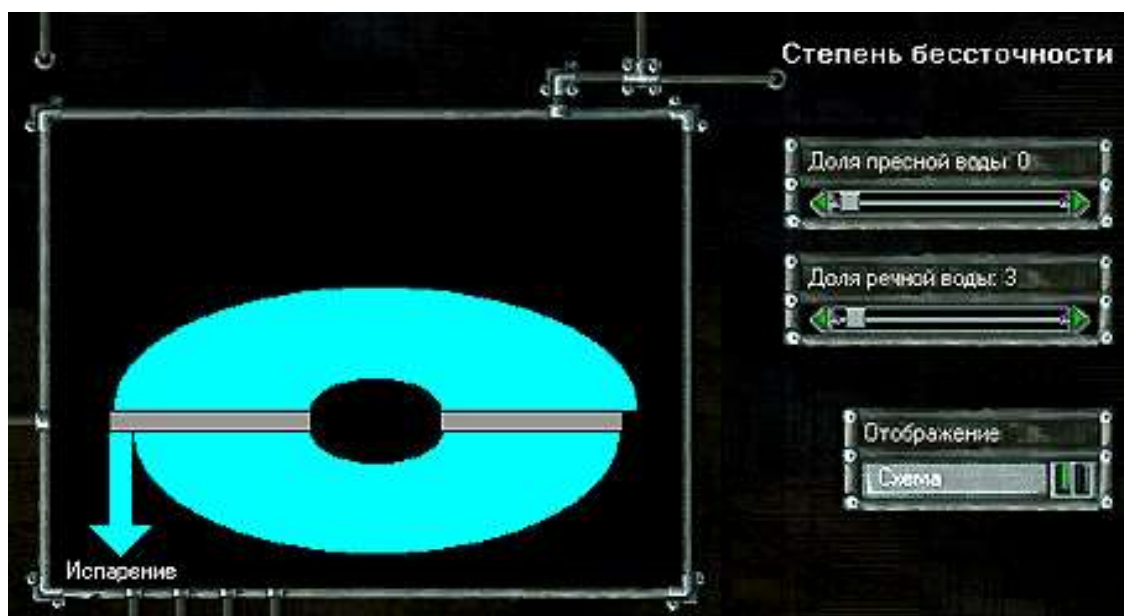


Рис. 154. Бессточная технология I типа

Речная вода расходуется только на восполнение потерь на испарение и уход из системы в виде сорбционно и осмотически связанной влаги в составе готовой продукции. Вся потребность производства покрывается оборотной водой, в которой накапливаются электролиты в рециркулирующих потоках, что ухудшает качество продукции и увеличивает ее себестоимость (рис. 154).

Технология с максимальным объемом сточных вод

Вся потребность производства покрывается речной водой, поэтому после использования она превращается в избыточную сточную воду и приводит к загрязнению водоема.

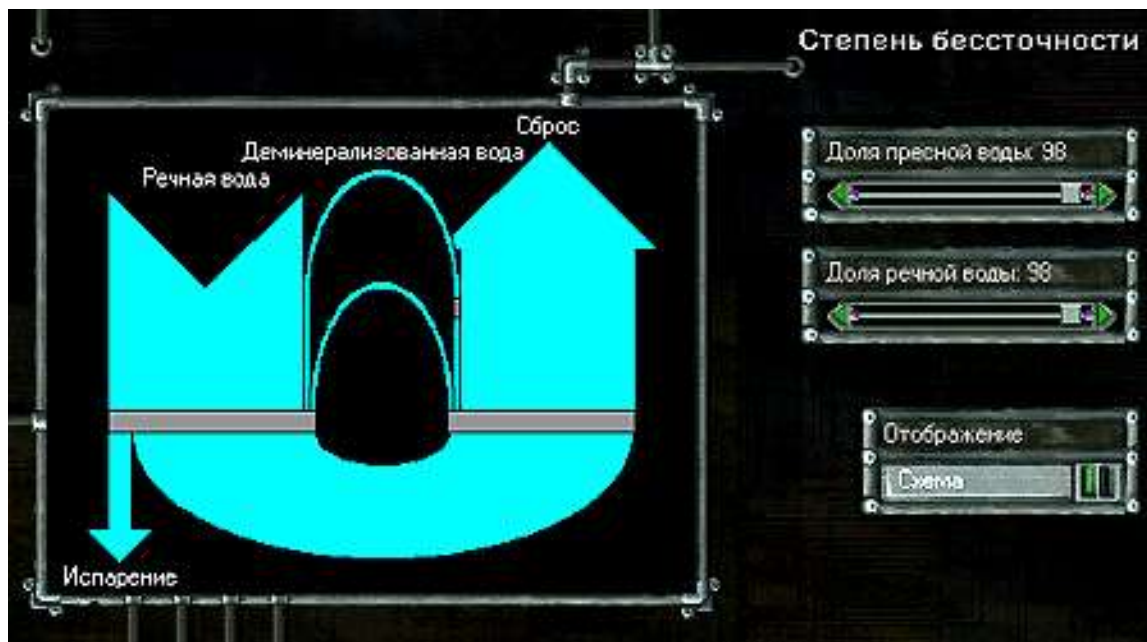


Рис. 155. Технология с максимальным объемом сточных вод

Рециркулирующих потоков воды в схеме нет, поэтому в системе не накапливаются электролиты, вредно влияющие на протекание технологических процессов, и качество продукции оказывается высоким.

Решающим оценивающим фактором технологии выступает размер оплаты ущерба, нанесенного окружающей среде (рис. 155).

Бессточная технология II типа

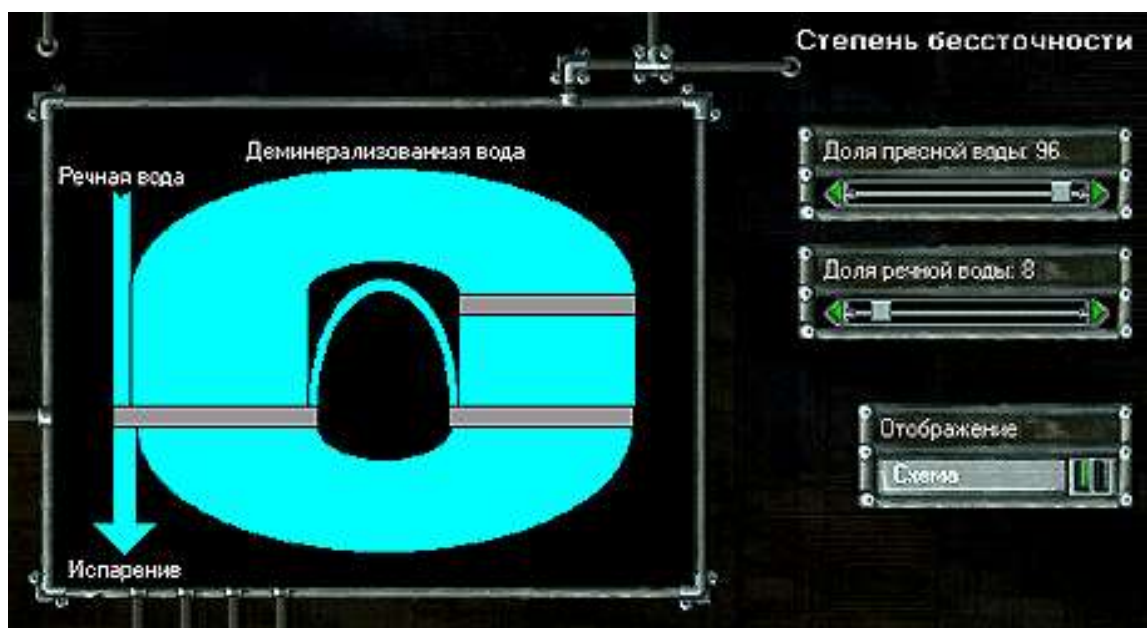


Рис. 156. Бессточная технология II типа

Речная вода расходуется только на восполнение потерь на испарение и уход из системы в виде сорбционно и осмотически связанной влаги в составе готовой продукции. Вся потребность производства покрывается деминерализованной водой. Качество продукции в этом случае получается высокое, загрязнение окружающей среды отсутствует, но технология оказывается разорительной для предприятия из-за высокой стоимости деминерализации оборотной воды (рис. 156).

Экономические особенности системы водообеспечения. Вода, которая собирается в сборнике осветленных вод, является исходной для обеспечения нужд всего производства в оборотной воде. Если бы не содержание в этой воде растворенных солей, которые оказывают вредное воздействие на протекание технологических процессов коагуляции латекса, промывки одежды машины и на состояние водоема, принимающего стоки, то система водоснабжения могла быть с максимальной степенью водооборота. Точнее, свежая речная вода не потребовалась бы совсем.

Но поскольку вода, поступающая в сборник осветленных вод является кислой, то покрытие потребностей в воде при роспуске макулатуры в гидроразбивателе не может обеспечиваться только оборотной водой. Технически это осуществимо, и в настоящее время в практике работы многих предприятий в гидроразбивателях используется только оборотная вода. Однако это заведомо влечет за собой ухудшение качества продукции, увеличение ее себестоимости и загрязнение реки, принимающей стоки.

Вторая возможность обеспечения потребности в воде при роспуске макулатуры заключается в использовании опресненной, деминерализованной воды. С экологической точки зрения и с точки зрения качества продукции это техническое решение привлекательно, но оно неприемлемо с экономической точки зрения. Денежные затраты на деминерализацию приведут к банкротству предприятия.

Наиболее рациональный путь решения проблемы заключается в определении условий, при которых суммарные затраты на оплату деминерализации минимально необходимого количества оборотной воды, на оплату оптимальных расходов упрочняющих добавок и на возмещение ущерба, наносимого окружающей среде, будут минимальны. Другими словами, нужно найти такое соотношение между объемами воды, поступающей из сборника осветленных вод, объемом свежей речной воды и объемом деминерализованной воды, чтобы

смесь соответствовала требованиям к технологической воде регистрируемого и регулируемого солевого состава.

Работа узла деминерализации характеризуется стоимостью одного кубометра воды глубокой очистки. Стоимость кубометра зависит от способа деминерализации, производительности опреснительной установки, степени очистки воды от растворенных солей и проектной концентрации рассола.

6.3.9.4. Наукоемкость технологии. Наукоемкость технологии в тренажере представлена значениями удельных расходов ресурсов (в первую очередь энергии) для производства одной калькуляционной единицы продукции. Удельные нормы характеризуют степень современности и прогрессивности такого оборудования. В рабочем варианте программы зафиксирован технический уровень оборудования советских времен, хотя текущие значения параметров по запросу могут быть легко перенастроены.

К орудиям труда может быть отнесена системная математическая модель производства, входящая в состав обучающего программного модуля и позволяющая имитировать в динамике функционирование всего производственного комплекса.

Доля подготовки людей, владеющих профессиональными навыками, в тренажере представляет программный оптимизирующий блок, позволяющий для технических, экономических и экологических условий, сформированных с пульта, автоматически определять величину оперативных оптимальных управляющих технологических воздействий, которые обеспечат получение продукции заданного качества (если оно достижимо) минимальными затратами. При отключенном оптимизирующем блоке можно наблюдать возможные примеры невежественного управления необразованного персонала промышленного объекта.

6.3.10. Рабочий интерфейс и структура программного модуля

Компьютерный мультимедийный тренажер (рис. 157) имитирует в динамике функционирование промышленного комплекса утилизации волокнистых отходов.

Взаимосвязи в системе представлены семью технологическими операциями, которые объединены 26 материальными потоками. 25 управляющих параметров могут изменяться пользователем в зави-

симости от обстоятельств, складывающихся в результате природоохранной административной деятельности и конъюнктуры рынка.

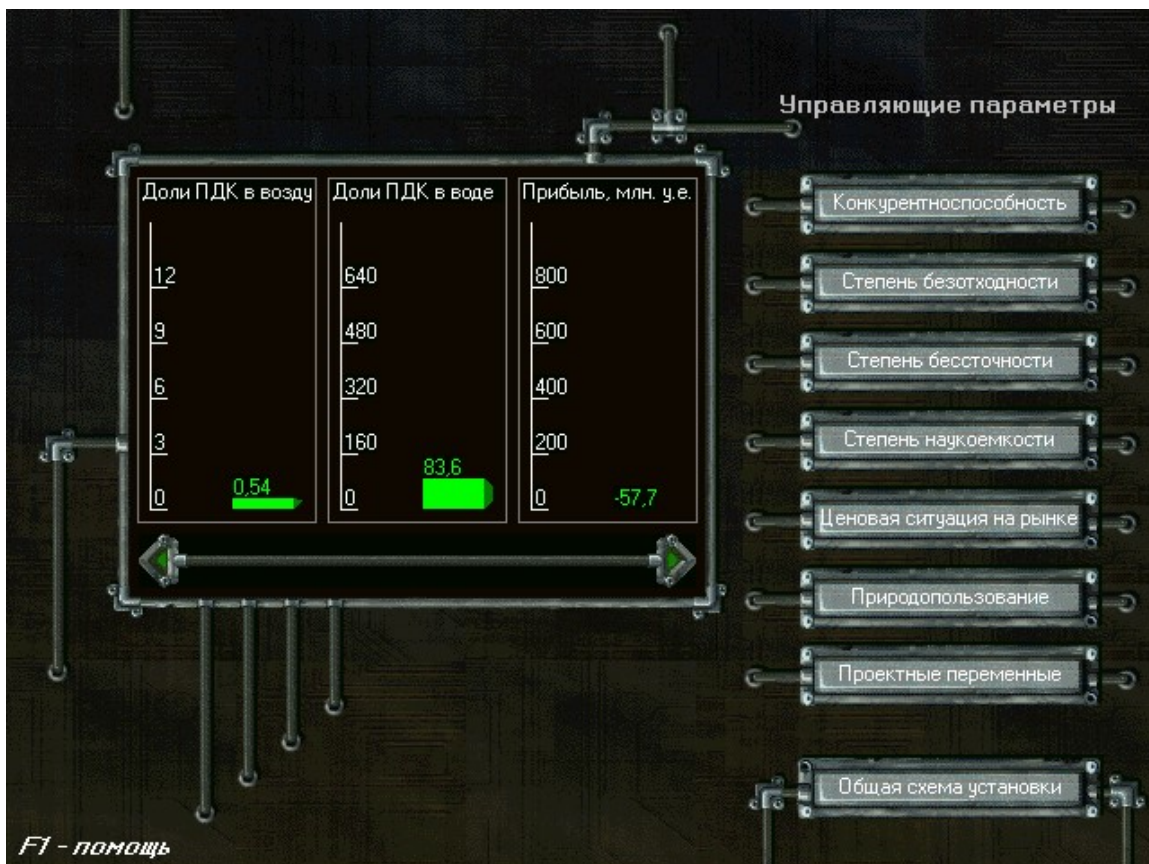


Рис. 157. Главное рабочее окно программного модуля

6.3.11. Запуск и управление работой программного модуля

Модуль запускается в работу автоматически при двойном нажатии ЛКМ при установке курсора на файл с именем *EcoTech.exe*.

Сначала демонстрируется видеофильм по экологической тематике.

Демонстрацию можно прервать нажатием на ЛКМ.

Затем по экрану снизу вверх перемещается текст Введения. Текст можно досрочно закончить нажатием на ЛКМ.

Возникает окно с четырьмя кнопками:

- старт;
- опции;
- помощь;
- ВЫХОД.

Опции позволяют настроить условия работы с тренажером
включить и выключить

- анимационные эффекты;
- звуковые эффекты;
- фоновую музыку;
- голос за кадром.

При нажатии на кнопку «Старт» возникает окно с технологической схемой (рис. 158).



Рис. 158. Структурная блок-схема технологического процесса

При работе с этим окном следует помнить, что:

- при нажатии на кнопки с названиями стадий технологического процесса вызывается файл помощи, в котором подробно описывается назначение и облик этой стадии процесса;
- при нажатии на красные стрелки с номерами технологических потоков возникает информация о количественном содержании компонентов в этих потоках.

Кнопка «Панель управления» вызывает окно главного меню программного модуля.

6.3.12. Организация вычислительных экспериментов

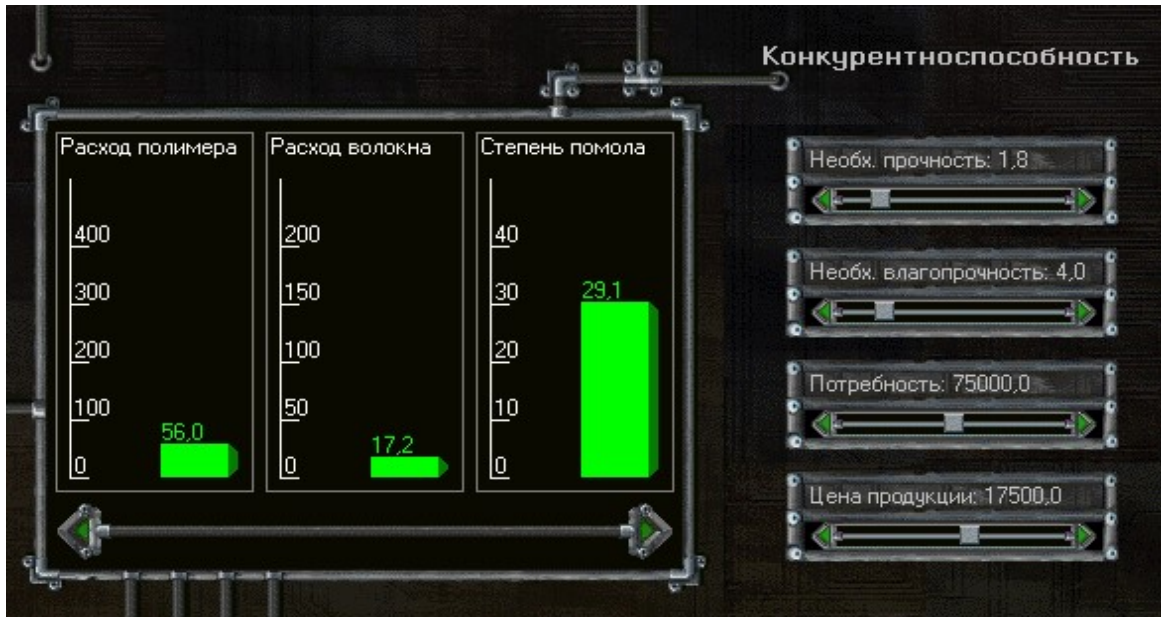


Рис. 159. Заказано низкое качество вырабатываемой продукции

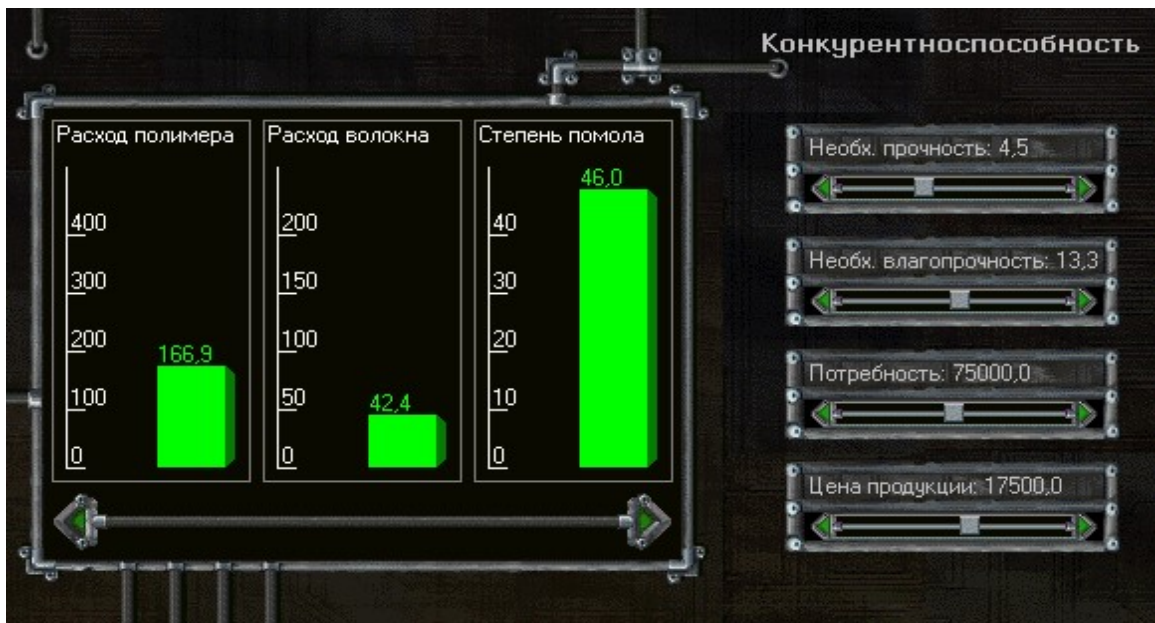


Рис. 160. Заказано повышенное качество вырабатываемой продукции

При организации вычислительных экспериментов важно помнить, что в зависимости от положения рычажка на факторных линейках синхронно будут изменяться выходные показатели оценки качества продукции, состояние экономики и экологии (рис. 159 и 160).

Эксперимент будет заключаться в формализации условий функционирования территориального производственного комплекса и интерпретации полученных при этом результатов.

6.4. РАЗРАБОТКА СИСТЕМ МОНИТОРИНГА ГОРОДА МИНСКА. ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ «MINSKESO»

6.4.1. Назначение и области использования программного модуля

Региональный мониторинг окружающей среды — это система слежения за процессами и явлениями, происходящими в воздухе, воде или почве в пределах обследуемого региона и предупреждение о создающихся критических ситуациях, когда антропогенные воздействия существенно превышают базовый фон, характерный для всей биосферы.

Все системы мониторинга предусматривают организацию сбора информации путем измерения качества окружающей среды в соответствующих точках съема показаний приборов или отбора проб на территории региона.

Основная идея программного модуля состоит в том, чтобы имитировать получение информации о качестве воздуха в любой точке территории города путем замены инструментальных натуральных измерений качества среды результатами вычислений концентрации примесей по математической модели загрязнения Минска.

Загрязнение атмосферы в тренажере представлено его математической моделью, полученной заранее разработчиками путем обработки результатов многолетних наблюдений.

Конкретный вид модели высокого порядка скрыт от внимания пользователей, поскольку «измерения» осуществляются автоматически в любой точке, где расположен курсор, на компьютерной карте города. Причем в каждой точке направление и скорость ветра определяются автоматически и случайным образом, что тоже напоминает процедуру съема информации в реальных условиях.

Таким образом, тренажер обеспечивает получение информации о загрязнении воздуха в любой точке Минска. Задача пользователя будет заключаться в таком размещении датчиков, чтобы наиболее ценная информация о качестве окружающей среды извлекалась либо за заданное время, либо при заданной стоимости, либо с заданной точностью.

Каждый вариант размещения датчиков будет сопровождаться автоматическим построением математической модели загрязнения по тому количеству и качеству информации, которые получены в результате реализации опытного, пробного варианта.

Каждая эмпирическая модель варианта дает возможность получить карту концентрационных полей по каждому загрязняющему веществу и на основании этого осуществить анализ результатов и наметить рациональную коррекцию системы сбора информации для очередного хода.

Удачность или неудачность размещения датчиков характеризуются коэффициентом парной корреляции между двумя признаками – выборкой результатов расчетов по базовой, эталонной модели и выборкой результатов расчетов по эмпирической модели в тех же точках факторного пространства и при тех же условиях, т. е. степенью приближения текущей оценки экологической обстановки к ее фактическому состоянию.

Программный модуль предназначен для получения навыков разработки систем мониторинга культурно-промышленных комплексов на примере города Минска с различными исходными данными и конечными характеристиками.

Программный модуль имеет целью ознакомить обучающихся с содержанием, последовательностью и результатами выполнения организационных и вычислительных процедур при оценке качества приземного слоя атмосферы в любом районе города, где расположены жилые массивы и промышленные предприятия, осуществляющие газовоздушные и пылевые выбросы вредных веществ. Использование настоящего программного модуля в арбитражных целях предприятиями и организациями не разрешается, так как он разрабатывался целевым назначением для учебного процесса в вузах.

6.4.2. Функциональные возможности программного модуля

- Программный модуль позволяет организовать сбор информации для оценки экологической обстановки города Минска с учетом выделенных ресурсов времени, средств контроля, стоимости системы мониторинга, а также с учетом требуемой точности математического описания.
- Программный модуль позволяет получать математические модели высоких порядков загрязнения атмосферы города на основании того объема информации, который удастся получить на предыдущем этапе.

- Программный модуль позволяет получать графические картины концентрационных полей загрязняющих веществ в условиях сканирования по скорости и направлению ветра, что позволяет решать причинно-следственные проблемы по интерпретации результатов и определению возможных виновников загрязнения.

- Программный модуль позволяет рассчитать необходимое количество стационарных постов контроля и мест их размещения на территории города.

6.4.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

MinskEco.exe Главный исполняемый файл программного модуля

Geo.exe Зависимый исполняемый файл

MinskEco.hlp Файл помощи

Geo.hlp Файл помощи

6.4.4. Рабочий интерфейс и структура программного модуля

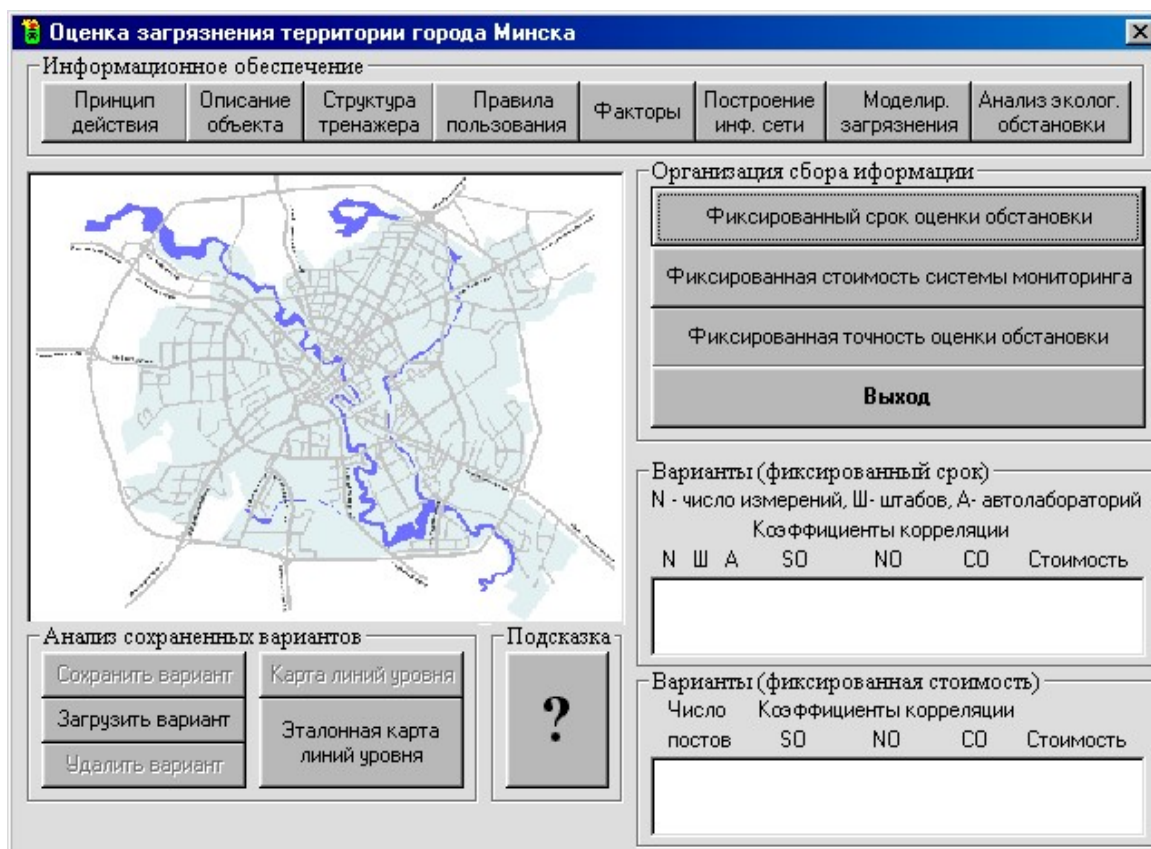


Рис. 161. Рабочий интерфейс программного модуля

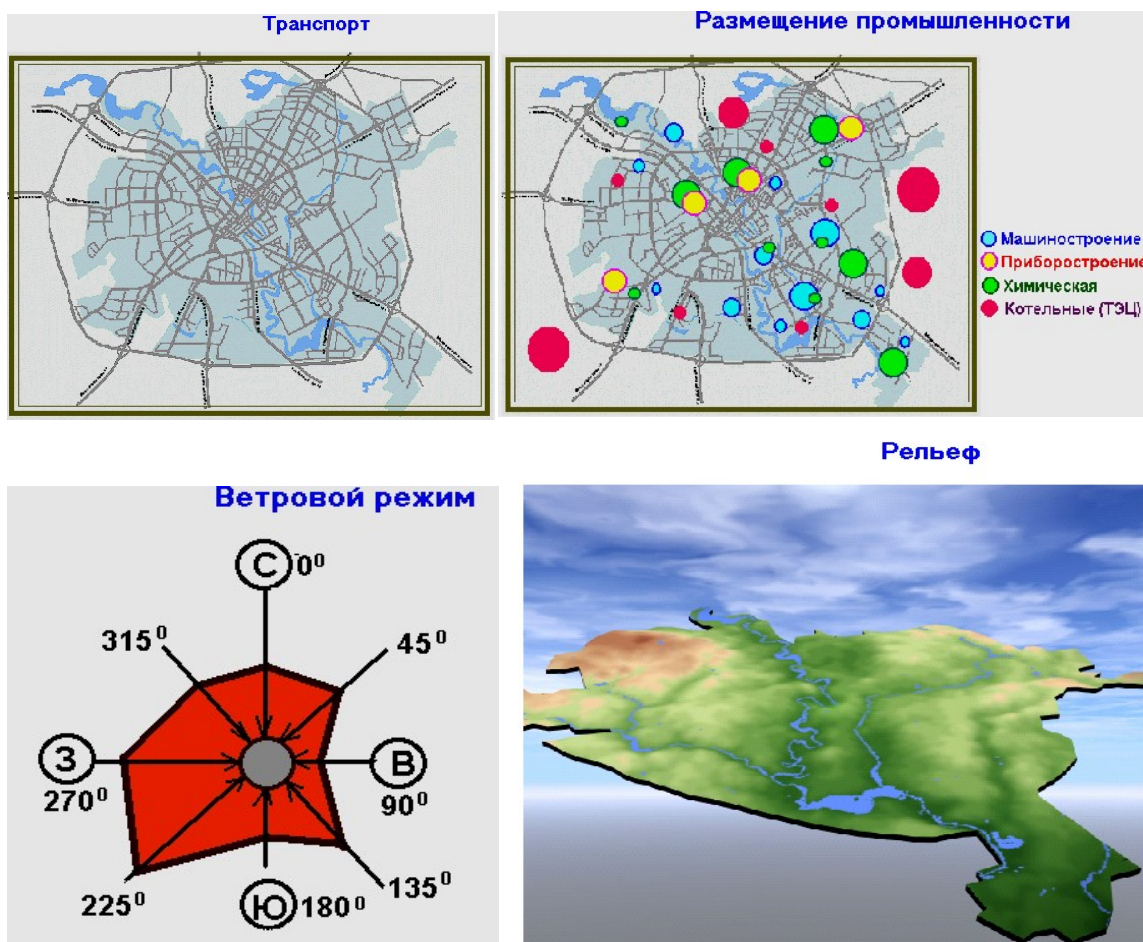


Рис. 162. Некоторые иллюстрации информационного обеспечения программного модуля

6.4.5. Теоретические основы программного модуля

Если для создания системы мониторинга города главное значение имеет время, за которое необходимо собрать максимально возможное количество экологической информации, в максимальной степени отражающее реальное положение дел, то в основу процесса выполнения поставленной задачи должны быть положены следующие конкретные значения исходных данных:

- срок представления конечной информации;
- какое количество передвижных автолабораторий выделено в распоряжение исполнителя;
- какое количество диспетчерских пунктов (штабов или гаражей), из которых будут выезжать и куда будут возвращаться автолаборатории, предполагается использовать для выполнения работы;

- как распределить автолаборатории между штабами (сколько машин выделить каждому штабу);
- как разместить штабы по территории города;
- как организовать маршруты каждого автомобиля с учетом скорости передвижения по городу;
- как организовать пункты остановок автомобилей для производства замеров проб воздуха с учетом затрат времени на каждое измерение;
- предполагается, что все автомобили будут работать одновременно в течение всего срока, выделенного на сбор информации.

Если определяющим условием разработки системы мониторинга является ее стоимость, то главными параметрами проекта будет объем выделенных финансовых ресурсов и стоимость одного стационарного поста наблюдений. При делении одной величины на другую получается количество датчиков, которые нужно рационально разместить на всей площади территории города, для съема информации в каждой конкретной точке.

Наилучшей системой следует признать такую, при которой созданная информационная сеть способна обеспечивать оценку качества атмосферного воздуха, максимально правильно описывающую экологическую обстановку в городе (максимальное значение коэффициента парной корреляции между значениями концентраций загрязняющих веществ, вычисленными по опытной модели, и ее арбитражному эталону).

Организация сбора информации при разработке систем мониторинга культурно-промышленных комплексов методически обеспечена слабо, поэтому в настоящее время определение необходимого и достаточного количества стационарных пунктов слежения, а также их рационального размещения на территории осуществляется, как правило, интуитивно.

С целью формализации процедуры принятия решения о требуемом количестве источников информации для описания загрязнения территории культурно-промышленного комплекса с заданной точностью, а также для вычисления координат их рационального размещения предложено рассматривать некоторую замкнутую область S , задаваемую массивом пар смежных точек границы области $M = [(x_i, y_i)], I = 1, n$.

Область S может представлять собой, например, контур карты города, что позволяет визуально соотносить участки области S с местоположением конкретных транспортных магистралей, промышленных или культурных объектов на территории комплекса.

На начальном этапе создания методики сбора информации о загрязнении окружающей среды необходимо располагать математической моделью загрязнения территории города рассматриваемым веществом $Z = f(F_1, F_2, \dots, F_k)$, которая имитировала бы процесс измерения качества воздуха в приземном слое атмосферы в любой заданной точке области S . Для получения модели необходимо разработать информационную сеть, в узлах которой должны содержаться данные многолетних наблюдений в зависимости от календарного времени, погодных условий, ветрового режима и других факторов F_1, F_2, \dots, F_k .

Информационная сеть строилась на основе проективных геометрий и полей Галуа. Для того, чтобы математическая модель адекватно описывала экологическую обстановку города, каждый фактор необходимо варьировать на достаточном числе уровней с тем, чтобы обеспечить получение аппроксимирующего полинома высокого порядка в виде отрезка ряда Тейлора:

$$Z = b_0 + \sum_{i,j=1, i \neq j}^k b_{ij} \cdot F_i \cdot F_j + \sum_{i=1}^k b_{ii} \cdot F_i \cdot F_i + \dots \quad (6.4)$$

Параметрами модели (6.4) выступали:

F_1 — абсцисса точки отбора пробы (в дальнейшем F_1 , будет выступать под именем x_1); F_2 — ордината точки отбора пробы (в дальнейшем F_2 , будет выступать под именем x_2); F_3 — направление ветра; F_4 — скорость ветра.

Выходной величиной Z являлась приземная концентрация SO_2 , NO_x , CO в городе Минске.

С использованием линеаризующих преобразующих соответствий и метода наименьших квадратов получена математическая модель (6.4) седьмого порядка. Поскольку временные ряды не соответствуют нормальному закону распределения выборочной совокупности, за дисперсию воспроизводимости принималась паспортная точность измерительных приборов.

6.4.6. Этапы решения задачи определения оптимального числа датчиков и рационального их размещения на территории города

Этапы решения задачи определения оптимального числа датчиков и рационального их размещения на территории города, для которого разрабатывается система мониторинга:

- выбор и обоснование факторов и уровней их варьирования для оценки экологической обстановки в городе при различных погодных условиях и ветровом режиме;
- выделение замкнутой области S факторного пространства, границы которой определяются контуром карты-схемы культурно-промышленного комплекса;
- построение информационной сети;
- получение таблично заданной функции по условиям информационной сети;
- получение полиномиальной модели загрязнения территории города Минска;
- выбор и обоснование значения евклидовой метрики d , определяющей точность описания области S ;
- определение значения варьируемого параметра r , задающего шаг координатной сетки, разбивающей область S на квадратные ячейки;
- формирование массива стоимости получения информации в каждой ячейке C_{ij} ;
- определение «экологического приоритета» (значимости и ценности информации) в каждой ячейке λ_{ij} ;
- построение координатной сетки;
- заполнение ячеек рассчитанными по модели (6.4) значениями концентраций загрязняющих веществ:

$$\bar{v}_{i,j} = (v_{i,j}^1, v_{i,j}^2, \dots, v_{i,j}^t); \quad (6.5)$$

- определение евклидова расстояния между ячейками $d_{(\alpha,\beta)(\xi,\chi)}$:

$$d_{(\alpha,\beta)(\xi,\chi)} = \sqrt{\sum_{k=1}^t (v_{\alpha,\beta}^k - v_{\xi,\chi}^k)^2}. \quad (6.6)$$

Значения евклидова расстояния можно использовать для разбиения области S на кластеры (зоны), представляющие некоторые типовые области загрязнения.

На основании S , ρ , d строится $0,1$ -матрица $B = [b_{ij}]$, такая, что $b_{ij} = 1$ в том и только в том случае, когда расстояние d_{ij} между ячейками i и j не превосходит d и $b_{ij} = 0$ в противном случае.

Пусть наконец для передвижных автолабораторий, используемых в качестве постов наблюдения, каждой ячейке (i, j) с учетом времени и расхода бензина приписана стоимость информации в ней ($C_1 \leq C_{ij} \leq C_2$).

Подготовленные таким образом исходные данные позволяют сформулировать и решить несколько важных прикладных задач.

Во-первых, можно найти минимальное взвешенное покрытие π^{\min} , т. е. такое множество строк из $|B|$, которые имеют минимальную стоимость и, по крайней мере, любая одна строка из π^{\min} содержит на пересечении с каждым из столбцов единицу. Эта задача позволяет определить необходимое число постов наблюдения и оптимальное их размещение в области S , при котором общие расходы на эксплуатацию станций оказываются минимальными.

Во-вторых, для известной суммы K выделенных денежных средств можно определить число и оптимальную конфигурацию (размещение) постов наблюдения обеспечивающие заданную точность оценки экологической обстановки.

Размещение стационарных постов наблюдений в ячейках информационной сети дает возможность использовать эти данные для оценки экологической обстановки в смежных ячейках области S со степенью точности, определяемой евклидовой метрикой d .

Таким образом, процедура определения необходимого числа датчиков и рационального их размещения на обследуемой территории для оценки экологической обстановки с заданной точностью сводится к решению хорошо известной NP-полной задачи о минимальном взвешенном покрытии $0,1$ -матрицы множеством строк (ЗМВП).

Специальный вариант этой задачи заключается в том, чтобы найти некое множество строк, суммарный вес которых не превышает K , таких, что они покрывают наибольшее число столбцов из SBS . Учитывая экологическую значимость центров загрязнения, каждой ячейке (ij) области S может быть приписан «экологический приоритет» λ_{ij} .

В этом случае станции наблюдения должны «накрывать» ячейки с максимальным суммарным экологическим приоритетом.

6.4.7. Алгоритм решения задачи поиска минимального взвешенного покрытия

Теоретически NP-полная задача может быть сведена к многократному решению ее специального варианта, причем такое сведение оказывается экспоненциальным. Поэтому целесообразно реализовать следующую схему приближенного решения:

а) исключить из матрицы столбцы, соответствующие экологически неинформативным ячейкам;

б) если решение задачи с учетом произведенного отсева столбцов все еще нарушает ограничение на стоимость K , то повторять а), пока это ограничение не будет выполнено или исключить из π^{\min} те строки, которые вносят минимальный вклад в число покрываемых столбцов.

Стартовой точкой алгоритма решения задачи являются выбор и обоснование величины отклонения $\Delta \mu$ -ой координаты вектора p_{ij} относительно ядра кластера.

Таким образом, ячейки попадают в один и тот же кластер, если расстояние между ними по каждой координате не превышает соответствующего отклонения $\Delta \mu$ ($\mu = 1, t$). На основании этого система получает решение и сравнивает его с оптимальным для NP-полной задачи или ее специального варианта.

В основе алгоритма поиска решений на больших 0,1-матрицах лежит принцип групповых резолюций, позволяющий отыскивать резольвенту $t\pi$ для группы синдромных столбцов матрицы покрытия $|B|$, что позволяет определить столбец α , содержащий минимальное число единиц.

Пусть p — текущее избыточное покрытие 0,1-матрицы, например, $p = \{i_1, i_2, \dots, i_t\}$. Столбец j называется синдромным для строки i_s ($s \in 1, 2, \dots, t$), если ни одна строка в π , кроме i_s , не содержит в столбце j единицу. Для каждой строки i_s в избыточном покрытии π есть синдромный столбец. Если у строки нет синдромного столбца, то она удаляется из π .

Далее строится подматрица $|B^*|$ для избыточного покрытия π , составленная из синдромных столбцов для строк из π (для

каждой строки – один столбец). Если $|B^*|$ собрана из столбцов j_1, j_2, \dots, j_t , тогда

$$W = \sum_{r=1}^t \omega_{ir}, \quad (6.7)$$

где ω_{ir} — наименьший вес строки, покрывающей столбец j_r .

Новый столбец j^* , называемый групповой резольвентой столбцов j_1, j_2, \dots, j_t , обладает свойствами уникальности и способностью покрываться минимальным взвешенным покрытием, если наименьшее еще не найдено.

6.4.8. Правила построения групповых резольвент

П 1. Если сумма W больше или равна весу наилучшего покрытия p , найденного к настоящему моменту (по крайней мере, одно покрытие p имеется всегда), то j^* содержит единицы в тех и только в тех строках, которые в $|B^*|$ содержат более одной единицы, и нули в остальных строках.

П 2. Если W меньше, чем вес наилучшего найденного покрытия, то из $|B^*|$ последовательно выводятся строки с наименьшими весами, покрывающими один или несколько синдромных столбцов, пока W не станет больше или равна весу наилучшего покрытия, после чего в j^* по правилу П 1 записываются единицы и добавляются в тех строках, которые были выведены.

П 3. Если j^* — нулевой столбец, то поиск наилучшего покрытия прекращается, так как оно не улучшаемо.

Алгоритм поиска минимального взвешенного покрытия строится подобно схеме ветвей и границ. На каждой итерации отыскивается резольвента j^* для текущего покрытия p . Затем отыскивается столбец в матрице с минимальным числом единиц. Если в этом столбце меньше единиц, чем в j^* , то для ветвления выбирается именно этот столбец, иначе выбирается групповая резольвента j^* . Ветвление выполняется по схеме, использующей две альтернативы:

- строка x покрывает используемый для ветвления столбец и входит в наилучшее покрытие;
- строка x покрывает используемый для ветвления столбец и не входит в наилучшее покрытие.

После выбора альтернативы производится редукция матрицы и повторение действий до тех пор, пока не сработает правило П 3, инициирующее откат в предыдущую вершину дерева поиска.

6.4.9. Запуск и управление работой программного модуля

6.4.9.1. Мониторинг с заданным сроком оценки экологической обстановки. При нажатии на кнопку «Фиксированный срок оценки обстановки» (рис. 163) на экране возникает окно «Фиксированное время оценки» (рис. 165).

С помощью этого окна можно задать имеющиеся ресурсы:

- число штабов (число автогаражей, из которых будут одновременно стартовать передвижные автолаборатории);
- число автолабораторий.
- необходимые расходы времени:
- срок оценки экологической обстановки;
- время, затрачиваемое на одно измерение;
- скорость передвижения автолабораторий по улицам города.

Несмотря на то, что траекторию для каждой автолаборатории на планшете программного модуля придется прокладывать последовательно, следует иметь в виду, что работать все автолаборатории будут одновременно. Время начала работы у всех автолабораторий будет одно и то же.

Рис. 163. Основные параметры варианта эколого-экономической игры «Разработка системы мониторинга с заданным сроком оценки экологической обстановки»

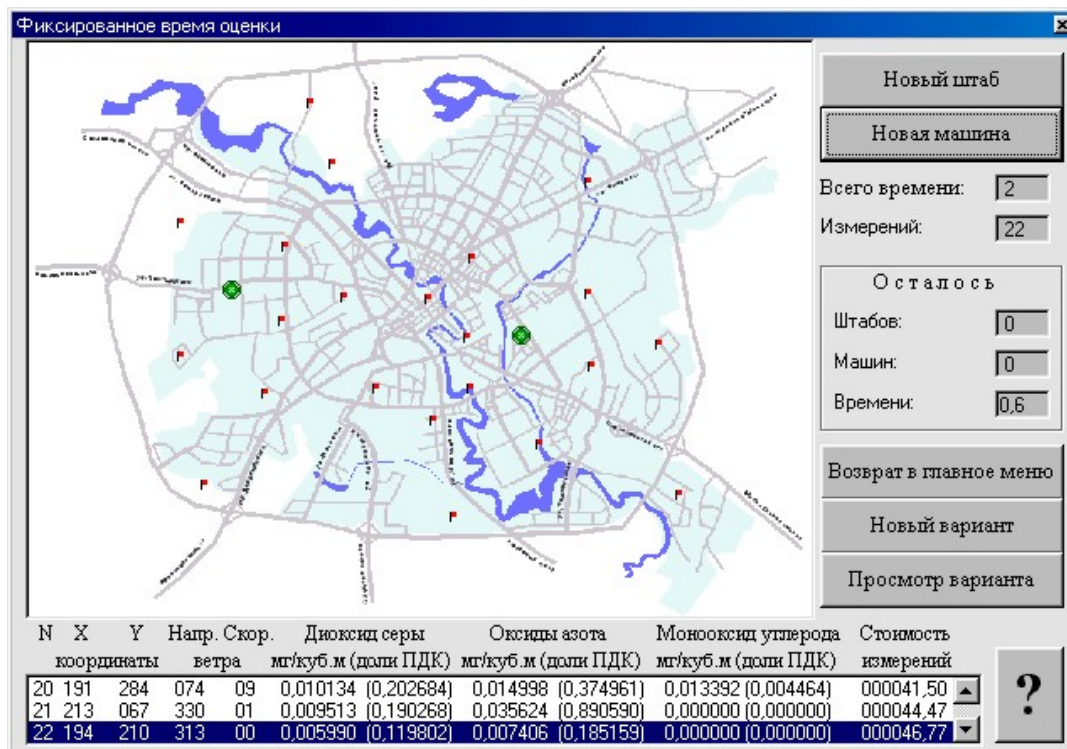


Рис. 164. Интерфейс программного модуля системы мониторинга воздушной среды города Минска с заданным сроком оценки экологической обстановки

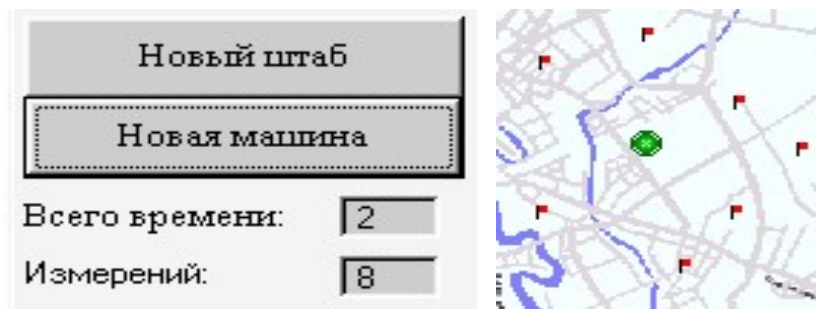


Рис. 165. Фрагменты окна интерфейса для размещения штабов (зеленая точка) и мест проведения измерений (маленькие красные флажки). Флажки ставятся под курсором при нажатии ЛКМ. При этом результат каждого измерения фиксируется в журнале (рис. 164)

N	X	Y	Напр. ветра	Скор.	Диоксид серы мг/куб.м (доли ПДК)	Оксиды азота мг/куб.м (доли ПДК)	Монооксид углерода мг/куб.м (доли ПДК)	Стоимость измерений
05	386	210	124	04	0,015153 (0,303055)	0,021096 (0,527403)	0,037666 (0,012555)	000008,34
06	402	377	323	08	0,012048 (0,240962)	0,016819 (0,420463)	0,000000 (0,000000)	000010,85
07	455	293	054	12	0,008032 (0,160635)	0,010499 (0,262469)	0,008594 (0,002865)	000012,75

Рис. 166. Журнал для записи результатов измерений

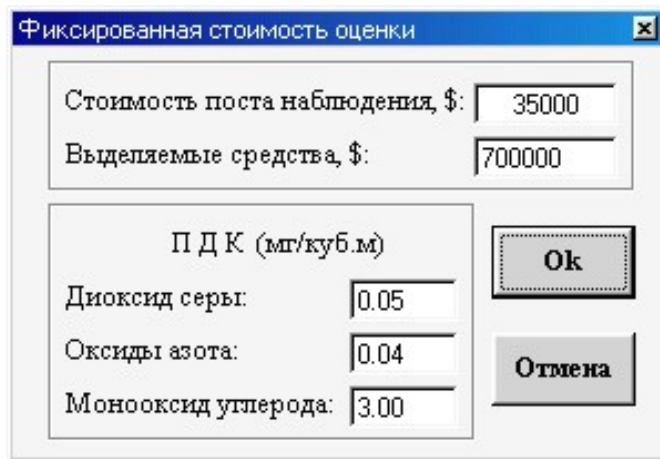


Рис. 167. Основные параметры варианта эколого-экономической игры

- стоимость одного поста наблюдения;
- выделенные финансовые средства.

Поделив сумму финансовых средств на стоимость одного поста контроля, получаем общее число источников информации, которые нужно рационально разместить на территории города.

6.4.9.2. Мониторинг с заданной стоимостью информационной сети. При нажатии на кнопку «Фиксированная стоимость оценки обстановки» (рис. 161) на экране возникает окно «Фиксированная стоимость оценки» (рис. 167).

С помощью этого окна можно задать имеющиеся ресурсы:

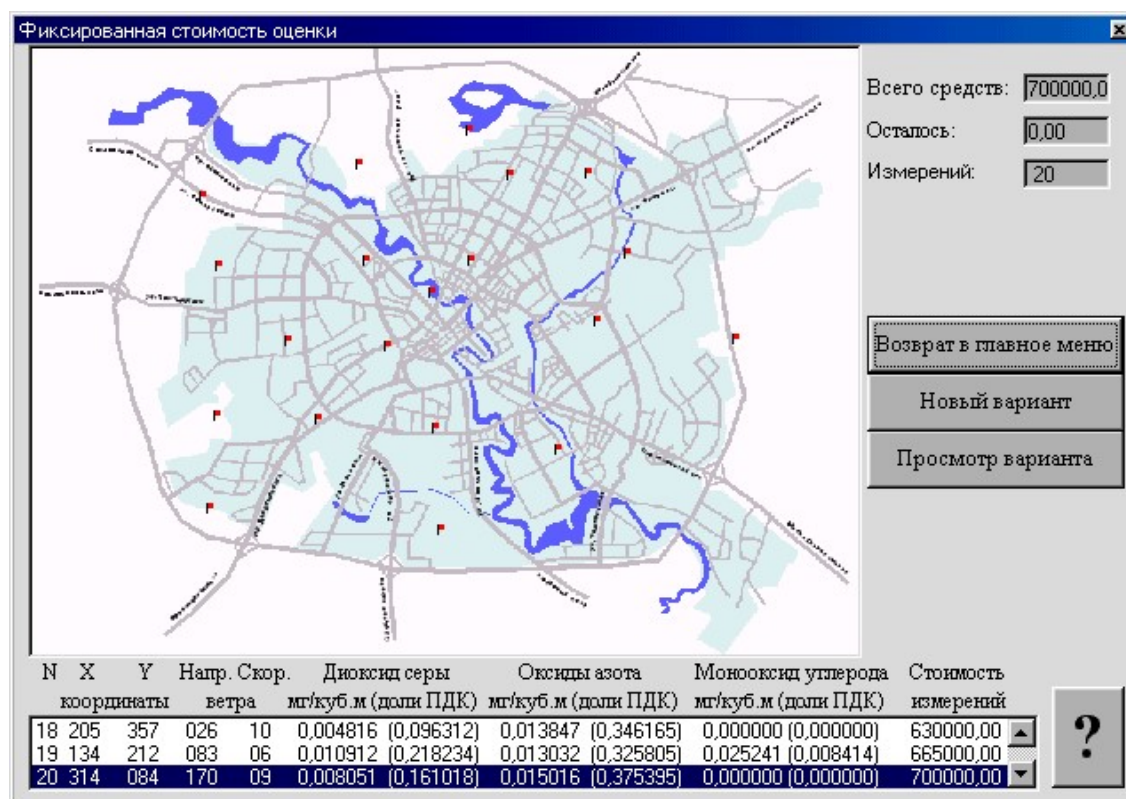


Рис. 168. Интерфейс программного модуля системы мониторинга воздушной среды города Минска с заданной стоимостью информационной сети

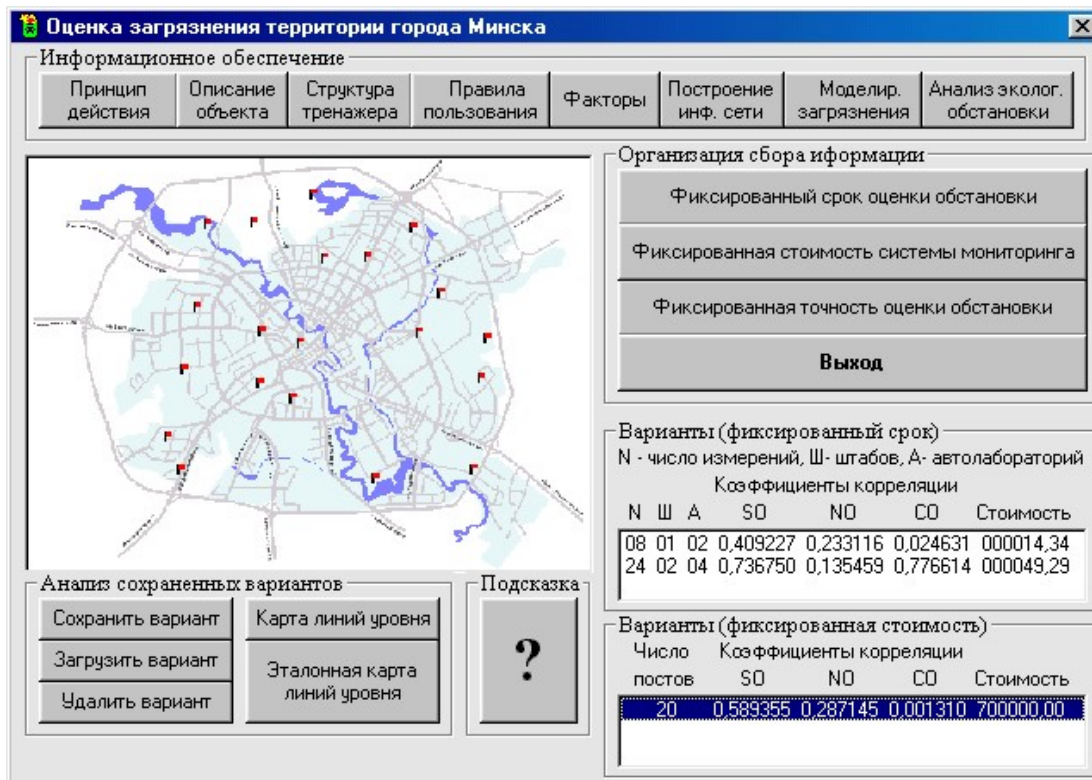


Рис. 169. Вид окна рабочего интерфейса после сбора экологической информации

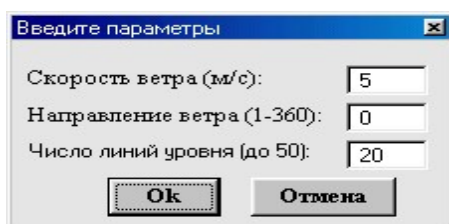


Рис. 170. Ввод параметров ветрового режима

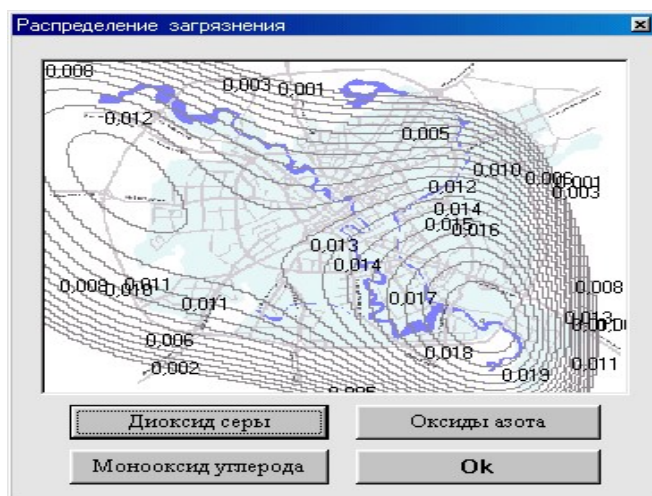


Рис. 171. Карта-схема загрязнения города

О рациональности размещения можно судить по значениям коэффициента корреляции между значениями концентрации загрязняющего вещества в точках отбора проб, вычисленными по модели, которую можно получить на основании собранного объема информации, и фактическими значениями концентрации в этих точках, полученными по базовой модели (рис. 169).

После нажатия на клавишу «Карта линий уровня» последовательно возникают два окна. Одно для настроек карты-схемы (рис. 170), другое — сама карта-схема (рис. 171) по условиям рис. 170.

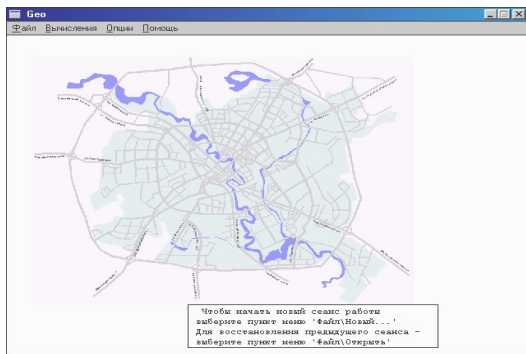


Рис. 172. Интерфейс

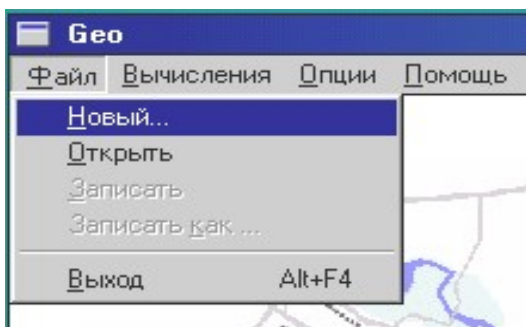


Рис. 173. Начало работы

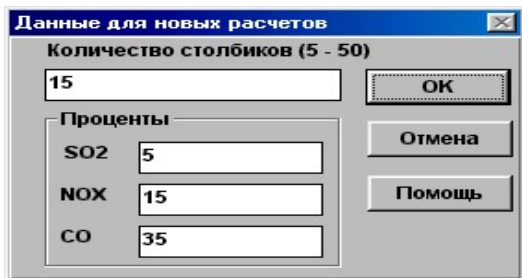


Рис. 174. Определение точности оценки экологической обстановки

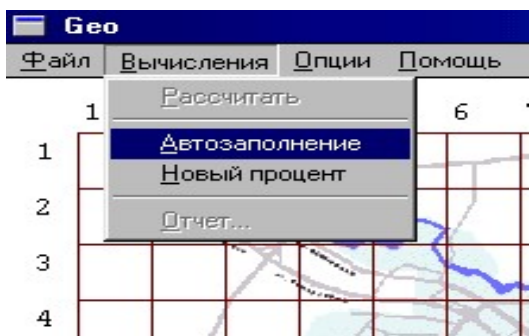


Рис. 175. Автозаполнение ячеек

6.4.9.3. Мониторинг с заданной точностью оценки экологической обстановки. Последовательность действий при работе с программным модулем.

1. Щелкнуть по кнопке «Фиксированная точность оценки обстановки» (рис. 161).

Появится диалоговое окно «Geo» (рис. 172).

2. В меню «Файл» выбрать пункт «Новый» (рис. 173).

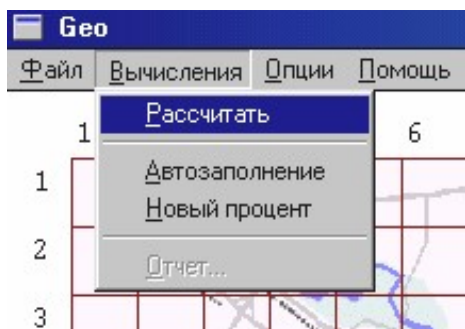
3. Заказать желаемое количество разбиений на столбики территории города. Чем больше будет заказано столбиков, тем точнее будет оценка (рис. 174).

4. Заказать значения евклидовых метрик d , исходя из условия, что меньшим значениям метрик будет соответствовать большая точность оценки. Смысл метрик в том, что загрязнение в данном пункте, отличающееся от загрязнения в соседних ячейках больше чем на d , будет отнесено к разным кластерам (рис. 177).

5. В меню «Вычисления» выбрать пункт «Автозаполнение» (рис. 175).

Теперь в каждой ячейке будут известны концентрации загрязняющих веществ (рис. 177).

6. В меню «Вычисления» выбрать пункт «Рассчитать» (рис. 176).



Появится диалоговое окно «Вычисление» с предупреждением о необходимости затрат времени на исполнение (рис. 178).

7. Щелкнуть по кнопке «Старт».

Появится окно с результатами вычислений (рис. 179).

Рис. 176. Расчет

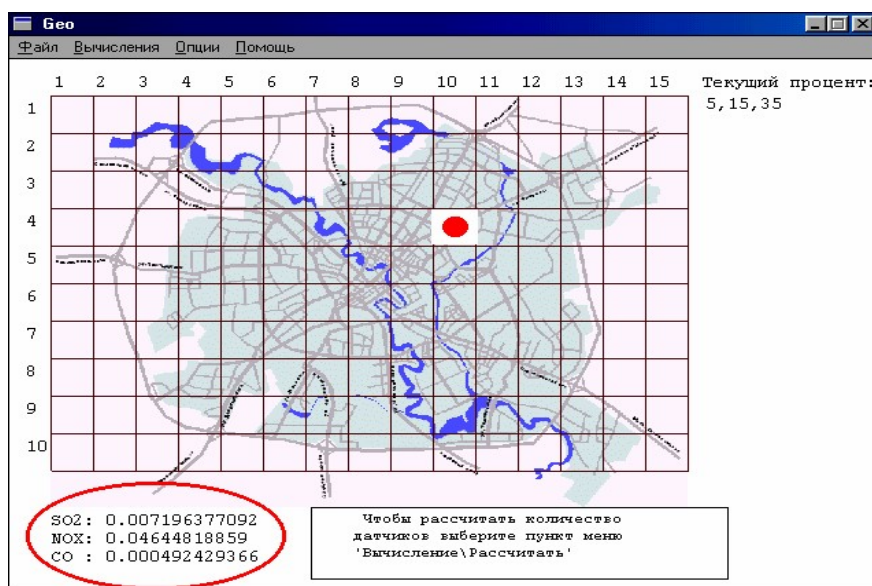


Рис. 177. Решетка с данными

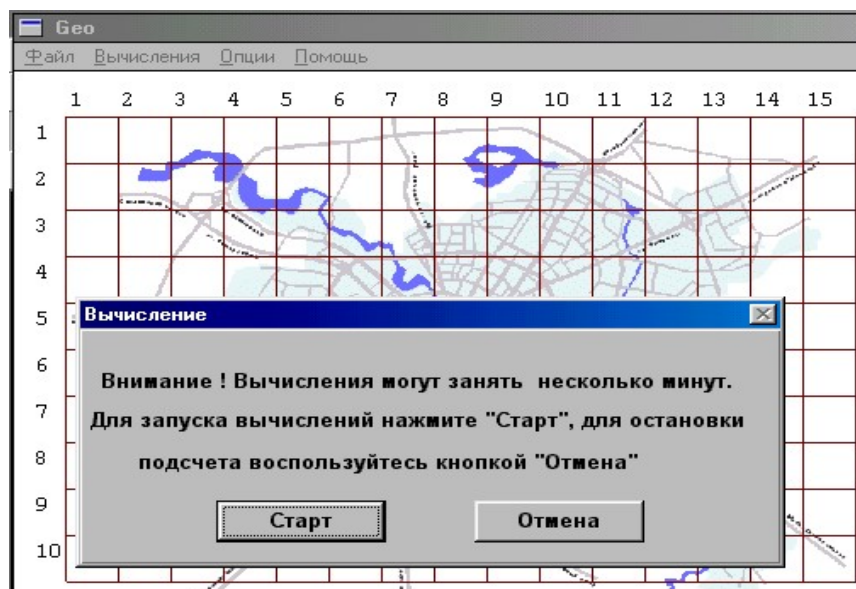


Рис. 178. Запуск на решение

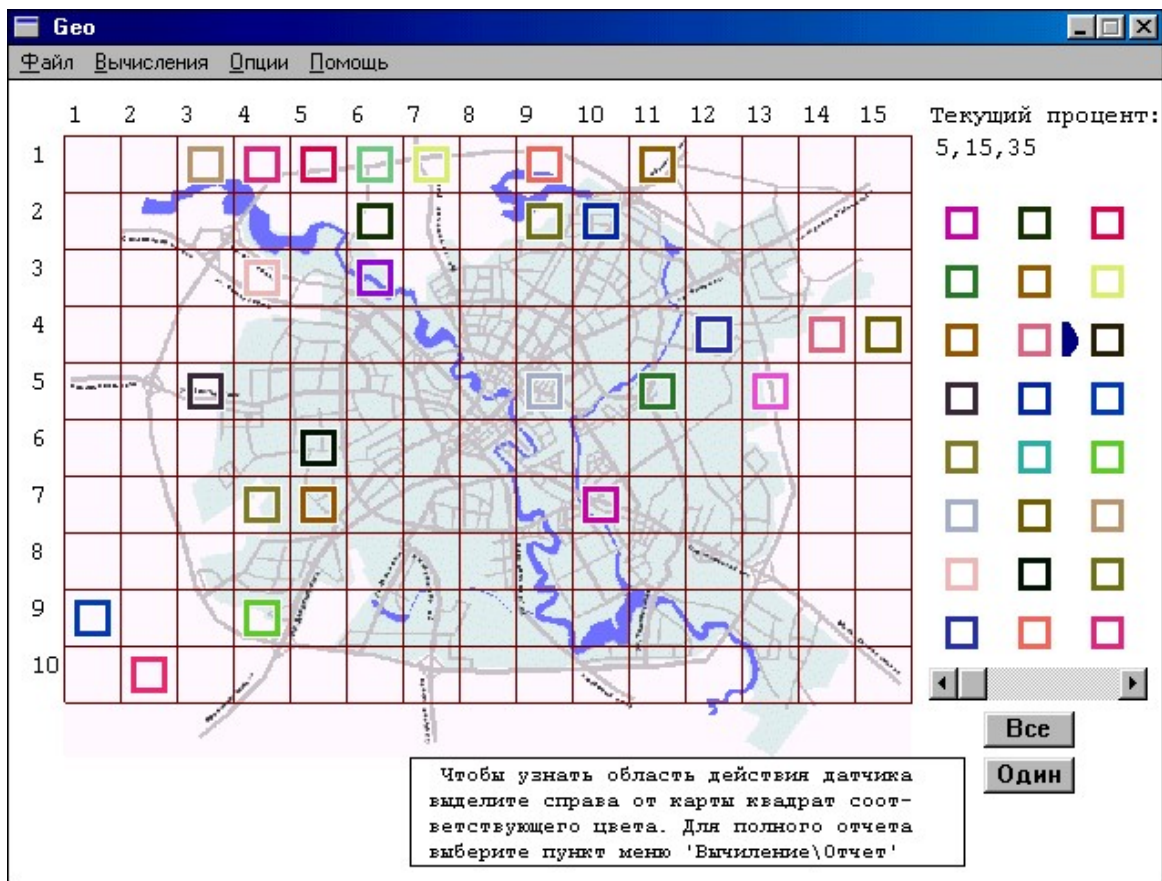


Рис. 179. Результат решения задачи определения необходимого количества (для текущего варианта условий — 26) и рационального размещения стационарных пунктов экологического наблюдения

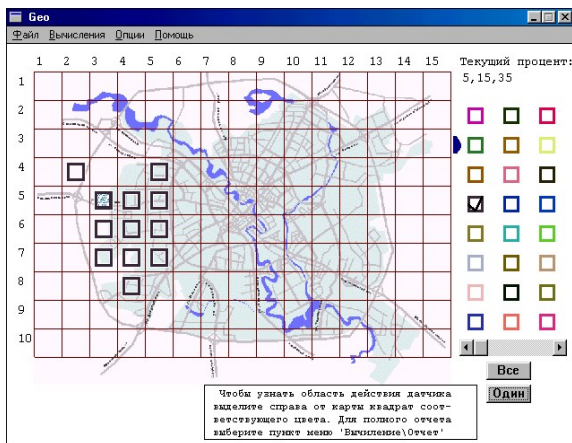


Рис. 180. Область одного кластера

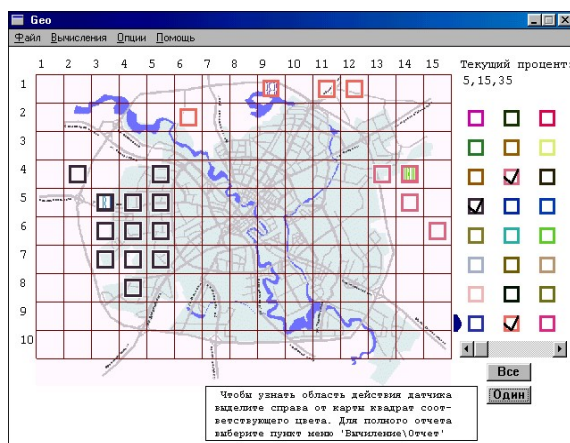


Рис. 181. Области двух кластеров

6.4.10. Вычислительный эксперимент для сравнительного анализа вариантов системы мониторинга воздушной среды

Построение плана вычислительного эксперимента осуществлялось путем направленного изменения параметров, задающих точность оценки экологической обстановки, в виде сочетаний значений шага координатной сетки (количества столбцов решетки, определяющих число ячеек в выделенной области территории города) и евклидовой метрики (отличий концентраций загрязняющих веществ, при которых соседние ячейки будут отнесены к разным кластерам).



Рис. 182. Карта-схема концентрационных полей загрязнения территории города Минска диоксидом серы

Комплекс моделей (6.4)–(6.7) дает возможность составить представление о распределении загрязнений по территории города. Полиномиальные модели (6.4) позволяют получить карты-схемы концентрационных полей трех загрязняющих веществ и анализировать экологическую обстановку в городе в зависимости от ветрового режима

путем закрепления на постоянном уровне значений направления и скорости ветра. Расположение в факторном пространстве следов факелов газоздушных выбросов позволяет выявить и оценить причинно-следственные связи между загрязнением и его источниками.

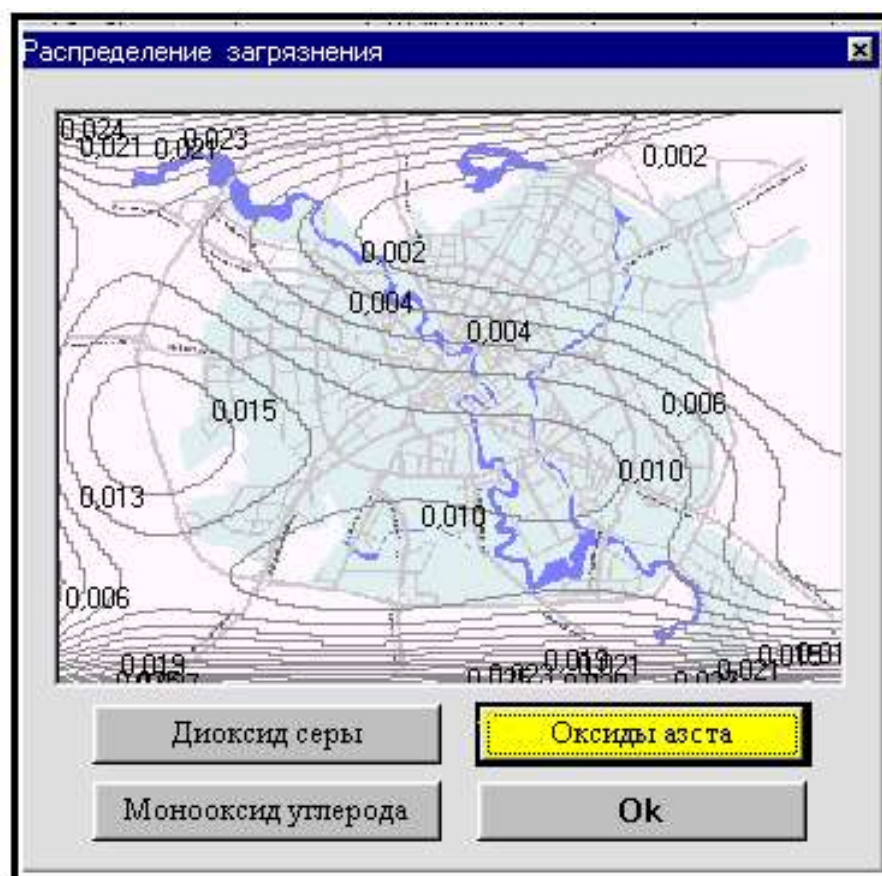


Рис. 183. Карта-схема концентрационных полей загрязнения территории города Минска оксидами азота

Как видно из рис. 182–184, диоксид серы сосредоточен, главным образом, в районе мощных промышленных предприятий, таких, как тракторный завод, мотовелозавод, шарикоподшипниковый, автозавод. Следует отметить, однако, что Заводской район нельзя считать единственным источником загрязнения города диоксидом серы. Вычислительный эксперимент на этом этапе показал, что при юго-западном направлении ветра со скоростью 2–5 м/с по территории перемещается след SO_2 от выбросов ТЭЦ-4. При скоростях ветра, больших 7–10 м/с выхлопные газы из высокой трубы ТЭЦ проносятся над городом, не загрязняя приземные слои атмосферы.

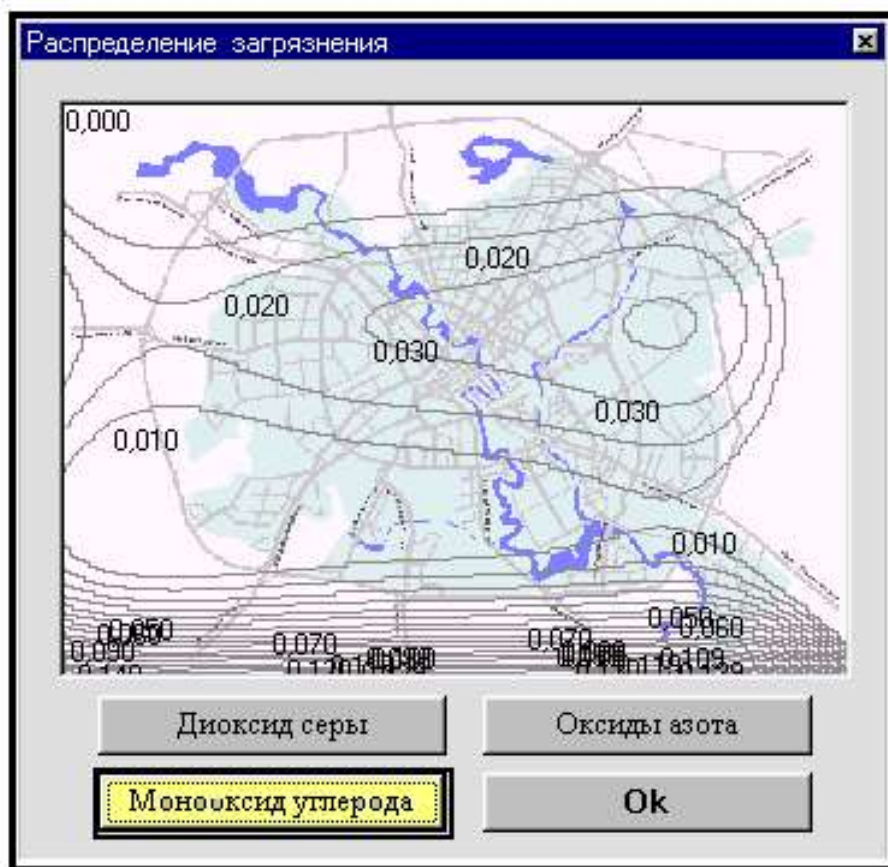


Рис. 184. Карта-схема концентрационных полей загрязнения территории города Минска монооксидом углерода

Оксиды азота более или менее равномерно распределены по территории города, что указывает на важную роль транспорта как наиболее многотоннажного источника загрязнения NO_x . Но при определенных условиях, подобных тем, которые фигурировали при анализе концентрационных полей SO_2 , вклад ТЭЦ-4 в загрязнение города оксидами азота может быть значительным.

По моделям (6.4) в центре каждой ячейки координатной сетки рассчитываются концентрации SO_2 , NO_x , CO . Естественно, что чем больше будет задано столбцов, определяющих размерность сетки, тем больше ячеек разместится на территории города, тем большее количество информации будет обрабатываться, тем точнее окажется оценка экологической обстановки в городе.

При анализе рис. 187 следует иметь в виду, что ячейки с маркерами выступают в качестве представителей кластеров как их среднее геометрическое и их число совпадает с числом выделенных кластеров.

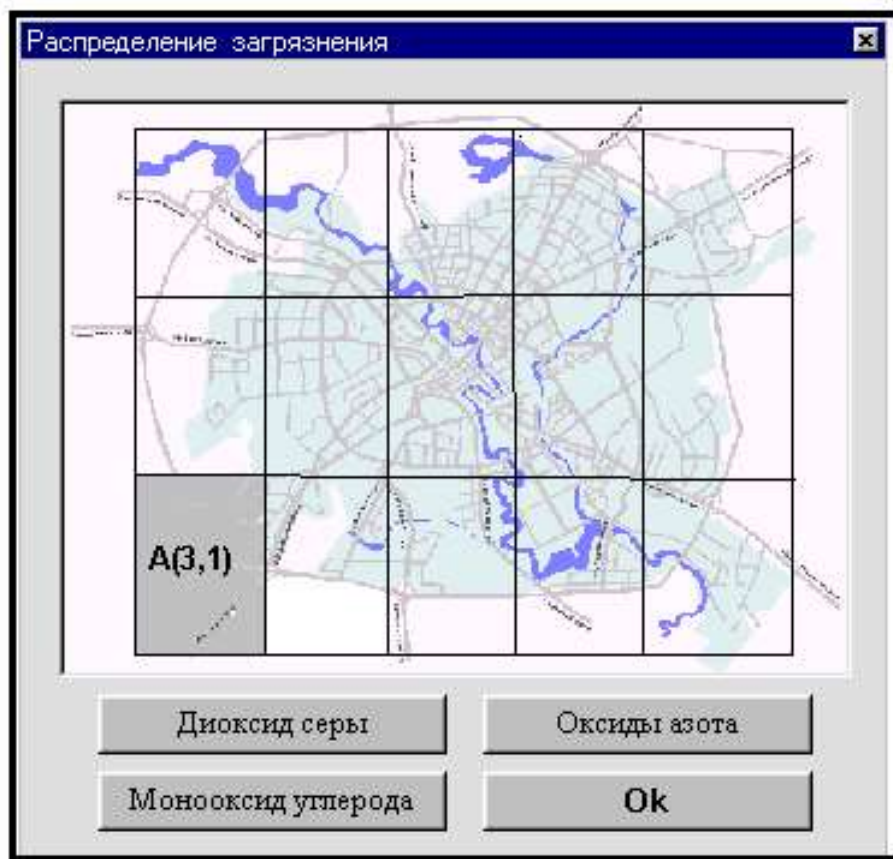


Рис. 185. Зоны территории города Минска в виде матрицы 3×5 для определения и формализации записи участка с наибольшей плотностью размещения пунктов экологического контроля

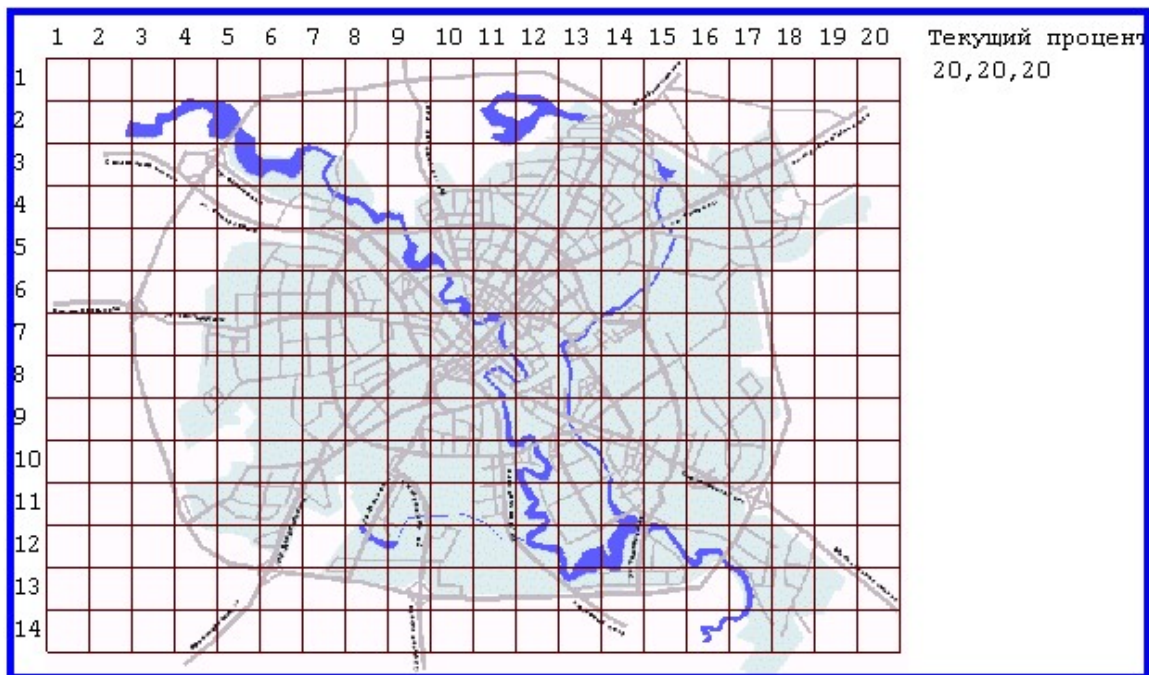


Рис. 186. Координатная сетка, образованная 20 столбцами

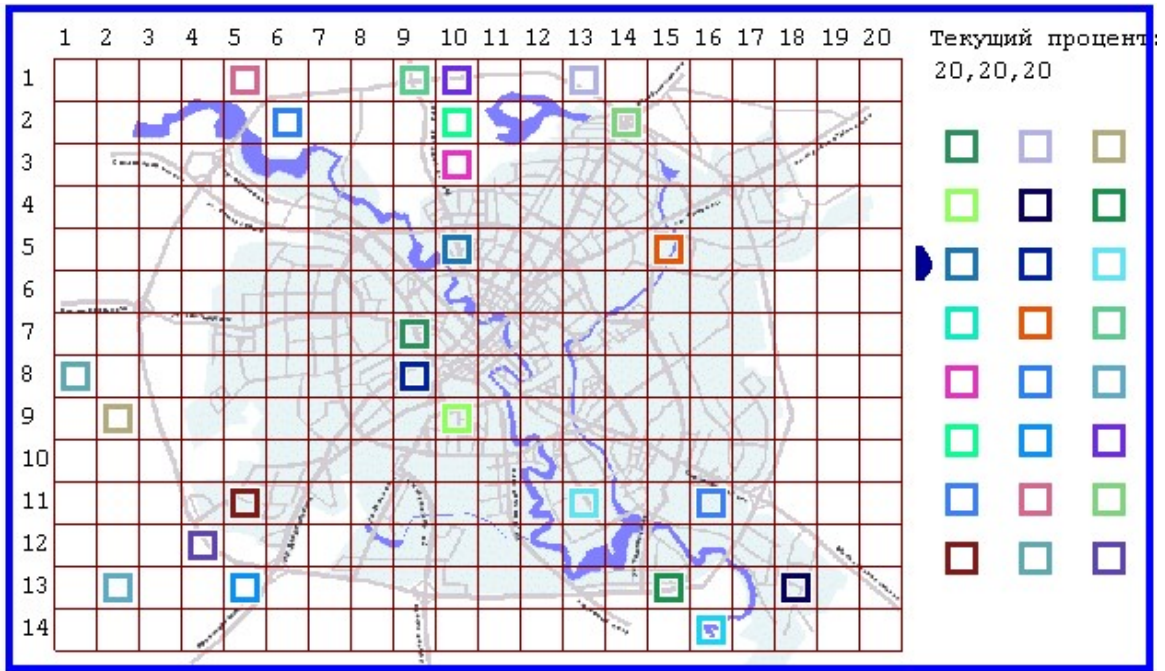


Рис. 187. Рациональное размещение необходимого числа стационарных пунктов экологического контроля, определенных в результате решения задачи

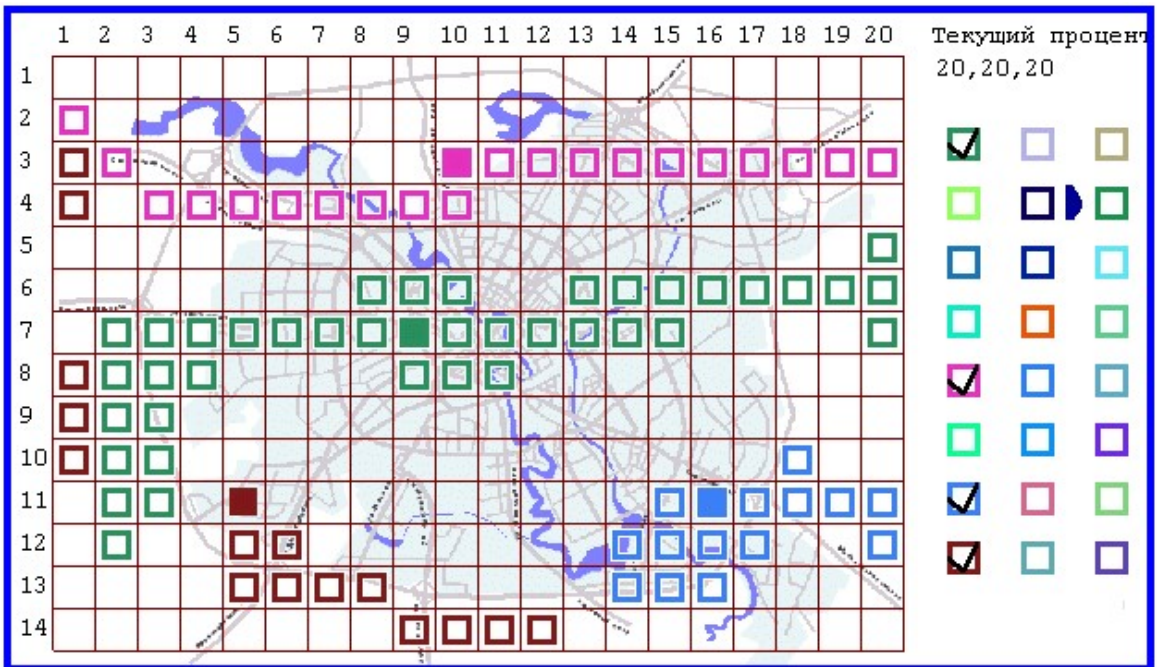


Рис. 188. Расположение некоторых кластеров, характеризующих уровень загрязнения города при $N_{\text{столбцов}} = 20$, $\%SO_2 : \%No_x : \%CO = 20 : 20 : 20$

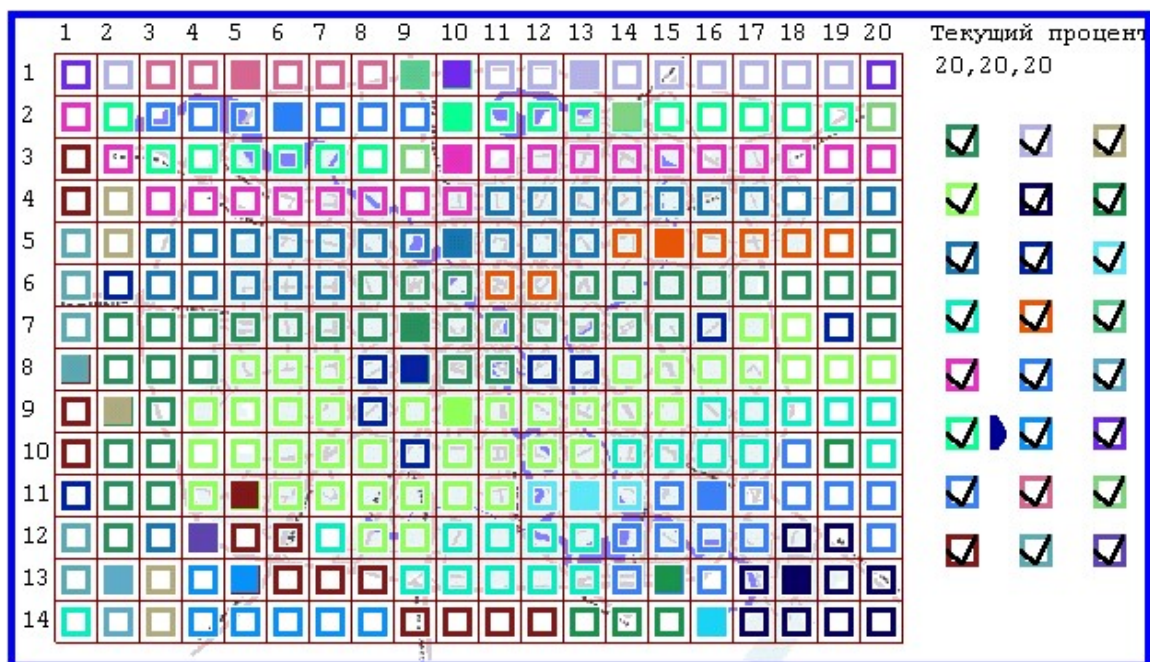


Рис. 189. Расположение всех кластеров, выделенных в результате решения задачи при $N_{\text{столбцов}} = 20$, $\%SO_2 : \%NO_x : \%CO = 20 : 20 : 20$

Местоположение некоторых кластеров представлено на рис. 188, а на рис. 189 приведены все кластеры.

В табл. 63 кластеры ранжированы по размерам (по числу ячеек, входящих в один кластер). Чтобы определить положение экологически опасных и благополучных зон, на основании табл. 63 необходимо пересортировать кластеры по концентрациям каждого загрязняющего вещества (следует помнить, что загрязнение внутри каждого кластера в соответствии с заданием охарактеризовано совокупной оценкой по всем загрязнителям одновременно).

Интересно отметить, что метод позволяет гибко настраивать механизм выделения кластеров и акцентировать внимание на одном или нескольких веществах путем подбора компонентов эвклидовой метрики $d(a_1, a_2, a_3)$.

Можно, например, более строго оценить загрязнение SO_2 при либеральном отношении к NO_x и CO : $d(a_{SO_2}, a_{NO_x}, a_{CO}) = d(10, 30, 30)$. Естественно, что при этом закономерно изменятся размеры и положение кластеров, что позволит объективно оценить экологическую обстановку города с заданной точностью. Евклидова метрика $d(a_{SO_2}, a_{NO_x}, a_{CO}) = d(5, 95, 95)$ позволит выявить кластеры, в которых загрязнение определяется практически моно веществом SO_2 .

Характеристика выделенных кластеров
при $N_{\text{столбцов}} = 20$, % SO_2 : % NO_x : % $\text{CO} = 20 : 20 : 20$

№ кластера	Количество ячеек в кластере	Вычисленные средние значения содержания загрязняющих веществ в каждом классе, доли ПДК		
		SO_2	NO_x	CO
1	40	0,00250744	0,00621279	0,00515136
2	42	0,00712968	0,00836945	0,00709754
3	27	0,00130893	0,00902185	0,0212016
4	21	0,010413	0,0102109	0,0123155
5	21	0,000996155	0,0139814	0,0349363
6	17	0,00345118	0,0203738	0,0464452
7	15	0,0143531	0,0134031	0,00703243
8	15	0,00914479	0,00647633	0,0215187
9	10	0,0101596	0,0320159	0,0541486
10	10	0,0178078	0,0147239	0,00832657
11	9	0,00556096	0,0065966	0,00534788
12	8	0,000419941	0,00864153	0,00949244
13	7	0,00739825	0,0239818	0,0580136
14	6	0,00760138	0,0058648	0,031278
15	6	0,0153942	0,0344812	0,0681063
16	5	0,01014	0,00224402	0,00545734
17	4	0,00372626	0,00510091	0,0251475
18	4	0,0137376	0,0113519	0,0192804
19	3	0,0103808	0,0105753	0,00086955
20	2	0,0121038	0,0323727	0,0616045
21	2	0,00202088	0,000871965	0,0196976
22	2	0,0057133	0,0289846	0,0473804
23	2	0,000903286	0,0182857	0,0400099
24	1	0,00648636	0,00712623	0,0181057
25	1	0,0169239	0,0129811	0,0179426

С практической точки зрения особую важность приобретает выработка рекомендаций по рациональному размещению пунктов экологического контроля. Для этого по данным рис. 182 и результатам вычислительного эксперимента при различных сочетаниях задаваемых параметров системы мониторинга можно подсчитать количество мест установки отбора проб, которое попало в каждую из 3×5 зон территории города (рис. 185), и определить области с максимальной плотностью датчиков.

Просматривая последний столбец табл. 64, можно видеть, что в Заводском районе с фактическим максимальным загрязнением (квадраты А (2, 5), А (2, 4), А (3, 5), А (3, 4)) не выявляется отчетливой

тенденции к размещению там большого числа источников информации. Наибольшую плотность установки датчиков рекомендуется создавать на периферийных участках территории города (квадраты А (1, 2) и А (2, 2)), там, где загрязнение только начинает значительно отличаться от фонового.

Таким образом, основную смысловую нагрузку при математическом описании экологической обстановки города нужно возлагать на организацию сбора информации в местах перехода от чистых участков к загрязненным.

Т а б л и ц а 64

**Условия и результаты вычислительного эксперимента
по определению необходимого числа стационарных пунктов контроля
и их рационального размещения при разработке систем мониторинга
воздушной среды города Минска**

№ варианта	Задаваемые условия точности				Вычисленные значения параметров		
	Число столбцов координатной сетки	% отличий концентраций загрязняющих веществ, при которых соседние ячейки будут отнесены к разным кластерам			Необходимое количество стационарных пунктов экологического контроля	Максимальная плотность размещения датчиков (шт./зону)	Расположение области максимальной плотности датчиков
		SO ₂	NO _x	CO			
1	10	10	10	10	30	6	А (1, 2)
2	10	20	20	20	19	3	А (2, 4)
3	10	30	30	30	7	2	А (2, 2)
4	30	10	10	10	56	9	А (1, 2)
5	30	20	20	20	30	5	А (2, 3)
6	30	30	30	30	17	2	А (3, 2)
7	20	10	10	10	46	9	А (2, 2)
8	20	20	20	20	25	5	А (1, 3)
9	20	30	30	30	9	3	А (1, 2)
10	20	10	20	20	44	6	А (1, 2)
11	20	20	10	20	35	7	А (1, 3)
12	20	20	20	10	40	7	А (3, 4)
13	20	30	20	20	20	3	А (1, 3)
14	20	20	30	20	22	4	А (2, 3)
15	20	20	20	30	19	3	А (2, 3)

6.5. УПРАВЛЕНИЕ ПРЕДПРИЯТИЕМ В УСЛОВИЯХ РЫНОЧНОЙ ЭКОНОМИКИ С МОДЕЛИРОВАНИЕМ РЫНКА И ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ВИРТУАЛЬНОГО КОНКУРЕНТА. ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ «MARKET»

6.5.1. Назначение, области использования и функциональные возможности программного модуля

Программный модуль предназначен для управления предприятием в условиях рыночной экономики с моделированием рынка и деятельности виртуального конкурента.

Компьютерный программный модуль позволяет:

- моделировать в динамике производственную и финансовую деятельность двух промышленных предприятий, выпускающих продукцию одного наименования и имеющих однотипное оборудование;
- осуществлять оперативное технологическое и административное управление;
- моделировать условия рынка с учетом цен на ресурсы;
- моделировать и осуществлять государственную управленческую деятельность в виде определения размеров возмещения ущерба, нанесенного окружающей среде;
- выбирать режим обучения:
 - человек — человек;
 - человек — «виртуальный конкурент- компьютер»;
 - компьютер — компьютер;
 - анализировать коммерческую деятельность предприятий;
 - оптимизировать условия оперативного технологического и административного управления в режиме «виртуального конкурента».

6.5.2. Перечень и назначение файлов программного пакета

<i>Market.exe</i>	Главный исполняемый файл программного модуля
<i>Mfc42.dll</i>	Системный файл
<i>FlpGrf.ocx</i>	Системный файл
<i>V_comp.chl</i>	Файл помощи
<i>V_comp.cnt</i>	Файл оглавления

<i>V_comp.hlp</i>	Файл помощи
<i>Install.log</i>	Файл сведений об инсталляции
<i>Unvise.exe</i>	Файл деинсталляции

6.5.3. Теоретические основы программного модуля

В качестве объекта управления взято производственное предприятие, изготавливающее обои из волокнистых отходов.

Обучение производится в игровой форме соперничества между двумя конкурентами — производителями одинаковой продукции. Цель каждого из них — получить максимальную экономическую выгоду от производства и продажи продукции.

В качестве игрока может выступать либо компьютер, либо человек. При этом переключение между типами игроков может происходить по ходу игры без ее прерывания.

События в игре происходят в реальном времени, скорость течения которого регулируется. В качестве минимальной единицы времени взят один день. По прошествии каждого дня происходит перерасчет активов. В процессе игры возникают следующие события:

- ежедневно: покупка потребителями продукции у производителей;
- периодически: изменения условий природопользования;
- случайно: изменения состояния рынка.

В основу настоящего программного модуля положены взгляды двух ученых-экономистов — Альфреда Маршалла и Джона Мейнарда Кейнса.

А. Маршалл, автор теории рыночного ценообразования, предложил переключить усилия экономистов на изучение проблемы взаимодействия спроса и предложения как сил, определяющих процессы, протекающие на рынке. Он тщательно проанализировал, как складываются и взаимодействуют эти силы, ввел понятие «эластичность спроса», предложил свою теорию рыночной цены.

Объяснение рыночной цены у А. Маршалла опирается как на теорию издержек производства, так и на положения теории предельной полезности. Иначе говоря, ученый предложил «компромиссный» подход, при котором цена определяется двумя факторами: предельной полезностью и издержками производства.

Главное в экономике — не столько объем затрат труда на производство товара, сколько конечный результат этого производства, который

оценивает потребитель, руководствуясь собственным субъективным представлением о полезности блага. Причем полезность каждой следующей единицы конкретного блага не остается неизменной. Она снижается по мере того, как потребность в данном благе насыщается. Таким образом, между количеством блага и его полезностью существует обратная зависимость. Например, будучи голоден, человек съедает один бутерброд, затем другой, третий и так до тех пор, пока не почувствует себя сытым. Разумеется, каждый следующий бутерброд приносит дополнительную полезность, но ее величина постоянно уменьшается.

Под предельной полезностью понимается величина дополнительной полезности, полученной от прироста величины потребления, равного единице некоторого блага (при прочих равных условиях). Отсюда следует, что предельная полезность — это не наибольшая и не средняя полезность, а именно наименьшая польза, ради которой эта вещь еще может рационально употребляться.

«Полезность» — не то же самое, что «ценность». Между этими категориями «австрийцы» видели специфическую связь. Всякое благо полезно, но не всякое — ценно. Ценностью обладают лишь те блага, которые редки (ограниченны) по сравнению с потребностью в них. Например, вода в реке, с точки зрения жаждущего человека, конечно, обладает полезностью, но ценности не имеет, так как ее количество практически не ограничено.

Цена, которую согласен уплатить потребитель, определяется степенью полезности товара, цена же, которую назначает производитель, не может быть, по крайней мере, ниже издержек производства. Между продавцами и покупателями достигается компромисс, в результате которого цена устанавливается на равновесном уровне.

Равновесная цена по Маршаллу, — это та максимальная цена, которую готов уплатить потребитель (исходя из субъективной оценки полезности товара), и одновременно та минимальная цена, по которой производитель согласен продать товар (исходя из уровня издержек на его производство). Принцип «издержек производства» и принцип «конечной полезности», без сомнения, являются составными частями одного всеобщего закона спроса и предложения; каждый из них можно сравнить с одним из лезвий ножниц.

Теорию рыночного ценообразования А. Маршалл иллюстрировал с помощью графиков и формул, большинство из которых прочно

вошли в учебники по экономическим наукам. Конечно, эти графические модели не дают всеобъемлющей картины экономической действительности, но они в самой простой форме объясняют нам, как взаимодействуют главные составляющие рыночного механизма — спрос и предложение.

А. Маршалл не ограничился только моделью «мгновенного равновесия», а исследовал, что произойдет со спросом, если изменятся такие факторы, как вкусы потребителей и их доходы, число потребителей, цены на товары-заменители («субституты») и взаимодополняющие («комплементарные») товары. Аналогичным образом ученый исследовал факторы, влияющие на предложение (среди них — технология производства, цены на ресурсы, налоги и субсидии и т. п.).

Экономисты-неоклассики, ограниченные микроэкономическим подходом и верой в «самолечение» капитализма, обнаружили неспособность предложить глобальные антикризисные решения, поэтому с теорией регулируемого капитализма выступил английский ученый Джон Мейнард Кейнс.

В качестве главного инструмента своего анализа Кейнс использовал так называемые «макроэкономические» (т. е. совокупные, агрегированные, укрупненные) показатели — национальный доход, потоки инвестиций и сбережений, совокупный спрос и совокупное предложение. Поэтому Кейнса справедливо считают одним из основоположников макроэкономического анализа. Теория Кейнса весьма тесно связана с практикой, истолкованием задач государственной политики и в этом смысле знаменует поворот к традициям политической экономии.

Центральная идея Кейнса состояла в том, что в условиях кризиса необходимо предложить и осуществить меры по активизации и стимулированию совокупного спроса (т. е. общей покупательной способности). Теорию Кейнса иногда называют в этой связи «теорией эффективного спроса».

Эффективный спрос — это совокупный платежеспособный спрос, определяющий объем занятости. Его ведущая роль в этом вопросе определяется тем, что в коротком периоде предложение остается неизменным и вывести экономику из состояния низких темпов производства с высоким уровнем незанятости можно только путем воздействия на другую сторону рынка — спрос.

Главными составляющими эффективного спроса выступают две части дохода – потребление и инвестиции (капиталовложения). Только в том случае, считал Кейнс, когда эти составляющие находятся в определенном соотношении, может наступить состояние полной занятости (т. е. отсутствие недобровольной безработицы). Прирост личного потребления, а следовательно, рост эффективного спроса, считал Кейнс, устойчиво зависит от прироста дохода. Зависимость здесь прямая. Чем выше доход, тем выше и уровень личного потребления. Однако личное потребление растет в меньшей степени, чем растет доход. Таково проявление «основного психологического закона», согласно которому с ростом дохода склонность к потреблению падает, а склонность к сбережению возрастает. Само по себе это не опасно, если сбереженные деньги не лежат без движения, а поглощаются растущим спросом на инвестиции (т. е. на капитальные вложения в развитие экономики). Размер инвестиций Кейнс считал главным фактором эффективного спроса, ибо рост инвестиций способствует увеличению национального дохода и привлечению в производство дополнительных работников, т. е. ликвидации безработицы.

Следовательно, обеспечить нормальный размер инвестиций — это значит перевести все сбережения в реальные капиталовложения. Отсюда широко известная в экономической теории формула: I (инвестиции) = S (сбережения), т. е. инвестиции должны быть равны сбережениям.

Обеспечить такое равенство, считал Кейнс, можно только при низкой норме процента. И чем она ниже, тем (при прочих равных условиях) оживленнее инвестиционный процесс, и наоборот. Причина проста — низкий процент означает, что кредиты дешевы и предпринимателю есть смысл брать больше кредитов и, значит, больше вкладывать в развитие производства. Кейнс, таким образом, полагал, что процент сам определяет величину инвестиций, а не является равновесной ценой на графике сбережений и инвестиций, как считали неоклассики.

Цены становятся негибкими из-за процесса монополизации экономики. А ведь именно абсолютная гибкость цен, как утверждала неоклассическая теория, является гарантом автоматического восстановления равновесия. Отсюда Кейнс сделал один из главных выводов своей теории — рыночная экономика может весьма длительное время находиться в состоянии равновесия совокупного спроса и совокупного

предложения при очень высоком уровне безработицы. Ученый был убежден, что без государственного вмешательства выйти из этого состояния рыночная экономика не может. Данное положение породило особую концепцию экономической политики государства — концепцию *регулируемого капитализма*.

6.5.4. Рабочий интерфейс и структура программного модуля

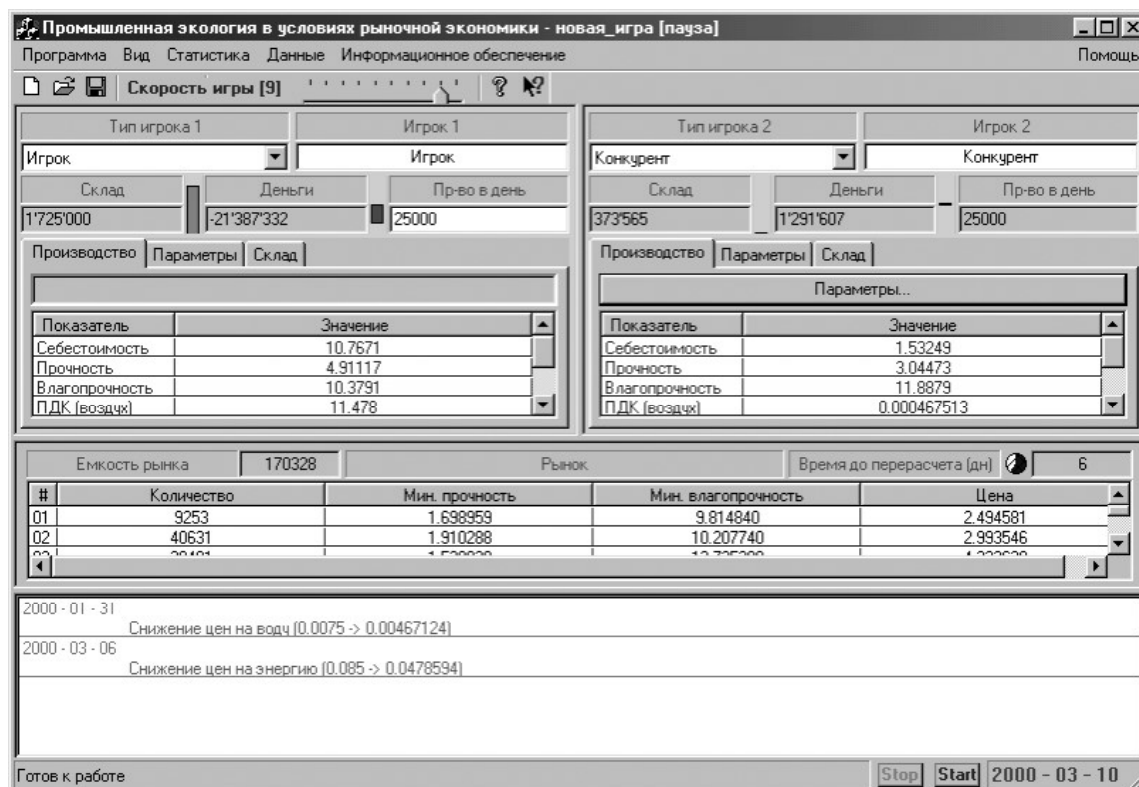


Рис. 190. Рабочий интерфейс программного модуля

6.5.5. Главное окно программного модуля


Главное окно программного модуля «Промышленная экология в условиях рыночной экономики» состоит из следующих элементов (сверху вниз):

Строка заголовка отображает имя файла с текущей игрой, состояние игры (запущена или остановлена), а также кнопки управления состоянием окна (максимизация/восстановление, минимизация, закрытие)

Меню	обеспечивает доступ к основным функциям программы
Панель инструментов	дублирует основные функции программы, ускоряя доступ к ним: <ul style="list-style-type: none"> • новая игра; • загрузка игры; • сохранение игры; • установка скорости игры (от 1 до 10); • информация о программе; • контекстная помощь
Свойства игроков	два встроенных окна с разделителем, которые обеспечивают доступ к функциям управления производством и сбытом, а также отображают статистическую информацию о состоянии дел у игроков
Состояние рынка	содержит элементы управления, отображающие структуру рынка и спроса
События игры	содержит список событий, возникающих во время игры
Статусная строка	содержит кнопки управления ходом игры (запуск и остановка), а также текущую дату

При запуске программы она восстанавливает свое состояние на момент завершения работы с ней (положение главного окна, окон статистики, параметры).

6.5.5. Главное меню программного модуля

 Программа	
	<p>«Новая игра» Создание новой игры. В случае, если изменения в текущей игре не были сохранены, отобразится запрос на сохранение. При выборе данного пункта отобразится диалог с запросом на типы и расположение игроков в рабочей области</p>

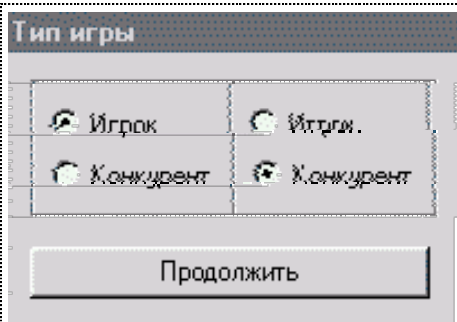


Рис. 191. Структура игры

«Загрузить игру»

Загрузка ранее сохраненной игры. В случае, если изменения в текущей игре не были сохранены, отобразится запрос на сохранение

«Сохранить игру»

Сохранение игры под текущим именем. Если оно не определено, то появится диалог запроса имени и местоположения файла, в котором будет сохранена игра

«Сохранить игру как...»

Сохранение игры под новым именем. При выборе данного пункта появится диалог запроса имени и местоположения файла, в котором будет сохранена игра

«Работа»

Запуск таймера времени в игре. В случае, если этот пункт доступен и не помечен галочкой, игра приостановлена

«Пауза»

Остановка таймера времени в игре. В случае, если этот пункт доступен и не помечен галочкой, время запущено

«Выход»

Выход из программы. Этому же результату можно добиться, щелкнув мышью на крестик в заголовке или нажав комбинацию клавиш Alt + F4



Вид

«Панель инструментов»

Управление отображением панели инструментов

«Статусная строка»

«Параметры программы»

Управление параметрами программы. При выборе данного пункта меню отображается диалог (рис. 192).

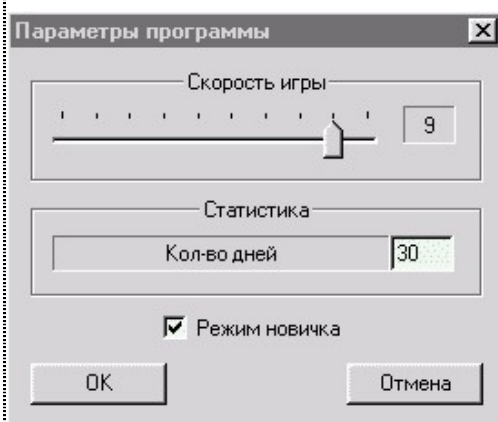


Рис. 192. Параметры программы

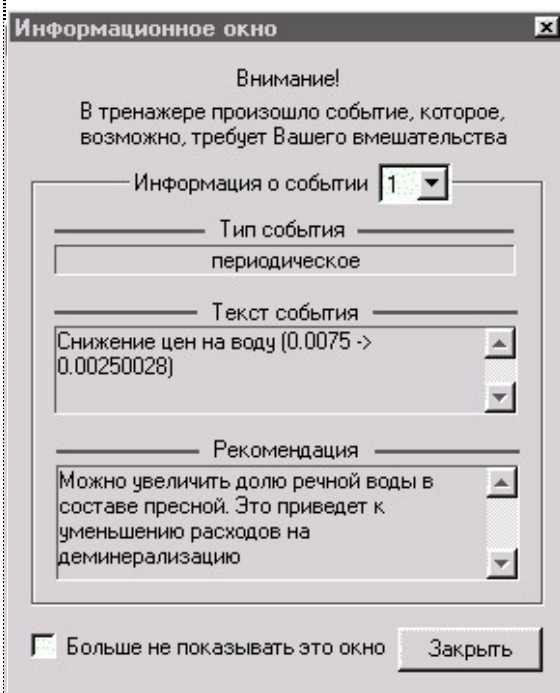


Рис. 193. Информация о событиях

Возобновление игры при этом осуществляется после закрытия диалога, нажатия на кнопку «Start» в статусной строке или выбора пункта меню «Программа» — «Работа».



Статистика

«Статистика (1)»

Ежедневная статистика игрока 1

В нем можно установить скорость течения времени (эта функция также доступна через панель инструментов), количество дней, в течение которых будет идти накопление ежедневной статистики, а также включить / выключить режим новичка, при котором каждое событие будет приводить к остановке игры и появлению на экране диалога с информацией о нем (рис. 193).

«Статистика (2)»
Ежедневная статистика игрока 2

«Помесячная статистика (1)»
Помесячная статистика игрока 1

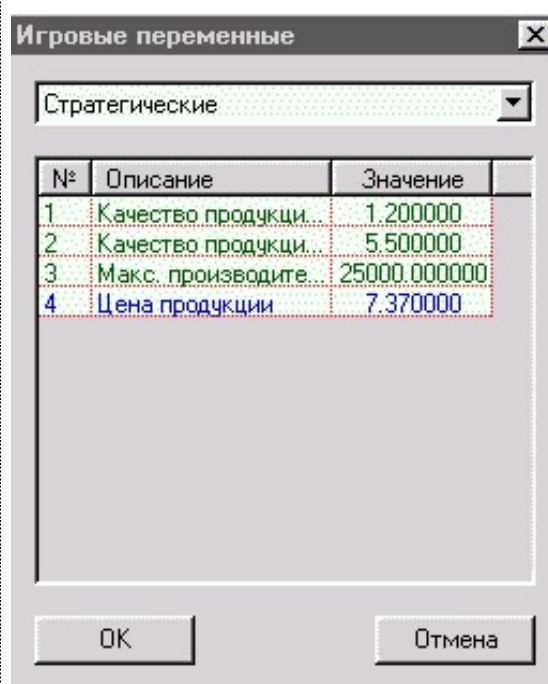
«Помесячная статистика (2)»
Помесячная статистика игрока 2



Данные

«Редактирование данных»

Функция ручного редактирования игровых переменных, регулирующих производство и сбыт. При ее вызове отображается следующий диалог:

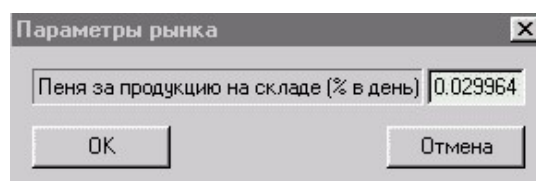


В нем пользователь может вручную задать значения параметров, модифицируемых в ходе игры вследствие возникновения *событий*. В диалоге изменять можно значения переменных, выделенных зеленым и красным цветом.

Рис. 194. Окно редактирования игровых переменных




«Редактирование параметров рынка»

Функция редактирования параметров рынка, не включенных в список переменных игры. При ее вызове отображается следующий диалог:



В нем пользователь может задать значение пени за хранение продукции на складе

Рис. 195. Параметры рынка

	Информационное обеспечение
	Вызов файла справки с теоретической информацией по тренажеру
	Помощь
	«Разделы справки» Вызов содержания данного файла справки
	«Контекстная помощь» Функция контекстной подсказки. При ее вызове (что также можно сделать через панель инструментов или комбинацию клавиш (SHIFT+F1), курсор принимает вид  , после чего щелчок на любом элементе управления приведет к вызову контекстной справки по нему
	«О программе» Вызов диалога с информацией о разработчиках и версии программы

6.5.6. Управление производством

В ходе производства обоев игрок решает задачу комплексного управления процессом выработки продукции, добиваясь решения следующих подзадач:

- минимизация расходов сырья;
- соблюдение требований к качеству продукции;
- минимизация сбросов и выбросов в окружающую среду и отходов, образующихся при производстве.

Воздействие на производственный процесс осуществляется путем модификации переменных, влияющих на производство и сбыт. Они разделены на несколько групп и могут быть доступны как для изменения *игроком, так и нет* Основными являются переменные из группы оперативных параметров — расход полимера, расход волокна, степень помола. Выработка продукции происходит ежедневно; количество произведенных изделий определяется значением параметра «Пр-во в день».

Произведенная продукция имеет три основных, наиболее значимых, свойства:

- качество (прочность);

- качество (влагопрочность);
- себестоимость.

Этими показателями, вытекающими из свойств производства, определяется дальнейшее поведение игрока по сбыту продукции. Естественно, что производитель стремится выработать продукцию с минимальной себестоимостью и требуемым качеством.

Готовая продукция поступает на склад, где группируется в зависимости от качества и себестоимости. Цена на выработанную продукцию устанавливается на закладке «Параметры» в свойствах игрока (затем она может быть изменена). Ежедневно со счета игрока снимается определенная сумма, равная проценту от суммы себестоимостей всех единиц продукции на складе — пеня за хранение продукции.

Другой задачей, которую необходимо решать в ходе игры, является планирование сбыта готовой продукции. При этом необходимо учитывать следующие обстоятельства:

- количество и качество продукции на складе;
- состояние спроса на рынке;
- размер пени за хранение продукции.



Рис. 196. Уровень конкурента



Рис. 197. Параметры поиска

Параметры конкурента.

При нажатии на кнопку «Параметры...» на закладке «Результаты производства» появляется следующий диалог с параметрами виртуального конкурента-компьютера.

В нем можно задавать следующие параметры:

- уровень «интеллекта» конкурента — от 1 до 10 (рис. 196);
- параметры поиска оптимального режима производства.

При нажатии на кнопку «Параметры поиска...» (рис. 197) будет выведен следующий диалог с параметрами метода случайного локального поиска, который в модифицированном виде используется в программе:

6.5.7. Моделирование рынка

Состояние рынка в тренажере определяется количеством групп покупателей, которым требуется продукция, производимая игроком. Каждая категория характеризуется следующими параметрами:

- требуемое количество единиц изделий в день;
- требуемые минимальные значения показателей качества продукции;
- максимальная цена, по которой продукция с заданным качеством может быть куплена.

Скриншот главного окна программы (рис. 198):

Емкость рынка		Рынок			Время до перерасчета (дн)
#	Количество	Мин. прочность	Мин. влагостойкость	Цена	
01	12720	1.895895	7.734024	3.042399	
02	32236	1.970330	7.575907	4.131739	
03	14326	1.667428	11.311155	4.316804	
04	66786	1.583874	13.548326	4.864173	
05	7630	2.509830	9.439062	6.132999	

Рис. 198. Состояние рынка

Оно содержит следующие информационные элементы:

«Емкость рынка» — количество единиц продукции, которое будет закупаться ежедневно при текущем состоянии спроса.

«Время до перерасчета (дн)» — количество дней до изменения структуры рынка (спроса). В течение этого времени набор и параметры категорий потребителей не изменятся, если только не произойдут события, требующие перерасчета рынка.

«Список категорий» содержит данные о категориях потребителей на рынке.

6.5.8. Оперативная информация о текущем состоянии производства

Окно с информацией о положении дел игрока и параметрах его деятельности на рынке содержит следующие информационные поля:

Тип игрока	Позволяет выбрать тип игрока (человек или компьютер)
------------	--

Тип игрока	Позволяет выбрать тип игрока (человек или компьютер)
«Игрок»	Позволяет задать имя игрока. При переключении игроков имя устанавливается в одно из predetermined значений — «Игрок» или «Компьютер»
«Склад»	Отображает количество единиц продукции на складе в данный момент времени. Детальная раскладка по категориям продукции отображается в «Свойства игрока» — «Склад». Справа от числового поля находится граф-индикатор количества единиц продукции на складе относительно игрока-конкурента
«Деньги»	Отображает текущее состояние счета игрока — количество денег на текущий момент. Справа от числового поля находится граф-индикатор количества денег на счету относительно игрока-конкурента. При этом красный цвет соответствует положительному значению, а синий — отрицательному
«Пр-во в день»	Содержит поле ввода количества единиц продукции, которое игрок производит ежедневно (оно не должно превышать установленное регламентированное значение). У игрока-конкурента это поле заблокировано для ввода
Производство Параметры Склад	Содержит информацию о результирующих показателях производства, параметрах производства и сбыта продукции, состоянии склада игрока



Рис. 199. Текущее состояние производства

Производство		
Параметры		
Склад		
Стратегические		
№	Описание	Значение
1	Качество продукции (прочность)	1.200000
2	Качество продукции (влагопрочность)	5.500000
3	Макс. производительность	25000.000000
4	Цена продукции	7.370000

Рис. 200. Закладка «Параметры»

6.5.8.1. Параметры производства. Параметры сгруппированы по 7 категориям в зависимости от назначения. Цвет параметра определяет характер его модификации (рис. 200):

- зеленый — значение параметра регулируется государством;
- синий — параметр может изменяться игроком в установленных пределах (см. ниже);
- красный — значение параметра регулируется рынком;
- черный — значение параметра фиксировано.

Группы параметров производства и сбыта

Группа	Характеристика
Стратегические переменные	параметры, определяющие конкурентную способность продукции и состояние рынка
Оперативные переменные	параметры, с помощью которых осуществляется оперативное управление технологическим процессом: <ul style="list-style-type: none"> • расход полимера; • расход волокна; • степень помола
Степень бессточности	параметры, определяющие степень замкнутости оборотного водоснабжения.
Степень наукоемкости	параметры, определяющие научный уровень технологии производства
Степень безотходности	параметры, определяющие степень превращения сырья в готовую продукцию

Группа	Характеристика
Природопользование	параметры, определяющие финансовые затраты на возмещение ущерба окружающей среде.
Ценовая ситуация на рынке	параметры, задающие цены на сырьевые, материальные и энергетические ресурсы
Проектные переменные	параметры, определяющие степень прогрессивности проектных решений

Модификация параметров осуществляется путем непосредственного ввода значения в активной строке, либо, ввода данных, после повторного щелчка мышью по активной строке (рис. 201).

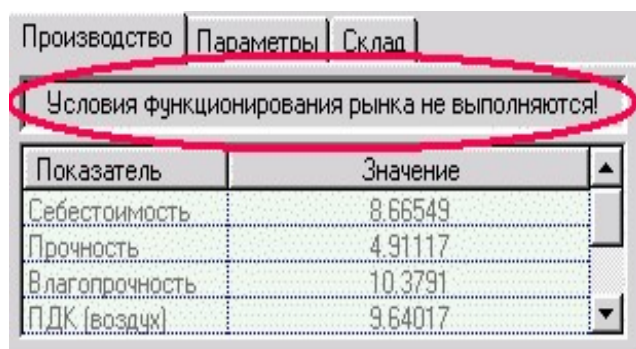


Рис. 201. Параметры производства

Если же значение переменной приведет к нарушению условий производства, то программа перейдет на закладку «Производство», в которой информационная строка отобразит соответствующее сообщение, и результаты производства будут выводиться серым цветом.

6.5.8.2. Результаты производства

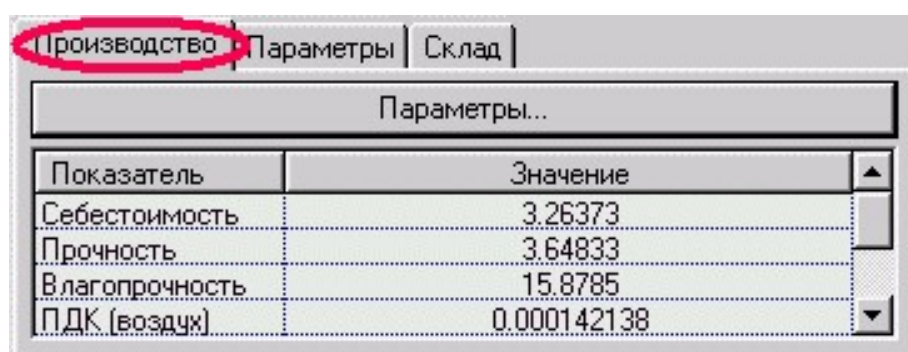


Рис. 202. Результаты производства

Результаты отображаются в виде списка пар параметр — значение. Над списком в зависимости от типа игрока отображается:

- «компьютер» — кнопка параметров конкурента-компьютера;
- «игрок» — поле отображения служебной информации для игрока.

А в а , і аї ðèì åð, àù àí àüòñý ñî î àù àí èü î í àñî î òååòòåèè ï ðî - èçàî àñòåáí í î àî ï ðî òåññà ðååè àí àí ò ì òðåáî àáî èüì . Å ýòî ì ñåó - ÷åå àéè àí òù ñî èñèè ðåçóëüòàòî à î ðî èçàî àñòåå î òî áðæàð òñü ñå - ðò ì òååòòî ì (ðèñ. 203).

Свойства игрока → склад

Пр-ть	Влагопр-ть	Себест-ть	Цена	Кол-во
4.911	10.379	11.252917	7.370000	354407
4.911	10.379	11.067492	7.370000	4368407
4.911	10.379	12.649385	7.370000	51104
4.911	10.379	14.586493	7.370000	362524
4.911	10.379	13.694901	7.370000	1869344
4.911	10.379	13.463439	7.370000	18108

Рис. 203. Количество складированной продукции

Продукция сгруппирована по категориям, каждая из которых характеризуется своим качеством, себестоимостью и ценой. Новые изделия, производимые ежедневно, поступают в категорию, соответствующую ее характеристикам.

Каждый день потребители покупают определенное количество единиц изделия, исходя из критериев качества и цены. В случае, если качество продукции удовлетворяет покупателя, то предпочтение, естественно, будет отдано изделиям из категории с меньшей ценой.

Поле «Цена» для категорий доступно для редактирования в случае, если игроком является человек. Для изменения цены продажи продукции необходимо ввести числовое значение в выделенную строку списка категорий.

6.5.9. События

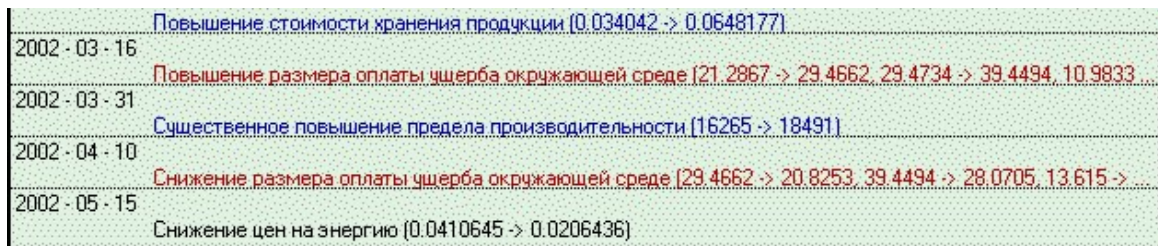
В ходе игры могут возникать события. Их значение — в изменении значений переменных игры. События классифицируются в зависимости от причины возникновения на 3 группы:

- **причинные** (обусловленные состоянием рынка и экономики) причина их возникновения — наличие определенных тенденций в изменении данных игроков (деньги, производство, продажа и т. п.);

- **периодические** (возникающие в определенное время) события этого рода могут наступать только в определенный период времени, что связано с последствиями самого события;

- **случайные** (возникающие без определенного условия) события могут возникать в любой момент (день) вне зависимости от каких-либо обстоятельств.

События отображаются в списке, находящемся в главном окне программы (рис. 202). В нем выводятся дата события, его суть и изменения переменных, вызванные им.



2002 - 03 - 16	Повышение стоимости хранения продукции (0.034042 -> 0.0648177)
2002 - 03 - 31	Повышение размера оплаты штрафа окружающей среде (21.2867 -> 29.4662, 29.4734 -> 39.4494, 10.9833)
2002 - 04 - 10	Существенное повышение предела производительности (16265 -> 18491)
2002 - 05 - 15	Снижение размера оплаты штрафа окружающей среде (29.4662 -> 20.8253, 39.4494 -> 28.0705, 13.615 -> ...)
	Снижение цен на энергию (0.0410645 -> 0.0206436)

Рис. 204. Окно со списком событий

При наведении указателя мыши на событие из списка после некоторой паузы (около секунды) появляется всплывающая подсказка с рекомендациями, относящимися к событию. Рекомендации также отображаются в окне информации о событии, которое возникает после каждого события в «Режиме новичка».

6.5.10. Статистика

В программе происходит периодический сбор статистики. При этом накапливаются данные о следующих данных (рис. 205–208):

- состояние счета (деньги);

- склад (количество единиц продукции на складе);
- производство (количество произведенных единиц продукции);
- продажа (количество проданных единиц продукции);
- продукция (сведения о качестве и себестоимости произведенной продукции).

Статистика игрока 2 [Конкурент]

Цифры | Графика

Дата	Деньги	Склад	Пр-во	Продажа	Продукция
2002 - 03 - 18	63'095'904 [+0.41%]	1'293'344 [-2.55%]	34'271 [+0.00%]	68'126 [+0.00%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 19	63'354'116 [+0.41%]	1'259'489 [-2.62%]	34'271 [+0.00%]	68'126 [+0.00%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 20	63'663'348 [+0.49%]	1'237'782 [-1.72%]	34'271 [+0.00%]	55'978 [-17.83%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 21	63'972'600 [+0.49%]	1'216'075 [-1.75%]	34'271 [+0.00%]	55'978 [+0.00%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 22	64'281'868 [+0.48%]	1'194'368 [-1.79%]	34'271 [+0.00%]	55'978 [+0.00%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 23	64'519'696 [+0.37%]	1'182'714 [-0.98%]	34'271 [+0.00%]	45'925 [-17.96%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 24	64'716'264 [+0.30%]	1'176'925 [-0.49%]	34'271 [+0.00%]	40'060 [-12.77%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 25	64'912'836 [+0.30%]	1'171'136 [-0.49%]	34'271 [+0.00%]	40'060 [+0.00%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 26	65'109'412 [+0.30%]	1'165'347 [-0.49%]	34'271 [+0.00%]	40'060 [+0.00%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 28	65'305'996 [+0.30%]	1'159'558 [-0.50%]	34'271 [+0.00%]	40'060 [+0.00%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 28	65'502'584 [+0.30%]	1'153'769 [-0.50%]	34'271 [+0.00%]	40'060 [+0.00%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 29	65'699'176 [+0.30%]	1'147'980 [-0.50%]	34'271 [+0.00%]	40'060 [+0.00%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 30	65'895'772 [+0.30%]	1'142'191 [-0.50%]	34'271 [+0.00%]	40'060 [+0.00%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 03 - 31	65'948'912 [+0.08%]	1'156'475 [+1.25%]	34'271 [+0.00%]	19'987 [-50.11%]	[4.75, 16.79, 2.61]
2002 - 04 - 01	66'020'020 [+0.11%]	1'168'370 [+1.03%]	34'271 [+0.00%]	22'376 [+11.95%]	[4.75, 16.79, 2.59]
2002 - 04 - 02	66'256'980 [+0.36%]	1'134'555 [-2.89%]	34'271 [+0.00%]	68'086 [+204.28%]	[4.75, 16.79, 2.59]
2002 - 04 - 03	66'493'956 [+0.36%]	1'100'740 [-2.98%]	34'271 [+0.00%]	68'086 [+0.00%]	[4.75, 16.79, 2.59]
2002 - 04 - 04	66'730'948 [+0.36%]	1'066'925 [-3.07%]	34'271 [+0.00%]	68'086 [+0.00%]	[4.75, 16.79, 2.59]

Рис. 205. Текстовая форма

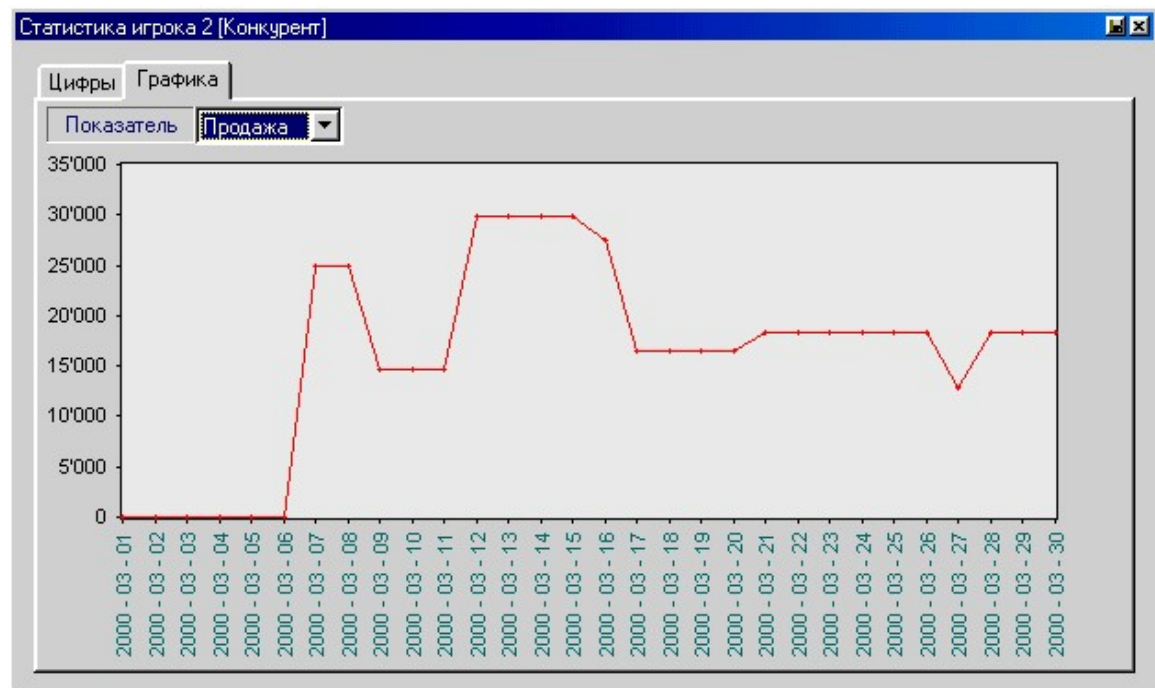


Рис. 206. Графическая форма

Статистика (по месяцам) игрока 2 [Конкурент]

Цифры | Графика

Месяц	Деньги	Склад	Пр-во	Продажа
2000, Январь	-931'125	150'000	475'000	325'000
2000, Февраль	1'881'037 [+302.02%]	150'000 [+0.00%]	725'000 [+52.63%]	725'000 [+123.08%]
2000, Март	3'067'227 [+63.06%]	494'088 [+229.39%]	775'000 [+6.90%]	430'912 [-40.56%]
2000, Апрель	7'342'682 [+139.39%]	152'294 [-69.18%]	763'764 [-1.45%]	1'105'558 [+156.56%]
2000, Май	8'172'858 [+11.31%]	212'518 [+39.54%]	709'644 [-7.09%]	649'420 [-41.26%]
2000, Июнь	7'971'955 [-2.46%]	353'140 [+66.17%]	402'936 [-43.22%]	262'314 [-59.61%]
2000, Июль	9'787'635 [+22.78%]	442'418 [+25.28%]	808'360 [+100.62%]	719'082 [+174.13%]
2000, Август	11'208'324 [+14.52%]	448'738 [+1.43%]	757'713 [-6.27%]	751'393 [+4.49%]
2000, Сентябрь	15'888'534 [+41.76%]	149'137 [-66.77%]	724'110 [-4.43%]	1'023'711 [+36.24%]
2000, Октябрь	19'790'390 [+24.56%]	151'695 [+1.72%]	748'247 [+3.33%]	745'689 [-27.16%]
2000, Ноябрь	22'775'672 [+15.08%]	149'137 [-1.69%]	724'110 [-3.23%]	726'668 [-2.55%]
2000, Декабрь	24'521'092 [+7.66%]	245'685 [+64.74%]	579'288 [-20.00%]	482'740 [-33.57%]
2001, Январь	25'384'386 [+3.52%]	242'097 [-1.46%]	482'740 [-16.67%]	486'328 [+0.74%]
2001, Февраль	26'672'624 [+5.07%]	494'361 [+104.20%]	675'836 [+40.00%]	423'572 [-12.90%]
2001, Март	30'192'074 [+13.19%]	381'419 [-22.85%]	748'247 [+10.71%]	861'189 [+103.32%]
2001, Апрель	35'698'736 [+18.24%]	84'802 [-77.77%]	724'110 [-3.23%]	1'020'727 [+18.53%]
2001, Май	35'702'360 [+0.01%]	527'803 [+522.39%]	748'247 [+3.33%]	305'246 [-70.10%]
2001, Июнь	40'822'880 [+14.34%]	224'303 [-57.50%]	758'100 [+1.32%]	1'061'600 [+247.79%]

Рис. 207. Текстовая форма

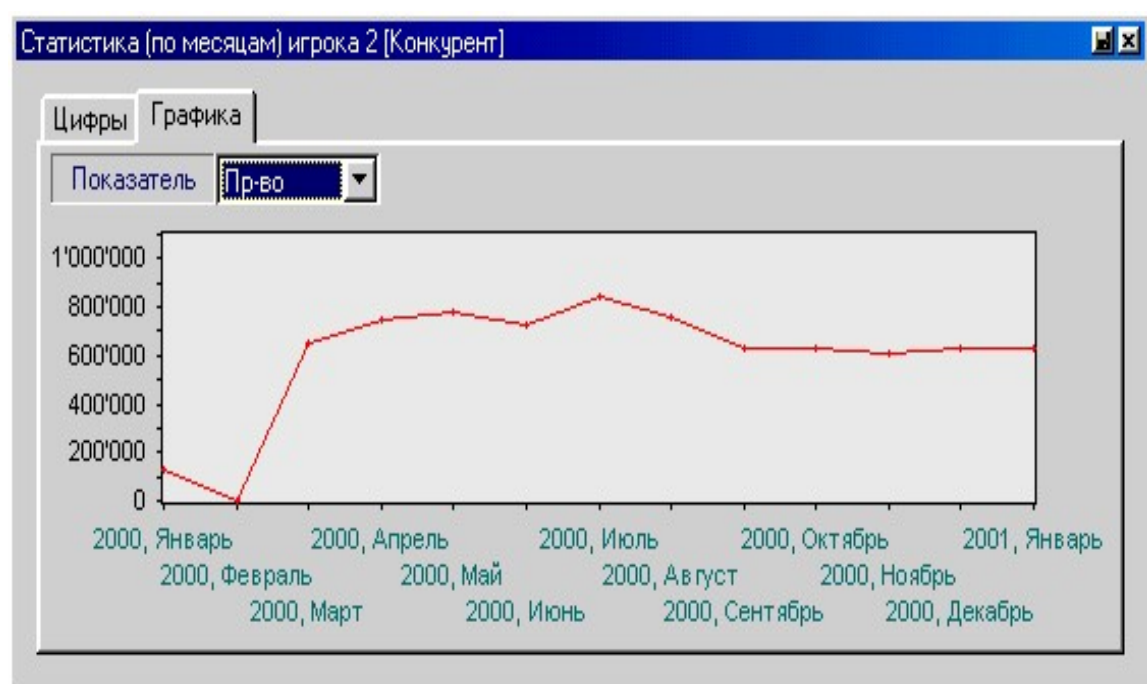



Рис. 208. Графическая форма

Статистика отображается как в табличной, так и графической форме (см. ниже). Имеется функция сохранения статистики в файл (текст либо графика — в зависимости от способа отображения). Для этого предназначена кнопка  в заголовке окна.

Программа накапливает статистику в три банка данных.

Текущая статистика (статистика по дням)

Эта статистика сохраняется в течение определенного количества дней (регулируется через *меню*). Выводится в окне «Статистика игрока», отображением которого можно управлять через *меню*.

Помесячная статистика (статистика по месяцам)

Выводится в окне «Помесячная статистика игрока», отображением которого можно управлять через *меню*.

Периодическая внутренняя статистика

Статистика этого рода нигде не отображается и используется для генерации *событий*.

6.6. КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ ПРОГРАММЫ

Экономическая игра «Market» — это моделирование производственной деятельности в реальном времени. Базовая единица времени в программе — сутки. По итогам суток происходит перерасчет данных и накопление статистики. Скоростью течения времени в программе можно управлять, задавая ее значение от 1 до 10. Кроме того, время можно останавливать. При этом все функции программы по-прежнему остаются доступными.

6.6.1. Данные программы

Конъюнктура рынка. Определяет ежедневный спрос на продукцию, формирующийся из некоторого числа категорий потребителей, каждая из которых показывает долю категории от суммарной потребности в продукции, минимальные требования к ее качеству (прочность и влагопрочность), а также максимальную цену, которые потребитель готов заплатить за продукцию с заданным качеством.

Суммарная потребность в продукции является функцией от количества ее единиц на складах у конкурентов. Периодически производится перерасчет суммарной потребности, а также качественного состава категорий. Количество дней, в течение которых конъюнктура рынка не изменится, отображается программой.

Состояние экономики. Данные из этой группы определяют общие для конкурентов параметры функционирования, участвующие в расчете себестоимости продукции, а также ограничения, накладываемые на производственную и экономическую деятельность игроков. Также сюда относятся параметры расчета конъюнктуры рынка, определяющие ограничения для категорий потребителей.

К этой группе относятся следующие данные (как переменные, так и константы):

- минимальные требования рынка к качеству;
- предел производительности в сутки;
- минимальная цена покупки продукции;
- стоимость сырья и химикатов для производства единицы продукции;
- стоимость выбросов отходов производства в окружающую среду.

Данные о производственном процессе. Каждый из игроков осуществляет управление производственным процессом путем варьирования значений ряда параметров, определяющих сущность технологии производства:

- расход волокнистой упрочняющей добавки;
- расход полимерной упрочняющей добавки;
- степень помола волокна;
- скорость бумагоделательной машины;
- концентрация массы при отливе;
- степень безотходности производства;
- степень бессточности производства;
- степень наукоемкости производства;
- степень очистки продукции от побочных компонентов.

Результатом расчетов по технологии производства являются значения показателей качества продукции (прочность и влагопрочность), а также себестоимость единицы продукции, на основании которой в совокупности с состоянием спроса игрок формирует цену на продукцию.

Игрок может производить не более определенного количества единиц продукции в день (определяется состоянием экономики). Кроме того, его продукция должна укладываться в заданные границы качества, иначе ее производство не допускается. В этом случае итоговые данные о производственном процессе отображаются серым цветом.

Состояние склада игроков. Произведенная продукция идет на склад, где хранится до тех пор, пока не будет продана. Продукция группируется в зависимости от своего качества, а также себестоимости. Каждая группа характеризуется ценой продажи, выставляемой для нее. Цена для группы может быть изменена в любой момент.

Следует заметить, что ежедневно за нахождение продукции на складе взимается пеня в размере доли от суммарной себестоимости продукции. Поэтому игроку становится невыгодно долго держать продукцию на складе.

Данные игры можно сохранять в файлы, а потом восстанавливать. При этом записываются не только сведения об игроках, экономике и рынке, но и вся статистика, а также время. Поэтому после загрузки сохраненная игра продолжается в точности с того места, с которого она была прервана.

Покупка продукции потребителями. Реализованная в программе модель функционирования рынка основана на элементарной логике.

Один раз в день потребители покупают продукцию у производителей-конкурентов. При этом для каждой категории потребителей критериями того, подходит им продукция или нет, являются ее качество и цена. В том случае, если подходящая продукция будет найдена на складе у одного из конкурентов в одной из групп продукции, то она будет куплена в количестве, равном максимуму от количества единиц на складе для подходящей группы и потребности категории потребителей.

Если же подходящая продукция будет обнаружена у обоих конкурентов (или у одного, но в разных группах продукции), то закупка из каждой группы будет определяться ценой продукции на нее. При этом самая большая удельная доля будет куплена из группы с наименьшей ценой, а самая маленькая — с наибольшей.

Изменение конъюнктуры рынка. Раз в 4–30 дней (определяется случайным образом) происходит перерасчет конъюнктуры рынка. При этом вычисляется суммарная потребность в продукции, определяемая как функция от количества единиц продукции на складе и времени в днях до следующего перерасчета. Также осуществляется деление потребителей на категории с общими запросами по качеству и цене. При этом минимальное количество категорий равно 3.

Изменение состояния экономики. Данные, определяющие состояние экономики, изменяются вследствие возникновения событий. Результатом события является модификация одной или нескольких переменных, формирующих состояние экономики. При этом если изменяются минимальные требования к качеству, то игрокам необходимо изменить параметры производства, чтобы выпускать продукцию в соответствии с изменившимися требованиями.

Проверка условий возникновения событий осуществляется с периодом 5 дней, а также в начале каждого месяца. Пределы модификации переменных, указанных в параметрах события, задаются в виде диапазона (в процентном отношении), значение из которого выбирается случайным образом.

Способ задания событий в программе реализован таким образом, что условия их возникновения могут быть легко сформулированы на естественном языке.

Следует заметить, что во всех событиях присутствует степень случайности, вне зависимости от их типа, так как каждое имеет дополнительный параметр — вероятность наступления.

События классифицируются по причине их возникновения:

а) обусловленные состоянием рынка и экономики (возникающие вследствие определенных тенденций):

- наступление возможно в начале месяца или в любой день;
- условие возникновения – тенденция, ее длительность, необходимость ее наличия у любого из игроков или у обоих.

ПРИМЕР. С вероятностью 0,33 ежемесячно изменяются значения стоимости отходов волокна (от –10% до –50%), стоимости полимерной добавки (от –20% до –30%), стоимости волокнистой добавки (от –10% до –20%) при условии, что в течение трех пятидневных периодов сохранится тенденция уменьшения количества продаж за этот период на 1% и более у любого из игроков;

б) периодические (возникающие в определенное время года или через некоторый интервал времени). Параметры:

- диапазон дней, в течение которых событие может возникнуть;
- может ли возникнуть событие в течение одного года или в любое время по прошествии указанного времени в днях;
- может ли событие возникнуть одновременно с другими.

ПРИМЕР. С вероятностью 0,03 увеличивается цена на энергию в диапазоне от 30% до 150% в течение одного года с 3 по 95-й день;

в) случайные (возникающие независимо от времени года и состояния экономики). Параметр:

- минимальный интервал (в днях) между событиями.

ПРИМЕР. С вероятностью 0,02 изменяются требования к качеству по прочности в диапазоне от 50% до 120% и по влагопрочности в диапазоне от 30% до 100% с минимальным интервалом времени между событиями такого рода в 120 дней.

Кроме этого, события различаются по характеру влияния на игрока — положительное или отрицательное. В зависимости от этого события отображаются в программе разными цветами.

В программе предусмотрена возможность модификации переменных, характеризующих состояние экономики, вручную, без вмешательства системы моделирования экономики.

6.6.2. Деятельность игрока-человека

Участник игры должен в ее ходе решать две основные задачи — управления производством и планирования сбыта продукции.

На первом этапе следует наладить производство в соответствии с требованиями рынка и собственным стремлением к минимизации себестоимости продукции. Это реализуется путем модификации переменных, которые собраны в 7 групп в зависимости от их значения. Следует отметить, что модифицировать можно не все переменные, а только те, которые отображаются зеленым цветом.

После модификации любой переменной происходит перерасчет итоговых данных о производстве. В случае, если внесенные изменения не позволяют выполнить заданные требования, отображается соответствующее сообщение, а значение переменной возвращается в прежнее состояние. Также если изменения состояния экономики создают ситуацию несоответствия требованиям к технологическому процессу, то итоговые данные отображаются серым цветом.

Если производство отвечает установленным требованиям, то игрок может выпускать продукцию в количестве не более верхнего предела, задаваемого текущим состоянием экономики. При этом игрок может сам устанавливать, сколько единиц продукта выпускать ежедневно.

Произведенные изделия сразу же идут на склад. Для них устанавливается цена продажи, равная значению одного из переменных в соответствующем списке. Продукция поступает на склад в состав той группы, которая имеет одинаковое с ней качество и себестоимость.

После поступления продукции на склад игрок может влиять на ее продажу путем модификации цены, выставяемой для группы.

6.6.3. Деятельность компьютера — виртуального конкурента

Виртуальный конкурент решает те же самые задачи, что и игрок-человек, сформулированные в математической форме.

При этом вопрос управления производством сводится к решению оптимизационной задачи, функцией цели для которой является минимизация себестоимости. Для того чтобы найти наилучшее соотношение себестоимости и качества, механизм оптимизации постоянно варьирует границы ограничений для качества в соответствии с запросами рынка.

В этих целях с определенной периодичностью осуществляется сбор статистической информации о структуре потребителей на рынке. Полученные данные задают нижние пределы требований к качеству и верхний предел себестоимости. Если текущий режим производства не укладывается в эти значения, то компьютер изменяет в сторону уменьшения объем выпуска продукции вплоть до нуля. Вообще же количество единиц продукции, выпускаемых ежедневно, является сложной статистической функцией, основанной на сравнении количества продукции на складе и количества по запросам рынка.

Планирование продаж со стороны виртуального конкурента осуществляется путем изменения цен на продукцию. Это происходит путем сравнения зафиксированного состояния рынка с продукцией, имеющейся на складе, по качеству. В случае, если на складе имеется одна или более групп продукции, удовлетворяющих по качеству потребителей, то цена определяется, исходя из удельных долей соответствующих категорий потребителей в общем их количестве.

С целью минимизации издержек, связанных с хранением продукции на складе (за это взимается ежедневная пеня), виртуальный конкурент периодически должен снижать себестоимость продукции для того, чтобы она продавалась. Это необходимо вследствие установленного для него правила, что продукция может продаваться по цене

не ниже себестоимости (для игрока-человека это правило не действует и он вполне может заниматься демпингом).

Для того чтобы сделать игру более интересной, предусмотрено 10 уровней игры конкурента: от самого низкого (1) до самого высокого (10). Уровень игры характеризуется, в основном, глубиной поиска решения оптимизационной задачи и интервалом синхронизации внутренних статистических данных с состоянием экономики.

6.7. НЕКОТОРЫЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ВЫРАБОТКЕ РАЦИОНАЛЬНОГО ПОВЕДЕНИЯ В КОНКУРЕНТНОЙ БОРЬБЕ

1. Чем вначале ошеломляет конкурент? — Живет займы и не жалеет денег на модернизацию. Финансирование науки приносит ему баснословную прибыль.

2. Надо модернизировать технологию и оборудование.

3. Необходимы инвестиции. Нужен кредит из банка.

4. На что потратить деньги в первую очередь?

5. Ведь определить, куда вкладывать деньги, живой человек может значительно хитроумнее, чем «железо».

6. Надо ли вырабатывать много плохой продукции на склад?

7. Может лучше приостановить производство и распродать продукцию со склада по более низкой цене, чем конкурент, даже себе в убыток? Зато потом мы можем отдохнуть от пени за складирование.

8. В чем сила конкурента? — Он вычисляет оптимальный технологический режим, а не угадывает.

9. Вручную нащупывать оригинальный технологический режим нужно на малых партиях продукции.

10. Как только будут покупать, увеличить объем производства.

11. В чем слабость конкурента? — В заорганизованности. Значит надо его бить нестандартными решениями.

12. Если у нас есть чем гордиться, то не надо жалеть денег на рекламу. Ведь даже в том случае, когда наша продукция по всем показателям лучше, покупать, как и покупали, будут у конкурента, поскольку о нашей продукции покупатель пока ничего не знает. Нужно быстрее завоевать симпатии покупателя (время до пересчета).

13. Завоевав покупателя, нужно управлять емкостью рынка. Пока покупают, следует насытить рынок нашей продукцией.

6.8. АНАЛИЗ И СИНТЕЗ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛОГИКИ. ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ «SINTEZ»

6.8.1. Назначение и области использования программного модуля

Тренажер предназначен для анализа и синтеза химико-технологических систем с помощью математической логики.

6.8.2. Функциональные возможности программного модуля

Модуль позволяет:

- формировать структуру химико-технологических систем с помощью библиотеки пиктограмм технологических операторов и материальных потоков;
- именовать и нумеровать технологические операторы и материальные потоки в соответствии с их функциональным назначением;
- формировать требуемый набор свойств технологических операторов, материальных потоков и химико-технологической системы как единого целого;
- с помощью встроенного интерпретатора формализовать логические высказывания для последующего решения систем линейных неравенств;
- формировать набор значений начальных условий с учетом текущих цен на ресурсы, наукоемкости анализируемых технологических процессов и требований к качеству выпускаемой продукции;
- организовывать вычислительный эксперимент по определению оптимальной структуры химико-технологических систем в соответствии с заданными требованиями.

6.8.3. Перечень и назначение файлов программного пакета

Sintez.exe Главный исполняемый файл тренажера

Example_00.dat Файл данных для расчета

cgr1.snz Файл наименований показателей матрицы свойств

_cgr34.snz Файл наименований показателей матрицы свойств

_cgr35.snz Файл наименований показателей матрицы свойств

Sintez.hlp Файл помощи

Sintez.cnt Файл оглавления

6.8.4. Теоретические основы программного модуля

Алфавит языка логики высказываний содержит три категории знаков.

Во-первых, это пропозициональные буквы: $p, g, r, s, t, p1, r1, s1, t1, h2, g2$ и т. д.

Во-вторых, это логические союзы:

\neg — знак отрицания;

\wedge — знак конъюнкции;

\vee — знак дизъюнкции;

\rightarrow — знак импликации;

\leftrightarrow — знак эквиваленции;

\uparrow — знак строгой дизъюнкции.

В-третьих, это технические знаки: (— левая скобка;) — правая скобка.

Логические формулы — это такие конечные последовательности знаков алфавита, которые построены по определенным правилам и образуют законченные выражения языка высказываний.

Примеры формул:

$\neg A$	не А;
$A \wedge B$	А и В;
$A \vee B$	А или В;
$A \rightarrow B$	если А, то В;
$A \leftrightarrow B$	А тогда и только тогда, когда В;
$A \uparrow B$	либо А, либо В.

Заглавные латинские буквы A_6, B_6, C_6, \dots , которые употребляются в выражениях формул, принадлежат не языку логики высказываний, а его метаязыку. В отличие от пропозициональных переменных p, g, r, \dots , А и В называют метапеременными или метабуквами.

$\neg A, (A \wedge B), (A \vee B), (A \rightarrow B), (A \leftrightarrow B), (A \uparrow B)$ — не формулы, а схемы формул, например $(A \vee B)$ может быть схемой формул $(p \vee g), ((p \rightarrow g) \wedge (p \leftrightarrow s))$ и др. $(A \wedge B)$ — схема формул $(p \wedge g), (\neg g \wedge \neg g), ((p \wedge r) \wedge (s \vee t))$.

Схему процесса построения формул можно представить в виде древовидной фигуры, которую называют деревом формулы (рис. 209).

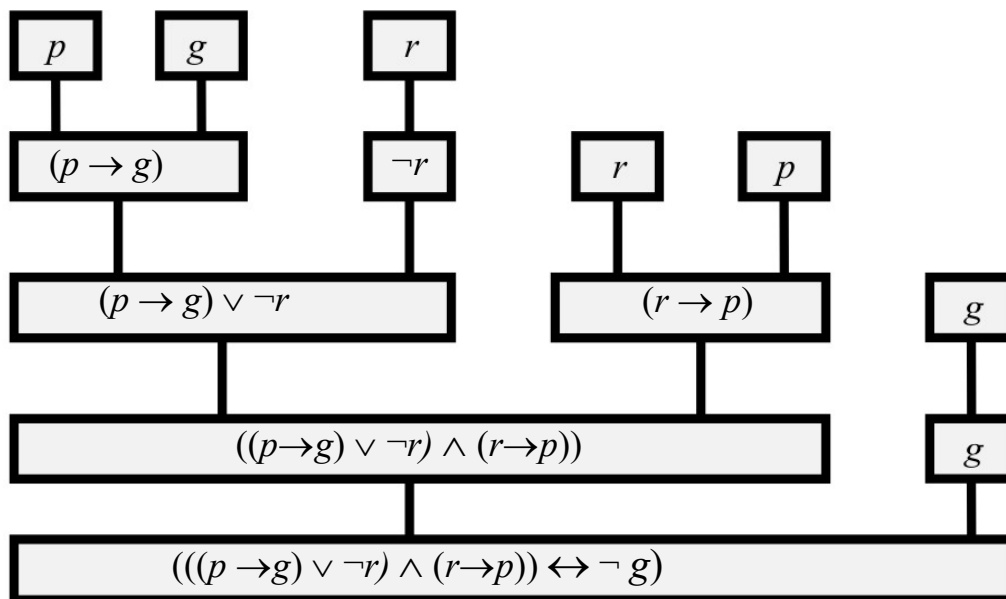


Рис. 209. Дерево логической формулы

Подформулы А и В в формуле $(A \wedge B)$ называются конъюнктами, а в формуле $(A \vee B)$ — дизъюнктами, в формуле $(A \rightarrow B)$ подформула А называется антецедентом, а подформула В — консеквентом.

В математической формальной логике можно пользоваться и бесскобочным языком: p, g, r, s, t — логические знаки; \bar{N} — отрицание; K — конъюнкция; A — дизъюнкция; C — импликация; E — эквиваленция; I — строгая дизъюнкция.

Формула $((\bar{p} \leftrightarrow g) \rightarrow (p \vee (r \wedge \bar{s})))$ в бесскобочном языке будет иметь вид $CENpgApKrNs$.

6.8.5. Рабочий интерфейс и структура тренажера

Рабочее поле интерфейса тренажера состоит из шести элементов:

- верхнее меню (рис. 212);
- панель инструментов I (рис. 211);
- панель инструментов II (рис. 212);
- библиотека пиктограмм технологических операторов (рис. 213);
- рабочее поле (планшет) окна проекта (рис. 210);
- окно матриц свойств технологических операторов, материальных потоков и химико-технологической системы (рис. 215, 216, 217).

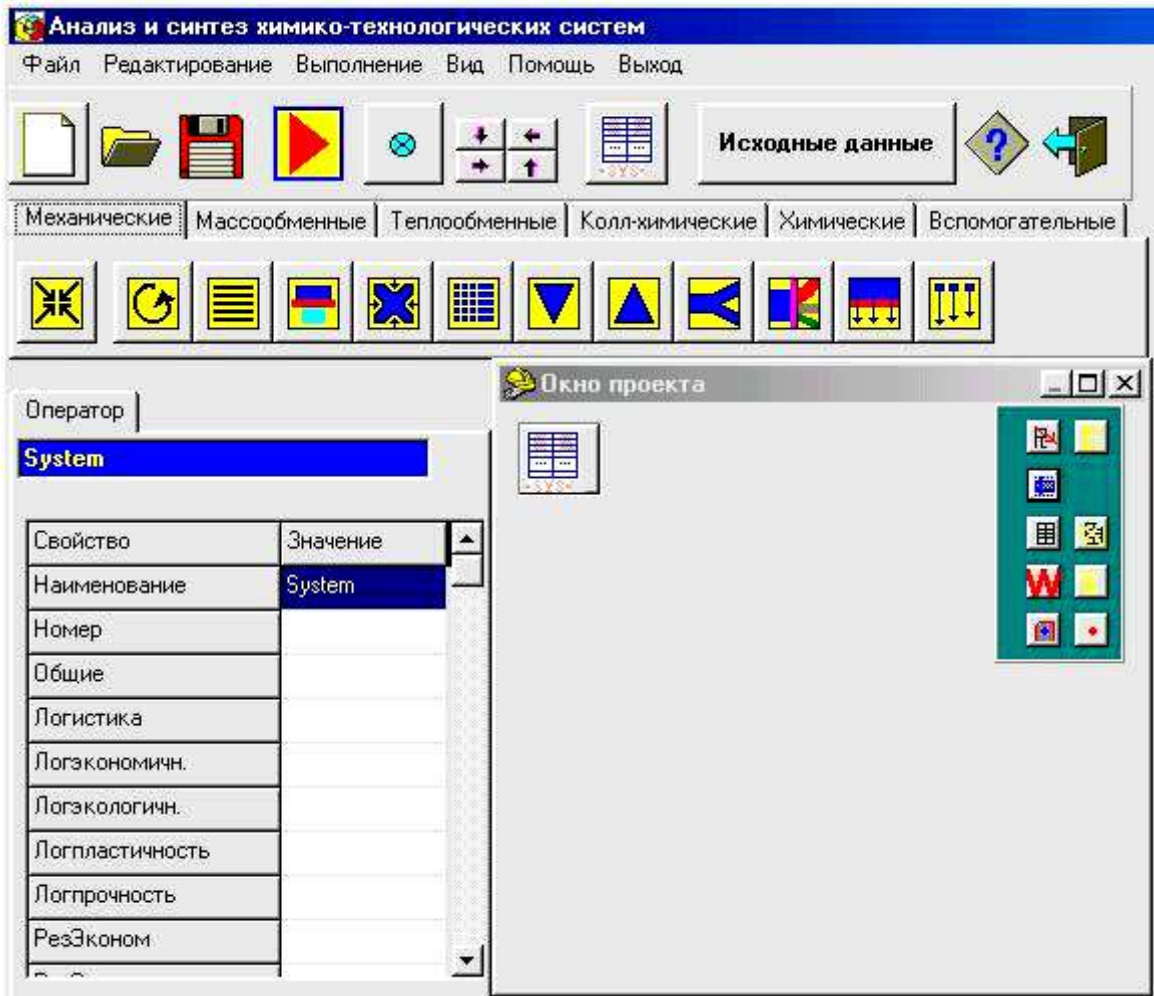


Рис. 210. Рабочий интерфейс тренажера

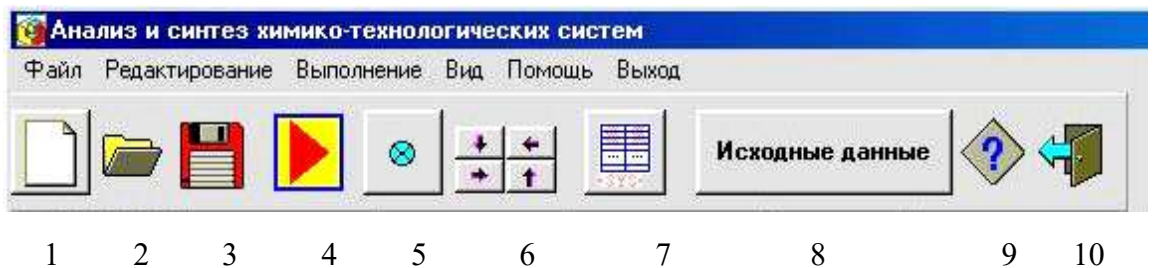


Рис. 211. Верхнее меню и панель инструментов тренажера



Рис. 212. Список пунктов меню «Вид»

Характеристика элементов панели инструментов

№ кнопки	Назначение командной кнопки
1	Создать новый проект
2	Загрузить файл сохраненного проекта
3	Сохранить проект
4	Выполнить расчет
5	Поместить на планшет пиктограмму материального потока
6	Ориентировать активированный материальный поток (стрелки)
7	Поместить на планшет пиктограмму химико-технологической системы
8	Вызвать диалоговое окно исходных данных (рис. 224)
9	Вызвать содержание файла помощи
10	Выход из программы

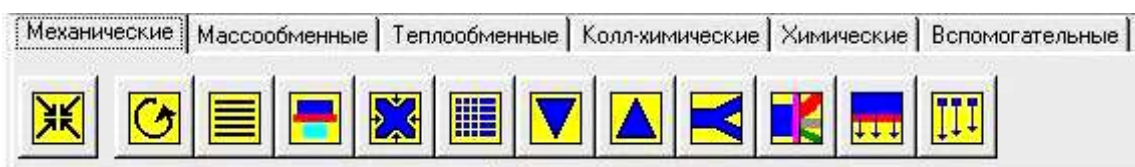


Рис. 211. Панель выбора технологических операторов

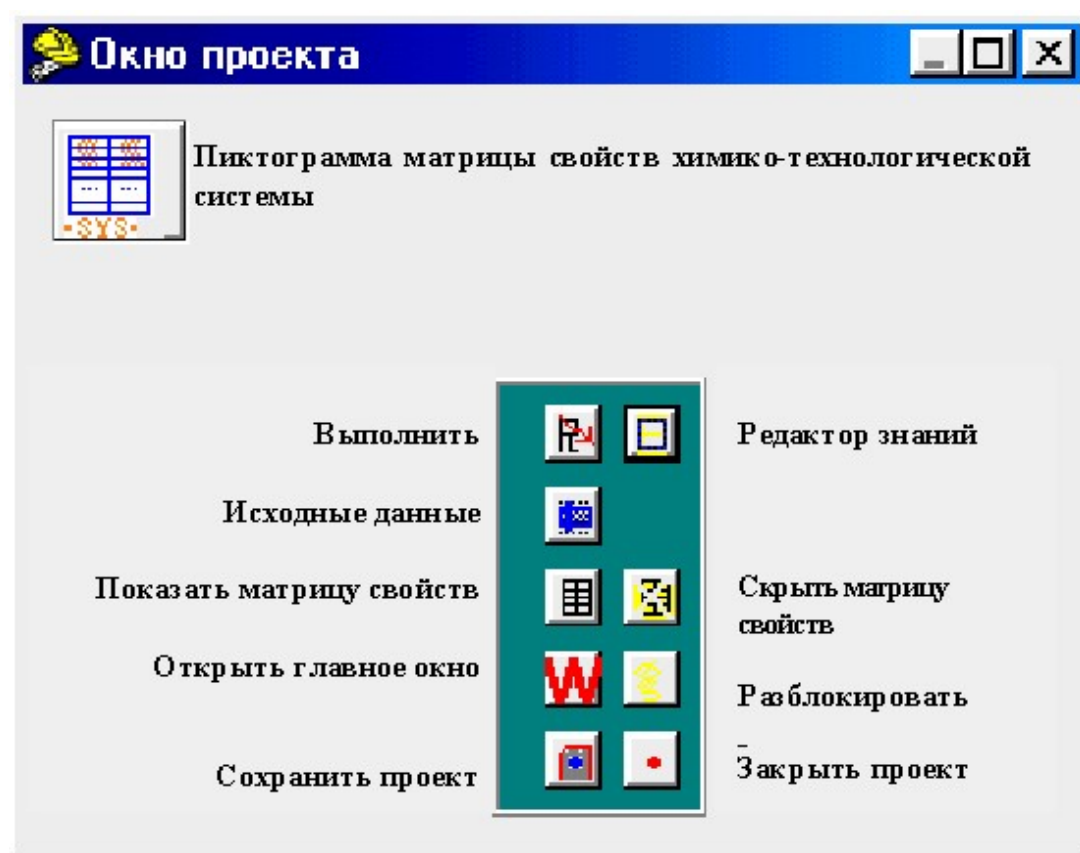




Рис. 214. Панель инструментов окна Проекта




Оператор	
CTRL2	
Свойство	Значение
Наименование	CTRL2
Номер	
Значимость	
Условия присутствия	



Поток	
CTRL4	
Свойство	Значение
Наименование	CTRL4
Номер	
Значимость	
Условия присутствия	

Рис. 215. Матрица свойств операторов Рис. 216. Матрица свойств потоков



Система	
System	
Свойство	Значение
Наименование	System
Номер	
Общие	
Логистика	
Логэкономичн.	
Логэкологичн.	
Логпластичность	
Логпрочность	
РезЭконом	

Рис. 217. Матрица свойств системы

6.8.6. Запуск и управление работой тренажера

1. Щелкнуть по кнопке «Создать новый проект» (позиция 1, рис. 211).
 2. Щелкнуть по кнопке «Системный блок» (позиция 7, рис. 211)
- для помещения на планшет пиктограммы химико-технологической системы, помня, что ее можно перемещать при нажатой левой клавиши мыши.

Библиотека пиктограмм технологических операторов

Механические		Теплообменные			
1		Смешение	17		Нагревание
2		Перемешивание	18		Охлаждение
3		Прессование	19		Контактный теплообмен
4		Вакууммирование	20		Теплопередача
5		Формование	21		Лучистый теплообмен
6		Измельчение	22		Ректификация
7		Концентрирование	23		Выпаривание
8		Разбавление	24		Обжиг
9		Разделение	25		Сжигание
10		Сортирование	Коллоидно-химические		
11		Фильтрация	26		Растворение
12		Седиментация	27		Диспергирование
Массообменные		28		Флокуляция	
13		Сорбция	29		Коагуляция
14		Десорбция	Химические		
15		Ионообмен	30		Окисление-восстановление
16		Экстракция	31		Электрохимия
Вспомогательные		32		Поликонденсация	
		Вход потока	33		Полимеризация
		Выход потока			Выход потока
		Выход потока			Выход потока
		Выход потока			Выход потока
		Пиктограмма потока			Выход потока
					Пиктограмма системы

3. В соответствии с особенностями технологии и формулировкой задачи на планшет помещаются пиктограммы технологических операторов по щелчку ЛКМ на соответствующую пиктограмму панели выбора операторов (рис. 213) и материальных потоков (рис. 211, позиция 5). При этом на планшете будет постепенно создаваться блок-схема химико-технологической системы (рис. 218–224).

4. Чтобы сформировать связи, нужно щелкнуть (активировать) по двум пиктограммам технологических операторов или потоков, которые должны быть связаны, допустим 1 и 4 рис. 220.

5. На свободном поле планшета нажать правую клавишу мыши. Появится диалоговое окно (рис. 219). В меню выбрать позицию «Соединить». Две выбранные пиктограммы будут соединены (рис. 220).

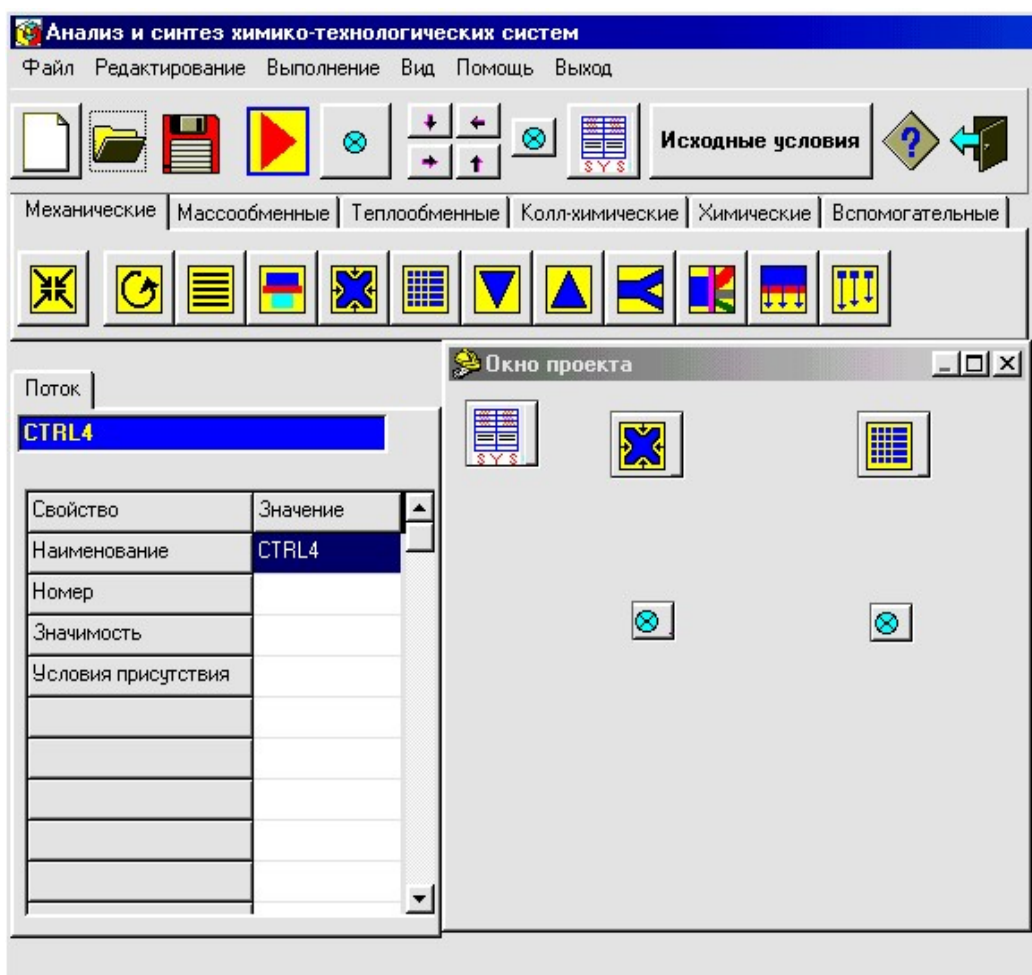


Рис. 218. Помещение на планшет пиктограмм операторов и потоков

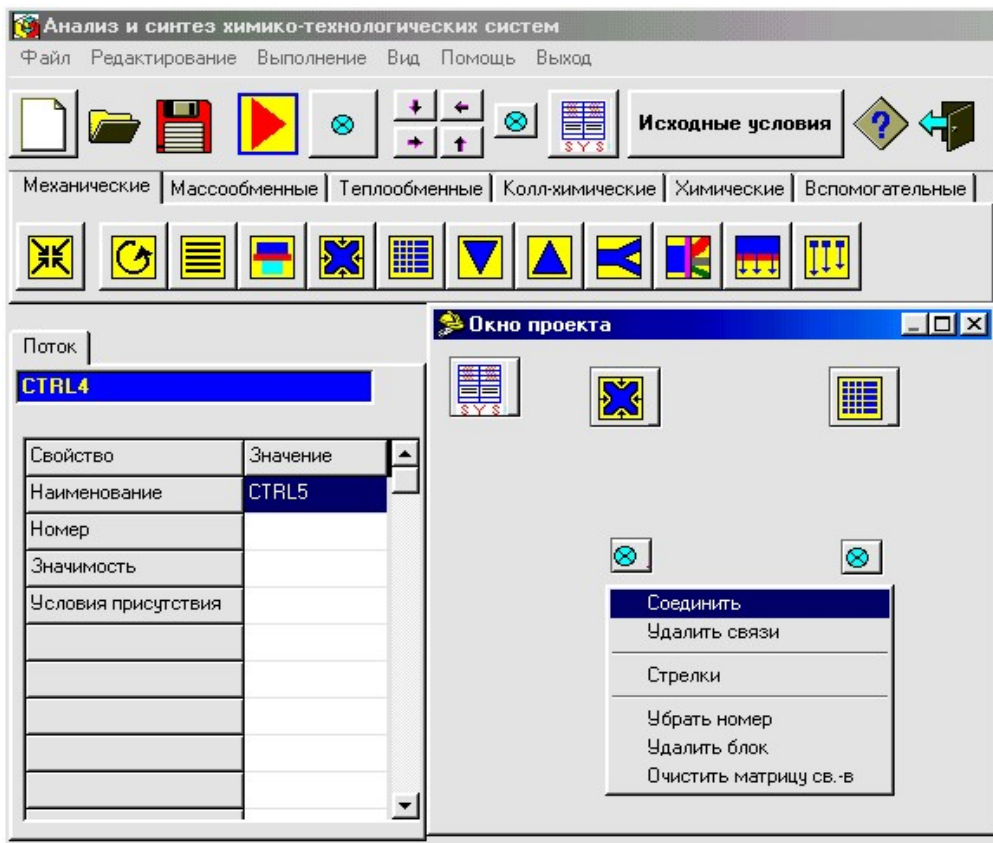


Рис. 219. Всплывающее меню управления создаваемой структурой

6. Чтобы строить сложные схемы, нужно обеспечить возможность иметь дело со сложными ломаными линиями материальных потоков. Поэтому размер пиктограммы 3 рис. 220 нужно минимизировать. Для этого при активированной пиктограмме в матрице свойств этого псевдопотока выбирают пункт «Размер» (рис. 221), а в предложенном списке выбирают пункт min. Фрагмент приобретает вид рис. 222.

7. Для дальнейшей работы технологические операторы и материальные потоки необходимо пронумеровать. Это делается с помощью матриц свойств (рис. 215–217), где в позицию «Номер» заносится соответствующее число.

8. Чтобы материальным потокам придать направление (ориентировать их), можно поступить двояко:

- на панели инструментов выбрать стрелку с соответствующим направлением (рис. 211, позиция б);
- на пиктограмме потока щелкнуть ПКМ и в появившемся списке выбрать пункт «Стрелки» (рис. 219).

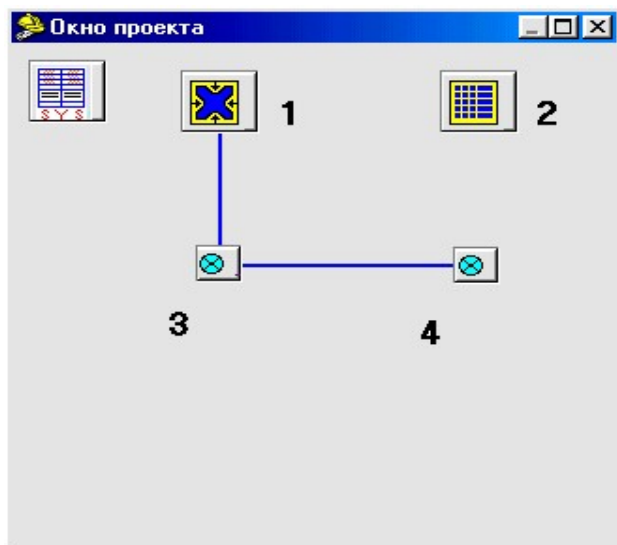


Рис. 220. Соединение пиктограмм

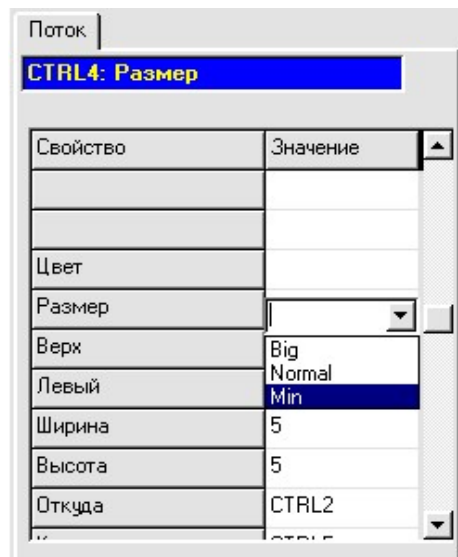


Рис. 221. Минимизация размеров пиктограммы нумерованного потока

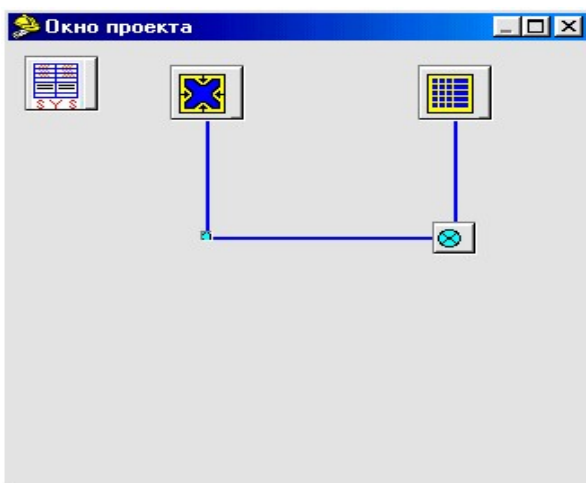


Рис. 222. Минимизированная пиктограмма нумерованного потока

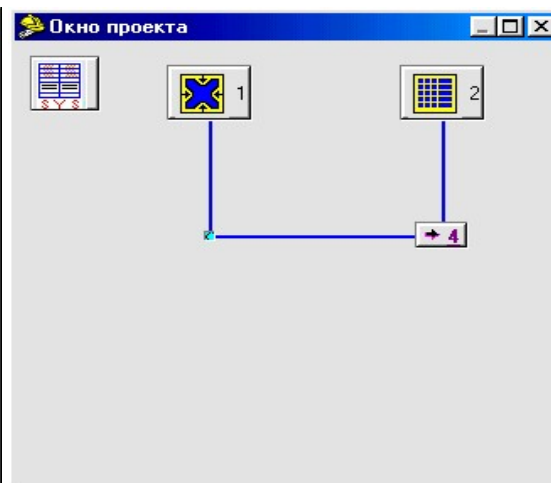


Рис. 223. Нумерация технологических операторов и ориентация потоков

9. Конкретные обстоятельства по ценам на ресурсы, степени наукоемкости технологических процессов анализируемого или синтезируемого производства, а также требования к качеству готовой продукции формализуются с помощью диалогового «Окна исходных данных» (рис. 224).

10. Большие размеры блок-схем технологических систем следует обрабатывать в полноэкранном режиме «Окна проекта». Для удобства на планшете помещена **Панель инструментов II** (рис. 225), а также можно пользоваться меню, выпадающим по ПКМ (рис. 224).

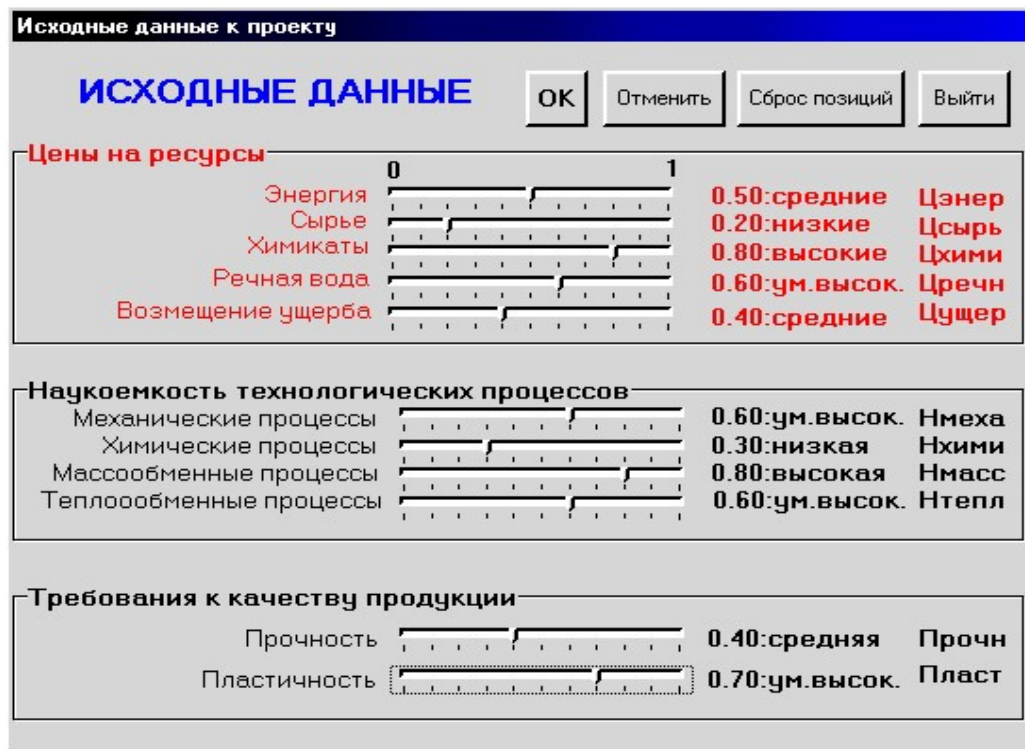


Рис. 224. Окно для настроек начальных условий

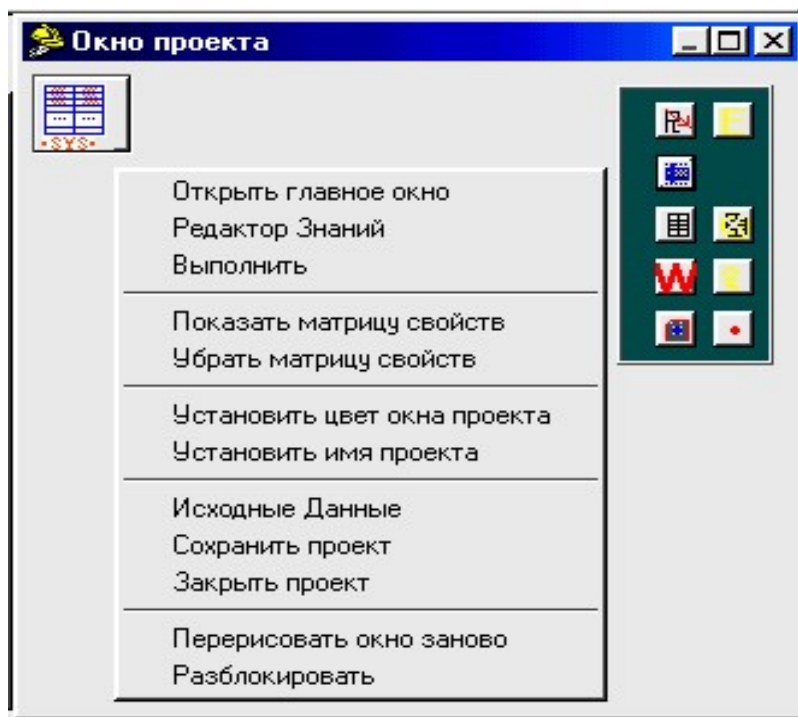


Рис. 225. Всплывающее по ПКМ меню управления свойствами «Окна Проекта»

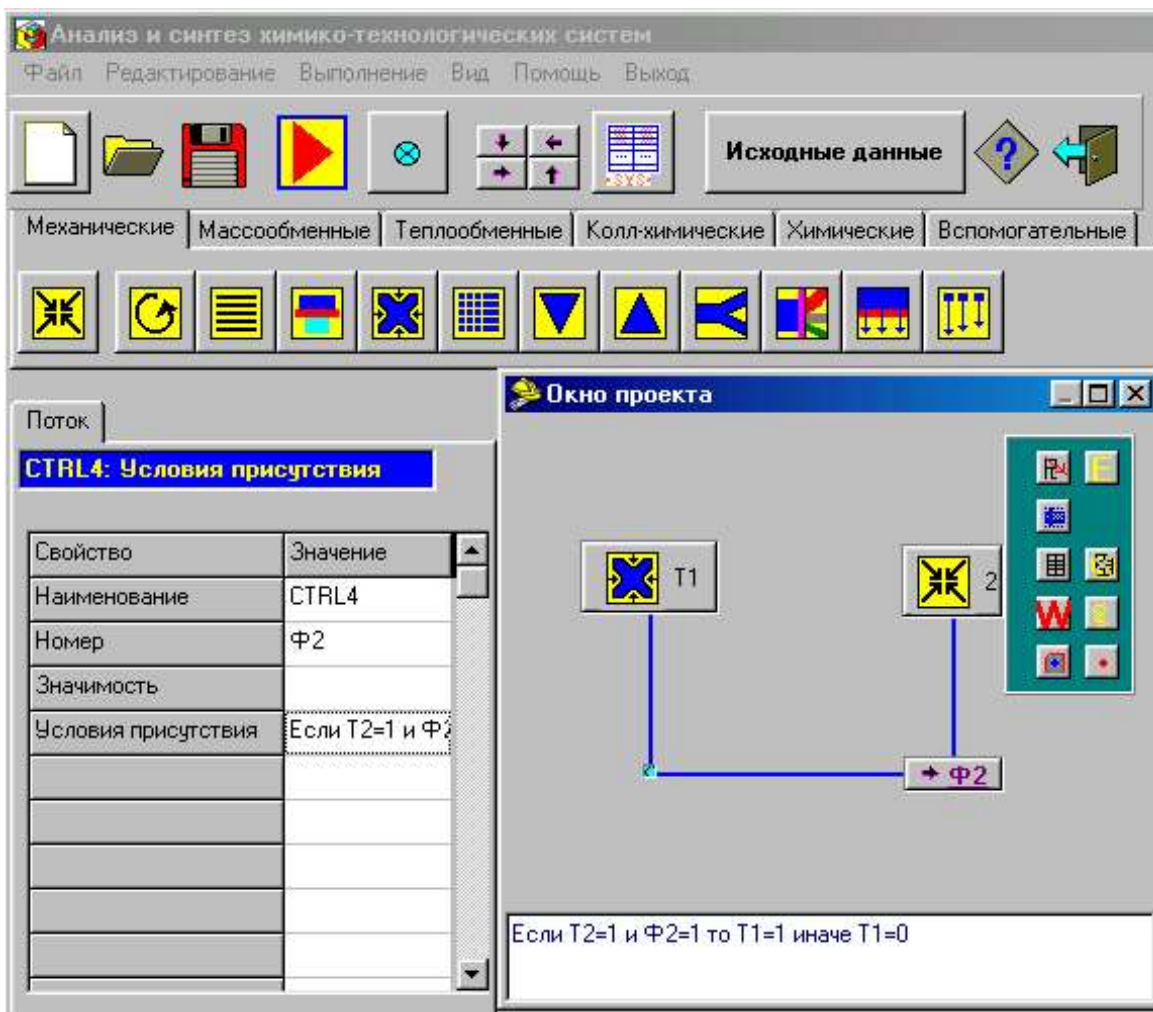


Рис. 226. Рабочее окно интерфейса на стадии формализации высказываний

11. Свойства, которыми должна обладать химико-технологическая система, устанавливаются с помощью матрицы свойств при активированной пиктограмме Системный блок (рис. 217).

12. Запуск на исполнение осуществляется тремя способами:

- командной кнопкой 4 на **Панели инструментов I** (рис. 211),
- командной кнопкой «Выполнить» на **Панели инструментов II** (рис. 225);
- выбором пункта «Выполнить» меню, открывающегося по ПКМ (рис. 214).

13. Чтобы организовать вычислительный эксперимент путем изменения условий функционирования, нужно щелкнуть по командной кнопке «Разблокировать».

6.8.7. Описание рабочего примера

В качестве конкретного примера, иллюстрирующего полезность математической логики, на рис. 225 изображена исходная многовариантная структурная блок-схема химико-технологической системы утилизации волокнистых отходов с избыточной информацией.

В качестве основного вида продукции, изготовленной из утилизируемой макулатуры, предложено выбрать обойную бумагу. Такой выбор хорош тем, что выводит макулатуру из многократного ее повторного использования. Наклеенные на стены обои долго не превратятся во вторсырье. К прочности обойной бумаги не предъявляется очень высоких требований, поскольку за весь период эксплуатации обоев она не работает ни на сжатие, ни на растяжение. Но есть и специфические требования к качеству обойной бумаги. Во-первых, она должна воспринимать рельефное тиснение без деформации, т. е. обладать высокой растяжимостью. Во-вторых, будучи пропитанной водным клеем, она не должна разрываться от собственного веса при выклейке обоев, т. е. быть достаточно влагопрочной. В-третьих, нанесенный на нее рельефный рисунок, не должен изменять глубину тиснения при влажном разглаживании на гладкой плоской поверхности стены.

Требуемый комплекс свойств может обеспечить бумаге применение полимерных связующих. Многие ценные и перспективные для нас полимеры не растворяются в воде и не плавятся при повышенной температуре. Поэтому их использование в технологии бумаги существенно затруднено. Самым интересным, самым универсальным и самым многотоннажным классом полимеров для наших целей являются водные дисперсии. Дисперсной фазой могут быть термопластичные и термореактивные смолы, а также все разновидности эластомеров, например, синтетические каучуковые латексы.

Будучи по природе своей резиной, латексы придают бумаге свойства влагопрочности, пластичности и растяжимости. Они существенно упрочняют бумагу из макулатуры, а добавки к ним таких веществ, как жидкое стекло, способны обеспечить устойчивость тисненого рельефа при выклейке обоев.

Одной из основных производственных операций, связанной со своеобразием макулатуры, является необходимость упрочнения листовых материалов, поскольку растительные волокна, уже однажды

прошедшие размол, отлив и сушку, отбухли, ороговели и в значительной степени утратили свои бумагообразующие свойства.

Упрочнение целесообразно осуществлять с помощью водных дисперсий бутадиенстирольных полимеров (каучуковых латексов).

В микрогетерогенной водной коллоидной системе взаимодействуют разнородные, разновеликие и разнопотенциальные микроскопические частицы волокон и каучуковых глобул. Эти частицы имеют одноименный электроотрицательный статический заряд, поэтому они не слипаются при контактах и требуют введения внешнего электролитного коагулянта, роль которого чаще всего выполняет сульфат алюминия $Al_2(SO_4)_3$. При этом в результате взаимодействия гидродисперсии полимера с электролитом частицы осадка каучука получаются очень крупными (преимущественной формой коагуляции является гомокоагуляция — процесс слипания однородных мелкодисперсных частиц). В то время как целесообразной формой коагуляции латекса в водно-волокнистой суспензии является гетероадагуляция (процесс слипания разнородных разновеликих частиц или процесс налипания мелких частиц каучука на макроповерхность волокон). Крупные частицы осадка раздвигают волокна, разрыхляют структуру листового материала и ослабляют межволоконные связи, тогда как фиксация мелкодисперсных частиц упрочняющих добавок на поверхности волокон заменяет жесткие связи волокно — волокно на пластичные волокно — полимер — волокно. В результате получается продукция, выдерживающая большое число двойных перегибов (высокое сопротивление излому), обладающая значительной влагонепрочностью и повышенным сопротивлением истиранию.

Надо также обратить внимание на то, что при обеспечении гетероадагуляции для достижения высокого качества листовых материалов требуемые расходы упрочняющих полимеров оказываются значительно меньшими, чем при гомокоагуляции. При этом фиксация полимера на волокнах предотвращает попадание химических веществ в сточные воды и снижает загрязнение окружающей среды.

Главным условием обеспечения гетероадагуляции следует считать предельное, достаточно малое содержание электролитов в волокнистой суспензии до введения в нее упрочняющих добавок. Это условие трудно выполнить в реальных производственных условиях, поскольку добавляемый для коагуляции сульфат алюминия накапли-

вается в рециркулирующих потоках оборотной воды и ухудшает характеристики всей технологии.

Соблюдение требований обеспечения высокого качества продукции, приемлемых экономических показателей технологии и допустимого уровня загрязнения окружающей среды наталкивается на совершенно естественные противоречия.

С одной стороны, необходимо максимально использовать оборотную воду для уменьшения объема стоков, но это приведет к удорожанию продукции за счет увеличения расхода упрочняющей полимерной добавки, так как в оборотной воде будет накапливаться содержание сульфата алюминия, вредно влияющее на характер коагуляции латекса.

С другой стороны, если оборотную и сточную воду подвергнуть глубокой очистке, например термической деминерализации, то экологические и технологические требования будут удовлетворены, но финансовые затраты на деминерализацию приведут к банкротству предприятия по экономическим причинам.

Таким образом, для оптимального оперативного технологического управления необходимо решать компромиссную задачу оптимизации, результатом которой должны быть найдены такие значения управляющих воздействий, которые обеспечивают получение продукции заданного качества при допустимом уровне загрязнения окружающей среды и минимизируют функцию цели, стоимость энерготехнологических затрат, или максимизируют прибыль от реализации продукции.

Избыточность информации блок-схемы заключается в том, что в нее включено больше материальных потоков, чем требуется для номинального режима работы. При синтезе бессточной технологии в схеме нужно оставить столько и таких потоков, чтобы при функционировании системы обеспечивались качество продукции, ее дешевизна, технологичность и максимальная степень интеграции с окружающей средой.

Исходная многовариантная структурная блок-схема состоит из шести элементов (технологических операций) и 14 материальных потоков.

Из макулатурного сырья $Q(1)$ можно получить продукцию в виде листового материала $Q(13)$, если в волокнистую суспензию

вводить упрочняющие добавки гидродисперсий полимеров $Q(3)$, которые коагулировать электролитами, добавляя их извне $Q(8)$ или извлекая их из оборотной воды на узле деминерализации $Q(9)$. Если для редиспергирования макулатуры использовать только оборотную воду $Q(5)$, в которой в виде накопленных растворенных загрязнений содержится коагулянт, то осаждение гидродисперсий происходит в неблагоприятном режиме, что приводит к перерасходу упрочняющей добавки и удорожанию продукции. Если работать на речной воде $Q(2)$, то расход полимеров уменьшится, но появится сток $Q(14)$, что делает технологию неэкологичной. Если вместо речной воды $Q(2)$ использовать только деминерализованную $Q(6)$, то при требуемой экологичности системы не получится требуемой дешевизны продукции (рис. 227).

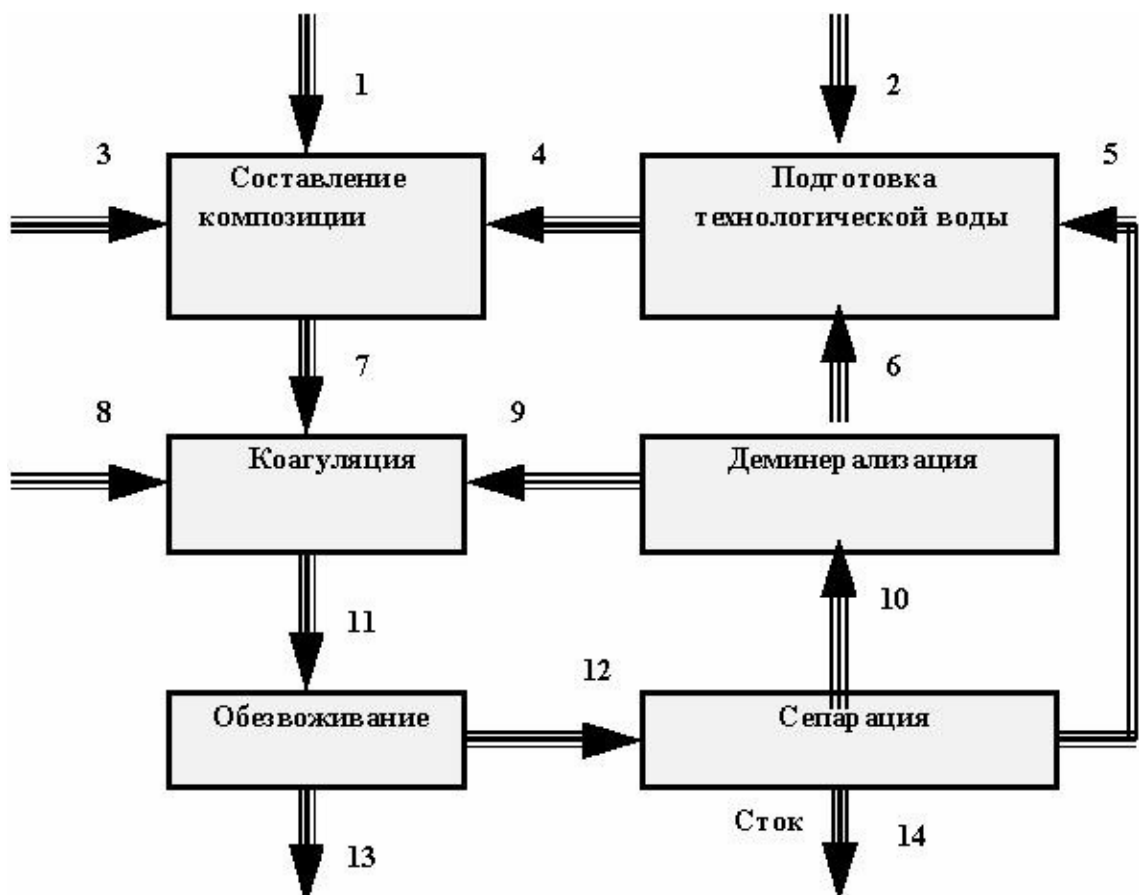


Рис. 227. Принципиальная многовариантная блок-схема химико-технологической системы утилизации волокнистых отходов

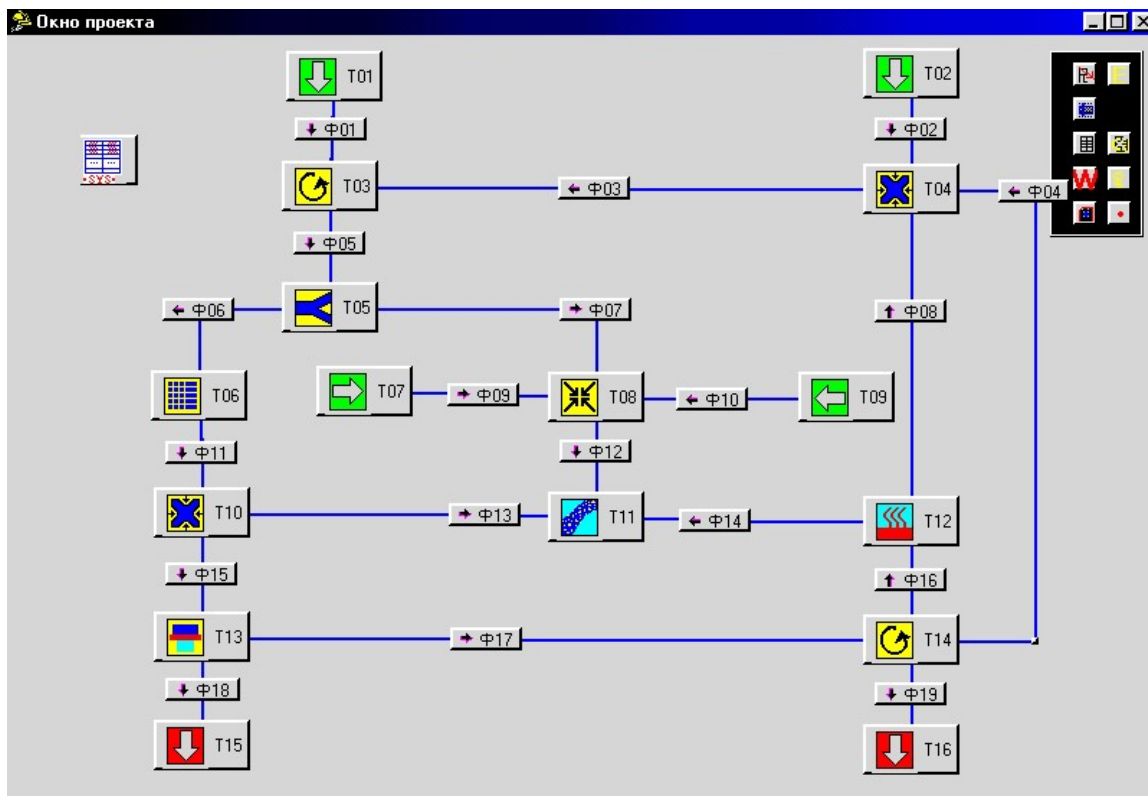




Рис. 228. Формализованная на основании рис. 227 структурная схема химико-технологической системы утилизации волокнистых отходов

Начальные условия

Цэнер:=0.00; Нмеха:=0.00;
 Цсырь:=0.00; Нхими:=0.00;
 Цхими:=0.00; Нмасс:=0.00;
 Цречн:=0.00; Нтепл:=0.00;
 Цушер:=0.00; Прочн:=0.00;
 Пласт:=0.00

Т а б л и ц а 67

Логические высказывания, формализующие условия присутствия в блок-схеме технологических операторов

№	Пиктограмма	Название оператора	Назначение оператора	Условие присутствия оператора
T01		Вход потока	Склад сырья	$T01:=1;$
T02		Вход потока	Проточный водоем	Если (Цушер > 0.65 и Цречн > 0.65) то $T02:=0;$ иначе $T02:=1;$

№	Пиктограмма	Название оператора	Назначение оператора	Условие присутствия оператора
T01		Вход потока	Склад сырья	T01:=1;
T02		Вход потока	Проточный водоем	Если (Цушер >0.65 и Цречн >0.65) то T02:=0; иначе T02:=1;
T03		Перемешивание	Разбавление	T03:=1;
T04		Смешение	Узел подготовки технологической воды	T04:=1;
T05		Разделение	Диспетчеризация	Если Ф06:=1 и Ф07:=1 то T05:=1 иначе T05:=0
T06		Измельчение	Механическое упрочнение	Если Ф06 = 1 то T06: = 1; иначе T06: = 0;
T07		Вход потока	Склад полимеров	Если Ф07 = 1 то T07: = 1 ; иначе T07: = 0;
T08		Смешение	Химическое упрочнение	Если Ф07 = 1 то T08:= 1; иначе T08: = 0;
T09		Вход потока	Склад коагулянта	Если Ф10 = 1 то T09: = 1; иначе T09: = 0;
T10		Формование	Формование листа	Если Ф06 = 1 или Ф07 = 1 или (Ф06 = 1 и Ф07 = 1) то T10 =1; иначе T10 = 0;
T11		Коагуляция	Гетероадагуляция	Если Ф07 = 1 то T11:= 1; иначе T11: = 0;
T12		Выпаривание	Узел деминерализации	Если Ф08=1 то T12:=1; иначе T12:=0;
T13		Вакууммирование	Обезвоживание	Если Ф15 = 1 то T13:=1; иначе T13 = 0;
T14		Перемешивание	Сборник оборотных вод	Если Ф17 = 1 то T14:=1; иначе T14 = 0;
T15		Выход потока	Склад продукции	Если Ф18 = 1 то T15:=1; иначе T15=0;
T16		Выход потока	Река, принимающая сточные воды	Если Ф19=0 то T16:=0 иначе T16:=1;

**Логические высказывания, формализующие условия
присутствия в блок-схеме материальных потоков**

№ потока	Назначение потока	Условие присутствия потока
Ф01	Поток сырья	Ф01:=1;
Ф02	Поток речной воды	Если T02=1 то Ф02:=1; иначе Ф02:=0;
Ф03	Технологическая вода	Ф03:=1;
Ф04	Поток оборотной воды	Если Ф02=0 и Ф08=0 то Ф04:= 1; иначе Ф04:=0;
Ф05	Поток на упрочнение	Ф05:=1;
Ф06	На механическое упрочнение	Ф06:=1;
Ф07	На химическое упрочнение	Если Пласт >0.5 то Ф07:=1; иначе Ф07:=0;
Ф08	Деминерализованная вода	Если Ф07 = 1 и Цречн > 0.35 и Цэнер < 0.25 и Цущер > 0.45 и Нтепл > 0.45 и Нхими > 0.45 и Нмасс > 0.45 то Ф08:=1; иначе Ф08:=0;
Ф09	Полимерная упрочняющая добавка	Если Ф07 = 1 то Ф09: = 1; иначе Ф09: = 0;
Ф10	Поток внешнего коагулянта	Если Ф14 = 1 то Ф10 := 0; иначе Ф10: = 1;
Ф11	Размолотая волокнистая суспензия	Если Ф06 = 1 то Ф11: = 1; иначе Ф11: = 0;
Ф12	На гетероадагуляцию	Если Ф07 = 1 то Ф12:= 1; иначе Ф12: = 0;
Ф13	После химического упрочнения	Если Ф07 = 1 то Ф13:= 1; иначе Ф13: = 0;
Ф14	Поток рассола внутреннего коагулянта	Если T12 = 1 то Ф14: = 1; иначе Ф14: = 0;
Ф15	На обезвоживание	Если T10 = 1 то Ф15:=1; иначе Ф15 = 1;
Ф16	На деминерализацию	Если T12=1 то Ф16:=1; иначе Ф16:=0;
Ф17	Оборотная вода	Если T13 = 1 то Ф17:=1; иначе Ф17=0;
Ф18	Продукция на склад	Если T13 = 1 то Ф18 = 1; иначе Ф18 = 0;
Ф19	Сточная вода	Если Ф02=0 то Ф19:=0; иначе Ф19:=1;

6.8.7.1. Логические высказывания, формализующие свойства химико-технологической системы. Если применяется только механическое упрочнение, то можно добиться 75% прочности

Если Ф06 = 1 и Ф07 = 0, то РезПрочн := 0,75.

Если применяется химическое упрочнение, но работают только на оборотной воде, то пластичность обеспечивается на 25%.

Если Ф07 = 1 и Ф04 = 1 и Ф02 = 0 и Ф04 = 0, то РезПласт: = 0,25.

Если применяется химическое упрочнение, но работают только на пресной воде, то пластичность обеспечивается на 85%.

Если $\Phi07 = 1$ и ($\Phi04 = 1$ или $\Phi02 = 1$ или ($\Phi04 = 1$ и $\Phi02 = 1$)) то $РезПласт := 0,85$.

Если применяется только механическое упрочнение, то пластичность обеспечивается на 15%.

Если $\Phi06 = 1$ и $\Phi07 = 0$ то $РезПласт := 0,15$.

Если применяется только механическое упрочнение и степень наукоёмкости механических процессов больше 80%, то экономичность получается около 85%, иначе экономичность обеспечивается только на 50%.

Если $\Phi06 = 1$ и $\Phi07 = 0$ и $Нмехан > 0,8$ то $РезЭконом := 0,85$; иначе $РезЭконом := 0,5$.

Высокая степень экологичности получается тогда, когда отсутствует сток.

Если $\Phi19 = 0$ то $РезЭколог := 1$.

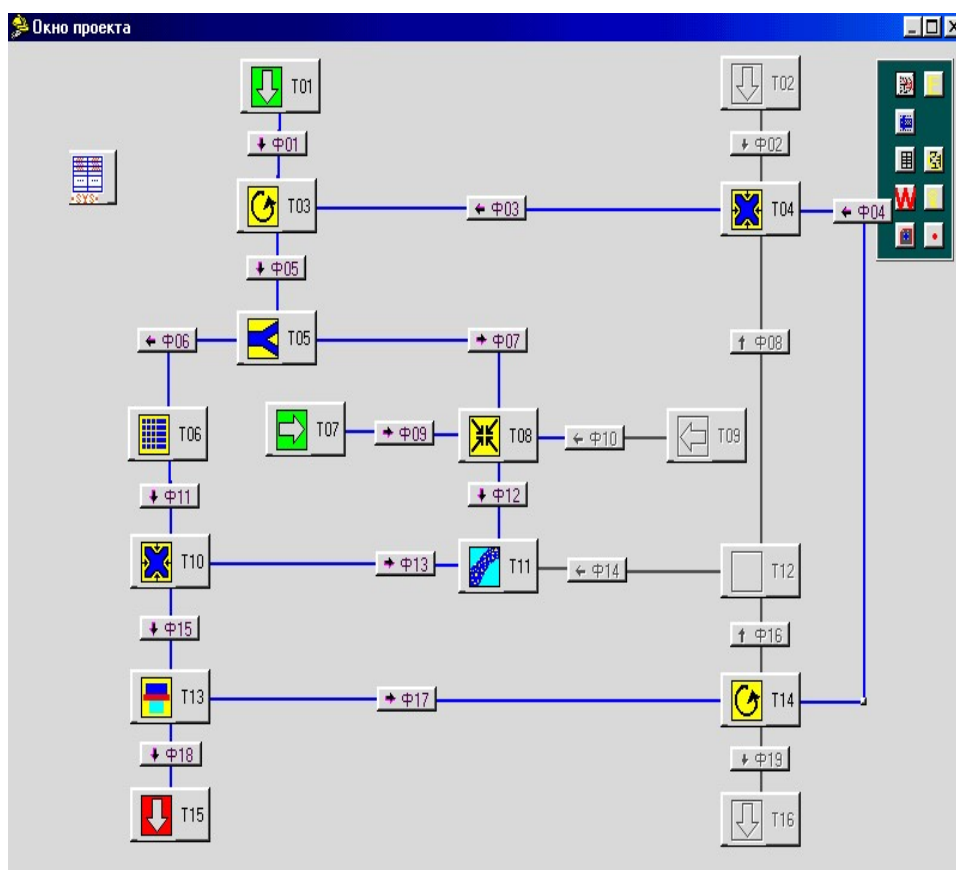


Рис. 229. Химико-технологическая система работает на одной оборотной воде

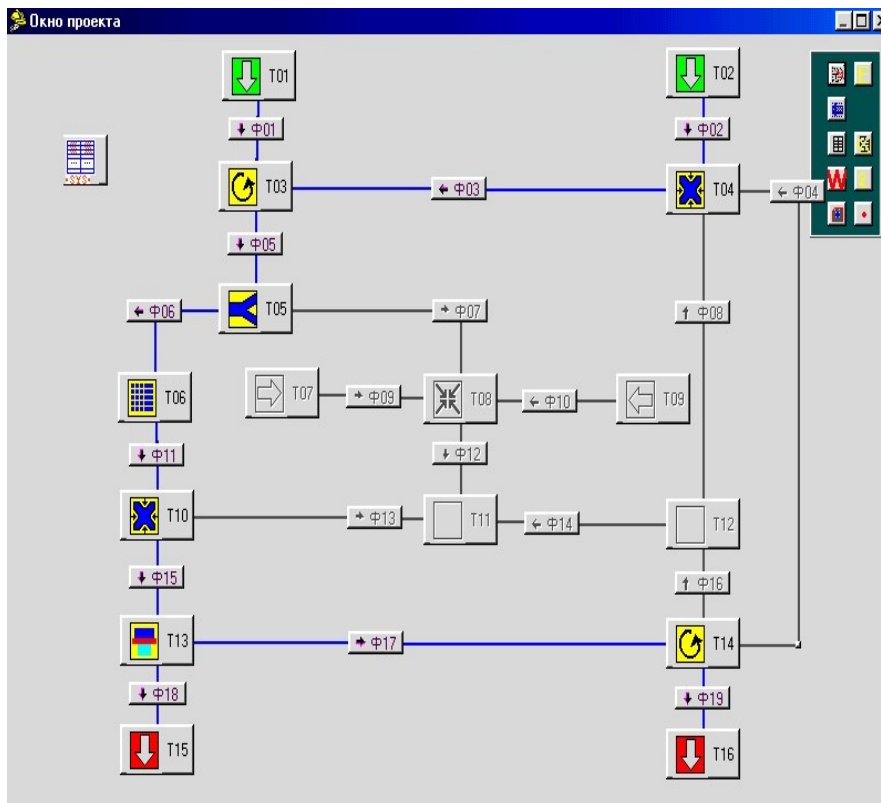


Рис. 230. Химико-технологическая система работает на одной речной воде

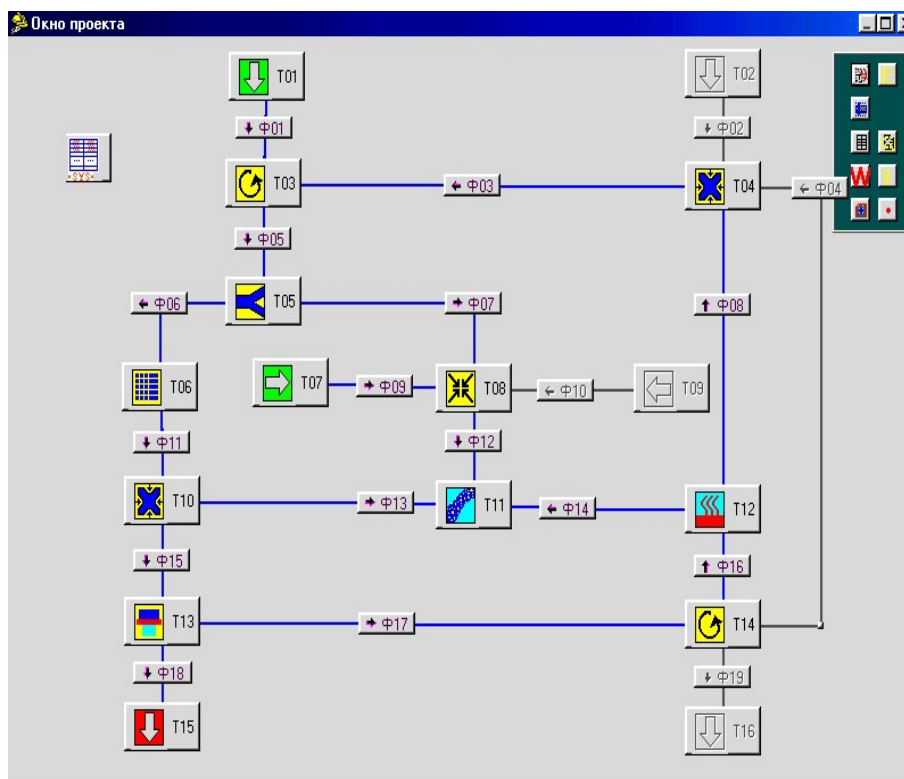


Рис. 231. Химико-технологическая система работает на одной деминерализованной воде

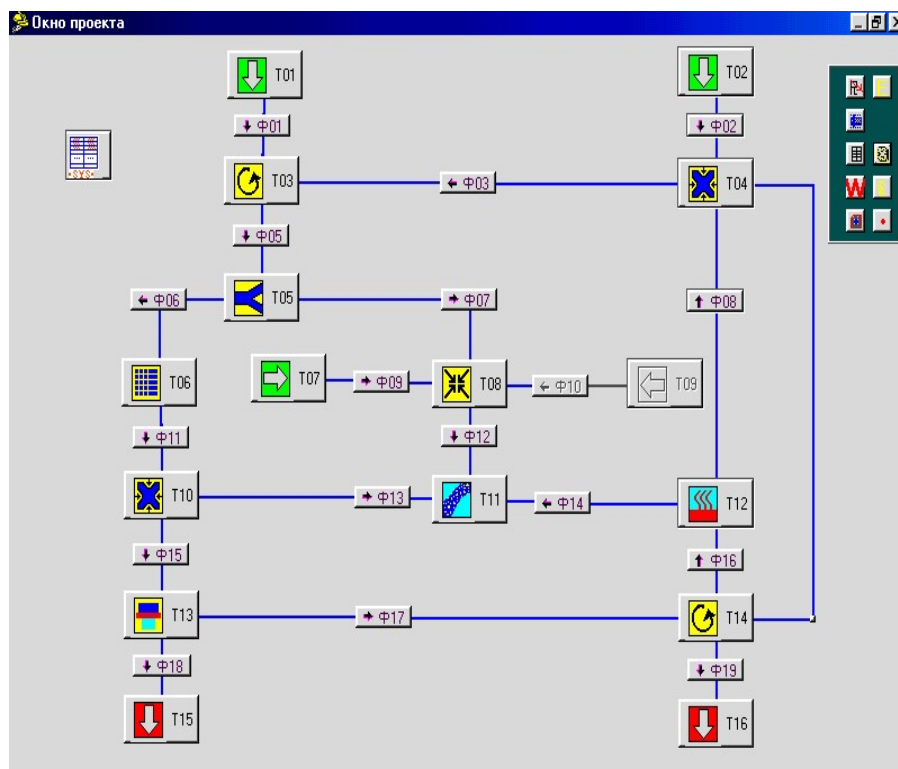


Рис. 232. Химико-технологическая система работает на технологической воде с регулируемым солевым составом

На рис. 229–232 приведены результаты вычислительного эксперимента по синтезу рациональной структуры химико-технологической системы утилизации волокнистых отходов при различных исходных данных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Балакирев В.С., Володин В.М., Цирлин А.М. Оптимальное управление процессами химической технологии. — М.: Химия, 1978.
2. Бендат Дж., Пирсон А. Применение корреляционного и спектрального анализа. — М.: Мир, 1983.
3. Бокс Дж., Дженкинс Г. Анализ временных рядов. Прогноз и управление. — М.: Мир, 1974.
4. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии. — М.: Химия, 1969.
5. Брайнес Я.М. Введение в теорию и расчеты химических и нефтехимических реакторов. — М.: Химия, 1978.
6. Брилинджер Д. *Временные ряды. Обработка данных и теория.* — М.: Мир, 1980.
7. Бродский В.З. Введение в факторное планирование эксперимента. — М.: Наука, 1976.
8. Васильков Ю.В. Компьютерные технологии вычислений в математическом моделировании. — М.: Финансы и статистика, 1999.
9. Вентцель Е.С. Исследование операций. — М.: Сов. радио, 1972.
10. Вольтер Б.В., Сальников И.Е. Устойчивость режимов работы химических реакторов. — М.: Химия, 1981.
11. Гмошинский В.Г., Флиорент Г.И. Теоретические основы инженерного прогнозирования. — М., 1973.
12. Горский В.Г., Адлер Ю.П. Планирование промышленных экспериментов. — М.: Металлургия, 1974.
13. Давидович Б.Я. и др. Методы прогнозирования спроса. — М., 1972.
14. Диксон Дж. Проектирование систем: изобретательство, анализ и принятие решений. — М.: Мир, 1969.

15. Дозорцев В.М., Шестаков Н.В. Компьютерные тренажеры для производств химико-технологического типа: полезность, эффективность, окупаемость // Проблемы безопасности при чрезвычайных ситуациях. 1997. № 7.
16. Жидков Б.А., Бондарь А.Г. Алгоритмизация расчетов в химической технологии. — Киев: Вища школа, 1970.
17. Ивахненко А.Г. Долгосрочное прогнозирование и управление сложными системами. — Киев, 1975.
18. Ивахненко А.Г., Лапа В.Г. Предсказание случайных процессов. — Киев: Наукова думка, 1971.
19. Кафаров В.В., Перов В.Л. Математические основы автоматизированного проектирования химических производств. — М.: Химия, 1979.
20. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. — М.: Химия, 1976.
21. Кафаров В.В. Принципы создания безотходных химических производств. — М.: Химия, 1982.
22. Кафаров В.В., Ветохин В.Н., Бояринов А.И. Программирование и вычислительные методы в химии и химической технологии. — М.: Наука, 1972.
23. Кафаров В.В., Мешалкин В.П. Анализ и синтез химико-технологических систем. — М.: Химия, 1991.
24. Кафаров В.В., Перов В.Л., Мешалкин В.П. Принципы математического моделирования химико-технологических систем. — М.: Химия, 1974.
25. Коган В.Б. Теоретические основы типовых процессов химической технологии. — Л.: Химия, 1977.
26. Крамер Г. Математические методы статистики. — М.: Мир, 1975.
27. Крапивин В.Ф., Свирежев Ю.М., Тарко А.М. Математическое моделирование глобальных биосферных процессов. — М.: Наука, 1982.
28. Красовский Г.И., Филаретов Г.Ф. Планирование эксперимента. — Мн.: ИБГУ, 1982.
29. Курносоев А.П. Вычислительная техника и программирование. — М.: Финансы и статистика, 1991.
30. Лизер С. Эконометрические методы и модели. — М.: Статистика, 1971.
31. Липатов Л.Н. Типовые процессы химической технологии как объекты управления. — М.: Химия, 1977.

32. Мешалкин В.П. Экспертные системы в химической технологии. — М.: Химия, 1995.
33. Мухленов И.П. *Расчеты химико-технологических процессов*. — Л.: Химия, 1982.
34. Мухленов И.П. и др. Основы химической технологии. — М.: Высшая школа, 1983.
35. *Оптимизация технологических процессов в гальванотехнике*. — М.: Машиностроение, 1972.
36. Островский Г.М., Волин Ю.М. Моделирование сложных химико-технологических схем. — М.: Химия, 1975.
37. Островский Г.М., Бережанский Г.А. Оптимизация химико-технологических процессов. Теория и практика. — М.: Химия, 1984.
38. Очков А.В., Очков В.Ф., Рахаев М.А. Новая концепция и новая среда разработки мультимедийных электронных учебников для подготовки персонала химических цехов электрических станций // Теплоэнергетика, 1998. № 10. — С. 53–58.
39. Полевой А.Н. Методическое пособие по разработке динамико-статистических методов прогнозирования урожайности сельскохозяйственных культур. — М.: Гидрометеиздат, 1981.
40. Попкович Г.С. Основы автоматизации систем водоснабжения и канализации. — М.: Литература по строительству, 1970.
41. Применение математических методов для исследования многокомпонентных систем. — М.: Металлургия, 1974.
42. Проектные исследования химических производств. — М.: Химия, 1976.
43. Пясковский Р.В., Померанец К.С. Наводнения. Математическая теория и предсказания. — Л.: Гидрометеиздат, 1982.
44. Рабинер А., Гоулд Б. Теория и применение цифровой обработки сигналов. — М.: Мир, 1978.
45. Рабочая книга по прогнозированию / Отв. редактор И.В. Бестужев-Лада. — М.: Мысль, 1982.
46. Рахаев М.А., Очков А.В., Очков В.Ф., Пильщиков А.П., Ткачева Л.Н. Тренажеры аппаратчика водоподготовки электростанции // Теплоэнергетика. 1998. № 7. — С. 68–72.
47. Репин С.В., Шеин С.А. Математические методы обработки статистической информации с помощью ЭВМ. — Мн.: Университетское, 1990.

48. Рождественский А.В., Чеботарев А.И. Статистические методы в гидрологии. — Л.: Гидрометеиздат, 1974.
49. Руководство по научно-техническому прогнозированию / Под ред. Л.М. Громова. — М.: Прогресс, 1977.
50. Сачок Г.И., Цуркова Т.Ф. Математико-картографическое моделирование условий Белоруссии. — Мн.: Наука и техника, 1984.
51. Статистические методы в природопользовании / В.Е. Валуев, А.А. Волчек, П.В. Шведовский. — Брест: БПИ, 1999.
52. Тарасевич Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс: Учебное пособие. — М.: Эдиториал УРСС, 2001.
53. Тейл Г. Прикладное экономическое прогнозирование. — М.: Прогресс, 1970.
54. Тихомиров В.Б. Планирование и анализ эксперимента. — М.: Легкая индустрия, 1974.
55. *Тутубалин В.Н. Статистическая обработка рядов наблюдений.* — М.: Знание, 1973.
56. Формальная логика. — Л.: ИЛУ, 1977.
57. Хеннан Э. Многомерные временные ряды. — М.: Мир, 1974.
58. Химико-технологические системы. Синтез, оптимизация и управление / Под ред. И.П. Мухленова. — Л.: Химия, 1986.
59. Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами. — М.: Мир, 1973.
60. Чарыков А. К. Математическая обработка результатов химического анализа. — Л.: Химия, 1984.
61. Чехов О.С., Назаров В.И., Калыгин В.Г. Вопросы экологии в стекольном производстве. — М.: Легпромстройиздат, 1990.
62. Чуев Ю.В., Михайлов Ю.Б., Кузьмин В.И. Прогнозирование количественных характеристик процессов. — М.: Сов. радио, 1975.
63. Шляпентох В.Э. Как сегодня изучают завтра. — М.: Сов. радио, 1975.

СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
ВВЕДЕНИЕ	8
Кому предназначаются компьютерные программные средства?	8
Особенности инсталляции программных модулей	8
1. ГЕНЕРИРОВАНИЕ ИНФОРМАЦИИ НА СТАДИИ ПРЕДВАРИТЕЛЬ- НОГО ИЗУЧЕНИЯ ОБЪЕКТА	12
1.1. Понятие информации	12
1.1.1. Терминология	12
1.1.2. Количество информации	15
1.1.3. Понятие энтропии информации	19
1.1.4. Генерирование информации	20
1.2. Проблемное инженерное проектирование на стадии предваритель- ного изучения объекта	22
1.2.1. Процесс инженерного проектирования	23
1.2.2. Методы проблемного инженерного проектирования в химической технологии	24
1.2.3. Примеры использования методов проблемного инженер- ного проектирования	31
1.3. Математическая обработка мнений специалистов на стадии предварительного изучения объекта с помощью методов ранговой корреляции и конкордации	36
1.3.1. Описание проблемы	36
1.3.2. О коэффициенте ранговой корреляции	38
1.3.3. Ранжирование с совпавшими рангами	41
1.3.4. Конкордация	42
1.3.5. Программный модуль «Konkor»	45
2. КОМПЬЮТЕРНАЯ ОБРАБОТКА ИНФОРМАЦИИ	51
2.1. Статистическая обработка результатов измерений, наблюдений и испытаний	51

2.1.1. Термины и определения	51
2.1.2. Числовые и графические характеристики результатов измерений случайной величины	55
2.1.3. Основные законы предельных распределений случайной величины	58
2.1.4. Обучающая компьютерная программа «StatExp»	110
2.1.5. Использование программного модуля «EcoGame» в качестве источника информации для статистической обработки результатов измерений	113
2.2. Комплексная оценка качества продукции по нескольким признакам	115
2.2.1. Теоретические основы комплексной оценки качества продукции по нескольким признакам	115
2.2.2. Подготовка исходных данных и методика расчета	116
2.2.3. Правила настраивания функции желательности по кривой с односторонними ограничениями	117
2.2.4. Правила настраивания функции желательности по кривой с двухсторонними ограничениями	118
2.2.5. Пример настраивания функции желательности	120
2.2.6. Программный модуль «Summary Order»	121
2.2.7. Описание рабочего примера	126
2.3. Корреляционный анализ в химической технологии	128
2.3.1. Теоретические основы корреляционного анализа	128
2.3.2. Программный модуль «Korr»	130
2.3.3. Описание рабочего примера	134
2.3.4. Использование программного модуля «EcoGame» в качестве источника информации для корреляционного анализа функционирования производственного комплекса	135
2.3.5. Рекомендации по использованию программного модуля	138
2.4. Основы математического прогнозирования	138
2.4.1. Термины и определения	138
2.4.2. Общая схема прогнозирования	140
2.4.3. Понятие модели прогнозируемого объекта	140
2.4.4. Методы прогнозирования	141
2.4.5. Прогнозирование характеристик стационарных случайных процессов	142
2.4.6. Прогнозирование временных рядов	143
2.4.7. Выявление тренда	145
2.4.8. Авторегрессионная модель тренда	148
2.5. Построение концентрационных полей загрязняющих веществ в приземных слоях атмосферы от выбросов точечных источников. Программный модуль «PDV»	149

2.5.1. Назначение и области использования программного модуля	149
2.5.2. Функциональные возможности программного модуля ...	150
2.5.3. Перечень и назначение файлов программного пакета	150
2.5.4. Теоретические основы программного модуля	150
2.5.5. Рабочий интерфейс и структура программного модуля ...	157
2.5.6. Запуск и управление работой программного модуля	157
2.6. Идентификация и ранжирование источников загрязнения выделенной зоны территории по результатам единичных и многократных измерений. Программный модуль «Expert»	158
2.6.1. Назначение и области использования программного модуля	158
2.6.2. Функциональные возможности программного модуля ...	158
2.6.3. Перечень и назначение файлов программного пакета	159
2.6.4. Методические основы программного модуля	159
2.6.5. Рабочий интерфейс и структура программного модуля ...	164
2.6.6. Описание рабочего примера	167
2.6.7. Рекомендации по использованию программного модуля ..	168
3. ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ	170
3.1. Планирование эксперимента с качественными (дистрибутив- ными) факторами	170
3.1.1. Неполноблочные планы для учета влияния свойств различных видов сырья, химикатов, типа оборудования	170
3.1.2. Пример полноблочной схемы при экспертной оценке качества продукции	171
3.1.3. Греко-латинские квадраты, кубы, параллелепипеды	174
3.1.4. Ортогональные греко-латино-арабские гиперкубы, совмещенные с факторными шкалами	175
3.1.5. Пример плана эксперимента для разработки режима упрочнения листовых волокнистых материалов	175
3.2. Факторное планирование экстремальных экспериментов для получения математических моделей химической технологии	177
3.2.1. Нормирование переменных, ПФЭ и дробные реплики ...	177
3.2.2. Ортогональное планирование второго порядка	182
3.2.3. Ротатабельное планирование второго порядка	184
3.2.4. D-оптимальные планы второго порядка	187
3.2.5. Преобразование уравнений регрессии с переходом к именованным величинам	190
3.3. Построение информационных сетей для получения математических моделей высоких порядков	191
3.3.1. Терминология	191

3.3.2. Этапы формирования информационной сети	193
3.3.3. Выбор и обоснование числа факторов и уровней их варьирования	193
3.3.4. Определение числа вершин фундаментального симплекса ...	195
3.3.5. Правила составления групп координат вершин связок плоскостей на бесконечности	196
3.3.6. Правила составления линейно независимых векторов	196
3.3.7. Решение проблемы упаковки ортогональной таблицы	196
3.3.8. Пример построения информационной сети	197
3.3.9. Использование тренажера «ModelBuidер» для построения информационных сетей	201
4. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ	205
4.1. Вероятностные модели	205
4.1.1. Теоретические основы получения полиномиальных моделей	206
4.1.2. Решение систем нормальных алгебраических уравнений	207
4.1.3. Проверка адекватности математических моделей	210
4.1.4. Линеаризующие преобразующие соответствия	213
4.1.5. Программный модуль «ModelBuilder»	218
4.2. Графические модели химической технологии	232
4.2.1. Классификация топологических моделей химико-технологических систем	233
4.2.2. Основные понятия и определения теории графов	233
4.2.3. Матричная форма графа	235
4.2.4. Характеристика и принципы построения топологических моделей химико-технологических систем	235
4.2.5. Программный модуль «GrafBuilder»	237
4.3. Кинетические модели и реакторы в химической технологии	245
4.3.1. Построение кинетических моделей	245
4.3.2. Сравнение химических реакторов идеального перемешивания и идеального вытеснения	246
4.3.3. Математическая модель каскада реакторов идеального перемешивания	248
4.3.4. Алгебраический метод расчета каскада реакторов	249
4.3.5. Графические методы расчета каскада реакторов	252
4.3.6. Теория рециркуляции и проблемы химической технологии	254
4.3.7. Программный модуль «Reaktor»	265
5. ОПТИМИЗАЦИОННЫЕ ЗАДАЧИ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ	269
5.1. Методы решения компромиссных оптимизационных задач	269

5.1.1. Общая схема решения оптимизационных задач	270
5.1.2. Методы решения оптимизационных задач	271
5.1.3. Программный модуль «Optimization»	312
5.2. Исследование и оптимизация свойств смесей химических веществ	322
5.2.1. Теоретические основы построения диаграмм «Состав – свойство»	322
5.2.2. Особенности метода построения диаграмм	323
5.2.3. Методика Шеффе	324
5.2.4. Выделение локальных областей	327
5.2.5. Рабочий пример получения диаграммы «Состав – свойство»	329
5.2.6. Программный модуль «Mixture»	334
5.3. Принятие управленческих решений в условиях неопределен- ности и риска	343
5.3.1. Источники неопределенности	343
5.3.2. Теория парных матричных игр с нулевой суммой	343
5.3.3. Платежная матрица	344
5.3.4. Решение парных матричных игр	346
5.3.5. Статистические методы принятия решений в условиях неопределенности	350
5.3.6. Программный модуль «MatrGame»	352
5.3.7. Запуск и управление работой программного модуля	355
5.3.8. Описание рабочего примера	356
5.3.9. Решение рабочего примера парной матричной игры методом итераций	357
5.3.10. Рекомендации по выбору оптимальной стратегии в условиях неопределенности и риска с точки зрения различных подходов и критериев	357
5.3.11. Организация вычислительных экспериментов	358
5.4. Рациональное распределение ограниченных ресурсов	358
5.4.1. Общая задача линейного программирования	358
5.4.2. Решение задач симплексным методом	365
5.4.3. Программный модуль «Resurs»	373
5.4.4. Описание рабочего примера	376
6. СИСТЕМНЫЕ ОБЪЕКТЫ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ	378
6.1. Основные понятия системных объектов	378
6.1.1. Проблемы математического описания систем	380
6.1.2. Функциональное описание системных объектов	380
6.1.3. Морфологическое описание системных объектов	383
6.1.4. Информационное описание системных объектов	385
6.1.5. Структура системных объектов	387

6.1.6. Классификация систем	394
6.2. Оперативное технологическое управление производственным комплексом на примере имитационной системной модели утилизации волокнистых отходов. Эколого-экономическая деловая игра «EcoGame»	403
6.2.1. Назначение и функциональные возможности программного модуля	403
6.2.2. Перечень и назначение файлов программного пакета	405
6.2.3. Базовые теоретические положения	405
6.2.4. Рабочий интерфейс и структура программного модуля	409
6.2.5. Технологическая схема	410
6.2.6. Управление эколого-экономической деловой игрой	411
6.2.7. Описание факторов	411
6.2.8. Выбор режима игры	413
6.2.9. Главные управляющие факторы, текущие значения которых могут определяться автоматически с помощью оптимизационного блока программного комплекса	416
6.2.10. Раздел «Результаты очередного хода»	419
6.2.11. Текущие значения возмущающих воздействий	422
6.2.12. Запуск, управление работой и рекомендации по использованию программного модуля	423
6.3. Исследование проблем взаимосвязи технологии, экологии и экономики на примере одного промышленного предприятия. Программный модуль «EcoTech»	424
6.3.1. Назначение и области использования программного модуля	424
6.3.2. Функциональные возможности программного модуля	424
6.3.3. Перечень и назначение файлов программного пакета	425
6.3.4. Концепция организации охраны окружающей среды	425
6.3.5. Идеи, положенные в основу программного модуля	427
6.3.6. Источники и причины проблем	428
6.3.7. Научная проблема	434
6.3.8. Математические основы и методическая структура программного модуля	435
6.3.9. Проблемные ситуации	436
6.3.10. Рабочий интерфейс и структура программного модуля	444
6.3.11. Запуск и управление работой программного модуля	445
6.3.12. Организация вычислительных экспериментов	447
6.4. Разработка систем мониторинга города Минска. Программный модуль «MinskEco»	448
6.4.1. Назначение и области использования программного модуля	448
6.4.2. Функциональные возможности программного модуля	449

6.4.3. Перечень и назначение файлов программного пакета	450
6.4.4. Рабочий интерфейс и структура программного модуля	450
6.4.5. Теоретические основы программного модуля	451
6.4.6. Этапы решения задачи определения оптимального числа датчиков и рационального их размещения на территории города	454
6.4.7. Алгоритм решения задачи поиска минимального взвешенного покрытия	456
6.4.8. Правила построения групповых резольвент	457
6.4.9. Запуск и управление работой программного модуля	458
6.4.10. Вычислительный эксперимент для сравнительного анализа вариантов системы мониторинга воздушной среды	465
6.5. Управление предприятием в условиях рыночной экономики с моделированием рынка и деятельности виртуального конкурента. Программный модуль «Market»	473
6.5.1. Назначение, области использования и функциональные возможности программного модуля	473
6.5.2. Перечень и назначение файлов программного пакета	473
6.5.3. Теоретические основы программного модуля	474
6.5.4. Рабочий интерфейс и структура программного модуля	478
6.5.5. Главное окно программного модуля	478
6.5.6. Управление производством	483
6.5.7. Моделирование рынка	485
6.5.8. Оперативная информация о текущем состоянии производства	485
6.5.9. События	490
6.5.10. Статистика	490
6.6. Краткое описание функционирования программы	493
6.6.1. Данные программы	493
6.6.2. Деятельность игрока-человека	497
6.6.3. Деятельность компьютера — виртуального конкурента	498
6.7. Некоторые рекомендации по выработке рационального поведения в конкурентной борьбе	499
6.8. Анализ и синтез химико-технологических систем с помощью математической логики. Программный модуль «Sintez»	500
6.8.1. Назначение и области использования программного модуля	500
6.8.2. Функциональные возможности программного модуля	500
6.8.3. Перечень и назначение файлов программного пакета	500
6.8.4. Теоретические основы программного модуля	501
6.8.5. Рабочий интерфейс и структура тренажера	502
6.8.6. Запуск и управление работой тренажера	505
6.8.7. Описание рабочего примера	512
ЛИТЕРАТУРА	522

Учебное издание

Колесников Виталий Леонидович
Жарский Иван Михайлович
Урбанович Павел Павлович

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
И ОПТИМИЗАЦИЯ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Учебное пособие

Редактор Е.И. Гоман
Верстка Е.В. Ильченко

Подписано в печать 28.10.2004. Формат 60×84¹/₁₆.
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 31,0. Уч.-изд. л. 32,0.
Тираж 550 экз. Заказ 605.

Учреждение образования
«Белорусский государственный технологический университет».
220050. Минск, Свердлова, 13а. Лицензия ЛИ № 02330/0133255 от 30.04.2004.

Отпечатано в лаборатории полиграфии
учреждения образования
«Белорусский государственный технологический университет».
220050. Минск, Свердлова, 13.

Переплетно-брошюровочные процессы произведены
в ОАО «Полиграфкомбинат им. Я. Коласа».
220600. Минск, Красная, 23. Заказ 3062.