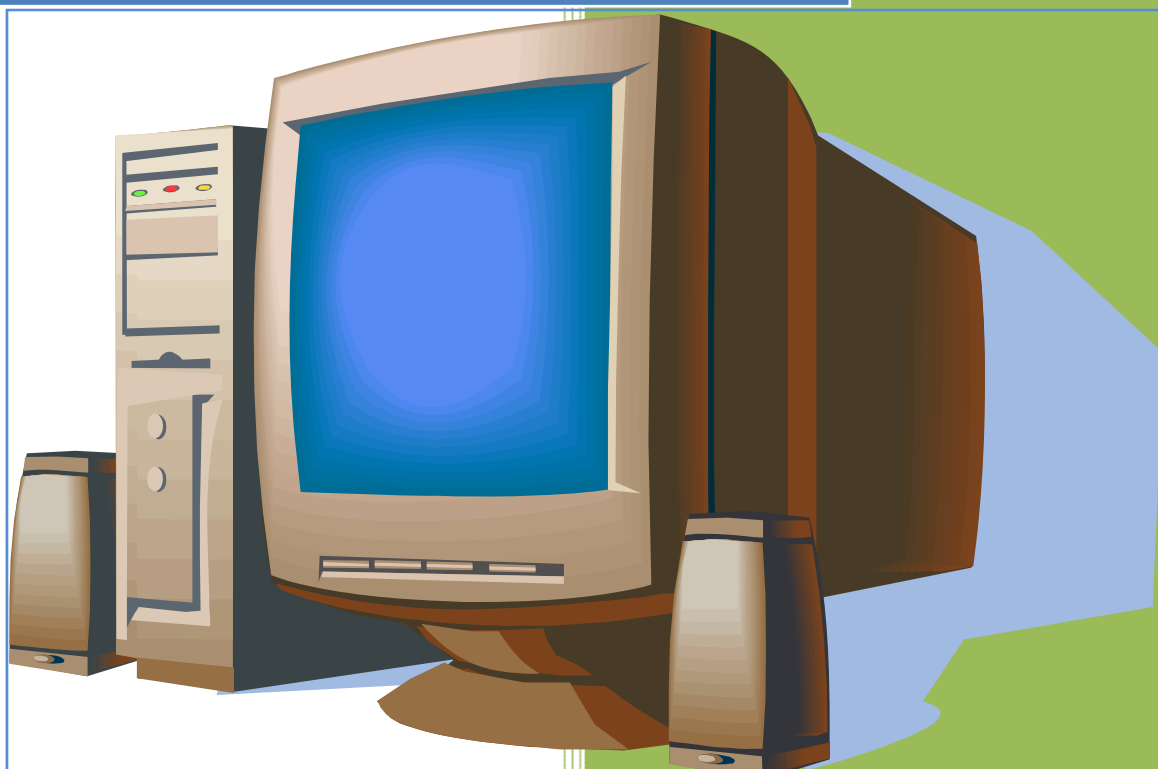




2008

Моделирование в химической технологии и расчёт реакторов



Муртазин Ф.Р.

Кафедра ХТП

04.03.2008

Оглавление

| | |
|---|----|
| Разделы дисциплины и виды занятий | 4 |
| Рекомендуемая литература..... | 4 |
| Основная литература: | 4 |
| Дополнительная литература: | 5 |
| 1 Введение. Области применения ЭВМ в химической технологии | 6 |
| 2 Математическое моделирование химико-технологических процессов..... | 9 |
| 2.1 Виды моделирования..... | 9 |
| 2.2 Основные виды математических моделей | 11 |
| 2.3 Выбор и построение модели процесса | 12 |
| 2.4 Этапы составления математического описания | 13 |
| 2.5 Состав математического описания | 13 |
| 2.6 Моделирующий алгоритм | 14 |
| 2.7 Установление адекватности математических моделей реальным объектам | 15 |
| 2.8 Способы построения математических моделей | 16 |
| 3 Математическое описание структуры потоков в аппарате | 17 |
| 3.1 Методы исследования структуры потоков..... | 17 |
| 3.1.1 Импульсный метод исследования структуры потоков..... | 18 |
| 3.1.2 Метод ступенчатого возмущения | 20 |
| 3.1.3 Основные характеристики распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате (моменты функции распределения) | 22 |
| 3.2 Типовые математические модели структуры потоков в аппаратах..... | 24 |
| 3.2.1 Модель идеального вытеснения..... | 24 |
| 3.2.2 Модель идеального смешения | 25 |
| 3.2.3 Диффузионная модель..... | 27 |
| 3.2.4 Ячеечная модель | 28 |
| 4 Составление математических моделей экспериментальным методом | 30 |
| 4.1 Математические модели, составленные экспериментально-статистическим методом | 30 |
| 4.2 Параметрическая идентификация моделей методом наименьших квадратов | 32 |
| 4.3 Регрессионный анализ | 35 |
| 4.3.1 Проверка воспроизводимости опытов | 35 |
| 4.3.2 Оценка значимости коэффициентов уравнения регрессии..... | 36 |
| 4.3.3 Проверка адекватности модели..... | 37 |
| 4.4 Корреляционный анализ | 39 |
| 4.4.1 Коэффициент корреляции | 39 |
| 4.4.2 Частный коэффициент корреляции..... | 40 |
| 4.4.3 Множественный коэффициент корреляции | 41 |
| 5 Методы оптимизации химико-технологических процессов и нахождения экстремума (минимума или максимума) функций | 43 |
| 5.1 Постановка задачи | 43 |
| 5.2 Поисковые методы для функции одной переменной..... | 43 |
| 5.2.1 Метод сканирования | 43 |
| 5.2.2 Метод дихотомии (половинного деления) | 43 |
| 5.2.3 Метод золотого сечения | 44 |
| 5.3 Поисковые методы для функции многих переменных..... | 45 |
| 5.3.1 Метод Гаусса – Зейделя (метод покоординатного поиска)..... | 45 |
| 5.3.2 Поиск экстремума методом динамического программирования | 46 |

Разделы дисциплины и виды занятий

| №№ п/п | Название раздела | Л | ПЗ | ЛР |
|------------------------------------|--|-----------|-----------|-----------|
| <i>Очная форма обучения</i> | | | | |
| 1 | Введение | 2 | - | - |
| 2 | Математическое моделирование химико-технологических процессов | 10 | 10 | 6 |
| 3 | Математические модели структуры потоков в аппаратах | 8 | - | - |
| 4 | Математические модели, составленные экспериментально-статистическим методом | 8 | - | 6 |
| 5 | Методы оптимизации химико-технологических процессов и нахождения экстремума функций | 8 | - | 6 |
| | Итого | 36 | 10 | 18 |
| <i>Очно-заочная форма обучения</i> | | | | |
| 1 | Введение | 2 | - | - |
| 2 | Математическое моделирование химико-технологических процессов | 4 | 18 | 12 |
| 3 | Математические модели структуры потоков в аппаратах | 4 | - | - |
| 4 | Математические модели, составленные экспериментально-статистическим методом | 6 | - | 12 |
| 5 | Методы оптимизации химико-технологических процессов и нахождения экстремума функций. | 2 | - | 12 |
| | Итого | 18 | 18 | 36 |

Рекомендуемая литература

Основная литература:

1. Гартман Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учеб. Пособие для вузов / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 416 с.
2. Самойлов Н.А. Моделирование в химической технологии и расчет реакторов: Учеб. пособие. – Уфа: ООО «Монография», 2005. – 224 с.
3. Виноградов В.М., Колесников И.М., Винокуров В.А., Любименко В.А. Моделирование в химии. Учебное пособие (Серия «Химическая кибернетика»). – М.: ФГУП Изд-во «Нефть и газ» РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, 2003. – 161 с.
4. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высш. шк., 1991. – 400 с.
5. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. – М.: Химия, 1976. – 463 с.

Дополнительная литература:

1. Кафаров В.В., Ветохин В.Н., Бояринов А.И. Программирование и вычислительные методы в химии и химической технологии. – М.: Наука, 1972. – 486 с.
2. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии М.: Химия, 1980.
3. Жоров Ю.М. Моделирование физико-химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. – М.: Химия, 1978. – 376 с.
4. Жоров Ю.М. Кинетика промышленных органических реакций: Справочник. –М.: 1989.
5. Безденежных А.А. Инженерные методы составления уравнений скоростей реакций и расчета кинетических констант. –Л.: Химия, 1973. –256 с.
6. Батунер Л.М., Позин М.Е. Математические методы в химической технике. Л.: Химия 1968.
7. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов.- М.:Химия , 1982.
8. Бенедик А., Ласло А. Научные основы химической технологии М.: Химия, 1970.
9. Островский Г.М., Волин Ю.М. Методы оптимизации химико-технологических схем. - М.: Химия, 1970.
10. Кроу К. Математическое моделирование химических процессов М.:Мир, 1973.
11. Кафаров В.В., Дорохов Н.Н. Системный анализ процессов химической технологии. Основы стратегии М.: Наука, 1976.
12. Островский Т.М. Алгоритмы оптимизации химико-технологических процессов М.: Химия, 1978.
13. Дьяконов В.П. Справочник по алгоритмам и программам на языке Бейсик, М.: Наука, 1989.

1 Введение. Области применения ЭВМ в химической технологии

Среди разнообразных применений ЭВМ в химической технологии можно выделить следующие области:

1. Переработка больших массивов информации.
2. Обработка экспериментальных данных.
3. Математическое моделирование.
4. Оптимальное проектирование.
5. Управление.

1. В настоящее время исследователям приходится иметь дело с огромными массивами информации. Например, только органических соединений сейчас, известно и описано около четырех миллионов и около трех миллионов неорганических. Кроме того, сейчас неизмеримо возрос поток научной информации. Только реферативный журнал "Химия" публикует ежегодно более 120 тыс. рефератов по различным областям химии и химической технологии. Каждые 10 лет этот поток информации удваивается. В таких условиях поиск необходимой информации превращается в самостоятельную проблему.

В химической технологии типичными примерами подобных задач, связанных с переработкой больших массивов информации, являются учет промышленной продукции, планирование снабжения и сбыта, оперативное управление производством, которые формируются в виде автоматических систем управления производственными предприятиями (АСУП).

2. Все задачи обработки экспериментальных данных по существу можно разделить на два класса:

- определение неизвестных параметров в закономерностях, построенных на теоретических предположениях, учитывающих физическую сущность рассматриваемого процесса;
- определение неизвестных параметров в формализованных закономерностях, построенных по статистической обработке опытных данных.

3. **Математическое моделирование.** Метод математического моделирования основан на том, что реальный процесс, (протекающий в объекте моделирования), представляет собой сочетание различных явлений, подчиненных закономерностям, и может быть описан математическими соотношениями. Изучение этих явлений, их описание на языке математики позволяет при последующем объединении уравнений в единую систему получить математическое описание исследуемого объекта.

Само по себе математическое описание еще не дает возможности судить о свойствах объекта моделирования, в особенности в тех случаях, когда оно достаточно сложно. Необходим алгоритм решения системы уравнений математического описания, позволяющий определить значения переменных, характеризующих состояние объекта моделирования в различных ситуациях, т.е. моделировать процесс.

Моделирование:

- 1) резко сокращает объем экспериментов и дополняет их исследованиями на вычислительной машине;
- 2) открывает возможности прогнозирования поведения объектов в неизвестных ситуациях;
- 3) позволяет изучить многие характеристики проектируемых процессов;
- 4) позволяет оценивать различные варианты аппаратурного оформления;
- 5) позволяет использовать математические методы оптимизации для определения оптимальных режимов эксплуатации и способов управления процессами.

Различают детерминированные и статистические модели. Математическое описание детерминированной модели представляет собой совокупность уравнений, определяющих взаимосвязь входных и выходных переменных состояния объекта моделирования.

При отсутствии информации о характере процессов, протекающих в объекте моделирования, иногда используются статистические модели, представляющие собой систему эмпирических зависимостей, полученных в результате статического обследования действующего объекта.

4. Оптимальное проектирование. Часто при создании нового процесса приходится решать целый ряд задач оптимального проектирования. Цель оптимального проектирования: создание достаточно эффективного и экономичного производства. Оптимальное проектирование (современных химико-технологических процессов) предполагает нахождение таких вариантов аппаратурного оформления процесса, при которых определенный его показатель имеет наибольшее или наименьшее значение.

Типичными примерами таких задач являются проектные разработки, в которых требуется обеспечить возможность реализации процесса с *наименьшими затратами на его аппаратурное оформление* или требуется выбрать вариант аппаратурного оформления процесса, позволяющий получить *максимальный выход продукта*.

Как правило, решение задач оптимального проектирования требует наличия математических моделей процессов.

С использованием этих моделей решаются как задачи оптимального проектирования отдельных стадий, так и задачи объединения этих стадий в единую производственную схему. Математические модели процессов позволяют эффективно использовать математические методы оптимизации, определять оптимальные решения на той или иной стадии проектирования.

Решение задач оптимального проектирования, как правило, требует огромного объема вычислений, выполнить которые возможно лишь при достаточно мощных средствах вы-

числительной техники и рациональном их использовании. Проектирование процессов обычно выполнялось на основе весьма приближенных расчетов и оценок, что чрезвычайно задерживало сроки осуществления и освоения новых производств. Для проектирования в настоящее время широкое распространение получили системы автоматизированного проектирования (САПР).

5. Управление. Задачи управления ХТП неразрывно связаны с задачами оптимального проектирования. Часто возможность реализации найденного проектного решения целиком определяется возможностью осуществления того или иного варианта оптимального управления процессом.

Для задач оптимального управления современными химическими производствами характерна четко выраженная иерархическая структура в соответствии с конкретным назначением системы.

Первый уровень - управление отдельными процессами производства. Эти задачи решаются локальными средствами автоматизации и несложными вычислительными устройствами.

Второй уровень - управление совокупностью отдельных процессов, составляющих законченное производство. На этом уровне решаются задачи оптимального распределения энергетических и материальных потоков. Решение этих задач требует использование более мощных средств вычислительной техники и разработки специальных алгоритмов управления.

Третий уровень - управление функционированием совокупности целого ряда производств, подчиненных единой производственной программе.

Возможности современных средств вычислительной техники и достижения вычислительной математики позволяют весьма эффективно использовать вычислительные машины в области химической технологии во всех рассмотренных выше областях ее применения. От инженера - исследователя теперь требуется предельно точная формулировка задачи и разработка алгоритма ее решения, для чего необходимо современное владение вычислительными методами анализа и вычислительной машиной.

2 Математическое моделирование химико-технологических процессов

2.1 Виды моделирования

Особенностью современных процессов химической технологии является их большая сложность.

Эта сложность проявляется в значительном числе и многообразии параметров, определяющих течение процессов, в большем числе внутренних связей между параметрами, в их взаимном влиянии. Причем изменение одного параметра вызывает нелинейное изменение других параметров. Кроме того, на процесс накладываются возмущения, статистически распределенные во времени.

Внешний потенциал информации о химико-технологических процессах очень велик. Из-за ограниченности возможностей человеческого восприятия, мы вынуждены уменьшить этот потенциал. Поэтому познание процесса достигается через модель. Модель - это такие упрощенные системы, которые отражают отдельные ограниченные стороны явлений рассматриваемого процесса.

Различают два вида моделирования: **физическое** и **математическое**.

При физическом моделировании изучение данного явления происходит на нем самом при его воспроизведении в разных масштабах и анализе влияния физических особенностей и линейных размеров. Эксперимент проводят непосредственно на изучаемом физическом процессе. Опытные данные обрабатывают представлением их в форме зависимостей безразмерных комплексов (критериев подобия), составленных комбинацией различных физических величин и линейных размеров.

Физическое моделирование сводится к воспроизведению постоянства определяющих критериев подобия в модели и объекте.

Таким образом, деформация физической модели производится непосредственно на самом объекте, где протекает физический процесс. Этот подход требует воспроизведения процесса во все больших масштабах (вплоть до заводских) и весьма сложных систем, с которыми приходится иметь дело в химической технологии.

Для сравнительно простых систем (например, гидравлических или тепловых с однофазным потоком) принцип подобия и физическое моделирование оправдывают себя, поскольку приходится оперировать ограниченным числом критериев. Однако для сложных систем и процессов использование физического подобия практически невозможно или затруднительно.

Поэтому основным методом расчета сложных процессов химической технологии стал метод математического моделирования, позволяющий оценивать оптимальные режимы проведения процессов и условия управления ими.

Математическое моделирование обязательно включает три взаимосвязанных стадии:

- 1) построение математической модели;
- 2) программирование решения;
- 3) установление адекватности модели изучаемому процессу.

При построении математической модели реальное явление упрощается, схематизируется, и получаемая схема описывается каким-либо математическим аппаратом.

При построении модели надо иметь в виду следующие положения:

1) в модели должны быть учтены все наиболее существенные факторы, влияющие на процесс;

2) она не должна быть загромождена множеством мелких, второстепенных факторов;

3) необходимо, чтобы модель достаточно верно описывала качественно и количественно свойства моделируемого процесса, т.е. она должна быть адекватна моделируемому процессу. Для проверки адекватности математической модели реальному процессу нужно сравнивать результаты изменений в ходе процесса с результатами предсказания модели в идентичных условиях.

Таким образом, модель, отражающая соответствующий физико-химический процесс, представляется в виде определенной математической записи, объединяет опытные факты и устанавливает взаимосвязь между параметрами исследуемого процесса. При этом используются теоретические методы и необходимые экспериментальные данные. Конечной целью разработки математических моделей является прогноз результатов проведения процесса и выработка рекомендаций по возможным воздействиям на его ход.

При математическом моделировании деформация модели процесса изучается не на физической модели, как при физическом моделировании, а непосредственно на самой математической модели при помощи ЭВМ.

Методы математического моделирования (в сочетании с ЭВМ) позволяют с высокой точностью быстро исследовать различные варианты аппаратного оформления процесса, изучить его основные особенности и вскрыть резервы усовершенствования. При этом в рамках используемой модели всегда гарантируется отыскание оптимальных решений.

Методы физического моделирования в настоящее время можно использовать для установления адекватности модели изучаемому объекту.

Методы математического моделирования применяют для изучения свойств математически описанных процессов. При математическом моделировании процесс исследуют, изменяя различные параметры, связанные в виде математические модели, на ЭВМ. Это позволяет быстро получать сведения о различных вариантах изучаемого процесса. Важно отметить, что в относительно короткий срок можно осуществить на математические модели оп-

тимизацию процесса. Математическое моделирование гораздо дешевле физического моделирования, независимо от того, выражена его стоимость в деньгах или во времени.

2.2 Основные виды математических моделей

Математические модели бывают:

- с распределенными параметрами;
- с сосредоточенными параметрами.

Если основные переменные процесса изменяются как во времени, так и в пространстве, то модели, описывающие такие процессы, называются **моделями с распределенными параметрами** и представляют их в виде дифференциальных уравнений в частных производных.

Если изменения основных переменных процесса в пространстве не происходят, то модели, описывающие такие процессы, называют **моделями с сосредоточенными параметрами**.

Статическая модель. Статическая модель не учитывает изменения параметров во времени. Составлению статической модели процесса предшествует анализ его физико-химической сущности, целевого назначения и основных уравнений, описывающих данный класс процессов и особенности этого процесса как типового.

Далее выявляются входные и выходные параметры процесса. К ним относятся:

- переменные, изменение которых связано с характером протекания процесса (**управляемые переменные**);
- переменные, изменение которых непосредственно влияет на ход процесса (**управляющие воздействия**);
- переменные, изменение которых непосредственно влияет на ход процесса - их целенаправленное изменение невозможно (**возмущающие воздействия**);
- переменные, изменение которых косвенно связано с характером протекания процесса (**промежуточные переменные**).

Затем определяют связи между указанными переменными и граничные условия протекания процесса.

Динамическая модель. Составление динамической модели сводится к получению так называемых динамических характеристик процесса, т.е. установлению связи между его основными переменными при изменении их во времени. Динамические характеристики можно получать теоретически, экспериментально или сочетанием обоих методов.

Динамическая модель процесса строится:

- в виде передаточных функций, связывающих выбранную зависимую переменную с одной или несколькими переменными;

- теоретически полученных обыкновенных дифференциальных уравнений или уравнений в частных производных.

Полная математическая модель процесса включает: основные переменные процесса, связи между основными переменными в статике, ограничения на процесс, критерий оптимальности, функции оптимальности, связи между основными переменными в динамике.

2.3 Выбор и построение модели процесса

В каждом конкретном случае математическая модель создается, исходя из:

- 1) целевой направленности процесса;
- 2) задач исследования;
- 3) требуемой точности решения;
- 4) достоверности используемых исходных данных.

Построение модели - самая ответственная часть математического моделирования. При этом требуется не только и не столько знание математики, сколько глубокое понимание сущности описываемых явлений. Построение любой математической модели начинают с формализованного описания объекта моделирования. Наиболее общим приемом разработки математического описания является блочный принцип. Согласно этому принципу, составлению математического описания предшествует анализ отдельных "элементарных" процессов, протекающих в объекте моделирования.

При *выборе модели* необходимо учитывать следующие положения:

- 1 модель должна наиболее точно описывать процесс при достаточной ее простоте;
- 2 параметры модели могут быть определены экспериментальным или другим способом;
- 3 при гетерогенных системах модели выбираются для каждой из фаз. Причем модели для обеих фаз могут быть одинаковыми или различными;
- 4 применительно к процессам, происходящим в гомогенных системах (с достаточной для практики точностью) можно принять модель с сосредоточенными параметрами. Для процессов, происходящих в гетерогенных системах, модель с сосредоточенными параметрами может быть принята при наличии сплошной фазы, а модель с распределенными параметрами - при наличии дисперсной фазы;
- 5 Следует принимать во внимание, что с изменением гидродинамического режима системы могут изменять виды моделей. Тип математической модели существенно влияет на вид уравнений, используемых для построения математического описания.

2.4 Этапы составления математического описания

- 1 исследование гидродинамической модели процесса как основы структуры математического описания;
- 2 изучение кинетики химических реакций;
- 3 изучение кинетики процессов массо- и теплопередачи;
- 4 составление математического описания каждого из этих процессов;
- 5 объединение описаний всех исследованных “элементарных” процессов (блоков) в единую систему уравнений математического описания объекта моделирования.

Достоинство блочного принципа (построение математического описания) заключается в том, что его можно использовать на стадии проектирования объекта, когда окончательный вариант аппаратного оформления еще неизвестен.

2.5 Состав математического описания

В состав математического описания разработанного на основе *физической природы* моделируемого объекта входят следующие группы уравнений:

- 1 Уравнения баланса масс и энергии.
- 2 Уравнения “элементарных” процессов. К этой группе относятся описания процессов массо- и теплообмена, химических реакций и др.
- 3 Теоретические, полуэмпирические или эмпирические соотношения между различными параметрами процесса. Например, зависимость коэффициента теплопередачи от скоростей потоков фаз, зависимость теплоемкости раствора от состава и т.д.
- 4 Ограничения на параметры процесса.

При отсутствии (или весьма ограниченном объеме) теоретических сведений о моделируемом объекте, уравнения математического описания могут представлять собой систему эмпирических зависимостей, полученных в результате статистического обследования действующего объекта. Эти модели называются **статистическими** и имеют вид **корреляционных** или **регрессионных** соотношений между входными и выходными параметрами объекта. Вывод указанных соотношений возможен лишь при наличии действующего объекта. Недостатком таких моделей является относительная узость области изменения их параметров. Данные модели в структуре уравнений не отражают физических свойств объекта моделирования, что затрудняет обобщение результатов, получаемых при их применении.

В отличие от статистических математические модели, которые построены с учетом основных закономерностей процессов, качественно более правильно характеризуют его даже при наличии недостаточно точных в количественном отношении параметров модели. Поэтому с их помощью можно изучать общие свойства объектов моделирования.

Для описания свойств объектов моделирования используются различные уравнения.

К **алгебраическим уравнениям** обычно сводится МО - стационарных режимов объектов, рассматриваемых как объекты с сосредоточенными параметрами (реактор идеального смешения).

Обыкновенные дифференциальные уравнения используют для математического описания нестационарных режимов (динамики) объектов с сосредоточенными параметрами, а также стационарных режимов объектов с распределенными параметрами, в которых значения параметров зависят только от одной пространственной координаты.

Дифференциальные уравнения в частных производных используют для МО динамики объектов с распределенными параметрами и стационарных режимов таких объектов, в которых распределённость имеется более чем по одной пространственной координате.

2.6 Моделирующий алгоритм

Задачей разработки *моделирующего алгоритма* чаще всего является решение системы уравнений математического описания.

В *простейших случаях*, когда возможно аналитическое решение системы уравнений математического описания, необходимость специальной разработки моделирующего алгоритма отпадает. В этом случае вся информация получается из соответствующих аналитических решений.

Когда математическое описание представляет собой *сложную систему* конечных и дифференциальных уравнений, от возможности построения достаточно эффективного моделирующего алгоритма существенно зависит практическая применимость математической модели.

Для решения задач математического моделирования применяются ЭВМ. При этом для решения системы уравнений математического описания необходимо иметь численный алгоритм.

Существующие в настоящее время методы численного анализа позволяют решать широкий круг задач математического моделирования. Однако, в некоторых случаях встречаются серьезные затруднения в применении общих методов численного анализа. К числу таких случаев, прежде всего, относятся следующие задачи математического моделирования:

- 1 решение систем конечных нелинейных уравнений с большим числом переменных;
- 2 интегрирование систем обыкновенных дифференциальных уравнений с крайними условиями;
- 3 интегрирование систем дифференциальных уравнений в частных производных.

Для указанных проблем в численном анализе пока отсутствуют эффективные общие методы решения. Поэтому в каждом конкретном случае при построении моделирующего алгоритма следует использовать особенности решаемой задачи. Например, при применении

метода потарелочного расчета ректификационных колонн, система нелинейных уравнений с большим числом неизвестных решается итеративным методом.

В некоторых случаях из-за сложности моделирующего алгоритма приходится изменять формулировку исходной задачи моделирования для упрощения математического описания. Это упрощение часто достигается лишь ценой снижения точности математической модели путем замены некоторых аналитических выражений более простыми или за счет сокращения полноты математического описания.

2.7 Установление адекватности математических моделей реальным объектам

Структура математической модели ХТП определяется, прежде всего, гидродинамическими параметрами и проявляется в характере *распределения времени пребывания частиц потока* в рассматриваемой системе.

Этот характер распределения подвержен *статистическим законам* и находится по виду сигнала, проходящего через систему. В качестве такого сигнала используется подача вещества (индикатора) на вход системы в виде *ступенчатого, импульсного или частотного* возмущения.

Этот прием является основным при установлении адекватности математической модели изучаемому объекту.

При исследовании структуры потоков в аппаратах, применяемых в химической технологии, непосредственно определяются кривые отклика - функция распределения случайной величины $F(\tau)$ или плотность распределения $f(\tau) = C(\tau)$.

Для установления закона изучаемого явления необходимо сравнить полученное экспериментальное распределение с теоретическим законом распределения (нормальным, законом Пуассона, экспоненциальным и т.д.).

Выбор теоретического закона распределения производится исходя из свойств различных теоретических распределений, и в каждом конкретном случае отдается предпочтение тому или другому закону.

Плотность распределения $f(\tau)$ и кривая распределения $F(\tau)$ связаны между собой выражением:

$$\frac{dF(\tau)}{d\tau} = f(\tau) = C(\tau)$$

Основные свойства распределения случайной величины можно описать несколькими *числовыми характеристиками*, которые числами определяют наиболее существенные особенности распределения. Такой системой характеристик является *момент* случайной величины.

Найденные по опытным данным моменты подставляются в выбранный теоретический закон распределения, и оценивается совпадение опытного и теоретического распределения.

При моделировании процессов химической технологии *теоретический закон распределения* может задаваться *уравнениями математической модели* процесса, оценивающей структуру потоков в аппарате. Таким образом, достоверность математической модели процесса также проверяется сравнением теоретического распределения с найденным экспериментально.

2.8 Способы построения математических моделей

Существуют три способа построения математических моделей:

- 1 аналитические;
- 2 экспериментальные;
- 3 экспериментально-аналитические.

При использовании аналитического метода структура уравнений модели определяется следующим образом. Анализируются физико-химические процессы, протекающие в объекте, составляются уравнения материального и теплового балансов для основных участков объекта. Отсюда находится зависимость выходных координат от входных.

Достоинства аналитического способа:

- 1 Он может использоваться для получения моделей вновь проектируемых объектов.
- 2 Полученная этим методом модель применима для описания всего класса объектов, к которому принадлежит исследуемый объект.
- 3 Параметры модели имеют ясный физический смысл.

Недостатки метода:

- 1 Трудоемкость получения модели.
- 2 Низкая точность.
- 3 Громоздкость уравнений.

При применении экспериментального метода структурой уравнений модели задаются. Зависимость выходных координат от входных описывается полиномом.

Достоинства метода:

- 1 Высокая точность.
- 2 Относительно небольшая трудоемкость.

Недостатки метода:

- 1 Модель, полученная экспериментальным методом, применима для описания только того объекта, на котором проводился эксперимент.
- 2 Параметры модели не имеют физического смысла.

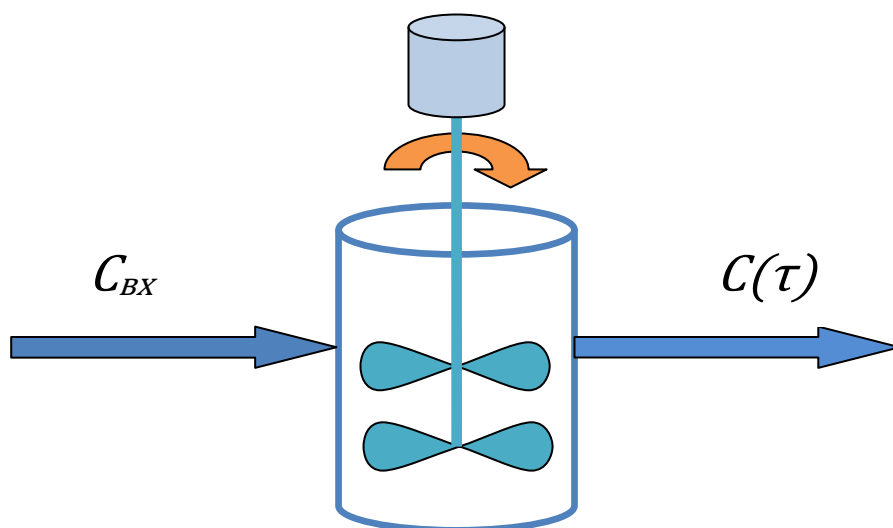
Экспериментально-аналитический метод представляет комбинацию вышеуказанных методов. Структура модели при применении этого метода находится так же, как в аналитическом методе, а параметры – как в экспериментальном.

3 Математическое описание структуры потоков в аппарате

Поведение потоков в реальных аппаратах весьма сложное. Дать строгое математическое описание их не представляется возможным. Структура потоков оказывает существенное влияние на эффективность ХТП, поэтому ее необходимо учитывать при моделировании процессов. При этом математические модели структуры потоков являются основой, на которой строится математическое описание ХТП. Теоретическое описание реальных потоков приводит к чрезвычайно трудным для решения задачам. Поэтому разработанные модели структуры потоков в аппаратах являются достаточно простыми и носят полуэмпирический характер. При проведении ХТП часто важно знать степень полноты их завершения, что зависит от *распределения времени пребывания частиц потока в аппарате*. Распределение времени пребывания частиц потока в аппарате (РВП) имеет стохастическую природу и оценивается статистическим распределением.

3.1 Методы исследования структуры потоков

Сущность методов исследования структуры потоков заключается в следующем (см. рисунок 3.1.1):



в поток на входе в аппарат вводят индикатор, а на выходе потока из аппарата измеряют концентрацию индикатора как функцию времени $C = f(\tau)$. Эта выходная кривая называется *функцией отклика системы на типовое возмущение по составу потока*.

Рисунок 3.1.1

В качестве индикаторов используют красители, растворы солей и кислот, изотопы и другие вещества. Индикатор вводят в виде стандартных сигналов (см. рисунок 3.1.2): *импульсного, ступенчатого и гармонического*:

В качестве индикаторов используют красители, растворы солей и кислот, изотопы и другие вещества. Индикатор вводят в виде стандартных сигналов (см. рисунок 3.1.2): *импульсного, ступенчатого и гармонического*:

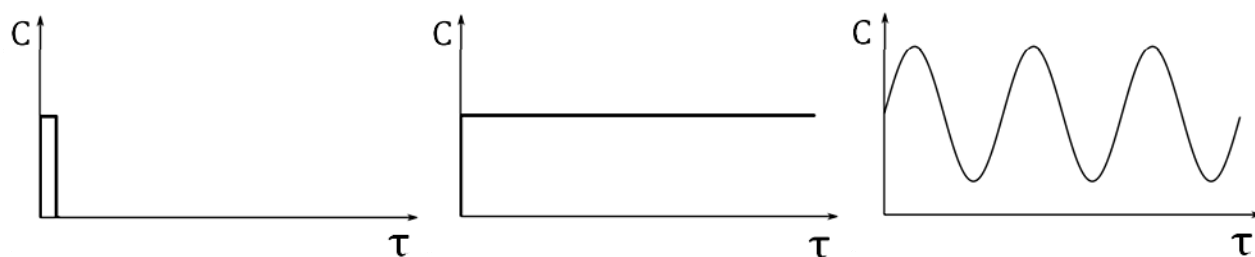


Рисунок 3.1.2

В зависимости от вида возмущающего сигнала различают методы исследования структуры потоков: *импульсный, ступенчатый и гармонический*.

3.1.1 Импульсный метод исследования структуры потоков

В соответствии с этим методом во входной поток практически мгновенно, в виде дельта функции, вводят определенное количество индикатора (см. рисунок 3.1.3).

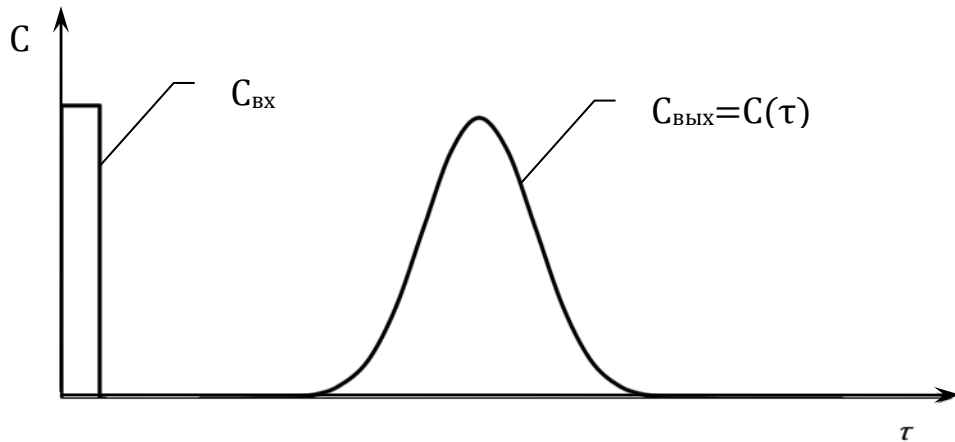


Рисунок 3.1.3

Допустим, что в аппарат ввели практически мгновенно индикатор и определили функцию отклика на это возмущение: обозначим объем аппарата через V и объемную скорость потока - через v .

Количество индикатора, время пребывания которого в аппарате изменяется от τ до $\tau + d\tau$, составляет

$$dg = vC_3(\tau) d\tau, \quad (3.1.1)$$

где $C_3(\tau)$ - концентрация индикатора на выходе из аппарата.

Отношение dg ко всему количеству индикатора g_0 выражает долю индикатора, вышедшего из аппарата за время от τ до $\tau + d\tau$.

$$d\alpha = \frac{dg}{g_0} = \frac{v \cdot C_3(\tau) d\tau}{g_0} \quad (3.1.2)$$

Так как поведение индикатора в аппарате идентично поведению основного потока, то выражение (3.1.2) представляет долю потока, время пребывания которого изменяется от τ до $\tau + d\tau$.

Общее количество введенного индикатора определяется выражением:

$$g_0 = v \int_0^{\infty} C_3(\tau) d\tau. \quad (3.1.3)$$

Тогда из уравнения (3.1.2) следует:

$$d\alpha = \frac{dg}{g_0} = \frac{vC_3(\tau)d\tau}{v \int_0^\infty C_3(\tau)d\tau} = \frac{C_3(\tau)d\tau}{\int_0^\infty C_3(\tau)d\tau} = C(\tau)d\tau, \quad (3.1.4)$$

где выражение

$$C(\tau) = \frac{C_3(\tau)}{\int_0^\infty C_3(\tau)d\tau}$$

задает нормированную C - кривую.

Уравнение (3.1.2) можно привести к виду:

$$d\alpha = \frac{vC_3(\tau)d\tau}{g_0} = \frac{C_3(\tau)d\tau}{\frac{g_0 V}{v}} = C(\theta)d\theta, \quad (3.1.5)$$

где $C(\theta) = \frac{C_3(\tau)}{C_0}$; $C_0 = \frac{g_0}{V}$; $\theta = \frac{\tau}{\bar{\tau}}$; $\tau = \frac{V}{v}$;

C_0 - начальная концентрация в потоке;

$C(\theta)$ - безразмерная концентрация;

θ - безразмерное время;

$\bar{\tau}$ - среднее время пребывания частиц потока в аппарате.

Тогда из уравнений (3.1.4) и (3.1.5) следует:

$$C(\theta)d\theta = C(\tau)d\tau$$

или

$$C(\theta) = C(\tau) \cdot \bar{\tau}. \quad (3.1.6)$$

Построим экспериментальную кривую в координатах $C(\theta)$ - θ . Такая кривая называется C - кривой.

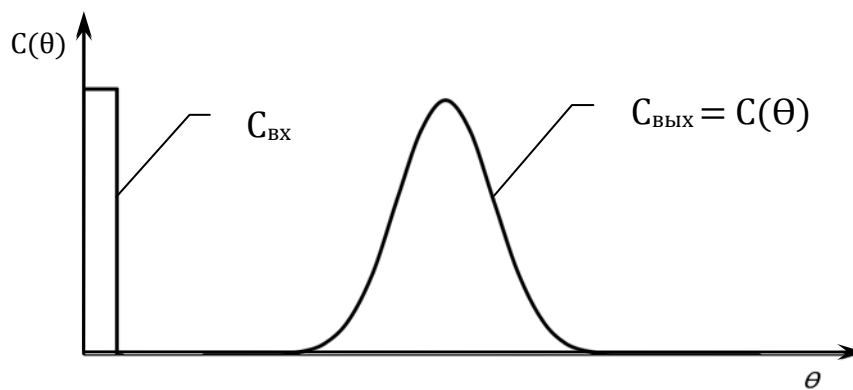


Рисунок 3.1.4

Заштрихованная площадь под ней равна

$$\int_0^\theta C(\theta)d\theta, \quad (3.1.7)$$

и означает долю потока, время пребывания которого в аппаратах изменяется от 0 до θ . Естественно, что

$$\int_0^{\infty} C(\theta) d\theta = 1. \quad (3.1.8)$$

Таким образом, C - кривая является характеристикой распределения элементов потока по времени их пребывания в аппарате.

Среднее время пребывания потока в аппарате есть

$$\bar{\tau} = \int_0^1 \tau \cdot d\alpha. \quad (3.1.9)$$

Поставим в это выражение значение $d\alpha$ из уравнения (3.1.4) и получим

$$\bar{\tau} = \int_0^{\infty} \tau \cdot C(\tau) d\tau. \quad (3.1.10)$$

3.1.2 Метод ступенчатого возмущения

При использовании этого метода, в поток жидкости, поступающий в аппарат и не содержащий индикатора, вводят некоторое количество индикатора таким образом, что его концентрация во входящем потоке изменяется скачком от 0 до некоторого значения C_0 и в дальнейшем поддерживается на этом уровне (см. рисунок 3.1.5).

Если C -кривая служит оценкой функции плотности распределения элементов потока по времени пребывания, то F -кривая (отклик системы на ступенчатое возмущение) является оценкой функции распределения. На практике удобно перейти от экспериментальной F -кривой $F_3(\tau)$ к нормированной $F(\tau)$, определяемой как:

$$F(\tau) = \frac{F_3(\tau)}{F(\infty)} \quad (3.1.11)$$

Кривая отклика, соответствующая сигналу ступенчатой формы, имеет вид:

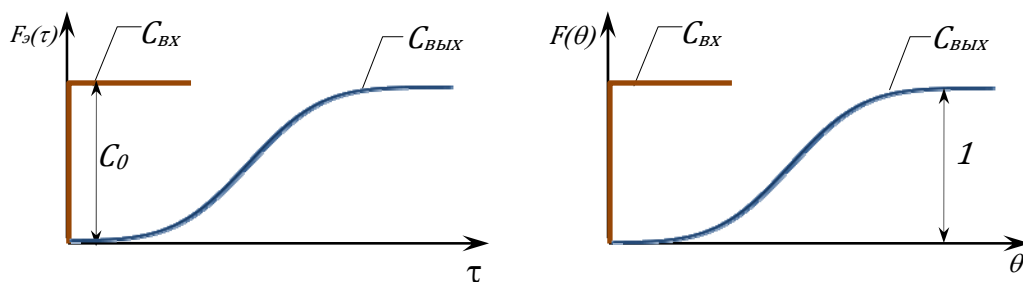


Рисунок 3.1.5

Если время выражено в безразмерных единицах, то зависимость изменения концентрации индикатора во времени в потоке, выходящем из аппарата, называется F - кривой. Величина, равная отношению $F/F(\infty)$, во входящем потоке изменяется от 0 до 1.

Доля элементов потока, время пребывания которых в аппарате находится в пределах от θ до $\theta+d\theta$, есть:

$$dF(\theta) = C(\theta)d\theta.$$

Доля элементов потока, время пребывания которых в аппарате меньше θ , определяется следующим образом:

$$F(\theta) = \int_0^{\theta} C(\theta)d\theta.$$

Справедливым является и равенство

$$F(\infty) = \int_0^{\infty} C(\theta)d\theta = 1.$$

Среднее время пребывания потока в аппарате составляет:

$$\bar{\tau} = \int_0^{\infty} \tau C(\tau)d\tau = \int_0^1 \tau dF = - \int_0^1 \tau d(1 - F).$$

Для нахождения последнего интеграла воспользуемся интегрированием по частям:

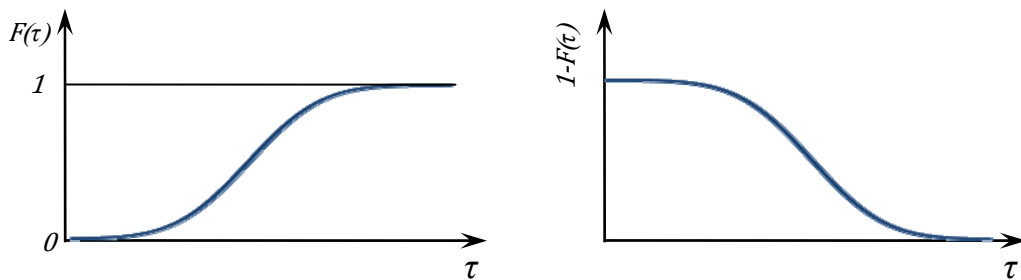


Рисунок 3.1.6

$$\int_0^1 \tau d(1 - F) = \tau(1 - F)|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} (1 - F)d\tau = - \int_0^{\infty} (1 - F)d\tau.$$

Тогда среднее время пребывания определяется:

$$\bar{\tau} = \int_0^{\infty} (1 - F)d\tau.$$

3.1.3 Основные характеристики распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате (моменты функции распределения)

Расчет распределения времени пребывания частиц потока основан на статистическом понятии моментов (и связан с распределением плотности вероятностей). Основные свойства распределения случайной величины можно описать несколькими числовыми характеристиками, которые определяют наиболее существенные особенности распределения. Такой системой характеристик являются моменты распределения случайной величины, которые систематизируются:

- по порядку β момента;
- по началу отсчета случайной величины.

Порядок β момента может быть любым числом. Практически же рассматривают моменты нулевого, первого, второго, третьего и четвертого порядков, т.е. $\beta=0, 1, 2, 3, 4$.

В зависимости от начала отсчета случайной величины различают *начальные* и *центральные* моменты. Общий вид *начальных моментов* функции распределения таков:

$$M_\beta = \int_0^{\infty} \tau^\beta C(\tau) d\tau.$$

Каждый из моментов имеет определенный физический смысл.

❖ Нулевой момент

$$M_0 = \int_0^{\infty} \tau^0 C(\tau) d\tau = \int_0^{\infty} C(\tau) d\tau$$

это площадь под кривой $C(\tau)$;

❖ Первый момент:

$$M_1 = \int_0^{\infty} \tau C(\tau) d\tau$$

характеризует среднее значение *среднее время пребывания* $\bar{\tau}$ или математическое ожидание случайной величины времени пребывания.

Случайные величины, отсчитываемые от математического ожидания, называются *центрированными*. Моменты центрированной величины называются *центральными*.

Общий вид центральных моментов таков:

$$\mu_\beta = \int_0^{\infty} (\tau - \bar{\tau})^\beta C(\tau) d\tau.$$

Второй центральный момент характеризует рассеяние случайной величины относительно среднего времени пребывания, он называется *дисперсией* и обозначается через σ_t^2 :

$$\sigma_t^2 = \mu_2 = \int_0^{\infty} (\tau - \bar{\tau})^2 C(\tau) d\tau.$$

Третий центральный момент характеризует *асимметрию* распределения и равен

$$\mu_3 = \int_0^{\infty} (\tau - \bar{\tau})^3 C(\tau) d\tau$$

и т.д.

В силу стохастической природы движения элементов потока в аппарате их время пребывания является случайной величиной с некоторой плотностью распределения. Оценкой функции плотности распределения элементов потока по времени пребывания является **С-кривая**, снимаемая на выходе аппарата при импульсном возмущении. Тогда моменты **С-кривой** являются основными характеристиками распределения элементов потока по времени пребывания, определяя тем самым структуру потока.

Рассмотрим теперь связь моментов *нормированной* и *безразмерной С-кривой*.

Значения нормированной **С-кривой** определяются как

$$C(\tau) = \frac{C_3(\tau)}{\int_0^{\infty} C_3(\tau) d\tau}$$

Начальный момент порядка β нормированной **С-кривой** есть

$$M_{\beta}^{\tau} = \int_0^{\infty} \tau^{\beta} C(\tau) d\tau$$

Вводя безразмерную концентрацию $C(\theta)$ и время θ и учитывая, что $C(\theta) = \bar{\tau} C(\tau)$ и $\theta = \tau/\bar{\tau}$ имеем:

$$M_{\beta}^{\tau} = \int_0^{\infty} (\theta \bar{\tau})^{\beta} \frac{C(\theta)}{\bar{\tau}} \bar{\tau} d\theta = \bar{\tau}^{\beta} \int_0^{\infty} \theta^{\beta} C(\theta) d\theta$$

Отсюда получается следующее соотношение между размерным и безразмерным начальными моментами порядка β :

$$M_{\beta}^{\tau} = \bar{\tau}^{\beta} \cdot M_{\beta}^{\theta}$$

Проведя аналогичную процедуру с выражением для центрального момента μ_{β}^{τ} порядка β нормированной С-кривой, получим соотношение между размерным и безразмерным центральными моментами:

$$\mu_{\beta}^{\tau} = \int_0^{\infty} (\tau - \bar{\tau})^{\beta} C(\tau) d\tau = \int_0^{\infty} (\theta \bar{\tau} - \bar{\tau})^{\beta} \frac{C(\theta)}{\bar{\tau}} \bar{\tau} d\theta$$

$$\mu_{\beta}^{\tau} = \bar{\tau}^{\beta} \int_0^{\infty} (\theta - 1)^{\beta} C(\theta) d\theta = \bar{\tau}^{\beta} \mu_{\beta}^{\theta}$$

3.2 Типовые математические модели структуры потоков в аппаратах

В зависимости от вида функции распределения всё многообразие математических моделей потоков, возникающих в разных аппаратах, может представлено в виде типовых моделей. Рассмотрим некоторые простейшие модели.

3.2.1 Модель идеального вытеснения

В соответствии с этой моделью принимается поршневое течение без перемешивания вдоль потока при равномерном распределении вещества в направлении, перпендикулярном движению. Время пребывания τ всех частиц в системе одинаково и равно отношению объема системы V к объемной скорости (объемному расходу жидкости) v :

$$\tau = \frac{V}{v}$$

Для вывода уравнения модели составим уравнение материального баланса для элемента аппарата dx как показано на рисунке 3.2.1.

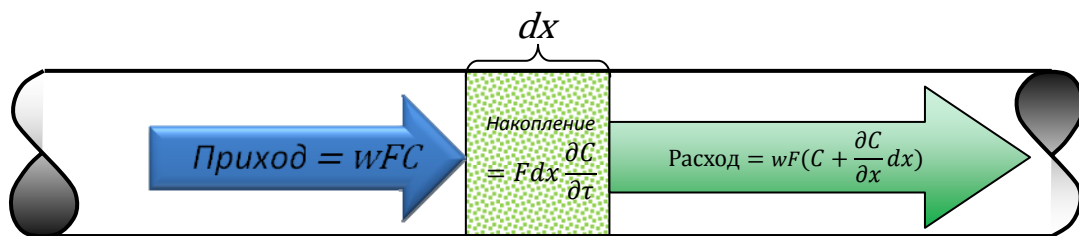


Рисунок 3.2.1

В рассматриваемый элемент dx поступает:

- конвективный поток wFC ;

Покидает рассматриваемый элемент:

- конвективный поток $wF\left(C + \frac{\partial C}{\partial x} dx\right)$;

В соответствии с законом сохранения массы разность между входящими и выходящими потоками должна составлять накопление вещества в рассматриваемом элементе. Накопление вещества равно $Fdx \frac{\partial C}{\partial \tau}$. Уравнение материального баланса для этого элемента аппарата:

Накопление = Приход вещества - Расход вещества

$$Fdx \frac{\partial C}{\partial \tau} = wFC - wF\left(C + \frac{\partial C}{\partial x} dx\right),$$

где F – сечение аппарата, м^2 ; C – концентрация индикатора, кг/м^3 ; τ – время, с; w – линейная скорость потока, м/с ; x – координата, вдоль которой перемещается вещество со скоростью w .

Преобразуя последнее уравнение получаем:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -w \frac{\partial C}{\partial x}.$$

Выходные кривые при импульсном и ступенчатом воздействии имеют вид:

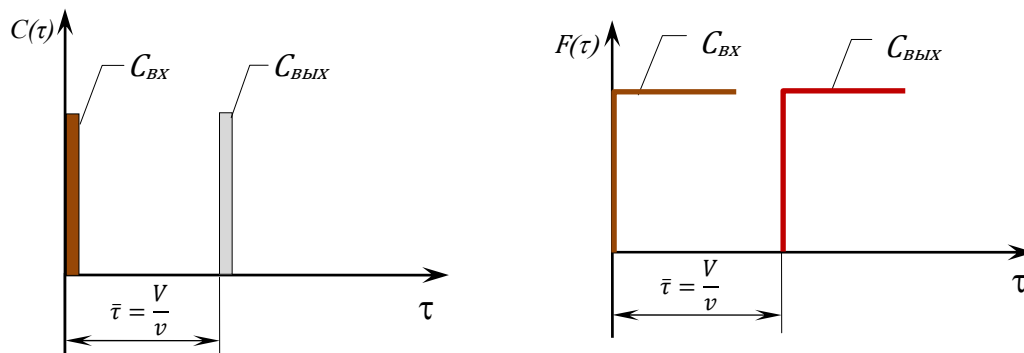


Рисунок 3.2.2

Модели идеального вытеснения в первом приближении соответствуют процессы, происходящие в трубчатых аппаратах при отношении длины трубы l к диаметру d более $l/d > 100$.

3.2.2 Модель идеального смешения

Согласно этой модели принимается равномерное распределение вещества по объему аппарата. Концентрация вещества в любой точке аппарата равна концентрации на выходе из него.

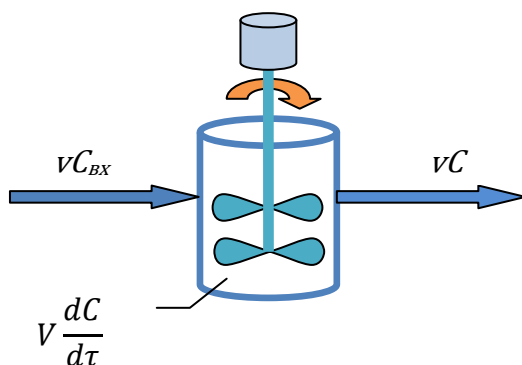


Рисунок 3.2.3

Примем следующие обозначения: $C_{ВХ}$ – концентрация вещества на входе; C – концентрация вещества в аппарате и на выходе из аппарата; V – объем аппарата; v – объёмный расход потока через аппарат.

В аппарат приходит:

- поток вещества равный $vC_{ВХ}$;

Покидает аппарат:

- поток вещества равный vC

В соответствии с законом сохранения массы разность между входящими и выходящими потоками должна составлять накопление вещества в аппарате. Накопление вещества равно $V \frac{dC}{d\tau}$.

Уравнение материального баланса для аппарата:

$$\text{Накопление} = \text{Приход вещества} - \text{Расход вещества}$$

Зависимость между концентрацией вещества на выходе аппарата из системы $C_{ВЫХ} = C$ и на входе $C_{ВХ}$ имеет вид:

$$V \frac{dC}{d\tau} = vC_{ВХ} - vC. \quad (3.2.1)$$

1) При импульсном возмущении $C_{вх} = 0$, тогда решая дифференциальное уравнение (3.2.1)

| Ход решения | |
|---|--|
| $v \frac{dC}{d\tau} = -vC;$ | $\frac{dC}{C} = -\frac{1}{\bar{\tau}} d\tau;$ |
| $\ln C = -\frac{\tau}{\bar{\tau}} + D;$ | $D = \ln C_H;$ |
| $C = C_H e^{-\frac{\tau}{\bar{\tau}}};$ | $C(\tau) = \frac{C_H e^{-\frac{\tau}{\bar{\tau}}}}{\int_0^\infty C_H e^{-\frac{\tau}{\bar{\tau}}} d\tau} = \frac{e^{-\frac{\tau}{\bar{\tau}}}}{\int_0^\infty e^{-\frac{\tau}{\bar{\tau}}} d\tau},$ |

с учётом того, что $\frac{1}{\bar{\tau}} = \int_0^\infty e^{-\frac{\tau}{\bar{\tau}}} d\tau$, получим функцию плотности распределения времени пребывания $C(\tau)$ для такого аппарата:

$$C(\tau) = \frac{e^{-\frac{\tau}{\bar{\tau}}}}{\bar{\tau}},$$

где $\bar{\tau} = \frac{V}{v}$ - среднее время пребывания частиц в системе

2) При ступенчатом возмущении $C_{вх} = C_0$. Решая дифференциальное уравнение (3.2.1) получим

| Ход решения | |
|--|--|
| $\frac{dC}{d\tau} = \frac{1}{\bar{\tau}} (C_0 - C);$ | $\frac{d\left(\frac{C}{C_0}\right)}{d\tau} = \frac{1}{\bar{\tau}} \left(1 - \frac{C}{C_0}\right);$ |
| $\frac{dF}{d\tau} = \frac{1}{\bar{\tau}} (1 - F);$ | $\frac{dF}{1 - F} = \frac{1}{\bar{\tau}} d\tau;$ |
| $-\ln(1 - F) = \frac{\tau}{\bar{\tau}} + D;$ | $D = 0$ |

функцию распределения времени пребывания частиц потока в аппарате $F(\tau)$

$$F = 1 - e^{-\frac{\tau}{\bar{\tau}}}.$$

Выходные кривые при ступенчатом воздействии и импульсном возмущении имеют вид:

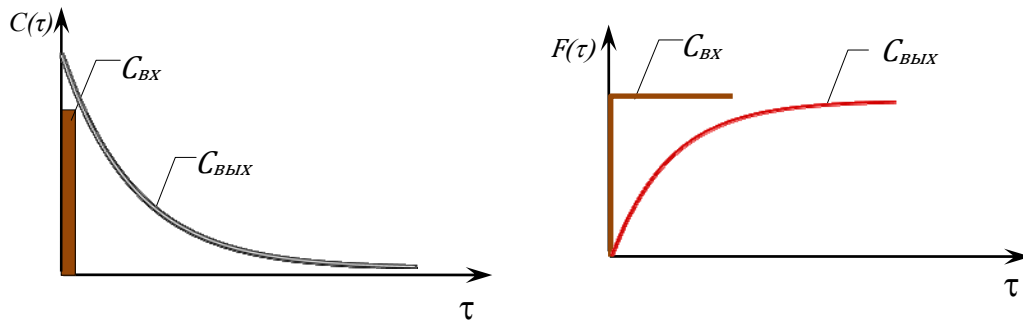


Рисунок 3.2.4

Модель идеального смешения соответствует процессы в кубовых емкостях при наличии интенсивного перемешивания.

3.2.3 Диффузионная модель

Различают однопараметрическую и двухпараметрическую диффузионные модели.

Основное уравнение однопараметрической диффузионной модели

В основе диффузионной модели лежит допущение, что структура потока описывается уравнением, аналогичным уравнению молекулярной диффузии. Параметром модели является коэффициент продольного перемешивания, называемый коэффициентом турбулентной диффузии или коэффициентом обратного перемешивания.

Представим элемент аппарата dx как на рисунке 3.2.5:

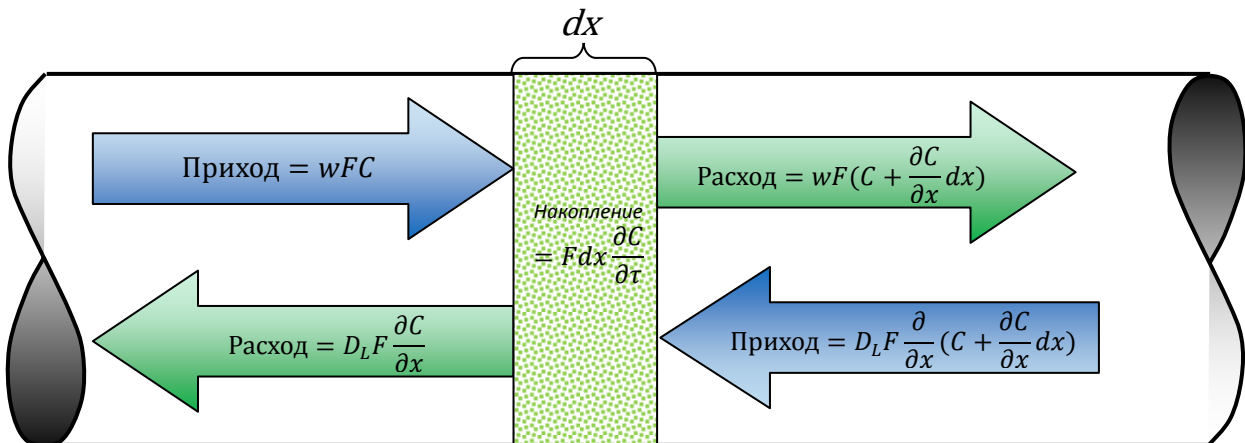


Рисунок 3.2.5

В рассматриваемый элемент dx поступают:

- конвективный поток wFC .
- поток, вызываемый турбулентной диффузией $D_L F \frac{\partial}{\partial x} (C + \frac{\partial C}{\partial x} dx)$.

Покидают рассматриваемый элемент:

- конвективный поток $wF(C + \frac{\partial C}{\partial x} dx)$;
- поток, вызываемый турбулентной диффузией $D_L F \frac{\partial C}{\partial x}$;

В соответствии с законом сохранения массы разность между входящими и выходящими потоками должна составлять накопление вещества в рассматриваемом элементе. Накопление вещества равно $F dx \frac{\partial C}{\partial \tau}$

Уравнение материального баланса для этого элемента аппарата:

$$\text{Накопление} = \text{Приход вещества} - \text{Расход вещества}$$

$$F dx \frac{\partial C}{\partial \tau} = wFC + D_L F \frac{\partial}{\partial x} \left(C + \frac{\partial C}{\partial x} dx \right) - wF \left(C + \frac{\partial C}{\partial x} dx \right) - D_L F \frac{\partial C}{\partial x}$$

Преобразуя последнее уравнение, получаем основное уравнение диффузионной модели:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - w \frac{\partial C}{\partial x}.$$

Выходные кривые при импульсном возмущении и ступенчатом воздействии имеют вид:

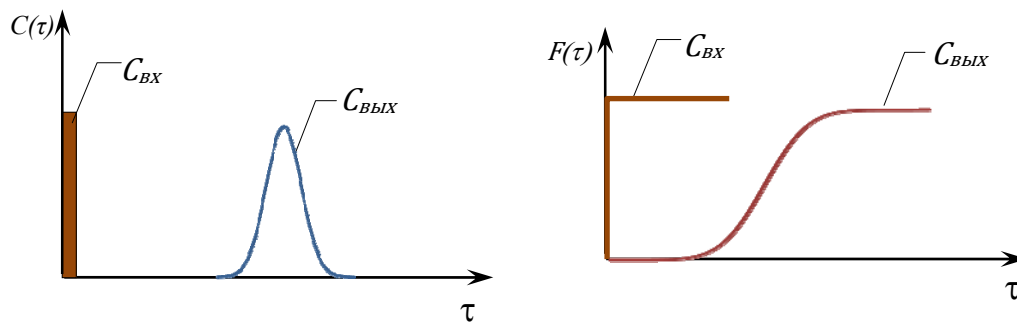


Рисунок 3.2.6

3.2.4 Ячеечная модель

Основой модели является представление реакционного пространства в виде совокупности ячеек равного объема. В пределах каждой ячейки, расположенных последовательно, осуществляется идеальное смешение, а перемешивание между ячейками отсутствует. Параметром модели служит число ячеек m .

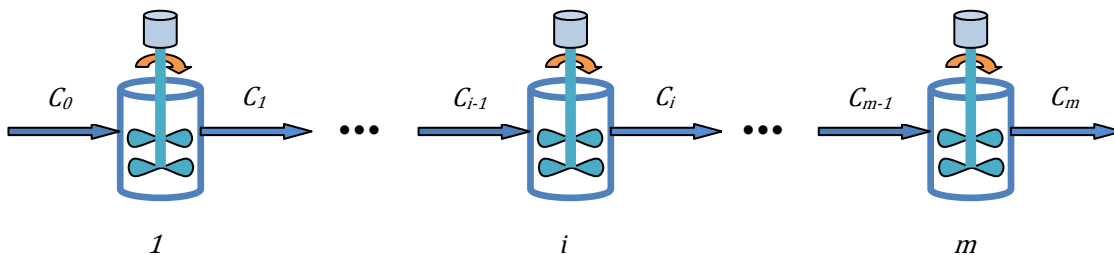


Рисунок 3.2.7

Математическое описание ячейечной модели включает m линейных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\frac{1}{m} \frac{dC}{d\tau} = \frac{1}{\bar{\tau}} (C_{i-1} - C_i)$$

где m – число ячеек; C_{i-1} – концентрация на входе в i -ю ячейку; C_i – концентрация на выходе из i -ой ячейки; $\tau = V/v$.

C-кривая для ячейечной модели описывается уравнением:

$$C(\tau) = \frac{m^m}{(m-1)!} \left(\frac{\tau}{\bar{\tau}}\right)^{m-1} e^{-\frac{m\tau}{\bar{\tau}}}$$

Выходные кривые при импульсном возмущении и ступенчатом воздействии имеют вид:

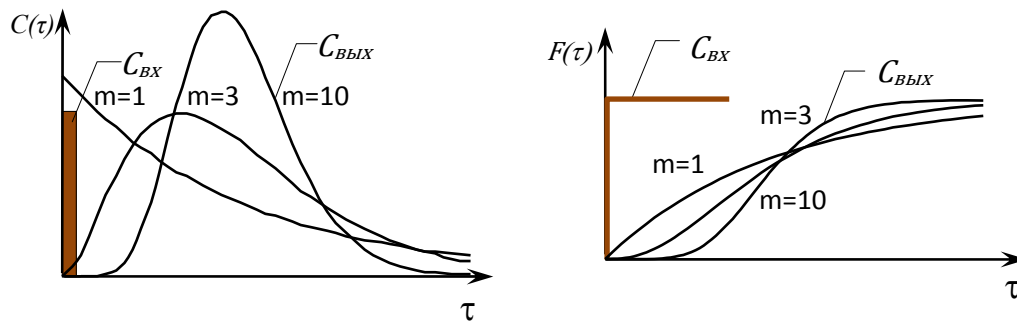


Рисунок 3.2.8

Не все реальные процессы удастся описать при помощи рассмотренных выше моделей. В частности, это относится к процессам, включающим байпасные и циркуляционные потоки, к процессам с застойными зонами, а также процессам в аппаратах сложной структуры. Для описания таких систем имеется широкий круг, так называемых комбинированных моделей, в которых реальный аппарат представляется какой-либо комбинацией типовых систем.

4 Составление математических моделей экспериментальным методом

4.1 Математические модели, составленные экспериментально-статистическим методом

В тех случаях, когда информации о рассматриваемом процессе недостаточно или процесс настолько сложен, что невозможно составить его детерминированную модель, прибегают к *экспериментально-статистическим* методам.

Процесс при этом рассматривается как “*черный ящик*”. Различают *пассивный* и *активный* эксперимент. При *пассивном эксперименте* экспериментатор не вмешивается в работу объекта, а просто регистрирует изменения значений входных и выходных величин в результате случайных воздействий. Обработка опытных данных в данном случае для получения математической модели проводится методами классического *регрессионного* и *корреляционного анализа*.

При *активном* эксперименте экспериментатор сам изменяет значения входных величин. При проведении активного эксперимента входные координаты изменяются в более широком диапазоне, поэтому и получаемая модель работоспособна в более широком диапазоне значений входных величин.

В общем случае объект бывает с m входными (x_1, x_2, \dots, x_m) и n выходными (y_1, y_2, \dots, y_n) координатами (см. рисунок 4.1.1)

Координата называется входной, если она оказывает влияние на процесс, а ее значение не зависит от протекания этого процесса. Координата называется выходной, если ее значение зависит от процесса, протекающего в объекте, и значений входных координат.

Математической моделью объекта называется совокупность уравнений, описывающих зависимость выходных координат от входных координат и параметров уравнений. Уточним, что в данном случае может служить моделью объекта.

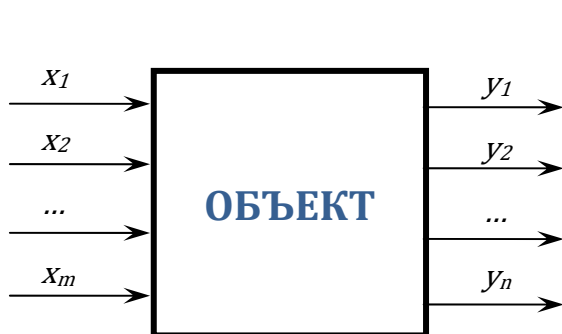


Рисунок 4.1.1

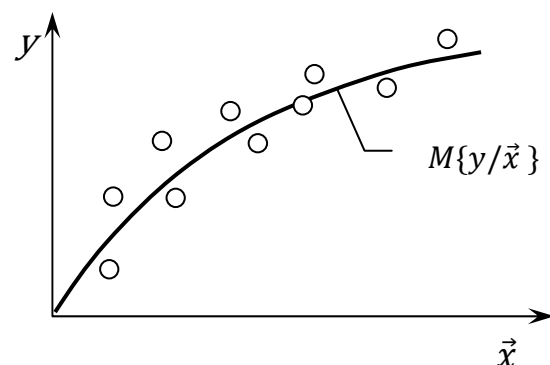


Рисунок 4.1.2

Поскольку на выходную координату объекта, помимо учитываемых входных координат, всегда влияют и не учитываемые переменные, которые рассматриваются как некоторые случайные величины - *помехи*, это определяемые экспериментально значения выходной координаты случайны. Тогда выходная координата y зависит от входных не функционально,

а *стохастически, вероятно*. Каждому фиксированному значению вектора \vec{x} входных координат соответствует не определенное значение y , а некоторая *условная плотность распределения значений* $y - f(y/\vec{x})$ и определенное значение *условного математического ожидания* выходной координаты – $M\{y/\vec{x}\}$ (см. рисунок 4.1.2).

Зависимость условного математического ожидания выходной координаты y от вектора \vec{x} : $\hat{y}(\vec{x}, \vec{a}) = M\{y/\vec{x}\}$ называется *регрессионной зависимостью*. Она и может служить в данном случае математической моделью объекта, т.к. позволяет прогнозировать значения выходной координаты объекта при данных значениях входных. Параметры \vec{a} в такой модели не имеют физического смысла, а являются просто коэффициентами зависимости. Кривая, описывающая зависимость $M\{y/\vec{x}\}$ от \vec{x} называется *кривой регрессии*.

Часто при экспериментальном методе математической моделью является *функция отклика*, связывающая *параметр оптимизации*, характеризующей результаты эксперимента, с переменными параметрами, которыми экспериментатор варьирует при проведении опытов.

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_m) \quad (4.1.1)$$

Независимые переменные x_1, x_2, \dots, x_m называются факторами (входные координаты); координатное пространство с координатами x_1, x_2, \dots, x_m – *факторным пространством*; геометрическое изображение функции отклика в факторном пространстве – *поверхностью отклика* (см. рисунок 4.1.3).

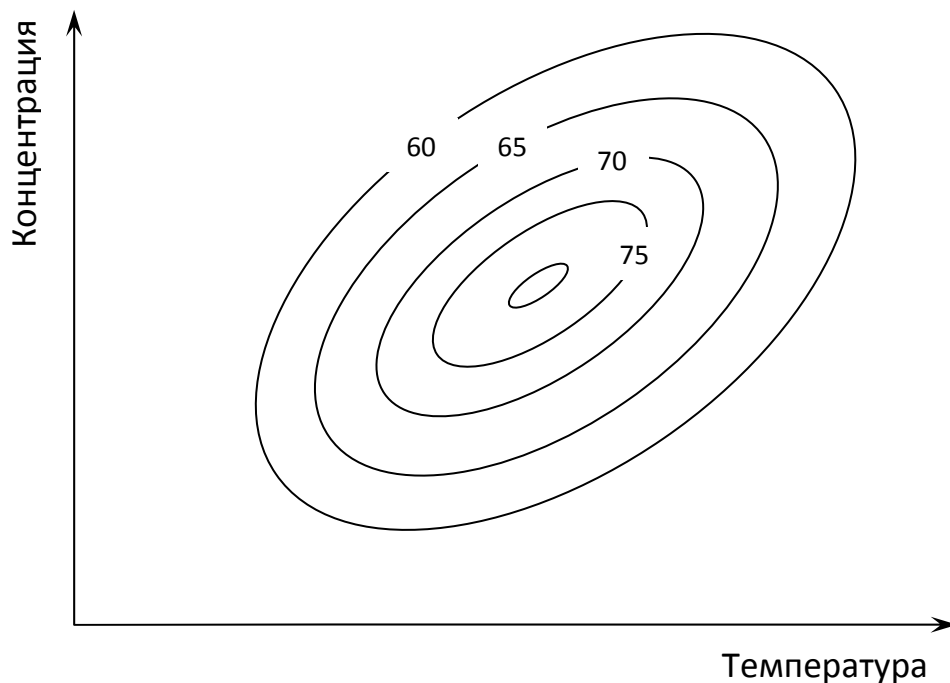


Рисунок 4.1.3

При использовании статистических методов математическая модель представляется в виде полинома - отрезка ряда Тейлора, в которой разлагается неизвестная зависимость:

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j + \sum_{\substack{u,j=1 \\ u \neq j}}^k \beta_{uj} x_u x_j + \sum_{j=1}^k \beta_{jj} x_j^2 + \dots \quad (4.1.2)$$

В связи с тем, что в реальном процессе всегда существуют неуправляемые и неконтролируемые переменные, изменение выходной величины носит случайный характер. Поэтому при обработке экспериментальных данных получаются так называемые выборочные коэффициенты регрессии b_0, b_j, b_{uj}, b_{jj} являющиеся оценками теоретических коэффициентов $\beta_0, \beta_j, \beta_{uj}, \beta_{jj}$.

Уравнение регрессии, получаемое на основании опыта, записывается в виде:

$$y = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{\substack{u,j=1 \\ u \neq j}}^k b_{uj} x_u x_j + \sum_{j=1}^k b_{jj} x_j^2 + \dots \quad (4.1.3)$$

Коэффициент b_0 называют *свободным членом* уравнения регрессии; b_j - *линейными эффектами*; b_{jj} - *квадратичными эффектами*; b_{uj} - *эффектами взаимодействия*.

4.2 Параметрическая идентификация моделей методом наименьших квадратов

Идентификацией модели называется определение ее параметров и структуры, обеспечивающих наименьшие отклонения выходных координат модели от выходных координат объекта при одинаковых входных воздействиях. *Процедура*, в которой одновременно определяются как структура, так и параметры, называется *идентификацией модели в широком смысле*. Часто же структурой модели задаются заранее, используя имеющиеся сведения об объекте, а определяют только параметры модели. Такая процедура называется *идентификацией в узком смысле* этого слова или *параметрической идентификацией*.

Для параметрической идентификации моделей часто используется МНК.

Постановка задачи. Объект имеет r входных x_1, x_2, \dots, x_r и одну выходную координату y .

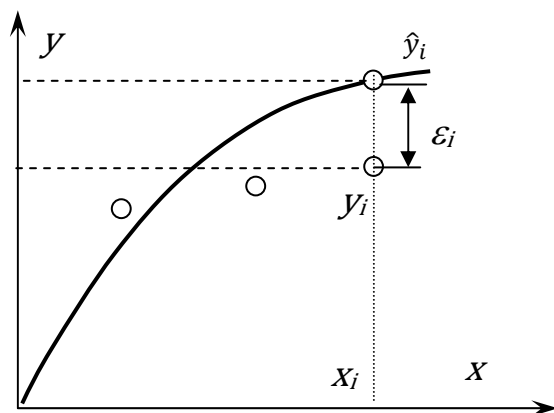


Рисунок 4.2.1

Обозначим $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_r)$ - вектор входных координат. Проведено n экспериментов. В каждом из которых, при известных значениях входных координат \vec{x} , определялись соответствующие им значения y_i выходной координаты. Требуется построить математическую модель объекта. Кривая регрессии должна проходить вблизи экспериментальных точек. Точнее, значения выходной координаты $\hat{y}(\vec{x}, \vec{a})$ находимые по модели, должны быть близки к значениям выходной координаты y_i

$= y(\vec{x})$, определенным экспериментом, но при тех же значениях входных координат. Эти условия и используются для построения модели.

Для этого формируется функция F , оценивающая невязку ε - степень отклонения $y(\vec{x})$ от $\hat{y}(\vec{x}, \vec{a})$:

$$\varepsilon = y(\vec{x}) - \hat{y}(\vec{x}, \vec{a}).$$

В методе наименьших квадратов в качестве такой функции используется квадрат невязки

$$F(\varepsilon) = \varepsilon^2 = [y(\vec{x}) - \hat{y}(\vec{x}, \vec{a})]^2 \quad (4.2.1)$$

Видом, структурой зависимости $\hat{y}(\vec{x}, \vec{a})$ задаются, поэтому построение искомой зависимости сводится к определению ее параметров \vec{a} . Они находятся таким образом, чтобы при этих значениях математическое ожидание функции невязки F было минимальным,

$$M(F) = M(\varepsilon^2) = M\{[y(\vec{x}) - \hat{y}(\vec{x}, \vec{a})]^2\} \Rightarrow \min. \quad (4.2.2)$$

Поскольку имеющаяся выборка экспериментальных данных всегда ограничена, то операцию нахождения математического ожидания заменяют операцией вычисления его оценки - среднего арифметического:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [y(\vec{x}) - \hat{y}(\vec{x}, \vec{a})]^2 \Rightarrow \min. \quad (4.2.3)$$

Отбросив величину $\frac{1}{n}$, степень близости модели и объекта будем оценивать величиной

$$f(a) = \sum_{i=1}^n [y(\vec{x}) - \hat{y}(\vec{x}, \vec{a})]^2 \Rightarrow \min. \quad (4.2.4)$$

Таким образом, при МНК параметры находятся из условия

$$f(a) \rightarrow \min$$

т.е. являются решением задачи минимизации суммы квадратов невязки.

Для использования МНК модель должна быть *линейна по параметрам*, т.е. параметры \vec{a} входят в модель линейно.

В качестве зависимости $\hat{y}(\vec{x}, \vec{a})$ используется полином l -ой степени. Например, если объект имеет две входные координаты z_1 и z_2 , то можно использовать квадратичный полином:

$$y = a_0 + a_1 z_1 + a_2 z_2 + a_3 z_1^2 + a_4 z_2^2 + a_5 z_1 z_2 \quad (4.2.5)$$

В любом случае для большей комплектности выкладок и удобства вычислений целесообразно переобозначить переменные, входящие в правую часть уравнения, и записать его в виде линейного полинома с другими переменными:

$$y = a_0 x_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_r x_r \quad (4.2.6)$$

Уравнение (4.2.5) приводится к такому виду с помощью обозначений:

$$x_0 = 1; x_1 = z_1; x_2 = z_2; x_3 = z_1^2; x_4 = z_2^2; x_5 = z_1 z_2.$$

лые отклонения в значениях входных координат (возможно, вызванных наличием помех измерения) будут приводить к существенному изменению находимых оценок параметров. Это может быть вызвано либо линейной зависимостью части входных координат, либо тем, что при проведении эксперимента значения входных координат изменялись слишком мало, либо неточностью вычисления Δ в выражении $a_i = \frac{\Delta_i}{\Delta}$.

В этом случае необходимо, соответственно, либо менять структуру модели (исключать линейно зависимые координаты), либо менять выборку экспериментальных данных, либо проводить вычисления с большей точностью.

Для решения системы нормальных уравнений с помощью ЭВМ лучше использовать метод Гаусса-Жардона.

4.3 Регрессионный анализ

После того, как уравнение регрессии найдено, необходимо провести *статистический* анализ результатов. Этот анализ состоит в следующем:

- 1) проверяется *значимость* коэффициентов уравнения регрессии;
- 2) устанавливается *адекватность* уравнения.

Такое исследование носит название *регрессионного анализа*.

Допущения, используемые при проведении регрессионного анализа:

- 1) Входные координаты x_1, x_2, \dots, x_r измеряются с пренебрежимо *малыми ошибками* и могут рассматриваться как неслучайные величины.
- 2) Экспериментальные значения выходной координаты представляют собой значения *независимых* случайных величин, имеющих *нормальное распределение*.
- 3) При изменении значений входных координат изменяется только *математическое ожидание* выходной координаты, но не изменяется *дисперсия* ее *разброса*, т.е. дисперсия разброса y при фиксированном значении $x = x_1$ является постоянной величиной, не зависящая от значения x_1 .

4.3.1 Проверка воспроизводимости опытов

Прежде всего, необходимо убедиться в том, что опыты воспроизводимы. Оценку воспроизводимости опытов осуществляют так называемой - *дисперсией воспроизводимости* $\sigma_{\text{восп.}}^2$.

1) Для определения дисперсии воспроизводимости проводят серию (N – количество серий опытов) параллельных опытов (опыты, в которых входные координаты принимают одни и те же значения; m – количество параллельных опытов в каждой серии). В каждом из таких опытов определяется в статическом режим установившееся значение выходной координаты $y_1, y_2, y_3, \dots, y_m$.

2) Для каждой серии параллельных опытов вычисляют оценку дисперсии:

$$\sigma_i^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{u=1}^m (y_{iu} - \bar{y}_i)^2 \quad (4.3.1)$$

где m - число параллельных опытов, проведенных при одинаковых условиях;
 N - число серий параллельных опытов;

$$\bar{y}_i = \frac{1}{m} \sum_{u=1}^m y_{iu} - \text{среднее арифметическое значение } y, i=1, 2, \dots, N.$$

3) Для проверки воспроизводимости опытов находят отношение наибольшей из оценок дисперсий к сумме всех оценок дисперсий

$$G_{max} = \frac{\sigma_{max}^2}{\sum_{i=1}^N \sigma_i^2} \quad (4.3.2)$$

где σ_{max}^2 - максимальное значение выборочной дисперсии.

Эта величина называется *расчетным значением критерия Кохрена*.

Если выполняется условие:

$$G_p(N, m-1) > G_{max}$$

то опыты считаются воспроизводимыми, а оценки дисперсий *однородными*.

$G_p(N, m-1)$ - *табулированное* значение критерия Кохрена при уровне значимости p ($P = 1 - p$, где P - доверительная вероятность, например $P=0,95$).

Если выборочные дисперсии однородны, рассчитывается *дисперсия воспроизводимости*:

$$\sigma_{восп}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2. \quad (4.3.3)$$

Степень свободы этой дисперсии $f = N(m-1)$.

4.3.2 Оценка значимости коэффициентов уравнения регрессии

При построении модели объекта желательно уметь выделять переменные, слабо влияющие на выходную координату. Их можно исключить из уравнения. Это позволяет упростить модель, не снижая существенно ее точности.

Оценка значимости коэффициентов производится по *критерию Стьюдента*:

$$t_j = \frac{|a_j|}{\sigma_{aj}} \quad (4.3.4)$$

где a_j - j -ый коэффициент уравнения регрессии; σ_{aj} - среднее квадратичное отклонение j - го коэффициента.

σ_{aj} определяется по закону накопления ошибок:

$$\sigma_{a_j} = \sqrt{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial a_j}{\partial y_i} \right)^2 \sigma_i^2} \quad (4.3.5)$$

Обычно $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \dots = \sigma_N^2 = \sigma_{\text{воспр}}^2$, тогда

$$\sigma_{a_j} = \sigma_{\text{воспр}} \sqrt{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial a_j}{\partial y_i} \right)^2} \quad (4.3.6)$$

1. Если t_j больше табулированного $t_p(f)$ (для выбранного уровня значимости p и числа степенной свободы $f = N-2$) т.е.

$$t_j > t_p(f),$$

то коэффициент a_j значимо отличается от нуля. Следовательно, он не может быть принят равным нулю, не может быть исключен из модели.

2. Если $t_j < t_p(f)$, то j -ый параметр с заданной вероятностью не значим. Незначимые коэффициенты исключаются из уравнения регрессии. Оставшиеся коэффициенты пересчитываются заново.

4.3.3 Проверка адекватности модели

После построения модели необходимо проверить, соответствует ли полученная модель объекту, т.е. адекватна ли она ему. Естественно считать, что модель соответствует объекту, если она позволяет определить значения выходных координат, близкие к тем, которые имели бы место на реальном объекте при заданных значениях входных координат. Степень отклонения выходных координат \hat{y}_i , определяемых по модели, от найденных экспериментально y_i при одинаковых значениях входных координат, оценивает величина называемая *дисперсией аппроксимации*

$$\sigma_{\text{апп}}^2 = \frac{1}{N-l} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (4.3.7)$$

где l - число значимых коэффициентов в уравнении регрессии.

Она количественно оценивает *точность описания* или *точность аппроксимации* экспериментальных данных моделью. Ее сопоставляют с точностью самих экспериментальных данных, оцениваемой дисперсией воспроизводимости.

Модель считается адекватной объекту, если различие оценок дисперсий аппроксимации и воспроизводимости случайно.

Адекватность уравнения, проверяемая по критерию Фишера:

$$F = \frac{\max(\sigma_{\text{апп}}^2, \sigma_{\text{воспр}}^2)}{\min(\sigma_{\text{апп}}^2, \sigma_{\text{воспр}}^2)} \quad (4.3.8)$$

Уравнение регрессии считается адекватным, если табличное значение критерия Фишера $F_p(f_1, f_2)$, для выбранного уровня значимости p и чисел степеней свободы $f_1=N-1$ и $f_2=N-1$, больше вычисленного значения F , т.е.

$$F_p(f_1, f_2) > F$$

При отсутствии параллельных опытов и дисперсии воспроизводимости критерий Фишера находится по формуле:

$$F = \frac{\sigma_y^2}{\sigma_{\text{анп}}^2}, \quad (4.3.9)$$

где

$$\sigma_y^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2$$

В этом случае, чем $F > F_p(f_1, f_2)$, тем лучше.

4.4 Корреляционный анализ

Если оказалось, что модель не адекватна объекту, то необходимо, либо изменить структуру модели - добавить или отбросить какие-либо члены модели, либо расширить выборку экспериментальных данных. После чего вновь рассчитываются параметры новой модели, и проводится регрессионный анализ.

Как видно из изложенного наиболее сложным при построении уравнения регрессии является выбор структуры уравнения. Построение модели производится, как правило, итеративно. При этом используются показатели, характеризующие степень влияния одного члена или группы членов на выходную координату.

4.4.1 Коэффициент корреляции

Коэффициент корреляции служит мерой линейной зависимости двух случайных величин и определяется по формуле:

$$r_{xy} = \frac{1}{N-1} \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sigma_x^2 \sigma_y^2}} \quad (4.4.1)$$

где

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i; \quad \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \quad \Leftarrow \text{Средние значения}$$

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2; \quad \sigma_y^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2. \quad \Leftarrow \text{Дисперсии } x \text{ и } y$$

Коэффициент корреляции:

- является безразмерной величиной;
- характеризует степень линейной зависимости;
- изменяется в интервале от -1 до +1;
- равен нулю, если величины линейно независимы;
- приближается по абсолютной величине к единице тем больше, чем больше степень линейной зависимости величин.

Коэффициент корреляции r_{xy} может служить показателем целесообразности включения переменной x в модель при условии, что другие переменные в модель не включены (она содержит только свободный член). С этой целью проверяется статистическая гипотеза о значимости коэффициента корреляции - существенном, значительном отклонении его истинного значения от нуля.

Если $r_{xy} = 0$, то величина

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

имеет распределение Стьюдента с числом степеней свободы $(N-2)$. Величина $F=t^2$ имеет распределение Фишера с числом степеней свободы $f_1=1$ и $f_2=N-1$. Любая из этих величин

может быть использована в качестве статистического критерия для проверки гипотезы: $r_{xy} = 0$.

Незначимость коэффициента корреляции (при достаточно большой выборке экспериментальных данных) свидетельствует об отсутствии линейной зависимости между величинами x и y и нецелесообразности включения переменной x в модель.

4.4.2 Частный коэффициент корреляции

Частный коэффициент корреляции служит мерой линейной зависимости между двумя величинами, например, y и x_r с учетом линейной зависимости y от остальных переменных, уже включенных в модель.

Допустим, что переменные x_1, x_2, \dots, x_{r-1} уже включены в модель. Тогда частный коэффициент корреляции y и x_r будем обозначать $\rho_{yx_r \cdot x_1 x_2 \dots x_{r-1}}$.

Число переменных, уже включенных в модель, не считая фиктивную переменную x_0 определяет **порядок частного коэффициента корреляции**.

Допустим, что в модель уже включена одна переменная x_1 . Частный коэффициент корреляции первого порядка $\rho_{yx_r \cdot x_1}$ находится по формуле:

$$\rho_{yx_r \cdot x_1} = \frac{r_{yx_r} - r_{yx_1} \cdot r_{x_r x_1}}{\sqrt{1 - r_{yx_1}^2} \cdot \sqrt{1 - r_{x_r x_1}^2}}$$

В правую часть этой формулы входят простые коэффициенты корреляции.

Частный коэффициент корреляции второго порядка - между переменными y и x_r при условии, что в модель уже включены переменные x_1, x_2

$$\rho_{yx_r \cdot x_1 x_2} = \frac{\rho_{yx_r \cdot x_1} - \rho_{yx_2 \cdot x_1} \cdot \rho_{x_r x_2 \cdot x_1}}{\sqrt{1 - \rho_{yx_2 \cdot x_1}^2} \cdot \sqrt{1 - \rho_{x_r x_2 \cdot x_1}^2}}$$

и так далее для любого числа ранее включенных переменных.

Частный коэффициент корреляции может служить показателем целесообразности включения очередной переменной в модель, уже содержащую ряд членов.

Если величина $\rho_{yx_r \cdot x_1 x_2 \dots x_{r-1}} = 0$, то величина

$$t_1 = \frac{\rho_{yx_r \cdot x_1 x_2 \dots x_{r-1}}}{\sqrt{1 - \rho_{yx_r \cdot x_1 x_2 \dots x_{r-1}}^2}} \sqrt{N - K - 2}$$

где $K = r-1$ - число уже включенных в модель переменных, имеет распределение Стьюдента с числом степеней свободы $N-K-2$, а $F_1 = t_1^2$ имеет распределение Фишера с числом степеней свободы $f_1 = 1$ и $f_2 = N-K-2$. Любая из этих величин может быть использована для проверки гипотезы:

$$\rho_{yx_r x_1 x_2 \dots x_{r-1}} = 0,$$

т. е. определение того, значимо ли влияние переменной x_r на y , если в модель уже ранее включены переменные x_1, x_2, \dots, x_{r-1} .

4.4.3 Множественный коэффициент корреляции

Множественный коэффициент корреляции служит мерой линейной зависимости выходной координаты y от совокупности переменных x_1, x_2, \dots, x_r . Он обозначается R^2 . С его использованием можно оценить долю влияния на величину y переменных, включенных в модель, от общего влияния всех переменных, действующих на объект. С этой целью анализируются величины дисперсий.

Общий разброс величины y относительно среднего \bar{y} может быть представлен как сумма разброса y относительно линии регрессии \hat{y} и разброса линии регрессии относительно среднего \bar{y} т.е.

$$\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \quad (4.4.2)$$

где

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 & \text{ - оценивает общий разброс величины } y \\ \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 & \text{ - оценивает разброс } y \text{ относительно линии регрессии, т.е. остаточный разброс} \\ \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2 & \text{ - оценивает разброс, обусловленный регрессией} \end{aligned}$$

Чем больше зависимость y от x_1, x_2, \dots, x_r (т.е. чем сильнее влияние переменных на y), тем в большей степени разброс y обуславливается наличием регрессионной зависимости, тем большую долю от общего разброса составляет разброс, обусловленный регрессией. Эта доля и определяет значение множественного коэффициента корреляции

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} \quad (4.4.3)$$

В предельном случае экспериментальные точки лежат на кривой регрессии, $y_i = \hat{y}_i$ и $R^2 = 1$. Если y не зависит от x_1, x_2, \dots, x_r , то $\hat{y}_i = \bar{y}$ и $R^2 = 0$.

Таким образом, множественный коэффициент корреляции:

- оценивает меру линейной зависимости выходной координаты от линейной комбинации переменных;
- является величиной безразмерной;
- изменяется в диапазоне от 0 до 1, приближаясь к единице тем больше, чем больше степень линейной зависимости y от x_1, x_2, \dots, x_r .

Множественный коэффициент корреляции может быть использован для оценки значимости всех переменных, включенных в модель.

Определение параметров нелинейных регрессионных моделей

В некоторых случаях модели, нелинейные по параметрам, удается привести к линейному виду с помощью специальных преобразований. Например, уравнение

$$\hat{y} = a_1 e^{a_2 x}$$

где a_1, a_2 - искомые параметры модели;

x, y - входная и выходная координаты.

Можно прологарифмировать, тогда получим

$$\ln y = \ln a_1 + a_2 x$$

Введем обозначения $\ln y = y_1, \ln a_1 = b_0, a_2 = b_1$, придем к линейному уравнению

$$y_1 = b_0 + b_1 x$$

Часто это не удается сделать. Например, уравнение

$$y = k_1 e^{k_2 x} + k_3$$

таким образом привести к линейному виду нельзя.

В этом случае процедура идентификации усложняется. Задача определения параметров нелинейной модели может быть сведена к минимизации суммы Φ квадратов отклонений значений выходных координат y_i и \hat{y}_i при одинаковых входных воздействиях $x = x_i$.

$$\Phi = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \rightarrow \min$$

Экстремум полученной функции также находится по соотношениям

$$\frac{\partial \Phi}{\partial b_0} = 0; \frac{\partial \Phi}{\partial b_1} = 0; \dots \frac{\partial \Phi}{\partial b_r} = 0.$$

Однако эти соотношения будут определять уже систему нелинейных алгебраических или трансцендентных уравнений, решение которых представляет самостоятельную и непростую задачу.

Параметры нелинейных моделей могут, также, находиться итеративно. Причем, на каждой итерации исходная функция линеаризуется путем разложения в ряд Тейлора. Однако данный алгоритм может либо вообще не сходиться, либо сходиться очень медленно, с большими колебаниями оценок параметров.

В связи с этим более эффективным является непосредственный поиск экстремума функции Φ , основанный на использовании одного из методов оптимизации.

5 Методы оптимизации химико-технологических процессов и нахождения экстремума (минимума или максимума) функций

5.1 Постановка задачи

Исследование химико-технологических процессов завершается поиском оптимальных условий его осуществления.

Если сформулирована зависимость

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_r)$$

то оптимизация заключается в подборе таких значений x_1^*, \dots, x_r^* , при которых y будет оптимальным (т.е. минимальным или максимальным). Кроме того, методы оптимизации используются при параметрической идентификации нелинейных моделей.

5.2 Поисковые методы для функции одной переменной

Пусть функция $y = f(x)$ в возможной области изменения аргумента имеет один экстремум.

Для поиска экстремума функции одной переменной могут быть использованы следующие методы:

- 1) метод сканирования;
- 2) метод дихотомии (половинного деления);
- 3) метод Фибоначчи;
- 4) метод золотого сечения.

5.2.1 Метод сканирования

Если ε наименьшее изменение x , которое приводит к ощутимому изменению y , то область поиска $x_{max} - x_{min}$ можно разбить $(x_{max} - x_{min})/\varepsilon$ интервалов и исследовать y на границе каждого интервала.

Сравнивая найденные значения y , выбирают из них оптимальное. Такой метод называется сканированием (обеганием). Он прост в постановке, позволяет точно определить положение экстремума, но требует очень длительной вычислительной работы.

Известен ряд вариантов этого метода, позволяющих уменьшить вычислительную работу при сканировании. Можно, например, увеличить шаг поиска в 2^r раз и проводить расчеты при "крупных" шагах в $2^r \varepsilon$. Проведя расчеты, наблюдают за величиной y . Найдя широкую "оптимальную" область, начинают движение к ней, уменьшив шаг в два раза - до $2^{r-1} \varepsilon$. Его процедуру повторяют до получения узкого интервала вблизи экстремума.

5.2.2 Метод дихотомии (половинного деления)

Более эффективны методы, основанные на так называемой **минимальной** стратегии.

Начальный интервал неопределенности составляет:

$$L_0 = x_{max} - x_{min}$$

Рассчитывают значение функции y при двух значениях аргумента x : x_1 и x_2 расположенных вблизи середины интервала на расстоянии ε друг от друга. Видно из рисунка, что $y_1 > y_2$, следовательно оптимум лежит в интервале $(x_{max} - x_1)$. Интервал $(x_1 - x_{min})$ исключается из области неопределенности. Тогда новый интервал неопределенности составит:

$$L_1 = (x_{max} - x_1)$$

Следующая пара расчетов дает новый интервал, и т.д. Расчет продолжают до тех пор, пока интервал не сузится до величины, сравниваемой с ε .

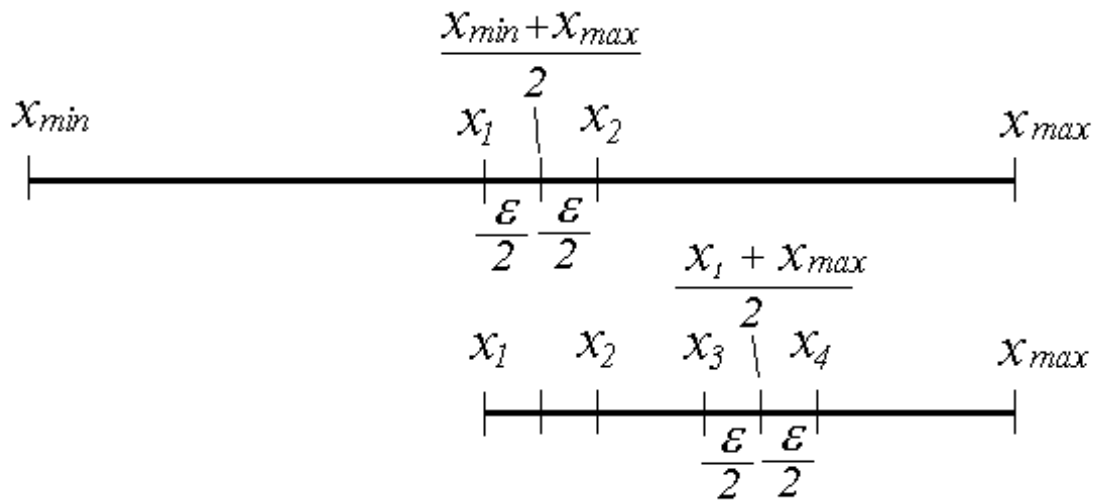


Рисунок 5.2.1

5.2.3 Метод золотого сечения

Существует метод Фибоначчи, который значительно эффективнее метода дихотомии. Числа Фибоначчи определяются по формуле:

$$F_i = F_{i-1} + F_{i-2}; \quad F_0 = 0; \quad F_1 = 1$$

Недостатком метода Фибоначчи является необходимость предварительного выбора числа расчетов. Этого недостатка лишны **метод золотого сечения**.

Начальный интервал неопределенности равен

$$L_0 = (x_{max} - x_{min})$$

Рассчитывают значения y в двух точках x_1 и x_2 , расположенных на расстоянии $0,62L_0$, т.е. при значениях x :

$$x_1 = x_{max} - 0,62 (x_{max} - x_{min})$$

$$x_2 = x_{min} + 0,62 (x_{max} - x_{min})$$

Ясно, что интервал $(x_1 - x_{min})$ не содержит экспериментального значения функции y . Поэтому данный интервал исключается из интервала неопределенности. Новый интервал неопределенности $L_1 = x_{max} - x_1 = 0,62L_0$. Новый интервал L_1 делится на три части по правилу **золотого сечения**.

Вычисляются значения y при x_3 и x_4

$$x_3 = x_{max} - 0,62 L_1$$

$$x_4 = x_{min} + 0,62 L_1$$

Следует отметить, что значения x_2 и x_3 совпадают, а следовательно: $y_2 = y_3$.

Таким образом, при последующих шагах рассчитывается лишь одно дополнительное значение функции y . Так расчет продолжается до максимальной координаты, пока интервал L_i не сузится до заранее заданной величины ε .

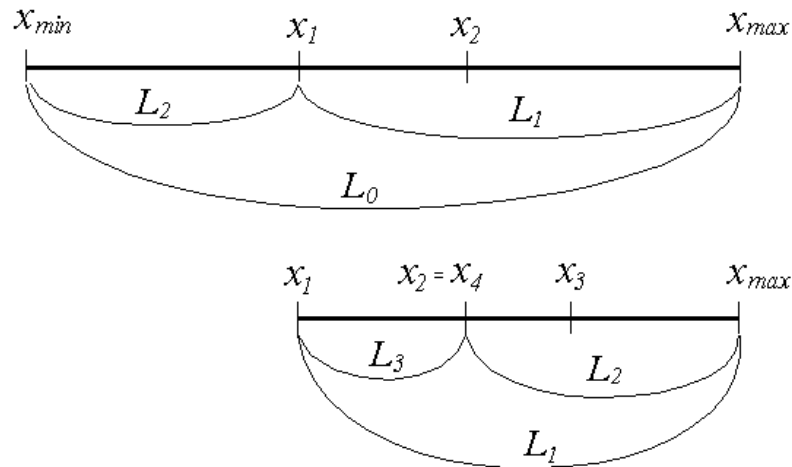


Рисунок 5.2.2

Отношения начального L_0 и полученного после 20 расчетов интервалов неопределенности L_0/L_{20} по методу:

- 1) половинного деления - 1024
- 2) фибоначчи - 10946
- 3) золотого сечения - 9349

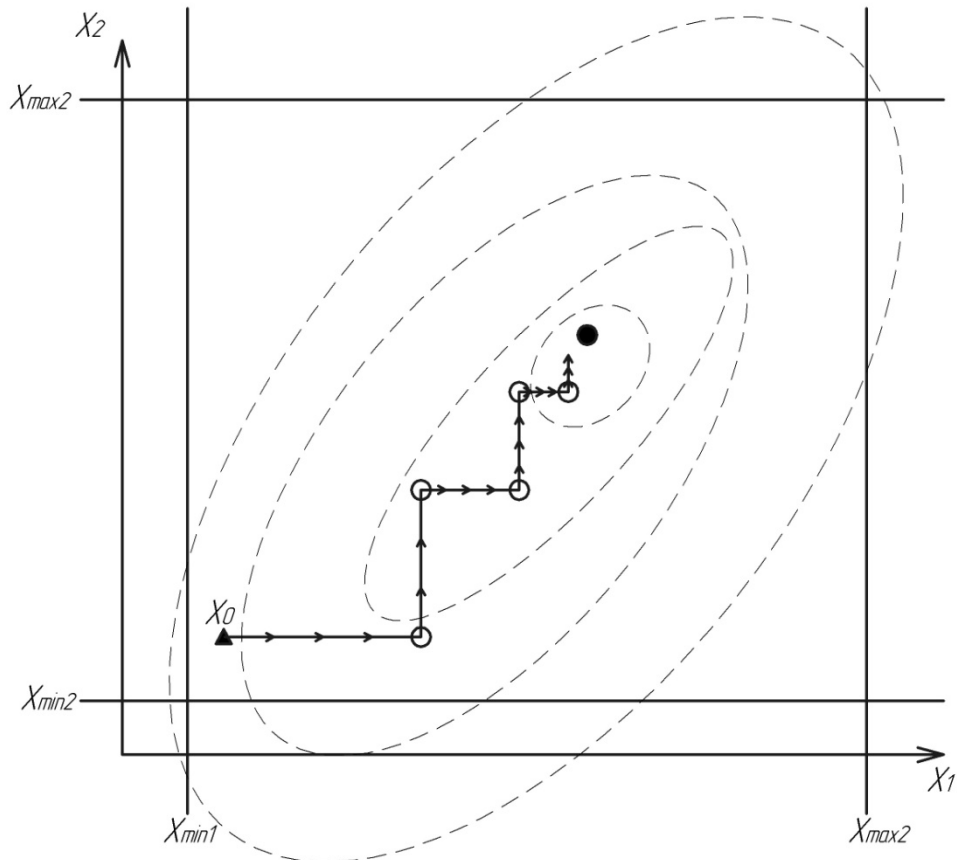
5.3 Поисковые методы для функции многих переменных

Задача поиска экстремума функции многих переменных, заданная уравнением $y = f(x_1, x_2, \dots, x_r)$, значительно сложнее, чем для функций одной переменной. Эта сложность связана, что функции многих переменных имеют ряд локальных минимумов (или максимумов); кроме того, движение к минимуму связано с движением по пологому "оврагу".

Метод сканирования практически не применим для функции многих переменных, в связи с большим числом расчетов.

5.3.1 Метод Гаусса – Зейделя (метод покоординатного поиска)

По этому методу осуществляют последовательный поиск по каждой переменной, фиксируя остальные. Например, меняют переменную x_1 до тех пор, пока y не пройдет через наилучшее значение. Далее x_1 фиксируют на найденном наилучшем уровне и начинают изменять x_2 при неизменных остальных переменных. Такой "просмотр" проводят r раз, последовательно меняя каждую из r переменных. Для нахождения экстремума по одной переменной могут быть использованы **методы половинного деления, золотого сечения**.



○ – локальные оптимальные значения переменных; ● – координаты глобального экстремума; ▲ – начальная точка.

Рисунок 5.3.1 – Иллюстрация метода Гаусса-Зейделя

5.3.2 Поиск экстремума методом динамического программирования

Этот метод применяется для многостадийных процессов, характеризующихся последовательностью решений, когда состояние системы зависит только от предыдущего шага и не зависит от ранее сделанных шагов. Динамическое программирование может быть использовано для оптимизации:

- 1) процессов ректификации;
- 2) процессов абсорбции;
- 3) каскада реактивов;
- 4) множественные адиабатические слои.

Принцип оптимальности формируется в следующем виде.

Оптимальная стратегия обладает таким свойством, что, каково бы ни было начальное состояние и начальное решение, последующие решения должны приниматься исходя из оптимальности стратегии относительно состояния, получаемого в результате первого решения.

Многостадийный процесс представим схемой:

Каждая стадия характеризуется входными x_{i-1} , выходными x_i и параметрами управления U_i .

При помощи управляющих воздействий оптимизируется результирующая оценка эффективности многостадийного процесса - критерий оптимальности R_N (целевая функция)

$$R_N = \sum_{i=1}^N r_i(x_{i-1}, u_i),$$

где $r_i(x_{i-1}, u_i)$ - результат, полученный на i -ой стадии (целевая функция для i -ой стадии).

Совокупность управлений называется *стратегией управления* многостадийным управлением.

Пусть оптимизирующая функция процесса, максимальное значение критерия R_N

$$f(x_0) = \max_{u_N \in U} \{r_1(x_{N-1}, u_N)\},$$

где максимум берется по всем наборам управляющих величин u_1, \dots, u_N .

$$f(x_0) = \max_{u_N \in U} \{r_1(x_0, u_1) + f_{N-1}^*(x_0, u_1)\},$$

Основное уравнение динамического программирования

$$f_N(x_{N-1}) = \max_{u_N \in U} \{r_N(x_{N-1}, u_N)\},$$

$$f_{N-1}(x_{N-2}) = \max_{u_{N-1} \in U} \{r_{N-1}(x_{N-2}, u_{N-1}) + f^*(x_{N-2}, u_{N-1})\}.$$

6 Обработка результатов активных экспериментов и оптимальное планирование экспериментов

При проведении опытных исследований различают пассивный и активный эксперимент.

Методология *пассивного экспериментирования* предполагает проведение большой серии опытных исследований с поочередным варьированием значений входных переменных x и анализом результатов измерений выходной переменной y (*лабораторный эксперимент* и *эксперимент на пилотной установке*). К пассивному эксперименту принято относить также и сбор опытных данных в режиме эксплуатации промышленной установки — так называемый *промышленный эксперимент*.

Обработка результатов пассивного эксперимента проводится методами регрессионного и корреляционного анализа, и выбор вида эмпирической модели (уравнения регрессии), т.е. решение задачи структурной идентификации, является достаточно сложной задачей. Это связано с тем, что вид уравнения регрессии необходимо определять по характеру изменения переменных на графике эмпирической линии регрессии, полученной по выборке экспериментальных данных.

Для решения этой задачи для одной входной переменной x предложены эффективные методы, в которых предусматривается преобразование системы координат как для входной x , так и для выходной переменной y . При большем числе входных переменных $x_1 \dots, x_m$ надёжных методов определения вида уравнения регрессии (вида эмпирической модели) в настоящее время не существует.

Активный эксперимент проводится по заранее составленному плану, в соответствии с которым ставится задача не только определения *оптимальных условий проведения эксперимента*, но и *оптимизации процесса* (эти две задачи принято относить к задачам оптимального планирования экспериментов). При этом уравнения регрессии (эмпирические модели) описывают данные активного эксперимента, в основном, в двух ограниченных областях изменения переменных, характеризующих процесс, и имеют следующий вид:

- *вдали от экстремального значения выходной переменной y .*

$$y = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{\substack{u,j=1 \\ u \neq j}}^k b_{uj} x_u x_j \quad (6.1)$$

- *вблизи экстремального значения выходной переменной y («в почти стационарной области»):*

$$y = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{\substack{u,j=1 \\ u \neq j}}^k b_{uj} x_u x_j + \sum_{j=1}^k b_{jj} x_j^2 \quad (6.2)$$

Приведённые уравнения являются линейными относительно коэффициентов регрессии b и имеют достаточно простой вид.

Они включают слагаемые с двойным взаимодействием входных переменных и не учитывают взаимодействия более высоких порядков (тройные, четверные и т.д.), вероятность которых существенно меньше.

Последнее уравнение включает слагаемые с квадратами входных переменных, коэффициенты которого получаются при обработке результатов активных экспериментов II-го порядка.

Уравнение (6.2) не включает слагаемые с квадратами входных переменных, и его коэффициенты получаются при обработке результатов активных экспериментов I-го порядка — например, ПФЭ — *полного факторного эксперимента*.

В теории активного экспериментирования выходную (зависимую) переменную принято называть *функцией отклика*, а входные (независимые) переменные — *факторами*. Соответственно — координатное пространство с координатами x_1, x_2, \dots, x_m называют *факторным пространством*, а геометрическое изображение функции отклика в факторном пространстве — *поверхностью отклика*.

Активный эксперимент планируется таким образом, чтобы упростить обработку его результатов методами регрессионного и корреляционного анализа.

6.1 Полный факторный эксперимент и обработка его результатов

Метод полного факторного эксперимента (ПФЭ) служит для получения математического описания процесса в виде отрезка ряда Тейлора, содержащего линейные члены и парные взаимодействия переменных величин:

$$y = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{\substack{u,j=1 \\ u \neq j}}^k b_{uj} x_u x_j \quad (6.3)$$

$$y = b_0 x_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 \quad (6.4)$$

$$y = b_0 x_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 \quad (6.5)$$

Коэффициенты уравнения (6.3), определяемые по экспериментальным данным, несут на себе погрешность эксперимента и являются выборочными оценками истинных значений коэффициентов регрессии.

6.1.1 Матрица полного факторного эксперимента и её свойства

Полным факторным экспериментом называется система опытов, содержащая все возможные неповторяющиеся комбинации уровней варьирования факторов.

Для удобства вычислений коэффициентов регрессии все факторы в ходе полного факторного эксперимента варьируются на двух уровнях.

Называют один из этих уровней *верхним*, а второй — *нижним*. *Интервалом* варьирования факторов называется некоторое число (свое для каждого фактора), прибавление которого к основному уровню дает верхний, а вычитание — нижний уровни фактора. Другими словами, интервал варьирования — это расстояние на координатной оси между основным и верхним (или нижним) уровнем. Таким образом, задача выбора уровней сводится к более простой задаче выбора интервала варьирования.

Для упрощения записи условий эксперимента и обработки экспериментальных данных пользуются кодированными переменными. Переход к кодированным переменным осуществляется по следующей формуле:

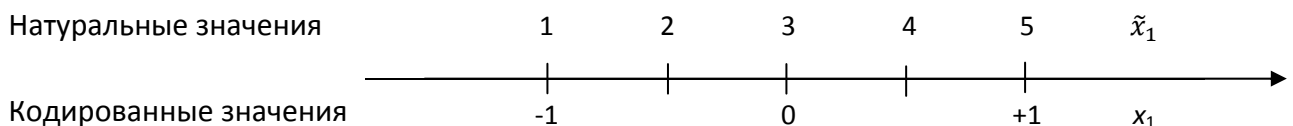
$$x_j = \frac{\tilde{x}_j - \tilde{x}_{jo}}{I_j}, \quad (6.6)$$

где x_j — кодированное значение фактора; \tilde{x}_j — натуральное значение фактора; \tilde{x}_{jo} — натуральное значение основного уровня; I_j — интервал варьирования; j — номер фактора.

Пусть процесс определяется четырьмя факторами. *Основной уровень и интервалы варьирования* выбраны следующим образом.

| | \tilde{x}_1 | \tilde{x}_2 | \tilde{x}_3 | \tilde{x}_4 |
|-----------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| Основной уровень | 3 | 30 | 1,5 | 15 |
| Интервал варьирования | 2 | 10 | 1 | 10 |

Остановимся на первом факторе. Отметим на координатной оси три уровня: нижний, основной и верхний.



Общее число опытов ПФЭ определяется по формуле

$$N = 2^k \quad (6.7)$$

где k — число факторов.

План проведения экспериментов, называется *матрицей планирования*. Она может быть составлена в физических значениях соответствующих уровней факторов (этот вариант

матрицы планирования необходим при постановке экспериментальных исследований) или в безразмерных (кодированных) значениях переменных (этот вариант матрицы используется главным образом для расчетов коэффициентов уравнения регрессии).

Выбор интервалов варьирования и базовых уровней факторов является сложной задачей, определяющей в ряде случаев результаты экспериментальных исследований. Общие рекомендации по выбору интервалов варьирования следующие: интервал должен быть достаточно велик по сравнению с ошибкой эксперимента и достаточно мал, чтобы более точно определить направление движения к оптимальной области.

На практике обычно интервал варьирования принимают в размере 15...35% от значения фактора на нулевом (базовом) уровне (в качестве базового уровня фактора часто выбирают его значение в отработанном режиме функционирования химико-технологического процесса или схемы).

Следует заметить, что если предварительно выбранный интервал варьирования оказался, соизмерим с изменением функции отклика, обусловленным погрешностью эксперимента, то последующее значение интервала варьирования следует взять примерно на порядок выше, чем соответствующая оценка погрешности эксперимента.

Матрица планирования эксперимента 2^2

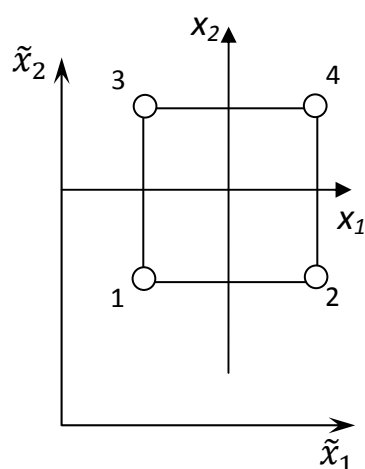


Таблица 6.1-Матрица планирования эксперимента 2^2

| Номер опыта | x_1 | x_2 | y |
|-------------|-------|-------|-------|
| 1 | -1 | -1 | y_1 |
| 2 | +1 | -1 | y_2 |
| 3 | -1 | +1 | y_3 |
| 4 | +1 | +1 | y_4 |

Матрица ПФЭ для трёх факторов приведена в таблице 6.2.

Таблица 6.2-Матрица планирования эксперимента 2^3

| Номер опыта | x_1 | x_2 | x_3 | y |
|-------------|-------|-------|-------|-------|
| 1 | -1 | -1 | -1 | y_1 |
| 2 | +1 | -1 | -1 | y_2 |
| 3 | -1 | +1 | -1 | y_3 |
| 4 | +1 | +1 | -1 | y_4 |
| 5 | -1 | -1 | +1 | y_5 |
| 6 | +1 | -1 | +1 | y_6 |
| 7 | -1 | +1 | +1 | y_7 |
| 8 | +1 | +1 | +1 | y_8 |

Матрица планирования ПФЭ обладает следующими свойствами:

$$\sum_{i=1}^N x_{ij} = 0, \quad (6.8)$$

$$\sum_{i=1}^N x_{ij}^2 = N, \quad (6.9)$$

$$\sum_{i=1}^N x_{il}x_{im} = 0, \quad l \neq m \quad (6.10)$$

где i — номер опыта; j — номер фактора.

Свойство, выраженное уравнением (6.10), называется *ортogonalностью* матрицы. Оно позволяет вычислять коэффициенты регрессии по простым формулам независимо друг от друга.

6.1.2 Расчет коэффициентов уравнения регрессии

Расчет коэффициентов регрессии для ПФЭ производится *методом наименьших квадратов*. Основное условие метода формулируется следующим образом: коэффициенты регрессии определяются на основании минимизации суммы квадратов отклонений; между экспериментальными и рассчитанными по уравнению регрессии значениями функции отклика.

Благодаря свойствам матрицы полного факторного эксперимента (6.8(6.10) получаются достаточно простые формулы для расчёта коэффициентов уравнения регрессии

$$b_j = \frac{\sum_{i=0}^N x_{ji} y_i}{N}, \quad j = 0, 1, \dots, k. \quad (6.11)$$

$$b_{lm} = \frac{\sum_{i=0}^N x_{il} x_{im} y_i}{N}, \quad l \neq m. \quad (6.12)$$

Проверка гипотезы о значимости коэффициентов уравнения регрессии производится с помощью критерия Стьюдента. Проверка адекватности уравнения регрессии экспериментальным данным проводится с помощью критерия Фишера.

Пример использования ПФЭ.

Таблица 6.3-Матрица планирования и результаты трёхфакторного эксперимента

| Номер опыта | Матрица планирования | | | | | | | Целевая функция | | | | | | | | |
|--|----------------------|-------|-------|----------|----------|----------|----------|-----------------|-------|-------|-------|-------|-------|----------|----------|----------|
| | x_0 | x_1 | x_2 | x_3 | x_1x_2 | x_1x_3 | x_2x_3 | y | y_p | | | | | | | |
| 1 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | 1 | 1 | 14,55 | 13,42 | | | | | | | |
| 2 | 1 | 1 | -1 | -1 | -1 | -1 | 1 | 45,3 | 46,43 | | | | | | | |
| 3 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | 12,4 | 13,53 | | | | | | | |
| 4 | 1 | 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 50,12 | 48,99 | | | | | | | |
| 5 | 1 | -1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 7,38 | 8,51 | | | | | | | |
| 6 | 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 27,52 | 26,39 | | | | | | | |
| 7 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 | 8,12 | 6,99 | | | | | | | |
| 8 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 26,2 | 27,33 | | | | | | | |
| 23,949 13,336 0,2613 -6,644 0,6138 -3,781 -0,406 | | | | | | | | | | | | | | | | |
| <table><tr><td>b_0</td><td>b_1</td><td>b_2</td><td>b_3</td><td>b_{12}</td><td>b_{13}</td><td>b_{23}</td></tr></table> | | | | | | | | | | b_0 | b_1 | b_2 | b_3 | b_{12} | b_{13} | b_{23} |
| b_0 | b_1 | b_2 | b_3 | b_{12} | b_{13} | b_{23} | | | | | | | | | | |

6.2 Дробный факторный эксперимент

Метод дробного факторного эксперимента (ДФЭ) предназначен для получения математического описания процесса в виде отрезка ряда Тейлора, содержащего линейные члены, а также в ряде случаев и парные взаимодействия переменных величин:

$$y = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{\substack{u,j=1 \\ u \neq j}}^k b_{uj} x_u x_j \quad (6.13)$$

Коэффициенты уравнения (6.13), определяемые по экспериментальным данным методом наименьших квадратов, являются выборочными оценками истинных значений коэффициентов регрессии.

6.2.1 Матрица дробного факторного эксперимента

Одним из недостатков полного факторного эксперимента (ПФЭ) является то, что с увеличением количества факторов, рассматриваемых исследователем, резко возрастает число опытов полного факторного эксперимента. Причем количество опытов ПФЭ значительно превосходит число определяемых коэффициентов уравнения регрессии.

Идея дробного факторного эксперимента заключается в том, чтобы сократить число опытов ПФЭ и при этом стремиться к тому, чтобы матрица планирования сохранила свойство ортогональности.

Дробным факторным экспериментом называется система опытов, представляющая собой часть ПФЭ, позволяющая рассчитать коэффициенты уравнения регрессии и сократить объем экспериментальных работ.

Для нахождения математического описания процесса используется определенная часть ПФЭ $1/2$, $1/4$, $1/8$ и так далее. Эти системы опытов называют *дробными репликами*, а сам метод, наряду с ДФЭ, также и *методом дробных реплик*. Возможные дробные реплики от ПФЭ типа 2^3 приведены в таблице 6.4.

Таблица 6.4-Полный трехфакторный эксперимент и его дробные реплики

| Номер опыта | Факторы | | | | Дробные реплики |
|-------------|---------|-------|-------|-----------------|--|
| | x_1 | x_2 | x_3 | Функция отклика | |
| 1 | -1 | -1 | -1 | y_1 | <div> <div> <div>1/4</div> <div>1/4</div> <div>1/4</div> <div>1/4</div> </div> <div>1/2</div> </div> |
| 2 | +1 | -1 | -1 | y_2 | |
| 3 | -1 | +1 | -1 | y_3 | |
| 4 | +1 | +1 | -1 | y_4 | |
| 5 | -1 | -1 | +1 | y_5 | |
| 6 | +1 | -1 | +1 | y_6 | |
| 7 | -1 | +1 | +1 | y_7 | |
| 8 | +1 | +1 | +1 | y_8 | |

Посмотрим, каким образом осуществляется в ДФЭ сокращение числа экспериментов.

Даже незначительная информация в технологическом процессе дает возможность предположить, что некоторые из взаимодействий факторов незначимы в той или иной области факторного пространства.

Если влияние некоторого взаимодействия признается пренебрежимо малым, то, естественно, что коэффициент регрессии при таком взаимодействии будет равен 0. Это дает возможность использовать соответствующий столбец расширенной матрицы планирования ПФЭ для оценки влияния дополнительного фактора.

Предположим, что надо исследовать влияние на результаты химико-технологического процесса трех факторов и получить его математическое описание в виде линейного уравнения.

Известно, что взаимодействие факторов x_1 (конечной температуры нагрева) и x_2 (скорости нагрева) незначимо. Этим обстоятельством воспользуемся для изучения влияния на параметр состояния процесса у третьего фактора x_3 (изотермической выдержки при конечной температуре).

Возьмем матрицу полного двухфакторного эксперимента (табл. 2) и приравняем произведение x_1x_2 к фактору x_3 (так как произведением x_1x_2 можно пренебречь).

Таблица 6.5-Планирование типа 2^{3-1}

| Номер опыта | x_1 | x_2 | $x_1x_2 = x_3$ | x_1x_3 | x_2x_3 | $x_1x_2x_3$ | Функция отклика |
|-------------|-------|-------|----------------|----------|----------|-------------|-----------------|
| 1 | -1 | -1 | +1 | -1 | -1 | +1 | y_1 |
| 2 | +1 | -1 | -1 | -1 | +1 | +1 | y_2 |
| 3 | -1 | +1 | -1 | +1 | -1 | +1 | y_3 |
| 4 | +1 | +1 | +1 | +1 | +1 | +1 | y_4 |

По данному плану мы можем определить коэффициенты регрессии b_0, b_1, b_2, b_3 , однако, они будут смешаны с парными и тройными взаимодействиями:

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

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

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

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

где β_i — истинные коэффициенты регрессии;

b_i — оценки коэффициентов регрессии, вычисленные по данным выборки.

Таким образом, сокращение числа опытов влечет за собой корреляцию между столбцами матрицы ДФЭ, что не позволяет разделять эффекты факторов и эффекты взаимодействий. В результате мы получаем так называемые *совместные* (смешанные) *оценки*. Этот недостаток рассматриваемого плана является своеобразной «платой» за уменьшение общего числа опытов.

6.2.2 Планирование со смешиванием. Определение совместных оценок коэффициентов регрессии

Планирование эксперимента, при котором некоторые из факторов приравниваются к произведениям нескольких факторов, называется *планированием со смешиванием*.

Общее число опытов ДФЭ вычисляется по формуле

$$N=2^{k-p},$$

где k — общее число факторов;

p — число факторов, приравненных к произведениям.

Существует правило, позволяющее определить, какие коэффициенты регрессии определяются совместно при планировании со смешиванием. Рассмотрим это правило на конкретном примере.

Методом ДФЭ будем искать математическое описание процесса в виде уравнения регрессии

$$y = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_5x_5. \quad (6.14)$$

Воспользуемся планированием типа 2^{5-2} и примем

$$\begin{aligned} x_4 &= -x_1x_2; \\ x_5 &= x_1x_2x_3. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Равенства типа (6.15) называются *генерирующими соотношениями*. Они показывают, какое из взаимодействий факторов принято *незначимым*, а поэтому заменено в матрице планирования новой независимой переменной. Надо заметить, что выбор генерирующих соотношений в общем случае произволен. Однако он существенно влияет на характер совместных оценок коэффициентов регрессии.

Правило определения совместных оценок коэффициентов регрессии состоит в следующем:

1 Принимаем во внимание, что

$$\begin{aligned} x_i^2 &= 1; \\ x_i \cdot 1 &= x_i. \end{aligned} \quad (6.16)$$

2 Умножив обе части генерирующих соотношений на x_4 и x_5 , получим

$$1 = -x_1x_2x_4; \quad (6.17)$$

$$1 = x_1x_2x_3x_5.$$

Эти равенства называются *определяющими контрастами*. Перемножив почленно 1-й и 2-й определяющий контрасты, получим

$$1 = -x_3x_4x_5; \quad (6.18)$$

3. Составим систему равенств из единицы и правых частей всех определяющих контрастов. Получим выражение для *обобщающего* определяющего контраста

$$1 = -x_1x_2x_4 = x_1x_2x_3x_5 = -x_3x_4x_5; \quad (6.19)$$

4 Умножив каждый из факторов на обобщающий определяющий контраст, получим для фактора x_1

$$x_1 = -x_2x_4 = x_2x_3x_5 = -x_1x_3x_4x_5. \quad (6.20)$$

Отсюда следует, что коэффициент регрессии b_1 будет оценкой

$$b_1 \rightarrow \beta_1 - \beta_{24} + \beta_{235} - \beta_{1345}.$$

Таким образом, значение коэффициента b_1 является оценкой ряда совместных эффектов. Аналогично получим

$$b_2 \rightarrow \beta_2 - \beta_{14} + \beta_{135} - \beta_{2345};$$

$$b_3 \rightarrow \beta_3 - \beta_{1234} + \beta_{125} - \beta_{45};$$

$$b_4 \rightarrow \beta_4 - \beta_{12} + \beta_{12345} - \beta_{35};$$

$$b_5 \rightarrow \beta_5 - \beta_{1245} + \beta_{123} - \beta_{34}.$$

Следовательно, резкое сокращение числа опытов приводит к смешанным оценкам коэффициентов уравнения регрессии, а поэтому и к снижению точности вычислений.

6.2.3 Разрешающая способность матрицы планирования

Эффективность системы смешивания факторов и взаимодействий факторов определяется *разрешающей способностью* матрицы. Она будет максимальной, если линейные эффекты смешаны с произведениями наибольшего количества факторов.

Например, при выборе полуреплики типа 2^{4-1} возможны 8 вариантов решений

$$\begin{array}{l|l} 1 & x_4 = x_1x_2; \\ 2 & x_4 = -x_1x_2; \\ 3 & x_4 = x_2x_3; \\ 4 & x_4 = -x_2x_3; \\ \hline 5 & x_4 = x_1x_3; \\ 6 & x_4 = -x_1x_3; \\ 7 & x_4 = x_1x_2x_3; \\ 8 & x_4 = -x_1x_2x_3. \end{array} \quad (6.21)$$

Наибольшая разрешающая способность у реплик 7-й и 8-й. При наличии априорной информации о значимости взаимодействий факторов можно разработать наилучшую систе-

6.3 Эксперименты на основе планов второго порядка

6.3.1 Общие сведения о планах второго порядка

Планы второго порядка используют в тех случаях, когда функция отклика существенно *нелинейна* и не может быть аппроксимирована линейным приближением в рассматриваемой области факторного пространства. Это имеет место, например, в окрестности экстремума функции отклика, где

$$\frac{dy}{dx_j} = b_j \approx 0, \quad j = 1, \dots, k \quad (6.24)$$

Здесь y — функция отклика; x_i — кодированное значение 1-го фактора; b_j — коэффициент регрессии; k — число факторов. Часть поверхности отклика, для которой справедливо уравнение (6.24), принято называть «почти стационарной» областью. Обычно исследователь обнаруживает «почти стационарную» область в результате оптимизации по методу крутого восхождения или симплекс-планирования. Для адекватного математического описания этой области часто используют полином *второго* порядка

$$y = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{\substack{u,j=1 \\ u \neq j}}^k b_{uj} x_u x_j + \sum_{j=1}^k b_{jj} x_j^2. \quad (6.25)$$

Чтобы найти коэффициенты этого полинома, необходим эксперимент, в котором каждый фактор варьировался бы не менее чем на трех уровнях.

Структура плана *второго* порядка, предназначенного для нахождения коэффициентов квадратичной модели (6.1), для экспериментаторов имеет существенное значение. Дело в том, что исследователь обращается к планам второго порядка обычно после того как ему не удалось получить адекватной модели в результате реализации полного или дробного факторного эксперимента, т. е. плана *первого* порядка. При этом естественно возникает желание сохранить и в дальнейшем использовать результаты эксперимента, выполненного по плану *первого* порядка.

Исходя из этих соображений были разработаны так называемые *композиционные* планы второго порядка. Структура данных планов представляет собой композицию из плана первого порядка и некоторого количества добавочных опытов. При этом один или несколько опытов проводятся в центре плана. Благодаря своей структуре такие планы экспериментов называются *центральными композиционными* (ЦКП).

На рисунке 6.1 показано расположение опытов центральных композиционных планов для двух факторов. Светлая точка обозначает центр плана, зачерненные точки — *ядро* плана. Ядром плана служит полный или дробный факторный эксперимент. На координатных осях на расстоянии α от центра плана обозначены символом ★ опыты в так называемых «звездных» точках. Расстояние α называется «звездным плечом». Около каждого опыта указаны в скобках значения *кодированных* переменных.

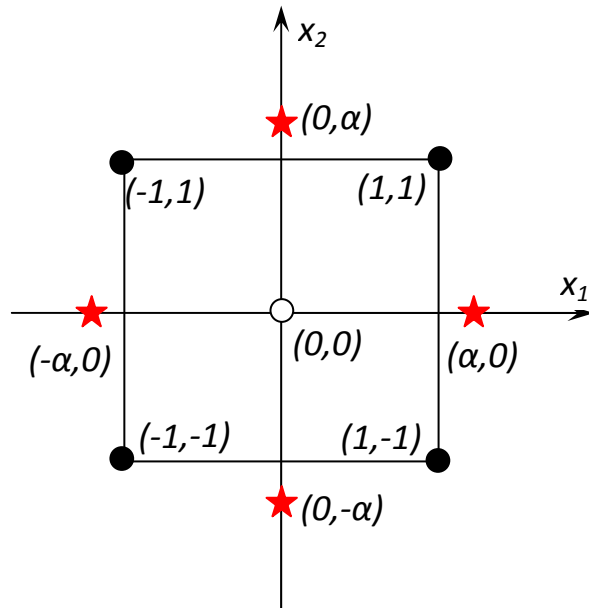


Рисунок 6.1 - Система опытов двухфакторного композиционного плана второго порядка

Соответствующие матрицы планирования приведены в таблицах 6.7 и 6.8.

Таблица 6.7 - Матрица двухфакторного композиционного плана второго порядка

| Номер опыта | Фрагмент плана | x_1 | x_2 | y |
|-------------|---------------------------|------------|------------|-------|
| 1 | Ядро плана | + 1 | +1 | y_1 |
| 2 | | -1 | +1 | y_2 |
| 3 | | + 1 | -1 | y_3 |
| 4 | | -1 | -1 | y_4 |
| 5 | Опыты в «звездных» точках | + α | 0 | y_5 |
| 6 | | - α | 0 | y_6 |
| 7 | | 0 | + α | y_7 |
| 8 | | 0 | - α | y_8 |
| 9 | Опыт в центре плана | 0 | 0 | y_9 |

Таблица 6.8 - Матрица трехфакторного композиционного плана второго порядка

| Номер опыта | Фрагмент плана | x_1 | x_2 | x_3 | y |
|-------------|---------------------------|-----------|-----------|-----------|----------|
| 1 | Ядре плана | +1 | +1 | +1 | y_1 |
| 2 | | -1 | +1 | +1 | y_2 |
| 3 | | +1 | -1 | +1 | y_3 |
| 4 | | -1 | -1 | +1 | y_4 |
| 5 | | +1 | +1 | -1 | y_5 |
| 6 | | -1 | +1 | -1 | y_6 |
| 7 | | +1 | -1 | -1 | y_7 |
| 8 | | -1 | -1 | -1 | y_8 |
| 9 | Опыты в «звездных» точках | $+\alpha$ | 0 | 0 | y_9 |
| 10 | | $-\alpha$ | 0 | 0 | y_{10} |
| 11 | | 0 | $+\alpha$ | 0 | y_{11} |
| 12 | | 0 | $-\alpha$ | 0 | y_{12} |
| 13 | | 0 | 0 | $+\alpha$ | y_{13} |
| 14 | | 0 | 0 | $-\alpha$ | y_{14} |
| 15 | Опыт в центре плана | 0 | 0 | 0 | y_{15} |

Если число факторов больше четырех, то в качестве ядра плана целесообразно использовать *дробный* факторный эксперимент. Общее число опытов ЦКП рассчитывается по формуле

$$N_{цкп} = N_{я} + N_{зв} + N_o$$

где $N_{я}$ — число опытов в ядре плана;

$N_{зв}$ — число опытов в «звездных» точках;

N_o — число центральных опытов.

Очевидно, $N_{зв} = 2n$, т. е. вдвое превышает количество факторов.

Из структуры ЦКП следует, что каждый фактор варьируется на *пяти* уровнях:

$$-\alpha, -1, 0, +1, +\alpha.$$

Таким образом, если с помощью полного или дробного факторного эксперимента невозможно получить адекватного математического описания поверхности отклика, следует перейти к центральному композиционному плану второго порядка, добавив опыты в «звездных» точках и в центре плана.

Известны два вида центрального композиционного планирования — *ортогональное* и *ротатабельное*. Сокращенно их называют ОЦКП и РЦКП. Существуют и *некомпозицион-*

ные планы второго порядка. Некоторые из них содержат меньшее число опытов по сравнению с композиционными при одинаковом числе факторов.

Разработано значительное количество планов второго порядка, удовлетворяющих различным специальным требованиям.

6.3.2 Ортогональное центральное композиционное планирование

Название этого вида планирования обусловлено свойством *ортогональности* его матрицы. Это свойство записывается следующим образом:

$$\sum_{i=1}^N x_{li} x_{mi} = 0, \quad l \neq m; l, m = 1, 2, \dots, k \quad (6.26)$$

т. е. сумма парных произведений элементов двух любых столбцов матрицы планирования равна нулю. На основании указанного свойства оценки коэффициентов регрессии рассчитываются *независимо* друг от друга и имеется возможность исключить из рассмотрения те факторы, при которых коэффициенты оказываются незначимыми.

Следует, однако, отметить, что свойство ортогональности не выполняется для столбцов, содержащих квадраты значений факторов, т. е.

$$\sum_{i=1}^N x_{li}^2 x_{mi}^2 \neq 0, \quad l \neq m; l, m = 1, 2, \dots, k. \quad (6.27)$$

Например, для ОЦКП с двумя факторами (см. таблицу 6.7) имеем

$$\sum_{i=1}^9 x_{1i}^2 x_{2i}^2 = 4. \quad (6.28)$$

Для обеспечения ортогональности *всех* столбцов матрицы планирования вместо квадратов значений факторов вводят новые переменные величины

$$x_{ki}^* = x_{ki}^2 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ki}^2, \quad j = 1, \dots, k; i = 1, \dots, N. \quad (6.29)$$

Из условия ортогональности

$$\sum_{i=1}^N x_{li}^* x_{mi}^* \neq 0 \quad (6.30)$$

получено уравнение для звездного плеча α :

$$4\alpha^4 + 4\alpha^2 N_{\alpha} - N_B(N_{3B} + N_0) = 0. \quad (6.31)$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$\alpha = \sqrt{\frac{\sqrt{N_{\text{я}}^2 + N_{\text{я}}(N_{\text{зв}} + N_0)} + N_{\text{я}}}{2}}. \quad (6.32)$$

В ОЦКП второго порядка не накладывается никаких ограничений на число опытов в центре плана N_0 . Обычно принимают $N_0=1$.

В таблице 6.9 приведены основные характеристики ОЦКП.

Таблица 6.9- Основные характеристики ортогонального центрального композиционного планирования

| n | N_a | $N_{\text{зв}}$ | N_0 | N | α |
|-----|-----------|-----------------|-------|-----|----------|
| 2 | 2^2 | 4 | 1 | 9 | 1,000 |
| 3 | 2^3 | 6 | 1 | 15 | 1,215 |
| 4 | 2^4 | 8 | 1 | 25 | 1,414 |
| 5 | 2^{5-1} | 10 | 1 | 27 | 1,547 |

В таблице 6.10 представлена матрица ортогонального центрального композиционного планирования для двух факторов. При ее построении использованы вспомогательные переменные:

$$x_1^* = x_1^2 - \frac{1}{9} \sum_{i=1}^9 x_{1i}^2 = x_1^2 - \frac{2}{3}; \quad (6.33)$$

$$x_2^* = x_2^2 - \frac{1}{9} \sum_{i=1}^9 x_{2i}^2 = x_2^2 - \frac{2}{3}. \quad (6.34)$$

Таблица 6.10-Матрица ОЦКП для двух факторов

| Номер опыта | Фрагмент плана | x_1 | x_2 | $x_1 x_2$ | $x_1^* = x_1^2 - \frac{2}{3}$ | $x_2^* = x_2^2 - \frac{2}{3}$ | y |
|-------------|-----------------------|-------|-------|-----------|-------------------------------|-------------------------------|-------|
| 1 | Ядро | +1 | +1 | +1 | +0,33 | +0,33 | y_1 |
| 2 | | -1 | +1 | -1 | +0,33 | +0,33 | y_2 |
| 3 | | +1 | -1 | -1 | +0,33 | +0,33 | y_3 |
| 4 | | -1 | -1 | +1 | +0,33 | +0,33 | y_4 |
| 5 | « Звездные » точки | +1 | 0 | 0 | +0,33 | -0,67 | y_5 |
| 6 | | -1 | 0 | 0 | +0,33 | -0,67 | y_6 |
| 7 | | 0 | +1 | 0 | -0,67 | +0,33 | y_7 |
| 8 | | 0 | -1 | 0 | -0,67 | +0,33 | y_8 |
| 9 | Центр | 0 | 0 | 0 | -0,67 | -0,67 | y_9 |

С помощью ортогонального центрального композиционного планирования ищут коэффициенты уравнения регрессии следующего вида:

$$y = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{\substack{u,j=1 \\ u \neq j}}^k b_{uj} x_u x_j + \sum_{j=1}^k b_{jj} \left(x_j^2 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ij}^2 \right). \quad (6.35)$$

В силу ортогональности матрицы ОЦКП все коэффициенты регрессии определяются независимо друг от друга:

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^N x_{ji} y_i}{\sum_{i=1}^N x_{ji}^2}, \quad j = 0, 1, \dots, k; \quad (6.36)$$

$$b_{lm} = \frac{\sum_{i=1}^N x_{li} x_{mi} y_i}{\sum_{i=1}^N (x_{li} x_{mi})^2}, \quad l \neq m. \quad (6.37)$$

$$b_{jj} = \frac{\sum_{i=1}^N x_{ji}^* \bar{y}_i}{\sum_{i=1}^N (x_{ji}^*)^2}. \quad (6.38)$$

Пример использования ОЦКП

Таблица 6.11-Матрица планирования трёхфакторного ОЦКП и результаты эксперимента

| Фрагмент плана | Номер опыта | Матрица планирования | | | | | | | | | | Целевая функция | |
|---|-------------|----------------------|--------|--------|--------|---------|---------|---------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|----------------|
| | | x_0 | x_1 | x_2 | x_3 | x_1^* | x_2^* | x_3^* | $x_1 \cdot x_2$ | $x_1 \cdot x_3$ | $x_2 \cdot x_3$ | $y_{\text{э}}$ | $y_{\text{р}}$ |
| Ядро плана | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0,27 | 0,27 | 0,27 | 1 | 1 | 1 | 82 | 79,0 |
| | 2 | 1 | -1 | 1 | 1 | 0,27 | 0,27 | 0,27 | -1 | -1 | 1 | 82 | 85,2 |
| | 3 | 1 | 1 | -1 | 1 | 0,27 | 0,27 | 0,27 | -1 | 1 | -1 | 42 | 43,0 |
| | 4 | 1 | -1 | -1 | 1 | 0,27 | 0,27 | 0,27 | 1 | -1 | -1 | 70 | 64,2 |
| | 5 | 1 | 1 | 1 | -1 | 0,27 | 0,27 | 0,27 | 1 | -1 | -1 | 60 | 67,2 |
| | 6 | 1 | -1 | 1 | -1 | 0,27 | 0,27 | 0,27 | -1 | 1 | -1 | 80 | 80,4 |
| | 7 | 1 | 1 | -1 | -1 | 0,27 | 0,27 | 0,27 | -1 | -1 | 1 | 48 | 46,1 |
| | 8 | 1 | -1 | -1 | -1 | 0,27 | 0,27 | 0,27 | 1 | 1 | 1 | 70 | 74,3 |
| Опыты в звёзд точках | 9 | 1 | -1,215 | 0 | 0 | 0,746 | -0,73 | -0,73 | 0 | 0 | 0 | 80 | 78,6 |
| | 10 | 1 | 1,215 | 0 | 0 | 0,746 | -0,73 | -0,73 | 0 | 0 | 0 | 60 | 57,7 |
| | 11 | 1 | 0 | -1,215 | 0 | -0,73 | 0,746 | -0,73 | 0 | 0 | 0 | 54 | 56,3 |
| | 12 | 1 | 0 | 1,215 | 0 | -0,73 | 0,746 | -0,73 | 0 | 0 | 0 | 88 | 81,9 |
| | 13 | 1 | 0 | 0 | -1,215 | -0,73 | -0,73 | 0,746 | 0 | 0 | 0 | 85 | 77,1 |
| | 14 | 1 | 0 | 0 | 1,215 | -0,73 | -0,73 | 0,746 | 0 | 0 | 0 | 74 | 78,1 |
| Центр | 15 | 1 | 0 | 0 | 0 | -0,73 | -0,73 | -0,73 | 0 | 0 | 0 | 70 | 75,7 |
| 69,67 - 8,61 10,53 0,42 - 5,12 - 4,45 1,31 3,75 1,75 3,75 | | | | | | | | | | | | | |
| | | b_0 | b_1 | b_2 | b_3 | b_4 | b_5 | b_6 | b_7 | b_8 | b_9 | | |