Теоретические подходы к моделированию технологических процессов.

Технологические процессы представляют собой комплекс взаимосвязанных и протекающих в сложной взаимозависимости явлений, описание которых затрудняется необходимостью установления закономерностей протекания элементарных процессов и их взаимодействия и взаимовлияния друг на друга.

Эти процессы относят к классу стохастических, в котором изменение определяющих величин происходит беспорядочно и часто дискретно. При этом значение выходной величины не находится в однозначном соответствии с входной. Для описания стохастических процессов используют статистико-вероятностные методы.

Одним из методов, хорошо зарекомендовавшим себя в решении такого рода задач, является метод полного факторного эксперимента, в основе которого лежит способ построения зависимости влияния определяющих факторов на параметр оптимизации в виде отрезка степенного ряда Тейлора.

Метод полного факторного эксперимента включает в себя последовательные этапы математического моделирования:

1. Выбор параметра (или параметров) оптимизации и влияющих факторов.
2. Выбор основного уровня и интервала варьирования по каждому фактору.
3. Проверка воспроизводимости результатов эксперимента.
4. Собственно построение математической модели с вычислением коэффициентов уравнения регрессии.
5. Проверка адекватности уравнения регрессии.
6. Инженерная интерпретация уравнения регрессии.

Выбор параметра (или параметров) оптимизации, влияющих факторов, а также выбор основного уровня и интервала варьирования по каждому фактору подробно рассматриваются в лекционном курсе.

На лабораторных занятиях студенты приобретают навыки решения задач проверки воспроизводимости результатов эксперимента, построения математической модели и проверки её адекватности на ЭВМ.

Пример:

Изучить влияние на параметр оптимизации Y, в качестве которого Выбрана ***Теплота сгорания***, от следующих факторов:

1. ***Зольность*** (X1);
2. ***Содержание серы*** (X2);
3. ***Влажность*** (X3).

Для факторов 1-3 были выбраны основные уровни, интервалы варьирования

Значения уровней факторов и интервалов варьирования

Показатель	фактор X_1		фактор X_2		фактор X_3	
	натуральное значение, %	кодированное значение	натуральное значение, %	кодированное значение	натуральное значение,	кодированное значение
Основной уровень	1,0	0	0,3	0	40	0
Интервал варьирования	0,5		0,2		20	
Нижний уровень	0,5	-1	0,1	-1	20	-1
Верхний уровень	1,5	+1	0,5	+1	60	+1

Эксперимент для проверки воспроизводимости опытов

Серия	№ опыта	фактор X_1	факторX_2	фактор X_3	Значения Y_1,
1	1	+1	+1	+1	7,1
	2	+1	+1	+1	10,1
	3	+1	+1	+1	8,1
2	1	-1	-1	-1	5,3
	2	-1	-1	-1	4,1
	3	-1	-1	-1	5,1
3	1	0	0	0	4,4
	2	0	0	0	4,2
	3	0	0	0	4,6

Матрица планирования полного факторного эксперимента

№ опыта	X_1	X_2	X_3	$Y_{1эксп}$, см
1	+1	+1	+1	8,5
2	+1	+1	-1	9,7
3	+1	-1	+1	6,3
4	+1	-1	-1	12,0
5	-1	+1	+1	3,5
6	-1	+1	-1	4,7
7	-1	-1	+1	3,6
8	-1	-1	-1	5,2

Выполнение задания:

Обработка результатов ведется по следующему алгоритму:

1. Для каждой серии параллельных опытов вычисляют среднее арифметическое значение функции отклика по формуле

$$\overline{Y}_j = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} Y_{j,i}$$

где j- номер серии параллельных опытов;

k-число параллельных опытов, проведенных при одинаковых условиях;

$Y_{j,i}$ - текущее значение параметра оптимизации i-го опыта j-й серии.

2. Для каждой серии параллельных опытов вычисляется оценка дисперсии s^2_j по формуле:

$$s_j^2 = \frac{1}{k-1}\sum_{i=1}^{k}(Y_{j,i} - \overline{Y}_j)^2$$

3. Расчетное значение Gp находят из отношения максимальной оценки дисперсии к сумме всех дисперсий

$$G_p = \frac{\max s_j^2}{\sum_{j=1}^{N} s_j^2}$$

и сравнивают с табличным значением критерия Кохрена, выбираемым из справочника при известных значениях общего количества дисперсий N , и числом степеней свободы f , связанным с каждой из них как f = k -1.

Если выполняется условие Gрасч ≤ Gтабл, то опыты считаются воспроизводимыми, а оценки дисперсий - однородными.

Оценки однородных дисперсий можно усреднить и найти величину, называемую оценкой дисперсии воспроизводимости

$$s_Y^2 = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} s_j^2,$$

с которой связано число степеней свободы **f = N (k -1)** .

Оценку дисперсии среднего значения рассчитывают по формуле

$$s_{\overline{Y}}^2 = \frac{s_Y^2}{k}.$$

С ней также связано число степеней свободы **f = N (k -1) .**

Результаты вычислений и выводы о воспроизводимости результатов эксперимента по параметру оптимизации Y представлены в табл.

Результаты проверки воспроизводимости эксперимента по параметру оптимизации Y

Серия	№ опыта	фактор X_1	фактор X_2	фактор X_3	Значения Y_1,	$\bar{Y}$, см	s_j^2
1	1	+1	+1	+1	7,1	8,43	2,333
	2	+1	+1	+1	10,1		
	3	+1	+1	+1	8,1		
2	1	-1	-1	-1	5,3	4,83	0,413
	2	-1	-1	-1	4,1		
	3	-1	-1	-1	5,1		
3	1	0	0	0	4,4	4,40	0,04
	2	0	0	0	4,2		
	3	0	0	0	4,6		

Расчетное значение критерия Кохрена

$$Gp = \frac{2,333}{2,333 + 0,413 + 0,04} = 0,837 .$$

Табличное значение критерия Кохрена $G_{табл}$ = 0,871
0,837<0,871 - опыты воспроизводимы.

Расчет коэффициентов уравнения регрессии ведется по формулам по исходным данным, представленным в табл.

$$b_0 = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} Y_j;$$

$$b_j = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} Y_j X_{ji};$$

$$b_{lm} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} Y_j X_{jm} X_{jl} \qquad \mathrm{l} \neq \mathrm{m}.$$

Оценка значимости коэффициентов уравнения регрессии проводится по условию

$$|b| \geq s_b t,$$

где b - коэффициент уравнения регрессии;

t - критерий Стьюдента;

s_b - оценка коэффициента уравнения регрессии, определяемая по формуле

$$s_b = \sqrt{\frac{s_Y^2}{N}}.$$

Адекватность уравнения регрессии проверяется с помощью критерия Фишера:

$$F_p = \frac{\max(s_{ад}^2, s_Y^2)}{\min(s_{ад}^2, s_Y^2)}$$

где $s^2_{ад}$ - оценка дисперсии адекватности. В числителе дроби находится большая, а в знаменателе - меньшая из указанных оценок исперсий.

Оценку дисперсии адекватности вычисляют по формуле

$$s_{ад}^2 = \frac{1}{N-B}\sum\left(Y_j^э - Y_j^p\right)^2$$

где B - число коэффициентов регрессии искомого уравнения, включая свободный член;

$Y_j^э Y_j^p$ - экспериментальное и расчетное значение функции отклика в j-том опыте;

N - число опытов полного факторного эксперимента.

С дисперсией адекватности связано число степеней свободы

f = N - B .

Расчетное значение критерия Фишера выбирается из таблицы.
Уравнение регрессии считается адекватным, если выполняется условие

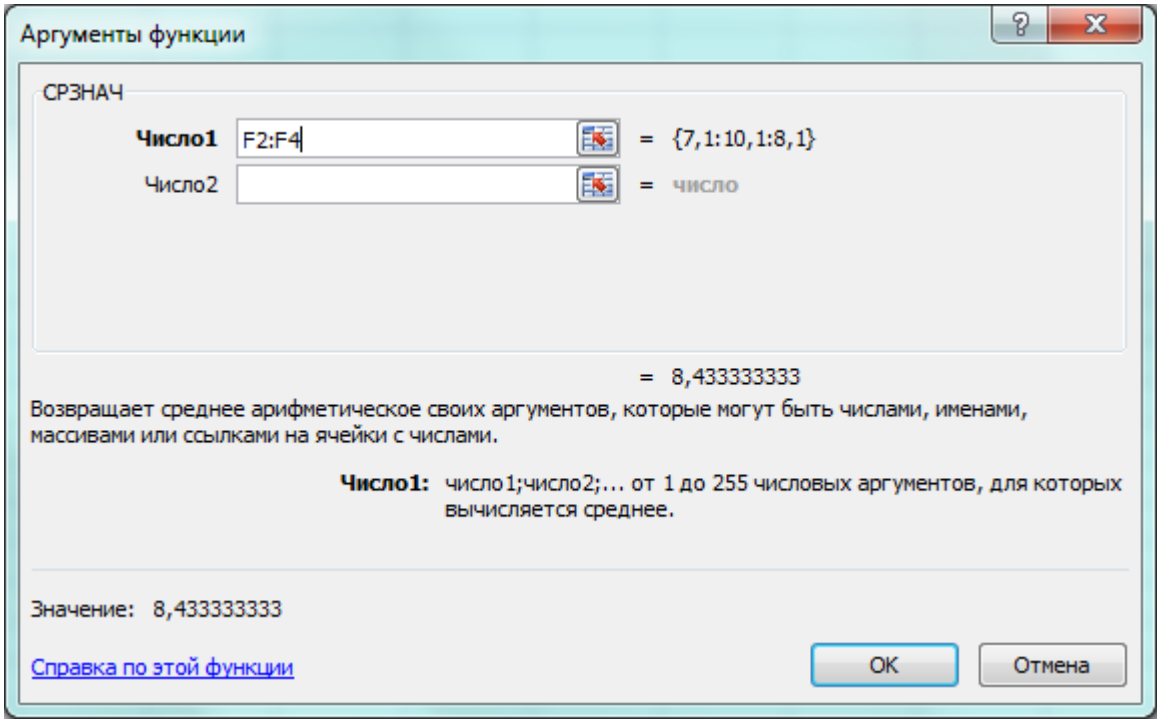
$$F_p \leq F$$

Расчеты по приведенному выше алгоритму проводят в Microsoft Excel путем программирования ячеек электронной таблицы.

Пример расчета: Переносим данные таблицы 2 на лист созданной книги Microsoft Excel

Расчет Y_{cp} и s^2_j производим путем программирования соответствующих ячеек книги Microsoft Excel. Ввод формулы в ячейку всегда начинается со знака равенства.

Для расчета Y_{cp} активизируем (выделяем мышью) ячейку G3 книги. После этого при помощи клавиатуры вводим знак равенства, а затем, используя мастер функций нажатием правой кнопкой мыши на значок f x , выбираем в категории «Статистические» функцию «среднее значение» - СРЗНАЧ (рис.) и нажимаем «ОК».



Для указания диапазона вычислений среднего значения указываем в поле окна «число 1» (рис.) массив данных, находящихся в ячейках F2, F3 и F4, выделив правой кнопкой мыши ячейку F2 и, удерживая нажатой клавишу «Shift», ячейку F4. Заканчивается ввод формулы нажатием «Enter».

Для расчета оценки дисперсии для каждой серии параллельных опытов s^2_j активизируем ячейку H3 и вводим в неё формулу следующим образом: =(1/2)*((F2-G3)^2+(F3-G3)^2+(F4-G3)^2). Заканчивается ввод формулы нажатием «Enter».

Аналогичным образом для вычисления средних значений по следующим сериям параллельных опытов программируем ячейки G6 и G9. Для вычисления соответствующих оценок дисперсий второй и третьей серий проведенных параллельных опытов ячейки H6 и H9. Результат расчетов представлен на рис.

$\bar{Y}$

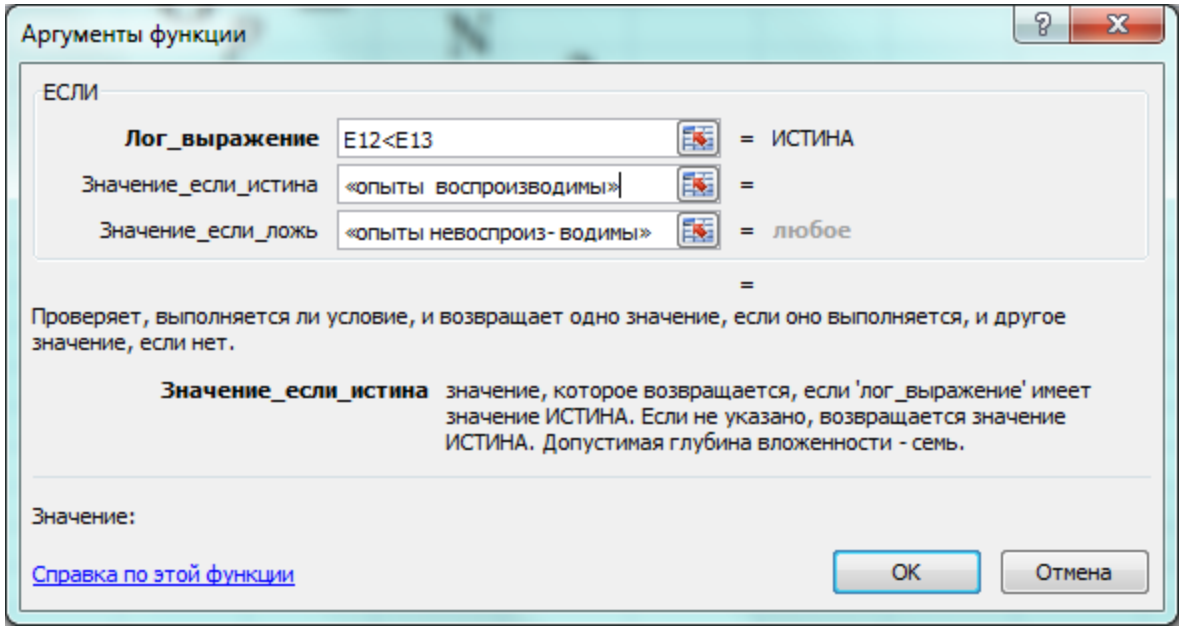
$$s_j^2 = \frac{1}{k-1}\sum_{i=1}^{k}(Y_{j,i} - \bar{Y}_j)^2$$

Серия	№ опыта	X1	X2	X3	Yэкс	$\bar{Y}$	s_j^2
1	1	I	I	I	7,10		
	2	1	1	1	10,10		
	3	1	1	1	8,10	8,43	109,015
2	1	-1	-1	-1	5,30		
	2	-1	-1	-1	4,10		
	3	-1	-1	-1	5,10	4,83	35,455
3	1	0	0	0	4,40		
	2	0	0	0	4,20		
	3	0	0	0	4,60	4,40	29,08

Вводим в ячейку А12 текст «Расчетное значение критерия Кохрена», а в ячейку А13 - текст «Табличное значение критерия Кохрена».

В ячейку Е12 вводим формулу (3) как = МАКС(G3:G9)/СУММ(G3:G9), а в ячейку Е13 – табличное значение критерия Кохрена из Приложения

Для сравнения расчетного и табличного значений критерия Кохрена используем логическую функцию «ЕСЛИ», программируя поле «Лог_выражение» как F12<F13, поле «Значение_если_истина» как «опыты воспроизводимы», а поле «Значение_если_ложь» как «опыты невоспроиз-водимы»



Скрия	№ опыта	X1	X2	X3	Yэкс	$\overline{Y}$	s_j^2	
1	1	I	I	I	7,10			1,777778
	2	1	1	1	10,10			2,777778
	3	1	1	1	8,10	8,43	2,33333	0,111111
2	1	-1	-1	-1	5,30			0,217778
	2	-1	-1	-1	4,10			0,537778
	3	-1	-1	-1	5,10	4,83	0,41333	0,071111
3	1	0	0	0	4,40			0
	2	0	0	0	4,20			0,04
	3	0	0	0	4,60	4,40	0,04	0,04

«Расчетное значение критерия Кохрена», 0,837320574

«Табличное значение критерия Кохрена» 0,871

опыты воспроизводимы

=ЕСЛИ(E12<E13;"опыты воспроизводимы";"опыты невоспроизводимы")

Скрия	№ опыта	X1	X2	X3	Yэкс			
1	1	I	I	I	7,10			1,777778
	2	1	1	1	10,10	$\bar{Y}$	s_j^2	2,777778
	3	1	1	1	8,10	8,43	2,33333	0,111111
2	1	-1	-1	-1	5,30			0,217778
	2	-1	-1	-1	4,10			0,537778
	3	-1	-1	-1	5,10	4,83	0,41333	0,071111
3	1	0	0	0	4,40			0
	2	0	0	0	4,20			0,04
	3	0	0	0	4,60	4,40	0,04	0,04

«Расчетное значение критерия Кохрена», 0,837320574

«Табличное значение критерия Кохрена» 0,871

опыты воспроизводимы

Оценка дпсперспн воспроизводимости 0,928888889

Связанное с ней число степенен свободы f 6

Оценка дисперспн среднего значення 0,31

Связанное с ней число степенен свободы f 6

Расчет коэффициентов уравнения регрессии проводится по формулам

$$b_0 = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} Y_j;$$

$$b_j = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} Y_j X_{ji};$$

$$b_{lm} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} Y_j X_{jm} X_{jl} \qquad \mathrm{l} \neq \mathrm{m}.$$

Переносим данные таблицы 3 на лист 2 созданной книги Microsoft Excel и создаем дополнительно таблицу для расчетов коэффициентов уравнения регрессии (рис. .

Лекция13 - Microsoft Excel

Главная | Вставка | Разметка страницы | Формулы | Данные | Рецензирование | Вид

Object 3 | =ВНЕДРИТЬ("Equation.3";"")

№	Xi	X_2	X_3	Yэкс	Yx1	Yx2	Yx3	x1x2	x1*x3	x2x3			
1	1	1	1	8,5	8,5	8,5	8,5	1	1	1	8,5	8,5	8,5
2	1	1	-1	9,7	9,7	9,7	-9,7	1	-1	-1	9,7	-9,7	-9,7
3	1	-1	1	6,3	6,3	-6,3	6,3	-1	1	-1	-6,3	6,3	-6,3
4	1	-1	-1	12	12	-12	-12	-1	-1	1	-12	-12	12
a	-1	1	1	3,5	-3,5	3,5	3,5	-1	-1	1	-3,5	-3,5	3,5
6	-1	1	-1	4,7	-4,7	4,7	-4,7	-1	1	-1	-4,7	4,7	-4,7
7	-1	-1	1	3,6	-3,6	-3,6	3,6	1	-1	-1	3,6	-3,6	-3,6
8	-1	-1	-1	5,2	-5,2	-5,2	-5,2	1	1	1	5,2	5,2	5,2
				53,5	19,5	-0,7	-9,7				0,5	-4,1	4,9

b0	6,6875
b1	2,4375
b2	-0,0875
b3	-1,2125
b12	0,0625
b13	-0,5125
b23	0,6125

$$b_0 = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} Y_j;$$

$$b_j = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} Y_j X_{ji};$$

$$b_{lm} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} Y_j X_{jm} X_{jl} \qquad 1 \neq m.$$

Как показывает практика создания математической модели с использованием метода полного факторного эксперимента, для точности предсказания результатов и адекватности полученного уравнения регрессии, можно не исключать из него элементы с незначимыми коэффициентами уравнения регрессии.

Поэтому проверку значимости коэффициентов уравнении регрессии не проводят.

Полученное уравнение регрессии имеет вид:

$$Y_1 = 6{,}6875 + 2{,}4375X_1 - 0{,}0875X_2 - 1{,}212X_3 + 0{,}0625X_1X_2 + 0{,}6125X_2X_3 - 0{,}5125^* X_1X_3$$

Проверка адекватности полученного уравнения проводятся стандартным методом при помощи сравнения табличного и расчетного значений критерия Фишера.

Решение этой задачи требует вычисления значений $Y1_{эксп}$. Для этого в уравнение регрессии построчно подставляются значения X1-X3 из табл. , соответствующие условиям проведения каждого из опытов полного факторного эксперимента и методом программирования ячеек проводятся соответствующие вычисления

Лекция13 - Microsoft Excel

O2 =$B$11+$B$12*B2+$B$13*C2+$B$14*D2+$B$15*I2+$B$16*J2+$B$17*K2

№	Xi	X_2	X_3	Yэкс	Yx1	Yx2	Yx3	x1x2	x1*x3	x2x3				$Y1_{эксп}$
1	1	1	1	8,5	8,5	8,5	8,5	1	1	1	8,5	8,5	8,5	7,9875
2	1	1	-1	9,7	9,7	9,7	-9,7	1	-1	-1	9,7	-9,7	-9,7	10,2125
3	1	-1	1	6,3	6,3	-6,3	6,3	-1	1	-1	-6,3	6,3	-6,3	6,8125
4	1	-1	-1	12	12	-12	-12	-1	-1	1	-12	-12	12	11,4875
a	-1	1	1	3,5	-3,5	3,5	3,5	-1	-1	1	-3,5	-3,5	3,5	4,0125
6	-1	1	-1	4,7	-4,7	4,7	-4,7	-1	1	-1	-4,7	4,7	-4,7	4,1875
7	-1	-1	1	3,6	-3,6	-3,6	3,6	1	-1	-1	3,6	-3,6	-3,6	3,0875
8	-1	-1	-1	5,2	-5,2	-5,2	-5,2	1	1	1	5,2	5,2	5,2	5,7125
				53,5	19,5	-0,7	-9,7				0,5	-4,1	4,9	
b0	6,6875													
b1	2,4375													
b2	-0,0875													
b3	-1,2125													
b12	0,0625													
b13	-0,5125													
b23	0,6125													

$$Y_1 = 6{,}6875 + 2{,}4375X_1 - 0{,}0875X_2 - 1{,}212X_3 + 0{,}0625X_1X_2 + 0{,}6125X_2X_3 - 0{,}5125 * X_1X_3$$

Лист1 | Лист1 (2) | Коэффициенты | Фишнр | критерий Кохрена

Готово | Среднее: 6,6875 | Количество: 8 | Сумма: 53,5 | 100%

$$s_{ад}^2 = \frac{1}{N-B}\sum\left(Y_j^э - Y_j^р\right)^2$$

Затем по формуле рассчитывается значение дисперсии адекватности, а по формуле **f = N – B** – связанное с ней число степеней свободы.

Алгоритм расчета критерия Фишера заключается в сравнении дисперсии воспроизводимости с дисперсией адекватности и делении большего числа на меньшее.

Программирование ячейки I19 заключается во вводе в нее формулы =МАКС(F19;F22)/МИН(F19;F22). Табличное значение критерия Фишера выбирается по Приложению и вводится в ячейку I20.

Аргументы функции

МАКС

Число1	E19	=	2,10125
Число2	E23	=	0,928888889
Число3		=	число

= 2,10125

Возвращает наибольшее значение из списка аргументов. Логические и текстовые значения игнорируются.

Число2: число1;число2;... от 1 до 255 чисел, пустых ячеек, логических или текстовых значений, среди которых ищется наибольшее значение.

Значение: 2,10125

Справка по этой функции

OK Отмена

Аргументы функции

МИН

Число1	E19	=	2,10125
Число2	E23	=	0,928888889
Число3		=	число

= 0,928888889

Возвращает наименьшее значение из списка аргументов. Логические и текстовые значения игнорируются.

Число2: число1;число2;... от 1 до 255 чисел, пустых ячеек, логических или текстовых значений, среди которых ищется наименьшее значение.

Значение: 2,262111244

Справка по этой функции

OK Отмена

Лекция13 - Microsoft Excel

№	Xi	X_2	X_3	Yэкс	Yx1	Yx2	Yx3	x1x2	x1*x3	x2x3				$Y1_{эксп}$	
1	1	1	1	8,5	8,5	8,5	8,5	1	1	1	8,5	8,5	8,5	7,9875	0,262656
2	1	1	-1	9,7	9,7	9,7	-9,7	1	-1	-1	9,7	-9,7	-9,7	10,2125	0,262656
3	1	-1	1	6,3	6,3	-6,3	6,3	-1	1	-1	-6,3	6,3	-6,3	6,8125	0,262656
4	1	-1	-1	12	12	-12	-12	-1	-1	1	-12	-12	12	11,4875	0,262656
a	-1	1	1	3,5	-3,5	3,5	3,5	-1	-1	1	-3,5	-3,5	3,5	4,0125	0,262656
6	-1	1	-1	4,7	-4,7	4,7	-4,7	-1	1	-1	-4,7	4,7	-4,7	4,1875	0,262656
7	-1	-1	1	3,6	-3,6	-3,6	3,6	1	-1	-1	3,6	-3,6	-3,6	3,0875	0,262656
8	-1	-1	-1	5,2	-5,2	-5,2	-5,2	1	1	1	5,2	5,2	5,2	5,7125	0,262656
				53,5	19,5	-0,7	-9,7				0,5	-4,1	4,9		2,10125

b0	6,6875
b1	2,4375
b2	-0,0875
b3	-1,2125
b12	0,0625
b13	-0,5125
b23	0,6125

$$Y_1 = 6{,}6875 + 2{,}4375X_1 - 0{,}0875X_2 - 1{,}212X_3 + 0{,}0625X_1X_2 + 0{,}6125X_2X_3 - 0{,}5125 * X_1X_3$$

дисперсии адекватности — 2,10125

связанное с ней число степеней свобод — 1

Оценка дпсперспн воспроизводимости — 0,92888889

Связанное с ней число степенен свободы f — 6

$$s^2_{ад} = \frac{1}{N-B}\sum\left(Y_j^э - Y_j^р\right)^2$$

f = N – B

критерий Фишера 2,262111

критерий Фишера 5,99

модель адекватна

$$s^2_Y = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} s_j^2,$$

f = N (k -1)

Лист1 | Лист1 (2) | Коэффициенты | Фишнр | критерий Кохрена | Критерий фишера

Готово

После положительного вывода об адекватности уравнения регрессии, его подвергают инженерной интерпретации следующим образом.

Известно, что величина коэффициента уравнения регрессии - количественная мера его влияния. О характере влияния факторов говорят знаки коэффициентов.

Знак «плюс» свидетельствует о том, что с увеличением значения фактора величина параметра оптимизации растет, а при знаке «минус» - убывает.