**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**

федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ**

**ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Инженерная школа ядерных технологий

Направление – Ядерные физика и технологии

Отделение ядерно-топливного цикла

Отчет по лабораторной работе №6

по дисциплине

«Методы разделения стабильных изотопов»

**Построение матрицы планирования оптимального эксперимента**

Вариант 6

Исполнитель:

Студент, гр. 0А8Д \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Кузьменко А.С.

подпись дата

Проверил:

Профессор ОЯТЦ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Орлов А.А.

подпись дата

Томск – 2021

**СОДЕРЖАНИЕ**

[ЦЕЛЬ РАБОТЫ 3](#_Toc88541022)

[1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ 3](#_Toc88541023)

[1.1. Математическое моделирование 3](#_Toc88541024)

[1.2. Методика выполнения расчета 10](#_Toc88541025)

[2. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ 13](#_Toc88541026)

[3. ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ 13](#_Toc88541027)

[ВЫВОДЫ 14](#_Toc88541028)

**ЦЕЛЬ РАБОТЫ**

Освоение методики построения матрицы планирования оптимального эксперимента и вывода уравнения регрессии.

**1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ**

**1.1. Математическое моделирование**

Физические явления и процессы, с которыми мы сталкиваемся в природе, а также в инженерной практике в различных отраслях техники и технологии, чрезвычайно разнообразны и характеризуются для каждого конкретного случая своим набором физических параметров. Исследование физических явлений, собственно, и представляет предмет обширной области науки – физики, которая подразделяется на ряд более специализированных дисциплин (механику, атомную и ядерную физику, теплофизику, акустику, молекулярную физику и т.д.).

Любой метод научного познания окружающего мира, в том числе и физических процессов, основывается на моделировании – исследовании объектов, процессов и явлений путем построения и изучения их моделей. При исследовании физических процессов существует два метода: теоретическое исследование (математическое моделирование) и экспериментальное исследование (физическое моделирование).

Физическое моделирование – это экспериментальный метод исследования. При этом физическому объекту ставится в соответствие его материальная копия – физическая модель (увеличенная или уменьшенная), допускающая исследование в лабораторных условиях. Выбор геометрических и режимных параметров (давление, скорость, температура) при создании физической модели процесса или объекта основывается на теории подобия.

Измеренные в процессе эксперимента данные необходимы для решения следующих задач:

* Понимание сути физических явлений и построение на основе экспериментальных данных адекватных физико-математических моделей рассматриваемого процесса.
* Получение базы данных, необходимых для проведения расчетов по заданной математической модели процесса (значения физических констант, зависимость их от внешних параметров и т.д.).
* Подтверждение адекватности математического моделирования сравнением расчетных и опытных данных и уточнение математической модели.

Несмотря на решающую роль эксперимента в развитии физической теории, данный метод исследования имеет целый ряд ограничений, которые можно во многом снять при математическом моделировании исследуемого процесса или явления.

Широкое использование математического моделирования в физике и инженерной практике обусловлено следующими факторами:

* Усложнение класса исследуемых задач, для которых необходимо создание дорогостоящих экспериментальных установок или модельных объектов.
* Эксперимент связан с энергетическими и финансовыми затратами на обслуживание экспериментальных установок, особенно при изучении крупногабаритных объектов.
* Эксперимент зачастую позволяет получить лишь ограниченный объем информации из-за технических трудностей (например, размещение большого количества датчиков для измерения пространственных характеристик потока).
* Невозможность проведения физического моделирования в ряде областей исследования (например, проведение детальных измерений в тайфунах и грозовых облаках и т.п. из-за случайности времени и места их появления).

Математическое моделирование наряду с экспериментом является основным способом исследования и получения новых знаний в различных областях физики.

Рассмотрим способы рационального планирования эксперимента, позволяющие сократить время его проведения, свести к минимуму погрешности, получить максимально полезные данные и осуществлять максимальный контроль за внешними и посторонними воздействиями.

Лишь для немногих экспериментов удается правильно оценить точный объем экспериментальной работы. При слишком малом объеме экспериментальных данных может оказаться невозможным найти закон или функцию, исследователь может получить низкую точность постоянных величин или не заметить какой-либо слабый эффект, имеющий большое теоретическое значение. С другой стороны, при слишком большом объеме получаемых данных эксперимент длится очень долго, обработка данных затягивается и затрудняется представление материала. В некоторых экспериментах чрезмерное количество данных по существу препятствует обнаружению важных эффектов.

План эксперимента будет компактным и эффективным, если заранее установить интервалы между значениями переменных. Если мы ищем функциональное соотношение между независимой переменной *x* и зависимой переменной *y*, то функцию *y(x)* можно изобразить в виде некоторой кривой (или прямой) в системе координат *(x,y)*. Такая кривая состоит из бесконечного числа отдельных точек, из которых необходимо выбрать некоторое конечное практически приемлемое число точек, представляющих данную функцию (однофакторный эксперимент). Если рассматривать функцию двух и более независимых переменных, например *z(x,y)*, то полной совокупности данных соответствует некоторая плоскость и т.д. (многофакторный эксперимент).

Таким образом, выбор конечной совокупности опытных точек является необходимым этапом планирования, который проводится до начала эксперимента. Очевидно, что выбор опытных точек следует начинать с определения экстремальных показаний измерительной аппаратуры, так как это позволит получить область исследуемых значений, охватывающую всю совокупность данных.

Существует два основных критерия выбора экспериментальных точек:

1. Относительная погрешность данных на различных участках области исследуемых значений.

Во многих случаях получаемые данные имеют разную погрешность на различных участках исследуемого диапазона *(xmin, xmax)*. Если анализ погрешностей показывает, что на каком-то участке данные вызывают наибольшее сомнение, то этот участок заполняется большим числом точек.

2. Характер экспериментальной функции.

Если характер экспериментальной зависимости заранее не известен, то целесообразно выбрать план эксперимента с одинаковыми интервалами между точками.

После выбора интервалов между точками необходимо установить последовательность проведения измерений. В технике и инженерно–физическом эксперименте обычно используют последовательный план, при этом изменение независимых переменных происходит регулярно в возрастающей или убывающей последовательности, или рандомизированный (случайный) план – выбранные значения независимой переменной чередуются чисто случайным образом.

Пусть, изучая функциональную зависимость *y=f(x)* мы провели ряд измерений величин *x* и *y*, была получена следующая таблица данных (таблица 1):

Таблица 1 – Таблица данных

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| x | x1 | x2 | … | xn |
| y | y1 | x2 | … | yn |

Если аналитическое выражение искомой функции неизвестно или весьма сложно, то необходимо установить эмпирическую формулу *y=f(x)*, значение которой про *x=xi* мало бы отличалось от опытных данных *yi (i=1,2,…,n)*. Обычно по ряду соображений указывают определенный вид функции, соответствующей этому распределению (линейная, степенная, экспоненциальная и т.п.).

Таким образом, задача сводится к нахождению наилучших показателей функции. Класс функции определяется из требования простоты эмпирической формулы, в ряде случаев он определяется самой природой явления (из физических соображений).

Полученные в результате эксперимента эмпирические формулы не являются законами природы, а представляют собой лишь некоторые гипотезы, более или менее согласующиеся с опытными данными. Практическое значение аппроксимирующих функций связано с компактностью описания полученных результатов измерений, особенно для функций нескольких переменных и большого числа опытных точек. Кроме того, аппроксимирующие зависимости удобны при проведении математического моделирования сложных физических процессов и при анализе соответствующих физических закономерностей.

Более точная оценка экспериментальных зависимостей возможна с помощью статистических методов, включающих проведение регрессионного и корреляционного анализов.

Уравнение регрессии представляет математическую форму зависимости измеряемой физической величины от влияющих на нее факторов. Выбор того или иного вида уравнения определяет точность, с которой модель описывает реальный процесс. Выбор вида уравнения определяется на основании априорных сведений о процессе, изучения влияющих факторов, от которых зависит измеряемая величина, а также удобства использования математической модели данного конкретного вида.

Регрессионный анализ сводится к определению на основании экспериментальных данных коэффициентов модели (коэффициентов регрессии), оценка значимости значений этих коэффициентов и степени адекватности модели.

Под корреляцией понимается всякая связь между двумя или несколькими исследуемыми явлениями. Эта связь может быть детерминированной или случайной (вероятностной). Первый тип связи определяется строгими закономерностями, обычно описываемыми некоторыми физическими формулами (например, закон Ома определяет жесткую связь между разностью потенциалов, силой тока и электрическим сопротивлением). Второй тип связи – когда связь между явлениями только предполагается, и отсутствуют теоретические предпосылки, свидетельствующие о наличии такой связи. В отличие от регрессионного анализа, корреляционный анализ применяется для исследования случайной связи между переменными. Задавая то или иное уравнение регрессии, мы тем самым определяем как само существование зависимости между независимыми переменными, так и математический вид этой зависимости. При корреляционном же анализе проверяется лишь сам факт, т.е. статистическая гипотеза о наличии или отсутствии связи. Сама природа величин, между которыми такая случайная связь предполагается, позволяет судить о ней как о вероятностной. Результат корреляционного анализа также носит статистический характер, так как заключение о наличии или отсутствии связи принимается с некоторой заранее заданной доверительной вероятностью.

Основная цель инженерно-физического эксперимента – это выявление главных особенностей изучаемых объектов или явлений и формирование на основе экспериментальных результатов некоторой математической модели. Следует отметить, что с точки зрения соотношения причина–следствие все задачи математического моделирования делятся на два больших класса – прямые и обратные задачи математической физики.

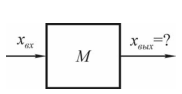


Рисунок 1 – К постановке прямой задачи

При постановке и решении прямой задачи должна быть задана математическая модель исследуемого объекта или явления, а также совокупность входящих воздействий *xвх* на эту модель. Конечной целью решения прямой задачи является нахождение поведения модели (совокупности *xвых*) при воздействии на нее *xвх*.

Прямые задачи математического моделирования к настоящему времени достаточно хорошо изучены. В случае, если решение прямой задачи существенно расходится с опытными данными, то это дает основание для уточнения или даже пересмотра математической модели изучаемого явления.

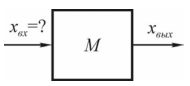


Рисунок 2 – К постановке обратной задачи

При постановке и решении обратной задачи также задается математическая модель процесса. При этом входные воздействия *xвх* частично или полностью неизвестны и их трудно или невозможно определить. Зато из реальных экспериментов известны выходные параметры модели *xвых* как результат взаимодействия модели с неизвестными входными воздействиями *xвх*.

К обратным задачам относятся задачи определения некоторых физических свойств объекта (плотности, коэффициента теплопроводности, модуля упругости и др.) в виде функций других параметров. Решение обратных задач связано с экспериментальным исследованием физических явлений, при этом измеряемая в эксперименте величина чаще всего регистрирует результат в виде некоторой суммы воздействий.

Решение обратных задач проводится, как правило, в рамках некоторой математической модели исследуемого объекта. Оно состоит в определении коэффициентов дифференциальных уравнений либо области, в которой действует оператор, либо начальных условий, либо сочетания этих причин. Процедура решения обратных задач связана с преодолением серьезных математических трудностей. Качество решения зависит как от точности и количества полученной из эксперимента информации, так и от способа (алгоритма) ее обработки.

Обратные задачи обладают рядом неприятных с математической точки зрения особенностей:

* Они, как правило, нелинейны, то есть неизвестная функция или неизвестный параметр входят в операторное или функциональное уравнение нелинейным образом.
* Решение обратных задач обычно неединственно, что может привести к появлению посторонних решений.

Эти особенности заложены в исходной физической постановке обратной задачи. Каждая прямая задача в рамках принятой математической модели может быть сопоставлена с некоторым множеством обратных задач.

**1.2. Методика выполнения расчета**

В качестве примера рассмотрим процесс разделения изотопических ионов при электромиграции в системе ионит–раствор.

Методы планирования экспериментов позволяют описать такие процессы функцией, представленной в виде полинома. Это позволяет не только учесть разнообразие факторов, влияющих на основные показатели процесса, но и дать оценку вклада каждого фактора в величину исследуемой функции. Использование метода планирования позволяет также сократить объем экспериментальной работы, что является весьма существенным в связи с большой трудоемкостью опытов по разделению изотопических ионов в указанном случае.

Для построения уравнения регрессии процесса разделения изотопических ионов, в качестве функции отклика рассматривается степень разделения (*y*).

Факторами выбраны следующие величины: концентрация раствора в разделительной установке *Х1* [г-экв/см3]; напряжение электрического поля *Х4* [В], скорости противотока раствора и ионита соответственно *Х2* и *Х3* [см3/час]. При учете априорных сведений о процессе были выбраны основные уровни. С точки зрения воспроизводимости функции отклика оценивались величины интервалов варьирования. Пример величин основных уровней и интервалов варьирования представлен в таблице 2, а матрица планирования процесса разделения в таблице 3.

Таблица 2 – Интервалы варьирования переменных

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Факторы  уровни варьирования | *Х1* | *Х2* | *Х3* | *Х4* |
| Основной уровень | 0,3 | 3 | 0,5 | 145 |
| Интервал варьирования | 0,1 | 1 | 0,5 | 45 |
| Верхний уровень | 0,4 | 4 | 1 | 190 |
| Нижний уровень | 0,2 | 2 | 0 | 100 |

Таблица 3 – Матрица планирования экспериментов

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № опыта | *X0* | *X1* | *X2* | *X3* | *X4* | *X1X4* | *X2X4* | *X3X4* | *Y* |
| 1 | + | – | – | – | – | + | + | + | 0,50 |
| 2 | + | + | – | – | + | + | – | – | 0,44 |
| 3 | + | – | + | – | + | – | + | – | 0,47 |
| 4 | + | + | + | – | – | – | – | + | 0,80 |
| 5 | + | – | – | + | – | + | + | – | 0,46 |
| 6 | + | + | – | + | + | + | – | + | 0,78 |
| 7 | + | – | + | + | + | – | + | + | 0,82 |
| 8 | + | + | + | + | – | – | – | – | 0,75 |

Здесь *Х0 –* среднее значение от суммы всех значений *Y* в таблице 3*.* Для факторов *Х1-Х4* знак минус показывает, что фактор находится на нижнем уровне, а плюс, что он находится на верхнем уровне. Значения факторов *Х1-Х4* и *X1X4, X2X4, X3X4* рассчитывается аналогично значению *Х0*. При этом если в графе стоит знак минус, то соответствующее значение *Y* домножается на -1, если плюс, то на 1. Полученные коэффициенты записываются перед соответствующим членом уравнения регрессии. При этом *Х0* = 1, поскольку данная величина не является одним из факторов.

Полученное уравнение регрессии имеет вид:

.

Из уравнения регрессии следует, что чем больше коэффициент стоит перед заданным фактором, тем больше он оказывает влияние на исследуемый процесс и результат эксперимента.

**2. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ**

Таблица 4 – Исходные данные

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Вариант | *Y1* | *Y2* | *Y3* | *Y4* | *Y5* | *Y6* | *Y7* | *Y8* |
| 6 | 0,57 | 0,68 | 0,51 | 0,16 | 0,63 | 0,17 | 0,91 | 0,41 |

Для расчетов нужно использовать матрицу планирования экспериментов, приведенную в таблице 3.

**3. ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ**

Таблица 5 – Матрица планирования экспериментов

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № опыта | *X0* | *X1* | *X2* | *X3* | *X4* | *X1X4* | *X2X4* | *X3X4* | *Y* |
| 1 | + | – | – | – | – | + | + | + | 0,57 |
| 2 | + | + | – | – | + | + | – | – | 0,68 |
| 3 | + | – | + | – | + | – | + | – | 0,51 |
| 4 | + | + | + | – | – | – | – | + | 0,16 |
| 5 | + | – | – | + | – | + | + | – | 0,63 |
| 6 | + | + | – | + | + | + | – | + | 0,17 |
| 7 | + | – | + | + | + | – | + | + | 0,91 |
| 8 | + | + | + | + | – | – | – | – | 0,41 |

Вычислены коэффициенты уравнения регрессии (формула 1) по формуле (2):

 (1)

 (2)

где множитель (+1), если в матрице планирования эксперимента «+», и (-1), если знак «-».

















В результате полученное уравнение регрессии:

 (3)

**ВЫВОДЫ**

Освоена методика построения матрицы планирования оптимального эксперимента и вывода уравнения регрессии. Полученное уравнение регрессии .