

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КІЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»

***Розробка
статистичної моделі
процесу хімічної
технології методом
повного факторного
експерименту***

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ДО ВИКОНАННЯ
ДОМАШНЬОЇ КОНТРОЛЬНОЇ РОБОТИ

для студентів напряму
підготовки 6.051301 «Хімічна технологія»

Затверджено Вченою радою ХТФ НТУУ «КПІ»

Київ – 2012

Розробка статистичної моделі процесу хімічної технології методом повного факторного експерименту: метод. вказівки до викон. домашн. контрол. роботи для студ. напряму підготовки 6.051301 «Хімічна технологія» [Навчальне електронне видання] / [уклад. Бойко Т. В., Абрамова А.О.]. – К: 2012. – 27 с. Систем. вимоги: Pentium; 256 Mb RAM; Windows 2000, XP, Vista; MS Word 97-2003 – Назва з екрану.

*Гриф надано Вченою радою ХТФ НТУУ “КПІ”,
протокол № від . . 2012 р.*

Навчальне електронне видання

РОЗРОБКА СТАТИСТИЧНОЇ МОДЕЛІ ПРОЦЕСУ ХІМІЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ МЕТОДОМ ПОВНОГО ФАКТОРНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ

**Методичні вказівки до виконання домашньої
контрольної роботи для студентів напряму підготовки
6.051301 «Хімічна технологія»**

Укладачі: Бойко Тетяна Владиславівна, канд. техн. наук, доц.
 Абрамова Алла Олександрівна, ас.

Відповідальний
редактор: В. І. Бендюг, канд. техн. наук, доц.

Рецензент: Н.М. Толстопалова, канд. техн. наук, доцент.

За редакцією укладачів

Зміст

ВСТУП.....	4
1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ	5
2 ПРИКЛАД РОЗРОБКИ СТАТИСТИЧНОЇ МОДЕЛІ	12
3 ВИМОГИ ДО ДКР	18
4 ПИТАННЯ ТА ЗАВДАННЯ ДО САМОПЕРЕВІРКИ.....	18
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ.....	19
ДОДАТКИ.....	20
Додаток А Статистичні критерії.....	20
Додаток Б Приклад реалізації у середовищі Mathcad	23

ВСТУП

Велика кількість експериментальних задач в хімії і хімічній технології формулюються як екстремальні; до них відноситься визначення оптимальних умов процесу, оптимального складу композиції і т. д. Планування експерименту для рішення таких задач дозволяє знайти оптимальне місце знаходження точок у факторному просторі і здійснити лінійне перетворення координат, завдяки чому забезпечується можливість подолати недоліки класичного регресійного аналізу, в тому числі кореляцію між коефіцієнтами рівняння регресії.

Вибір плану визначається постановкою задачі дослідження та особливостями об'єкта. Процес дослідження зазвичай розбивається на окремі етапи. Інформація, отримана після кожного етапу, визначає подальшу стратегію експерименту – таким чином виникає можливість оптимального управління експериментом. Планування експерименту дозволяє одночасно варіювати всі фактори та отримувати кількісні оцінки основних ефектів та ефектів взаємодії.

Ефекти, що цікавлять дослідника, визначаються зі значно меншою похибкою, ніж та, яка характерна для традиційних методів дослідження.

В кінцевому рахунку використовування методів планування експерименту значно збільшує ефективність експерименту.

Домашня контрольна робота на тему «Розробка статистичної моделі процесу хімічної технології методом повного факторного експерименту», що виконується в рамках дисципліни «Математичне моделювання і оптимізація процесів хімічної технології» призначена для закріплення навичок практичного застосування придбаних знань.

Метою ДКР є вивчення метода повного факторного експерименту та його алгоритму для одержання математичної моделі (у вигляді лінійного

полінома) і виявлення їх адекватності, а також вивчення методики складання матриць планування, набуття навичок обробки та аналізу результатів повного факторного експерименту для визначення оптимальних методів проведення хіміко-технологічних процесів.

1 ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Суть метода повнофакторного експерименту (ПФЕ) полягає в одночасному змінюванні усіх факторів у дослідах, одержані математичної моделі (рівняння регресії) у вигляді лінійного полінома та досліджені останнього методами математичної статистики. Рівняння регресії, яке одержано згідно з результатами ПФЕ, має вигляд:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_nx_n \quad (1.1)$$

Слід також відзначити, що у випадках можливої взаємодії між факторами рівняння регресії записують у формі неповного квадратичного полінома, наприклад, при $n=2$:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 \quad (1.2)$$

В рівняннях (1) та (2) b_0 – вільний член, b_i – лінійні ефекти ($i=1, 2, 3, \dots, n$) b_{ij} – ефекти взаємодії ($i, j=1, 2, 3, \dots, k$) $i \neq j$, k – кількість факторів.

Вибір області експерименту. Для проведення дослідження обирається так звана область експерименту, тобто певна область факторного простору, за межі якої не будуть виходити значення факторів при проведенні дослідів.

При виборі області експерименту враховуються наступні обмеження:

1. Обмеження на область визначення факторів, які не можуть бути порушені при будь-яких обставинах;
2. Обмеження, пов'язані з техніко-економічними показниками (наприклад, якщо у досліді використовується коштовний продукт, то його витрата

повинна бути обмежена, інакше вартість експерименту буде дуже великою).

3. Обмеження, пов'язані з конкретними умовами проведення процесу (технологічні обмеження). Враховуючи усі ці обмеження, можна вибрати достатньо вдалу область експерименту.

Область експерименту визначається наступними параметрами:

- основним (нульовим) рівнем факторів;
- інтервалами варіювання факторів.

За основні рівні приймаються ті величини факторів, які згідно з результатами попередніх досліджень визначають найкраще значення змінної стану.

Основна вимога до інтервалу варіювання полягає у тому, щоб він був вищім за подвійну середню квадратичну помилку фактора:

$$\Delta z > 2 |S_{x_i}| \quad (1.3)$$

Ця вимога обумовлена тим, що фактори, які мають близькі значення (знаходяться на сусідніх рівнях), повинні невипадковим чином впливати на змінну стану. Вдалий вибір інтервалів варіювання гарантує достовірність математичної моделі.

Найбільше розповсюдження одержало планування факторів на двох рівнях, де як рівні використовуються верхня й нижня межі інтервалу варіювання.

Побудова матриці планування. Матриця планування вдає із себе план експерименту, що утримує запис усіх комбінацій факторів або частини з них у кодованій формі.

Кодування значень факторів здійснюється за формулою:

$$x_j = \frac{z_i - z_{i0}}{\Delta z_i} \quad (1.4)$$

де x_j – кодоване значення фактору;
 z_{io} – нульовий рівень натуральної змінної;
 z_i – верхній або нижній рівень натуральної змінної;
 Δz_i – інтервал варіювання натуральної змінної.

Верхньому рівню натуральної змінної відповідає кодоване значення (+1), а нижньому – (-1). В матрицю включається також стовпець x_o , що складається з (+1), який знадобиться при розрахунку вільного члена поліному.

Складання матриці планування проводиться на основі певних принципів оптимальності. В інженерній практиці широко використовуються принципи рототабельності та ортогональності.

1. Принцип рототабельності передбачає мінімум дисперсії передбаченого значення змінної стану. У будь-якій точці факторного простору при рівності цих дисперсій на рівній відстані від центру плану;
2. Принцип ортогональності дозволяє при розрахунку коефіцієнтів рівняння регресії (математичної моделі) використати наступні властивості (див. матрицю планування, табл. 2.2):

$$\begin{aligned} \sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} &= 0; \\ \sum_{u=1}^N x_{iu} &= 0; \\ \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 &= N; \\ i \neq j; i, j &= 1, 2, \dots, k \end{aligned} \tag{1.5}$$

де N – кількість дослідів ;
 u – номер досліду ($u=1, 2, \dots, N$);
 i – кількість факторів ($i=1, 2, \dots, k$).

Після побудови матриці планування приступають до проведення експерименту. Якщо попередньо було встановлено, що на зміну стану

процесу значний вплив виявляють перешкоди (хімічні), то план експерименту реалізують декілька разів (паралельні досліди) і одержують m значень вихідного параметра, які потім усереднюють (u – номер паралельного досліду, $u^i=1,2,\dots,m$).

Звичайно, за початкове приймають кількість паралельних дослідів m (*частіше від 2 до 4*). При перевірці відтворення кількість паралельних дослідів уточнюється (якщо це необхідно). Після цього результати експериментів оброблюються та аналізуються.

Обробка та аналіз результатів повного факторного експерименту. Розрахунок коефіцієнтів рівняння регресії та статистичний аналіз виявляються основними задачами обробки результатів активного експерименту. Алгоритм розв'язання цих задач може бути таким:

1) *Розрахунок коефіцієнтів рівняння регресії* проводиться згідно з формулами:

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{0u} \bar{y}_u \quad (1.6)$$

$$b_i = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu} \bar{y}_u, \quad (i = 1, 2, \dots, k) \quad (1.7)$$

$$b_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} \bar{y}_u, \quad (i \neq j, i, j = 1, 2, \dots, k) \quad (1.8)$$

де b_{ij} – коефіцієнт регресії, який характеризує взаємодію факторів $x_i \cdot x_j$;
 \bar{y}_u – середнє значення y згідно з паралельними дослідами u -го рядка матриці планування.

2) *Перевірка однорідності дисперсій.* Перед розрахунком помилки досліду необхідно переконатися, що розсіяння дослідів у кожній точці факторного простору не перевищує певної величини. Необхідно розрахувати порядкові дисперсії та перевірити їх однорідність.

Порядкові дисперсії S_u^2 розраховуються за формулою:

$$S_u^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \bar{y}_u)^2 \quad (1.9)$$

Перевірку однорідності дисперсій слід проводити згідно з критерієм Кохрена (G). Його розрахункове значення G_p визначають як відношення:

$$G_p = \frac{S_{u\max}^2}{\sum_{u=1}^N S_u^2} \quad (1.10)$$

де $S_{u\max}^2$ – максимальна з розрахованих порядкових дисперсій;

$\sum_{u=1}^N S_u^2$ – сума усіх дисперсій з N -рядків матриці планування.

Якщо виконується умова:

$$G_p < G_T. \quad (1.11)$$

то гіпотеза про однорідність дисперсій приймається. Табличне значення критерію Кохрена G_T знаходять у таблицях (Додаток А., табл. А.1) для чисел ступенів вільності $f_1 = m-1$; $f_2=N$ та рівня значимості q (у технічних розрахунках приймається 5% рівня значимості, або $q=0.05$). Якщо умова (1.11) не виконується, то слід збільшити число паралельних дослідів, тобто ще раз, або кілька разів необхідно реалізувати матрицю планування.

При виконанні умови (1.11) про однорідність порядкових дисперсій їх усереднюють згідно з формулою:

$$S_0^2 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N S_u^2 = \frac{1}{N(m-1)} \sum_{u=1}^N \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \bar{y}_u)^2, \quad (1.12)$$

де $f_0 = N(m-1)$ – число ступенів свободи.

Таким чином одержують помилку досліду S_0^2 , яка для хімічних процесів не повинна перевищувати 5%.

Необхідно відмітити, що неоднорідні дисперсії усереднювати не можна.

3) *Перевірка значимості коефіцієнтів регресії.* Відомо, що один фактор більше впливає на зміну стану, а другий менше. Для оцінки його впливу використовують перевірку значимості кожного коефіцієнту двома рівноцінними способами. В обох випадках спочатку знаходять дисперсію коефіцієнтів регресії згідно з формулою:

$$S_{bi}^2 = \frac{S_0^2}{N \cdot m}, \quad (1.13)$$

так як дисперсії усіх коефіцієнтів рівні, оскільки залежать тільки від помилки досліду S_0^2 та кількості рядків матриці планування N .

За першим способом, оцінку значимості коефіцієнтів проводять згідно з формулою (1.14), та умовою (1.15):

$$t_{ip} = \frac{|b_i|}{S_{bi}}, \quad (1.14)$$

$$t_{ip} > t_T, \quad (1.15)$$

де $|b_i|$ – абсолютне значення i -того коефіцієнту регресії;

$S_{bi} = \sqrt{S_{bi}^2}$ - середньоквадратичне відхилення;

t_{ip} – розрахункове значення критерію Стьюдента для кожного коефіцієнту;

t_T – табличне значення критерію Стьюдента, який знаходиться для чисел ступенів вільності $f_o = N(m-1)$ та рівня значимості $q=0,05$ (Додаток А, табл. А2).

За другим способом, для перевірки значимості коефіцієнтів регресії використовують довірчий інтервал Δb_i який унаслідок рівності S_{bi}^2 для усіх коефіцієнтів одинаковий:

$$\Delta b_i = \pm t_t \cdot S_{bi} \quad (1.16)$$

В цьому випадку оцінку значимості проводять згідно з умовою порівняння значень коефіцієнтів та довірчого інтервалу (1.17):

$$|b_i > \Delta b_i| \quad (1.17)$$

Якщо виконуються умови (1.15) та (1.17), то i -тий коефіцієнт признається значимим. Якщо умова (1.15) або (1.17) не виконується для якого-небудь коефіцієнта, то відповідний фактор можна признати незначимим, і виключити його з рівняння регресії. Кількість значимих коефіцієнтів позначимо літерою l .

4) *Перевірка адекватності лінійного рівняння регресії.* Перевірка адекватності лінійного рівняння регресії реального процесу проводиться порівнянням дисперсій. Одна дисперсія характеризує розсіювання середніх дослідних даних змінної стану \bar{y}_u відносно тих значень змінної стану \hat{y}_u , які передбачені одержаними лінійними рівняннями регресії. Ця дисперсія звєтється дисперсією адекватності і знаходиться за допомогою формули (1.18):

$$S_{ad}^2 = \frac{m}{N-l} \sum_{u=1}^N \left(\bar{y}_u - \hat{y}_u \right)^2, \quad (1.18)$$

де m – кількість паралельних дослідів;

N – кількість рядків матриці планування;

l – кількість членів рівняння регресії, які залишилися після оцінки значення коефіцієнтів.

Друга дисперсія – це помилка досліду S_0^2 .

Перевірку адекватності проводять, оцінюючи відношення (1.19):

$$F_p = \frac{S_{ad}^2}{S_0^2} \quad (1.19)$$

Згідно з умовою:

$$F_p < F_T, \quad (1.20)$$

де F_p – розрахунковий критерій Фішера,

F_T – табличний критерій Фішера, який знаходиться в додатку А, для числа ступенів вільності $f_1=f_{ad}=N-l$; $f_2=f_0=N(m-1)$ та обраного рівня значимості $q=0,05$.

Якщо виконується умова (1.20), то лінійне рівняння регресії вважається адекватним. У випадку невиконання умови адекватності (1.20) припустима модель неадекватна. Потрібно повторити досліди усі або частково за інших умов (наприклад, збільшити кількість паралельних дослідів, зменшити інтервали варіювання декількох факторів, врахувати нові фактори, тощо), або перейти до поліномів більш високих порядків.

2 ПРИКЛАД РОЗРОБКИ СТАТИСТИЧНОЇ МОДЕЛІ

Процес іонообмінного вилучення і концентрування ртуті із відпрацьованого електроліту у виробництві їдкого натру і хлору здійснюється на аніоніті АВ-17.

Вибір змінної стану: як змінну стану у обирають ступінь очищення розчину від ртуті, %.

Вибір факторів: кінетичні дослідження показали, що значний вплив здійснюють наступні фактори: z_1 – термін контакту, год.; z_2 – кількість смоли, що завантажується, г; z_3 – видаток відпрацьованого електроліту, л/год. Область зміни факторів визначалася відповідно до технологічних умов і представлено у таблиці 2.1.

Таблиця 2.1

Інтервали зміни факторів

Найменування	Фактори		
	Z_1	Z_2	Z_3
Верхній рівень	5,5	12,5	1,5
Нижній рівень	4,5	9,5	1,0
Нульовий рівень	5,0	11,0	1,25
Інтервал варіювання	0,5	1,5	0,25

Таким чином, математична модель процесу у загальному вигляді будемо шукати у вигляді поліному:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{23} x_2 x_3 + b_{13} x_1 x_3, \quad (2.1)$$

Вибір матриці планування. Постановка задачі вимагає одержання математичної моделі. Скористаємося планом ПФЕ типу 2^3 –планування дворівневе, три фактори, 8 дослідів. Враховуючи невелике відтворення дослідів, була прийнята кількість паралельних дослідів рівною 2.

Матриця планування експерименту приведена в таблиці 2.2. Реалізація цього експерименту проводилася блоками по 8 дослідів за 2 дні без рандомізації.

Таблиця 2.2

Матриця планування експерименту

Досліди №	План експерименту							Експеримент			Розрахунок	
	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	y_1	y_2	\bar{y}	S_u^2	\hat{y}_u
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	93,18	92,62	92,90	0,16	91,19
2	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	94,34	96,40	95,37	2,12	94,91
3	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	80,99	77,61	79,30	5,71	80,63
4	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	84,20	82,80	83,50	0,98	84,34
5	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	96,65	94,95	95,80	1,45	96,38
6	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	99,07	97,93	98,50	0,65	100,1
7	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	89,25	82,75	86,00	21,13	85,81
8	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	92,91	90,09	91,50	3,98	89,53

Порядкові дисперсії розраховані згідно з формулою (1.9) і внесені у відповідний стовпець таблиці 2.2.

Перевірка однорідності дисперсій.

$$G_p = \frac{21,13}{722,87} = 0,58$$

$G_T=0,679$ при $f_1=1, f_2=8$ та $q=0,05$ (див. додаток А, табл. А.1.)

гіпотеза про однорідність дисперсій приймається.

Розрахунок помилки досліду. Згідно з формулою (1.12), одержуємо:

$$S_o^2 = \frac{1}{8} \cdot 36,17 = 4,521$$

Розрахунок коефіцієнтів лінійного рівняння регресії. Згідно з формулами (1.6) – (1.8) і даними таблиці 2.2 розраховані значення коефіцієнтів регресії представлені у таблиці 2.3.

Перевірка значимості коефіцієнтів регресії. Дисперсія коефіцієнтів рівняння регресії розраховується згідно з формулою (1.13):

$$S_{si}^2 = \frac{4,521}{8 \times 2} = 0,283;$$

$$S_{ui} = \sqrt{0,283} = 0,53$$

Розрахунковий критерій Стьюдента для кожного коефіцієнту, визначений за формулою (1.14), представлений у таблиці 2.3.

Таблиця 2.3

Значення коефіцієнтів регресії і оцінка їх значимості

Коефі-цієнт	Значення	Розраховане значення критерія Стьюдента, t_P	Табличне значення критерія Стьюдента t_T	Висновок
b_0	90,36	169,99		значимий
b_1	-1,86	3,50		значимий
b_2	5,28	9,94		значимий
b_3	-2,59	4,87		значимий
b_{12}	0,57	1,07		незначимий
b_{13}	0,19	0,36		незначимий
b_{23}	1,08	2,04		незначимий

Згідно з умовою (1.15) значимі коефіцієнти b_0, b_1, b_2, b_3 ($l=4$).

Таким чином рівняння регресії :

$$\hat{y}_x = 90,36 - 1,86x_1 + 5,28x_2 - 2,59x_3, \quad (2.2)$$

де індекс x підкреслює той факт, що значення факторів для розрахунку використовуються у кодованій формі. За отриманим рівнянням регресії визначаємо значення \hat{y}_u , що наведені в останньому стовпчику таблиці 2.2.

Перевірка адекватності рівняння регресії. Дисперсію адекватності розрахуємо згідно з формулою (1.18) по відповідним значенням із таблиці 2.2:

$$S_{ad}^2 = \frac{2}{8-4} \times 12,397 = 6,199$$

Тоді, розраховане значення критерію Фішера за (1.19): $F_p = \frac{6,199}{4,521} = 1,37$

Перевірку адекватності проводимо за умовою (1.20), для чого знаходимо значення табличного критерію Фішера в Додатка А, таблиці А3 при числі ступенів вільності:

$$f_1 = f_{ad} = 4; f_2 = f_0 = 8 \text{ ma } q = 0.05 \quad F_T = 3,84$$

Порівняємо обидва критерія: $F_p < F_T$.

Одержане лінійне рівняння (2.2) адекватно описує експериментальні дані.

Для отримання адекватної статистичної моделі необхідно перейти до значення факторів у натуральних одиницях виміру. Наведемо залежність для приведення факторів моделі до натуральних одиниць використовуючи залежність (1.4):

$$(2.3) \quad \hat{y}_x = 90,36 - 1,86 \frac{z_1 - z_{1_0}}{\Delta z_1} + 5,28 \frac{z_2 - z_{2_0}}{\Delta z_2} - 2,59 \frac{z_3 - z_{3_0}}{\Delta z_3} = \\ = 90,36 - 1,86 \frac{z_1 - 5,0}{0,5} + 5,28 \frac{z_2 - 11,0}{1,5} - 2,59 \frac{z_3 - 1,25}{0,25}$$

Після приведення подібних членів відносно факторів z_1, z_2, z_3 математична модель набуває вигляду (2.4):

$$\hat{y}_z = 83,19 - 3,72 z_1 + 3,52 z_2 - 10,36 z_3, \quad (2.4)$$

де індекс z підкреслює той факт, що значення факторів для розрахунку використовуються у натуральних одиницях.

Самоперевірка здійснюється наступним чином: розраховують значення змінної стану за адекватним регресійне рівнянням при завданні

набору факторів у кодованій формі і за статистичною моделлю при відповідних значеннях факторів у натуральних одиницях.

Так для отриманих результатів за прикладом, це представлено у таблиці 2.4.

Таблиця 2.4

Результати самоперевірки

Фактори:	в кодованій формі			в натуральних одиницях		
	x_1	x_2	x_3	z_1	z_2	z_3
значення	+1	+1	+1	5,5	12,5	1,5
Вираз для визначення змінної стану	$\hat{y}_x = 90,36 - 1,86x_1 + 5,28x_2 - 2,59x_3$			$\hat{y}_z = 83,19 - 3,72z_1 + 3,52z_2 - 10,36z_3$		
Результат	91,19			91,19		

Таким чином, можна зробити висновок про отримання адекватної статистичної математичної моделі, яка дає змогу розрахувати ступінь очищення розчину від ртуті (%) при іонообмінному вилученні ртуті із відпрацьованого електроліту у виробництві їдкого натру і хлору на аніоніті АВ-17 в залежності від терміну контакту, кількості смоли, що завантажується та видатку відпрацьованого електроліту.

Приклад реалізації середовищі Mathcad згідно з наведеним прикладом, представлений у Додатку Б.

З ВИМОГИ ДО ДКР

Для виконання необхідно опанувати матеріал відповідної лекції, матеріал для СРС відповідної теми (див. список літератури), на лабораторних заняттях отримати завдання і послідовно зробити :

- 1) Отримати завдання та проаналізувати матрицю експерименту.
- 2) Провести розрахунок коефіцієнтів рівняння регресії.
- 3) Здійснити перевірку однорідності дисперсій.
- 4) Провести перевірку значимості коефіцієнтів регресії.
- 5) Зробити перевірку адекватності лінійного рівняння регресії.
Проаналізувати отримані результати.
- 6) Всі розрахунки здійснювати в середовищі Mathcad.
- 7) Оформити пояснівальну записку відповідно ДСТУ 3008-95, а посилання на літературні джерела за ДСТУ ГОСТ 7.1:2006. Обсяг до 10 стор. Текст в редакторі WinWord 2000-2003, шрифт "Times New Roman Сүг", розмір 14 пт; формат А4 через 1,5 інтервал; поля : ліворуч 30мм, інші – 15 мм, вирівнювання по ширині.
- 8) Захистити ДКР.

4 ПИТАННЯ ТА ЗАВДАННЯ ДО САМОПЕРЕВІРКИ

1. Суть методу повного факторного експерименту?
2. Що звється областю факторного простору ?
3. Якими параметрами визначається область експерименту?
4. Вимоги, що пред'являються до інтервалу варіювання?
5. Суть принципів рототабельності та ортогональності?
6. Що являє собою матриця планування експерименту?

7. Переваги повного факторного експерименту?
8. Алгоритм обробки та аналіз результатів ПФЕ?
9. Розрахунок коефіцієнтів рівняння регресії?
10. Розрахунок помилки досліду?
11. Перевірка однорідності дисперсій?
12. Перевірка значимості коефіцієнтів регресії?
13. Перевірка адекватності рівняння регресії?
14. Рекомендації у випадку неадекватної математичної моделі?

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Бондарь А.Г. Математическое моделирование в химической технологии.-К.: Вища школа, 1973.-280с.
2. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии.- М.:Химия, 1985.-448с.
3. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии.- М.:Высшая школа,1985.-327с.
4. Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з дисципліни “Математичне моделювання та застосування електронно-обчислювальних машин в хімічній технології /Уклад. Т.В.Бойко, О.С. Бондаренко, І.О Потяженко, О.Т. Попович.– К.:Політехника,2001.–64с.
5. Математичне моделювання та застосування ЕОМ в хімічній технології: Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт для студентів напряму підготовки «Хімічна технологія та інженерія» / Уклад.: Т.В. Бойко, В.І. Бендюг, І.О. Потяженко, О.М. Жигір, А.М. Шахновський, О.С.Бондаренко.– К.; НТУУ «КПІ», 2007. – 128с.
6. Бондарь А.Г.,Статюха Г.А. Планирование эксперимента в химической технологии.-К.:Вища школа,1976.-262с.

ДОДАТКИ

Додаток А Статистичні критерії

Таблиця А.1

Критерій Кохрена (при $q=0,05$)

$f_2 \backslash f_1$	1	2	4	4	5	6	7	8	9	10	∞
2	0.9985	0.9750	0.9392	0.9057	0.8584	0.8534	0.8332	0.8159	0.8100	0.7880	0.500
3	0.9669	0.8709	0.7977	0.7457	0.7071	0.6771	0.6530	0.6333	0.6167	0.6025	0.3333
4	0.9065	0.7679	0.6841	0.6287	0.5895	0.5598	0.5365	0.5175	0.5017	0.4884	0.2500
5	0.8412	0.6838	0.5981	0.5440	0.5063	0.4783	0.4564	0.4387	0.4241	0.4118	0.2000
6	0.7808	0.6161	0.5321	0.4803	0.4447	0.4184	0.3980	0.3817	0.3682	0.3568	0.1667
7	0.7271	0.5612	0.4800	0.4807	0.3907	0.3726	0.3726	0.3555	0.3384	0.3254	0.1429
8	0.6788	0.5157	0.4377	0.3910	0.3595	0.3362	0.3185	0.3043	0.2926	0.2829	0.1250
9	0.6385	0.4775	0.4027	0.3584	0.3286	0.3067	0.2901	0.2768	0.2659	0.2568	0.1111
10	0.6020	0.4459	0.3733	0.3311	0.3029	0.2823	0.2666	0.2541	0.2439	0.2353	0.1000
12	0.5410	0.3924	0.2880	0.2624	0.2439	0.2299	0.2187	0.2098	0.2020	0.2020	0.0833
15	0.4708	0.3346	0.278	0.2419	0.2195	0.2034	0.1911	0.1815	0.1736	0.1671	0.0667
20	0.3894	0.2705	0.2205	0.1921	0.1735	0.1602	0.1501	0.1422	0.1357	0.1303	0.0500
24	0.3434	0.2354	0.1907	0.1656	0.1493	0.1374	0.1286	0.1216	0.1160	0.1113	0.0417
30	0.2929	0.1980	0.1593	0.1377	0.1237	0.1137	0.1061	0.1002	0.0958	0.0921	0.0333
40	0.2370	0.1576	0.1259	0.1082	0.0968	0.0887	0.0827	0.0780	0.0745	0.0713	0.0250
50	0.1737	0.1131	0.089	0.0766	0.0766	0.0623	0.0583	0.0552	0.0520	0.0497	0.0167
120	0.0998	0.0632	0.0496	0.0419	0.0371	0.0337	0.0312	0.0292	0.0297	0.0266	0.0083
∞	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Таблиця А.2

Процентні точки розподілення Стьюдента.

$f_0 \backslash q$	10%	5%	2%	1%
1	6.31	12.71	31.82	63.66
2	2.92	4.30	6.96	9.92
3	2.35	3.18	4.54	5.84
4	2.13	2.78	3.75	4.60
5	2.02	2.57	3.36	4.03
6	1.94	2.45	3.14	3.71
7	1.89	2.36	3.00	3.50
8	1.86	2.31	2.90	3.36
9	1.83	2.26	2.82	3.25
10	1.81	2.23	2.76	3.17
11	1.80	2.20	2.72	3.11
12	1.78	2.18	2.68	3.05
13	1.77	2.16	2.65	3.01
14	1.76	2.14	2.62	2.98
15	1.76	2.13	2.60	2.95
16	1.75	2.12	2.58	2.92
17	1.74	2.11	2.57	2.90
18	1.73	2.10	2.55	2.88
19	1.73	2.09	2.54	2.86
20	1.72	2.09	2.53	2.85
21	1.72	2.08	2.52	2.83
22	1.72	2.07	2.51	2.82

Таблиця А.3

Критерій Фішера при $q=0.05$

$f_2 \backslash f_1$	1	2	3	4	5	6	8	12	24	∞
1	161.46	199.50	215.70	224.60	230.20	234.66	238.96	243.90	249.00	254.30
2	18.51	19.06	19.16	19.25	19.30	19.33	19.37	19.41	19.45	19.50
3	10.13	9.55	9.28	9.12	9.61	8.94	8.84	8.74	8.64	8.53
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.64	5.91	6.77	5.63
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.65	4.95	4.82	4.68	4.53	4.33
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.16	4.60	3.84	3.67
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.72	3.57	3.41	3.23
8	5.32	4.46	4.67	3.84	3.69	3.58	3.44	3.28	3.12	2.98
9	5.12	4.26	3.86	3.63	3.48	3.37	3.23	3.67	2.90	2.71
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.67	2.91	2.74	2.54
11	4.84	3.98	3.59	3.36	3.20	3.09	2.95	2.79	2.61	2.40
12	4.75	3.88	3.49	3.26	3.11	3.00	2.85	2.69	2.50	2.30
13	4.67	3.80	3.41	3.18	3.02	2.92	2.77	2.60	2.42	2.21
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.70	2.53	2.35	2.13

Додаток Б Приклад реалізації у середовищі Mathcad

Число паралельних дослідів:

$$m := 2$$

Число рядків матриці планування:

$$N := 8$$

Значення факторів:

$$X1 := \begin{pmatrix} 5.5 \\ 4.5 \\ 5.5 \\ 4.5 \\ 5.5 \\ 4.5 \\ 5.5 \\ 4.5 \end{pmatrix} \quad X2 := \begin{pmatrix} 12.5 \\ 12.5 \\ 9.5 \\ 9.5 \\ 12.5 \\ 12.5 \\ 9.5 \\ 9.5 \end{pmatrix} \quad X3 := \begin{pmatrix} 1.5 \\ 1.5 \\ 1.5 \\ 1.5 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{у натуральних значеннях}$$

Нульовий рівень:

$$X10 := \frac{\sum X1}{N} \quad X20 := \frac{\sum X2}{N} \quad X30 := \frac{\sum X3}{N}$$

Інтервал варіювання:

$$xx1 := |X10 - X1_1| \quad xx2 := |X20 - X2_1| \quad xx3 := |X30 - X3_1|$$

Кодовані матриці:

$$\begin{aligned} i &:= 0..7 \\ M0_i &:= 1 \quad M1 := \frac{(X1 - X10)}{xx1} \quad M2 := \frac{(X2 - X20)}{xx2} \quad M3 := \frac{(X3 - X30)}{xx3} \end{aligned}$$

$$M12_i := M1_i \cdot M2_i \quad M23_i := M2_i \cdot M3_i \quad M13_i := M1_i \cdot M3_i$$

Результати паралельних дослідів:

$$Y1 := \begin{pmatrix} 93.18 \\ 94.34 \\ 80.99 \\ 84.20 \\ 96.65 \\ 99.07 \\ 89.25 \\ 92.91 \end{pmatrix} \quad Y2 := \begin{pmatrix} 92.62 \\ 96.4 \\ 77.61 \\ 82.8 \\ 94.95 \\ 97.93 \\ 82.75 \\ 90.09 \end{pmatrix}$$

Розрахунок коефіцієнтів регресії:

$$F := \text{augment}(Y1, Y2) \quad M := \text{augment}(M0, M1, M2, M3, M12, M13, M23) \quad i := 0..7$$

$$B := (M^T \cdot M)^{-1} \cdot M^T \cdot C \quad G := \sum_{j=0}^1 \frac{F_{i,j}}{2}$$

Коефіцієнти регресії:

$$B = \begin{pmatrix} 90.359 \\ -1.859 \\ 5.284 \\ -2.591 \\ 0.566 \\ 0.191 \\ 1.084 \end{pmatrix}$$

Знаходження порядкових дисперсій:

$$S_i := \frac{1}{m-1} \cdot \left[(Y1_i - G_i)^2 + (Y2_i - G_i)^2 \right]$$

$$S = \begin{pmatrix} 0.157 \\ 2.122 \\ 5.712 \\ 0.98 \\ 1.445 \\ 0.65 \\ 21.125 \\ 3.976 \end{pmatrix}$$

Перевірка однорідності дисперсій:

$$SS := \sum S \quad S_{\max} := \max(S) \quad K := 0.679$$

(Табличне значення критерію Кохрена,

обирається відповідно до додатку А)

$$f_1 := m - 2$$

$$f_2 := N - 2$$

$$G_p := \frac{S_{\max}}{SS}$$

$$Kochren := \begin{cases} 1 & \text{if } G_p < K \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$K = 0.679$$

$$Kochren = 1$$

Якщо $Kochren=1$, то гіпотеза про однорідність дисперсій приймається, якщо $Kochren=0$ - не приймається.

Перевірка значимості коефіцієнтів регресії:

$T_t := 2.31$ (Табличне значення критерю Стьюдента, обирається відповідно до додатку А)

$$S_o := \frac{\sum s}{N} \quad S_o = 4.521 \quad \text{помилка досліду}$$

$$i := 0..6 \quad f := N \cdot (m - 1) - 1 \quad f_0 := 0$$

$$\delta_{tab} := T_t \cdot S_o$$

$$S_b := \frac{S_o}{N \cdot m} \quad S_b = 0.283 \quad \text{дисперсія коефіцієнтів регресії}$$

$$S_u := \sqrt{S_b} \quad S_u = 0.532$$

$$B1_i := |B_i|$$

$$t := \frac{B1}{S_u}$$

$$t = \begin{pmatrix} 169.989 \\ 3.497 \\ 9.94 \\ 4.875 \\ 1.065 \\ 0.36 \\ 2.039 \end{pmatrix}$$

Розраховане значення критерія Стьюдента

$$tt_i := \begin{cases} 0 & \text{if } t_i > T_t \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$tt = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad l := 4$$

l - кількість членів рівняння регресії, які залишилися після оцінки значення коефіцієнтів.

Якщо $tt=1$, то коефіцієнт незначимий, якщо $tt=0$ значимий .

Перевірка адекватності рівняння регресії:

$$u := 0..7 \quad d := N - 1$$

$$o := N \cdot (m - 1)$$

$$YY_u := B_0 + B_1 M1_u + B_2 M2_u + B_3 \cdot M3_u \quad \text{Модель із значимими коефіцієнтами}$$

$$Sad := \frac{m \cdot \sum_{u=0}^7 (G - YY_u)^2}{N - 1} \quad \text{Дисперсія адекватності}$$

$$Sad = 6.198$$

$$FF := qF(0.05, o, d)$$

$$Ft := FF^{-1} \quad Ft = 3.838 \quad \text{Табличний критерій Фішера}$$

$$Fp := \frac{Sad}{So} \quad Fp = 1.371 \quad \text{Перевірка адекватності}\newline \text{розраховане значення критерію Фішера}$$

$$R := \begin{cases} 1 & \text{if } Fp < Ft \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad R = 1 \quad \text{Адекватна модель}$$

Якщо $R = 1$ - то модель адекватна,

Якщо $R = 0$ - то не адекватна.

Порівняння результатів:

Дослідне
середнє
значення:

	0
0	92.9
1	95.37
2	79.3
3	83.5
4	95.8
5	98.5
6	86
7	91.5

Розраховане
теоретичне
значення:

	0
0	91.192
1	94.91
2	80.625
3	84.343
4	96.375
5	100.093
6	85.808
7	89.525

$$YY =$$

Модель у кодованій формі

$$y = 90.36 - 1.86x_1 + 5.284x_2 - 2.59x_3$$

Для отримання адекватної статистичної моделі необхідно перейти до значення факторів у натуральних одиницях виміру

$$YY_u = B_0 + B_1 \cdot \frac{z1 - X10}{xx1} + B_2 \cdot \frac{z2 - X20}{xx2} + B_3 \cdot \frac{z3 - X30}{xx3}$$

$$\frac{B_1}{xx1} = -3.717 \quad z1 \quad \frac{B_2}{xx2} = 3.523$$

$$\frac{[-B_1] \cdot X10}{xx1} + \frac{[-B_2] \cdot X20}{xx2} + \frac{[-B_3] \cdot X30}{xx3} + B_0 = 83.155$$

Модель набуває вигляду

$$YY_u = 83,155 - 3,72 \cdot z1 + 3.523z2 - 10.365 \cdot z3$$

Перевірка правильності побудови моделі

в натуральних одиницях виміру

$$z1 := 5.5 \quad z2 := 12.5 \quad z3 := 1.5$$

$$YY_{up} := 83.155 - 3.72 \cdot z1 + 3.523z2 - 10.365 \cdot z3$$

$$YY_{up} = 91.185$$

в кодованій формі

$$YY_u := B_0 + B_1 M1_0 + B_2 M2_0 + B_3 \cdot M3_C$$

$$YY_0 = 91.192$$

Тобто, отримано адекватну статистичну модель.