

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«СЕВАСТОПОЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГИИ И ПРОМЫШЛЕННОСТИ

С.А. Федорова

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Методические указания
по выполнению курсовой работы
по дисциплине

Севастополь
СевГУ
2019

УДК 66.011
Ф33

Р е ц е н з е н т:
А.М. Акимов - д.т.н., профессор

Федорова С.А.
Ф33 Моделирование химико-технологических процессов: метод. указания по выполнению курсовой работы по дисциплине. - Севастополь: СевГУ, 2019. – 32 с.: ил.

Предназначены для студентов 4-го курса очной формы обучения по специальности 18.05.02 - Химическая технология материалов современной энергетики.

Описаны основные этапы выполнения курсовой работы по оптимизации работы химического реактора по трем факторам.

УДК 66.011

Методические указания рассмотрены и утверждены на заседании кафедры "Химические технологии и новые материалы", протокол № 13 от 23 января 2019 г.

© ФГАОУ ВО «Севастопольский
государственный университет», 2019

ОГЛАВЛЕНИЕ

Использование метода крутого восхождения при решении задач оптимизации в химической технологии	4
1. Алгоритм исследования в задачах химической технологии	4
1.1. Формализация априорных данных	5
1.2. Выдвижение гипотезы о структуре модели	5
1.3. Планирование экспериментов	8
1.4. Реализация экспериментов	9
1.5. Проверка гипотезы об адекватности модели	10
2. Статистическая оптимизация технологических объектов. Метод крутого восхождения	13
3. Выполнение работы	15
4. Требования к оформлению работы	31
Список литературы	32

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА КРУТОГО ВОСХОЖДЕНИЯ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Цель работы: использование статистических методов обработки данных и полного факторного эксперимента при решении задач оптимизации химико-технологических процессов.

Работа выполняется с использованием приложения «Оптимизация».

1. Алгоритм исследования в задачах химической технологии

Основные этапы исследования представлены на рис. 1.

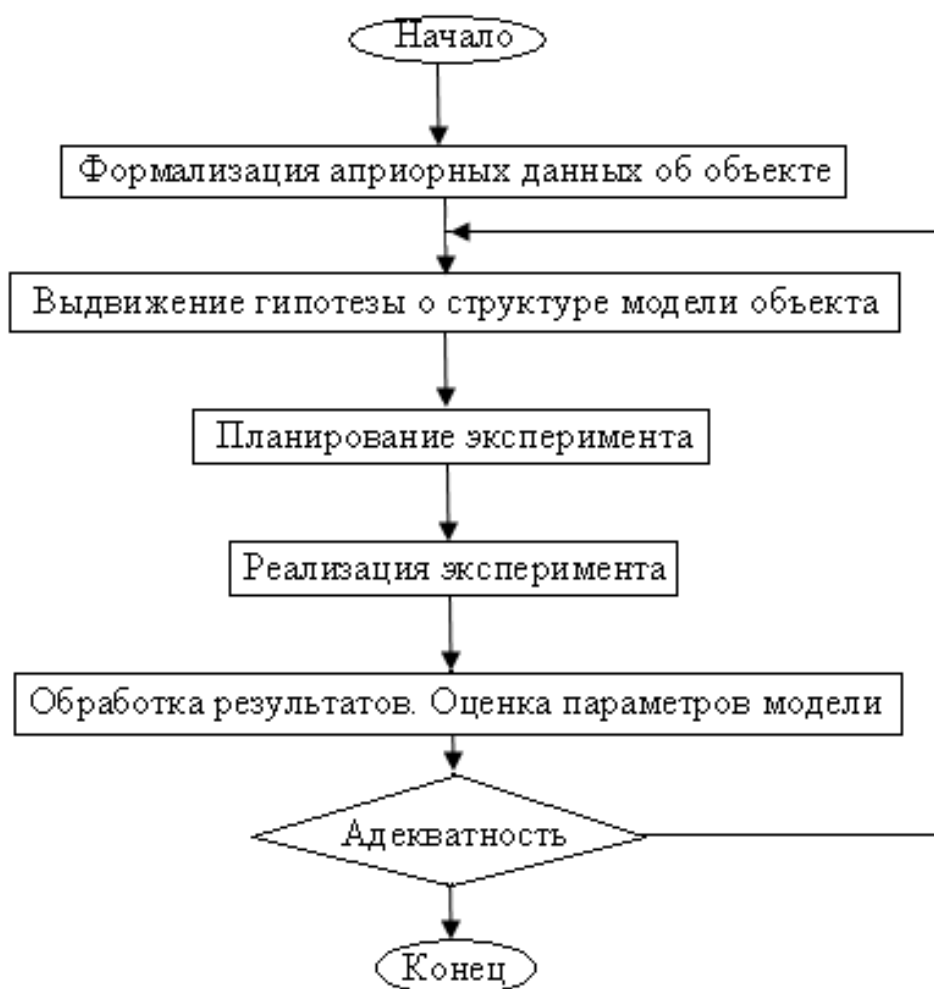


Рисунок 1. Процедура построения модели

1.1. Формализация априорных данных

Исходные данные могут быть либо результатом ранее проводившихся исследований, либо набором накопленных наблюдений, мнением специалистов, их предположением о результатах будущего исследования и т.п. Априорные данные различаются как по степени достоверности, так и объему. При этом, исследуемый технологический объект (рис. 2) рассматривается как объект с большим числом факторов.

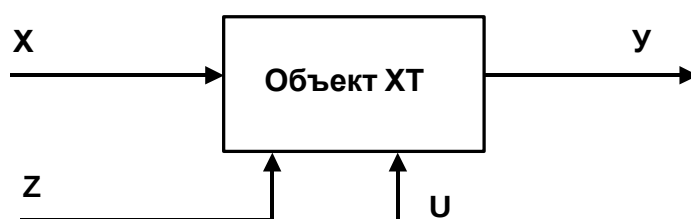


Рисунок 2. Общая схема объекта химической технологии

Задача формализации априорных данных заключается в исследовании ряда формальных приемов, позволяющих определить относительную степень влияния каждого из факторов групп Z и U на группу Y . В результате формализации можно выделить факторы, существенно влияющие на выходные контролируемые параметры.

1.2. Выдвижение гипотезы о структуре модели

На этом этапе принимают решение:

- о количестве факторов (наиболее существенные), которые следует включить в модель,
- о виде зависимости (зависимостей), связывающих эти факторы.

Процесс принятия этих решений не может быть формализован, поскольку зависит от конкретных целей исследования и конкретных данных об объекте исследования.

Чем больше факторов будет включено в модель, тем она будет точнее. Однако, для оценивания параметров модели по мере увеличения числа факторов требуется больше экспериментов. Кроме того, каждый эксперимент связан с материальными и временными затратами, поэтому, исходя из конкретной задачи исследования, стараются снизить размерность модели (иногда этот прием называют *редуцированием*). Так, в исследованиях из группы выходных контролируемых параметров Y в модель включают какой-либо один параметр - наиболее информативный, или формируют комплексный выходной контролируемый параметр, используя для этого соответствующую зависимость. Например, пусть качество готового продукта характеризуется концентрациями двух веществ А и В. Если для производства существенным является соотношение концентраций, то выходной контролируемый параметр можно определить отношением

$$y = \frac{C_A}{C_B},$$

где C_A - концентрация вещества А; C_B - концентрация вещества В.

Группу входных контролируемых факторов целесообразно формировать исходя из результатов этапа формализации априорных данных. При этом, как правило, ограничиваются от одного до пяти факторов, оказывающих наиболее существенное влияние на выходной контролируемый параметр. Выделенные факторы будут включены в модель, остальные - относят к группе неконтролируемых возмущающих факторов Z . Таким образом, на основании вышесказанного, схематическое представление технологического объекта упрощается и приводится к виду, представленному на рис. 3.



Рисунок 3. Упрощенное схематическое представление технологического объекта

Как видно из рис.3, при построении модели мы имеем один выходной контролируемый параметр и несколько входных контролируемых факторов. Действие возмущающих факторов Z приведено к выходу технологического объекта и обозначено ε . Это означает, что если зафиксировать входные контролируемые факторы $x_1, \dots, x_k$, то изменение выходного контролируемого параметра будет полностью определяться действием возмущающих факторов. Таким образом, согласно представленной на рис. 3 схеме в каждом i -м наблюдении будет справедливо соотношение:

$$Y_i = f(x_{i1}, \dots, x_{ik}) + \varepsilon_i, \quad (1)$$

где $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ik}$ - значения входных факторов в i -м наблюдении; y_i - значение выходного контролируемого параметра в i -м наблюдении; ε_i - значение случайного фактора возмущающих воздействий в i -м наблюдении.

В структуре модели (1) присутствуют две составляющие - детерминированная функция $f(x_1, \dots, x_k)$, определяющая вид зависимости y от набора $x_1 \dots x_k$ и случайная составляющая ε .

При принятии решения о виде функциональной зависимости важно знать область изменения факторов $x_1, \dots, x_k$, для которой строим модель. Чем меньше эта область (уже диапазон изменения $x_1, \dots, x_k$), тем больше оснований считать зависимость линейной.

$$f(x_1 \dots x_k) = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_k x_k \quad (2)$$

И наоборот, чем больше область изменения факторов $x_1, \dots, x_k$, для которой необходимо построить модель, тем больше оснований считать модель нелинейной, содержащей составляющие более высокого порядка - второго, третьего и т.д.

В реальных производственных условиях, как правило, интерес представляют модели, описывающие поведение технологического объекта в узких пределах изменения $x_1, \dots, x_k$. Это связано с тем, что модель используется для уже отлаженного процесса и ориентирована, либо на улучшение качества управления процессом, либо на отслеживание изменений условий его реализации. Кроме того, получение оценок параметров нелинейных моделей связано со значительными экспериментальными затратами, поэтому часто предпочитают построить несколько простых моделей для смежных подобластей изменения $x_1, \dots, x_k$, чем одну для всей области.

При формировании гипотезы о структуре модели (виде функции $f(x_1, \dots, x_k)$), следует неизвестные коэффициенты, включаемые в модель, ставить только в первой степени. Нарушение этого правила приводит к резкому ухудшению точности определения оценок этих коэффициентов и, как следствие, качества самой модели.

Так, модель вида $y = \frac{a^2}{c} x_1 + \frac{1}{\sqrt{d}} x_2$ следует представить как $y = b_1 x_1 + b_2 x_2$.

1.3. Планирование экспериментов

Если выдвинута гипотеза о структуре модели $y = f(x_1, x_2)$, то это означает, что указан вид зависимости (выдвинута гипотеза о структуре модели), например, $y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_1^2 + b_4 x_2^2 + b_5 x_1 x_2$.

Дальнейшие действия должны быть направлены на получение оценок неизвестных коэффициентов. Мы можем только оценить эти коэффициенты, т.к. согласно(1) в каждом наблюдении значение выходного контролируемого параметра определяется как значениями факторов $x_1, \dots, x_k$, так и значения случайной составляющей ε . Одним из методов получения оценок является метод активного эксперимента.

При проведении активного эксперимента проводятся наблюдения выходного контролируемого параметра для различных, определенных по соответствующему правилу, значений $x_1, \dots, x_k$. Набор этих значений является планом эксперимента, который реализуется в пространстве факторов $x_1, \dots, x_k$. Количество точек и значение их координат зависит от числа факторов и структуры предполагаемой модели $y = f(x_1, \dots, x_k)$. Так, если выдвигается гипотеза о структуре модели вида $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$, то план эксперимента строится для оценивания трех коэффициентов b_0, b_1, b_2 . В модели вида $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_1x_2$ - оцениваются 4 коэффициента.

Координаты точек плана определяют область эксперимента, т.е. границы области значений факторов, для которой определяется модель. Вне этой области, теоретически моделью пользоваться нельзя.

1.4. Реализация экспериментов

Эксперименты проводятся с соблюдением условий повторяемости и рандомизации.

Первым условием реализации экспериментов является *повторяемость* их в координатах точек, указанных планом. Это позволяет осуществлять ряд статистических процедур, предназначенных для получения обоснованных (в статистическом смысле) выводов о точности получаемой модели и ее адекватности исследуемому объекту.

Вторым условием реализации экспериментов является соблюдение принципа *рандомизации*. Согласно этому принципу эксперименты необходимо реализовывать в случайном порядке, чтобы избежать существенных ошибок в оценках коэффициентов. Такие ошибки могут появиться при действии факторов, не включенных в модель, но оказывающих влияние на выходной контролируемый параметр. Например, действие фактора температуры окружающей среды или фактора старения катализатора могут исказить результаты исследования, однако применение рандомизации позволяет представить в результатах экспериментов действие этих факторов как факторов возмущения. Это отличает метод активного эксперимента от традиционных методов технического (т.е. за счет различных технологических приемов) исключения воздействия неуправляемых факторов. В методе активного эксперимента эти факторы не устраняются, а приводятся к случайным.

На данном этапе, используя аппарат статистической оценки и методы проверки статистических гипотез, определяют:

- воспроизводимость экспериментов,
- значение оценок коэффициентов заданной (гипотетической) модели,
- отличие каждого коэффициента модели от нуля (проверка гипотез о значимости коэффициентов),
 - окончательную структуру модели, полученной по результатам экспериментирования.

1.5. Проверка гипотезы об адекватности модели

Проверка адекватности позволяет подтвердить или отвергнуть гипотезу о структуре модели. Кроме того, на этом этапе можно оценить прогнозируемое значение выходного контролируемого параметра при заданных значения входных факторов. Проверка гипотезы об адекватности модели

заключается в сопоставлении точности прогноза с воспроизводимостью экспериментов. Если модель адекватна, то ее точность полностью определяется точностью наблюдений, т.е. воспроизводимостью.

Если экспериментальные данные противоречат гипотезе об адекватности модели, то возвращаемся ко второму этапу итеративной процедуры построения модели и выдвигаем другую гипотезу о структуре модели. Однако, неадекватность модели может быть вызвана не только неверным выбором структуры, но и другими причинами: низкой воспроизводимостью экспериментов, малостью области экспериментирования и большими погрешностями в реализации входных факторов при проведении экспериментов и т.п.

Если модель адекватна, она может быть использована для прогноза и управления процессом.

Рассмотренная логическая схема построения модели эффективна при выполнении ряда предпосылок.

Для получения несмещенных и эффективных статистических оценок параметров модели необходимо выполнение предпосылок регрессионного анализа:

1. Возмущающее воздействие e должно быть распределено по нормальному закону с нулевым математическим ожиданием и конечной дисперсией. Математически это записывается в виде

$$\varepsilon \in N(0, \sigma_\varepsilon^2) , \quad (3)$$

где N - знак нормального распределения; σ - дисперсия случайной величины e .

2. Возмущающие воздействия должны быть однородны, т.е. иметь одинаковые вероятностные характеристики для любого набора значений

факторов $x_1, \dots, x_n$. В соответствии с предыдущей предпосылкой это означает, что $\sigma = \text{const}$ для любого набора $x_1, \dots, x_n$.

3. Изменение значения e не должно зависеть от предыдущих значений. Для любого $i \neq j$

$$\text{cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0, \quad (4)$$

$\text{cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j)$ - ковариация возмущающих воздействий в i -м и j -м экспериментах; $\varepsilon_i, \varepsilon_j$ - значение возмущений в i -м и j -м экспериментах.

В регрессионном анализе предполагается, что значения факторов $x_1, \dots, x_n$ в эксперименте задаются абсолютно точно. Однако на практике точность эта ограничена погрешностями измерительных приборов. Поэтому, должно выполняться еще одно условие: точность задания факторов $x_1, \dots, x_n$ при реализации эксперимента должна быть существенно (на два - три порядка) выше воспроизводимости (погрешности) эксперимента, определяемой σ_{ε_k} .

Выполнимость перечисленных предпосылок проверяется в процессе обработки результатов эксперимента. Выполнение ряда предпосылок можно добиться применением специальных приемов. Так, для выполнения условия равенства нулю математического ожидания в модель достаточно ввести свободный коэффициент. Например, пусть рассматривается модель

$$y = b_1 x_1 + b_2 x_2 \quad (5)$$

тогда в i -м наблюдении (эксперименте) имеем

$$y_i = b_1 x_{1i} + b_2 x_{2i} + \varepsilon_i, \quad (6)$$

где y_i - значение выходного контролируемого параметра в i -м наблюдении; x_{1i}, x_{2i} - значение входных факторов в i -м наблюдении; b_1, b_2 - коэффициенты; ε_i - значение возмущения в i -м эксперименте.

Для выполнения условия равенства нулю математического ожидания структуру модели надо представить в виде:

$$y_i = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 \quad (7)$$

Очевидно, что при $x_1=0$ и $x_2=0$ $M_\varepsilon = b_0$.

Для выполнения третьей предпосылки регрессионного анализа о независимости возмущающих воздействий можно использовать прием рандомизации экспериментов.

Выполнение предпосылок регрессионного анализа обязательно, ибо на этих предпосылках основаны процедуры оценивания параметров модели и проверки гипотез. В предположении выполняемости этих предпосылок делаются выводы о качестве модели.

2. Статистическая оптимизация технологических объектов.

Метод крутого восхождения

С помощью экспериментально-статистических методов определяют математические модели, которые описывают поведение исследуемого объекта химической технологии в «узком», рабочем диапазоне изменения входных, выходных, управляющих и возмущающих воздействий. Так, мы можем подобрать оптимальный режим работы ионообменника при известных характеристиках катионита (анионита) – его обменной емкостью, и параметрах, характеризующих его работу – фильтроцикл, качества исходной воды – концентрации ионов железа, жесткости, электропроводимости и т.п.

Принято рассматривать задачу оптимизации в двух направлениях:

1. Получить математическую модель для всей области пространства входных факторов, в которой может находиться экстремум. Определить координаты оптимума аналитически или используя численные методы.

2. Используя метод экспериментального поиска определить вероятную область экстремума. Координаты экстремума определяют постепенно сужая эту область.

Первое направление решается достаточно сложно. Сочетая экспериментальные и аналитические методы составления математического описания, задача решается проще и достаточным уровнем надежности получаемых результатов.

В нашей работе используется метод крутого восхождения (метод Бокса и Уилсона). В этом методе сочетается метод градиента с факторным экспериментом. Движение осуществляется в направлении градиента линейного приближения. Это движение по кратчайшему, наиболее крутому пути, поэтому это движение называют «крутым восхождением».

По методу крутого восхождения сначала выбирается некоторая область в пространстве факторов, где ставятся эксперименты для определения параметров модели, описывающей исследуемый объект в этой области. Затем, используя линейную часть модели, определяют составляющие и направление градиента. Движение в направлении градиента (при определении максимума) осуществляется последовательными шагами. Каждый шаг пропорционален произведению соответствующего коэффициента регрессии каждого фактора на значение интервала варьирования по этому фактору при проведении эксперимента. Такое движение осуществляется только из центра области экспериментирования.

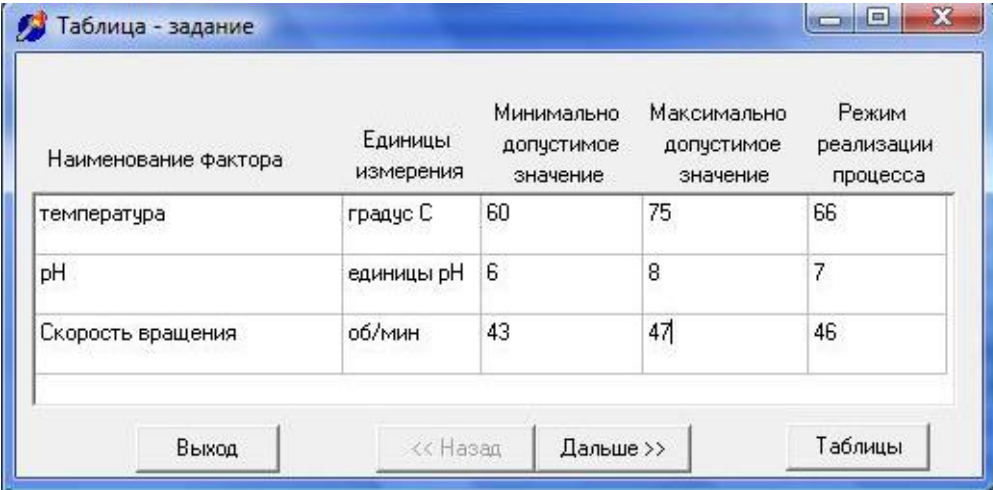
На основании анализа априорной информация делается выбор значений каждого их исследуемых факторов, которые, по мнению экспериментатора, относятся к области оптимума. Они принимаются за основной (нулевой) уровень. Затем выбираем шаг и интервал варьирования каждого фактора. Величину интервала варьирования целесообразно принимать равной 15 - 35 % от основного уровня.

Проводят серию опытов (первый цикл крутого восхождения), в нашем случае, используя вычислительный эксперимент. Результаты анализирую на предмет достижения оптимума. Если оптимальное значение не получено, то вторая серия опытов (второй цикл крутого восхождения) начинается из достигнутой точки частного экстремума, которая принимается за центр плана экспериментирования. Определяем новые уровни и интервалы варьирования. Циклы повторяем до достижения экстремума.

Окончание расчетов определяется значениями полученной математической модели - когда коэффициенты линейной составляющей модели становятся незначимыми.

3. Выполнение работы

Исходные данные. Данные для выполнения работы, полученные у преподавателя, заносят в таблицу исходных данных (рис.4). Исходные данные содержат информацию о трех видах входных управляющих факторах, для которых необходимо провести экспериментально-статистическое исследование и оптимизацию технологического объекта.



Наименование фактора	Единицы измерения	Минимально допустимое значение	Максимально допустимое значение	Режим реализации процесса
температура	градус С	60	75	66
pH	единицы pH	6	8	7
Скорость вращения	об/мин	43	47	46

Рисунок 4. Исходные данные для решения задачи оптимизации

По каждому из факторов в таблице приведены наименование, едини-

цы измерения, область допустимых значений и значение, при котором осуществляется реализация процесса (исходный рабочий режим). Выходным контролируемым параметром исследуемого процесса является концентрация конечного продукта А (процентная концентрация).

Дальнейшее исследование предполагает реализацию эксперимента для получения уравнения регрессии (модели), связывающего концентрацию продукта А со значениями факторов, указанных в таблице-задании. Эксперименты реализуются в области, центром которой является режим процесса. По полученной модели необходимо определить возможность повышения концентрации продукта реакции изменением режима процесса. Используя метод крутого восхождения, определить параметры режима, при которых обеспечивается максимальный выход продукта.

Определение плана эксперимента. План эксперимента представляет собой набор значений входных факторов, при которых исследователь выполняет наблюдения выходного контролируемого параметра. Количество различных значений факторов, их координаты зависят в первую очередь от структуры модели, которую предполагает исследователь. Очевидно, что чем больше гипотетическая модель отличается от линейной, тем больше различных значений должен принимать каждый фактор при реализации эксперимента. В практике исследования технологических объектов широкое распространение получили эксперименты, в плане которых каждый фактор имеет только два различных значения - два уровня. При этом эксперименты, реализующие все возможные сочетания уровней факторов, называются полными факторными экспериментами. Для случая трех факторов имеет план с числом точек равным 8 (2^3). План данного типа пригоден для получения независимых оценок коэффициентов регрессионной модели следующего общего вида:

$$y_i = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_1x_2 + b_5x_1x_3 + b_6x_2x_3 \quad (8)$$

Квадраты значений факторов в этом полиноме третьей степени отсутствуют. Модель условно состоит из двух частей: линейной $b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3$ и оставшейся $b_4x_1x_2 + b_5x_1x_3 + b_6x_2x_3$ нелинейной части. Очевидно, что чем больше область изменения входных факторов, для которой оцениваются коэффициенты модели, тем больше оснований предполагать существенным влияние нелинейной составляющей модели. Наоборот, чем меньше область эксперимента, тем меньше влияние нелинейной части.

Этими рассуждениями руководствуются при выборе интервалов варьирования факторов. Интервалом варьирования факторов называется некоторое число (свое для каждого фактора), прибавление которого к основному уровню дает верхний, и вычитание - нижний уровни фактора. При этом за основной уровень каждого фактора принимается координата, соответствующая центру области экспериментирования. Итак, чем меньше интервалы варьирования, тем больше предпосылок для линейности модели. Однако, значение интервала варьирования по каждому из факторов ограничено снизу, в первую очередь, погрешностями приборов и устройств, с помощью которых измеряются и устанавливаются значения факторов при экспериментировании. Обычно на практике используют относительную погрешность приборов и устройств.

Относительно верхней границы интервала варьирования четких рекомендаций нет. Однако рекомендуется ограничить его 5-7% от области (интервала) допустимых значений по каждому фактору.

Определение верхней и нижней границы по каждому фактору приведено на рис. 5.

Таблица значений факторов при экспериментировании

$\Delta_1 = 0.05 \quad (X_i^B - X_i^H) = 0.75 \quad \text{Диапазон } [0.05 \div 0.07]$
 $\Delta_2 = 0.05 \quad (X_i^B - X_i^H) = 0.1 \quad \text{Диапазон } [0.05 \div 0.07]$
 $\Delta_3 = 0.05 \quad (X_i^B - X_i^H) = 0.2 \quad \text{Диапазон } [0.05 \div 0.07]$

Таблица значений факторов при экспериментировании

№/№	Наименование фактора	Един. изм.	Нижний уровень	Верхний уровень
1	температура	градус С	65.25	66.75
2	рН	единицы рН	6.9	7.1
3	Скорость вращения	об/мин	45.8	46.2

Выход << Назад Далее >> Персчёт

Рисунок 5. Таблица значений факторов при экспериментировании

Полученный результат вводим в таблицу значений, принимаемых факторами при экспериментировании (рис. 6).

Таблица значений факторов при экспериментировании

№/№	Наименование фактора	Един. изм.	Нижний уровень	Верхний уровень
1	температура	градус С	65.25	66.75
2	рН	единицы рН	6.9	7.1
3	Скорость вращения	об/мин	45.8	46.2

Выход << Назад Далее >> Таблицы

Рисунок 6. Таблица значений факторов при экспериментировании

Перед реализацией эксперимента необходимо определить количество повторений экспериментов в каждой точке плана (число дублирующих опытов) и провести рандомизацию экспериментов.

Повторяемость экспериментов необходима как для определения точностных характеристик получаемой модели, так и для проверки ее адекватности. В каждой точке плана рекомендуется выполнять не более двух-трех экспериментов.

В нашем исследовании количество повторений равно двум. Отсюда следует, что общее число экспериментов, которое необходимо провести, равно 16. Эти 16 экспериментов должны реализовываться в случайном порядке, для определения которого используют прием рандомизации.

Рандомизацию экспериментов осуществляют с помощью специальной таблицы - таблицы случайных чисел. Ниже приведен фрагмент таблицы случайных чисел (таблица 1).

Т а б л и ц а 1

Фрагмент таблицы случайных чисел

1	2	3	4	5	6	7	8	9
1534	7106	2836	7873	5574	7545	7590	5573	1203
6128	8993	4102	2551	0303	2358	6427	7067	9325
6047	8566	8644	9343	9237	6175	3500	8754	2913
0806	5201	5705	7355	1448	9562	7514	9205	0402
9915	8274	4525	5695	5725	9640	7172	6988	0227
2882	7158	4341	5786	1178	1173	0670	0820	3463
9213	1223	4388	9760	6691	6861	8214	8813	0611
8410	9836	3899	3683	1253	1683	6988	9979	8026
9974	2362	2103	4326	3825	9079	6187	2721	1489

Рандомизацию следует проводить следующим образом: в таблице случайных чисел выбирается некоторый столбец (выбор тоже может быть случайным), из которого в порядке их следования выбираются числа от 1 до числа равного числу экспериментов. В нашем случае числа от 1 до 16. Если встречается уже выбранное число, то оно отбрасывается. Выберем

для нашего случая первый столбец. Уже первое число 1534 дает последовательность случайных чисел 1, 5, 3, 4, либо 15, 3, 4. Остановимся на последней, и вообще, договоримся, что как только встретится сочетание двух цифр, обозначающих число от 10 до 15, то сразу же мы его включаем в нашу последовательность. Итак, имеем 15, 3, 4, далее по столбцу: 6, 12, 8, 7, 9, 1, 5, 2, 13, 10. Остались числа 11, 14, и 16, поэтому переходим к следующим столбцам. Получаем: 14 (столбец 5, 4-я строка сверху), 11 (там же, 4-я строка снизу), 16.

Таким образом, наша последовательность следующая: 15, 3, 4, 6, 12, 8, 7, 9, 1, 5, 2, 13, 10, 14, 11, 16. Эта последовательность заносится в таблицу реализации экспериментов (рис. 7).

Результат			
Концентрация			
№ Пор.	значен.	№ Пор.	значен.
15		1	
3		5	
4		2	
6		13	
12		10	
8		14	
7		11	
9		16	

Фрагмент таблицы случайных элементов								
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)
1534	7106	2836	7873	5574	7545	7590	5573	1203
6128	8993	4102	2551	0303	2358	6427	7067	9325
6047	8566	8644	9343	9237	6751	3500	8754	2913
0806	5201	5705	7355	1448	9562	7514	9205	0402
9915	8274	4525	5695	5725	9640	7172	6988	0227
2882	7158	4341	5786	1178	1173	0607	0802	3463
9213	1223	4388	9760	6691	6861	8214	8813	0611
8410	9836	3899	3683	1253	1683	6988	9979	8026
9974	2362	2103	4326	3825	9079	6187	2721	1489

Рисунок 7. Рандомизация экспериментов

В полных факторных экспериментах для упрощения записи условий проведения каждого эксперимента (опыта) и обработки результатов выполняют нормирование значений каждого фактора таким образом, чтобы верхний уровень соответствовал +1, нижний -1, а основной - нулю. Нормировка осуществляется по формуле

$$X_j = \frac{x_j - x_{j0}}{h_j} \quad (9)$$

где x_{j1} - нулевой уровень; h_j - интервал варьирования; x_j - значение фактора; j - номер фактора.

В безразмерной системе координат x_{j0} принимает значение 0, верхний уровень $x_{j0}+h_j=x_{jв}$ - значение +1, нижний уровень $x_{j0}-h_j=x_{jn}$ - значение - 1.

Метод полного факторного эксперимента дает возможность получить математическое описание исследуемого процесса в некоторой локальной области факторного пространства, лежащей в окрестности выбранной точки с координатами $(x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0n})$.

В нормированных переменных координаты точек в плане эксперимента записываются в виде таблицы (рис. 8).

Таблица реализации экспериментов										
План эксперимента							Результат			
температура			pH		Скорость вращения		Концентрация			
№/№	Код	значен.	Код	значен.	Код	значен.	№ Пор.	значен.	№ Пор.	значен.
1	+1	66.75	+1	7.1	+1	46.2	15		1	
2	+1	66.75	+1	7.1	-1	45.8	3		5	
3	+1	66.75	-1	6.9	+1	46.2	4		2	
4	+1	66.75	-1	6.9	-1	45.8	6		13	
5	-1	65.25	+1	7.1	+1	46.2	12		10	
6	-1	65.25	+1	7.1	-1	45.8	8		14	
7	-1	65.25	-1	6.9	+1	46.2	7		11	
8	-1	65.25	-1	6.9	-1	45.8	9		16	

Фрагмент таблицы случайных элементов								
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)
1534	7106	2836	7873	5574	7545	7590	5573	1203
6128	8993	4102	2551	0303	2358	6427	7067	9325
6047	8566	8644	9343	9237	6751	3500	8754	2913
0806	5201	5705	7355	1448	9562	7514	9205	0402
9915	8274	4525	5695	5725	9640	7172	6988	0227
2882	7158	4341	5786	1178	1173	0607	0802	3463
9213	1223	4388	9760	6691	6861	8214	8813	0611
8410	9836	3899	3683	1253	1683	6988	9979	8026
9974	2362	2103	4326	3825	9079	6187	2721	1489

Рисунок 8. Составление плана эксперимента

В левой части таблицы представлен план эксперимента, записанный как в нормированных, так и в натуральных значениях входных факторов. Эта часть таблицы заполняется на основании таблицы значений факторов при экспериментировании (рис.6). Как следует из таблицы, первым должен выполняться эксперимент при следующих значениях факторов: темпера-

тура - 66,75 °; pH - 7,1; скорость вращения - 46,2 об/мин. Для определения воспроизводимости при этих условиях проводим два параллельных опыта (1-й и 15-й).

Затем проводим вычислительный эксперимент (нажимаем кнопку «Далее») и получаем результаты наблюдений (рис. 9). Таким образом, для параллельных опытов (1-го и 15-го) концентрация продукта на выходе составила: 177,3 г/л (первый опыт) и 186,2 г/л (второй опыт).

Таблица реализации экспериментов											
План эксперимента							Результат				
температура			pH		Скорость вращения		Концентрация				
№/№	Код	значен.	Код	значен.	Код	значен.	№ Пор.	значен.	№ Пор.	значен.	
1	+1	66.75	+1	7.1	+1	46.2	15	177.3	1	186.2	
2	+1	66.75	+1	7.1	-1	45.8	3	175.7	5	184.5	
3	+1	66.75	-1	6.9	+1	46.2	4	173.2	2	181.9	
4	+1	66.75	-1	6.9	-1	45.8	6	171.7	13	180.3	
5	-1	65.25	+1	7.1	+1	46.2	12	175.8	10	184.6	
6	-1	65.25	+1	7.1	-1	45.8	8	174.2	14	182.9	
7	-1	65.25	-1	6.9	+1	46.2	7	171.7	11	180.3	
8	-1	65.25	-1	6.9	-1	45.8	9	170.2	16	178.7	

Фрагмент таблицы случайных элементов

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)
1534	7106	2836	7873	5574	7545	7590	5573	1203
6128	8993	4102	2551	0303	2358	6427	7067	9325
6047	8966	8644	9343	9237	6751	3500	8754	2913
0806	5201	5705	7355	1448	9562	7514	9205	0402
9915	8274	4525	5695	5725	9640	7172	6988	0227
2882	7158	4341	5786	1178	1173	0607	0802	3463
9213	1223	4388	9760	6691	6861	8214	8813	0611
8410	9836	3899	3683	1253	1683	6988	9979	8026
9974	2362	2103	4326	3825	9079	6187	2721	1489

Выход

<< Назад

Дальше >>

Таблицы

Рисунок 9. Реализация вычислительного эксперимента

Построение модели процесса. Обработка экспериментальных данных. При обработке экспериментальных данных выполняются расчеты, необходимые для проверки гипотезы о значимости полученных оценок коэффициентов модели (уравнение регрессии), гипотезы об адекватности модели.

1. Расчет оценок дисперсии воспроизводимости эксперимента в каждой точке плана проводя по формуле

$$S_i^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (y_{i1} - \bar{y}_i)^2 \quad (10)$$

где S_i^2 - оценка дисперсии воспроизводимости в i -й точке плана; m - число повторений экспериментов в каждой точке плана; y_{i1} - значение выходного контролируемого параметра в 1-м эксперименте в i -й точке плана; $\bar{y}_i$ - оценка математического ожидания выходного контролируемого параметра в i -й точке плана.

Расчетные формулы приведены на рис. 10. y_{11} и y_{21} – значения выходного параметра для первого опыта вычислительного эксперимента (рис.9.).

Расчет оценок дисперсии воспроизводимости эксперимента

$m = 2$

$$S_1^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (y_{i1} - \bar{y}_1)^2 =$$

$$\bar{y}_1 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m y_{i1} =$$

Ввод значен. :

$y_{11} =$

$y_{21} =$

Выход << Назад Дальше >>

Рисунок 10. Расчет оценок воспроизводимости эксперимента

Расчет выполняется для каждой пары параллельных измерений при одинаковых значениях факторов. Результаты вычислений представлены на рис.11.

Расчет оценок дисперсии воспроизводимости эксперимента

$m = 2$

$$S_8^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{l=1}^m (y_{8l} - \bar{y}_8)^2 = 36.13$$

$$\bar{y}_8 = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^m y_{8l} = 174.45$$

Ввод значен. :

$y_{18} =$

$y_{28} =$

$\bar{y}_1 = 181.75$	$S_1^2 = 39.61$	$\bar{y}_5 = 180.2$	$S_5^2 = 38.72$
$\bar{y}_2 = 180.1$	$S_2^2 = 38.72$	$\bar{y}_6 = 178.55$	$S_6^2 = 37.85$
$\bar{y}_3 = 177.55$	$S_3^2 = 37.85$	$\bar{y}_7 = 176$	$S_7^2 = 36.98$
$\bar{y}_4 = 176$	$S_4^2 = 36.98$	$\bar{y}_8 = 174.45$	$S_8^2 = 36.13$

Выход
<< Назад
Дальше >>

Рисунок 11. Расчетные значения оценки дисперсии и воспроизводимости

Для того чтобы сделать вывод о воспроизводимости используют критерий Кохрена. Результаты расчетов приведены на рис. 12.

Оценка дисперсии воспроизводимости

$$G = S_{i \max}^2 / \sum S_i^2 = 0.1308$$

$$S_\epsilon^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^2 = 37.85$$

$\tilde{X}_{ij}$			$\bar{Y}_i$
+1	+1	+1	181.75
+1	+1	-1	180.1
+1	-1	+1	177.55
+1	-1	-1	176
-1	+1	+1	180.2
-1	+1	-1	178.55
-1	-1	+1	176
-1	-1	-1	174.45

Выход
<< Назад
Дальше >>
Таблицы

Рисунок 12. Оценка дисперсии воспроизводимости

Далее следует вычислить и оценить коэффициенты модели линейной и нелинейной части структуры. Последовательность операций для оценки коэффициентов линейной части математической модели приведена на рис. 13. Значения x_{11} , x_{12} , x_{13} , x_{14} , x_{15} , x_{16} , x_{17} , x_{18} – берутся согласно таблице рис.12 (столбец 1).

Оценка коэффициентов модели

$$\hat{b}_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{y}_i$$

$$\hat{b}_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{y}_i \tilde{x}_{ii}$$

$$\hat{b}_{ik} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{y}_i \tilde{x}_{ik}$$

$$t_i = \frac{|\hat{b}_i|}{S(b)}; \quad t_{ik} = \frac{|\hat{b}_{ik}|}{S(b)}$$

$$S(b) = \sqrt{S_e^2 / (N \cdot m)}$$

$$\hat{b}_1 = \frac{1}{8} (\quad) = \quad t_1 = \quad$$

x11	y1	x12	y2	x13	y3	x14	y4	x15	y5	x16	y6	x17	y7	x18	y8
1	181.75	1	180.1	1	177.55	1	176	-1	180.2	-1	178.55	-1	176	-1	174.45

Рисунок 13. Заполнение таблицы для расчета и оценки коэффициентов линейной части математической модели

Итоговая таблица приведена на рис. 14.

Оценка коэффициентов модели

$$\hat{b}_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{y}_i$$

$$\hat{b}_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{y}_i \tilde{x}_{ii}$$

$$\hat{b}_{ik} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{y}_i \tilde{x}_i \tilde{x}_k$$

$$t_i = \frac{|\hat{b}_i|}{S(b)}; t_{ik} = \frac{|\hat{b}_{ik}|}{S(b)}$$

$$S(b) = \sqrt{S_\varepsilon^2 / (N \cdot m)}$$

$$\hat{b}_1 = \frac{1}{8} (1 \cdot 181.75 + 1 \cdot 180.1 + 1 \cdot 177.55 + 1 \cdot 176 - 1 \cdot 180.2 - 1 \cdot 178.55 - 1 \cdot 176 - 1 \cdot 174.45) \cdot 0.78 \quad t_1 = 0.50$$

$$\hat{b}_2 = \frac{1}{8} (1 \cdot 181.75 + 1 \cdot 180.1 - 1 \cdot 177.55 - 1 \cdot 176 + 1 \cdot 180.2 + 1 \cdot 178.55 - 1 \cdot 176 - 1 \cdot 174.45) \cdot 2.08 \quad t_2 = 1.35$$

$$\hat{b}_3 = \frac{1}{8} (1 \cdot 181.75 - 1 \cdot 180.1 + 1 \cdot 177.55 - 1 \cdot 176 + 1 \cdot 180.2 - 1 \cdot 178.55 + 1 \cdot 176 - 1 \cdot 174.45) \cdot 0.80 \quad t_3 = 0.52$$

X31	Y1	X32	Y2	X33	Y3	X34	Y4	X35	Y5	X36	Y6	X37	Y7	X38	Y8
1	181.75	-1	180.1	1	177.55	-1	176	1	180.2	-1	178.55	1	176	-1	174.45

<< Назад
Дальше >>

Выход

<< Назад
Дальше >>
Таблицы

Рисунок 14. Расчет коэффициентов линейной части математической модели

Последовательность операций для расчета и оценки коэффициентов нелинейной части математической модели приведена на рис. 15.

Оценка коэффициентов модели

$$\hat{b}_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{y}_i$$

$$\hat{b}_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{y}_i \tilde{x}_{ii}$$

$$\hat{b}_{ik} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{y}_i \tilde{x}_i \tilde{x}_k$$

$$t_i = \frac{|\hat{b}_i|}{S(b)}; t_{ik} = \frac{|\hat{b}_{ik}|}{S(b)}$$

$$S(b) = \sqrt{S_\varepsilon^2 / (N \cdot m)}$$

$$\hat{b}_{12} = \frac{1}{8} ($$

$$) =$$

$$t_{12} =$$

Y1	Y2	Y3	Y4	Y5	Y6	Y7	Y8
181.75	180.1	177.55	176	180.2	178.55	176	174.45

X1	X2
1	1
1	1
1	-1
1	-1
-1	1
-1	1
-1	-1
-1	-1

<< Назад
Дальше >>

Выход

<< Назад
Дальше >>
Таблицы

Рисунок 15. Заполнение таблицы для расчета и оценки коэффициентов нелинейной части математической модели

Итоговая таблица приведена на рис. 16.

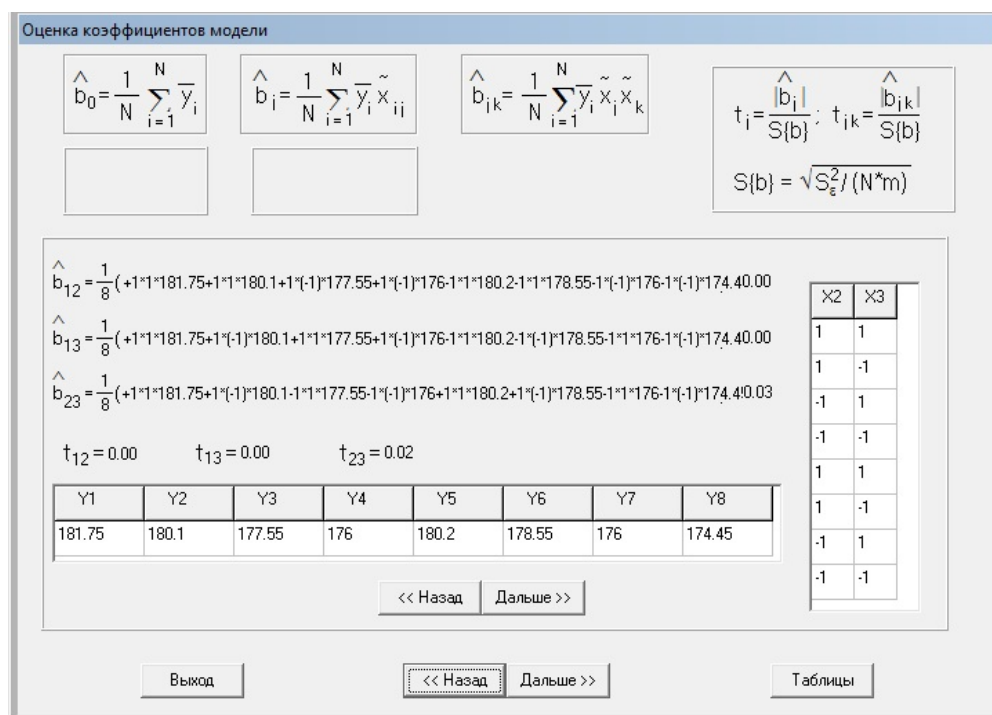


Рисунок 16. Расчет и оценка коэффициентов нелинейной части математической модели

Критическое значение t-статистики определяют по таблице Стьюдента (рис.17).

Оценка коэффициентов модели

$$\hat{b}_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{y}_i$$

$$\hat{b}_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{y}_i \tilde{x}_{ii}$$

$$\hat{b}_{ik} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{y}_i \tilde{x}_{ik}$$

$$t_i = \frac{|\hat{b}_i|}{S\{b\}}; \quad t_{ik} = \frac{|\hat{b}_{ik}|}{S\{b\}}$$

$$S\{b\} = \sqrt{S_e^2 / (N \cdot m)}$$

Определите критическое значение t-статистики:

см. Таблицу распределения Стьюдента

Выход << Назад Далее >> Таблицы

Рисунок 17. Критическое значение t-статистики

По результатам вычислений формируется таблица оценок коэффициентов модели (рис. 18).

Таблица оценок коэффициентов модели

Оценка коэффиц.	Значение оценки	Значение t-статистики	t _{кр}	Результат проверки гипотезы
b ₀	178.08	115.78	2.32	
b ₁	0.78	0.50	2.32	
b ₂	2.08	1.35	2.32	
b ₃	0.80	0.52	2.32	
b ₁₂	0.00	0.00	2.32	
b ₁₃	0.00	0.00	2.32	
b ₂₃	0.03	0.02	2.32	

$$y =$$

$$S_{ад}^2 = \frac{1}{N-d} \sum_{i=1}^N m (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2 =$$

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{\epsilon}^2} =$$

Выход << Назад Далее >> Таблицы

Рисунок 18. Таблица оценок коэффициентов модели

Приступаем к построению таблицы крутого восхождения. (рис. 19, 20).

Таблица крутого восхождения

$$\delta_i = \hat{b}_i \Delta_i$$

$$\delta_1 = 0.78 * 0.75 = 0.585$$

$$\delta_2 = 2.08 * 0.1 = 0.208$$

$$\delta_3 = 0.80 * 0.2 = 0.16$$

$$\delta_0 = 0.78$$

$$\lambda_6 = 0.5 * 0.75 = 0.375 \quad \text{Диапазон } [0.3 \div 1.0]$$

$$\lambda_i = \frac{\delta_i}{|\delta_0|} \lambda_6$$

$$\lambda_1 = 0.28$$

$$\lambda_2 = 0.10$$

$$\lambda_3 = 0.08$$

Выход << Назад Далее >>

Рисунок 19. Расчет λ_i для построения таблицы крутого восхождения

Таблица крутого восхождения									
Модель :									
Вариант №		Факторы			Результат				
Название		температура	pH	Скорость вращения	Концентрация продукта А				
Начальная точка		66	7	46					
Рабочий шаг									
Номер шага	Тип эксперимента				По модели	Эксперименты		Сред.	
					$\hat{y}$	y_1	y_2	$\bar{y}$	
1		66.28	7.10	46.08	0.00	185.22	176.4	180.81	
2		66.56	7.20	46.15	0.00	187.95	179.0	183.475	
3		66.84	7.30	46.23	0.00	190.68	181.6	186.14	
4		67.13	7.40	46.31	0.00	193.515	184.3	188.9075	
5		67.41	7.50	46.38	0.00	196.35	187.0	191.675	
6		67.69	7.60	46.46	0.00	199.185	189.7	194.4425	
7		67.97	7.70	46.54	0.00	202.02	192.4	197.21	
8		68.25	7.80	46.62	0.00	204.96	195.2	200.08	

Выход

<< Назад

Дальше >>

Рисунок 20. Построение таблицы крутого восхождения

По итогам работы (рис. 20) формируется файл результатов (рис. 22).

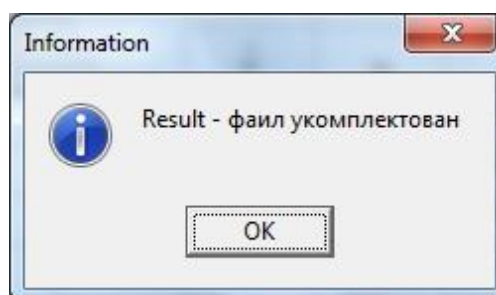


Рисунок 21. Информационное сообщение окончания работы

Если оптимум не достигнут, то расчет повторяется. При этом результаты расчетов следует пересохранить с другим именем, поскольку следующий расчет будет заноситься в этот же файл с заменой информации.

Таблица - задание

температура	градус С	60	75	66
pH	единицы pH	6	8	7
Скорость вращения	об/мин		43	47 46

Delta1 = 0.75
Delta2 = 0.1
Delta3 = 0.2

Таблица значений факторов при экспериментировании

1	температура	градус С	65.25	66.75
2	pH	единицы pH	6.9	7.1
3	Скорость вращения	об/мин	45.8	46.2

Таблица реализации экспериментов

1	+1	66.75	+1	7.1	+1	46.2	15	177.3	1	186.2
2	+1	66.75	+1	7.1	-1	45.8	3	175.7	5	184.5
3	+1	66.75	-1	6.9	+1	46.2	4	173.2	2	181.9
4	+1	66.75	-1	6.9	-1	45.8	6	171.7	13	180.3
5	-1	65.25	+1	7.1	+1	46.2	12	175.8	10	184.6
6	-1	65.25	+1	7.1	-1	45.8	8	174.2	14	182.9
7	-1	65.25	-1	6.9	+1	46.2	7	171.7	11	180.3
8	-1	65.25	-1	6.9	-1	45.8	9	170.2	16	178.7

Таблица оценок коэффициентов модели

178.08	115.78	2.32	Значим
0.78	0.50	2.32	Незначим
2.08	1.35	2.32	Незначим
0.80	0.52	2.32	Незначим
0.00	0.00	2.32	Незначим
0.00	0.00	2.32	Незначим
0.03	0.02	2.32	Незначим

Таблица крутого восхождения

66.28	7.10	46.08	0.00	185.22	176.4	180.81
66.56	7.20	46.15	0.00	187.95	179.0	183.475
66.84	7.30	46.23	0.00	190.68	181.6	186.14
67.13	7.40	46.31	0.00	193.515	184.3	188.9075
67.41	7.50	46.38	0.00	196.35	187.0	191.675
67.69	7.60	46.46	0.00	199.185	189.7	194.4425
67.97	7.70	46.54	0.00	202.02	192.4	197.21
68.25	7.80	46.62	0.00	204.96	195.2	200.08
68.53	7.90	46.69	0.00	207.795	197.9	202.8475
68.81	8.00	46.77	0.00	210.735	200.7	205.7175
69.09	8.10	46.85	0.00	213.57	203.4	208.485
69.38	8.20	46.92	0.00	216.51	206.2	211.355
69.66	8.30	47.00	0.00	219.45	209.0	214.225
69.94	8.40	47.08	0.00	222.39	211.8	217.095
70.22	8.50	47.15	0.00	225.33	214.6	219.965
70.50	8.60	47.23	0.00	228.375	217.5	222.9375

Рисунок 22. Файл Result

В отчете приводятся все итоговые расчеты и конечное уравнение, которое описывает оптимальные условия получения целевого продукта с приведением значений факторов.

4. Требования к оформлению работы

1. Работа выполняется шрифтом Times New Roman, кегль 14, интервал полуторный, абзац 1 см, поля – сверху, снизу, справа, слева по 2,5 см, выравнивание – по ширине. Заголовки – жирным шрифтом, выравнивание посередине.

2. Содержание работы:

титульный лист,

задание,

оглавление,

введение,

глава 1. Использование численных методов при решении задач химической технологии,

глава 2. Использование метода крутого восхождения для оптимизации химико-технологических процессов,

глава 3. Определени опимальных значений физико-химических параметров работы химического реактора,

выводы,

список литературы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Методические указания для изучения раздела «Оценка эффективности СМО на основе экстремального эксперимента» по дисциплине «Теория систем» для магистров очной и заочной форм обучения по специальности 09.04.01 «Информатика и вычислительная техника» / Сост.: И.А. Балакирева. – Севастополь: Изд-во СевГУ, 2016. – 24с. <https://lektsii.org/10-61349.html>
2. Гринфельд Г.М. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии: конспект лекций / Г.М. Гринфельд, А.В. Моисеев. – Комсомольск-на-Амуре: ФГБЦУ ВПО «КНАГТУ», 2014. – 76с.
3. Метод крутого восхождения <https://studall.org/all-182187.html>
4. Метод крутого восхождения <https://studfiles.net/preview/4288036/>
5. Метод крутого восхождения (Метод Бокса-Уилсона) https://studopedia.ru/19_273465_metod-krutogo-voshozhdeniya-metod-boksa-uilsona.html.

Федорова Светлана Александровна

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Методические указания

В авторской редакции

Изд. № 44/19. Объем 2 п.л.
РИИЦМ ФГАОУ ВО "Севастопольский государственный университет"