МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Український державний університет науки і технологій

Кафедра «Покриттів, композиційних матеріалів і захисту металів»

В авторській редакції

ОПТИМІЗАЦІЯ КОРОЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ

Навчально-методичні рекомендації
до проведення практичних занять

Електронне видання

ДНІПРО
2024

УДК 669.018.8:621.78(076.5)
О 62

Упорядник:
І. В. Голуб

Електронне видання

Схвалено Групою забезпечення якості освітньої
програми 136 «Захист металів від корозії»
Протокол № 8 від 14.02.2024 р.

О 62 Оптимізація корозійних процесів : навчально-методичні рекомендації до проведення практичних занять / упоряд: І. В. Голуб ; Укр. держ. ун-т науки і технологій. – Електрон. вид. – Дніпро : УДУНТ, 2024. – 49 с.

Навчально-методичні рекомендації розроблені з метою навчання студентів вирішувати практичні задачі. В методичних рекомендаціях наведені приклади рішення задач оптимізації та завдання для самовирішення.

Методичні рекомендації призначені для студентів спеціальності 136 – металургія ОПП «Захист металів від корозії» (магістерський рівень) денної та заочної форм навчання.

ЗМІСТ

ВСТУП

Сучасний рівень розвитку промисловості обумовлює необхідність оптимізації виробництва, розробки високоефективних та економічних процесів, створення нових матеріалів і продуктів.

Застосування методів математичного моделювання є ефективним інструментом для аналізу і керування корозійними процесами, оптимізації параметрів виготовлення матеріалів, створення матеріалів різного призначення, дослідження властивостей об’єктів та організації процесу виробництва.

Метою курсу оптимізація корозійних процесів є не тільки навчити набору стандартних рішень, а ще й навчити думати, аналізувати завдання, вміти шукати рішення та оцінювати їх результати. Тоб то маючи інформацію про мету, вихідні речовини, набір обмежень, можливу сукупність впливів на систему, сформулювати приватні та загальні критерії оптимізації та знайти «найкращий із можливих» варіантів рішення використав найефіктівніші методи вирішення завдання.

ПРАКТИЧНА РОБОТА 1

Матриці. Матричні операції та застосування матриць. Пошук оптимального значення функції на відрізку.

1. *Матриці. Матричні операції та застосування матриць*

Значну частина математичних моделей різних об’єктів і процесів можно записати в матричній формі:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} = (a_{ij}) \tag{1.1}$$

де $i = 1, \ldots, m$; $j = 1\ldots,n$.

Матриця, складена з одного рядка, має назву матриця (вектор) - рядок:

$$A = (a_{11} \quad a_{12} \quad \cdots \quad a_{1n}) \tag{1.2}$$

а з одного стовбця – матриця (вектор) - стовбець:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \cdots \\ a_{m1} \end{pmatrix} \tag{1.3}$$

1.1 Операція з матрицями

а) транспонування

Транспонованою називається матриця A^T , в якій стовбці початкової матриці замінюються рядками з відповідними номерами.

Приклад:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & -7 & 11 \\ 18 & 19 & 39 \\ -5 & 91 & 87 \end{pmatrix} \qquad A^T = \begin{pmatrix} 3 & 18 & -5 \\ -7 & 19 & 91 \\ 11 & 39 & 87 \end{pmatrix}$$

б) складання і віднімання матриць

Складати і віднімати матриці можна тільки одного розміру. Сумою матриць *A* і *B* називається матриця *C* = *A* + *B*, тобто матриці складаються поелементно.

Приклад:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 9 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{B} = \begin{pmatrix} 0 & -4 \\ 5 & 19 \end{pmatrix}$$

$$C = A + B = \begin{pmatrix} 1+0 & 2-4 \\ 9+5 & -1+19 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 14 & 18 \end{pmatrix}$$

Аналогічно визначається різниця двох матриць *C* = *A* + *B*.

в) множення матриці на число

При множенні матриці на число необхідно кожен елемент матриці помножити на це число:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 9 & -1 \end{pmatrix}$$

$$2 \cdot A = \begin{pmatrix} 2 \cdot 1 & 2 \cdot 2 \\ 2 \cdot 9 & 2 \cdot (-9) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 18 & -18 \end{pmatrix}$$

г) множення матриць

Добуток матриць визначений, якщо число стовбців першої матриці дорівнює числу рядків другої. Перемножування матриць здійснюється наступним чином:

$$C = A \cdot B = \begin{pmatrix} 1ряд \cdot 1ствб & 1ряд \cdot 2ствб & \dots & 1ряд \cdot p\ ствб \\ 2ряд \cdot 1ствб & 2ряд \cdot 2ствб & \dots & 2ряд \cdot p\ ствб \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ m\ ряд \cdot 1ствб & m\ ряд \cdot 2ствб & & m\ ряд \cdot p\ ствб \end{pmatrix} \qquad (1.4)$$

Приклад:

$$C = A \cdot B = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 3 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 10 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \cdot 1 + 3 \cdot 2 + 4 \cdot 10 \\ 3 \cdot 1 + 2 \cdot 2 + 0 \cdot 10 \\ 0 \cdot 1 + 1 \cdot 2 - 1 \cdot 10 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \\ -8 \end{pmatrix}$$

1.2 Застосування матриць

а) побудова атомної матриці

Молекулу речовини $C_6H_5NO_2$ можна подати у вигляді 6C+5H+1N+2O. Якщо ввести позначення: A = A1…An; B = B1…Bn; $M = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}$

то в матричному вигляді можна записати $B=M \cdot A$, де M - атомна матриця

Приклад :

Дано три речовини H_2, O_2, H_2O, що складаються з атомів H і O. Знайти атомну матрицю суміші цих речовин.

Рішення

Необхідно прийняти що $B=\begin{pmatrix} H_2 \\ O_2 \\ H_2O \end{pmatrix}$, і $A=\begin{pmatrix} H \\ O \end{pmatrix}$,

то можна записати $\begin{pmatrix} H_2 \\ O_2 \\ H_2O \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} H \\ O \end{pmatrix}$ де атомна матриця суміші $M=\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$.

б) рішення системи лінійних рівнянь

Якщо суміш готується з n компонентів, до складу яких входять m речовин і потрібно встановити кількість кожного компонента в суміші, то позначимо M - кількість суміші, що готується, кг.; x_j (j=1, …, n) – кількість j-го компонента у суміші, кг; b_i (i=1, …, m) – вміст i-ї речовини у суміші, %; a_{ij} - вміст i-ї речовини в j-му компоненті, %. Тоді кількість i-го речовини в суміші, з одного боку, дорівнюватиме $M\ b_i$, а з іншого боку - сумі кількостей цієї речовини в кожному з n компонентів, тобто $Ax = Mb$.

Отже, у процесі знаходження кількості кожної речовини в суміші отримана система лінійних рівнянь, яка є моделлю розрахунку сумішей.

Рішенням системи $Ax = Mb$ є $x = A^{-1}Mb$

Приклад:

Нехай потрібно приготувати 4250 кг суміші наступного складу: вода – 22%, азотної кислоти – 16%, сірчаної кислоти – 62% з: меланжу (5% H_2O, 85% HNO, 10% H_2SO_4), олеуму (100% H_2SO_4) та відпрацьованої кислоти (30% H_2O, 70% H_2SO_4).

Знайти витрати кислот, що йдуть на приготування цієї суміші.

Рішення

Нехай x1 – кількість H_2O в сіміші; x2 – кількість HNO в сіміші та x3 – кількість H_2SO_4 в сіміші.

Тоді систем алгебраїчних рівнянь

$$\begin{cases} 5x1+30x3=4250\cdot 22 \\ 85x2 =4250\cdot 16 \\ 10x1 +100x2+70x3=4250\cdot 62 \end{cases}$$

Тобто в матричному виді маємо

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 30 \\ 85 & 0 & 0 \\ 10 & 100 & 70 \end{pmatrix}; x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \text{ та } Mb = \begin{pmatrix} 93500 \\ 6800 \\ 263500 \end{pmatrix}$$

Маємо систему $Ax = Mb$ де рішенням є $x = A^{-1}Mb$. Зворотню матрицю знаходимо використовуя Excelчи метод Крамера.

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0{,}0117 & 0 \\ -0{,}023 & 0{,}00019 & 0{,}01 \\ 0{,}033 & -0{,}0019 & 0 \end{pmatrix}$$

тоді рішенням системи буде

$$x = \begin{pmatrix} 0 & 0{,}0117 & 0 \\ -0{,}023 & 0{,}00019 & 0{,}01 \\ 0{,}033 & -0{,}0019 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 93500 \\ 6800 \\ 263500 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 800 \\ 466{,}6 \\ 2983{,}4 \end{pmatrix}$$

Одже, щоб отримати 4250 кг суміші необхідно H_2O 800 кг, HNO 466,6 кг та H_2SO_4 2983,4 кг.

Задачи для самоконтролю

1. *Дано три речовини H_2, O_2, B_2O_3, що складаються з атомів H, B і O. Знайти атомну матрицю суміші цих речовин.*
2. *Дано чотири ємності з розчинами сірчаної кислоти різної концентрації. Якщо змішати розчини у певних співвідношеннях, то вийде кислота заданої концентрації (дані представлені в таблиці.). Визначити яка концентрація кислоти у кожній посудині.*

Таблиця - Вихідні дані

Співвідношення концентрацій	*Кінцева концентрація кислоти, %*
1:1:1:1	*13*
4:3:2:1	*34*
4:1:1:4	*25*
4:1:4:1	*25*

2 Пошук оптимального значення функції на відрізку

Більшість задач оптимізації зводиться до пошуку найбільшого (або найменшого) значення деякої функції· Задача пошуку цільової функції формулюється у вигляді:

$$f(x^*) = extremym\ f(x),\ x \in X,$$

де X - множина тобто безліч допустимих точок, серед яких здійснюється пошук точка х*, яка надає екстримальне значення $f(x)$ цільової функції.

Функція однієї змінної $y = f(x)$ називається унімодальною на відрізку $[a, b]$, якщо на ньому знаходиться єдина точка $x^* \in [a, b]$, в якій функція набуває екстримального значення. У методах одновимірної оптимізації замість X розглядають відрізок $X=[a, b]$, що містить вирішення х*. Такий відрізок називається відрізком невизначеності або відрізком локалізації. Щодо цільової функції $f(x)$ часто передбачається, що вона унімодальна.

Властивість унімодальності функції означає наявність у неї єдиного локального мінімуму, і цей мінімум досягається в точці $x = x^*$.

Для знаходження екстремуму функції на відрізку необхідно побудувати графік залежності на декартовій площині чи перевірить функцію на необхідні і достатні умови екстремуму функції заданої на відрізку для визначення існування на задоному відрізку екстремального значенняфункції.

Приклад.

Знайдіть екстремум функція $y=2 - 4{\cdot}(x - 5)\ {\cdot}x^2$, про яку відомо, що вона досліджується в інтервалі [0, 6].

Рішення.

Для знаходження екстремуму функції маємо два шляхи:

- Перший це графічне зображення графіку функції на задоному відрізку, яке наведено на рисунку 1.1.

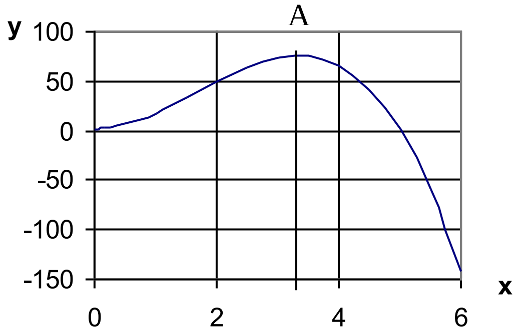

Рисунок 1.1 – Графічне зображення функції y=2 – 4·(x - 5) ·x^2

Функція y=2–4·(x-5)·x^2 має максимум функції в точці А з приблизними координатами x = 3.5, y = 75.

- другий це виконання теорем про необхідні і достатні умови екстремуму. Запишимо необхідні умови екстремуму першого порядку.

y'=(2–4·(x-5)·x^2) ′= 40x-12x^2=0. Звідси одержуємо стаціонарні точки: $x^{(1)*}$=0, $x^{(2)*}$=3,3. Перевіримо виконання достатніх умов екстремуму: y''=40 - 24x; y''= $f'x^{(1)*}$) =0, f'' ($x^{(2)*}$) =-39,2<0. Тому в точках $x^{(2)*}$ - локальний максимум, а у точці $x^{(1)*}$ достатні умови не виконуються, тому обчислюємо третю похідну y'''= $f''x^{(1)*}$) = -24. Оскільки ця похідна відмінна від нуля й має непарний порядок, то в точці $x^{(1)*}$ немає екстремуму.

Отже, функція y=2–4·(x-5)·x^2 унімодальна має локальний максимум і може досліджуватися методами одномірної безумовної оптимізації.

2.1 Методи виключення інтервалів

а) Метод ділення інтервалу навпіл

Метод дозволяє виключати в точності половину інтервалу на кожній ітерації.

Алгоритм пошуку.

Крок 1. Задають a, b, ε. Проводять обчислення точки $x_2=(a+b)/2$ та y_2 = $f(x_2)$.

Крок 2. Проводять обчислення в точках: $x_1=(a+x_2)/2$, $y_1=f(x_1)$, $x_3=(x_2+b)/2$, $y_3=f(x_3)$.

Находять x_j таким, що $f(x_j) = \min\limits_{1 \le i \le 3}\{f(x_i)\}$.

Тоді точне рішення x^* міститься на відрізку $[x_{j-1}, x_{j+1}]$. Передбачають $x_0 = a, x_4 = b$.

Крок 3. Вважають $a=x_{j-1}$, $b=x_{j+1}$, $x_2=x_j$, $y_2=y_j$. Якщо $b-a \le 2\varepsilon$, то $x^* = x_2$, $y^* = y_2$, і пошук закінчується. Інакше переходять до кроку 2.

Приклад: Визначити максимум функції $y= 2-4\cdot(x-5)\cdot x^2$ на відрізку [0, 6] з точністю ε=0,01.

Рішення:

Проводять розрахунок в точці x_2=(0+6)/2=3. Обчислюють $y_2=f(x_2)$= 2-4(3-5)3^2=74.

Розраховують значення функції в точках x_1 і x_3:

$x_1=(a+x_2)/2$, тобто x_1=(0+3)/2=1,5, $y_1=f$(1,5)= 2-4(1,5-5)$1{,}5^2$=33,5;

$x_3=(x_2+b)/2$, тобто x_3=(3+6)/2=4,5 $y_3=f$(4,5)=2-4(4,5-5)$4{,}5^2$=42,5.

Із значень функції $f(x_1)$ та $f(x_3)$ знаходять максимальне значення $f(x_3)$=42,5, тоб то новий інтервал пошуку максимуму знаходиться на відрізку [1,5, 6]. $b-a \ge$ 0,02. Перша ітерація закінчилася. Розрахунок продовжують. Приймають, що $a= x_1$, $b = b$. Обчислюють значення точок та функції за наведеним алгоритмом до $b-a \le 2\varepsilon$. Пошук закінчується,тоді $x^* = x_2$, $y^* = y_2$. Результати обчислення зводять до таблиці 1.

Таблиця 1 – Розрахункові значення

n	a	b	x_1	x_2	x_3	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	$b-a$
1	0	6	1.5	3	4.5	33.5	74	42.5	6
2	1.5	6	2.62	3.75	4.87	67.35	72.31	14.33	4.5
3	1.5	4.87	2.34	3.185	4.03	60.26	75.64	65.01	3.37
…	…	…	…	…	…	…	…	…	…
n	3.3302	3.338	3.332	3.334	3.336	76.074	76.074	76.0739	0.008

Відповідь: максимальне значення функції $y = 2-4\cdot(x-5)\cdot x^2$ знаходиться в точці x = 3.33, яка належить відрізку [0, 6], і дорівнює 76.07 з точністю ε=0,01.

б) Метод дихотомії

Метод дихотомії - один із самих простих способів пошуку мінімуму. Згідно йому на і-ому кроці вираховуються два значення: x_1, та x_2, на відстані δ праворуч і ліворуч від середини інтервалу неозначеності.

Алгоритм пошуку.

Крок 1. Задаються a,b,ε і δ – мале позитивне число, значно менше ε.

Крок 2. Визначають середину відрізку $x=(a+b)/2$. Проводять обчислення в двох точках, близьких середині: $y_1=f(x-\delta)$, $y_2=f(x+\delta)$.

Крок 3. Визначають наступний відрізок локалізації, тобто визначають, який з відрізків $[a, x+\delta]$ або $[x-\delta, b]$ містить точне рішення x^*. Якщо $y_1 \geq y_2$, то це відрізок $[a,x+\delta]$ і $b=x+\delta$, інакше це відрізок $[x-\delta, b]$ і $a=x-\delta$, тобто вибраний відрізок локалізації знову позначають як $[a, b]$.

Крок 4. Якщо $b-a \leq 2\varepsilon$, то $x=(a+b)/2$, $y*=f(x*)$, і пошук закінчується. Інакше переходять до кроку 2.

Знайдемо значення функції, наведеної в методі ділення інтервалу навпіл.

Рішення:

Задаються $\delta= 0.001$. Визначають середину відрізку $x=(0+6)/2=3$. Проводять розрахунок в двох точках, близьких середині:

$y1=f(x-\delta)$, тобто $f(3-0.001)=2-4(2.999-5)2.999^2=73.988$;

$y2=f(x+\delta)=f(3+0.001)=2-4(3.001-5)3.001^2=74.011$.

Оскільки $y_1 \leq y_2$, то відрізок містить точне рішення, яке знаходитися в межах [2.999, 6]. Перша ітерація закінчилася. Розрахунок продовжують до $b-a \leq 2\varepsilon$, то $x^*=(a+b)/2$, $y*=f(x*)$, і пошук закінчується. Оскільки $b-a \leq 2\varepsilon$, то $x^*=(3.32395+3.3346)/2=3.33$, $y^*=76.07$. Результати обчислення зводять до таблиці 2.

Відповідь: максимальне значення функції $y=2-4\cdot(x-5)\cdot x^2$ знаходиться в точці $x=3.33$, яка належить відрізку [0, 6], і дорівнює 76.07 з точністю $\varepsilon=0,01$.

Таблиця 2 – Розрахункові значення

n	a	b	ε	x	$f(x-\varepsilon)$	$f(x+\varepsilon)$	$b-a$
1	0	6	0,001	3	73,98798	74,01198	6
2	2,999	6	0,001	4,4995	42,59442	42,46849	3,001
…	…	…	…	…	…	…	…
n	3,32395	3,3346	0,001	3,329275	76,07356	76,07389	0,01065

в) Метод золотого перетину

Алгоритм пошуку.

Крок 1. Задаються a, b, ε і $\lambda = 1.618$. Обчислюють

$x_1 = b - \frac{b-a}{\lambda}, x_2 = a + \frac{b-a}{\lambda}, y_1 = f(x_1), y_2 = f(x_2)$.

Крок 2.

а) Якщо $y_1 \leq y_2$, то приймають новий інтервал [x_1, b] і обчислюють x_1 і x_2 за формулами, приведеними в кроці 1.

б) Якщо $y_1 > y_2$, то приймають інтервал [a, x_2] і обчислюють x_1 і x_2 за формулами, приведеними в кроці 1.

Крок 3. Якщо $b - a > \varepsilon$, то переходять до кроку 2. Інакше якщо $y_1 < y_2$, то вважають $x *= x_1$ і ; якщо $y_1 \geq y_2$, то вважають $x *= x_2$ і $y *= y_2$.

Закінчують пошук.

Знайдемо значення функції, наведеної в методі ділення інтервалу навпіл.

Рішення:

Обчислюють

$$x_1 = b - \frac{b-a}{\lambda} = 6 - \frac{6-0}{1{,}618} = 2{,}2917, x_2 = a + \frac{b-a}{\lambda} = 0 + \frac{6-0}{1{,}618} = 3{,}708,$$

$$y_1 = f(x_1) = 2 - 4(2{,}2917 - 5)2{,}2917^2 = 58{,}89, \quad y_2 = f(x_2) = 2 - 4(3{,}708 - 5)3{,}708^2 = 73{,}051$$

Оскільки $y_1 \leq y_2$, то виключають інтервал [0, 2.2917], вважають новий інтервал пошуку в межах [2.2917, 6] і обчислюють x_1 і x_2.

Розрахунок здійснюють, поки $b - a \leq \varepsilon$. Результати обчислення зводять до таблиці 3.

Таблиця 3 – Розрахункові значення

n	*a*	*b*	*l*	x_1	x_2	$f(x_1)$	$f(x_2)$	*b-a*
1	0	6	1,618	2,291718	3,708282	58,89528	73,0515	6
2	2,291718	6	1,618	3,708108	4,583611	73,0544	36,99251	3,708282
3	2,291718	4,583611	1,618	3,167113	3,708215	75,53986	73,05261	2,291892
…	…	…	…	…	…	…	…	…
n	3,329427	3,336547	1,618	3,332146	3,333827	76,07405	76,07407	0,00712

Відповідь: максимальне значення функції $y=2\text{-}4\cdot(x\text{-}5)\cdot x^2$ знаходиться в точці x=3.33, яка належить відрізку [0, 6], і дорівнює 76.07 з точністю ε=0,01.

г) Метод чисел Фібоначчі

Цей метод застосовується, коли число експериментів N заздалегідь задано.

Алгоритм пошуку.

Крок 1. Задаються a, b, N. Обчислюють числа Фібоначчі $F_0, F_1, \ldots, F_N$. Визначають:

$$x_1 = a + (b - a)F_{N-2}/F_N;$$

$$x_2 = a + (b - a)F_{N-1}/F_N;$$

$$y_1 = f(x_1), y_2 = f(x_2).$$

Крок 2.

а) Якщо $y_1 \leq y_2$, то приймають $b = x_2, x_2 = x_1, y_2 = y_1$ і обчислюють $x_1 = a + b - x_2, y_1 = f(x_1)$.

б) Якщо $y_1 > y_2$, то приймають $a = x_1, x_1 = x_2, y_1 = y_2$ і обчислюють $x_2 = a + b - x_1, y_2 = f(x_2)$.

Повторюють крок 2 $N - 2$ раза.

Крок 3. Якщо $y_1 < y_2$, то вважають $x* = x_1$ і $y* = y_1$. Якщо $y_1 \geq y_2$, то вважають $x* = x_2$ і $y* = y_2$. Закінчують пошук.

Знайдемо значення функції, наведеної в методі ділення інтервалу навпіл з додатковою умовою проведення 10 експериментів.

<u>Рішення:</u>

Обчислюють числа Фібоначчі

$F_0 = 1, F_1 = 1, F_2 = 2, F_3 = 3, F_4 = 5, F_5 = 8, F_6 = 13, F_7 = 21, F_8 = 34, F_9 = 55, F_{10} = 89.$

Визначають

$$x_1 = 0 + (6 - 0)34/89 = 2.292;$$
$$x_2 = 0 + (6 - 0)55/89 = 3.707;$$
$$y_1 = f(2.292) = 58.903;$$
$$y_2 = f(3.707) = 73.072.$$

Оскільки $y_1 \leq y_2$, то виключають інтервал [0, 2.292], вважають новий інтервал пошуку в межах [2.292, 6] і обчислюють x_1 и x_2.

Розрахунок здійснюють вісім разів. Результати обчислення зводять до таблиці 4.

Таблиця 4 – Розрахункові значення

n	a	b	x_1	x_2	$f(x_1)$	$f(x_2)$
1	0	6	2,292135	3,707865	58,90722	73,05844
2	2,292135	6	3,708623	4,583512	73,04581	36,99928
3	2,292135	4,583512	3,167492	3,708155	75,54225	73,05362
4	2,292135	3,708155	2,833086	3,167203	71,56987	75,54043
5	2,833086	3,708155	3,167382	3,373859	75,54156	76,04096
6	3,167382	3,708155	3,373969	3,501567	76,04078	75,48898
7	3,167382	3,501567	3,295048	3,373901	76,04498	76,04089
8	3,167382	3,373901	3,246277	3,295006	75,92514	76,04492

<u>Відповідь</u>: максимальне значення функції $y=2-4\cdot(x-5)\cdot x^2$ знаходиться в точці $x= 3.295$, яка належить відрізку [0, 6], і дорівнює 76.045 після проведення 10 експериментів.

2.2 Методи пошуку, засновані на апроксимації цільової функції

Суть цих методів полягає в тому, що за отриманою в ході обчислень інформацією будується апроксимуюча функція, і її экстремум береться за точку чергового обчислення. Такі методи дають добрі результати при мінімізації досить гладких унімодальних функцій.

а) Метод дотичних

Алгоритм пошуку.

Крок 1. Прийняти за початкове значення змінної будь-яке дійсне число. Наступне наближення до стаціонарної точки x* визначають за формулою

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)},$$

де x_k - початкове значення змінної;

$f'(x_k)$ - значення першої похідної досліджуваної функції;

$f''(x_k)$ - значення другої похідної досліджуваної функції.

Крок 2. Обчислити $f'(x_{k+1})$, $f''(x_{k+1})$.

Крок 3. Якщо $|f'(x_{k+1})| < \varepsilon$, то закінчують пошук. Інакше необхідно повернутися до кроку 1.

Як випливає з алгоритму, цільова функція $f(x\ )$ має бути двічі диференційована.

Приклад: Визначити мінімум функції $f(x) = 2x^2 + \frac{16}{x}$ на відрізку [1, 5] з точністю ε = 0,01.

Рішення:

Спочатку перевіримо функцію на необхідні і достатні умови екстремуму. Запишимо необхідні умови екстремуму першого порядку $f'(x) = 4x - \frac{16}{x^2} = 0$. Звідси одержуємо стаціонарні точки: $x^{(1)*}$=0, $x^{(2)*}$=1,58. Перевіримо виконання достатніх умов екстремуму: $f''(x) = 4 + \frac{32}{x^3}$; $y''= f''x^{(1)*}$ =0, $f''(x^{(2)*})$ =4,5>0. Тому в точках $x^{(2)*}$ - локальний мінімум, а у точці $x^{(1)*}$ достатні умови не виконуються, тому обчислюємо третю похідну $y''' = f'''x^{(1)*})$ = не існує (ділення на 0). Оскільки ця похідна не існує й має непарний порядок, то в точці $x^{(1)*}$ немає екстремуму.

Отже, функція $f(x) = 2x^2 + \frac{16}{x}$унімодальна має локальний мінімум і може досліджуватися методами одномірної безумовної оптимізації.

Приймають x_1=1.

Записують похідну першого порядку $\frac{\partial f(x)}{\partial x} = f'(x)$. Для заданої функції $f'(x_1) = 4x - \frac{16}{{x_1}^2}$. Обчислюють похідну першого порядку в точці x_1=1:

$f'(x_1) = 4x_1 - \frac{16}{{x_1}^2} = 4 \cdot 1 - \frac{16}{1^2} = -12$.

Записують похідну другого порядку $\frac{\partial f'(x)}{\partial x^2} = f''(x)$. Для заданої функції $f''(x_1) = 4 + \frac{32}{{x_1}^3}$. Обчислюють похідну другого порядку в точці x_1 = 1:

$f''(x_1) = 4 + \frac{32}{{x_1}^3} = 4 + \frac{32}{1^3} = 36$. Розраховують значення x_2 за формулою

$x_2 = x_1 + \frac{f'(x_1)}{f''(x_1)} = 1 - (-\frac{12}{36}) = 1.33$.

Набувши значення x_2 = 1.33, необхідно продовжити розрахунок, поки не буде виконуватися нерівність $|f'(x_k)| \leq \varepsilon$. Результати обчислення наведено у таблиці 5.

Таблиця 5 – Розрахункові значення

n	*x*	*f*(*x*)	*f* '(*x*)	*F* ''(*x*)
1	1	18	-12	36
2	1,333333	15,55556	-3,66667	17,5
3	1,542857	15,13119	-0,55011	12,7131
4	1,586128	15,11906	-0,01529	12,01928
5	1,5874	15,11905	-1,2E-05	12,00002

Відповідь: мінімальне значення функції $f(x)=2x^2+(16/x)$ знаходиться в точці x= 1.58, яка належить відрізку [1, 5], і дорівнює 15.12 з точністю ε=0,01.

б) Метод хорд

Алгоритм методу хорд дозволяє апроксимувати функцію$f'(x)$ "хордою" і знайти точку, в якій січна графіка $f'(x)$ перетинає вісь абсцис.

Алгоритм пошуку.

Крок 1. Наближення до стаціонарної точки x* визначають за формулою

$$x = b - \frac{f'(b)\cdot(b-a)}{f'(b) - f'(a)}.$$

Крок 2. Обчислюють $f'(x)$.

Крок 3. Якщо $|f'(x)| < \varepsilon$, то закінчують пошук. Інакше необхідно вибрати одну з точок a або b, щоб знаки похідних в цій точці і точці x були різні. Повертаються до кроку 1.

Знайдемо значення функції, наведеної в методі дотичних.

Рішення:

Приймають a=1 і b=5.

Записують похідну першого порядку $\frac{\partial f(x)}{\partial x} = f'(x)$. Для заданої функції $f'(x) = 4x - \frac{16}{x^{2}}$. Обчислюють похідну першого поряду в точці a=1:

$$f'(a) = 4a - \frac{16}{a^2} = 4\cdot 1 - \frac{16}{1^2} = -12.$$

Обчислюють похідну першого порядку в точці b=5:

$$f'(b) = 4x - \frac{16}{b^2} = 4\cdot 5 - \frac{16}{5^2} = 19{,}36.$$

Обчислюють значення точки $x = 5 - \frac{19{,}36\cdot(5-1)}{19{,}36+12} = 2{,}53.$

Обчислюють значення похідної першого порядку в точці x=2,53:

$$f'(x) = 4x - \frac{16}{x^2} = 4\cdot 2{,}53 - \frac{16}{2{,}53^2} = 7{,}62.$$

Оскільки $f'(2.53) = 7.62 \succ 0$, приймають b =2.53.

Ітерації продовжують до тих пір, поки не буде виконуватися нерівність $|f'(x)| \le \varepsilon$. Результати обчислення зводять до таблиці 6.

Таблиця 6 – Розрахункові значення

n	a	b	$f'(a)$	$f'(b)$	x	$f(x)$	$f'(x)$
1	1	5	-12	19,36	2,5306	19,1305	7,6240
2	1	2,5306	-12	7,6240	1,9359	15,7605	3,4748
3	1	1,9359	-12	3,4748	1,7257	15,2278	1,5311
…	…	…	…	…	…	…	…
8	1	1,5913	-12	0,0468	1,5890	15,1190	0,0193
9	1	1,5890	-12	0,0193	1,5880	15,1190	0,0079

<u>Відповідь</u>: мінімальне значення функції $f(x)=2x^2+(16/x)$ знаходиться в точці $x= 1.58$, що належить відрізку [1, 5], і дорівнює 15.12 з точністю $\varepsilon=0,01$.

в) Метод середньої точки

Процедура пошуку за методом середньої точки заснована на дослідженні тільки знаку похідної.

<u>Алгоритм пошуку.</u>

Крок 1. Задаються a, b, причому $f'(a) <0$ і $f'(b) >0$.

Крок 2. Обчислюють $x = \frac{a+b}{2}$ і $f'(x)$.

Крок 3. Якщо $|f'(x)| < \varepsilon$, то закінчують пошук. Інакше, якщо $f'(x) <0$, покладають $a = x$ і переходять до кроку 2. Якщо $|f'(x))| > \varepsilon$, покладають $b = x$ і переходять до кроку 2.

Знайдемо значення функції, наведеної в методі дотичних.

<u>Рішення:</u>

Приймають $a=1$ і $b=5$. Записують похідну першого порядку $\frac{\partial f(x)}{\partial x} = f'(x)$. Для заданої функції $f'(x) = 4x - \frac{16}{x^{\ 2}}$. Обчислюють похідну першого порядку у точці $a=1$: $f'(a) = 4a - \frac{16}{a^2} = 4 \cdot 1 - \frac{16}{1^2} = -12$ та у точці $b=5$:

$f'(b) = 4x - \frac{16}{b^2} = 4 \cdot 5 - \frac{16}{5^2} = 19{,}36$. Обчислюють значення точки x:

$x = \frac{(5-1)}{2} = 3$.

Обчислюють значення похідної першого порядку в точці $x = 3$:

$f'(x) = 4x - \frac{16}{x^2} = 4 \cdot 3 - \frac{16}{3^2} = 10{,}22$.

Оскільки $f'(3) = 10.22 > 0$, приймають $b = 3$.

Ітерації продовжують до тих пір, поки не буде виконуватися нерівність $|f'(x)| \leq \varepsilon$. Результати обчислення зводять до таблиці 7.

Таблиця 7 – Розрахункові значення

n	a	b	x	$f(a)$	$f'(a)$	$f(b)$	$f'(b)$	$f(x)$	$f'(x)$
1	1	5	3	18	-12	53,2	19,36	23,3333	10,2222
2	1	3	2	18	-12	23,3333	10,2222	16	4
…	…	…	…	…	…	…	…	…	…
n	1,5859	1,5898	1,5878	15,1190	-0,0175	15,11909	0,0292	15,1190	0,0058

Відповідь: мінімальне значення функції $f(x)=2x^2+(16/x)$ знаходиться в точці $x= 1.58$, що належить відрізку [1, 5], і дорівнює 15.12 з точністю $\varepsilon=0{,}01$.

Задачи для самоконтролю:

1. *Знайти екстремум функцій $2x^3-15x^2-36x-5$, $2x^3-12x^2+18x-2$, $2x^3-18x^2+54x+8$ на відрізку [-1, 4]*
2. *Знайти екстремум функції $2x^3+12x^2-30x+9$ на відрізку [1, 6] з точністю 10^{-3} методом золотого перетину*
3. *Знайти екстремум функції $2x^3-5x^2+6x-5$ на відрізку [1, 6] з точністю 10^{-3} методом хорд*
4. *Знайти екстремум функції $2x^3+9x^2-3$ на відрізку [1, 6] з точністю 10^{-3} методом дотичних*
5. *Знайти екстремум функції x^2+e^x на відрізку [-1, 0] при проведені12 експеріментів*

ПРАКТИЧНА РОБОТА 2

Плани першого порядку. Повний факторний експеримент. Симплекс - ґратчасте планування

Для одержання математичних моделей першого порядку використовують факторні експерименти: повний і дробовий факторний експеримент (ПФЕ і ДФЕ), що дозволяє одержати інформацію про об'єкт дослідження, представлену у вигляді лінійного або нелінійного полінома першого ступеня, провести статистичний аналіз моделі, здійснити оптимізацію факторів.

У загальному виді поліноміальна модель першого ступеня має вигляд

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^{N} b_i X_i + \sum_{i=1}^{N} b_{ij} X_i X_j \qquad (1.1)$$

де Y - параметр оптимізації;

b_0, b_i, b_{jj} - коефіцієнт рівняння, $i = 1,2,\ldots,n; i \prec j$;

X_i, X_j - фактори.

1 Повний факторний експеримент

Розглянемо алгоритм повного факторного експерименту для випадку планування на двох рівнях, тобто реалізуємо ПФЭ 2^n (n - число факторів) для отримання математичної моделі у виді нелінійного поліному першого порядку.

Приклад:

Для очистки хімічного устаткування застосовуються суміші мінеральних кислот соляної, ортофосфатної та азотної відповідно X_1, X_2, X_3. Параметр оптимізації швидкість розчинення солевідкладень Р, г/м³·год. Досліди вели при температурі 293 К у кожній точці плану виконувалося по 2 паралельних досліди.

Виготовлення суміші здійснюють із кислот соляної 6 - 7,5 % ортофосфатної – 73 ÷ 79 %, та азотної – 21 ÷ 27 %. швидкість розчинення солевідкладень складає 30 ÷ 34 г/м³·год.

Необхідно оптимізувати швидкість розчинення солевідкладень з метою одержання максимального значення швидкості розчинення солевідкладень.

Рішення:

Для планування математичного експерименту вибираємо наступні фактори:

X_1 - кількість соляної кислоти,%;

X_2 - кількість ортофосфатної кислоти, %;

X_3 - кількість азотної кислоти, %.

Як вихідну змінну – параметр оптимізації приймаємо швидкість розчинення солевідкладень – Y.

Враховуючи кількість факторів необхідно отримати математичну модель – нелінійне рівняння регресії першого ступеня виду

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + b_{12}X_1X_2 + b_{13}X_1X_3 + b_{23}X_2X_3 + b_{123}X_1X_2X_3 \qquad (1.2)$$

а) Складання матриці планування експерименту, проведення експерименту. Перевірка однорідності дисперсій

На підставі результатів збору апріорної інформації щодо об'єкту дослідження або попередніх досліджень вибирають X_{i0} (нульовий рівень), який забезпечує найкращі значення параметра Y. Установивши область визначення факторів, задаються інтервалом їх варіювання і визначають верхній та нижній рівні факторів за формулами

$$X_{iB} = X_{i0} + \Delta X_i \qquad (1.3) \qquad X_{iH} = X_{i0} - \Delta X_i \qquad (1.4)$$

де X_{iB} - верхній рівень *i*-го фактора;

X_{iH} - нижній рівень *i*-го фактора;

X_{i0} - основний (нульовий) рівень *i*-го фактора;

ΔX_i - інтервал варіювання *i*-го фактора.

Далі кодують фактори, переходячи безрозмірної системи координат X_1, X_2, …, X_n

$$x_{iB} = \frac{X_{iB} - X_{i0}}{\Delta X_i} \qquad (1.5) \qquad x_{iH} = \frac{X_{iH} - X_{i0}}{\Delta X_i} \qquad (1.6)$$

У новій системі координат фактори приймають значення +1 (верхній рівень) і -1 (нижній рівень). Результати приводять у таблиці 8.

Таблиця 8 – Умови проведення експерименту

Рівні факторів	Позначення	Фактори		
		X_1	X_2	X_3
Основний рівень	X_{i0}	5	24	6
Інтервал варіювання	ΔX_i	2	3	1,5
Верхній рівень (+1)	X_{iB}	7	27	7,5
Нижній рівень (-1)	X_{iH}	3	21	4,5

З урахуванням кількості досліджуваних факторів (n = 3) складають матрицю планування експерименту ПФЕ 2^3 (таблиця 9) з кількістю рядків у матриці – N = 8 (2^3 = 8). Після перевірки властивостей матриці (ортогональність, симетричність, нормування) проводять експеримент і зводять результати до таблиці 9.

Далі обчислюють середнє значення параметра і порядкові дисперсії за паралельними визначеннями по кожному рядку матриці, а так само суму середніх значень параметра і дисперсії за формулами

$$\sum_{u=1}^{N} \overline{Y}_u = \overline{Y}_{uk} + \ldots + \overline{Y}_N \qquad (1.7) \qquad S_{uk}^2 = \frac{(Y_{uk} - \overline{Y}_u)^2}{m_u - 1} \qquad (1.8) \qquad S_u^2 = \sum_{u=1}^{N} S_{uk}^2 \qquad (1.9)$$

Таблиця 9 – Матриця планування і результати експерименту

Номер досліду	Фактори (кодовані позначення)			Параметр оптимізації		
	X_1	X_2	X_3	Паралельні визначення		$\bar{Y}_u$
				Y_{u1}	Y_{u2}	
1	+1	+1	+1	22,9	24,3	23,6
2	–1	+1	+1	23,1	23,4	23,25
3	+1	–1	+1	19,0	20,6	19,80
4	–1	–1	+1	23,0	25,1	24,05
5	+1	+1	–1	35,5	36,8	36,15
6	–1	+1	–1	41,1	39,6	40,35
7	+1	–1	–1	21,9	21,8	21,85
8	–1	–1	–1	22,6	22,5	22,55

де S_{uk}^2 - порядкові дисперсії по паралельних дослідах кожного u-того рядку матриці;

Y_{uk} - експериментальне значення параметра по u-тому рядку в k-тім досліді;

$\bar{Y}_u$ - середнє значення параметру по u-тому рядку m паралельних визначень;

m_u - число паралельних визначень по кожному рядку матриці;

S_u^2 - дисперсія суми порядкових дисперсій;

N - число різних умов досліду (число рядків матриці планування).

$$\sum_{u=1}^{N} Y_u = 23{,}6 + 23{,}25 + 19{,}8 + 24{,}05 + 36{,}15 + 40{,}35 + 21{,}85 + 22{,}55 = 211{,}6$$

$$S_1^2 = \frac{(22{,}9 - 23{,}6)^2 + (24{,}3 - 23{,}6)^2}{2-1} = 0{,}98 \qquad S_5^2 = \frac{(35{,}5 - 36{,}15)^2 + (36{,}8 - 36{,}15)^2}{2-1} = 0{,}845$$

$$S_2^2 = \frac{(23{,}1 - 23{,}25)^2 + (23{,}4 - 23{,}25)^2}{2-1} = 0{,}045 \qquad S_6^2 = \frac{= (41{,}1 - 40{,}35)^2 + (39{,}6 - 40{,}35)^2}{2-1} = 1{,}125$$

$$S_3^2 = \frac{(19{,}0 - 19{,}8)^2 + (20{,}6 - 19{,}8)^2}{2-1} = 1{,}28 \qquad S_7^2 = \frac{(21{,}9 - 21{,}85)^2 + (21{,}8 - 21{,}85)^2}{2-1} = 0{,}005$$

$$S_4^2 = \frac{(23{,}0-24{,}05)^2+(25{,}1-24{,}05)^2}{2-1} = 2{,}205 \qquad S_8^2 = \frac{(22{,}6-22{,}55)^2+(22{,}5-22{,}55)^2}{2-1} = 0{,}005$$

$$S_u^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + S_4^2 + S_5^2 + S_6^2 + S_7^2 + S_8^2 = 0{,}98 + 0{,}045 + 1{,}28 +$$
$$+ 2{,}205 + 0{,}845 + 1{,}125 + 0{,}005 + 0{,}005 = 6{,}49$$

Для перевірки гіпотези однорідності дисперсій і відтворюваності вимірів при однаковому числі паралельних визначень використовують критерій Кохрена, який розраховується за формулою

$$G^{розр.} = \frac{S_{uk\max}^2}{S_u^2} \tag{1.10}$$

де $G^{розр.}$ - критерій Кохрена;

$S_{uk\max}^2$ - максимальне значення порядкової дисперсії.

$$G^{розр.} = \frac{2{,}205}{6{,}49} = 0{,}3398$$

Гіпотеза про однорідність дисперсій підтверджується, якщо виконується умова

$$G^{розр.} \prec G^{табл.} \tag{1.11}$$

У разі невиконання умови (1.11) гіпотеза про однорідності дисперсій відкидається, і одним з рішень є збільшення числа паралельних дослідів, зміна методу контролю вихідний змінної та інші.

Для знаходження табличного значення критерію Кохрена задаються рівнем значимості ($\alpha = 0{,}05$) і ступенями вільності, які розраховуються по формулах

$$f_1 = m - 1, \tag{1.12}$$

$$f_2 = N, \tag{1.13}$$

де f_1, f_2 - ступені вільності;

m - число паралельних дослідів;

N - число різних умов досліду (число рядків матриці).

Для розглянутої матриці $f_1 = 2-1=1$, $f_2 = 8$. Табличне значення критерію Кохрена дорівнює $G_{1;8}^{табл.} = 0{,}6798$ (додаток А). Так як $0{,}3398 \prec 0{,}6798$, то дисперсії однорідні.

б) Розрахунок коефіцієнтів рівняння регресії

Розрахунок коефіцієнтів рівняння регресії роблять по формулах

$$b_0 = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N}\overline{Y}_u \qquad (1.14) \qquad\qquad b_i = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N}x_{iu}\cdot\overline{Y}_u \qquad (1.15)$$

$$b_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N}x_{iu}\cdot x_{ju}\cdot\overline{Y}_u \qquad (1.16) \qquad\qquad b_{ijk} = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N}x_{iu}\cdot x_{ju}\cdot x_{ku}\cdot\overline{Y}_u \qquad (1.17)$$

де i, j, k - номер фактора; $i \prec j \prec k, i = 1,2,3\ldots,n$;

x_{iu} - значення x_i-го в u-тім досліді.

$$b_0 = \frac{211{,}6}{8} = 26{,}45$$

$$b_1 = \frac{1}{8}\cdot\begin{bmatrix}(+1)\cdot 23{,}6 + (-1)\cdot 23{,}25 + (+1)\cdot 19{,}8 + (-1)\cdot 24{,}05 + (+1)\cdot 36{,}15 + \\ + (-1)\cdot 40{,}35 + (+1)\cdot 21{,}85 + (-1)\cdot 22{,}55\end{bmatrix} = -1{,}10$$

$$b_2 = \frac{1}{8}\cdot\begin{bmatrix}(+1)\cdot 23{,}6 + (+1)\cdot 23{,}25 + (-1)\cdot 19{,}8 + (-1)\cdot 24{,}05 + (+1)\cdot 36{,}15 + \\ + (+1)\cdot 40{,}35 + (11)\cdot 21{,}85 + (-1)\cdot 22{,}55\end{bmatrix} = 4{,}39$$

$$b_3 = \frac{1}{8}\cdot\begin{bmatrix}(+1)\cdot 23{,}6 + (+1)\cdot 23{,}25 + (+1)\cdot 19{,}8 + (+1)\cdot 24{,}05 + (-1)\cdot 36{,}15 + \\ + (-1)\cdot 40{,}35 + (-1)\cdot 21{,}85 + (-1)\cdot 22{,}55\end{bmatrix} = -3{,}77$$

$$b_{12} = \frac{1}{8}\cdot\begin{bmatrix}(+1)\cdot(+1)\cdot 23{,}6 + (-1)\cdot(+1)\cdot 23{,}25 + (+1)\cdot(-1)\cdot 19{,}8 + (-1)\cdot(-1)\cdot 24{,}05 + \\ + (+1)\cdot(+1)\cdot 36{,}15 + (-1)\cdot(+1)\cdot 40{,}35 + (+1)\cdot(-1)\cdot 21{,}85 + (-1)\cdot(-1)\cdot 22{,}55\end{bmatrix} = 0{,}14$$

$$b_{13} = \frac{1}{8}\cdot\begin{bmatrix}(+1)\cdot(+1)\cdot 23{,}6 + (-1)\cdot(+1)\cdot 23{,}25 + (+1)\cdot(+1)\cdot 19{,}8 + (-1)\cdot(+1)\cdot 24{,}05 + \\ + (+1)\cdot(-1)\cdot 36{,}15 + (-1)\cdot(-1)\cdot 40{,}35 + (+1)\cdot(-1)\cdot 21{,}85 + (-1)\cdot(-1)\cdot 22{,}55\end{bmatrix} = 0{,}13$$

$$b_{23} = \frac{1}{8} \cdot \begin{bmatrix} (+1)\cdot(+1)\cdot 23{,}6 + (+1)\cdot(+1)\cdot 23{,}25 + (-1)\cdot(+1)\cdot 19{,}8 + (-1)\cdot(+1)\cdot 24{,}05 + \\ + (+1)\cdot(-1)\cdot 36{,}15 + (+1)\cdot(-1)\cdot 40{,}35 + (-1)\cdot(-1)\cdot 21{,}85 + (-1)\cdot(-1)\cdot 22{,}55 \end{bmatrix} = -3{,}64$$

$$b_{123} = \frac{1}{8} \cdot \begin{bmatrix} (+1)\cdot(+1)\cdot(+1)\cdot 23{,}6 + (-1)\cdot(+1)\cdot(+1)\cdot 23{,}25 + (+1)\cdot(-1)\cdot(+1)\cdot 19{,}8 + \\ + (-1)\cdot(-1)\cdot(+1)\cdot 24{,}05 + (+1)\cdot(+1)\cdot(-1)\cdot 36{,}15 + (-1)\cdot(+1)\cdot(-1)\cdot 40{,}35 + \\ + (+1)\cdot(-1)\cdot(-1)\cdot 21{,}85 + (-1)\cdot(-1)\cdot(-1)\cdot 22{,}55 \end{bmatrix} = 1{,}01$$

в) Розрахунок помилки досліду та оцінка значимості коефіцієнтів рівняння

Розрахунок дисперсії відтворюваності (помилки досліду) виробляється усередненням порядкових дисперсій по формулі

$$S_y^2 == \frac{1}{N \cdot (m-1)} \cdot S_u^2 \qquad (1.18)$$

де S_y^2 - дисперсія відтворюваності (помилка досліду);

N - число різних умов досліду (число рядків матриці планування);

m - число паралельних дослідів по кожному рядку матриці;

S_u^2 - дисперсія суми дисперсій за рядками.

$$S_y^2 = \frac{1}{8 \cdot (2-1)} \cdot 6{,}49 = 0{,}81125$$

Значимості коефіцієнтів рівняння регресії оцінюють за критерієм Стьюдента, для розрахунку якого попередньо визначають дисперсію коефіцієнтів по формулі

$$S_{b_i}^2 = \frac{S_y^2}{N \cdot m}, \qquad (1.19)$$

де $S_{b_i}^2$ - дисперсія коефіцієнтів рівняння регресії;

S_y^2 - дисперсія відтворюваності (помилки досліду);

N - число різних умов досліду;

m - число паралельних дослідів по кожному рядку матриці.

$$S_{b_i}^2 = \frac{0,81125}{8 \cdot 2} = 0,0507$$

Розрахунок t- критерію Стьюдента виконують за формулою

$$t_0 = \frac{|b_0|}{\sqrt{S_{b_i}^2}}, \quad t_i = \frac{|b_i|}{\sqrt{S_{b_i}^2}}, \quad t_{ij} = \frac{|b_{ij}|}{\sqrt{S_{b_i}^2}}, \quad t_{ijk} = \frac{|b_{ijk}|}{\sqrt{S_{b_i}^2}}, \tag{1.20}$$

де $t_0, t_i, t_{ij}, t_{ijk}$ - критерій Стьюдента коефіцієнтів рівняння;

$b_0, b_i, b_{ij}, b_{ijk}$ - коефіцієнти рівняння регресії;

i, j, k - номер фактора.

$$t_0 = \frac{|26,45|}{\sqrt{0,0507}} = 117,46; \quad t_1 = \frac{|-1,10|}{\sqrt{0,0507}} = 4,89; \quad t_2 = \frac{|4,39|}{\sqrt{0,0507}} = 19,5;$$

$$t_3 = \frac{|-3,77|}{\sqrt{0,0507}} = 16,74; \quad t_{12} = \frac{|0,14|}{\sqrt{0,0507}} = 0,62; \quad t_{13} = \frac{|0,13|}{\sqrt{0,0507}} = 0,58;$$

$$t_{23} = \frac{|-3,64|}{\sqrt{0,0507}} = 16,17; \quad t_{123} = \frac{|1,01|}{\sqrt{0,0507}} = 4,49.$$

Прийняття рішення про значимість коефіцієнтів рівняння регресії здійснюють на підставі виконання умов

$$t_0 \geq t_{\alpha,f}^{табл}; \quad t_i \geq t_{\alpha,f}^{табл}; \quad t_{ij} \geq t_{\alpha,f}^{табл}; \quad t_{ijk} \geq t_{\alpha,f}^{табл} \tag{1.21}$$

де $t_{\alpha,f}^{табл}$ - табличне значення критерію Стьюдента (додаток Б);

α - рівень значимості ($\alpha = 0,05$);

f - число ступенів вільності.

Якщо для якогось коефіцієнта рівняння умова (1.21) не виконується, то відповідний фактор варто визнати не значимим і виключити його з рівняння регресії.

Число ступенів вільності визначають по формулі

$$f = N \cdot (m-1), \qquad (1.22)$$

де N, m - число різних умов і паралельних дослідів відповідно.

Кількість ступенів вільності становить $f = 8 \cdot (2-1) = 8$, тоді $t_{0,05;8}^{табл} = 2{,}31$.

$t_0 = 117{,}45 \succ 2{,}31$; $t_1 = 4{,}89 \succ 2{,}31$; $t_2 = 19{,}5 \succ 2{,}31$; $t_3 = 16{,}74 \succ 2{,}31$;

$t_{12} = 0{,}62 \prec 2{,}31$; $t_{13} = 0{,}58 \prec 2{,}31$; $t_{23} = 16{,}17 \succ 2{,}31$; $t_{123} = 4{,}49 \succ 2{,}31$.

Таким чином, коефіцієнти рівняння регресії b_{12}, b_{13} не значимі, й вони виключаються з полінома першого ступеня (1.2), що для розглянутого завдання має вигляд

$$Y = 26{,}45 - 1{,}1X_1 + 4{,}39X_2 - 3{,}77X_3 - 3{,}64X_2X_3 + 1{,}01X_1X_2X_3 \qquad (1.23)$$

г) Аналіз адекватності математичної моделі

Для перевірки адекватності необхідно за отриманим рівнянням регресії й відповідно до матриці планування експерименту розраховують значення параметра оптимізації.

$\widehat{Y}_1 = 26{,}45 - 1{,}1 \cdot (+1) + 4{,}39 \cdot (+1) - 3{,}77 \cdot (+1) - 3{,}64 \cdot (+1) \cdot (+1) + 1{,}01 \cdot (+1) \cdot (+1) \cdot (+1) = 23{,}34;$

$\widehat{Y}_2 = 26{,}45 - 1{,}1 \cdot (-1) + 4{,}39 \cdot (+1) - 3{,}77 \cdot (+1) - 3{,}64 \cdot (+1) \cdot (+1) + 1{,}01 \cdot (-1) \cdot (+1) \cdot (+1) = 23{,}51;$

$\widehat{Y}_3 = 26{,}45 - 1{,}1 \cdot (+1) + 4{,}39 \cdot (-1) - 3{,}77 \cdot (+1) - 3{,}64 \cdot (-1) \cdot (+1) + 1{,}01 \cdot (+1) \cdot (-1) \cdot (+1) = 19{,}81;$

$\widehat{Y}_4 = 26{,}45 - 1{,}1 \cdot (-1) + 4{,}39 \cdot (-1) - 3{,}77 \cdot (+1) - 3{,}64 \cdot (-1) \cdot (+1) + 1{,}01 \cdot (-1) \cdot (-1) \cdot (+1) = 24{,}04;$

$\widehat{Y}_5 = 26{,}45 - 1{,}1 \cdot (+1) + 4{,}39 \cdot (+1) - 3{,}77 \cdot (-1) - 3{,}64 \cdot (+1) \cdot (-1) + 1{,}01 \cdot (+1) \cdot (+1) \cdot (-1) = 36{,}14;$

$\widehat{Y}_6 = 26{,}45 - 1{,}1 \cdot (-1) + 4{,}39 \cdot (+1) - 3{,}77 \cdot (-1) - 3{,}64 \cdot (+1) \cdot (-1) + 1{,}01 \cdot (-1) \cdot (+1) \cdot (-1) = 40{,}36;$

$\widehat{Y}_7 = 26{,}45 - 1{,}1 \cdot (+1) + 4{,}39 \cdot (-1) - 3{,}77 \cdot (-1) - 3{,}64 \cdot (-1) \cdot (-1) + 1{,}01 \cdot (+1) \cdot (-1) \cdot (-1) = 22{,}11;$

$\widehat{Y}_8 = 26{,}45 - 1{,}1 \cdot (-1) + 4{,}39 \cdot (-1) - 3{,}77 \cdot (-1) - 3{,}64 \cdot (-1) \cdot (-1) + 1{,}01 \cdot (-1) \cdot (-1) \cdot (-1) = 22{,}29.$

Для перевірки адекватності рівняння необхідно розрахувати дисперсію адекватності по формулі

$$S^2_{адекв.} = \frac{m}{N-l} \cdot \sum_{u=1}^{N} (\widehat{Y}_u - \overline{Y}_{uk})^2, \qquad (1.24)$$

де $S^2_{адекв.}$ - дисперсія адекватності;

N - число різних умов досліду;

m - число паралельних дослідів по кожному рядку матриці;

l - кількість коефіцієнтів рівняння, що залишилися після перевірки їх значимості;

$\overline{Y}_{uk}$ - значення параметра по u -тому рядку матриці в k -тому досліді ;

$\widehat{Y}_u$ - розрахункове значення параметра по рівнянню регресії зі значимими коефіцієнтами.

$$S^2_{адекв} = \frac{2}{8-6} \cdot \begin{bmatrix} (23,34-23,6)^2 + (23,51-23,25)^2 + (19,81-19,8)^2 + \\ + (24,04-24,05)^2 + (36,14-36,15)^2 + (40,36-40,35)^2 + \\ + (22,11-21,85)^2 + (22,29-22,55)^2 \end{bmatrix} = 0,27625$$

Адекватність рівняння перевіряється за критерієм Фішера. Якщо розрахункове значення критерію Фішера задовольняє умові

$$F_{розр.} \prec F_{табл.}, \qquad (1.25)$$

то рівняння вважається адекватним. Якщо умова (1.25) не виконується, то це свідчить про істотну кривизну функції відгуку (параметра), і рівняння вважається неадекватним.

Якщо гіпотеза адекватності моделі відкидається, то можливі наступні прийоми одержання адекватної моделі:

- збільшення інтервалів варіювання факторів (цей прийом може привести до мети, якщо вирішується завдання оптимізації);

- виділення (якщо можливо) фактора, що породжує неадекватність, і реалізація для *k - 1* факторів нових планів, що залишилися (при цьому виділений фактор повинен бути зафіксований на певному рівні);

- перетворення контрольованих змінних (факторів), тобто перехід до нових факторів, статистично зв'язаних з попередніми.

Розрахункове значення критерію Фішера визначається по формулі

$$F_{розр.} = \frac{S^2_{адекв.}}{S^2_y}, \tag{1.26}$$

де $F_{розр.}$ - розрахункове значення критерію Фішера;

$S^2_{адекв.}$ - дисперсія адекватності;

S^2_y - дисперсія відтворюваності (помилка досліду).

$$F_{розр.} = \frac{0{,}27625}{0{,}81125} = 0{,}3405$$

Табличне значення критерію Фішера визначається для $\alpha = 0{,}05$ і ступенів вільності f_1 и f_2 (додаток В).

$$f_1 = N - l, \tag{1.27}$$

$$f_2 = N \cdot (m-1), \tag{1.28}$$

де f_1, f_2 - число ступенів вільності;

N - число різних умов;

m - число паралельних дослідів по кожному рядку матриці;

l - кількість коефіцієнтів рівняння, що залишилися після перевірки їх значимості.

$$f_1 = 8 - 6 = 2, \qquad f_2 = 8 \cdot (2-1) = 8.$$

Табличне значення критерію Фішера дорівнює $F_{табл.} = 19{,}37$, а $F_{розр.} = 0{,}3405$, тобто $F_{розр.} \prec F_{табл.}$, отже, математична модель адекватна.

Результати виконаних розрахунків зводять у таблицю 10.

Виконання розрахунків за наведеним алгоритмом можливо здійснювати за допомогою ЕОМ використовую програми Excel, Mathcad та інші.

Таблиця 10 – Результати розрахунку коефіцієнтів і статистичний аналіз рівняння регресії

№ з/п	Найменування	Розрахункові значення
1	Коефіцієнти рівняння регресії	$b_0 = 26{,}45; b_1 = -1{,}1; b_2 = 4{,}39; b_3 = -3{,}77;$ $b_{23} = -3{,}64; b_{123} = 1{,}01$
2	Сума порядкових дисперсій	$\sum_{u=1}^{N} S_{uk}^2 = 6{,}49$
3	Критерій Кохрена (розрахункове значення)	$G^{розр.} = 0{,}3398$
4	Критерій Кохрена (табличне значення)	$f_1 = 2-1=1,\ f_2 = 8,\ G_{1;8}^{табл.} = 0{,}6798$
5	Умова однорідності дисперсій	$0{,}3398 \prec 0{,}6798$ – дисперсії однорідні
6	Дисперсія відтворюваності (помилка досліду)	$S_y^2 = 0{,}81125$
7	Дисперсія коефіцієнтів рівняння	$S_{b_i}^2 = 0{,}0507$
8	Критерій Стьюдента (розрахункове значення)	$t_0 = 117{,}46; t_1 = 4{,}89; t_2 = 19{,}5; t_3 = 16{,}74;$ $t_{12} = 0{,}62; t_{13} = 0{,}58; t_{23} = 16{,}17; t_{123} = 4{,}49$
9	Значимі коефіцієнти	$b_0; b_1; b_2; b_3; b_{23}; b_{123}$
10	Не значимі коефіцієнти	b_{12}, b_{13}
11	Дисперсія адекватності	$S_{адекв.}^2 = 0{,}27625$
12	Критерій Фішера (розрахункове значення)	$F_{розр.} = 0{,}3405$
13	Критерій Фішера (табличне значення)	$f_1 = 8-6 = 2;\quad f_2 = 8\cdot(2-1) = 8\ F_{табл.} = 19{,}37$
14	Адекватність моделі	Рівняння регресії адекватно ($F_{розр.} \prec F_{табл.}$)
15	Адекватне рівняння регресії (фактори в кодованій формі)	$Y = 26{,}45 - 1{,}1X_1 + 4{,}39X_2 - 3{,}77X_3 -$ $- 3{,}64X_2X_3 + 1{,}01X_1X_2X_3$

д) Аналіз математичної моделі

Отримана математична модель дозволяє оцінити ступінь як самостійного, так і спільного впливу факторів процесу корозії. Відносну силу впливу різних факторів можна представити у вигляді таблиці або діаграми, де величина кожного коефіцієнта позначена стовпчиком відповідної висоти (табл.11, рис 2.1).

Таблиця 11 – Коефіцієнти рівняння регресії

Позначення коефіцієнта	b_1	b_2	b_3	b_{23}	b_{123}
Значення	-1,10	4,39	-3,77	-3,64	-1,01

При аналізі коефіцієнтів рівняння регресії враховується наступне:

- чим більше абсолютна величина коефіцієнта фактора X_i, тим більший вплив цього фактора на величину параметра Y ;

- якщо коефіцієнт рівняння регресії фактора X_i приймає негативне значення, то для збільшення значення параметра оптимізації Y потрібно зменшити значення відповідного фактора;

- якщо коефіцієнт рівняння регресії фактора X_i приймає позитивне значення, то для збільшення значення параметра оптимізації Y потрібно збільшити значення відповідного фактора;

- якщо ефект взаємодії факторів X_iX_j має негативний знак, то для збільшення значення параметра оптимізації Y фактори X_i і X_j повинні змінюватися в різних напрямках.

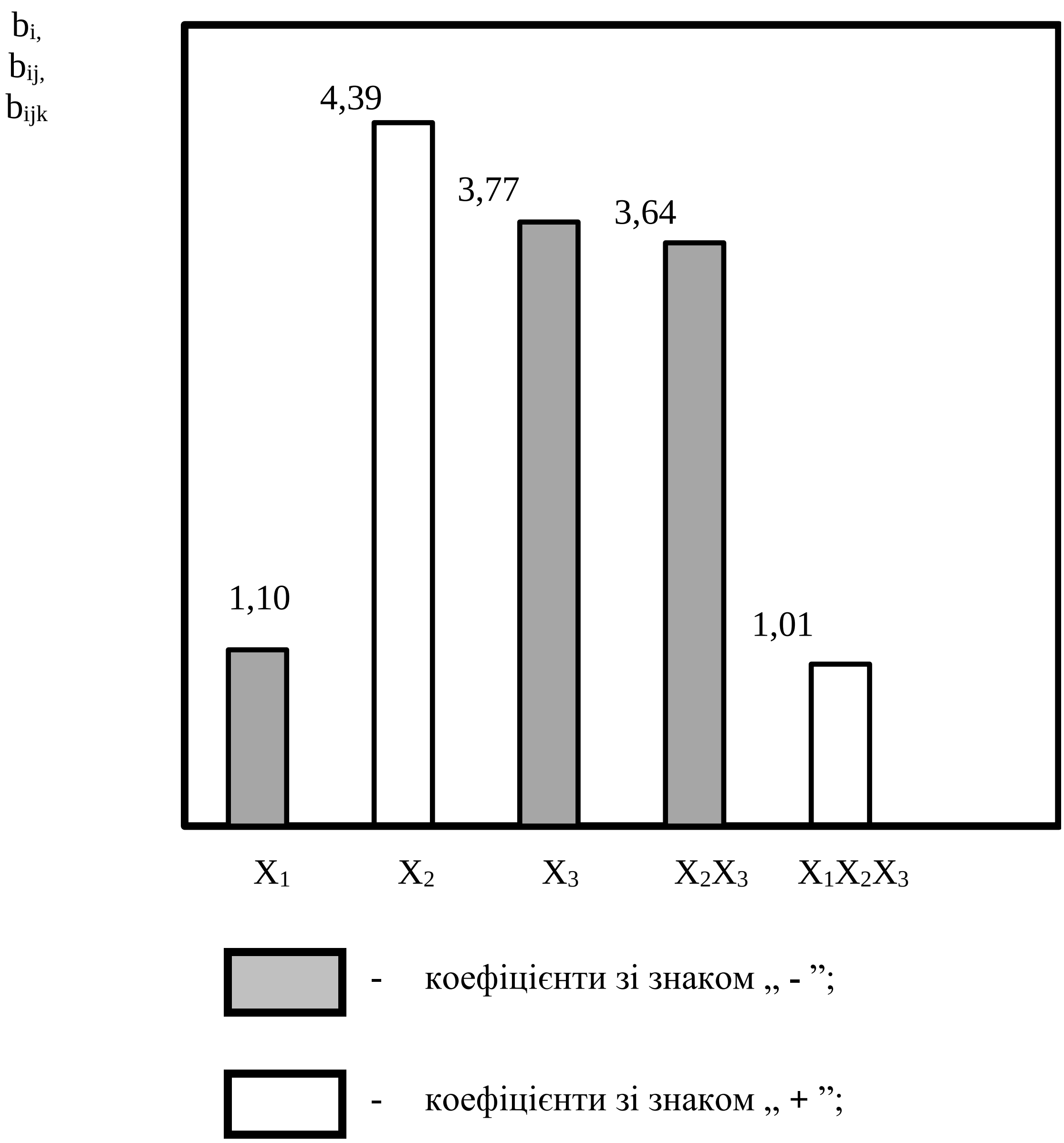

Рисунок 2.1 – Відносна сила впливу факторів

Істотний вплив на параметр Y – швидкості розчинення солевідкладень, мають фактори X_2 ($|b_2| = 4{,}39$) – кількість ортофосфатної і X_3 ($|b_3| = 3{,}77$) – кількість азотної кислоти у суміші, а так само їх спільна взаємодія ($|b_{23}| = 3{,}64$). Фактор X_1 – кількість соляної кислоти і спільна взаємодія факторів X_1, X_2, X_3 здійснюють незначний вплив на швидкість розчинення солевідкладень ($|b_1| = 1{,}1, b_{123} = 1{,}01$).

Враховуючи те, що величина коефіцієнтів рівняння регресії фактора X_2 приймає позитивне значення ($b_2 = 4{,}39$), а коефіцієнт фактора X_3 негативне значення ($b_3 = -3{,}77$), то для підвищення швидкості розчинення необхідно збільшувати кількість ортофосфатної кислоти (X_2) і зменшувати кількість азотної у суміші (X_3).

За допомогою отриманого рівняння регресії можна розрахувати швидкість розчинення солевідкладень для випадку зміни одного з факторів у досліджуваній області за умови фіксування двох інших факторів на нульовому рівні.

Наприклад, при $X_1 = +1$ і $X_2 = 0$, $X_3 = 0$ швидкість розчинення солевідкладень складатиме

$$Y = 26{,}45 - 1{,}1 \cdot (+1) + 4{,}39 \cdot 0 - 3{,}77 \cdot 0 - 3{,}64 \cdot 0 \cdot 0 + 1{,}01 \cdot (+1) \cdot 0 \cdot 0 = 27{,}5$$

Результати розрахунків швидкість розчинення солевідкладень наведено в таблиці 12.

Як видно з отриманих даних, максимальні значення швидкості розчинення солевідкладень відповідають $X_2 = +1$ ($Y = 30{,}8$ г/м³·год) і $X_3 = -1$ ($Y = 30{,}2$ г/м³·год), і зменшення кількості ортофосфатної кислоти (фактор X_2 - рівень –1) так само, як і збільшення азотної (фактор X_3 - рівень +1) обумовлюють зниження швидкості розчинення солевідкладень до 22,1 г/м³·год і 22,7 г/м³·год відповідно.

Таблиця 12 – Розрахункові значення параметра оптимізації

№ з/п	X_1	X_2	X_3	Y, г/м³·год
1	+ 1	0	0	27,5
2	- 1	0	0	25,3
3	0	+ 1	0	30,8
4	0	- 1	0	22,1
5	0	0	+ 1	22,7
6	0	0	- 1	30,2

При $X_1 = +1$ і $X_1 = -1$ швидкість розчинення солевідкладень знижується до 25,3 г/м³·год і 27,5 г/м³·год, тобто зменшення кількості соляної кислоти у суміші сприяє деякому підвищенню швидкості розчинення солевідкладень.

Таким чином, із проведеного аналізу можна припустити, що область оптимальних значень фактора X_2 перебуває в інтервалі значень від нульового рівня до рівня +1, тобто кількість ортофосфатної кислоти в суміші повино становити 24 – 27 %, а кількість азотної кислоти – фактор X_3 доцільно приймати в інтервалі від нульового рівня до –1, що відповідає значенням 6 – 4,5 %. Величина фактора X_1 може змінюватися в межах рівня від +1 до –1, тобто від 3 % до 7 %.

Зважаючи на те, що на швидкість розчинення солевідкладень впливає спільна взаємодія факторів, особливо X_2 і X_3 $(b_{23} = -3{,}64)$, то доцільно провести аналіз моделі при фіксованому значенні одного фактора на нульовому рівні і зміні двох інших на верхньому (+1) і нижньому (–1) рівнях (таблиця 13).

Отримані дані підтверджують раніше зроблені висновки і дозволяють визначити значення факторів для виробництва суміші з швидкістю розчинення солевідкладень більше 31 г/м³·год (таблиця 14).

Таблиця 13 – Розрахункові значення параметра оптимізації при зміні факторів

№ з/п	X_1	X_2	X_3	Y, г/м³·год
1	0	+1	+1	23,4
2	0	+1	-1	38,3
3	0	-1	-1	22,2
4	0	-1	+1	21,9
5	+1	0	+1	23,8
6	+1	0	-1	31,3
7	-1	0	-1	29,1
8	-1	0	+1	21,6
9	+1	+1	0	31,9
10	+1	-1	0	23,2
11	-1	-1	0	21,0
12	-1	+1	0	29,7

Як видно із отриманих даних, підвищення вмісту соляної кислоти у суміші до 7% незалежно від кількості ортофосфатної та азотної кислот обумовлює низьку швидкість розчинення солевідкладень –31,3 г/м³·год і 31,9 г/м³·год. Зменшення кількості соляної при однаковій кількості азотної кислоти і при збільшенні ортофосфатної кількості обумовлює збільшення швидкістю розчинення солевідкладень.

Таблиця 14 – Оптимальні технологічні параметри виготовлення суміші

№ з/п	Фактори (кодовані позначення)			Фактори (натуральні значення)			Y, г/м³·год
	X_1	X_2	X_3	X_1	X_2	X_3	
1	0	+1	-1	5	27	4,5	38,3
2	+1	0	-1	7	24	4,5	31,3
3	+1	+1	0	7	27	6	31,9

В якості оптимальної суміші кислот, яка забезпечить підвищену швидкість розчинення солевідкладень (більше 38,3 г/м³·год), рекомендуються наступні:

- Кількість соляної кислоти (X_1) – 5 %
- Кількість ортофосфатної (X_2) – 27 %
- Кількість азотної (X_3) – 4,5 %

2 Симплекс - ґратчасте планування експерименту

Важливою частиною дослідження багатокомпонентних матеріалів і сумішей є побудова діаграм "склад-властивість". Особливістю експерименту при побудові діаграми "склад-властивість" є нормування суми незалежних змінних

$$\Sigma X_i = 1 \quad \text{або} \quad \Sigma X_i = 100\%, \ (i = 1, 2, \dots q), \qquad (2.1)$$

де X_i - концентрація i-го компоненту в q – багатокомпонентній системі, частка одиниці або %.

У зв'язку із цим склади систем з будь-яким числом компонентів задаються симплексом, тобто найпростішою геометричною фігурою, що має $k + 1$ вершин в k- мірному просторі. Симплекс називається правильним, якщо відстані між всіма його вершинами рівні. Так, для трикомпонентних сумішей такі діаграми являють собою мережу ізоліній на трикутнику концентрацій. На рисунку 2.2 зображений трикутник концентрацій суміші, що складає із трьох компонентів: X_1, X_2, X_3. Вершини трикутника A, B і C відповідають 100 %-им концентраціям компонентів. На сторонах трикутника AB, AC і BC розміщені двокомпонентні суміші, що складаються, відповідно, з X_1 і X_2, X_1 і X_3, X_2 і X_3. У вузлах ґрат всередині трикутника, називаної симплексної, можна розмістити суміші, що складаються із всіх трьох компонентів з різним співвідношенням їхніх концентрацій.

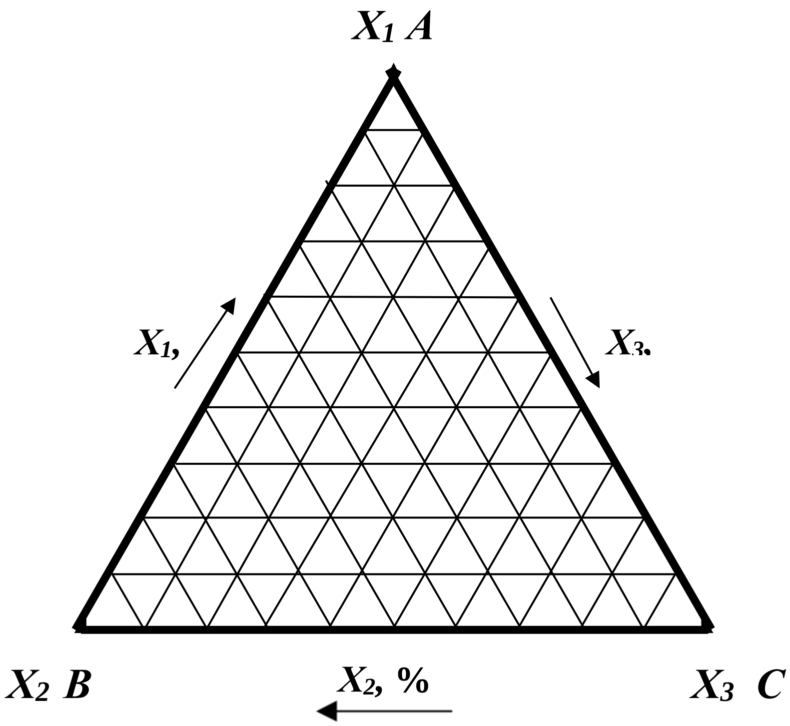

Рисунок 2.2 – Трикутник концентрацій суміші трьох компонентів X_1, X_2 і X_3

У симплекс - ґратчастих планах для побудови моделі ступеня *n* експериментальні крапки розташовують симетрично по симплексі, використовуючи для кожного компонента рівновіддалені рівні в інтервалі від 0 до 1. Всі можливі комбінації цих рівнів і являють собою плани – симплексні ґрати. Планування на симплексах здійснюють рівномірним розкидом експериментальних крапок. Виходять $\{n, m\}$ - ґратки, де n - число компонентів суміші (число факторів), m - порядок полінома.

Ступінь полінома залежить від складності поверхні відгуку. Опис починають поліномом першого ступеня. У випадку відсутності адекватності рівняння регресії підвищують ступінь полінома, для чого ставлять додаткові досліди. Кожної моделі відповідає цілком певне розташування крапок.

Сутність симплекс - методу, запропонованого Анри Шеффе, полягає в тому, що досліди ставлять із сумішами заздалегідь заданого складу, вимірюють відгук (властивості суміші), після чого систему описують поліномом. Як і в більшості інших способів планування експерименту, при проведенні експерименту на симплексі, як правило, будують регресійні моделі різного порядку.

При дослідженні системи на симплексі, складання матриці планування експерименту і виконання дослідів, проводять статистичну оцінку коефіцієнтів рівняння регресії.

Після одержання оцінок коефіцієнтів перевіряють гіпотезу про адекватність регресійної моделі, тобто з'ясовують, чи можна використовувати отримане рівняння, або необхідна інша модель. Процедура перевірки адекватності вимагає знання оцінки дисперсії досліду S_y^2 .

Гіпотези про однорідність перевіряють по одному із критеріїв: Кохрена (при однаковому дублюванні), Бартлетта (при неоднаковому дублюванні). Перевірка гіпотези про адекватності побудованих рівнянь виробляється за критерієм Фішера (F-критерій) і критерієм Стьюдента (t-критерій).

Математичні моделі при дослідженні систем на симплексі будують у вигляді канонічних моделей. Так, поліном другого порядку

$$\widehat{y} = b_0 + \sum_{1 \le i \le n} b_i X_j + \sum_{1 \le i \prec j \le n} b_{ij} X_i X_j + \sum_{1 \le i \le n} b_{ii} X_i^2 \qquad (2.2)$$

приводять до канонічного виду

$$\hat{y} = \sum_{1 \le i \le n} \beta_i X_i + \sum_{1 \le i \prec j \le n} b_{ij} X_i X_j \tag{2.3}$$

а) Побудова полінома другого порядку

Розглянемо алгоритм планування експерименту симплекс-методом для трикомпонентної системи для побудови математичної моделі другого порядку для вирішення наступної задачі.

Приклад:

Встановити залежність плазмового покриття від суміші порошків Ti, Ni та Al шляхом отримання математичної моделі – поліному неповного третього порядку.

Для побудови моделі виду (2.3) використовувався симплекс-ґратчастий план, що містить 6 дослідів і одну перевірочну крапку. Число паралельних дослідів дорівнює 2. Матриця планування експерименту і результати проведених дослідів наведені в таблиці 15.

Таблиця 15 – Матриця планування експерименту і результати дослідів

Номер рядка	Склад маси						Параметр оптимізації			Дисперсія S_u^2
	в кодових одиницях			в натуральних %			Паралельні визначення		$\bar{Y}_u$	
	X_1	X_2	X_3	X_1	X_2	X_3	Y_{u1}	Y_{u2}		
1	1	0	0	100	0	0	52,2	52,5	52,35	0,045
2	0	1	0	0	100	0	46,9	46,4	46,65	0,125
3	0	0	1	0	0	100	47,0	46,6	46,80	0,08
4	0,5	0,5	0	50	50	0	62,8	62,2	62,40	0,180
5	0,5	0	0,5	50	0	50	46,4	45,9	46,15	0,125
6	0	0,5	0,5	0	50	50	54,4	53,8	54,10	0,180
7	0,33	0,33	0,33	33,33	33,33	33,33	55,8	55,5	55,65	0,045

Далі обчислюють середнє значення параметра і порядкові дисперсії по паралельних дослідах по кожному рядку матриці, а так само суму середніх значень параметра і дисперсії

$$S_1^2 = \frac{(52{,}2-52{,}35)^2+(52{,}5-52{,}35)^2}{2-1} = 0{,}045 \qquad S_4^2 = \frac{(62{,}8-62{,}4)^2+(62{,}2-62{,}4)^2}{2-1} = 0{,}18$$

$$S_2^2 = \frac{(46{,}9-46{,}65)^2+(46{,}4-46{,}65)^2}{2-1} = 0{,}125 \qquad S_5^2 = \frac{(46{,}4-46{,}15)^2+(45{,}9-46{,}15)^2}{2-1} = 0{,}125$$

$$S_3^2 = \frac{(47{,}0-46{,}8)^2+(46{,}6-46{,}8)^2}{2-1} = 0{,}08 \qquad S_7^2 = \frac{(54{,}4-54{,}1)^2+(53{,}8-54{,}1)^2}{2-1} = 0{,}18$$

$$S_7^2 = \frac{(55{,}8-55{,}65)^2+(55{,}5-55{,}65)^2}{2-1} = 0{,}045$$

$$S_u^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + S_4^2 + S_5^2 + S_6^2 + S_7^2 = 0{,}045+0{,}125+0{,}08+0{,}18+$$
$$+0{,}125+0{,}18+0{,}045 = 0{,}78$$

Перевіряють гіпотезу про однорідності дисперсій.

$$G^{розр.} = \frac{0{,}18}{0{,}78} = 0{,}2308, \quad f_1 = 2-1 = 1, \quad f_2 = 4$$

Табличне значення критерію Кохрена дорівнює $G_{1;8}^{табл.} = 0{,}7271$ (додаток А) Враховуючи те, що $0{,}2308 \prec 0{,}7271$, дисперсії однорідні.

Розрахунок дисперсії відтворюваності (помилки досліду) і дисперсії коефіцієнтів

$$S_y^2 = \frac{1}{7\cdot(2-1)}\cdot 0{,}78 = 0{,}1114$$

Коефіцієнти рівняння розраховують по формулах

$$\beta_i = \bar{y}_i \qquad (2.4) \qquad\qquad \beta_{ij} = 4\bar{y}_{ij} - 2\bar{y}_i - 2\bar{y}_j \qquad (2.5)$$

де $\bar{y}_i$ - середнє значення параметра по i-му фактору;

$\bar{y}_{ij}$ - середнє значення параметра по рядку парної взаємодії i-го та j-го факторів.

$$\beta_1 = \bar{y}_1 = 52{,}35; \qquad \beta_2 = \bar{y}_2 = 46{,}65; \qquad \beta_3 = \bar{y}_3 = 46{,}80;$$

$$\beta_{12} = 4\bar{y}_{12} - 2\bar{y}_1 - 2\bar{y}_2 = 4 \cdot 62{,}4 - 2 \cdot 52{,}35 - 2 \cdot 46{,}65 = 52{,}00$$

$$\beta_{13} = 4\bar{y}_{13} - 2\bar{y}_1 - 2\bar{y}_3 = 4 \cdot 46{,}15 - 2 \cdot 52{,}35 - 2 \cdot 46{,}8 = -13{,}70$$

$$\beta_{23} = 4\bar{y}_{23} - 2\bar{y}_2 - 2\bar{y}_3 = 4 \cdot 54{,}1 - 2 \cdot 46{,}65 - 2 \cdot 46{,}8 = 29{,}50$$

Отримане рівняння регресії має вигляд

$$\hat{y} = 52{,}35 \cdot X_1 + 46{,}65 \cdot X_2 + 46{,}8 \cdot X_3 + 52 \cdot X_1 X_2 - 13{,}7 \cdot X_1 X_3 + 29{,}5 \cdot X_2 X_3 \qquad (2.6)$$

При використанні контрольних дослідів гіпотезу про адекватність рівняння регресії перевіряють за критерієм Стьюдента. Розрахункове значення критерію Стьюдента визначають по формулі

$$t^{розр} = \frac{|\bar{y}_k - \hat{y}_k|\sqrt{m_k},}{S_y \cdot \sqrt{1+\xi}} \qquad (2.7)$$

де $\bar{y}_k, \hat{y}_k$ - експериментальне і розрахункове значення відгуку в k- тім контрольнім досліді відповідно;

m_k - число паралельних дослідів в k- тім контрольнім досліді;

ξ - величина, що залежить від положення контрольного досліду на симплексі (для моделей другого порядку $\xi = 0{,}628$).

Гіпотеза про адекватність моделі не відхиляється у випадку, коли

$$t_{\alpha;f}^{розр} \le t_{\alpha;f}^{табл} \qquad (2.8)$$

Задоволення умови потрібно для всіх без винятку контрольних точок.

При рішенні завдань побудови математичних моделей діаграм "склад - властивість" з використанням симплекса можливий варіант, коли через складності функції відгуку отримана модель виявиться неадекватною. У цьому випадку буде потрібно проведення додаткових дослідів і перехід до моделі наступного ступеня з відповідним добудуванням матриці.

Розрахункове значення параметра оптимізації визначається для контрольної точки і становить

$$\hat{y}_7 = 52{,}35 \cdot 0{,}33 + 46{,}65 \cdot 0{,}33 + 46{,}8 \cdot 0{,}33 + 52 \cdot 0{,}33 \cdot 0{,}33 - 13{,}7 \cdot 0{,}33 \cdot 0{,}33 + \\ + 29{,}5 \cdot 0{,}33 \cdot 0{,}33 = 55{,}49$$

$$S_y = \sqrt{S_y^2} \qquad (2.9)$$

$$S_y = \sqrt{0{,}1114 = 0{,}3338}$$

Тоді розрахункове значення критерію Стьюдента дорівнюватиме

$$t^{розр.} = \frac{|55{,}65 - 55{,}50|\sqrt{2}}{0{,}3338 \cdot \sqrt{1 + 0{,}628}}$$

Для визначення табличного значення критерію обчислюють число ступенів вільності $f = 7 \cdot (2 - 1) = 7$. Табличне значення критерію Стьюдента для $f = 7, \alpha = 0{,}05$ (додаток Б) - $t_{0{,}05{,}7}^{табл.} = 2{,}37$. Так як виконується умова (2.8) – $0{,}51 \prec 2{,}37$, то гіпотеза про адекватність моделі не відхиляється.

У разі отримання неадекватного рівняння регресії ступінь поліному підвищується шляхом включення в план-матрицю перевірочної точки, тоді переходять до розрахунку коефіцієнтів полінома більш високого порядку. Розрахункові формули для обчислення коефіцієнтів поліномінальних моделей різних ступенів наведено в додатку Г.

Задачи для самоконтролю

Вивчався вплив складу платинового каталізатора на непористому маталичному носії (Pt/Al, O$_3$*) на його активність (Y, %) при 350°С. Сумарна масова кількість компонентів від досвіду до досвіду підтримувалась постійним тоді можна записати, що* $\sum X_I = 1$*. Де X1 - подрібнений відпрацьований каталізатор риформінгу, X2 та X3 - оксиди металів 1 та 2 груп періодичної системи Д.І.Менделєєва, частки одиниці. Результати дослідів 1-7 використовуйте для побудови моделі, 8-10 – для перевірки її адекватності.*

Помилка досвіду при вимірі активності каталізатора S=3.24%. Число паралельних дослідів у кожній точці плану n=2. Число ступенів свободи f =7.

Перевірте адекватність моделі за критерієм Стьюдента рівня значимості α=0,05. За отриманими моделями побудуйте ізолінії активності каталізатора.

Таблиця план-матриця експерименту та результати дослідів

№ досвіду	X1	X2	X3	У,%
1	1	0	0	97,4
2	0	1	0	3,0
3	0	0	1	4,7
4	1/2	1/2	0	70,0
5	1/2	0	1/2	66,0
6	0	1/2	1/2	68,0
7	0	2/3	1/3	96
8	1/3	2/3	0	46
9	2/3	1/3	0	91
10	1/3	1/3	1/3	95,4

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Жалдак М. І., Триус Ю. В. Основи теорії і методів оптимізації : навч. посіб. Черкаси : Брама-Україна, 2005. 608 с.
2. Сікора Я. Б., Щехорський А. Й., Якимчук Б. Л. Методи оптимізації та дослідження операцій : навч. посіб. Житомир : Вид-во ЖДУ ім. Івана Франка, 2019. 148 с.
3. Теорія ймовірностей, математична статистика та імовірнісні процеси : навч. посіб. / Слюсарчук Ю. М., Хром'як Й. Я., Джавала Л. Л., Цимбал В. М. Львів : Львівська політехніка, 2015. 364 с.
4. Пінчук С. Й. Організація експерименту при моделюванні та оптимізації технічних систем : навч. посіб. Дніпропетровськ : Дніпро-VAL, 2009. 289 с.
5. Пантейков С. П. Конспект лекцій з дисципліни "Математичне моделювання технологічних процесів" для студентів спеціальності 8.05040101 – "Металургія чорних металів" (усіх форм навчання). Дніпродзержинськ : ДДТУ, 2012. 38 с.
6. Оптимізація корозійних процесів : навч.-метод. рек. до лаборатор. практикуму / упоряд.: І. В. Голуб, А. В. Біла ; Укр. держ. ун-т науки і технологій. Дніпро : УДУНТ, 2024. 46 с.

ДОДАТОК А

Значення критерію Кохрена (*G*-критерій) для $\alpha = 0{,}05$

f_1 / f_2	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**	**10**	**16**
2	0,9985	0,9750	0,90392	0,9057	0,8772	0,8534	0,8332	0,8159	0,8010	0,7880	0,7341
3	0,9669	0,8709	0,7977	0,7457	0,7071	0,6771	0,6530	0,6333	0,6167	0,6025	0,5466
4	0,9065	0,7679	0,6841	0,6287	0,5895	0,5598	0,5365	0,5175	0,5017	0,4884	0,4366
5	0,8412	0,6838	0,5981	0,5441	0,5065	0,4783	0,4564	0,4387	0,4241	0,4118	0,3645
6	0,7808	0,6161	0,5321	0,4803	0,4447	0,4184	0,3980	0,3817	0,3682	0,3568	0,3135
7	0,7271	0,5612	0,4800	0,4307	0,3974	0,3726	0,3535	0,3384	0,3259	0,3154	0,2756
8	0,6798	0,5157	0,4377	0,3910	0,3595	0,3362	0,3185	0,3043	0,2926	0,2829	0,2462
9	0,6385	0,4775	0,4027	0,3584	0,3286	0,3067	0,2901	0,2768	0,2659	0,2568	0,2226
10	0,6020	0,4450	0,3733	0,3311	0,3029	0,2823	0,2666	0,2541	0,2439	0,2353	0,2032
12	0,5410	0,3924	0,3264	0,2880	0,2624	0,2439	0,2299	0,2187	0,2098	0,2020	0,1737
15	0,4709	0,3346	0,2758	0,2419	0,2195	0,2034	0,1911	0,1815	0,1815	0,1671	0,1429
20	0,3894	0,2705	0,2205	0,1921	0,1735	0,1602	0,1501	0,1422	0,1357	0,1303	0,1303

ДОДАТОК Б

Значення критерію Стьюдента (*t*-критерію)

Число ступенів вільності	Рівень значимості, α			Число ступенів вільності	Рівень значимості, α		
	0,1	0,05	0,1		0,01	0,05	0,1
1	6,31	12,7	10,01	26	1,71	2,06	2,78
2	2,92	4,30	9,93	27	1,70	2,05	2,77
3	2,35	3,18	5,84	28	1,70	2,05	2,76
4	2,13	2,78	4,60	29	1,70	2,05	2,76
5	2,02	2,57	4,03	30	1,70	2,045	2,756
6	1,94	2,45	3,71	32	1,699	2,041	2,742
7	1,90	2,37	3,50	34	1,696	2,037	2,737
8	1,86	2,31	3,36	36	1,692	2,032	2,729
9	1,83	2,26	3,25	38	1,691	2,028	2,715
10	1,81	2,23	3,17	40	1,689	2,023	2,708
11	1,80	2,20	3,11	42	1,688	2,020	2,701
12	1,78	2,18	3,06	46	1,685	2,016	2,692
13	1,77	2,16	3,01	48	1,684	2,011	2,683
14	1,76	2,15	2,98	50	1,682	2,009	2,679
15	1,75	2,13	2,95	55	1,680	2,005	2,669
16	1,75	2,12	2,92	60	1,677	2,001	2,662
17	1,74	2,11	2,90	65	1,675	1,998	2,675
18	1,73	2,10	2,88	70	1,674	1,996	2,649
19	1,73	2,09	2,86	75	1,671	1,993	2,645
20	1,73	2,09	2,85	80	1,669	1,991	2,640
21	1,72	2,08	2,83	85	1,667	1,989	2,637
22	1,72	2,07	2,82	90	1,667	1,987	2,633
23	1,71	2,07	2,81	95	1,665	1,985	2,629
24	1,71	2,06	2,80	100	1,662	1,984	2,627
25	1,71	2,06	2,79				

ДОДАТОК В

Критерій Фішера (F - критерій) для $\alpha = 0{,}05$

Число ступенів вільност і	Число ступенів вільності														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	16	24	40	100
1	161	200	216	225	230	234	237	239	241	242	244	246	249	251	253
2	18,51	19,0	19,16	19,25	19,30	19,33	19,37	19,37	19,38	19,39	19,41	19,43	19,45	19,47	19,49
3	10,13	9,55	9,28	9,12	9,01	8,94	8,38	8,84	8,81	8,78	8,74	8,69	8,64	8,60	8,56
4	7,71	6,94	6,59	6,39	6,26	6,16	6,09	6,04	6,0	5,96	5,91	5,84	5,77	5,71	5,66
5	6,10	5,79	5,41	5,19	5,05	4,95	4,88	4,82	4,78	4,74	4,68	4,60	4,53	4,46	4,40
6	5,99	5,14	5,76	4,53	4,39	4,28	4,21	4,15	4,10	4,03	4,0	3,92	3,84	3,77	3,71
7	5,59	4,74	4,35	4,12	3,97	3,87	3,79	3,73	3,68	3,63	3,57	3,49	3,41	3,34	3,28
8	5,32	4,46	4,07	3,84	3,69	3,58	3,50	3,44	3,39	3,34	3,28	3,2	3,12	3,05	2,98
9	5,12	4,26	3,86	3,63	3,48	3,37	3,29	3,23	3,18	3,13	3,07	2,98	2,98	2,82	2,76
10	4,96	4,10	3,71	3,48	3,33	3,32	3,14	3,07	3,02	2,97	2,91	2,82	2,74	2,67	2,59
12	4,75	3,88	3,49	3,26	3,11	3,0	2,92	2,85	2,80	2,76	2,69	2,60	2,50	2,46	2,35
14	4,60	3,74	3,34	3,11	2,96	2,85	2,77	2,70	2,65	2,60	2,53	2,44	2,35	2,27	2,19
16	4,49	3,63	3,24	3,01	2,85	2,74	2,66	2,59	2,54	2,49	2,42	2,33	2,24	2,16	2,07
18	4,41	3,55	3,16	2,93	2,77	2,66	2,58	2,51	2,46	2,41	2,34	2,25	2,15	2,07	1,98

ДОДАТОК Г

Лінійна модель: $$y = \sum_{i=1}^{q} b_i \cdot x_i$$, де $b_i = y_i$.

Модель другого ступеня: $$y = \sum_{1 \le i \le q} b_i \cdot x_i + \sum_{1 \le i \le j \le q} b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j,$$

де $b_i = y_i$; $b_{ij} = 4y_{ij} - 2y_i - 2y_j$

Неповна кубічна модель:

$$y = \sum_{1 \le i \le q} b_i \cdot x_i + \sum_{1 \le i < j \le q} b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{1 \le i < j < k \le q} b_{ijk} \cdot x_i \cdot x_j \cdot x_k,$$

де $b_i = y_i$,;$b_{ij} = 4y_{ij} - 2y_i - 2y_j$; $b_{ijk} = 27y_{ijk} - 12(y_{ij} + y_{ik} + y_{jk}) + 3(y_i + y_j + y_k)$

Кубічна модель:

$$y = \sum_{1 \le i \le q} b_i \cdot x_i + \sum_{1 \le i < j \le q} b_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \sum_{1 \le i < j \le q} \gamma_{ij} \cdot x_i \cdot x_j \cdot (x_i - x_j) + \sum_{1 \le i < j < k \le q} b_{ijk} \cdot x_i \cdot x_j \cdot x_k,$$

де $b_i = y_i$

$b_{ij} = 9/4\ (y_{iij} + y_{ijj} - y_i - y_j)$;

$\gamma_{ij} = 9/4\ (3\ y_{iij} - 3y_{ijj} - y_i + y_j)$;

$b_{ijk} = 27y_{ijk} - 27/4\ (y_{iij} + y_{ijj} + y_{ikk} + y_{jjk} + y_{iik} + y_{jkk}) + 9/2\ (y_i + y_j + y_k)$

Навчально-методичне видання

Голуб Ірина Валеріївна

ОПТИМІЗАЦІЯ КОРОЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ

Навчально-методичні рекомендації до проведення практичних занять

Електронне видання

Експертний висновок склав канд. техн. наук, доц. Ольга Носко

Зареєстровано НМВ УДУНТ (№ 710 від 18.03.2024)

В авторській редакції

Комп'ютерна верстка І. В. Голуб

Формат 60х84 $_{1/16.}$ Ум. друк арк. 2,85. Облік.-вид. арк. 1,22.
Зам. № 34

Видавець: Українській державний університет науки і технологій
вул. Лазаряна, 2, ауд. 2216, м. Дніпро, 49010
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 7709 від 14.12.2022

Адрес видавця та дільниці оперативної поліграфії:
вул. Лазаряна, 2, Дніпро, 49010