

Министерство сельского хозяйства Российской Федерации
ФГБОУ ВПО «Ульяновская ГСХА им. П.А. Столыпина»

ГЛУЩЕНКО А.А., ХОХЛОВ А.Л., САЛАХУТДИНОВ И.Р.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ**

Ульяновск 2015

УДК 621.001.57

Г 55

ББК К1–1с31я73-2

Глущенко А.А. Моделирование технологических процессов и систем: учебное пособие для аспирантов инженерного факультета / Составители: А.А. Глущенко, А.Л. Хохлов, И.Р. Салахутдинов.– Ульяновск: УГСХА имени П. А. Столыпина, 2015. – 76 с.

Рецензенты: Дьяков Иван Федорович, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Основы проектирования машин» ФГБОУ ВПО «Ульяновский государственный технический университет»

Исаев Юрий Михайлович, доктор технических наук, профессор кафедры «Высшая математика» ФГБОУ ВПО «Ульяновская государственная сельскохозяйственная академия им. П.А. Столыпина»

В учебном пособии рассмотрены основные понятия теории моделирования, классификации моделей и моделирования, основы планирования эксперимента и основы построения регрессионных моделей для исследования технологических процессов и систем.

В учебном пособии использованы материалы В.А. Штерезон «Моделирование технологических процессов». Учебное пособие предназначено для подготовки аспирантов по направлению подготовки 35.06.04 и профилю подготовки 05.20.03 – Технологии и средства технического обслуживания в сельском хозяйстве, а также может быть полезно для инженерно-технических работников, научных организаций и студентов инженерных специальностей.

Печатается по решению научно-технического совета
ФГБОУ ВПО «Ульяновская ГСХА им. П.А. Столыпина»

Протокол № 1 от 24.02.2015.

© Глущенко А.А., Хохлов А.Л., Салахутдинов И.Р., 2015

© ФГБОУ ВПО «Ульяновская ГСХА им. П.А. Столыпина», 2015

1 ОРГАНИЗАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКИЙ РАЗДЕЛ

Цель и задачи изучения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Моделирование технологических процессов и систем» являются процессы моделирования технологических процессов и систем при техническом обслуживании и ремонте в агроинженерных системах. Полученные знания составляют профессиональную компетентность и мобильность слушателей в области моделирования процессов и систем. Освоение программы курса поможет реализовать информационно-образовательное расширение круга знаний слушателей об основных принципах, законах и методах современной технологии моделирования процессов и систем в агроинженерии, а также даст возможность применения полученных знаний для успешного выполнения диссертационного исследования.

Основными задачами учебной дисциплины «Моделирование технологических процессов и систем» являются:

- формирование у аспирантов основных знаний по теории и технологии моделирования технологических процессов и систем в агроинженерных системах;
- формирование у аспирантов навыков по моделированию технологических процессов и систем в условиях современной образовательной и информационной среды.

Место дисциплины в структуре ООП ВПО

Дисциплина входит в вариативную часть профессионального цикла Б 1, дисциплина по выбору Б 1. В. ДВ 2 очной формы обучения, осваивается на 2 курсе обучения.

Для изучения курса «Моделирование технологических процессов и систем» требуются знания по следующим дисциплинам: «Основы проектирования технологического оборудования», «Технологии технического обслуживания, ремонта и диагностики автомобилей».

Минимальные требования к «входным» знаниям, необходимым для успешного освоения данной дисциплины: удовлетворительное усвоение программ по указанным выше дисциплинам.

Общекультурные и профессиональные компетенции

Изучение дисциплины «Моделирование технологических процессов и систем» направлено на формирование у аспирантов профессиональных компетенций:

- способностью к анализу и выбору современных технологических процессов и технических средств технического обслуживания, ремонта и диагностики автотракторной техники и используемых в ней эксплуатационных материалов) (ПК-1);

- готовностью разрабатывать новые, осуществлять прогнозирование последствий и эффективности использования разработанных технологических процессов и технических средств технического обслуживания, ремонта и диагностики автотракторной техники и используемых в ней эксплуатационных материалов (ПК-2).

универсальные компетенции:

- способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1).

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

знать:

- основные методы моделирования систем, современные технические средства и их программное обеспечение для решения задач моделирования;

уметь:

- производить анализ исходной задачи осуществлять оценку необходимости решения задачи методом моделирования, приводить исходную модель к виду, удобному для моделирования, разрабатывать программы для решения конкретных задач моделирования применять известные методы для идентификации математических моделей;

- грамотно ставить задачу, выделять данные и искомые объекты, формулировать цель решения;

- анализировать возможности моделирования процессов и систем и их программного обеспечения, выбирать из них адекватные поставленной задаче;

- интерпретировать полученные результаты и использовать их в практической деятельности.

- иметь представление о современных тенденциях развития изучаемых технических средств и методов моделирования.

владеть:

- современными инструментами моделирования;

- знаниями и навыками решения конкретных задач анализа и моделирования технологических процессов и систем при техническом обслуживании и ремонте в агроинженерных системах.

3 ГЛОССАРИЙ

Адаптивность – приспособляемость к различным внешним возмущающим факторам в широком диапазоне изменения воздействий внешней среды.

Адекватность модели объекту есть показатель того, что результаты моделирования подтверждаются и могут служить основой для прогнозирования процессов, протекающих в исследуемых объектах.

Аналогия - суждение о каком-либо частном сходстве двух объектов.

Аналоговая модель - система, имеющая физическую природу, отличающуюся от оригинала, но сходные с оригиналом процессы функционирования

Выборочной совокупностью (или *выборкой*) называется совокупность случайно отобранных однородных объектов.

Генеральной совокупностью называется совокупность всех однородных объектов, из которых производится выборка.

Гипотеза - определенное предсказание, основывающееся на небольшом количестве опытных данных, наблюдений.

Имитационная модель - это совокупность описания системы и внешних воздействий, алгоритмов функционирования системы или правил изменения состояния системы под влиянием внешних и внутренних возмущений.

Квазинатуральные модели - совокупность натуральных и математических моделей.

Корреляция – это связь между двумя или несколькими величинами или исследуемыми объектами. Корреляция бывает двух видов: *детерминированная* (определяется строгими

закономерностями и обычно описывается физико-химическими формулами) и *стохастическая* (случайная, вероятностная – проявляется в том, что одна из величин влияет на изменение другой изменениями своего закона распределения).

Масштабная модель - это система той же физической природы, что и оригинал, но отличается от него масштабами.

Математические модели - формализованное представление системы с помощью абстрактного языка, с помощью математических соотношений, отражающих процесс функционирования системы.

Моделирование – это замещение одного объекта другим с целью получения информации о важнейших свойствах объекта-оригинала с помощью объекта-модели.

Натуральные модели — это реальные исследуемые системы (макеты, опытные образцы).

Объемом совокупности (выборочной или генеральной) называется число объектов этой совокупности.

Процесс – определенная совокупность действий, направленных на достижение поставленной цели.

Регрессия - зависимость между случайными величинами.

Система – целенаправленное множество объектов любой природы.

Случайная величина - величина, которая в результате одного и того же опыта может принять то или иное заранее неизвестное значение.

Численная модель характеризуется зависимостью такого вида, который допускает только частные решения для конкретных начальных условий и количественных параметров моделей.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время методология моделирования и вычислительного эксперимента стала составной частью общих подходов, характерных для современных информационных технологий. Ее практическая реализация существенно повышает эффективность инженерных разработок, особенно при создании принципиально новых, не имеющих прототипов машин и приборов, материалов и технологий. Она позволяет сократить затраты времени и средств на использование в технике передовых достижений физики, химии, механики и других фундаментальных наук. При этом нередко возникает необходимость в количественном анализе процессов, протекающих в системах с распределенными параметрами, когда важно располагать информацией о их распределении в пространстве и изменении во времени. Такая информация позволит не только оптимизировать исследовательский процесс, но и выбрать альтернативу.

1 ВВЕДЕНИЕ В МОДЕЛИРОВАНИЕ

1.1 Модель и моделирование

Термин «*модель*» (от лат. *modulus* – мера, образец, норма) вошел в математику в XIX в. в связи с развитием неевклидовой геометрии.

Сегодня в литературе можно встретить множество определений понятия «*модель*». Суммируя все известные определения, можно сказать, что *модель* – это объект любой природы, который при исследовании способен замещать реально существующий объект с целью получения новой информации о последнем.

Кроме понятия «*модель*» в моделировании есть еще ряд важных понятий.

Объект (от лат. *objectum* – предмет) – все, на что направлена человеческая деятельность [3]. Любой объект исследования является бесконечно сложным и характеризуется бесконечным числом состояний и параметров.

Процесс – определенная совокупность действий, направленных на достижение поставленной цели.

Система – целенаправленное множество объектов любой природы [3].

Таким образом, можно сказать, что *система* – это совокупность взаимосвязанных элементов и компонентов, имеющая вполне конкретную структуру и вполне конкретное целевое назначение.

Элемент системы – часть системы, не подвергаемая дальнейшему делению.

Моделирование – это замещение одного объекта (оригинала) другим (моделью) и изучение свойств модели. Замещение проводится с целью упрощения, удешевления, ускорения

ния изучения свойств оригинала.

В общем случае объектом-оригиналом может быть естественная или искусственная, реальная или воображаемая система. Она имеет множество параметров S_0 и характеризуется определёнными свойствами. Количественной мерой свойств системы служит множество характеристик Y_0 , система проявляет свои свойства под влиянием внешних воздействий X .

1.2. Цели и принципы моделирования

Создавая модель объекта, исследователь познает объект, т. е. выделяет его из окружающей среды и строит его формальное описание.

Основные цели моделирования:

- описание объекта;
- объяснение объекта;
- прогнозирование поведения и свойств объекта.

Цели описания и объяснения объекта можно объединить в одну - изучение объекта (познавательная цель). Модель нужна для того, чтобы понять, как устроен конкретный исследуемый объект, каковы его структура, внутренние связи, основные свойства, законы развития, саморазвития и взаимодействия с окружающей средой [2]. Еще одна цель (прогнозирование поведения и свойств объекта) является частью стратегической цели – управлять объектом, определяя по модели оптимальные управляющие воздействия при заданных целях и критериях. Модель нужна и для того, чтобы прогнозировать последствия различных воздействий на объект.

В основе моделирования лежит *теория подобия*, согласно которой абсолютное подобие возможно только при замене одного объекта другим точно таким же.

Любая модель не тождественна объекту-оригиналу и не является полной, так как при ее построении исследователь учитывал только те особенности объекта, которые считал наиболее важными для решения конкретной задачи. Достаточно того, чтобы модель хорошо отражала интересующие исследователя свойства и проявления анализируемого объекта.

Реальная польза от моделирования может быть получена при выполнении следующих условий:

- модель должна быть адекватной оригиналу в том смысле, что должна с достаточной точностью отображать интересующие исследователя характеристики оригинала;

- модель должна устранять проблемы, связанные с физическими измерениями каких-то сигналов или характеристик оригинала.

Моделирование базируется на нескольких основополагающих принципах [5]:

1. *Принцип информационной достаточности* – при полном отсутствии информации об объекте построение его модели невозможно. Существует некоторый уровень априорной информации об объекте, только при достижении которого может быть построена адекватная модель.

2. *Принцип осуществимости* – создаваемая модель должна обеспечивать достижение поставленной цели исследования с вероятностью, существенно отличающейся от нуля.

3. *Принцип множественности моделей* – создаваемая модель должна отражать в первую очередь те свойства реального объекта (системы), которые интересуют исследователя. Для полного исследования объекта необходимо достаточно большое количество моделей, отражающих исследуемый объект с разных сторон и с разной степенью детализации.

4. *Принцип агрегатирования* – в большинстве исследо-

ваний систему целесообразно представить как совокупность подсистем, для описания которых оказываются пригодными стандартные схемы.

5. Принцип параметризации – модель строится в виде известной системы, параметры которой неизвестны.

Цель функционирования определяет степень целенаправленного поведения модели. По этому признаку модели могут быть разделены на одно- и многоцелевые.

Сложность модели можно оценить по общему числу элементов в системе и связей между ними.

Целостность указывает на то, что создаваемая модель является одной общей системой, включает в себя большое количество составных частей, находящихся в сложной взаимосвязи друг с другом.

Неопределенность, которая проявляется в системе, оценивается *энтропией*. Используя эту характеристику, в ряде случаев можно определить количество управляющей информации для достижения заданного состояния системы.

Поведенческая стратегия позволяет оценить эффективность достижения системой поставленной цели. В зависимости от наличия случайных возмущений можно различать детерминированные и стохастические системы, по своему поведению – непрерывные и дискретные.

Адаптивность – приспособляемость к различным внешним возмущающим факторам в широком диапазоне изменения воздействий внешней среды. При этом система управления должна компенсировать изменение случайных факторов.

Организационная структура системы моделирования во многом зависит от сложности модели и степени совершенства средств моделирования.

Управляемость модели дает возможность обеспечивать

управление процессом в различных условиях, имитирующих реальные. К этому можно отнести управление технологическим процессом как в нормальном, так и в предаварийном состоянии.

Возможность развития модели позволяет создавать мощные системы моделирования для исследования многих сторон функционирования реального объекта. Модель должна быть открытой: обеспечивать включение в ее состав новых подмоделей или подсистем управления.

Любую модель строят в зависимости от цели моделирования, поэтому одной из основных проблем при моделировании является проблема целевого назначения. При создании АСУ целью оптимизации может быть максимальная производительность, минимум потерь цветных металлов, снижение себестоимости продукции и некоторые другие цели.

1.3 Классификация моделей

При моделировании используются следующие модели (рис. 1.1).

Физические модели. В основу классификации положена степень абстрагирования модели от оригинала. Предварительно все модели можно подразделить на 2 группы — физические и абстрактные (математические).

Ф.М. обычно называют систему, эквивалентную или подобную оригиналу, но возможно имеющую другую физическую природу. Виды Ф.М.:

- натуральные;
- квазинатуральные;
- масштабные;
- аналоговые;

Натуральные модели — это реальные исследуемые

системы (макеты, опытные образцы). Имеют полную адекватность (соответствия) с системой оригиналом, но дороги.



Рисунок 1.1 - Классификация моделей

Квазинатуральные модели — совокупность натуральных и математических моделей. Этот вид используется тогда, когда модель части системы не может быть математической из-за сложности её описания (модель человека оператора) или когда часть системы должна быть исследована во взаимодействии с другими частями, но их ещё не существует или их включение очень дорого. (вычислительные полигоны, АСУ)

Масштабная модель — это система той же физической природы, что и оригинал, но отличается от него масштабами. Методологической основой масштабного моделирования является теория подобия. При проектировании ВС мас-

штабные модели могут использоваться для анализа вариантов компоновочных решений.

Аналоговыми моделями называют системы, имеющие физическую природу, отличающуюся от оригинала, но сходные с оригиналом процессы функционирования. Для создания аналоговой модели требуется наличие математического описания изучаемой системы. В качестве аналоговых моделей используются механические, гидравлические, пневматические и электрические системы. Аналоговое моделирование использует при исследовании средства ВТ на уровне логических элементов и электрических цепей, а так же на системном уровне, когда функционирование системы описывается например, дифференциальными или алгебраическими уравнениями.

Математические модели. Математические модели представляют собой формализованное представление системы с помощью абстрактного языка, с помощью математических соотношений, отражающих процесс функционирования системы. Для составления математических моделей можно использовать любые математические средства — алгебраическое, дифференциальное, интегральное исчисления, теорию множеств, теорию алгоритмов и т.д. По существу вся математика создана для составления и исследования моделей объектов и процессов.

К средствам абстрактного описания систем относятся также языки химических формул, схем, чертежей, карт, диаграмм и т.п. Выбор вида модели определяется особенностями изучаемой системы и целями моделирования, т.к. исследование модели позволяет получить ответы на определённую группу вопросов. Для получения другой информации может потребоваться модель другого вида. Математическое моделирование можно классифицировать на детерминированные и вероятно-

стные, аналитические, численные и имитационные.

Аналитической моделью называется такое формализованное описание системы, которое позволяет получить решение уравнения (1.2) в явном виде, используя известный математический аппарат.

Численная модель характеризуется зависимостью (1.2) такого вида, который допускает только частные решения для конкретных начальных условий и количественных параметров моделей.

Имитационная модель — это совокупность описания системы и внешних воздействий, алгоритмов функционирования системы или правил изменения состояния системы под влиянием внешних и внутренних возмущений. Эти алгоритмы и правила не дают возможности использования имеющихся математических методов аналитического и численного решения, но позволяют имитировать процесс функционирования системы и производить вычисления интересующих характеристик. Имитационные модели могут быть созданы для гораздо более широкого класса объектов и процессов, чем аналитические и численные. Поскольку для реализации имитационных моделей служат ВС, средствами формализованного описания ИМ служат универсальные и специальные алгоритмические языки. ИМ в наибольшей степени подходят для исследования ВС на системном уровне.

Классификация процессов как объектов моделирования

Процессы, для управления которыми создаются системы управлений, можно разделить на три группы:

- *непрерывные*, которые характеризуются непрерывным режимом работы;
- *полунепрерывные* (непрерывно-дискретные), которые

характеризуются полунепрерывным режимом работы;
--*периодические*, которые характеризуются дискретным режимом работы.

В соответствии с приведенной классификацией процессов выделяются системы управления с непрерывными, полунепрерывными и периодическими процессами.

Наибольшую сложность представляет автоматизация периодических процессов. Для реализации АСУ необходимо промоделировать технологический процесс.

1.4 Структурно-параметрическое описание и назначение параметров объекта

В математической модели проектируемого объекта выделяют структурно-параметрическое описание собственно объекта и описание поведения объекта во времени и внешней среде. Математическая модель проектируемого объекта состоит из двух частей: структурно-параметрического описания объекта с помощью набора проектных параметров и модели функционирования.

Структурно-параметрическое описание это описание, которое показывает, из каких подсистем, блоков, агрегатов, деталей состоит данный объект, как эти компоненты соединены и взаимодействуют между собой, каковы их весовые, габаритные характеристики и т.д.

Структурно-параметрическое описание должно давать возможность генерировать множество альтернатив, быть достаточно подробным, соответствующим этапу проектирования и доставлять информацию для моделей функционирования.

Для сложных объектов существуют различные методы структурно-параметрического описания: систематического покрытия поля, отрицания и конструирования, морфологиче-

ского ящика, комбинаторного файла и т.д.

При построении модели наряду со структурным возникает потребность в параметрическом описании. Обычно такое описание дается конечным набором параметров, варьируя значения которых в определенных пределах с учетом необходимых ограничений, можно вводить в структуру оперативного управления различные по характеристикам подсистемы.

Параметрическое описание объекта включает в себя выделение совокупности входных переменных (внешних параметров) X_1, X_2, \dots, X_n , управляющих воздействий U_1, U_2, \dots, U_k , влияющих на процесс, выходных переменных (зависимых параметров) Y_1, Y_2, \dots, Y_m , характеризующих протекание процесса, а также внутренних параметров модели P_1, P_2, \dots, P_l .

Управляющие воздействия U_1, U_2, \dots, U_k являются целенаправленно изменяемыми переменными и формируются на основе информации о входных переменных, которые называются управляемыми. Остальные входные переменные относятся к возмущающим воздействиям, а выходные переменные – к неуправляемым.

Внутренние параметры модели – это внутренние характеристики объекта, не зависящие от процесса моделирования, например, конструктивные параметры агрегатов, теплофизические свойства объектов и т.п.

Возмущающие воздействия и неуправляемые переменные могут быть контролируруемыми (наблюдаемыми) и неконтролируемыми (ненаблюдаемыми).

В математическом моделировании используется различный математический аппарат в зависимости от характера моделируемого процесса или объекта.

Модели функционирования управляемых динамических систем описываются обыкновенными дифференциальными

уравнениями. Этот класс систем характеризуется тем, что содержит модели, адекватно отражающие функционирование современных изделий машиностроения, технологических систем и т.д. Модели функционирования подразделяются:

на модели без управления

$$Y = f(t, z, \delta),$$

используемые для создания систем контроля, диагностики и прогнозирования технических систем, где z – вектор фазовых состояний; t – время; δ – набор параметров;

модели с управлением, применяемые для создания систем автоматического управления:

$$Y = f(t, z, \delta, u, \mu),$$

где μ – возмущение; u – управляющее воздействие.

Для описания процессов, протекающих в технологических агрегатах, используют математические выражения, которые составляют математическую модель процесса или объекта управления. В зависимости от того, какие математические формулы используют для описания процессов, математические модели подразделяют на линейные и нелинейные.

Линейной называется такая математическая модель описания объекта или процесса, для построения которой используют линейные дифференциальные или другие уравнения, т.е. уравнения, в которых связь между входными и выходными параметрами является линейной.

Нелинейной называется такая математическая модель описания объекта или процесса, для построения которой используют нелинейные уравнения, т.е. уравнения, в которых связь между входными и выходными параметрами является нелинейной.

Линейные модели могут использоваться для описания взаимосвязи входных и выходных параметров с помощью парных и множественных вероятностных (регрессионных)

уравнений.

С помощью нелинейных моделей можно описать сложные физико-химические процессы и процессы массопереноса и физических превращений.

Дискретные и непрерывные модели

При построении моделей сложных систем большое значение имеет идея прерывности, на основе которой сложные явления поддаются описанию как закономерно составленные из простых частей.

Идея прерывности применяется при описании процессов с сосредоточенными и распределенными параметрами.

Используя принципы соответствия, конкретности и прерывности для систем управления отдельными агрегатами, цехами и заводами, можно построить расчленённые модели, обозримые как в целом, так и для каждой из структурных единиц. Чем сложнее система, тем более крупную структурную единицу нужно рассматривать на каждой ступени иерархии, а модель всей системы можно представить как систему подмоделей.

При этом между структурными единицами нужно оставить лишь минимум необходимых связей, учитывая, что внутри каждой единицы существует саморегулирование.

2 МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ

2.1 Математический аппарат, используемый при синтезе математической модели

Процесс моделирования можно представить в виде следующих этапов:

- 1) постановка задачи;

- 2) выбор и построение модели – выбор структуры, тематическое описание отдельных блоков;
- 3) исследование модели;
- 4) перенос знаний с модели на оригинал и экспериментальная проверка модели.

Основным этапом является постановка задачи моделирования, которая определяет подход к построению моделей.

Для составления математических моделей может использоваться следующий математический аппарат:

- метод активного и пассивного эксперимента;
- метод аналогий;
- метод экспериментально-статистический;
- метод параметрической идентификации;
- алгебраические линейные и нелинейные уравнения;
- дифференциальные уравнения;
- регрессионные (вероятностные) уравнения и некоторые другие.

Для оптимизации технологических систем практическое применение получили методы линейного, нелинейного, динамического программирования.

Метод пассивного эксперимента используют для определения значений основных технологических параметров и для анализа изменения их динамики при заданном (существующем) способе или законе управления технологическими процессами (ТП). Данный метод используется для построения вероятностных математических моделей технологических процессов и для описания процессов в статике, например, для оценки технико-экономических показателей работы устройства или процесса за смену, месяц или год.

Метод активного эксперимента применяют для проверки правильности построения математических моделей процессов, для проверки разработанных методов и законов

управления. Сущность активного эксперимента состоит в том, что управляющие воздействия, определенные расчетным путем, прикладываются к регуляторам и исследуют реакцию системы (технологического процесса) на эти возмущения.

Алгебраические линейные и нелинейные уравнения. К алгебраическим относят уравнение вида

$$F(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_{n-1}x + a_n = 0$$

где a_i – коэффициенты. действительные или комплексные числа. $F(x)$ – многочлен степени n относительно X , который называется алгебраическим уравнением степени n с неизвестным x .

Алгебраическое уравнение степени n имеет n корней. Оно называется действительным, если все его коэффициенты a_i являются действительными числами. Математические модели могут описываться алгебраическими уравнениями первой (линейными), второй (квадратными), третьей (кубическими уравнениями) степени и т.д.

Дифференциальные уравнения позволяют выразить соотношения между изменениями физических величин. Они подразделяют на линейные и нелинейные.

Обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка

$$\frac{dy}{dx} = F(x, y). \quad (2.1)$$

имеет решение $y = y(x)$, удовлетворяющее условию $y(x_0) = y_0$, если $F(x, y)$ непрерывна в некоторой окрестности точки (x_0, y_0) .

Обыкновенные дифференциальные уравнения используют для создания динамических моделей физико-химических процессов, воспроизводящих поведение процессов во времени. Такие модели дают возможность прогнози-

ровать будущее состояние процесса, определять оптимальные пути его протекания, а следовательно, и пути повышения производительности или экономичности. Дифференциальные уравнения позволяют рассчитывать управляющие воздействия для регулирования технологического процесса.

Обыкновенные дифференциальные уравнения используются при описании технологических процессов с сосредоточенными параметрами.

Во многих реальных системах наряду с изменением параметров во времени происходит их существенное изменение в пространстве. Для моделирования таких объектов, называемых системами с распределенными параметрами, применяются *дифференциальные уравнения в частных производных*.

Линейное уравнение с частными производными второго порядка в случае двух переменных записывается следующим образом:

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + a \frac{\partial u}{\partial y} + b \frac{\partial u}{\partial x} + cu = F(x, y). \quad (2.2)$$

В зависимости от знака дискриминанта $D = A\tilde{N} - b^2$ уравнение (2.2) относят к уравнениям эллиптического типа при $D > 0$, параболического типа при $D = 0$ и гиперболического типа при $D < 0$. Если уравнение (2.2) меняет тип от точки к точке, его называют уравнением смешанного типа.

В уравнении (2.2) переменные x и y являются независимыми технологическими параметрами процесса (концентрация, вес, температура, производительность); u – скорость изменения выходного параметра во времени; A, B, C – коэффициенты.

К системам с распределенными параметрами прежде всего относятся так называемые сплошные среды. Математические модели процессов, происходящих в газах, жидко-

стях и твердых телах (движения, теплопереноса, диффузии), обычно строятся в предположении, что вещество сплошь заполняет занимаемый им объем, т.е. оно находится в каждой точке объема. Это допущение вполне обосновано с физической точки зрения, поскольку межмолекулярные расстояния внутри вещества столь ничтожны по сравнению с размерами рассматриваемого объема и масштабами моделируемых явлений, что ими можно пренебречь без особого ущерба для качества моделей.

Математические модели сплошной среды строятся на основе общих физических законов, в частности законов сохранения массы, количества движения, энергии и др.

Моделирование технологических процессов с помощью дифференциальных уравнений сводится, как правило, к решению систем уравнений, в которых число уравнений равно числу неизвестных функций.

Метод аналогий.

Операции в аналогово-вычислительных машинах – АВМ (вычислительных машинах специального назначения) осуществляются с непрерывно изменяющимися физическими величинами, например напряжением постоянного тока. Принцип действия АВМ является наглядным примером математического подобия, вытекающего из единства природы и проявляющегося в том, что разные по физической природе процессы и явления могут описываться одинаковыми по форме дифференциальными и другими уравнениями.

АВМ – это устройство, состоящее из элементов, которые будучи соединены соответствующим образом, представляют сложную систему, подобную в определенном смысле исходной сложной системе, взятой в качестве объекта для моделирования.

Различают два подхода к моделированию, а в связи с

этим и два типа АВМ. В первом случае моделируются по операциям математические уравнения, подлежащие решению, т.е. в основу берется математическое подобие уравнений, при этом в АВМ имеется набор операционных блоков (умножения на постоянный коэффициент, суммирования, интегрирования), соединяя которые определенным образом, можно получить схему, описываемую таким же по форме дифференциальным уравнением, что и исходное. Изменяя непрерывно изменяющуюся величину, например напряжение, на выходе соответствующего операционного блока, получают решение исходного уравнения. Критериальное соотношение между коэффициентами исходного уравнения и машинного находится в соответствии с теоремой подобия.

Во втором случае в основу закладывается физическая природа задачи, исследуемая система моделируется по ее отдельным составным частям. Здесь наиболее последовательно используются принципы моделирования методом поэтапной прямой аналогии.

2.2 Экспериментально-статистические методы математического описания

Наиболее распространенными экспериментально-статистическими методами математического описания являются регрессионный анализ (применительно к активному и пассивному эксперименту), динамический корреляционный анализ (анализ случайных процессов), идентификация и оценивание параметров. Они нашли широкое применение при построении прогнозирующих моделей металлургических процессов.

Все процессы, происходящие в природе, являются результатом взаимодействия многих факторов. Для того чтобы

изучить эти процессы и в дальнейшем ими управлять, необходимо выяснить, какую роль в рассматриваемом процессе играет каждый фактор в отдельности. Таким образом, математические методы изучения взаимодействующих факторов требуют умения выражать действия различных факторов количественно.

В основе методологии построения математических моделей стохастических процессов и зависимостей, отражающих взаимосвязи между экспериментальными данными, лежит теория случайных величин и регрессионный анализ.

2.3 Теории случайных величин

Случайной называется величина, которая в результате одного и того же опыта может принять то или иное заранее неизвестное значение. Случайные величины могут быть *дискретными (прерывными)* и *непрерывными*.

Дискретные случайные величины принимают изолированные числовые значения, отделенные друг от друга конечными интервалами (например, число попаданий при нескольких выстрелах, число появлений герба при нескольких подбрасываниях монеты). Значения непрерывных случайных величин не могут быть заранее перечислены и непрерывно заполняют некоторый промежуток (например, ошибка измерения, дальность полета снаряда).

Всякое соответствие между возможными значениями случайной величины и вероятностями, с которыми эти значения принимаются, называется *законом распределения* случайной величины. Закон распределения количественно может выражаться в следующих формах: табличной, графической и аналитической.

При количественном описании закона распределения

вероятностей можно воспользоваться вероятностью события $X < x$, где x – текущая переменная. Вероятность этого события называется *функцией распределения случайной величины* X и обозначается $F(x)$:

$$F(x) = P(X < x). \quad (2.3)$$

Одной из форм закона распределения непрерывной случайной величины является *плотность распределения вероятностей* $f(x)$. Она связана с функцией распределения формулой

$$f(x) = F'(x). \quad (2.4)$$

Наиболее важную роль среди законов распределения непрерывных случайных величин играет нормальный закон. Случайная величина X называется распределенной по нормальному закону, если ее плотность распределения вероятности имеет вид

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (2.5)$$

где m – математическое ожидание величины X ; σ – ее среднее квадратическое отклонение.

При решении большинства практических задач закон распределения, т.е. полная характеристика случайной величины, неудобен для использования. Поэтому чаще применяют числовые характеристики случайной величины, наиболее распространенными из которых являются математическое ожидание, дисперсия и среднее квадратическое отклонение.

Математическое ожидание непрерывной случайной величины находится следующим образом:

$$M[X] = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x)dx. \quad (2.6)$$

Дисперсия $D[X]$ и среднее квадратическое отклонение определяют рассеяние случайной величины около её матема-

тического ожидания и вычисляются по формулам

$$D[X] = M[X - M[X]]^2, \\ \sigma[X] = \sqrt{D[X]}.$$

Корреляция – это связь между двумя или несколькими величинами или исследуемыми объектами. Корреляция бывает двух видов: *детерминированная* (определяется строгими закономерностями и обычно описывается физико-химическими формулами) и *стохастическая* (случайная, вероятностная – проявляется в том, что одна из величин влияет на изменение другой изменениями своего закона распределения).

Характеристикой системы двух случайных величин, описывающей тесноту связи между ними, является коэффициент корреляции

$$r_{xy} = \frac{M[(X - m_x) - (Y - m_y)]}{\sigma_x \sigma_y}, \quad (2.7)$$

где m_x, m_y – сокращенное обозначение математического ожидания величины X и Y , соответственно, $m_x = M[X], m_y = M[Y]$. Если $r_{xy} = 0$, то корреляционная связь между величинами отсутствует.

2.4 Построение и исследование регрессионных моделей

Зависимость между случайными величинами называется *регрессией*. Она понимается как зависимость между математическими ожиданиями этих величин.

Форма связи между случайными величинами определяется линией регрессии, показывающей, как в среднем изменяется величина Y при изменении величины X , что характеризуют условным математическим ожиданием $m_{y/x}$ величины Y , вычисляемым при $X = x$. Таким образом, кривая регрес-

сии Y на X есть зависимость условного математического ожидания Y от известного значения X .

Математическая постановка задачи регрессионного анализа:

для каждого i -го опыта имеется набор значений входных параметров $X1i, X2i, \dots, Xni$ и соответствующее этому набору значение выходного параметра Yi . Необходимо определить зависимость выходного параметра Y от входных факторов $X1i, X2i, \dots, Xni$, которая в случае, например, линейной связи может иметь вид

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + \dots + b_nX_n. \quad (2.8)$$

Такая зависимость называется *линейной регрессией*. Любая другая зависимость называется *нелинейной регрессией*.

Задача сводится к тому, чтобы при измеренных во время опытов значениях входных переменных X_1, X_2, \dots, X_n и выходной переменной Y найти коэффициенты уравнения регрессии $b_0, b_1, b_2, \dots, b_n$, которые с определенной вероятностью будут отражать связь аргументов X_1, X_2, \dots, X_n с Y .

Регрессионная зависимость вида $Y = f(X_i)$ называется *однофакторной* или *парной* и описывает связь между двумя переменными: входной X и выходной Y .

Регрессионная зависимость вида $Y = f(X_1, X_2, \dots, X_n)$ называется *многофакторной* или *множественной* и описывает связь между несколькими входными X_1, X_2, \dots, X_n и одной выходной переменной Y .

Построение и исследование регрессионной модели можно разбить на четыре этапа.

1-й этап. Проверка наличия стохастической связи между исследуемыми величинами. Для этого нужно определить по значению r_{xy} , существует ли корреляционная связь между X и Y .

2-й этап. Выбор вида уравнения регрессии. Вид уравнения регрессии выбирается исходя из особенностей изучаемой системы случайных величин.

Один из возможных подходов при этом – экспериментальный подбор типа уравнения регрессии по соответствующим критериям адекватности. В случае же, когда имеется определенная априорная (доопытная) информация об объекте, более эффективным является использование для этой цели теоретических представлений о процессах и типах связей между изучаемыми параметрами.

3-й этап. Расчет параметров (коэффициентов) уравнения регрессии.

Для определения параметров (коэффициентов) уравнения регрессии используется метод наименьших квадратов (МНК). Сущность метода заключается в том, что выбирается такая линия регрессии, при которой сумма квадратов разностей между экспериментальными значениями выходной переменной Y_i , полученными на объекте, и значениями, рассчитанными по выбранной регрессионной формуле (модели) $Y_i = f(X_i)$, будет минимальной:

$$q = \sum_{i=1}^n (Y_i - mY)^2 \Rightarrow \min, \quad (2.9)$$

где q – критерий близости модели и объекта, называемый невязкой модели; n – количество экспериментальных данных.

Задача построения линейной модели сводится к минимизации функции невязки следующего вида:

$$q = \sum_{i=1}^n (Y_i - (b_0 + b_1x_{1i} + b_2x_{2i} + \dots + b_nx_{ni}))^2 \Rightarrow \min. \quad (2.10)$$

В качестве нелинейных регрессионных моделей чаще всего используются полиномы разной степени:

$$Y = b_0 + b_1 X + b_2 X^2 + \dots + b_m X^m. \quad (2.11)$$

4-й этап. Проверка адекватности структуры модели. Об адекватности структуры модели можно судить по коэффициенту корреляции r или корреляционному отношению η , гистограмме распределения остатков и содержательному анализу остатков модели.

Коэффициент корреляции r характеризует степень тесноты линейной связи между \tilde{Y} и Y . Приближенное значение r определяется по формуле

$$r = \frac{n \sum_{i=1}^n \tilde{Y}_i Y_i - \sum_{i=1}^n \tilde{Y}_i \sum_{i=1}^n Y_i}{\sqrt{\left[\sum_{i=1}^n \tilde{Y}_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n \tilde{Y}_i \right)^2 \right] \left[\sum_{i=1}^n Y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n Y_i \right)^2 \right]}}. \quad (2.12)$$

Коэффициент корреляции изменяется от -1 до $+1$.

Корреляционное отношение η характеризует степень тесноты нелинейной связи между переменными \tilde{Y}_i и Y :

$$\eta = \sqrt{\frac{n \sum_{i=1}^n (\tilde{Y}_i - \tilde{Y})^2}{n \sum_{i=1}^n (Y_i - \tilde{Y})^2}}, \quad (2.13)$$

где \tilde{Y}_i – текущее значение параметра Y , вычисленное по математической модели; Y_i – текущее значение параметра Y , полученное на объекте; \tilde{Y} – выборочное среднее значение,

$$\tilde{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i. \quad (2.14)$$

Корреляционное отношение изменяется от 0 до 1 .

Следует иметь в виду, что коэффициент корреляции является частным случаем корреляционного отношения и используется обычно только при исследовании линейных

моделей. Выводы о степени адекватности модели делаются на основании значения коэффициента корреляции или корреляционного отношения, которые должны быть близки к 1.

3 ПРИМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ АНАЛИЗА И РАСЧЕТА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Интерполяционные методы обработки исходных данных

Вычисление значения функции $y = f(x)$ – одна из тех задач, с которой на практике приходится сталкиваться постоянно. Желательно иметь быстрые и надежные алгоритмы вычисления значений используемой функции. Рассмотрим некоторые типичные ситуации.

1. Функция f задана таблицей своих значений:

$$y_i = f(x_i) \quad (i = 0, 1, \dots, n).$$

2. Непосредственное определение значения $y = f(x_i)$ связано с проведением сложных расчетов и требует существенных затрат машинного времени, которые могут оказаться неприемлемыми, если функция вычисляется многократно.

3. При заданном значении x значение функции может быть найдено в результате эксперимента. Такой способ в большинстве случаев нельзя использовать в вычислительных алгоритмах, т.к. он связан с необходимостью прерывания вычислительного процесса для проведения эксперимента. В этой ситуации экспериментальные данные получают до начала расчетов на ЭВМ.

Нередко они представляют собой таблицу с тем отличием, что табличные значения y_i отличаются от «истинных» зна-

чений y_i , т.к. заведомо содержат ошибки эксперимента. Возникающие проблемы нередко удается решить следующим образом. Функцию $f(x)$ приближенно заменяют другой функцией $g(x)$, вычисляемые значения которой и принимают за приближенные значения функции $f(x)$.

Постановка задачи интерполяции: пусть в точках x_0, x_1, \dots, x_n , расположенных на отрезке $[a, b]$ и попарно различных, задана таблица значений некоторой функции f . Задача интерполяции состоит в построении функции g , удовлетворяющей условию

$$g(x_i) = y_i \quad (i = 0, 1, \dots, n).$$

Другими словами, ставится задача о построении функции g , график которой проходит через заданные точки (x_i, y_i) . Указанный способ приближения функций принято называть интерполяцией (или интерполированием), а точки x_i – узлами интерполяции. Нетрудно видеть, что выбор функций g неоднозначен.

Постановка задачи экстраполяции: пусть x_{\min} и x_{\max} – минимальный и максимальный узлы интерполяции. В случае, когда интерполяция используется для вычисления приближенного значения функции f в точке x , не принадлежащей отрезку $[x_{\min}, x_{\max}]$ (отрезку наблюдения), принято говорить о том, что осуществляется экстраполяция.

Этот метод приближения часто используют с целью прогнозирования характера протекания тех или иных процессов при значениях параметров, выходящих за пределы отрезка наблюдения. Надежность такого прогноза при значениях x , удаленных на большое расстояние от отрезка $[x_{\min}, x_{\max}]$, как правило, невелика.

Интерполяция сплайнами

Повышение точности интерполяционного многочлена возможно благодаря увеличению его степени, но связано с существенным повышением сложности вычислений. Сплайн-функция, или сплайн – специальным образом построенные гладкие кусочно-многочленные функции.

Пусть отрезок $[a, b]$ разбит точками $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ на n частичных отрезков $[x_i - x_{i-1}]$. Сплайном степени m называется функция $S_m(x)$, обладающая следующими свойствами:

- функция $S_m(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$ вместе со своими производными до некоторого порядка p ;

- на каждом частичном отрезке $[x_i - x_{i-1}]$ функция $S_m(x)$ совпадает с некоторым алгебраическим многочленом $P_{m, i}(x)$ степени m .

Наибольшее распространение на практике получили сплайны третьей степени:

$$S_3(x) = a_i + b_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3.$$

Методы первичной обработки статистических данных

В основе методологии построения математических моделей стохастических процессов и зависимостей, отражающих взаимосвязи между экспериментальными данными, лежит теория случайных величин и регрессионный анализ.

Выборочной совокупностью (или *выборкой*) называется совокупность случайно отобранных однородных объектов.

Генеральной совокупностью называется совокупность всех однородных объектов, из которых производится выборка.

Объемом совокупности (выборочной или генеральной) называется число объектов этой совокупности.

Выборка называется *репрезентативной* (представительной), если она достаточно хорошо представляет количественные соотношения генеральной совокупности.

Расположим результаты выборки в таблице. Пусть $\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_l$ – различные значения случайной величины X , соответственно, в 1, 2, 3, ..., n -м испытаниях. Среди приведенных значений случайной величины X могут быть и равные.

Объединив равные значения случайной величины, получим таблицу

X	x_1	x_1	x_1	...	x_l
n_x	n_1	n_2	n_3	...	n_l

где n_i – число появлений значения x_i ($i = 1, 2, \dots, l$). Величины n_1, n_2, \dots, n_l называются *частотами* соответствующих значений x_1, x_2, \dots, x_l случайной величины X . Очевидно, что $\sum_{i=1}^l n_i = n$, т.е. сумма частот всех значений случайной величины равна объему выборки.

Отношение частоты n_i к объему выборки n называется *относительной частотой* значения x_i и обозначается через w_i ($i = 1, 2, \dots, l$). Следовательно, для случайной величины X сумма относительных частот всех ее значений равна единице.

Таблица, устанавливающая соответствие между значениями случайной величины и их относительными частотами, называется *статистическим распределением* случайной величины X :

X	x_1	x_1	x_1	...	x_l
W	w_1	w_2	w_3	...	w_l

Для наглядности статистическое распределение дискретной случайной величины иллюстрируется *полигоном* распределения. Для этого последовательные точки $(x_1; w_1), (x_2; w_2), \dots, (x_l; w_l)$ изображают на координатной плос-

кости и соединяют их прямолинейными отрезками.

Точки, не являющиеся вершинами полигона, не представляют интереса с точки зрения математической статистики.

4 ПОСТРОЕНИЕ ЭМПИРИЧЕСКИХ РЕГРЕССИОННЫХ МОДЕЛЕЙ

4.1 Планирование и проведение эксперимента

С общефилософской точки зрения эксперимент (от лат. *experimentum* – проба, опыт) – это чувственно-предметная деятельность в науке, в более узком смысле слова – опыт, воспроизведение объекта познания, проверка гипотез и т. д. [10]. Большинство научных исследований связано с экспериментом – физическим, психологическим или модельным.

Планирование эксперимента – раздел математической статистики, изучающий рациональную организацию измерений и наблюдений [4]. Планирование эксперимента состоит в процедуре выбора числа и условий проведения опытов, необходимых и достаточных для исследования объекта с заданной точностью. Планирование эксперимента обеспечивает [10, 11]:

- одновременное варьирование всех факторов по специальным правилам;
- использование математического аппарата, формализующего многие действия экспериментатора;
- выбор четкой стратегии, позволяющей принимать обоснованные решения после каждой серии экспериментов;

- минимизацию числа опытов, ресурсов (финансовых, временных, материальных, человеческих).

В основе построения эмпирических моделей лежит теория многофакторного эксперимента (МФЭ), разработанная Р. Фишером, которая опирается на изучение состояния и поведения объекта при одновременном изменении нескольких входных факторов.

Эксперимент можно рассматривать как реализацию всех или части состояний, в которых может находиться объект.

В теории многофакторного эксперимента сам эксперимент понимается как совокупность опытов.

Опыт – воспроизведение исследуемого объекта в строго определенных условиях при возможности регистрации результатов.

По форме проведения и представления результатов эксперименты бывают качественными и количественными [10].

Качественный эксперимент устанавливает сам факт наличия объекта, процесса или явления, но при этом не дает никаких количественных характеристик.

Количественный эксперимент не только фиксирует сам факт существования того или иного объекта, процесса или явления, но и позволяет установить соотношение между количественными характеристиками поведения исследуемого объекта и количественными характеристиками внешнего воздействия.

При проведении опытов очень важно, может ли исследователь во время опытов устанавливать те уровни факторов, которые представляют для него интерес. С этой точки зрения различают следующие факторы [10]:

- контролируемые и управляемые – это факторы, для которых можно не только зарегистрировать их уровень, но и задать в каждом опыте любое возможное значение;

- контролируемые, но не управляемые – это факторы, уровни которых можно только регистрировать, но задавать в каждом опыте определенное значение практически невозможно;

- неконтролируемые – это факторы, уровни которых не регистрируются исследователем, он даже может не подозревать об их существовании.

Если исследователь имеет возможность контролировать и управлять уровнями факторов, то такой эксперимент можно назвать активным. Если исследователь может только наблюдать и регистрировать, но не имеет возможности управлять уровнями факторов, то это пассивный эксперимент.

Во время экспериментального исследования объект рассматривается как «черный ящик» (рис. 4.1).

Выходные факторы в эксперименте еще называют откликом, а зависимость $Y_j = f(X_1, X_2, \dots, X_k)$, которую пытаются установить, – функцией отклика.

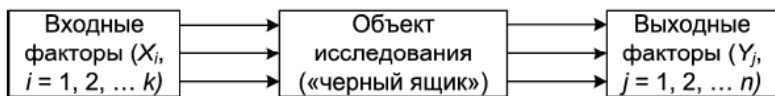


Рисунок 4.1 - Объект исследования в общем виде

План эксперимента – совокупность данных, определяющих число, условия и порядок реализации опытов.

Совокупность областей определения входных факторов назовем факторным пространством. Каждая точка факторного пространства представляет собой вполне опре-

деленное сочетание конкретных значений входных факторов и соответствует одному состоянию объекта. На основе анализа задачи исследования и априорной информации об исследуемом объекте для каждого входного фактора выделяется область, в пределах которой он будет изменяться во время эксперимента. Сочетание таких областей по всем входным факторам будем называть факторным пространством эксперимента.

Планирование эксперимента начинают с выбора нулевого уровня каждого входного фактора, в качестве которого может быть взята любая точка факторного пространства эксперимента. Но одной точки – нулевого уровня – для проведения эксперимента и получения необходимой информации недостаточно. Нужны еще точки. Построение плана эксперимента – это выбор точек (уровней входных факторов) относительно нулевого.

Для определения других уровней входных факторов вводится интервал варьирования каждого входного фактора. Чтобы обозначить верхний уровень входного фактора, следует интервал варьирования прибавить к нулевому уровню данного фактора, а чтобы определить нижний уровень – вычесть интервал варьирования из нулевого уровня. На интервал варьирования накладываются ограничения естественного характера снизу и сверху.

К интервалу варьирования входного фактора предъявляются следующие требования:

- он не может быть менее ошибки, с которой измеряется данный фактор, иначе уровни фактора будут неразличимы;

- он не может быть слишком большим, т. е. нижние и верхние уровни не должны покидать области определения фактора и области проведения эксперимента.

Обычно при первичном планировании эксперимента количество уровней по всем входным факторам выбирают одинаковым. Тогда количество опытов в эксперименте ($N_{\text{э}}$) может быть определено по формуле

$$N = p^k,$$

где p – число уровней каждого входного фактора; k – число входных факторов, исследуемых в эксперименте.

Если из анализа априорной информации известно, что исследуемая зависимость $Y_j = f(X_1, X_2, \dots, X_k)$ является линейной, то достаточно реализовать эксперимент, в котором каждый входной фактор имеет в эксперименте только два уровня, т. е.

$$N = 2^k.$$

Такой план эксперимента называется планом первого порядка. Если из анализа априорной информации известно, что исследуемая зависимость $Y_j = f(X_1, X_2, \dots, X_k)$ является нелинейной, то достаточно реализовать эксперимент, в котором каждый входной фактор имеет три уровня. Такой план называется планом второго порядка, а

$$N = 3^k.$$

4.2 Полный факторный эксперимент

Полный факторный эксперимент (ПФЭ) – это эксперимент, в котором реализуются все возможные сочетания всех уровней всех входных факторов [4] (например, $N = 2^k$, $N = 3^k$).

Условия полного факторного эксперимента записывают в виде таблицы – матрицы планирования эксперимента. Для эксперимента, исследующего объект с двумя входными факторами, каждый из которых изменяется по

двум уровням, матрица планирования имеет следующий вид

№ п/п	X_1	X_2	$Y_{\text{эксп}}$
1	-	-	$Y_{1\text{эксп}}$
2	-	+	$Y_{2\text{эксп}}$
3	+	-	$Y_{3\text{эксп}}$
4	+	+	$Y_{4\text{эксп}}$

Рисунок 4.2 - Матрица планирования полного факторного эксперимента $N = 2^2$

Примечание. Знаком «+» обозначены верхние уровни факторов, знаком «-» – нижние.

Так выглядит кодированная форма записи.

Если для исследования входного фактора было выбрано три уровня, включая нулевой, то в матрице планирования они обозначаются знаками «-» (нижний), «0» (нулевой), «+» (верхний). На рис. 4.3 показана геометрическая интерпретация полного факторного эксперимента $N = 2^2$.

Если выбрано два нижних и два верхних уровня, то они обозначаются как «-2» (второй нижний), «-1» (первый нижний), «+1» (первый верхний) и «+2» (второй верхний).

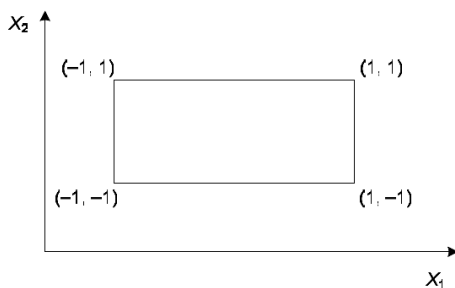


Рисунок 4.3 - Геометрическая интерпретация полного факторного эксперимента $N = 2^2$

Независимо от числа факторов матрицы ПФЭ обладают следующими общими свойствами [4]:

- симметричность относительно центра эксперимента – алгебраическая сумма элементов вектора-столбца каждого фактора равна нулю;

- условие нормировки – сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу опытов;

- ортогональность – сумма почленных произведений любых двух вектор-столбцов матрицы равна нулю;

- рототабельность – точки в матрице планирования подбираются так, что точность предсказаний значений параметра оптимизации одинакова на равных расстояниях от центра эксперимента и не зависит от направления.

Полный факторный эксперимент страдает избыточностью опытов.

Если анализ априорной информации дает основания полагать, что в выбранной области эксперимента объект описывается линейной моделью, то количество опытов можно минимизировать, сократив матрицу планирования эксперимента. Такой эксперимент называется дробным факторным экспериментом (ДФЭ), а таблица его плана – дробной репликой [4, 10, 11, 13 и др].

Уменьшение числа опытов позволяет снизить затраты времени, средств, материалов на проведение и обработку эксперимента.

4.3. Проведение эксперимента

Перед проведением эксперимента необходимо выяснить следующее:

1) можно ли установить выбранные уровни входных факторов на используемом для эксперимента оборудовании и удерживать их во время опыта;

2) возможно ли возникновение негативных последствий от реализации выбранных сочетаний уровней факторов;

3) возможно ли проведение параллельных опытов во время эксперимента;

4) когда были проверены и откалиброваны измерительные приборы.

Параллельными называются опыты, в которых уровни факторов повторяются. Рекомендуется повторять эксперименты не менее трех раз.

Проведение параллельных опытов дает возможность сделать более надежными оценки влияния входных факторов на выходной фактор и выполнить расчеты статистических характеристик.

После составления матрицы планирования необходимо произвести рандомизацию опытов.

Рандомизация (от англ. random – случайный) – введение случайной последовательности проведения опытов.

Цель рандомизации – исключение появления и влияния систематических ошибок на результаты эксперимента.

Опыты необходимо рандомизировать во времени.

Для генерирования случайной последовательности опытов можно использовать программы-генераторы случайных чисел. Выбранную случайным образом последовательность опытов нарушать не рекомендуется.

Эксперимент, который ставится для решения задач оптимизации, называется экстремальным. Если не ставится задача оптимизации, а требуется установить только коли-

чественную связь между входными и выходными факторами, то такой эксперимент часто называют интерполяционным.

После проведения эксперимента следует тщательно проанализировать полученные результаты. Если среди результатов измерений выходного фактора одно-два-три резко отличаются от остальных, то следует проверить, не являются ли они грубыми выбросами, которые подлежат исключению.

5 РЕГРЕССИОННЫЕ МОДЕЛИ С ОДНОЙ ВХОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

5.1 Основные понятия

Технологические процессы производства очень сложны по своей физико-химической природе. Поэтому очень часто используют эмпирические модели. Эмпирические модели объектов и процессов представляют собой результат обработки экспериментальных данных о поведении объекта или процесса методами математического статистического анализа. Очень часто для построения моделей объектов по результатам экспериментальных исследований используют математический аппарат регрессионного и корреляционного анализа.

В настоящее время «регрессия» и «корреляция» – основные понятия статистики. Основная задача корреляционного анализа – выявление значимости связи между значениями различных случайных величин. Зависимость между величинами (в том числе и случайными), при которых одному значению одной величины (аргумента) отвечает одно или несколько вполне определенных значений

другой величины, называется, соответственно, однозначной или многозначной функциональной зависимостью [11]. Зависимость между величинами, при которой каждому значению одной величины отвечает с соответствующей вероятностью множество возможных значений другой, называют вероятностной (стохастической, статистической).

Математический аппарат регрессионного анализа позволяет:

- оценить неизвестные параметры предлагаемой к исследованию регрессионной модели;
- проверить статистическую значимость параметров модели;
- проверить адекватность модели;
- оценить точность модели.

Вид регрессионной модели выбирается исходя из следующего:

- физической сущности изучаемого объекта или явления;
- характера экспериментального материала;
- анализа априорной информации.

Самым простым для моделирования является объект, у которого один входной и один выходной фактор (рис. 5.1). Входной фактор характеризует воздействие на исследуемый объект. В технологических процессах это могут быть температура, сила, время, геометрические параметры инструмента, характеристики обрабатываемого и инструментального материалов и т. д. Выходной фактор характеризует реакцию (отклик) объекта на воздействие входного фактора. Выходные факторы в технологических процессах машиностроения – длина пройденного инструментом пути, величина износа, напряжения, качество обработанной поверхности и т. д.

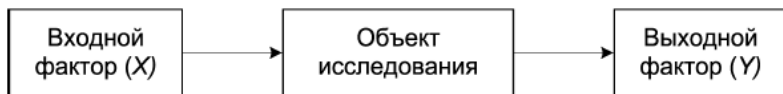


Рисунок 5.1 - Объект исследования с одним входным и одним выходным фактором

Для начала построения эмпирической модели необходимо иметь данные экспериментальных исследований объекта (в виде таблицы или графика), в которых каждому значению входного фактора (X) соответствует значение выходного фактора (Y), т. е. известна пара чисел (x_i, y_i) .

Пары случайных переменных (x, y) подчиняются некоторому двумерному вероятностному распределению. Общее количество пар чисел пусть равно m (рис. 5.2).

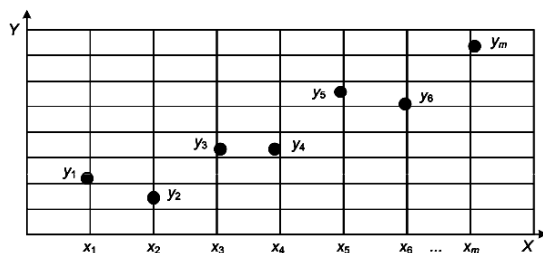


Рисунок 5.2 - Графическое отображение результатов эксперимента

Данный график называется диаграммой рассеяния, или точечной диаграммой [12]. Необходимо найти такую кривую, которая бы наилучшим образом аппроксимировала экспериментальные точки. Для удобства дальнейшего исследования объекта эта кривая должна иметь для своего описания одну единственную формулу (функцию). Если соединить точки на графике, то получится ломаная линия, состоящую из нескольких прямых отрезков и описывае-

мую соответствующим количеством линейных моделей. Это крайне неудобно для исследования. Необходимо найти кривую, наилучшим образом описывающую все экспериментальные точки (рис. 5.3). Такую кривую называют кривой регрессии, или регрессионной кривой Y по X . В общем случае кривая регрессии может иметь любой вид (монотонно возрастающая, монотонно убывающая, с точками перегиба и т. д.), но она должна быть непрерывной, т. е. не должна иметь разрывов.

В самом простом случае кривая регрессии имеет вид прямой линии.

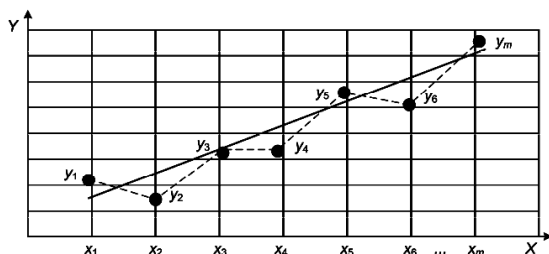


Рисунок 5.3 - Построение линии регрессии

Обычно построение моделей и исследование объекта начинают с самых простых моделей – линейных. Линейной модели соответствует кривая регрессии в виде простой линии. Как видно из графика (см. рис. 5.3), всегда имеются отклонения экспериментальных точек от кривой регрессии, что вызвано влиянием других (неучтенных в модели) внешних факторов на исследуемый объект. В моделировании выходной фактор еще называют зависимой выходной переменной, а входной – независимой входной переменной. Во время исследования объекта входной фактор всегда носит детерминированный характер, а выходной – случайный.

Выражение, которое устанавливает связь между случайной зависимой и детерминированной независимой переменными, представляет собой уравнение регрессии.

Модель, построенная на основе уравнения регрессии, является регрессионной моделью.

Если иметь неограниченно большое количество экспериментальных точек, то линейная регрессионная модель имеет вид [12]

$$y = \beta_0 + \beta_1 \cdot x + e, \quad (5.1)$$

$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 \cdot x, \quad (5.2)$$

где \hat{y} – значения выходной переменной, рассчитанные (предсказанные) по линейной модели; x – значения входной переменной; β_0 и β_1 – коэффициенты регрессии; e – остаток (невязка).

Определение коэффициентов регрессии осуществляется на основе метода наименьших квадратов. Метод наименьших квадратов применяют в тех случаях, когда случайная вариация входного фактора пренебрежительно мала по сравнению с наблюдаемым диапазоном его измерения [12], т. е. значения входной переменной считаются фиксированными. Суть метода в том, что подбираются такие β_0 и β_1 , при которых сумма квадратов отклонений измеренных величин y от предсказанных \hat{y} была бы минимальной. Для пар наблюдений можно записать

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_i + e_i. \quad (5.3)$$

Отклонение измеренной величины y от предсказанной \hat{y}

$$e_i = y_i - \hat{y} = y_i - (\beta_0 + \beta_1)x. \quad (5.4)$$

Сумма квадратов отклонений выражается в виде

$$S = \sum_{i=1}^m \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^m (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i), \quad (5.5)$$

где S – функция суммы квадратов.

Подберем b_0 и b_1 так, чтобы при подстановке их вместо β_0 и β_1 значение S было минимальным из возможных. Найдем частные производные (∂):

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_0} = -2 \sum_{i=1}^m (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2, \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_1} = -2 \sum_{i=1}^m x_i (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2, \quad (5.7)$$

Наименьшее значение суммы квадратов отклонений достигается в том случае, когда коэффициенты β_0 и β_1 удовлетворяют условию [11]

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_0} = \frac{\partial S}{\partial \beta_1} = 0. \quad (5.8)$$

Имеющиеся экспериментальные данные в виде пар (x_i, y_i) являются лишь ограниченной выборкой из общего числа состояний исследуемого объекта. Поэтому можно определить только оценки коэффициентов β_0 и β_1 , которые обозначают, соответственно, b_0 и b_1 .

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x. \quad (5.9)$$

Такие модели часто называют однофакторными регрессионными моделями. Коэффициент регрессии b_1 определяется по формуле [12]

$$b_1 = \frac{\sum_{i=1}^m (x_i - \tilde{x})(y_i - \tilde{y})}{\sum_{i=1}^m (x_i - \tilde{x})^2}, \quad (5.10)$$

где x_i – значение входного фактора во время эксперимента; y_i – значение выходного фактора, соответствующее x_i ; \tilde{x} – среднее значение входного фактора, определяемое по формуле

$$\tilde{x} = \frac{\sum_{i=1}^m x_i}{m}, \quad (5.11)$$

\bar{y} – среднее значение выходного фактора, определяемое по формуле

$$\tilde{y} = \frac{\sum_{i=1}^m y_i}{m}. \quad (5.12)$$

Коэффициент регрессии b_0

$$b_0 = \tilde{y} - b_1 \tilde{x}. \quad (5.13)$$

Получаем

$$y = \tilde{y} + b_1(x_i - \tilde{x}). \quad (5.14)$$

где \tilde{x} и \tilde{y} – координаты «центра тяжести» экспериментальных данных, через который обязательно проходит линия регрессии.

5.2 Адекватность регрессионных моделей

На определении коэффициентов регрессионной модели построение модели не заканчивается. Необходимо установить адекватность и точность предлагаемой модели. Адекватность модели характеризует соответствие модели экспериментальным данным и статистическую значимость уравнения регрессии. Адекватность регрессионной модели оценивается коэффициентом Фишера ($F_{расч}$)

$$F_{расч} = \frac{\sum_{i=1}^m (y_i - \tilde{y})^2}{\sum_{i=1}^m (y_i - \tilde{y}_i)^2}. \quad (5.15)$$

Критерий Фишера представляет собой отношение суммы квадратов отклонений, обусловленных регрессией, к сумме квадратов отклонений относительно регрессии.

Формулируем нулевую гипотезу $H_0: b_1 = 0$. Расчетное значение коэффициента $F_{расч}$ необходимо сравнить с табличным значением $F_{табл}(m, \alpha)$.

В этой записи m – общее количество экспериментальных наблюдений (x_i, y_i) , которое влияет на количество степеней свободы при определении критерия Фишера. α – уровень значимости – вероятность, с которой мы можем отвергнуть правильную гипотезу о модели как неправильную. Обычно в моделировании используют значения $\alpha = 0,05; 0,01$.

Если $F_{расч} > F_{табл}$, то нулевая гипотеза отвергается, модель считается адекватной, а регрессия – значимой. Если $F_{расч} < F_{табл}$, то регрессионная модель неадекватна и использовать ее для анализа и исследования объекта нельзя. В этом случае необходимо снова проанализировать априорную информацию, снова спланировать и провести эксперимент.

Значения коэффициента Фишера обычно даны в справочниках по математической статистике и теории вероятностей.

5.3 Точность регрессионных моделей

Для оценки точности регрессионных моделей с одной входной используется выборочный коэффициент корреляции Пирсона (r_{xy}), который определяется по формуле [12]

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^m (x_i - \tilde{x})(y_i - \tilde{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^m (x_i - \tilde{x})^2 \sum_{i=1}^m (y_i - \tilde{y}_i)^2}}. \quad (5.16)$$

Коэффициент корреляции r_{xy} характеризует тесноту связи между выходной переменной y и входной переменной x . Область определения коэффициента корреляции r_{xy} лежит в пределах от -1 до $+1$ включительно. Можно выделить несколько частных случаев значения коэффициента корреляции (рис. 5.4)

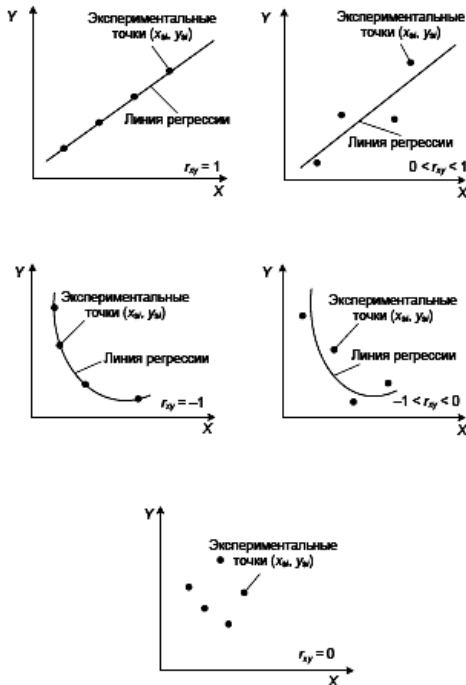


Рисунок 5.4 - Частные случаи значения коэффициента корреляции

Чем выше значение r_{xy} , тем теснее связь между выходной переменной y и входной переменной x , тем точнее, а следовательно, лучше математическая модель.

Если модель имеет низкое значение r_{xy} , то она имеет низкую точность оценки и предсказания поведения или свойств объекта. Такую модель использовать для исследования, описания и предсказания объекта не рекомендуется. Из нескольких моделей, проанализированных во время моделирования, для исследования объекта выбирается та модель, у которой коэффициент корреляции r_{xy} имеет наибольшее значение. После расчета коэффициента корреляции производят проверку его значимости при помощи критерия Стьюдента. Коэффициент корреляции, рассчитанный для модели ($r_{расч}$), сравнивается с табличным (граничным) значением ($r_{табл}$).

Если $r_{расч} > r_{табл}$, то $r_{расч}$ принимается как показатель тесноты связи и наоборот [10]. Табличные значения $r_{табл}$ можно найти в справочниках по теории вероятностей и математической статистике.

Если попытаться оценить стандартную ошибку для предсказанных значений выходного фактора y^- , то наилучшие предсказания будут в «центре тяжести» эксперимента [12]. Чем дальше от «центра тяжести», тем менее точными будут предсказания y^- .

5.4 Виды регрессионных моделей с одной входной переменной

Если в результате расчета коэффициента корреляции r_{xy} линейная модель признана недостаточно точной, переходят к исследованию более сложных моделей: степенной ($y = b_0x^{b_1}$), экспоненциальной ($y = \exp(b_0 + b_1x)$),

обратной ($y = b_0 + b_1/x$ или $y = 1/b_0 + b_1x$), полинома ($y = b_0 + b_1x + b_2x^2$).

Полином и обратные модели являются линейными по параметрам, поэтому для оценки их коэффициентов регрессии, корреляции и критерия адекватности можно использовать формулы (5.10), (5.13), (5.15), (5.16).

Степенная и экспоненциальная модели требуют дополнительных преобразований в виде логарифмирования.

6 РЕГРЕССИОННЫЕ МОДЕЛИ С НЕСКОЛЬКИМИ ПЕРЕМЕННЫМИ

6.1 Многофакторная (множественная) линейная регрессия

Для построения модели объекта исследования с несколькими входными факторами (рис. 6.1) необходимо иметь данные экспериментальных исследований объекта, представленные в виде таблицы, где каждой комбинации значений входных факторов соответствует значение выходного фактора.

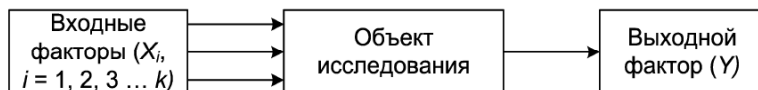


Рисунок 6.1 – Объект исследования с несколькими входными факторами

Моделирование объекта со сложным внешним воздействием в виде нескольких входных факторов, так же как и для объекта с одним входным фактором, начинается с линейной модели.

Номер эксперимента	X_1	X_2	...	X_k	Y
1	x_{11}	x_{21}	...	x_{k1}	y_1
2	x_{12}	x_{22}	...	x_{k2}	y_2
3	x_{13}	x_{23}	...	x_{k3}	y_3
...					
m	x_{1m}	x_{2m}	...	x_{km}	y_m

Рисунок 6.2 -Данные экспериментальных исследований объекта

Если иметь неограниченно большое количество экспериментальных точек, то линейная регрессионная модель с несколькими входными переменными имеет вид

$$y^- = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \dots + \beta_k x_k, \quad (6.1)$$

где x_1, x_2, x_3 и т. д. – значения входной переменной; $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$ – коэффициенты регрессии.

Имеющиеся экспериментальные данные в виде комбинаций ($x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}, \dots, x_{ki}, y_i$) являются лишь ограниченной выборкой из общего числа состояний исследуемого объекта. Поэтому можно определить только оценки коэффициентов $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots$, которые обозначают, соответственно, $b_0, b_1, b_2, b_3, \dots, b_k$.

$$y^- = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + \dots + b_k x_k. \quad (6.2)$$

Такие модели часто называют многофакторными моделями. Однако определить коэффициенты регрессии b_i так, как это делается для однофакторной модели – по методу наименьших квадратов, в данном случае не представляется возможным. Необходимо использовать основы алгебры матриц и матричного исчисления.

6.2 Матричный подход к определению коэффициентов Регрессии

Запишем для нашего случая матрицы X, Y, B:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & x_{31} & \dots & x_{k1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & x_{32} & \dots & x_{k2} \\ 1 & x_{13} & x_{23} & x_{33} & \dots & x_{k3} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{1m} & x_{2m} & x_{3m} & \dots & x_{km} \end{bmatrix}. \quad (6.3)$$

В матрице X все элементы первого столбика равны единице. Будем считать это фиктивной входной переменной X0 с постоянным значением.

$$Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \dots \\ y_m \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_k \end{bmatrix}. \quad (6.4)$$

Определим размерность этих матриц:

Y – вектор наблюдений ($m \cdot 1$);

X – матрица независимых переменных ($m(k + 1)$);

B – вектор коэффициентов регрессии ($(k + 1) \cdot 1$).

Правила умножения матриц и векторов требуют, чтобы они были согласованными и имели соответствующую размерность [9, 12].

Пусть A – матрица размерностью ($n \cdot p$):

- на матрицу A только слева может быть умножена матрица B размерностью ($m \cdot n$):

$$B \cdot A = (m \cdot n \cdot n \cdot p) = C(m \cdot p); \quad (6.5)$$

- на матрицу A только справа может быть умножена матрица D размерностью ($p \cdot q$):

$$A \cdot C = (n \cdot p \cdot p \cdot q) = F(n \cdot q). \quad (6.6)$$

Следовательно, произведение $B \cdot X$ не существует и множественная линейная регрессия может быть записана в виде

$$Y = X \cdot B. \quad (6.7)$$

Использование аппарата линейной алгебры позволяет получить общую формулу для определения вектора, содержащего коэффициенты регрессии [9]:

$$B = (X' \cdot X)^{-1} \cdot X' \cdot Y, \quad (6.8)$$

где $(X' \cdot X)^{-1}$ – обратная матрица; X' – транспонированная матрица.

Определением коэффициентов регрессионной модели построение модели не заканчивается. Необходимо также определить адекватность и точность предлагаемой многофакторной модели.

6.3 Оценка адекватности и точности многофакторной линейной модели

Адекватность модели характеризует соответствие модели экспериментальным данным и статистическую значимость уравнения регрессии.

Адекватность регрессионной модели оценивается коэффициентом Фишера

$$F_{расч} = \frac{\sum_{i=1}^m (y_i - \tilde{y})^2}{\sum_{i=1}^m (y_i - \tilde{y}_i)^2}. \quad (6.9)$$

Расчетное значение коэффициента ($F_{расч}$) необходимо сравнить с табличным значением ($F_{табл}(m, \alpha)$), где m – общее количество экспериментальных наблюдений, α –

уровень значимости – вероятность, с которой правильная гипотеза о модели может быть отвергнута как неправильная. Обычно в моделировании используют значения $\alpha = 0,05; 0,01$.

Однако для многофакторных моделей табличное значение F-критерия зависит еще и от числа входных переменных [9].

Если $F_{расч} > F_{табл}$, то модель считается адекватной, а регрессия статистически значимой. Если $F_{расч} < F_{табл}$, то регрессионная модель неадекватна и регрессия статистически незначима.

Для оценки точности регрессионных моделей с несколькими входными переменными используется множественный коэффициент корреляции (R^2) [4], который определяется по формуле

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^m (y_i - \tilde{y})^2}{\sum_{i=1}^m (y_i - \tilde{y}_i)^2}. \quad (6.10)$$

Отношение R^2 характеризует тесноту связи между выходной переменной и входными переменными. Область определения отношения R^2 лежит в пределах от 0 до 1. При $R^2 = 0$ выходной фактор у линейно не зависит от входных факторов x_1, x_2, \dots, x_k – можно сказать, что корреляционная связь между выходным фактором и входными факторами отсутствует.

При $R^2 = 1$ выходной фактор у линейно зависит от входных факторов x_1, x_2, \dots, x_k – имеется в наличии сильная корреляционная связь. Чем выше значение R^2 , тем теснее связь в модели между выходной переменной (фактором) и входными переменными (факторами), тем точнее, а следо-

вательно, лучше математическая модель. Если модель имеет низкое значение R^2 , то она имеет низкую точность оценки и предсказания поведения или свойств объекта. Использовать такую модель для исследования, описания и предсказания объекта не рекомендуется. Из нескольких моделей для исследования выбирается та, у которой отношение R^2 имеет наибольшее значение.

6.4 Линейные регрессионные модели с несколькими входными переменными

Если в результате расчета отношения R^2 множественная линейная регрессия признана недостаточно точной, переходят к исследованию более сложных моделей:

- полинома с одной независимой переменной

$$y = b_0 + b_1x + b_2x^2 + b_3x^3;$$

- полинома с несколькими независимыми переменными

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_1^2 + b_4x_2^2 + b_5x_1x_2;$$

- обратной модели

$$y = b_0 + \frac{b_1}{x_1} + \frac{b_2}{x_2} + \frac{b_3}{x_3} + \frac{b_4}{x_4};$$

или
$$y = b_0 + \frac{b_1}{x_1} + \frac{b_2}{x_2} + \frac{b_3}{x_1^2} + \frac{b_4}{x_2^2} + \frac{b_4}{x_1x_2};$$

- комбинированной модели

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2\sqrt{x} + b_3 \ln x + b_4 \exp(x).$$

Исследователь сам может предложить вид многофакторной модели на основе анализа априорной информации. Оценка коэффициентов регрессии, критерия адекватности модели и множественного коэффициента корреляции осуществляется по формулам (6.8), (6.9), (6.10).

6.5 Нелинейные регрессионные модели с несколькими входными переменными

Если в результате построения линейных моделей ни одна из них не была признана достаточно точной, переходят к исследованию более сложных моделей. Любую модель, в результате преобразования записываемую в виде (6.1), можно анализировать методами линейного регрессионного анализа.

Виды преобразований для нелинейных моделей [12]:

- обратное преобразование;
- логарифмическое преобразование;
- преобразование типа квадратного корня.

Если при помощи каких-либо преобразований нелинейная модель может быть приведена к виду множественной линейной регрессии, то она называется нелинейной моделью с «внутренней линейностью» [11]. К таким моделям относятся:

- степенная (мультипликативная) модель

$$y = b_0 \cdot x_1^{b_1} \cdot x_2^{b_2} \cdot x_3^{b_3} \dots \cdot x_k^{b_k}.$$

Выполним преобразования:

$$\ln y = \ln b_0 + b_1 \ln x_1 + b_2 \ln x_2 + \dots + b_k \ln x_k.$$

Введем переобозначения:

$$\ln x_i = z_i, \quad w = b_0 + b_1 z_1 + b_2 z_2 + \dots + b_k z_k.$$

Данная модель имеет вид многофакторной линейной регрессии (6.1), следовательно, степенная модель может быть преобразована логарифмированием к виду многофакторной линейной регрессии. Это позволяет использовать для расчета коэффициентов регрессии, критерия адекватности и множественного коэффициента корреляции формулы, рассмотренные выше.

После вычислений необходимо выполнить потенцирование [11] и вернуться к исходному степенному виду модели;

- экспоненциальная модель

$$y = \exp(b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + \dots + b_kx_k).$$

Логарифмирование также позволяет преобразовать экспоненциальную модель к виду многофакторной линейной модели (6.1) и использовать для ее исследования аппарат линейного регрессионного анализа;

- обратная модель

$$y = \frac{1}{b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + \dots + b_kx_k}.$$

Выполним преобразования:

$$\frac{1}{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + \dots + b_kx_k.$$

Введем переобозначения:

$$y = w, \quad w = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_kx_k.$$

Следовательно, обратная модель также может быть преобразована к виду множественной линейной регрессии, что позволяет использовать для ее исследования аппарат линейного регрессионного анализа.

Если при помощи любых преобразований нелинейная модель не может быть приведена к виду множественной линейной регрессии, то она называется нелинейной моделью с «внутренней нелинейностью». Для исследования этих моделей в математике разработан аппарат нелинейного регрессионного анализа [12].

6.6 Шаговые методы построения регрессионных Моделей

На практике при исследовании объектов и построении регрессионных моделей с несколькими входными переменными используют шаговые (итерационные) методы, позволяющие обоснованно включать в модель только наиболее влиятельные и значимые входные факторы. Чаще всего применяют метод исключения переменных и метод включения переменных.

Метод исключения переменных состоит из нескольких этапов [12]:

1: предлагается регрессионная модель, включающая все исследуемые входные переменные.

2: рассчитывается частный F -критерий Фишера для каждой входной переменной F_{X_i} и оценивается статистическая значимость каждой входной переменной аналогично тому, как это выполняется для модели в целом.

3: устанавливается входная переменная с минимальным значением F_{X_i} .

4: минимальное значение F -критерия сравнивается с граничным значением.

Если $F_{min} > F_{табл}(m, \alpha)$, то соответствующая входная переменная считается статистически значимой и остается в модели. Следовательно, предложенная на этапе 1 модель статистически значима, адекватна и может быть использована для исследования объекта. Анализ оставшихся входных переменных уже не проводится. Далее рассчитываются коэффициенты регрессии и множественный коэффициент корреляции.

Если $F_{min} < F_{табл}$, то соответствующая входная переменная статистически незначима и должна быть удалена из модели как неадекватная. Следует помнить, что для многофакторных моделей табличное значение F -критерия зависит еще и от числа входных переменных [9, 12].

5: после удаления статистически незначимой входной переменной для оставшихся входных переменных снова пересчитываются их частные F -критерии.

6: снова устанавливается входная переменная (из оставшихся) с минимальным значением F_{Xi} .

7: этапы 4, 5, 6 повторяются до тех пор, пока в модели не останутся только статистически значимые переменные.

Если после выполнения указанных процедур в модели не останется ни одной статистически значимой переменной, то модель построить нельзя. Скорее всего, причина в просчетах, допущенных при планировании эксперимента на основе анализа априорной информации. В этом случае следует снова внимательно проанализировать априорную информацию, заново спланировать и провести эксперимент и обработать его результаты.

Если в модели остаются входные переменные, то переходят к расчету коэффициентов регрессии и оценке точности модели.

Метод включения переменных также состоит из этапов:

0: в «модели» нет ни одной входной переменной.

1: рассчитывается корреляционная матрица (из частных коэффициентов корреляции входных переменных друг с другом и с выходной переменной)

$$\begin{bmatrix} R_{1y} & R_{11} & R_{21} & R_{31} & \dots & R_{k1} \\ R_{2y} & R_{12} & R_{22} & R_{32} & \dots & R_{k2} \\ R_{3y} & R_{13} & R_{23} & R_{33} & \dots & R_{k3} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ R_{ky} & R_{1k} & R_{2k} & R_{3k} & \dots & R_{kk} \end{bmatrix},$$

где R_{ky} – частный коэффициент корреляции k -й входной переменной и выходной переменной; R_{ij} – частный коэффициент корреляции i -й и j -й входных переменных ($i = 1, k; j = 1, k; i \neq j$).

2: выбирается входная переменная с максимальным коэффициентом корреляции R_{iy} . Эта переменная первой вводится в модель.

3: определяется частный F-критерий введенной входной переменной, который одновременно является критерием адекватности всей модели.

Если $F_{расч} < F_{табл}$, то соответствующая входная переменная статистически незначима, т. е. должна быть удалена из модели, а сама модель неадекватна. Оставшиеся входные переменные имеют с выходной переменной еще менее тесную корреляционную связь. Следовательно, в данной ситуации модель построить не представляется возможным.

Если $F_{расч} > F_{табл}(m, \alpha)$, то соответствующая входная переменная считается статистически значимой и остается в модели.

4: корреляционная матрица пересчитывается без учета влияния выбранной входной переменной.

5: из оставшихся входных переменных выбирается переменная с максимальным коэффициентом корреляции R_{iy} . Эта переменная вводится в модель следующей.

6: определяется F-критерий новой модели.

Если $F_{расч} < F_{табл}$, то вновь введенная в модель входная переменная статистически незначима и должна быть удалена из модели как неадекватная. В модели остается одна входная переменная.

7: процедуры 4, 5, 6 повторяются до тех пор, пока не сформируется окончательный вид модели. Далее переходят к расчету коэффициентов регрессии и оценке точности модели.

Сравнивая данные методы, можно сказать следующее:

- Метод исключения входных переменных дает вполне удовлетворительные результаты при моделировании.
- Метод включения входных переменных более экономичен в вычислительном аспекте.

7 ИНТЕРПРЕТАЦИЯ И ОПТИМИЗАЦИЯ РЕГРЕССИОННЫХ МОДЕЛЕЙ

7.1 Интерпретация модели

После построения регрессионной модели, оценки ее адекватности и точности, расчета коэффициентов регрессии переходят к анализу полученных результатов. Этот этап называется интерпретацией.

Интерпретация – «перевод» результатов математического описания исследуемого объекта с языка математики на язык пользователя (схемы, графики, таблицы и т. д.). На этапе интерпретации оценивается, насколько результаты (в частности, модель) соответствуют здравому смыслу и существующей информации о поведении и свойствах

объекта. Интерпретацию можно рассматривать как этап, обратный формализации.

Основные шаги интерпретации.

1. Анализ значений коэффициентов регрессии

Технологические процессы не относятся ни к области микромира, ни к области макромира. Если значения коэффициентов регрессии подозрительно велики или малы, то это может быть следствием ошибки в расчетах. Следует выполнить проверку полученных результатов.

2. Анализ знаков перед коэффициентами регрессии

На этом этапе устанавливается, в какой мере и как каждый входной фактор влияет на отклик объекта. Знаки коэффициентов регрессии указывают на характер влияния входных факторов на выходной фактор. Сравнивая результаты моделирования и априорную информацию об объекте, можно сделать вывод о пригодности полученной модели для описания, объяснения и предсказания поведения и свойств объекта.

3. Анализ расчетных значений выходной переменной (выполняется графически)

На этом этапе анализируется, насколько значения выходного фактора, предсказанные по выбранной модели, отличаются от экспериментальных данных. По результатам сравнения также можно сделать вывод о пригодности полученной модели для описания, объяснения и предсказания поведения и свойств объекта.

Современное программное обеспечение, которое применяется для статистического моделирования (STATISTICA, STATGRAPHICS, SPSS и др.), позволяет объединить указанные этапы и выполнить интерпретацию

модели графоаналитическим способом, т. е. используя широкие возможности построения графиков и поверхностей отклика.

7.2 Оптимизация модели

Большое количество задач управления, планирования и проектирования связано с проблемой оптимизации, сводимой к отысканию таких значений входных факторов, при которых критерий оптимизации достигает экстремума [13].

Можно выделить два основных подхода к решению задачи оптимизации. Первый связан с созданием теории процесса и его детерминированной (или аналитической) модели. В этом случае для решения задачи используются методы линейного, нелинейного и динамического программирования, принцип максимума и т. д. [13, 14, 15].

Второй подход – эмпирический и в настоящее время используется значительно чаще. Появились и эмпирические способы оптимизации – метод Бокса-Уилсона и симплекс-планирование.

При решении задачи оптимизации необходимо выбрать метод поиска оптимального решения в зависимости от особенностей исследуемого объекта и применить его для получения «наилучших» характеристик или вариантов поведения объекта или воздействия на него. Если количество входных факторов (k) равно или больше 2, то графическим отображением результатов моделирования объекта является, соответственно, поверхность или гиперповерхность отклика. Ранее мы уже говорили, что в этом случае выходной фактор называется критерием оптимизации.

Решая задачу поиска экстремальных значений критерия оптимизации при построении моделей, следует помнить, что линейные, степенные, экспоненциальные, обратные функции не имеют экстремумов. Следовательно, регрессионные модели на их основе тоже не будут иметь экстремумов. Поэтому в данном случае в качестве моделей для описания объекта целесообразнее использовать полиномы четных степеней.

Бокс и Уилсон предложили шаговый метод исследования поверхности отклика – метод крутого восхождения (или метод наискорейшего спуска) [13, 14, 15], в основе которого лежит использование градиента функции. Движение по градиенту обеспечивает кратчайший путь к оптимуму и дает возможность в сложной многофакторной ситуации вести поиск целенаправленно.

Градиентом непрерывной однозначной функции называется вектор. Градиент всегда направлен в сторону увеличения функции. Следовательно, если перемещаться по градиенту, то можно достичь максимума функции отклика, а если двигаться в направлении, противоположном градиенту, то минимума [13]. Современное программное обеспечение, которое используется для статистического моделирования (STATISTICA, STATGRAPHICS и др.), позволяет исследователю избежать многочисленных вычислительных процедур, так как дает возможность графически отображать результаты поиска экстремумов функции.

Если поставленную оптимизационную задачу не удалось решить, то следует перенести область проведения эксперимента, провести эксперимент заново, построить новые регрессионные модели и определить наличие экстремумов (возможно, локальных) критерия оптимизации и соответствующих им значений входных факторов.

ВОПРОСЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ:

1. Что понимается под объектом моделирования?
2. Что такое гипотеза в моделировании?
3. Дайте определение модели.
4. Что такое математическая модель?
5. Приведите пример аналогии в физических процессах.
6. Дайте классификацию процессов как объектов моделирования.
7. Чем отличаются стохастические процессы от детерминированных?
8. Опишите постановку задачи моделирования в общем виде.
9. Дайте общую классификацию математических моделей.
10. Какова структура модели математического программирования?
11. Что понимают под структурно-параметрическим описанием объекта моделирования?
12. В чем состоит различие между линейными и нелинейными моделями?
13. В каких случаях используется корреляционный коэффициент, а в каких – корреляционное отношение как критерий адекватности модели?
14. Дайте классификацию моделируемых процессов по характеру их протекания.
15. Перечислите основные этапы построения математической модели.
16. Опишите метод активного и пассивного эксперимента. Чем они отличаются?
17. Какой математический аппарат используется при синтезе математических моделей детерминированных процессов?
18. Какие системы относят к системам с распределенными параметрами?

19. Что такое сплошная среда?
20. Каким уравнением в частных производных моделируется процесс теплопереноса?
21. В чем состоит идея метода аналогий?
22. Опишите экспериментально-статистический метод моделирования.
23. Модели каких процессов описываются дифференциальными уравнениями?
24. Сформулируйте, в чем заключается задача регрессионного анализа.
25. Какую величину называют случайной? Опишите основные типы случайных величин.
26. Что такое закон распределения случайной величины?
27. Назовите виды регрессионных зависимостей.
28. Какая характеристика служит для оценки качества линейной модели? Какие она может принимать значения?
29. Опишите суть метода наименьших квадратов.
30. Какая характеристика служит для оценки качества нелинейной модели? Какие она может принимать значения?
31. Что такое корреляция? Какие виды корреляции вы знаете?
32. Как строится линия регрессии?
33. Опишите метод построения гистограммы.
34. В чем заключается содержательный анализ остатков модели?
35. Что такое эксперимент?
36. Что такое планирование эксперимента?
37. Обозначьте цели планирования эксперимента.
38. Что такое опыт?
39. Какие виды экспериментов существуют?
40. Что такое план эксперимента?
41. Что такое нулевой уровень фактора? Как он выбирается?

42. Что такое интервал варьирования? Как он выбирается?
43. Что такое полный факторный эксперимент?
44. Что такое матрица планирования эксперимента?
45. Назовите свойства матрицы полного факторного эксперимента.
46. Что такое дробная реплика?
47. Что такое рандомизация? Какова цель проведения рандомизации?
48. Что такое экстремальный эксперимент?
49. Что такое интерполяционный эксперимент?
50. Что такое линия регрессии?
51. Что такое уравнение регрессии?
52. Какие модели называются регрессионными?
53. На основе какого метода определяются коэффициенты регрессии?
54. Как определяются коэффициенты регрессии однофакторной модели?
55. Каким критерием оценивается адекватность модели с одним входным фактором?
56. Что делать, если модель оказывается неадекватной?
57. Как оценивается точность однофакторной модели?
58. Где точность предсказаний значений выходного фактора выше?
59. Какими, кроме линейной, могут быть модели с одной входной переменной?
60. Что такое многофакторная линейная регрессия?
61. Как оценивается точность многофакторной линейной регрессионной модели?
62. Как оценивается адекватность многофакторной линейной регрессионной модели?
63. Какие значения может принимать множественный коэффициент корреляции?

64. Что такое нелинейные модели с «внутренней линейностью»?
65. Какие бывают нелинейные модели с «внутренней линейностью»?
66. Что такое нелинейные модели с «внутренней нелинейностью»?
67. Обозначьте основные этапы метода включения переменных.
68. Что такое корреляционная матрица?
69. Что такое частный критерий Фишера для входной переменной? Что он характеризует?
70. Обозначьте основные этапы метода исключения переменных.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

Учебная литература Основная

1. Кузьмин В. В. Математическое моделирование технологических процессов сборки и механической обработки изделий машиностроения: учебник для вузов / В. В. Кузьмин [и др.]. Москва: Высшая школа, 2008. 279 с.
2. Ашихмин В. Н. Введение в математическое моделирование: учебное пособие / В. Н. Ашихмин [и др.]; под ред. П. В. Трусова. Москва: ЛОГОС, 2005. 440 с.
3. Советов Б. Я. Моделирование систем: учебник для вузов / Б. Я. Советов, С. А. Яковлев. 3-е изд., перераб и доп. Москва: Высшая школа, 2001. 343 с.
4. Зобнин Б. Б. Моделирование систем: конспект лекций / Б. Б. Зобнин. Екатеринбург: Изд-во УГТГА, 2001. 129 с.
5. Дьяконов В. П. Новые информационные технологии: учебное пособие / В. П. Дьяконов [и др.]; под ред. В. П. Дьяконова. Москва: СОЛОН-Пресс, 2005. 640 с.
6. Саблина Н. Г. Информационные технологии: конспект лекций: в 2 частях / Н. Г. Саблина, Г. М. Черногородова. Екатеринбург: Изд-во УГТУ – УПИ, 2001. Ч. 2. 119 с.
7. Дулов В. Г. Математическое моделирование в современном естествознании: учебное пособие / В. Г. Дулов, В. А. Цибаров; под ред. В. Г. Дулова. Санкт-Петербург: Изд-во С.-Петербург. ун-та, 2001. 244 с.
8. Зарубин В. С. Математическое моделирование в технике: учебник для вузов / В. С. Зарубин [и др.]; под ред. В. С. Зарубина. Москва: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2001. 496 с.

Дополнительная

9. Корн Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Г. Корн, Т. Корн. Москва: Наука, 1972. 830 с.

10. Спирин Н. А. Методы планирования и обработки результатов инженерного эксперимента: учебное пособие / Н. А. Спирин [и др.]; под ред. Н. А. Спирина; ГОУ ВПО УГТУ – УПИ. Екатеринбург, 2003. 260 с.

11. Рогов В. А. Методика и практика технических экспериментов: учебное пособие / В. А. Рогов. Москва: Академия, 2005. 288 с.

12. Дрейпер Н. Прикладной регрессионный анализ: перевод с английского / Н. Дрейпер, Г. Смит. 3-е изд. Москва: Вильямс, 2007. 912 с.

13. Адлер Ю. П. Теория эксперимента: прошле, настоящее, будущее /Ю. П. Адлер, Ю. В. Грановский, Е. В. Макарова. Москва: Знание, 1982. 64 с.

14. Цирлин А. М. Оптимальное управление технологическими процессами / А. М. Цирлин. Москва: Энергопромиздат, 1986. 400 с.

15. Ногин В. Ю. Основы теории оптимизации / В. Ю. Ногин, И. О. Протодяконов, И. И. Евлампиев. Москва: Высшая школа, 1986. 384 с.

СОДЕРЖАНИЕ

	ОРГАНИЗАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКИЙ РАЗДЕЛ.....	3
	ГЛОССАРИЙ.....	6
	ВВЕДЕНИЕ.....	8
1	ВВЕДЕНИЕ В МОДЕЛИРОВАНИЕ.....	9
2	МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ.....	20
3	ПРИМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ АНАЛИЗА И РАСЧЕТА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ.....	32
4	ПОСТРОЕНИЕ ЭМПИРИЧЕСКИХ РЕГРЕССИОННЫХ МОДЕЛЕЙ.....	36
5	РЕГРЕССИОННЫЕ МОДЕЛИ С ОДНОЙ ВХОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ	44
6	РЕГРЕССИОННЫЕ МОДЕЛИ С НЕСКОЛЬКИМИ ПЕРЕМЕННЫМИ	54
7	ИНТЕРПРЕТАЦИЯ И ОПТИМИЗАЦИЯ РЕГРЕССИОННЫХ МОДЕЛЕЙ	65
	ВОПРОСЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ.....	69
	БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....	73

Составители:

Глушенко Андрей Анатольевич
кандидат технических наук,
доцент кафедры «Эксплуатация мобильных машин и
технологического оборудования»

Хохлов Алексей Леонидович
кандидат технических наук,
доцент кафедры «Эксплуатация мобильных машин и
технологического оборудования»

Салахутдинов Ильмас Рифкатович
кандидат технических наук,
доцент кафедры «Эксплуатация мобильных машин и
технологического оборудования»

Моделирование технологических процессов и систем

Учебное пособие для аспирантов
инженерного факультета.

Ульяновск: УГСХА им. П.А. Столыпина, 2015, - 76 с.

Подписано в печать
Формат 60х90/16 Бумага офсетная №1
Гарнитура Таймс. Усл. печ. л. 4,8
Тираж 100 Заказ _____

Адрес издателя: 432017, г. Ульяновск, бульвар Новый
Венец, 1