

Министерство образования Российской Федерации
Волгоградский государственный технический университет
Межкафедральная лаборатория информационных технологий ХТФ
Кафедра химии и технологии переработки эластомеров

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ И БИОТЕХНОЛОГИИ

Методические указания

Волгоград 2001

УДК 678.04

Использование планирования эксперимента в химической технологии и биотехнологии: Методические указания к лабораторной работе/ Сост. А.Н. Гайдадин, И.П. Петрюк; Волгоград. гос. техн. ун-т.– Волгоград, 2001.– 8 с.

В лабораторной работе описана методика проведения регрессионного анализа с учетом этапа построения матрицы планирования эксперимента, получения и исследования уравнения регрессии.

Для студентов по направлению 5508 – “Химическая технология и биотехнология”; специальности 2506 – “Химическая технология переработки пластмасс и эластомеров” по курсу “Моделирование процессов переработки полимеров”, а также для студентов по магистерской программе 5508-15 – “Технология переработки эластомеров”.

Библиограф.: 4 назв.

Рецензент С.М. Москвичев

Печатается по решению редакционно-издательского совета
Волгоградского государственного технического университета

© Волгоградский государственный
технический университет, 2001

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ

Целью настоящей работы является ознакомление с методикой проведения регрессионного анализа в технологической практике, освоении принципов выбора области планирования, числа и типа варьируемых факторов. В работе проводится расчет уравнения регрессии, статистическая оценка значимости коэффициентов и адекватности уравнения. К цели работы относится получение линий равного уровня исследуемой функции отклика и проведения оптимизации процесса методом анализа контурных кривых.

Задачей студента является овладение теоретическими основами, терминологией и методологией регрессионного анализа. При выполнении лабораторной работы студент должен приобрести навыки выбора типа эксперимента в зависимости от действующих факторов, оценки получаемого уравнения регрессии, расчета изолиний функции отклика. Студент должен овладеть методикой исследования уравнения регрессии, поиска точек экстремума и определение типа поверхностей отклика. Должны быть приобретены навыки проведения моделирования исследуемого свойства с помощью регрессионного уравнения и проведение оптимизации методом анализа контурных кривых; показана возможность использования теоретических основ для решения реальных технологических задач с использованием вычислительной техники и специализированного программного обеспечения.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

Методы регрессионного анализа позволяют получить математическую модель изучаемого процесса в выбранной области планирования. Математическая модель уравнения второго порядка в общем случае имеет вид

$$R = b_0 + \sum b_1 \cdot x_j + \sum b_{ij} \cdot x_{ij} + \sum b_{ii} \cdot x_i^2,$$

где R – значение функции отклика;

b_1, b_{ij} – коэффициенты, учитывающие влияния факторов x_j, x_{ij} и x_i^2 ;

x_1, x_2, x_3 – значения варьируемых факторов в условных единицах.

В частных случаях математические модели планирования для двух и трех действующих факторов соответственно имеют вид для двух факторов

$$R = b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + b_{11} \cdot x_1^2 + b_{22} \cdot x_2^2;$$

для трех факторов

$$R = b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_3 \cdot x_3 + b_{12} \cdot x_1 \cdot x_2 + b_{13} \cdot x_1 \cdot x_3 + b_{23} \cdot x_2 \cdot x_3 + b_{11} \cdot x_1^2 + b_{22} \cdot x_2^2 + b_{33} \cdot x_3^2.$$

Область планирования выбирается исследователем с учетом типа применяемой модели и числа действующих факторов. Значения факторов, влияющих на исследуемый объект, выбираются в натуральных величинах (кг, м, массовых частях, процентах и т.д.). Расчет коэффициентов уравнения регрессии проводят с учетом порядка эксперимента, описываемого матрицей планирования.

После получения математической модели необходимо провести статистический анализ, заключающийся в определении адекватности математической модели и оценке значимости коэффициентов уравнения регрессии.

Проверка значимости проводится для выявления коэффициентов, влияние которых на изменение функции отклика мало. В дальнейшем при работе с уравнением незначимые коэффициенты не учитываются. Оценка значимости проводится с помощью критерия Стьюдента. Коэффициент считается значимым если выполняется соотношение

$$|b_i| * S_{b_i} \geq t_{st},$$

где b_i – значение коэффициента;

S_{b_i} – величина дисперсии, связанной с коэффициентом;

t_{st} – табличное значение критерия Стьюдента.

Проверка адекватности математической модели проводится по критерию Фишера. Дисперсионное соотношение в этом случае имеет вид

$$F_p = S_{ад}^2 / S_{восп.}^2,$$

где F_p – расчетное (соответствующее проводимому эксперименту) значения критерия Фишера;

$S_{ад}^2$ – дисперсия адекватности, характеризующая отклонение математической модели от реального процесса;

$S_{восп.}^2$ – дисперсия воспроизводимости, характеризующая ошибку проведения эксперимента.

Дисперсия адекватности определяется из соотношения

$$S_{ад}^2 = [\sum(Y_p - Y_{э})^2] / (N - n),$$

где Y_p – значения функции отклика, полученные по математической модели ;

$Y_{э}$ – значения функции отклика, полученные в ходе эксперимента;

N – число опытов в матрице планирования;

n – число значимых коэффициентов в математической модели.

Дисперсия воспроизводимости определяется из соотношения

$$S_{воспр}^2 = [\sum(Y_i - Y_{cp})^2] / (n^1 - 1),$$

где Y_i – текущее значение функции отклика в параллельном опыте на выбранном уровне фактора;

$Y_{\text{ср}}$ – среднее значение функции отклика на выбранном уровне фактора;

n^1 – число параллельных опытов.

Расчетное значение критерия Фишера сравнивают с табличным при выбранном уровне значимости и числе степеней свободы $f_1 = N - n$, $f_2 = n^1 - 1$.

В случае соотношения $F_p \leq F_{\text{тавл}}$ уравнение адекватно и может быть использовано для моделирования изучаемого процесса.

Работа с любым регрессионным уравнением ведется в условных единицах. Для этого натуральные значения факторов преобразовываются в условные с учетом шага варьирования. Для этого используется соотношение вида

$$X_{\text{усл.}i} = (X_i - X_{\text{иср}}) / h_i$$

где $X_{\text{усл.}i}$ – условное значение фактора;

X_i – натуральное значение фактора;

$X_{\text{иср}}$ – натуральное значение фактора, соответствующее центру плана;

h_i – шаг варьирования.

3. ХОД РАБОТЫ

1. Подготовить экспериментальные данные и получить допуск на проведение лабораторной работы у преподавателя.

2. Определить число действующих факторов, область планирования и функцию отклика. Провести заполнение таблицы 1 соответствия натуральных и условных значений действующих факторов.

3. Найти и запустить программу "Регрессионный анализ".

4. Провести расчет матрицы планирования эксперимента, занести матрицу планирования в протокол. Для регрессионной модели от двух факторов матрица планирования представлена в таблице 2. При заполнении матрицы планирования необходимо внести экспериментальные значения в строгом соответствии с планом эксперимента.

5. Получить значения коэффициентов регрессионного уравнения. провести сравнение экспериментальных и расчетных значений f, \dots ции отклика. Занести результаты в протокол в таблицу 3.

6. Провести оценку значимости коэффициентов уравнения регрессии, провести оценку адекватности полученного уравнения. Результаты занести в протокол.

7. Провести определение координат точек экстремума полученного уравнения и типа поверхности отклика. Результаты занести в протокол.

Таблица 1

Значения уровней факторов в условных и натуральных величинах

Название Фактора	Шифр фактора	Средний уровень фактора	Шаг варьирования	Значения уровней переменных, соответствующие усл.ед.		
				- 1	0	+1
Сшивающий агент	X ₁	1,9	0,6	1,3	1,9	2,5
Ускоритель процесса	X ₂	0,7	0,5	0,2	0,7	1,2

Таблица 2

Матрица планирования эксперимента для двух действующих факторов.

№ п.п.	Название переменных				Значения функции Отклика
	Условные единицы		Натуральные единицы		
	X ₁	X ₂	X ₁	X ₂	
1	+1	+1	2,5	1,2	
2	+1	-1	2,5	0,2	
3	-1	+1	1,3	1,2	
4	-1	-1	1,3	0,2	
5	0	0	1,9	0,7	
6	0	+1	1,9	1,2	
7	0	-1	1,9	0,2	
8	+1	0	2,5	0,7	
9	-1	0	1,3	0,7	

Пример: для определения координат точек экстремума проводят вычисление первой производной по каждому из значений факторов. Корни полученной системы уравнений представляют собой координаты точек экстремума исследуемой функции.

$$\begin{cases} dR/dx_1 = b_1 + 2*b_{11}*x_1 + b_{12}*x_2 = 0 \\ dR/dx_2 = b_2 + 2*b_{22}*x_2 + b_{12}*x_1 = 0 \end{cases}$$

Таблица 3

Сравнение расчетных и экспериментальных данных

Расчетное значение функции отклика	Экспериментальное значение функции отклика	Относительная ошибка, %
------------------------------------	--	-------------------------

Полученные значения используются при определении типа поверхности отклика. Алгоритм определения поверхности отклика представлен в лекционном курсе. При выполнении лабораторной работы необходимо схематично изобразить полученную поверхность.

8. Выбрать значения линий равного уровня в области планирования и построить изолинии по выбранным значениям. Результаты занести в протокол.

9. Провести расчет значений функции отклика в 5-ти точках области планирования. В ходе лабораторной работы необходимо самостоятельно получить уравнения преобразования натуральных единиц в условные. Результаты занести в протокол.

5. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Методы активного эксперимента. Терминология и особенности применения. Основные отличия методов активного и пассивного эксперимента.

2. Назначение матрицы планирования, порядок выбора действующих факторов, расчета и анализа математической модели.

3. Определение значимости коэффициентов уравнения регрессии, анализ способов оценки адекватности математической модели.

4. Назначение и методики построения линий равного уровня. Особенности применения метода анализа контурных кривых при оптимизации области изменений действующих факторов.

5. Способы нахождения точек экстремума полученной функции и поиск вида поверхности отклика.

6. Особенности работы с уравнением регрессии, достоинства и недостатки регрессионного анализа.

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Красовский В.Н., Воскресенский А.М., Харчевников В.М. Примеры и задачи по технологии переработки эластомеров.– Л.: Химия, 1984.– 432 с.

2. Планирование эксперимента и применение вычислительной техники в процессе синтеза резин/ Под ред. Евстратава В.Ф. и Шварца Л.Г.– М.: Химия, 1970.– 250 с.

3. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии.– М.: Высш. шк., 1978.– 213 с.

Составители: Алексей Николаевич Гайдадин
Иван Павлович Петрюк

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА В
ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ И БИОТЕХНОЛОГИИ
Методические указания к лабораторной работе

Редактор Е. М. Богомазова
Темплан 2001 г., поз. 10

Подписано в печать Формат 60x84 1/16.
Бумага газетная. Печать офсетная. Усл. печ. л. 0,46
Уч.-изд. л. 0,4 Тираж 150 экз. Заказ

Волгоградский государственный технический университет
400131, Волгоград, пр. Ленина, 28

РПК «Политехник»
Волгоградского государственного технического университета
400131, Волгоград, ул. Советская, 35