

Министерство высшего и среднего специального образования
РСФСР

Волгоградский ордена Трудового Красного Знамени
политехнический институт
Кафедра химии и технологии переработки эластомеров

Лабораторная работа № 2
Факторный эксперимент
Методические указания

Волгоград 1987

Факторный эксперимент. Метод. указ. к лабораторным работам
(Сост. В.Ф. Каблов, В.П. Шевчук, А.Н. Гайдадин, научный редактор
А.М. Огрель, - Волгоград: ВолгПИ, 1987 - II с.)

Изложена процедура проведения факторного анализа с помощью
микро-ЭВМ "Искра 1256".

Для студентов специальности 0812 "Технология резины" по курсу
"Применение ЭВМ в химической технологии".

Табл. 5 . Библиогр. 3 назв.

1. ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Ознакомление с методикой проведения факторного эксперимента
и получение уравнений регрессии для определения поверхности
отклика.

2. ПОДГОТОВКА К РАБОТЕ

Сущность факторного эксперимента состоит в одновременном
варьировании всех факторов по определенному плану. Планирование,
проведение и обработка результатов факторного эксперимента состо-
ит из следующих этапов:

- 1) Составление матрицы планирования.
- 2) Проведение эксперимента.
- 3) Вычисление коэффициентов регрессии.
- 4) Проверка значимости коэффициентов регрессии.
- 5) Проверка адекватности модели.
- 6) Интерпретация (анализ) модели.
- 7) Принятие решения о дальнейшем ходе исследования.

Факторный эксперимент будет рассмотрен на примере двух уров-
невых планов типа 2 (2-число уровней, k-число факторов).
Такие планы дают возможность описать изучаемый процесс управле-
ния первого порядка (линейными) вида:

$$Y = \sum_{i=1}^k B_i X_i ; \quad (2.1)$$

$$Y = \sum_{i=1}^k B_0 + \sum_{i=1}^k B_i X_i \quad (2.2)$$

или неполными квадратными уравнениями

$$Y = B_0 + \sum_{i=1}^k B_i X_i + \sum_{i < j} B_{ij} X_i X_j \quad i, j=1, \quad (2.3)$$

где Y - выходной параметр;

$X_{i,j}$ - независимые переменные факторы;

B_0, B_i, B_j - коэффициенты регрессии.

3. АЛГОРИТМ РАСЧЕТОВ

Для построения матрицы планирования производят кодирование
факторов: верхний уровень считают равным +1, часто обозначают

как "+", нижний считают равным -I или "-". Связь между натуральными X_i и кодированным условным, нормированным \bar{X}_i значением факторов определяется по формуле:

$$\bar{X}_i = \frac{X_i - X_{i(\text{ср})}}{h_i}, \quad (3.1)$$

где $h_i = \frac{X_{i(\text{max})} - X_{i(\text{ср})}}{2}$, h_i - шаг варьирования для

$$X_{i(\text{max})} = \frac{X_{i(\text{max})} - X_{i(\text{ср})}}{h} = +1; \quad (3.2)$$

$$X_{i(\text{min})} = \frac{X_{i(\text{min})} - X_{i(\text{ср})}}{h} = -1. \quad (3.3)$$

Таким образом, планирование осуществляется в интервалах (+I, -I) для каждого X_i . В таблице 3.1 приведено определение уровней переменных в условном и натуральном масштабе для четырех переменных.

Таблица 3.1

Уровни переменных в условном и натуральном масштабе

№ п/п	Ингредиенты	Фактор	Средний уровень масс.ч.	Шаг варьир. масс.ч.	Значение уровней переменных (масс.ч.) соответ. усл.ед.	
					-I	+I
1.	Сера	X_1	1,7	0,4	1,3	2,1
2.	масло ПН-6	X_2	25	10	15	35
3.	Техуглерод ПМ-ГОС	X_3	75	10	65	85
4.	Сульфенамид И	X_4	1,7	0,4	1,3	2,1
5.	Альтакс	X_5	0,4	0,4	0	0,8

В таблице 3.2 показана организация матрицы планирование для 2, 3, 4 и 5 факторов, для получения уравнения (2.1). Для построения матрицы в настоящей работе достаточно указать в диалоговом режиме количества факторов, максимальные и минимальные значения каждого фактора.

Коэффициенты уравнения регрессии рассчитывают по следующей формуле:

$$B_i = \sum_{u=1}^N X_{iu} Y_u / N, \quad (3.4)$$

где u - номер строки матрицы (номер опыта);
N - количество опытов.

Для получения уравнений вида (3.2) и (3.3) матрицу планирования дополняют графами X_0 и X_{ij} . В таблице 3.3 приведена матрица планирования для трех переменных, позволяющая получить уравнение вида (2.3).

Таблица 3.3

Матрица планирования полного факторного эксперимента

номер опыта	Факторы								Результаты опыта Y
	X_0	X_1	X_2	X_3	$X_1 X_2$	$X_1 X_3$	$X_2 X_3$	$X_1 X_2 X_3$	
1	+	-	-	-	+	+	+	-	
2	+	+	-	-	-	-	+	+	
3	+	-	+	-	-	+	-	+	
4	+	+	+	-	+	-	-	-	
5	+	-	-	+	-	-	-	+	
6	+	+	-	+	+	+	-	-	
7	+	-	+	+	-	-	+	-	
8	+	+	+	+	+	+	+	+	

Планирование эксперимента по приведенной в табл. 3.3 матрице позволяет получить уравнение:

$$Y = B_0 + B_1 X_1 + B_2 X_2 + B_3 X_3 + B_{12} X_1 X_2 + B_{13} X_1 X_3 + B_{23} X_2 X_3 + B_{123} X_1 X_2 X_3. \quad (3.5)$$

Величины коэффициентов $B_1, B_2, B_3, B_{12}, B_{13}, B_{23}, B_{123}$ показывают эффект взаимодействия факторов X_1, X_2 и X_3 . Коэффициенты B_{ij} рассчитываются по формуле (3.4) с заменой факторов X_i на их произведения:

$$B_{ij} = \sum_{u=1}^N X_{iu} X_{ju} Y_u / N.$$

При небольших интервалах варьирования факторов и их числе больше 3 (K > 3) целесообразно использовать дробный факторный эксперимент. Это существенно уменьшает число опытов.

Дробный факторный эксперимент представляет собой часть ПЭС - так называемую дробную реплику и позволяет оценивать

линейные эффекты и некоторые из эффектов взаимодействия. В обозначении дробной реплики 2^{3-1} цифра 3 указывает на общее число переменных, а цифра 1-на число переменных, которые приравниваются соответствующим взаимодействиям. При таком планировании можно оценить свободный член B_0 и три коэффициента регрессии при линейных членах. Дробная матрица планирования для трех переменных приведена в таблице 3.4. Как видно из таблицы 3.4 при использовании дробной полуреплики число опытов сокращается с 16 до 8, т.е. в 2 раза.

Таблица 3.4

Дробная матрица планирования 2^{3-1}

номер опыта	Факторы				Результаты опыта
	X_1	X_2	X_3	X_4	
1	+	-	-	+	
2	+	+	-	-	
3	+	-	+	-	
4	-	+	+	-	

Планирование эксперимента по приведенной схеме позволяет получить уравнение

$$Y = B_0 + B_1 X_1 + B_2 X_2 + B_3 X_3. \quad (3.6)$$

В этом уравнении значения коэффициентов будут оценками для совместных эффектов:

$$B_1 = B_1 + B_{23};$$

$$B_2 = B_2 + B_{13};$$

$$B_3 = B_3 + B_{12},$$

где — истинные коэффициенты регрессии.

Выбор нужной реплики в качестве плана эксперимента производится в зависимости от имеющихся о процессе сведений. Зная какими из эффектов можно пренебречь (обычно эффекты взаимодействия), можно построить системы смешения оценок коэффициентов регрессии. Если включить в эксперимент еще один фактор, приравняв его к какому-либо взаимодействию, например: $X_4 = X_1 X_2$, то получим четвертьреплику от ПФЭ 2^5 или ДФЭ 2^{5-2} .

Таблица 3.2

Организация матрицы планирования

Тип эксперимента	номер опыта	Факторы					Отклик
		X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	
	1	+I	+I	+I	+I	+I	
	2	2I	+I	+I	+I	+I	
	3	+I	-I	+I	+I	+I	
	4	-I	-I	+I	+I	+I	
	5	+I	+I	-I	+I	+I	
	6	-I	+I	-I	+I	+I	
	7	+I	-I	-I	+I	+I	
	8	-I	-I	-I	+I	+I	
	9	+I	+I	+I	-I	+I	
	10	-I	+I	+I	-I	+I	
	11	+I	-I	+I	-I	+I	
	12	-I	-I	+I	-I	+I	
	13	+I	+I	-I	-I	+I	
	14	-I	+I	-I	-I	+I	
	15	+I	-I	-I	-I	+I	
	16	-I	-I	-I	-I	+I	
	17	+I	+I	+I	+I	-I	
	18	2I	+I	+I	+I	-I	
	19	+I	-I	+I	+I	-I	
	20	-I	-I	+I	+I	-I	
	21	+I	+I	-I	+I	-I	
	22	-I	+I	-I	+I	-I	
	23	+I	-I	-I	+I	-I	
	24	-I	-I	-I	+I	-I	
	25	+I	+I	+I	-I	-I	
	26	-I	+I	+I	-I	-I	
	27	+I	-I	+I	-I	-I	
	28	-I	-I	+I	-I	-I	
	29	+I	+I	-I	-I	-I	
	30	-I	+I	-I	-I	-I	
	31	+I	-I	-I	-I	-I	
	32	-I	-I	-I	-I	-I	

Характеристика некоторых дробных реплик

Таблица 3.5

План	Кол-во опытов	Матрица	Смешанные эффекты	
			Линейные	Взаимодействие
$I/2$ реплика 2^{3-1}	4	a, b, c, abc	$V_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}$ $V_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13}$ $V_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}$	не определяются
$I/2$ реплика 2^{4-1}	8	ab, ac, ad, bc, bd, cd, abcd, (I)	не смешаны	$V_{12} \rightarrow \beta_{12} + \beta_{34}$ $V_{13} \rightarrow \beta_{13} + \beta_{24}$ $V_{14} \rightarrow \beta_{14} + \beta_{23}$
$I/2$ реплика 2^{5-1}	16	(I), ab, acde, bcde, ac, bc, de, abcde, ae, be, ed, abcd, ad, cd, ce, abc	не смешаны $\beta_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{245}$ $\beta_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{145}$ $\beta_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{145}$ $\beta_4 \rightarrow \beta_4 + \beta_{135}$ $\beta_5 \rightarrow \beta_5 + \beta_{124}$	не смешаны
$I/4$ реплика 2^{3-2}	8	ace, bce, ade, cde, ab, cd, abcd, (I)		$V_{13} \rightarrow \beta_{13} + \beta_{14}$ $V_{14} \rightarrow \beta_{14} + \beta_{23}$

Для сокращения записи матриц применяют кодовое обозначение строк; буквы a, b, c, d ... обозначают, что соответствующий фактор X_i находится на верхнем уровне. Если буква, соответствующая данному фактору, отсутствует, то фактор в этом опыте находится на нижнем уровне. Опыт, в котором все факторы находятся на нижнем уровне, обозначается символом (I). Матрица планирования ПФЭ для трех факторов (табл) может быть обозначена одной строкой:

abc, bc, ac, c, ab, b, a, (I).

В таблице 3.5 приведены некоторые ДФЭ.

С помощью таблицы 3.5 определяют значение факторов на фиксированных уровнях; с использованием формул 2.1 - 2.3 получают математические модели процесса.

4. ХОД РАБОТЫ

- 1) Ввести по имени программу расчета матрицы планирования с учетом выбранного количества факторов. Занести матрицу в лабораторный журнал.
- 2) Установить область планирования и значения варьируемых факторов.
- 3) Провести эксперимент.
- 4) Экспериментальные значения показателя записать в правый столбец матрицы планирования.
- 5) Ввести по имени программу расчета коэффициентов уравнения регрессии для выбранного количества факторов. Найти уравнение регрессии и записать в лабораторный журнал.
- 6) Провести оценку экспериментальных и расчетных значений показателя. Занести в лабораторный журнал расчетные значения показателя и значения отклонения.
- 7) Ввести по имени программу проведения статистического анализа полученного уравнения.
- 8) Провести по имени оценку адекватности уравнения по критерию Фишера. Результаты занести в лабораторный журнал.
- 9) Провести оценку значимости коэффициентов уравнения регрессии. Результаты занести в лабораторный журнал.
- 10) По заданию преподавателя построить линии равных уровней или определить коэффициенты корреляции показателей. Результаты занести в лабораторный журнал.

вание <Esc> на имя очередного ингредиента. Внимание! Активные наполнители указываются в конце таблицы. Первым ингредиентом указывается каучук. Без соблюдения этих условий нормальный результат не гарантируется. По окончании ввода Вы увидите следующее.

Смело нажмите на клавишу <Enter>. При желании результат можно вывести на принтер. После печати нажмите клавишу <Enter>. Для выхода из режима расчета нажмите клавишу <Esc>. Для информационного файла выходными данными являются кортежи теплофизических характеристик ингредиентов. Полученные данные могут быть сохранены в файле данных системы расчета кинетики вулканизации "Булкаметрия". Для этого в каталоге прямого доступа должен находиться информационный файл [NAME].DBF. Способы работы с этим файлом очень просты и здесь не рассматриваются.

Функция "Новая база" обеспечивает выбор нового файла данных.

Функция "Выход" означает конец работы.

4. Ход работы

1. Загрузить программу INGR.
2. Оценить рецепт полимерного материала, полученного в качестве задания. Установить ингредиенты, относящиеся к активным наполнителям.
3. Провести расчет теплофизических характеристик смеси.
4. Оценить влияния концентрации ингредиента на значения характеристик композиции.
4. Построить зависимости теплопроводности, удельной теплоемкости, температуропроводности и плотности от концентрации ингредиента.
5. Проанализировать влияние на значения коэффициентов природы и концентрации выбранных ингредиентов.
6. Получить регрессионную модель изменения теплофизических характеристик от двух ингредиентов различной природы.
7. Провести анализ полученных моделей. Определить область минимальных и максимальных значений свойств.
8. Написать выводы, подготовить отчет.

5. Контрольные вопросы.

1. Необходимость расчета теплофизических характеристик поли-

мерных смесей для технологической практики.

2. Особенности применения моделей Гамильтона - Гроссера, Миснара и Дульнева.
3. Сравнительные характеристики результатов, полученных экспериментальными и расчетными методами.
4. Особенности влияния активных наполнителей на теплофизические характеристики композиции.
5. Влияние природы ингредиентов на теплофизические характеристики композиции.
6. Влияние концентрации органических и неорганических веществ на свойства композиции.
7. Привести пример расчета свойств с помощью программы INGR.
8. Привести пример пополнения файла данных с помощью программы INGR.
9. Назначение программы INGR.

Л и т е р а т у р а

1. В.Н. Красовский, А.М. Воскресенский, В.М. Харчевников Примеры и задачи по технологии переработки эластомеров, Л, Химия, 1984
2. Лабораторный практикум по технологии резины, под ред. Захарова Н.Д., М, Химия, 1988