

*Дисциплина*

# **Моделирование химическо-технологических процессов**

*Тема №3*

## **Статистические методы исследование экспериментальных данных**

*Воробьев Евгений Сергеевич*

# Проведение исследования

При выполнении исследования мы можем использовать два подхода при выполнении экспериментальных работ:

- Использовать уже имеющиеся экспериментальные данные или просто их накапливать по мере надобности и потом проводить их анализ (**Пассивный эксперимент**);
- Планировать проведение экспериментальных исследований по мере их надобности и оптимизировать их число или другие параметры (**Активный эксперимент**)

# Пассивный эксперимент

Собрав необходимый экспериментальный материал, проводим его анализ с целью выявления возможных связей между выходными функциями и входными параметрами. Это позволяет отбросить малозначимые входные параметры и включить в анализ возможные (наиболее значимые) взаимосвязи между входными параметрами. Данные анализы выполняются с помощью статистических методов:

***Дисперсионный анализ*** – определение возможных связей (влияний) различных параметров друг на друга и выходную функцию;

***Корреляционный анализ*** – выделение наиболее значимых связей и их вида (прямая и обратная зависимости);

***Регрессионный анализ*** – нахождение оптимального вида функции для найденного выше влияния.

# Дисперсионный анализ

С помощью дисперсионного анализа решаются вопросы о влиянии одного (однофакторный дисперсионный анализ) или нескольких (многофакторный дисперсионный анализ) факторов на значение изучаемой функции.

Например, типа корма на удой, региона проживания на продолжительность жизни, способа отбора проб на их достоверность и представительность и т.п.

При этом рассматривается нулевая гипотеза: факторы не влияют на функцию, средние выборок принадлежат одной генеральной совокупности. Если нулевая гипотеза отвергается при уровне значимости  $\alpha$ , то с доверительной вероятностью  $1-\alpha$  можно сделать вывод, что фактор влияет на функцию.

# Равномерный однофакторный дисперсионный анализ

При равномерном однофакторном дисперсионном анализе число замеров значений изучаемого признака на разных уровнях (при разных значениях) факторного признака одинаковое. Данные замеров сводятся в таблицу:

Номер измерения	Уровень фактора			
	$A_1$	$A_2$	...	$A_p$
1	$x_{11}$	$x_{12}$	...	$x_{1p}$
2	$x_{21}$	$x_{22}$	...	$x_{2p}$
...	...	...	...	...
q	$x_{q1}$	$x_{q2}$	...	$x_{qp}$
Групповые средние	$\bar{X}_{гр1}$	$\bar{X}_{гр2}$	...	$\bar{X}_{грp}$

# Гомогенный однофакторный дисперсионный анализ (расчет)

Общая сумма квадратов отклонений наблюдаемых значений признака от общей средней:

$$C_{общ} = \sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^q (x_{ij} - \bar{x})^2$$

Факторная (межгрупповая) сумма квадратов отклонений групповых средних от общей средней, характеризующая рассеяние между группами:

$$C_{факт} = q \sum_{j=1}^p (x_{гp j} - \bar{x})^2$$

Остаточная (групповая) сумма квадратов отклонений наблюдаемых значений от своей групповой средней, характеризующая рассеяние внутри групп:

$$C_{ост} = C_{общ} - C_{факт}$$

Общая, факторная и остаточная дисперсии:

$$S_{общ}^2 = C_{общ} / (pq - 1)$$

$$S_{факт}^2 = C_{факт} / (p - 1)$$

$$S_{ост}^2 = C_{ост} / p(q - 1)$$

Значение критерия Фишера:

$$F = S_{факт}^2 / S_{ост}^2$$

Значение критерия Фишера сравнивается с критическим для заданного уровня значимости  $\alpha$  и числа степеней свободы  $k1 = p - 1$  и  $k2 = p(q - 1)$ . Если  $F > F_{кр}$ , то гипотеза об отсутствии влияния фактора на признак отвергается с доверительной вероятностью  $1 - \alpha$ .

# Результаты решения

Исходные данные –  
таблица с 5 факторами и 10  
измерениями по каждому  
из факторов

$X_i \setminus F_j$	$F_1$	$F_2$	$F_3$	$F_4$	$F_5$
$X_1$	34,22004	63,2994	63,23938	71,17602	71,04351
$X_2$	59,41386	56,17536	65,13892	62,60317	79,83182
$X_3$	53,51544	52,90722	65,36055	83,90108	66,10766
$X_4$	46,90552	32,89104	64,56097	66,43844	60,67118
$X_5$	57,53644	67,21237	75,29947	74,83599	75,5602
$X_6$	33,11478	74,09106	68,7929	73,43308	72,39644
$X_7$	53,45366	40,72347	75,52062	65,58531	73,69896
$X_8$	62,41992	32,63074	68,91385	72,38873	72,23337
$X_9$	53,91379	39,07065	71,44204	72,15462	71,01498
$X_{10}$	37,0729	55,42577	58,5511	70,34815	63,00187

Однофакторный дисперсионный анализ

ИТОГИ

Группы	Счет	Сумма	Среднее	Дисперсия
Столбец 1	10	491,5663	49,15663	115,8853
Столбец 2	10	514,4271	51,44271	212,0715
Столбец 3	10	676,8198	67,68198	29,0074
Столбец 4	10	712,8646	71,28646	34,51144
Столбец 5	10	705,56	70,556	33,57472

Дисперсионный анализ

Источник вариации	SS	df	MS	F расч.	P-знач.	F крит.
Между гр	4681,337	4	1170,334	13,76701	2,08E-07	2,578739
Внутри гр	3825,453	45	85,01007	F расч. >> F крит.		
Итого	8506,79	49				

Результаты расчета  
по методике  
однофакторного  
дисперсионного  
анализа.





# другие виды дисперсионного однопараметрического анализа

Можно реализовывать неравномерные выборки по параметрам ( разное число испытаний для каждого уровня параметра) это приводит к более сложным формулам расчета критерия Фишера, когда учитываются число испытаний для каждого уровня.

Однофакторный непараметрический дисперсионный анализ используется для сравнения влияния качественных факторов, которые заменяются на ранги. Для оценок используется критерий Краскала-Уоллиса (в русскоязычной литературе его также называют критерием Краскела-Уоллеса, Крускала-Уоллеса). Например, проверить, существенны ли различия уровня безработицы в разных регионах России.

# Двухфакторный дисперсионный анализ

Позволяет оценить влияние двух факторов на выходную функцию, например, несколько катализаторов на выход целевых продуктов по разным схемам ведения процесса, или урожайность различных сортов пшеницы и разных удобрений и т.п.

Можно реализовывать анализ с повторяющимися данными (часть уровней или факторов повторяются в различных столбцах или строках).

Оценка гипотезы проверяется так же через критерий Фишера.

Все эти методы можно реализовать в MS Excel с использованием надстройки «Анализ данных» или непосредственно на листе

# Корреляционный анализ

Корреляционный анализ состоит в определении степени связи между двумя случайными величинами  $X$  и  $Y$ . В качестве меры такой связи используется коэффициент корреляции. Коэффициент корреляции оценивается по выборке объема  $n$  связанных пар наблюдений  $(x_i, y_i)$  из совместной генеральной совокупности  $X$  и  $Y$ . Существует несколько типов коэффициентов корреляции, применение которых зависит от измерения (способа шкалирования) величин  $X$  и  $Y$ .

Для оценки степени взаимосвязи величин  $X$  и  $Y$ , измеренных в количественных шкалах, используется коэффициент линейной корреляции (коэффициент Пирсона), предполагающий, что выборки  $X$  и  $Y$  распределены по нормальному закону.

# Качественная оценка тесноты СВЯЗИ

Величина коэффициента парной корреляции	Характеристика силы связи
До 0,3	Практически отсутствует
0,3–0,5	Слабая
0,5–0,7	Заметная
0,7–0,9	Сильная
0,9–0,99	Очень сильная

При получении коэффициента корреляции более 0,5  
обычно требуется учета

# Примеры расчетов

Исходные данные –  
таблица с 5 факторами и 10  
измерениями по каждому  
из факторов

Результаты расчетов по  
стандартным процедурам в  
надстройке «Анализ  
данных»

$X_i \setminus F_j$	$F_1$	$F_2$	$F_3$	$F_4$	$F_5$
$X_1$	34,22004	63,2994	63,23938	71,17602	71,04351
$X_2$	59,41386	56,17536	65,13892	62,60317	79,83182
$X_3$	53,51544	52,90722	65,36055	83,90108	66,10766
$X_4$	46,90552	32,89104	64,56097	66,43844	60,67118
$X_5$	57,53644	67,21237	75,29947	74,83599	75,5602
$X_6$	33,11478	74,09106	68,7929	73,43308	72,39644
$X_7$	53,45366	40,72347	75,52062	65,58531	73,69896
$X_8$	62,41992	32,63074	68,91385	72,38873	72,23337
$X_9$	53,91379	39,07065	71,44204	72,15462	71,01498
$X_{10}$	37,0729	55,42577	58,5511	70,34815	63,00187

Ковариационная матрица					
	Столбец 1	Столбец 2	Столбец 3	Столбец 4	Столбец 5
Столбец 1	104,2968				
Столбец 2	-71,414	190,8643			
Столбец 3	26,14353	-5,50109	26,10666		
Столбец 4	-2,06204	19,6499	0,634321	31,0603	
Столбец 5	23,23533	24,61303	15,29908	-7,56606	30,217

Корреляционная матрица					
	Столбец 1	Столбец 2	Столбец 3	Столбец 4	Столбец 5
Столбец 1	1				
Столбец 2	-0,50616	1			
Столбец 3	0,501018	-0,07793	1		
Столбец 4	-0,03623	0,255209	0,022276	1	
Столбец 5	0,413891	0,324097	0,544706	-0,24697	1

# Порядок принятия решения

Процедуру установления корреляционной зависимости принято называть проверкой гипотезы. Ее принято проводить в следующей последовательности:

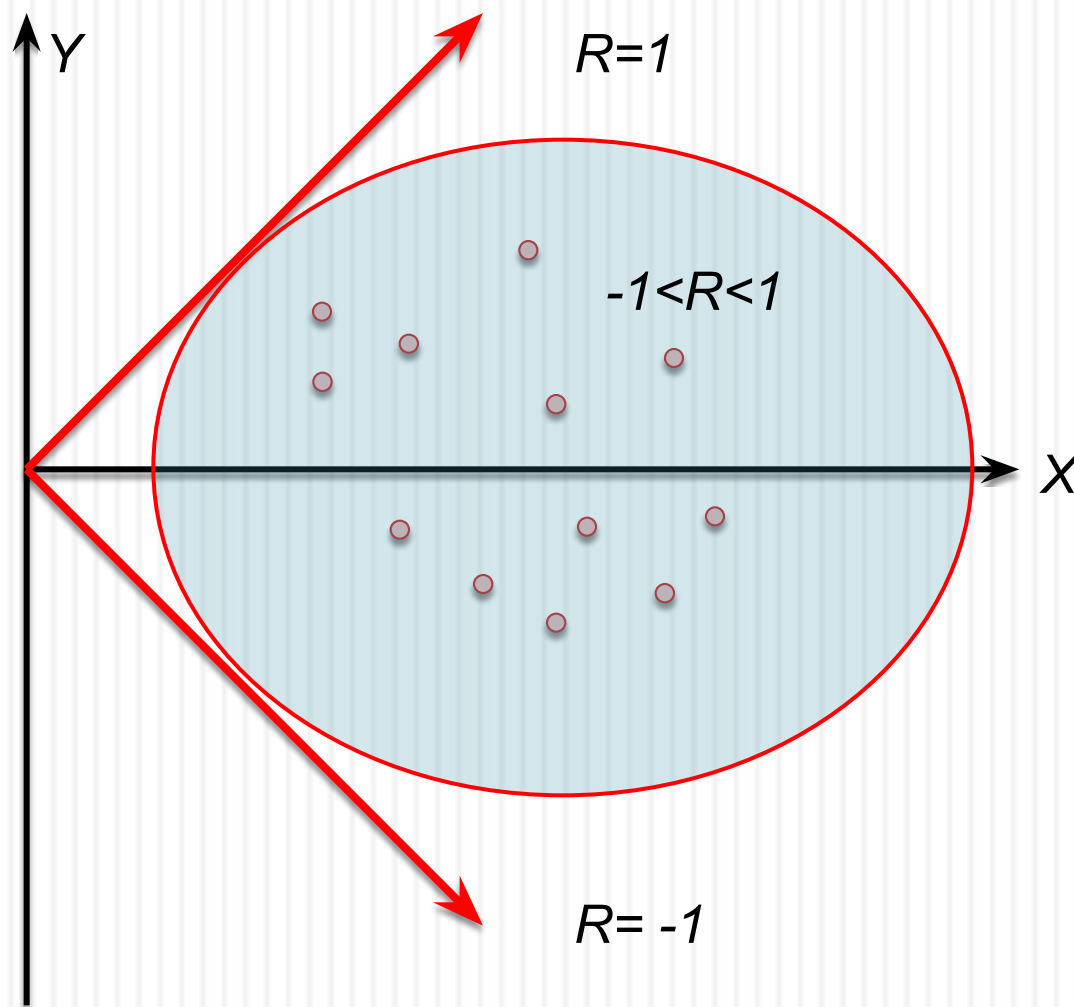
- вычисление линейного коэффициента парной корреляции (КПК) между совокупностями случайных величин  $x_i$  и  $y_i$ ;
- его статистическая оценка (проверка значимости).

Статистическую оценку КПК проводят путем сравнения его абсолютной величины с табличным (или критическим) показателем  $r_{\text{крит}}$ , значения которого отыскиваются из специальной таблицы.

Если окажется, что  $|r_{\text{расч}}| \geq r_{\text{крит}}$ , то с заданной степенью вероятности (обычно 95 %) можно утверждать, что между рассматриваемыми числовыми совокупностями существует значимая линейная связь. Или по-другому – гипотеза о значимости линейной связи не отвергается.

В случае же обратного соотношения, т.е. при  $|r_{\text{расч}}| < r_{\text{крит}}$ , делается заключение об отсутствии значимой связи.

# Области существования корреляционных зависимостей





# Оценка значимых факторов при анализе работы печи пиролиза

	A	B	C	D	E	F	G	H
2	Тем-ра пирогаза	Состав сырья %мас		Выход компонентов % мас				
3		C3H8	C4H10	водород H <sub>2</sub>	метан CH <sub>4</sub>	этан C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	этилен	пропан
4	800	0,55	93,88	0,701469	17,56019	6,397923	24	
5	800	0,55	93,88	0,882276	18,66101	6,737023	27	
6	800	3,24	94,32	0,872131	21,78131	7,264156	30	
7	800	9,3	86,22	0,955312	24,36872	8,058169		
8	800	9,3	86,22	0,943216	22,12325	7,355159		
9	800	9,3	86,22	0,862038	21,25557	7,449277		
10	800	21,94	76,27	0,902102	21,49675	7,209379		
11	800	21,94	76,27	0,960065	20,97625	6,829041		
12	800	6,21	88,63	0,894738	22,51985	7,115684		
13	800	6,21	88,63	0,903411	22,35622	7,358003		
14	800	6,21	88,63	0,932584	22,72273	6,791589		
15	800	14,57	81,79	0,88663	22,09488	7,063919	30	
16	800	40,74	55,46	1,083855	24,12461	6,557261	33	
17	800	40,74	55,46	0,936321	21,94982	7,548767	29	
18	800	40,74	55,46	0,887005	20,81151	8,070000	26	

**Фрагмент  
таблицы  
данных ЦЗЛ  
ОАО «Казань  
Оргсинтез»  
по составу  
компонентов  
при работе  
печи  
пиролиза.**



# Оценка значимых факторов при анализе работы печи пиролиза

		Тем-ра пирогаза	Состав сырья %мас		водород H <sub>2</sub>	метан CH <sub>4</sub>	этан C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	этилен C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	пропан C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
			C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>					
Тем-ра пирогаза		1							
Сырьё %мас	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,095317	1						
	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	-0,11859	-0,99656	1					
выход компонентов % мас	водород H <sub>2</sub>	0,290632	0,431535	-0,43439	1				
	метан CH <sub>4</sub>	0,457784	-0,11308	0,099555	0,58018	1			
	этан C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0,29021	0,018409	-0,01309	-0,02026	0,459954	1		
	этилен C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	0,301568	-0,20616	0,197579	0,596223	0,924257		1	
	пропан C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,060909	0,751344	-0,73923	0,36889	-0,3267			1
	пропилен C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	-0,38061	-0,2726	0,274865	-0,69383	-0,75446			
	ацетилен C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	0,352191	-0,2314	0,226025	0,515553	0,792903			
	изобутан iC <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	-0,16414	0,109161	-0,11808	-0,59164	-0,65379			
	н-бутан nC <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	-0,48314	-0,37538	0,378245	-0,8321	-0,67655			
	бутилен C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>	-0,43387	-0,30453	0,298566	-0,71799	-0,63766			
	пропадиен C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	-0,04377	-0,21804	0,204776	-0,22722	0,022119	-0,022119		
	дивинил C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>	0,106145	-0,35332	0,349165	0,093263	0,262017	-0,262017		

Фрагмент  
таблицы  
коэффициент  
ов  
корреляции  
для  
компонентов  
при работе  
печи  
пиролиза от  
температуры

**Фрагмент  
таблицы  
коэффициент  
ов  
корреляции  
для  
компонентов  
при работе  
печи  
пиролиза от  
температуры  
и исходного  
сырья**

# Регрессионный анализ

В практике статистического исследования часто возникает необходимость определить не только корреляционное соотношение между изучаемыми характеристиками, но и установить определенную связь между ними, представив её в строгой аналитической форме.

Таким образом, в случае выявления корреляции дается ответ на вопрос: «*Существует ли связь?*»

Целью же регрессионного анализа является поиск ответа на более сложный вопрос: «*Каков вид этой связи? Что на что влияет?*»

Однако в последнем случае речь не идет о выяснении механизма причинности обнаруженной связи, т.е. не ставится вопрос «*Почему существует связь?*» Это уже считается проблемой специального исследования.

# Выбор модели

Задачей анализа является поиск математической зависимости и оценка насколько описание с использованием данной зависимости для описание экспериментальных данных лучше, чем её отсутствие. Обычно используются стандартные зависимости:

□ Линейная –

$$Y = A_0 + A_1 X$$

□ Степенная –

$$Y = A_0 \cdot X^{A_1}$$

□ Логарифмическая –

$$Y = A_0 + A_1 \ln(X)$$

□ Экспоненциальная –

$$Y = A_0 e^{A_1 X}$$

□ Полином –

$$Y = A_0 + \sum_{i=1}^n A_i X^i$$

# Математическая реализация решения

В основе решения задачи лежит метод наименьших квадратов (МНК), критерием оптимальности которого является следующая зависимость:

$$R = \sum_{i=1}^N (Y_{\text{эксп}_i} - Y_{\text{расч}_i})^2 \Rightarrow \min$$

для решения данной задачи подставляем математическое выражение  $Y_{\text{расч}}$  и дифференцируем по неизвестным коэффициентам в данном выражении. Получаем систему из  $k$  уравнений с  $k$  неизвестными, принимая условие, что в точке минимума производные превращаются в нуль, решаем данную систему.

# Решение одномерных задач

Требуется провести исследование влияния одного параметра на исследуемую функцию, например как изменяется вязкость смеси от температуры:

- Собираем информацию о процессе, методиках исследования;
- Проводим статистические исследования методик, установки и образцов, определяемся с желаемой точностью результатов;
- Задаемся начальной температурой;
- Задаемся шагом изменения параметра;
- Проводим исследование пока не получим достаточное число экспериментальных данных;
- Обрабатываем результаты и получаем модель;
- Проверяем её на адекватность.

# Реализация решения в MS Excel

	A	B
1	Исходные данные	
2	Параметр	Температура
3	Начальное значение	100
4	Шаг изменения	15
5	Функция	Вязкость

Пользуясь информацией из таблицы исходных данных строим

	D	E	F	G
	Таблица экспериментальных и расчетных данных			
1				
2	№	Темпера	Вязкость	
3	опыта	тура	эксп.	расч.

Готовим таблицу с исходными данными

Используем формулу  
=B2 (наименование параметра)

Используем формулу  
=B5 (наименование функции)

Ячейки объединяем и выравниваем с переносом слов



Формируем формулы для нумерации опытов и значений параметра:


- Первый опыт начинается 1 и далее вычисляется по формуле к предыдущему номеру прибавляем 1;
- Начальное значение параметра выбираем из таблицы исходных данных и далее к предыдущему значению параметра прибавляем шаг, заданный в таблице исходных данных
- Далее вторую строку таблицы копируем необходимое число раз, например до 10 опытов.

	D	E
2	№ опыта	
3		=B2
4	1	=B3
5	=D4+1	=E4+\$B\$4

В формулах адреса ячеек соответствуют следующим данным:  
B2 – наименование параметра;  
B3 – начальное значение параметра;  
B4 – шаг изменения параметра  
D4 – номер первого опыта  
E4 – значение параметра в первом опыте

В результате получаем следующую таблицу

[Посмотреть](#)

	A	B	C	D	E	F	G
1	Исходные данные			Таблица экспериментальных и расчетных данных			
2	Параметр	Температура		№	Темпера	Вязкость	
3	Начальное значение	100		опыта	тура	эксп.	расч.
4	Шаг изменения	15		1	100		
5	Функция	Вязкость		2	115		
6	При заполнении экспериментальных данных сначала выделим весь столбец с этими данными и используем команду: <div>  <p>Полином 3-ого порядка</p> </div>			3	130		
7				4	145		
8				5	160		
9				6	175		
10				7	190		
11				8	205		
12				9	220		
13				10	235		



# Заполняем экспериментальные данные

D	E	F	G	H
№	Температу	Вязкость		
опыта	ра	эксп.	расч.	
1	15			
2	22			
3	29			
4	36			
5	43			
6	50			
7	57			
8	64			
9	71			
10	78			

Номер задания заполняется автоматически или может быть выбираем из списка имен «Использовать в формуле ☐» на ленте «Формулы».

Набор выходных данных определяется по выделенным ячейкам на листе.

Набор входных параметров указывается мышкой из ячеек столбца «Температура».

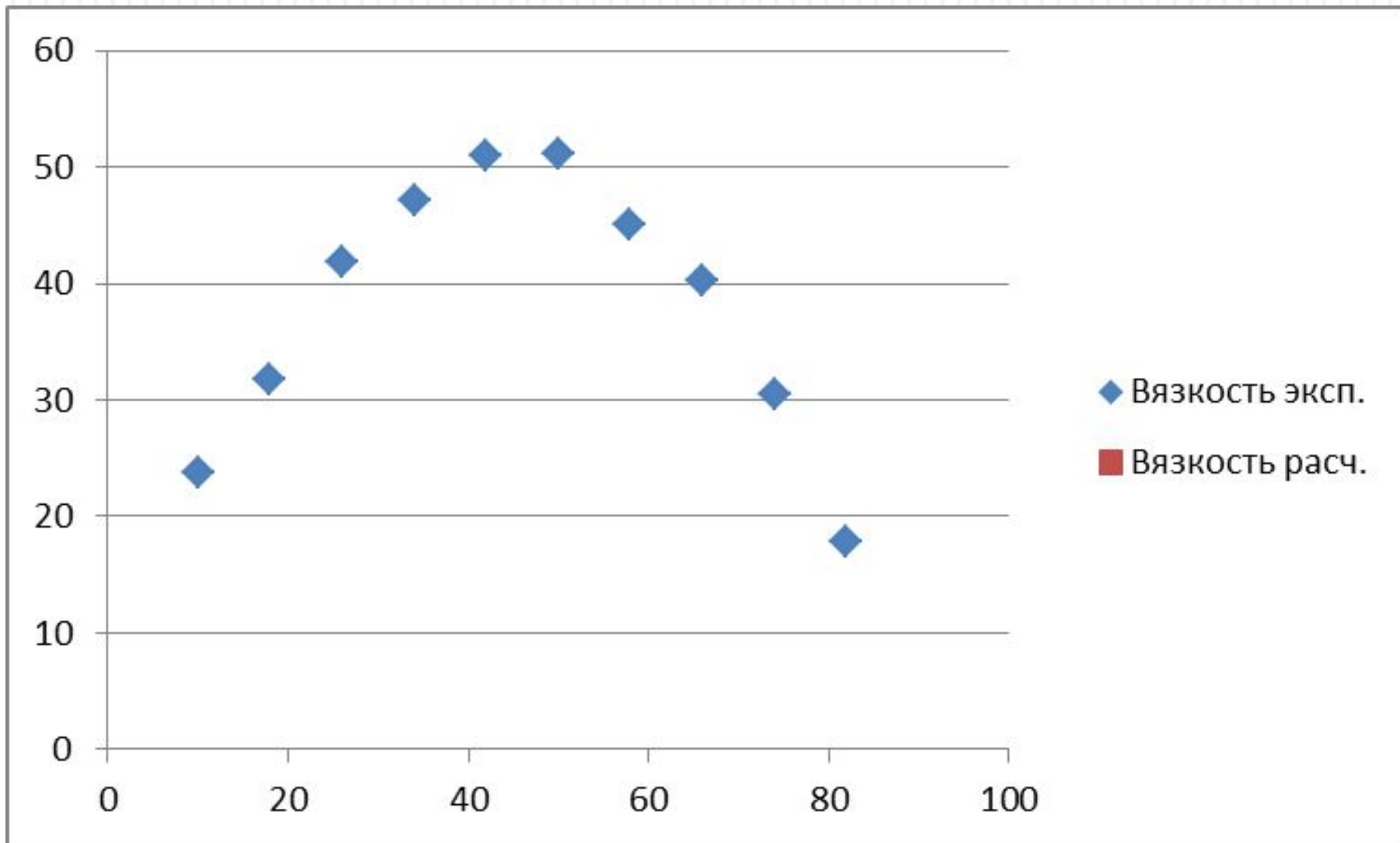
После завершения ввода данных для набора входных параметров кнопкой «Генерируем» получаем необходимый набор экспериментальных данных для столбца «Вязкость эксп.»

По результатам  
эксперимента строим  
график

Выделяем таблицу с ячейки,  
где написано «Температура»  
до последнего расчетного  
значения

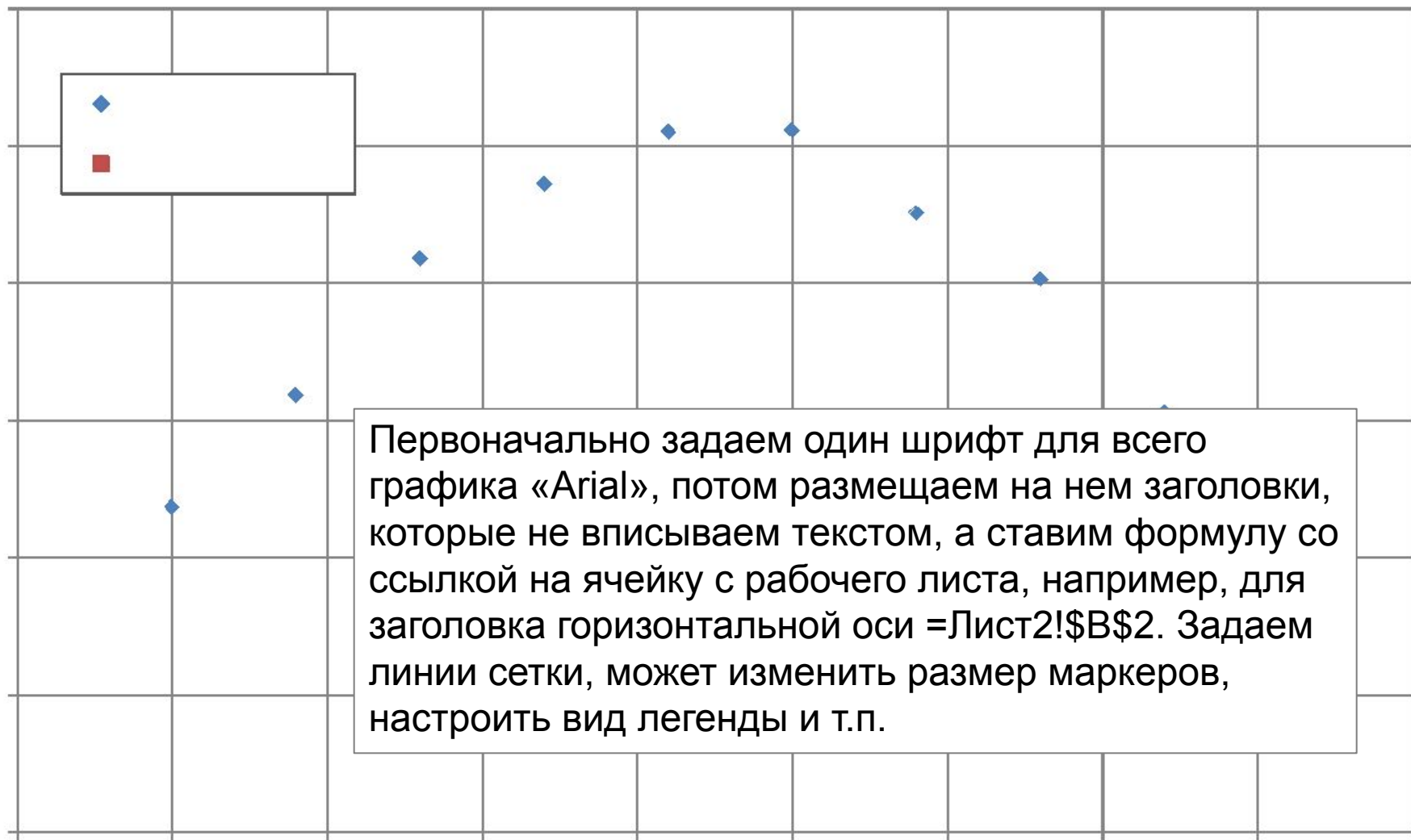
	D	E	F	G
3	№	Температу	Вязкость	
4	опыта	ра	эксп.	расч.
5	1	15	32,418202	
6	2	22	40,521722	
7	3	29	47,343278	
8	4	36	51,715724	
9	5	43	53,039947	
10	6	50	52,82624	
11	7	57	50,981374	
12	8	64	46,163968	
13	9	71	36,716008	
14	10	78	25,351664	

Вызываем команду  
построения диаграммы  
«Точечная» - «Только  
маркеры». Перемещаем  
диаграмму на отдельный  
лист, настраиваем её вид  
(сетка, оси и их  
названия), оптимизируем  
поверхность диаграммы,  
форматируем вид  
легенды. Получаем  
следующий график



Если график нужен для отчета, переносим его на отдельный лист и настраиваем по требованиям ГОСТ или издания для которого он готовится.

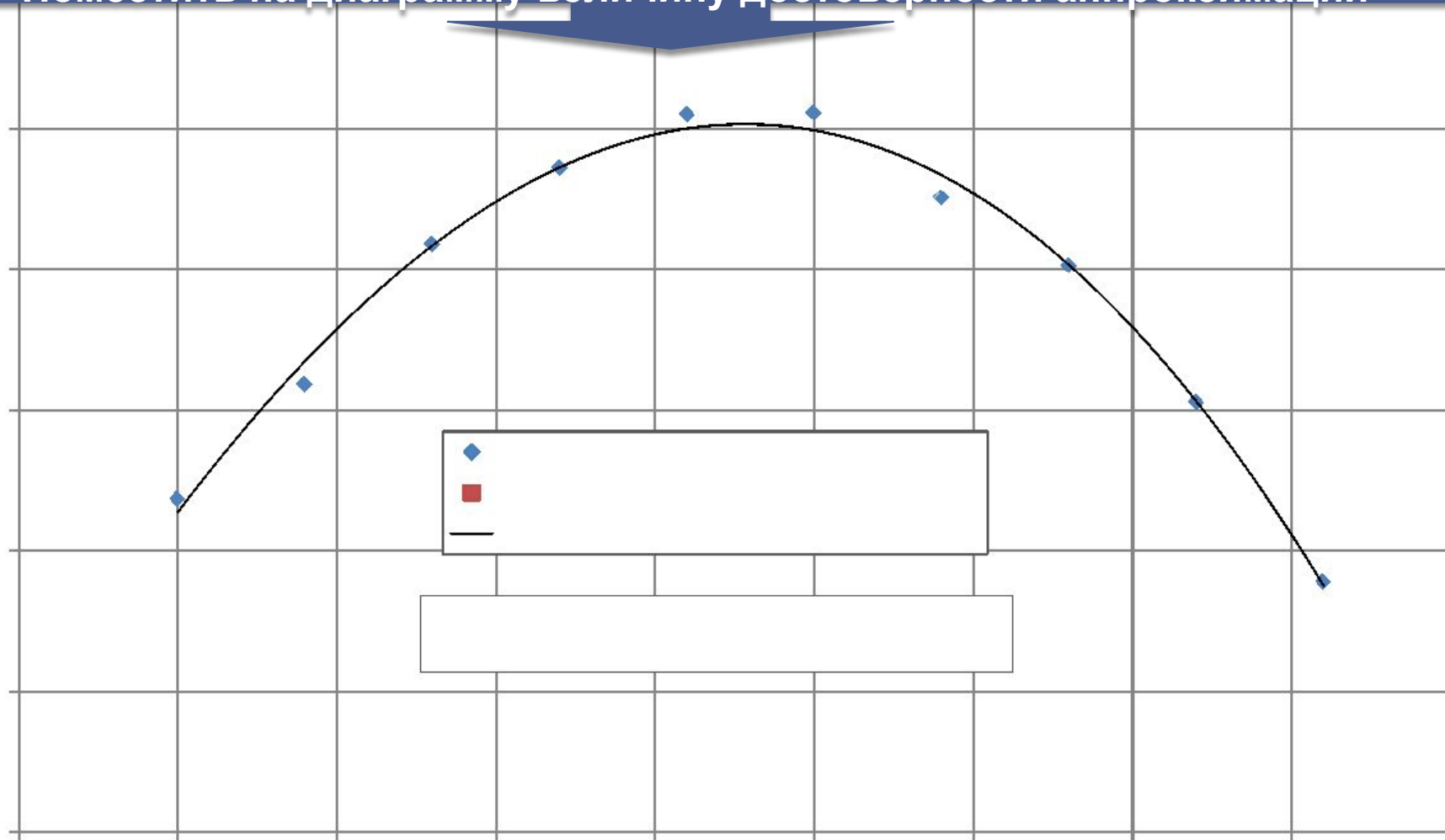
# Вязкость раствора зависит от температуры



Настраиваем график

Через контекстное меню ряда (щелчок правой кнопки мышки на точке) выполняем команду – «Добавить линию тренда» и в открывшемся окне выполняем её настройку:

- Тип линии – Полином 3-его порядка;
- Показать уравнение на диаграмме;
- Поместить на диаграмму величину достоверности аппроксимации



**Создаем таблицу  
расчетных и  
экспериментальных  
данных**

Таблица экспериментальных и

№ опыт	Темпера тура, °C	Вязкость	
		эксп.	расч.
1	10	23,6879	22,7526
2	18	31,8164	32,4821
3	26	41,7881	41,6923
4	34	47,1804	47,2505
5	42	50,962	50,0242
6	50	51,1317	49,8809
7	58	45,0785	46,6879
8	66	40,2702	40,3126
9	74	30,5022	30,6226
10	82	17,7736	17,4852

**Готовим таблицу  
с начальными  
приближениями  
по всем  
коэффициентам**

Коэффициенты

A0	5,99991
A1	1,85311
A2	-0,01735
A3	-4,3E-05

**Подготавливаем формулы для «Поиска  
решения» и оценки достоверности  
результатов**

Минимум =СУММКВРАЗН(F4:F13;G4:G13)

Пирсон =КВПИРСОН(F4:F13;G4:G13)

**Заполняем  
расчетной  
формулой  
расчетные  
значения функции**

= \$J\$2+ \$J\$3\*E 13+ \$J\$4\*E 13^2+ \$J\$5\*E 13^3



# Вызываем «Поиск решения»

Параметры поиска решения

Оптимизировать целевую функцию:

До: ☐ Максимум ☒ Минимум ☐ Значения:

Изменяя ячейки переменных:

В соответствии с ограничениями:

Добавить

Изменить

Удалить

Сбросить

Загрузить/сохранить

☐ Сделать переменные без ограничений неотрицательными

Выберите метод решения:

Метод решения

Для гладких нелинейных задач используйте поиск решения нелинейных задач - поиск решения нелинейных задач симплекс-методом задач - эволюционный поиск решения.

Справка

Найти решение

лиз "что если" ▾ Промежуточн  
ми Структура

I	J
Коэффициенты	
A0	1,68483
A1	2,11394
A2	-0,02282
A3	-8E-06

Отчет	
Минимум	17,0709
Пирсон	0,98735

Убираем галочку

Параметры

Все методы Поиск решения нелинейных задач методом ОПГ Эв < >

Сходимость:


Производные

☐ Правые ☒ Центральные


Выбираем центральные производные


# «Поиск решения» в 2007

**Поиск решения**

Установить целевую ячейку:  

Равной: ☐ максимальному значению ☐ значению:  ☐ минимальному значению

Изменяя ячейки:  

Ограничения:  

**Параметры поиска решения**

Максимальное время:  секунд

Предельное число итераций:

Относительная погрешность:

Допустимое отклонение:  %

Сходимость:


☐ Линейная модель ☒ Автоматическое масштабирование

☐ Неотрицательные значения ☐ Показывать результаты итераций

Оценки: ☐ линейная ☒ квадратичная

Разности: ☐ прямые ☒ центральные

Метод поиска: ☒ Ньютона ☐ сопряженных градиентов

лиз "что если" ▾  Промежуточн  
и Структура

I	J
Коэффициенты	
A0	1,68483
A1	2,11394
A2	-0,02282
A3	-8E-06
Отчет	
Минимум	17,0709
Пирсон	0,98735



## Результаты поиска решения

Решение найдено. Все ограничения и условия оптимальности выполнены.

Тип отчета

Результаты  
Устойчивость  
Пределы

- ☒ Сохранить найденное решение  
☐ Восстановить исходные значения

ОК

Отмена

Сохранить сценарий...

Справка

50000  
атуры

## Результаты поиска решения

Решение найдено. Все ограничения и условия оптимальности выполнены.

Отчеты

Результаты  
Устойчивость  
Пределы

- ☒ Сохранить найденное решение  
☐ Восстановить исходные значения

☐ Вернуться в диалоговое окно параметров

☐ Отчеты со

ОК

Отмена

Сохранить сценарий...

Решение найдено. Все ограничения и условия оптимальности выполнены.

Если используется модуль ОПГ, то найдено по крайней мере локально оптимальное решение. Если используется модуль поиска решений линейных задач симплекс-методом, то найдено глобально оптимальное решение.

# Реализация решения для произвольного уравнений

Имеется задача исследовать процесс получения продукта в химическом реакторе:

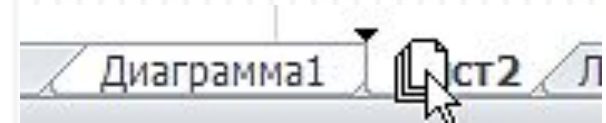
- Входным параметром является время и изменяется от 0 с шагом 5 мин;
- Исследуемая функция – Выход продукта, который изменяется от нуля в начальный момент времени до достижения равновесной концентрации при стремлении времени к бесконечности.

Для описания данной зависимости нельзя использовать стандартные линии тренда (они всегда стремятся в бесконечность). Мы используем дробно-иррациональную функцию вида:

$$Y = \frac{(A + B \cdot X)}{(C + D \cdot X)}$$

Копируем два листа, которые были созданы ранее (рабочий лист и диаграмма):

- Выделяем рабочий лист и удерживая клавишу Shift выделяем диаграмму
- Хватаем их за заголовки левой кнопкой мышки и с нажатой клавишей Ctrl тянем вправо, за последний выделенный лист. Отпускаем левую кнопку мышки и потом клавишу Ctrl. В книге появляются два новых листа с именами в которых добавлена (2);
- Другой вариант – вызываем контекстное меню (щелчок правой кнопкой мышки) и выбираем команду – «Переместить или скопировать...» ставим внизу окна галочку «Создать копию» и выбираем следующий лист после нашего. Этой командой можно переместить эти листы и в другую книгу.



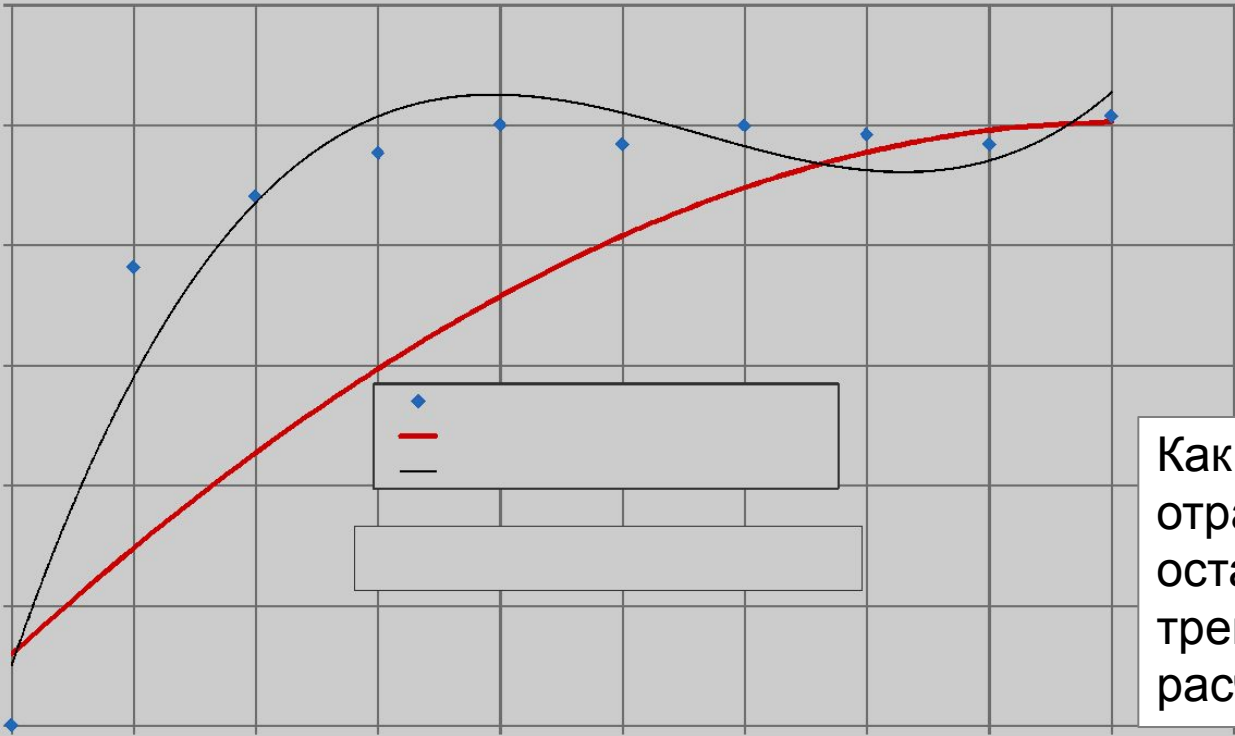
Получаем новый лист с набором необходимых формул и команд, вносим в необходимые изменения:

- В исходные данные: **Время; 0; 5; Выход.**
- Для заполнения экспериментальные данные используем команду «**Дробно-иррациональная функция**» с ленты «**Моделирование**»

# Получаем следующую таблицу и новый график

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	Однопараметрическая произвольная зависимость							
2	Исходные данные					Таблица экспериментальных и расчетных данных		
3	Параметр	Время		№ опыта	Время	Выход		
4	Нач.значение	0				эксп.	расч.	
5	Шаг	5		1	0			
6	Функция	Выход		2	5			
7	Заголовок графика			3	10			

Зависимость выхода продукта от времени процесса



Дробно-иррациональная функция

Команда генерирует полный план экспериментов по выбранной функции

Номер задания: 13

Набор выходных данных: Лист3 (2)!\$F\$5:\$F\$14

Набор входных параметров: 'Лист3 (2)!\$E\$5:\$E\$14

Задан план: содержащий опытов - 10 параллельных испытаний - 1

Генерируем

Не надо

Как видим, все изменения отразились и на графике, остается убрать линию тренда и исправить расчетную формулу

Таблица экспериментальных и  
расчетных данных

№ опыта	Время	Выход продукта	
		эксп.	расч.
1	0	0	-0,15114
2	5	23,5083	24,6121
3	10	34,2057	33,4146
4	15	38,8523	37,9263
5	20	41,2116	40,6698
6	25	40,4545	42,5142
7	30	45,4995	43,8393
8	35	44,1846	44,8373
9	40	46,5775	45,6161
10	45	45,025	46,2407

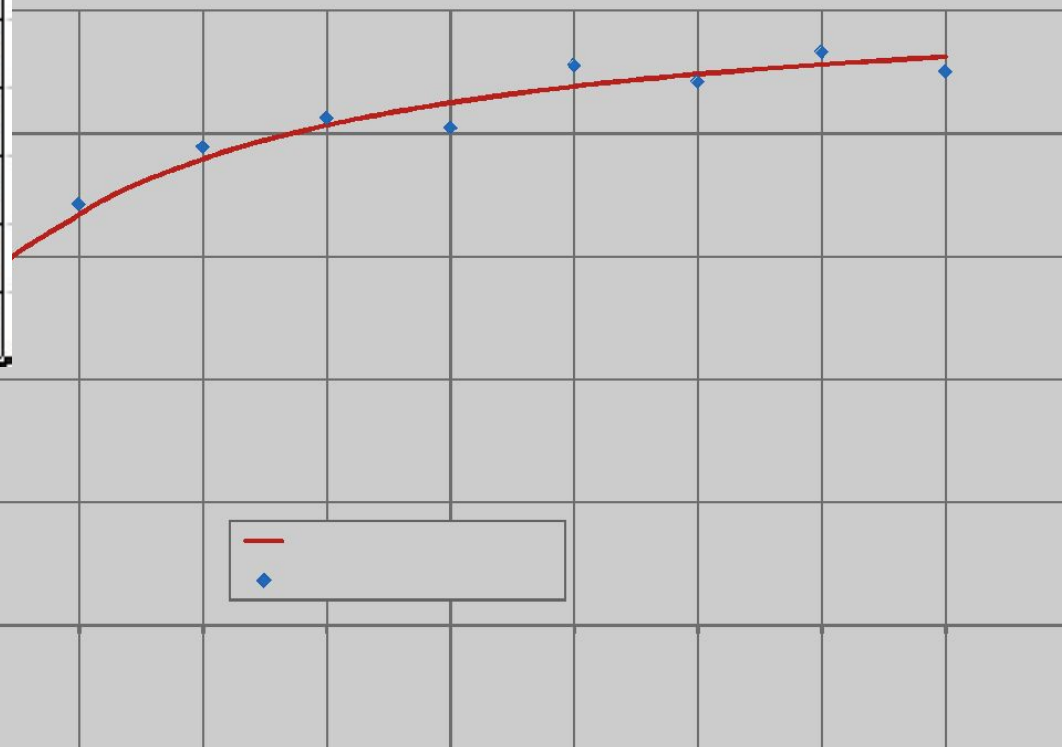
Исправляем формулу:

$$=(\$J\$2+\$J\$3*E4)/(\$J\$4+\$J\$5*E4)$$

Выполняем поиск решения и  
получаем результат, который не совсем  
отвечает нашим желанием:

- Начальная точка уходит от нуля;
- Последнее значение продолжает  
возрастать

График зависимости выхода продукта от времени

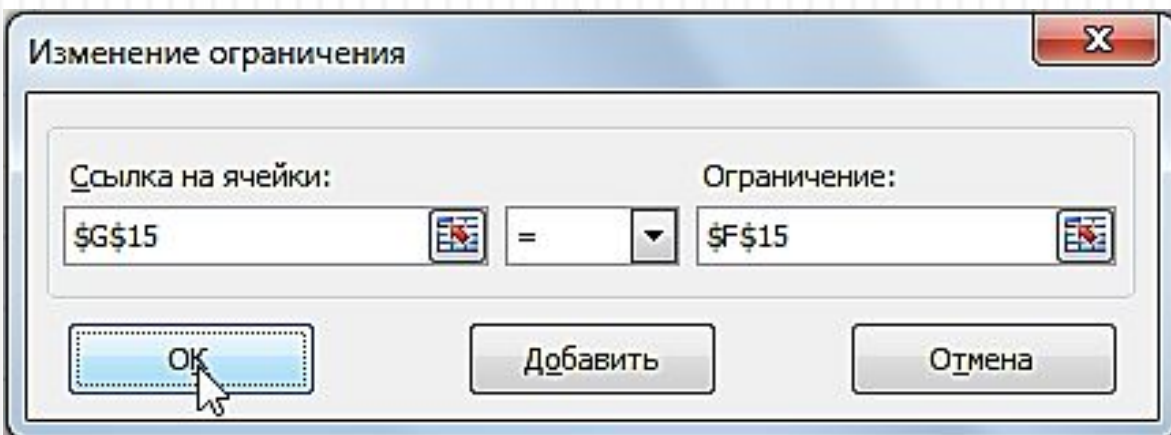




## Сделаем анализ формулы и используем ограничения:

- Задание первому коэффициенту нулевого значения (или удаление его из формулы) обеспечивает  $Y=0$  в начальной точке;
- Зная, что реакция должна достигать равновесной концентрации 45 зададим её в ограничении;
- Копируем последнюю строку таблицы. На номер опыта пишем «Ограничения» и ставим для параметра значения «200», которое считаем хорошим приближением к равновесию;
- В «Поиске решения» нажимаем кнопку «Добавить» для ввода нового ограничений и задаем его в появившемся окне:

	10	45	45,025	45,1019
Ограничение	200	45	45	



- Завершаем ввод кнопкой «Ok» и

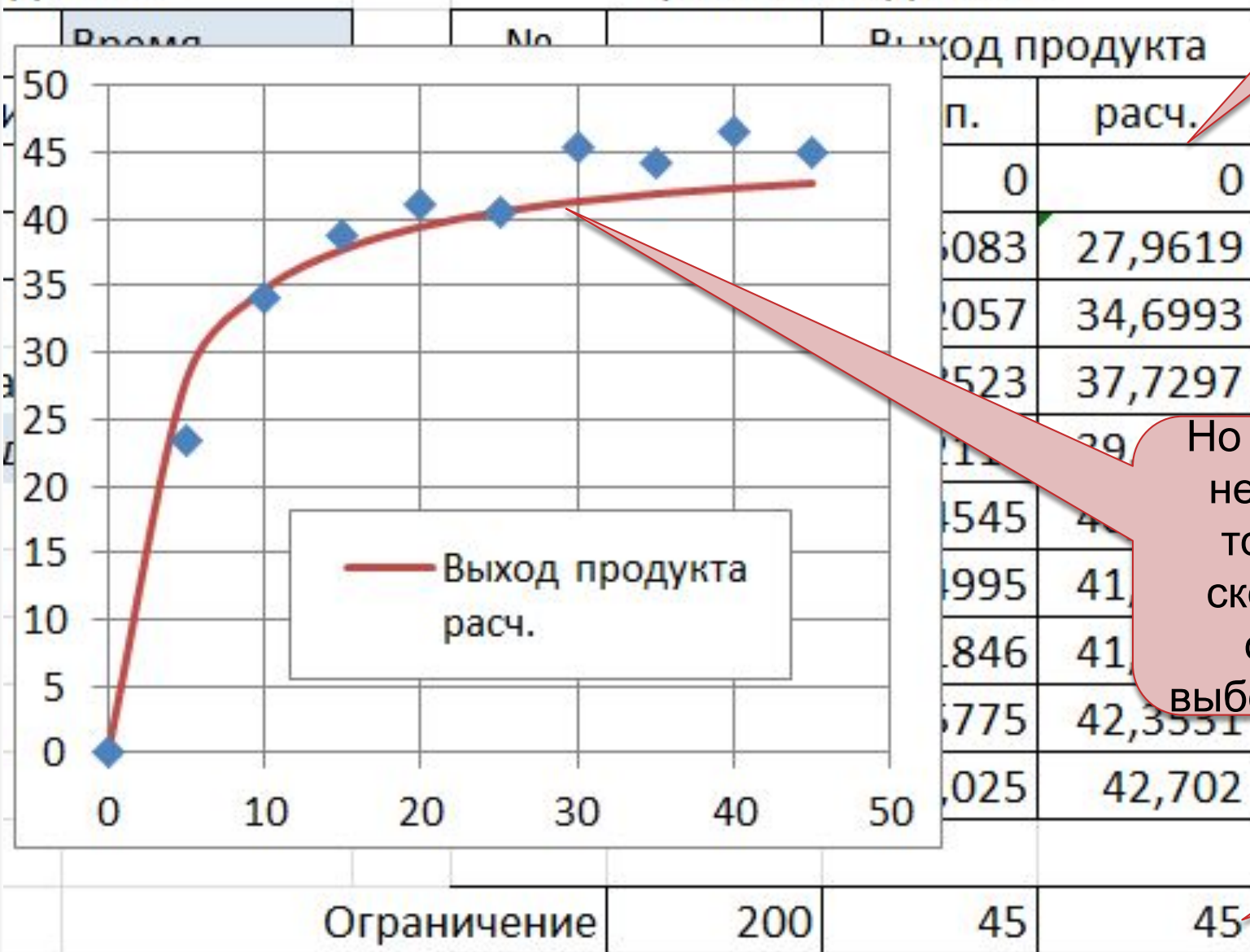
В соответствии с ограничениями:

$\$G\$15 = \$F\$15$

- Запускаем расчет и получаем новый результат поиска.

Таблица экспериментальных и  
расчетных данных

данные



Равно  
нулю

Но кривая идет  
не совсем по  
точкам, это,  
скорее всего,  
связано с  
выбором модели

Равняется  
45

Внесем изменения в модель, добавив степени для параметра:

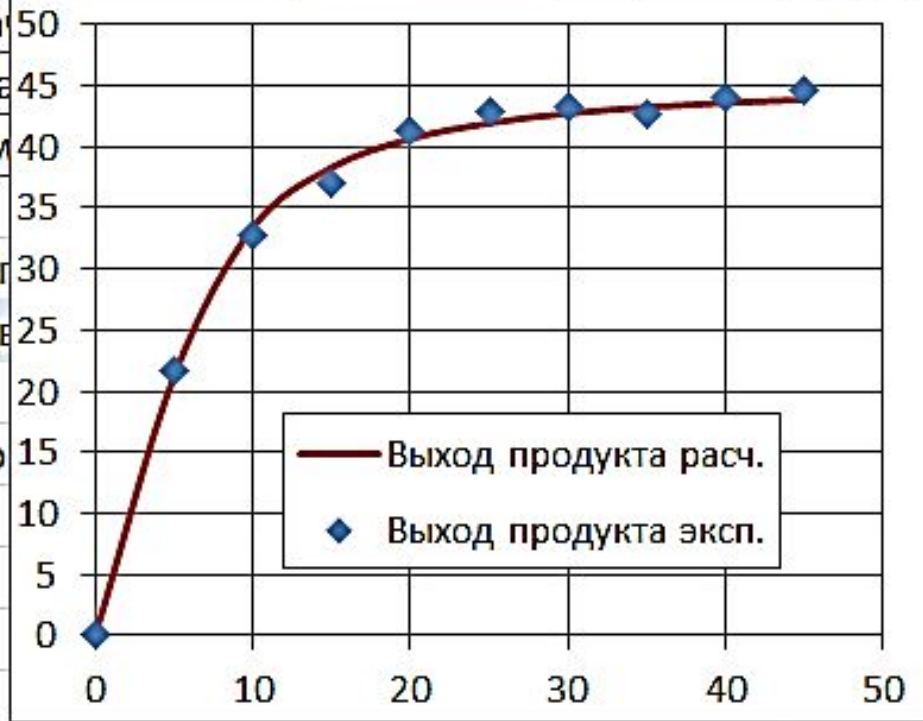
$$Y = \frac{(A + B \cdot X^E)}{(C + D \cdot X^E)}$$

- Для этого расширим таблицу коэффициентов, выделим две свободные ячейки после последнего коэффициента и выполним команду «Вставка» на ленте «Главная», что позволит программе правильно расширить таблицу с сохранением всех введенных на ней формул и ссылок;
- Исправим расчетную формулу:  
$$= (\$J\$2 + \$J\$3 * E4^{\$J\$6}) / (\$J\$4 + \$J\$5 * E4^{\$J\$6})$$
- Вызовем «Поиск решения» и изменим в нем число параметров в поле «Изменяя ячейки переменных»;
- Выполним расчет и получим следующий результат

a3	0,105176999
Минимум	180,9551563
Пирсон	0,937047523



Исходные данные		Таблица экспериментальных и расчетных данных				Коэффициенты	
Имя параметра	Время	№	Время	Выход продукта		а0	0
				эксп.	расч.	а1	1,75548
На	50			0	0	а2	0,6554
Ша	45			5	21,6599	а3	0,03892
Им	40			10	32,8376	а4	1,6817
	35			15	37,1055		
Заг	30			20	41,414	Минимум	4,69268
Зае	25			25	42,8093	Пирсон	0,99756
	20			30	43,2724		
Но	15			35	42,6411		
	10			40	44,0454		
	5			45	44,6454		
	0						
Ограничение			200	45	45		



Получена модель процесса с высокой степенью надежности по совпадению экспериментальных и расчётных данных

# Реализация решения для многопараметрических уравнений

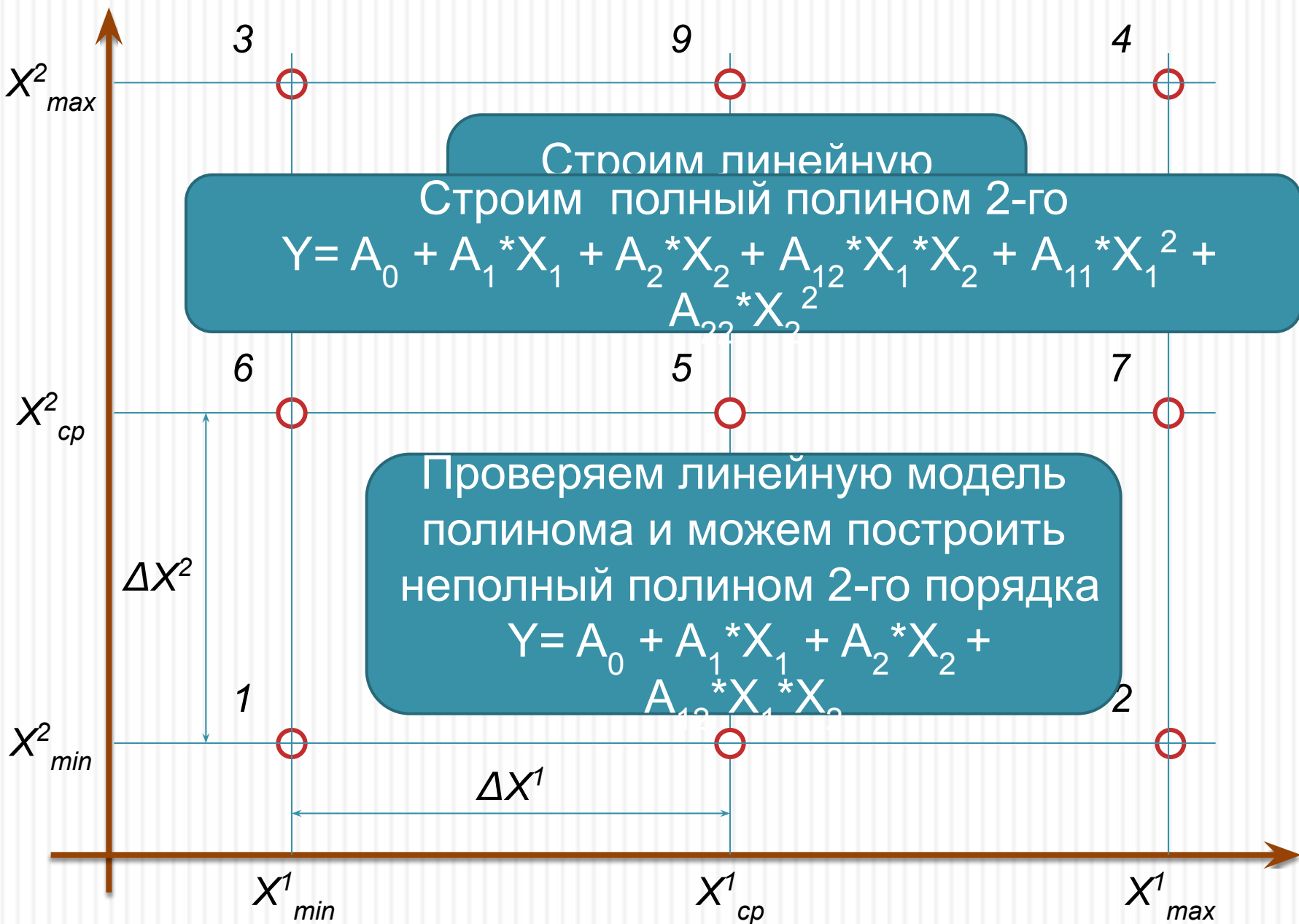
Однако, чаще приходится решать многопараметрические задачи  $Y=F(X_1, X_2)$  . Первый вопрос – как вести эксперимент?

Существует два подхода для выбора области факторного пространства:

- Задаемся центральной точкой в факторном пространстве и шагами по каждому из факторов;
- Задаемся допустимыми интервалами для каждого параметра в исследуемом факторном пространстве и строим область исследования.

Оба варианта приводят к следующей методике – основой становятся средние значения параметров и шаги их изменения. Для второго случая среднее и шаг вычисляются из следующих формул:

$$\bar{X} = (X_{\max} + X_{\min})/2; \quad \Delta X = (X_{\max} - X_{\min})/2$$



Копируем лист, который был создан для первой задачи:

- Перемещаем его за заголовок левой кнопкой мышки и с нажатой клавишей CTRL или через контекстное меню (щелчок правой кнопкой мышки);
- Рассмотрим структуру листа и необходимые изменения на нем:

Надо вставить нужное число столбцов после столбца «В» в зависимости от числа параметров

	A	B	C	D	E	F	G
1	Исходные данные			Таблица экспериментальных и расчетных данных			
2	Параметр	Температура		№	Темпера	Вязкость	
3	Начальное значение	100		опыта	тура	эксп.	расч.
4	Шаг изменения	15		1	100		
5	Функция	Вязкость		2	115		
6				3	120		

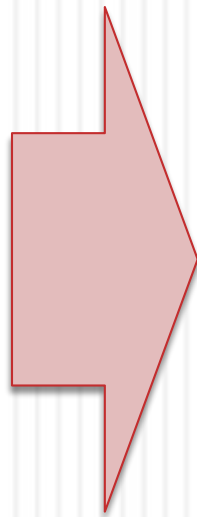
А потом добавить это же число столбцов после столбца с данными по температуре

Данные операции надо выполнять только командами с объектами столбцы, перетаскивание ячеек может привести к потере формул и нарушит связи с другими ячейками. Все действия выполняются по команде «Главная» - «Вставить»

## Разберем порядок выполнения команд:

- Выделяем столбец «С», нажимая левой кнопкой мышки на его заголовок;
- Выполняем команду «Главная» – «Вставка»;
- Получаем копию столбца «В» и с настроенными шириной и заливкой колонки:

	В	С	Д
			Та
1	анные		
2	Температура, °С		№
3	100		опыт
4	15		1
5	Вязкость		2
6			3
7			4
8			5
9			6
10			7
11			8
12			9
13			10



	В	С	Д	Е
				Та
1	анные			
2	Температура, °С			№
3	100			опыт
4	15			1
5	Вязкость			2
6				3
7				4
8				5
9				6
10				7
11				8
12				9
13				10
14				



- Вносим изменение в названии – «Среднее значение»;
- Заполняем данные по следующему параметру – «Давление», 4, 2 и изменяем шаг с 15 на 50 для температуры;
- Форматируем табличку и получаем:

	A	B	C
1	Исходные данные		
2	Параметр	Температура, °C	Давление, атм
3	Среднее значение	100	4
4	Шаг изменения	50	2
5	Функция	Вязкость	

- Расширяем «Таблицу экспериментальных и расчетных данных» по той же процедуре:

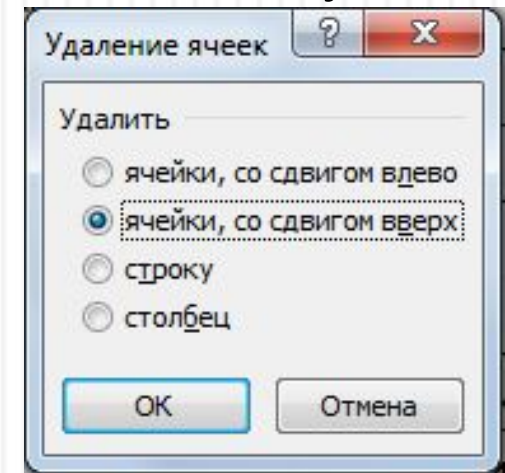
	E	F	G	
1	Таблица экспериментальных и расчетных данных			
2	№	Темпера	Вязкость	
3	опыта	тура, °C	эксп.	
4	1	100	1	1,1
5	2	150	7	10



	E	F	G	H
1	Таблица экспериментальных и расчетных данных			
2	№	Темпера		Вязк
3	опыта	тура, °C		эксп.
4	1	100		1
5	2	150		7

- Начинаем заполнять данные таблицы экспериментальных и расчетных данных, чтобы заполнить имя второго параметра надо просто растянуть ячейку с именем «Температура» вправо ;
- В плане должно быть 9 опытов, поэтому выделяем 13 строку таблицы и удаляем её командой «Главная» – «Удалить», если удалить строки нельзя, так как они содержат другую необходимую информацию, то удаляем ячейки. Для этого выделяем нужные ячейки, выбираем команду «Главная» – «Удалить» ▼ – «Удалить ячейки» и окне выбора направления удаления выбираем «Удалить ячейки со сдвигом вверх»;
- Для заполнения значений параметров используем следующие формулы:

	E	F	G
2	№	Темпера	Давлени
3	опыта	тура, °C	е, атм

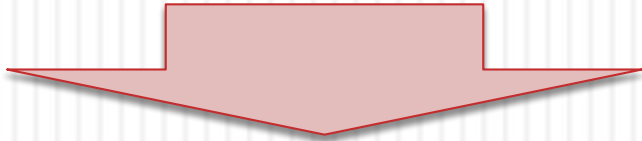


$$X_{\min} = X_{cp} - \Delta X(1); \quad X_{cp} = X_{cp}(2); \quad X_{\max} = X_{cp} + \Delta X(3)$$

- Для температуры они повторяются три раза подряд (1, 2, 3, 1, 2, 3, 1, 2, 3), а для давления каждая их формул повторяется три раза (1, 1, 1, 2, 2, 2, 3, 3, 3).



- Заполняем формулы в ячейки таблицы:
- Получаем готовый лист для двухпараметрической зависимости;
- Заполняем экспериментальные данные и получаем готовую таблицу для расчета;



	F	G
4	=B\$3-B\$4	=C\$3-C\$4
5	=B\$3	=C\$3-C\$4
6	=B\$3+B\$4	=C\$3-C\$4
7	=B\$3-B\$4	=C\$3
8	=B\$3	=C\$3
9	=B\$3+B\$4	=C\$3
10	=B\$3-B\$4	=C\$3+C\$4
11	=B\$3	=C\$3+C\$4

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	Исходные данные				Таблица экспериментальных и расчетных данных			
2	Параметр	Температура, °C	Давление, атм		№ опыта	Температура, °C	Давление, атм	Вязкость, эксп.
3	Среднее значение	100	4					
4	Шаг изменения	50	2		1	50	2	1
5	Функция	Вязкость			2	100	2	7
6					3	150	2	2
7					4	50	4	6

- При необходимости число параметров можно увеличить, добавив нужное число столбцов, соблюдая тот же порядок, что и был (сначала добавляем столбцы в таблицу исходных данных, а потом уже в таблицу экспериментальных и расчетных данных);
- Эксперимент по команде «**2-х параметрический полином**»

- Готовим табличку с коэффициентами для уравнения:

$$Y = A_0 + A_1 * X_1 + A_2 * X_2 + A_{12} * X_1 * X_2 + A_{11} * X_1^2 + A_{22} * X_2^2$$

- Расширяем её до 6 коэффициентов, выделив 4 ячейки, командой «Главная» – «Вставить ячейки» – «со сдвигом вниз». Исправляем наименования коэффициентов и заполняем их значения «1»:

	К	L
1	Коэффициенты	
2	A0	-76,3889447
3	A1	1,290114843
4	A2	-0,00585945
5	A3	7,53979E-06
6		
7	Отчет	
8	Минимум	2845,954633
9	Пирсон	0,027768106



	К	L
1	Коэффициенты	
2	A0	-76,3889447
3	A1	1,290114843
4	A2	-0,00585945
5	A3	7,53979E-06
6		
7		
8		
9	Отчет	
10	Минимум	2845,954633
11	Пирсон	0,027768106



	К	L
1	Коэффициенты	
2	A0	1
3	A1	1
4	A2	1
5	A11	1
6	A12	1
7	A22	1
8		
9	Отчет	
10	Минимум	3,8E+13
11	Пирсон	0,0581

- Теперь исправляем расчетное уравнение добавляя новые коэффициенты и новый параметр.

Первоначально наше выражение имело вид:

$$= \$L\$2 + \$L\$3 * F4 + \$L\$4 * F4^2 + \$L\$5 * F4^3$$

Исправление начинаем с параметра при коэффициенте  $A_2$  ( $\$L\$4$ ), который привязан к второму параметру (давление), заменяем  $F4^2$  (температура в квадрате) на  $G4$  (давление)

Затем заменяем 3-ю степень у температуры на 2-ую, как в новом уравнении

Потом дополняем уравнение оставшимися коэффициентам и параметрами

$$= \$L\$2 + \$L\$3 * F4 + \$L\$4 * G4 + \$L\$5 * F4^2 + \$L\$6 * F4 * G4 + \$L\$7 * G4^2$$

Копируем полученную формулу в остальные опыты и вызываем «Поиск решения» для расчета. Основные настройки в «Поиске решения» остались, надо только расширить список коэффициентов

Расчеты по «Поиску решения» надо выполнить не менее 2-х раз до тех пор, пока значения в ячейках «Минимума» и «Пирсона» не будут изменяться. В результате расчетов получаем следующую таблицу с результатами:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
	Исходные данные				Таблица экспериментальных и расчетных данных						Коэффициенты	
1	Исходные данные				данных						Коэффициенты	
2	Параметр	Температура, °C	Давление, атм		№ опыта	Температура, °C	Давление, атм	Вязкость			A0	-27,111
3	Среднее значение	100	4					эксп.	расч.		A1	0,41333
4	Шаг изменения	50	2		1	50	2	1	1,1389		A2	8,5
5	Функция	Вязкость			2	100	2	7	6,5556		A11	-0,0019
6					3	150	2	2	2,3056		A12	-0,0075
7					4	50	4	6	5,8889		A22	-0,9583
8					5	100	4	10	10,556			
9					6	150	4	6	5,5556		Отчет	
10					7	50	6	3	2,9722		Минимум	0,86111
11					8	100	6	7	6,8889		Пирсон	0,98918
12					9	150	6	1	1,1389			

Теперь построим визуальное представление результатов в виде диаграммы «Поверхность» для которой надо построить матрицу значений расчетной функции (чем больше будет узлов в матрице, тем выше качество графика). Для построения матрицы используем команду «Данные – «Анализ “что если”» – «Таблица данных».

Разберем порядок построения:



Копируем ячейку с расчетной функцией и вставляем её ниже, переходим в режим редактирования, чтобы отметить ячейки с данными по температуре и давлению заголовками сверху:

	B	C	D	E	F	G	H	I
11				8	100	6	7	6,8889
12				9	150	6	1	1,1389
13								
14				$2 \cdot 14^2$				

Можно вставить значения температуры и давления в эти ячейки.



	B	C	D	E
13	T	P		
14	150	6		1,139

Теперь вправо от ячейки заполняем прогрессии в 10 шагов по температуре от 50 до 150 °С, а вниз по давлению от 2 до 6 атм. Сначала вводим 50 и потом отсчитываем 10 ячеек и вводим 150, выделяем этот диапазон:

	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
14	50										150

вызываем команду «Главная» – «Заполнить» – «Прогрессия»

	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
14	50	60	70	80	90	100	110	120	130	140	150

Повторяем эти операции для давления, только по столбцу вниз. Сначала вводим 2 и потом отсчитываем 10 ячеек вниз и вводим 6, выделяем этот диапазон и вызываем команду «Главная» – «Заполнить» – «Прогрессия».

Выделяем полученную матрицу и вызываем команду «Данные – «Анализ “что если”» – «Таблица данных», в окне команды указываем подставлять данные по столбца (температура) в ячейку с «Т», а данные по строкам в «Р»:

	Е		Е
14	1,139	14	1,139
15	2	15	2
16		16	2,4
17		17	2,8
18		18	3,2
19		19	3,6
20		20	4
21		21	4,4
22		22	4,8
23		23	5,2
24		24	5,6
25	6	25	6

	В	С	Д	Е	Ф	Г	Н	І	Ј	К	Л	М	Н	О	Р
13	Т	Р													
14	150	6		1,139	50	60	70	80	90	100	110	120	130	140	150
15				2											
16				2,4											
17				2,8											
18				3,2											
19				3,6											
20				4											
21				4,4											
22				4,8											
23				5,2											
24				5,6											
25				6											

Таблица данных

Подставлять значения по столбцам в:

Подставлять значения по строкам в:

ОК Отмена



Выделяем внутреннюю часть матрицы данных:

	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
14	1,139	50	60	70	80	90	100	110	120	130	140	150
15	2	1,13889	2,9956	4,4656	5,5489	6,2456	6,555556	6,47889	6,01556	5,16556	3,92889	2,30556
16	2,4	2,70222	4,5289	5,9689	7,0222	7,6889	7,968889	7,86222	7,36889	6,48889	5,22222	3,56889
17	2,8	3,95889	5,7556	7,1656	8,1889	8,8256	9,075556	8,93889	8,41556	7,50556	6,20889	4,52556
18	3,2	4,90889	6,6756	8,0556	9,0489	9,6556	9,875556	9,70889	9,15556	8,21556	6,88889	5,17556
19	3,6	5,55222	7,2889	8,6389	9,6022	10,179	10,36889	10,1722	9,58889	8,61889	7,26222	5,51889
20	4	5,88889	7,5956	8,9156	9,8489	10,396	10,555556	10,3289	9,71556	8,71556	7,32889	5,55556
21	4,4	5,91889	7,5956	8,8856	9,7889	10,306	10,43556	10,1789	9,53556	8,50556	7,08889	5,28556
22	4,8	5,64222	7,2889	8,5189	9,4222	9,8889	10,08889	9,78889	9,01889	8,08889	6,51889	4,78889
23	5,2	5,05889	6,6756	7,8856	8,7889	9,306	9,555556	9,3289	8,61556	7,61556	6,22889	4,78889
24	5,6	4,16889	5,7556	6,8856	7,7889	8,306	8,53556	8,3289	7,61556	6,61556	5,22889	3,78889
25	6	2,97222	4,5289	5,6389	6,5489	7,066	7,28889	7,08889	6,37556	5,37556	3,98889	2,58889

Строим диаграмму «Вставка» – «Другие» – «Поверхность» и получаем:

