



Министерство образования Республики Беларусь

Учреждение образования  
«Гомельский государственный технический  
университет имени П. О. Сухого»

Кафедра «Металлургия и технологии обработки материалов»

**И. Б. Одарченко, В. А. Жаранов, И. Н. Прусенко**  
**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**  
**МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ И ЛИТЕЙНЫХ**  
**ПРОЦЕССОВ**

**УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ**

*Рекомендовано учебно-методическим объединением  
по образованию в области металлургического оборудования  
и технологий в качестве учебного пособия для студентов  
учреждений высшего образования,  
обучающихся по специальностям 1-36 01 02  
«Машины и технологии литейного производства»  
и 1-42 01 01 «Металлургическое производство  
и материалобработка (по направлениям)»*

**Электронный аналог печатного издания**

**Гомель 2023**

УДК 621.778(075.8)  
ББК 34.622я73  
О-40

Рецензенты: проф. кафедры оперативно-тактической деятельности и техники  
Университета гражданской защиты МЧС Республики Беларусь  
д-р техн. наук, проф. *В. А. Ковтун*;  
гл. инженер ОЛП ОАО «Гомельский завод литья  
и нормалей» *А. С. Головач*

**Одарченко, И. Б.**

О-40 Математическое моделирование металлургических и литейных процессов : учеб. пособие / И. Б. Одарченко, В. А. Жаранов, И. Н. Прусенко. – Гомель : ГГТУ им. П. О. Сухого, 2023. – 272 с. – Систем. требования: PC не ниже Intel Celeron 300 МГц ; 32 Mb RAM ; свободное место на HDD 16 Mb ; Windows 98 и выше ; Adobe Acrobat Reader. – Режим доступа: <https://elib.gstu.by>. – Загл. с титул. экрана.

ISBN 978-985-535-516-9.

Рассмотрены основные понятия, определения, положения и подходы математического моделирования, представлена классификация математических моделей. Описаны основные этапы, технологии построения математических моделей, приведены примеры ее применения. Особое внимание уделено современным технологиям математического моделирования в металлургии, в том числе основанным на методах искусственного интеллекта. Дан анализ перспектив использования различных методов численного моделирования применительно к отраслевым задачам актуального металлургического производства.

Для специалистов по металлургическому производству и материалобработке.

УДК 621.778(075.8)  
ББК 34.622я73

ISBN 978-985-535-516-9

© Одарченко И. Б., Жаранов В. А.,  
Прусенко И. Н., 2023  
© Учреждение образования «Гомельский  
государственный технический университет  
имени П. О. Сухого», 2023

# Оглавление

ВВЕДЕНИЕ .....	5
Глава 1. РОЛЬ МОДЕЛИРОВАНИЯ В НАУЧНОМ ИССЛЕДОВАНИИ СЛОЖНЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, ОБЪЕКТОВ И СИСТЕМ. ТИПЫ МОДЕЛЕЙ, ИХ ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА И ФУНКЦИИ .....	8
1.1. Объекты математического моделирования в металлургии и литейном производстве.....	8
1.2. Что такое модель .....	24
1.3. Основные принципы построения математических моделей....	41
1.4. Способы получения и характеристика основных критериев подобия .....	49
1.5. Средства математического моделирования технических объектов .....	70
Глава 2. ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ И ОСНОВНЫЕ ЭТАПЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ. ВЫБОР МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ.....	74
2.1. Требования к моделям.....	77
2.2. Структурный подход для построения математических моделей .....	85
2.3. Использование структурного подхода для составления моделей на молекулярном уровне.....	87
2.4. Моделирование равновесия в системах химических реакций ...	94
2.5. Моделирование кинетики химических реакций.....	97
Глава 3. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ МЕТОДАМИ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА .....	101
3.1 Основные понятия корреляционного, регрессионного и дисперсионного анализа .....	106
3.2. Оценка достоверности результатов анализа .....	112
3.3. Математическое планирование экспериментов в технологических процессах .....	122
Глава 4. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТА. ЭМПИРИЧЕСКИЕ ЗАВИСИМОСТИ .....	131
4.1. Характеристика видов связей между рядами наблюдений....	131
4.2. Определение коэффициентов уравнения регрессии.....	135
4.3. Определение тесноты связи между случайными величинами .....	141
4.4. Регрессионный анализ.....	150

4.5. Линейная множественная регрессия .....	155
4.6. Нелинейная регрессия .....	159
Глава 5. МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ. ПОИСК ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ .....	161
5.1. Структура и постановка задач оптимизации .....	162
5.2. Основные типы вычислительных процедур оптимизации ....	164
5.3. Методы одномерной оптимизации .....	169
5.4. Методы поиска экстремума функций многих переменных ...	172
5.5. Методы условной оптимизации.....	186
Глава 6. ОСНОВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ.....	197
6.1. Метод конечных элементов .....	197
6.2. Метод конечных разностей.....	219
6.3. Метод граничных элементов .....	222
6.4. Применение численных методов для моделирования технологических процессов подготовки производства отливок.....	226
Глава 7. ОСОБЕННОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ПРОИЗВОДСТВЕ.....	235
7.1. Интеллектуальные технологии в металлургии и их развитие.....	235
7.2. Применение нечеткой логики .....	238
7.3. Применение нейронных сетей .....	239
7.4. Компьютерное моделирование сложных нагруженных узлов печей.....	246
7.5. Расчеты процесса нагрева шихты в слое в нестационарных условиях .....	251
7.6. Моделирование режимов работы и оптимизация конструкций литниково-питающих систем для условий получения отливок из чугуна в разовых песчано- глинистых формах .....	256
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	263
ЛИТЕРАТУРА.....	265

## ВВЕДЕНИЕ

Развитие информационных и компьютерных технологий в последние десятилетия позволяет инженерам выполнять практически любую сложность необходимых расчетов. Сегодня трудно представить проектную или инжиниринговую компанию, которая в своей практике в той или иной степени не использовала бы математические модели. Использование математического моделирования в научных исследованиях становится все более широким и эффективным.

За последние десятилетия математическое моделирование возникло как отдельная междисциплинарная область знаний со свойственными ему объектами, подходами и методами исследования [1, 6, 8].

Внедрение новых информационных технологий в разработку автоматизированных систем способствует дальнейшему развитию математического моделирования [52, 56, 62]. Разнообразие используемых моделей растет, а математические методы решения вычислительных задач приобретают значение сами по себе. В теории математического моделирования появились новые перспективные направления, ориентированные на анализ, синтез и оптимизацию сложных систем. Математическое моделирование стало инструментом, позволяющим решать задачи построения сложных систем с минимальными капитальными затратами или без них. Виртуальное пространство для проектирования функциональных характеристик позволяет исследовать взаимодействие систем с внешней средой, не только избегая проектных ошибок, но и аварийных ситуаций на реальном производстве.

Литейное производство и металлургия относятся к областям промышленности, в которых объективно наблюдается высокая сложность протекающих процессов, их энергоемкость и значительная ресурсоемкость [6, 10, 12]. Это создает много предпосылок для использования математического моделирования в целях оптимизации производства, реализации задач снижения удельных затрат и повышения надежности установок.

Решение оптимизационных задач составляет важную, если не основную часть работы инженера. Расшифровка значения этого термина на практике обычно не вызывает затруднений. Так, если решается задача снижения себестоимости выпускаемой продукции, то оптимуму в этом случае соответствует минимальная стоимость, при решении задачи повышения качества оптимум соответствует абсолютному качеству [15, 18].

При этом оптимум очень часто связывают с неким средним промежуточным уровнем критерия. Например, твердость серого чугуна должна иметь определенный промежуточный уровень, поскольку низкой твердости, а следовательно, и прочности недостаточно конструктору, но высокая твердость приводит к сильному снижению производительности металлообрабатывающих станков и зачастую кратному росту затрат на механическую обработку [2, 52].

Усовершенствование технологических процессов металлургического производства и повышение уровня автоматизации движутся к разработке оптимальных технологических схем, которые позволят уменьшить количество операций, создавая возможность автоматического контроля и управления технологическими параметрами.

Комплексное использование сырья предполагает извлечение из него всех ценных компонентов, доступных на актуальном уровне развития техники.

Чем жестче требования к трудоемкости использования сырья, чем сложнее технологическая схема и чем больше число операций в этой схеме, тем больше полупродуктов и оборот в таких схемах. Управлять такими схемами и проектировать такие технологии становится все труднее [6, 11].

Вторая особенность современных технологических процессов – увеличение единичной мощности технологических агрегатов. Например, в металлургии меди на медеплавильных заводах, как правило, есть одна, реже две главные установки, через которые протекает весь поток поступающего сырья. Актуально и повышение требований к экологической безопасности процессов [20, 7].

В результате становится невозможным эффективно управлять технологическими процессами только на основе опыта и интуиции персонала, а ошибки в управлении обходятся дорого.

Выходом из сложившейся ситуации является внедрение информационных систем управления технологическими процессами, основной целью которых является обеспечение обработки информации о технологическом процессе, и по результатам этой обработки поддержка персонала, управляющего технологическим процессом [1, 35, 66].

Информационные системы работают наиболее эффективно, когда содержат модельную систему поддержки принятия решений, основанную на математической модели технологического процесса, позволяющую на основе расчетов прогнозировать течение и исход технологического процесса при изменении условий его осуществления. Из-за этого

инженер-металлург, руководящий технологическим процессом, должен владеть методами создания и использования математических моделей для совершенствования и оптимизации технологии.

Основная цель данной книги – не только познакомить студентов-металлургов технического вуза с основами предмета, но и пробудить у них интерес к методам экспериментирования и инженерного анализа на компьютере в рамках курса моделирования. В результате в перспективе может быть обеспечено повышение уровня качества и конкурентоспособности продукции отечественной металлургии как эффекта от прихода в реальный сектор экономики генерации выпускников с принципиально отличными от традиционных компетенциями.

# Глава 1. РОЛЬ МОДЕЛИРОВАНИЯ В НАУЧНОМ ИССЛЕДОВАНИИ СЛОЖНЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, ОБЪЕКТОВ И СИСТЕМ. ТИПЫ МОДЕЛЕЙ, ИХ ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА И ФУНКЦИИ

## 1.1. Объекты математического моделирования в металлургии и литейном производстве

На рис. 1.1 показана схема технологического объекта (ТО), где  $X$  – вектор контролируемых управляющих входов (расходы сырых материалов, энергии, топлива и т. д.);  $Z$  – вектор контролируемых возмущений (качественные показатели сырья, параметры состояния оборудования, простои и т. д.);  $E$  – вектор неконтролируемых возмущений (параметры внешней по отношению к АСУ ТП среды);  $Y$  – вектор выходов объекта (показатели состояния технологического процесса (температура, давление, состав вещества), качественные и количественные показатели промежуточных (литейная форма) или конечных (отливка) продуктов, технико-экономические показатели производства) [1, 6].

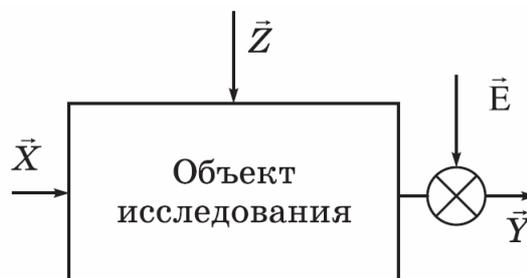


Рис. 1.1. Технологический объект

Математическая модель ТО представляет собой зависимость  $Y = f(X; Z; E; t)$  (1.1) при известном виде функции  $f$ , которая в общем случае может зависеть от времени  $t$  (в динамических моделях) и существующих ограничениях на переменные  $\alpha \leq u_i \leq \beta$ ;  $\delta \leq y_i \leq \gamma$ .

Стохастическая математическая модель строится в условиях неполных знаний о ТО или его этапах, когда связи между входами и выходами ТО носят вероятностный характер.

Детерминированная математическая модель представляет собой

совокупность алгебраических или дифференциальных уравнений, характеризующих причинно-следственные связи между входами и выходами ТО, исходя из известных законов сохранения массы, энергии, химических превращений и т. п.

Комбинированные математические модели сочетают в себе черты стохастического и детерминированного моделирования, например, процесс кристаллизации расплава описывается детерминированной моделью, а коэффициенты, входящие в эту модель, определяются стохастическими методами.

Математическая модель управления технологическим процессом литейного производства содержит целевую функцию. Целевая функция может быть основана на различных технических и экономических критериях, например, минимальное время наладки, ограничение температурных градиентов в слитке, вызывающих его растрескивание при кристаллизации, минимальные затраты на получение расплава и т. д. [28, 38].

Термин «модель» в отличие от закона подразумевает, что соотношение, используемое в математических выражениях, может быть не совсем точным, и поэтому прогнозы, полученные на его основе, могут быть лишь приближительными.

Задача оптимального управления производством литых деталей в целом подразделяется на ряд подзадач: шихтовка; плавка; смесеприготовление; формовка; разливка; охрана окружающей среды.

**Шихтовка.** При формировании и загрузке шихты возникают две проблемы:

1) расчет оптимального состава исходного сырья, обеспечивающий необходимые пределы содержания в нем отдельных химических элементов с учетом их отходов и минимальных затрат при имеющихся ресурсах;

2) автоматическое управление дозирующими механизмами компонентов шихты и подачей их в плавильные печи.

Принцип действия дозатора основан на изменении грузоподъемности электромагнита в зависимости от намагничивающего тока. Дозатор (рис. 1.2) состоит из подъемного электромагнита (ПЭ), датчика массы (ДМ), измерительного прибора (ИП), цифрового устройства (ЦУ) и коммутатора (К). Электромагнит питается от генератора постоянного тока (Г), управляемого оператором с помощью регулятора тока (РТ).

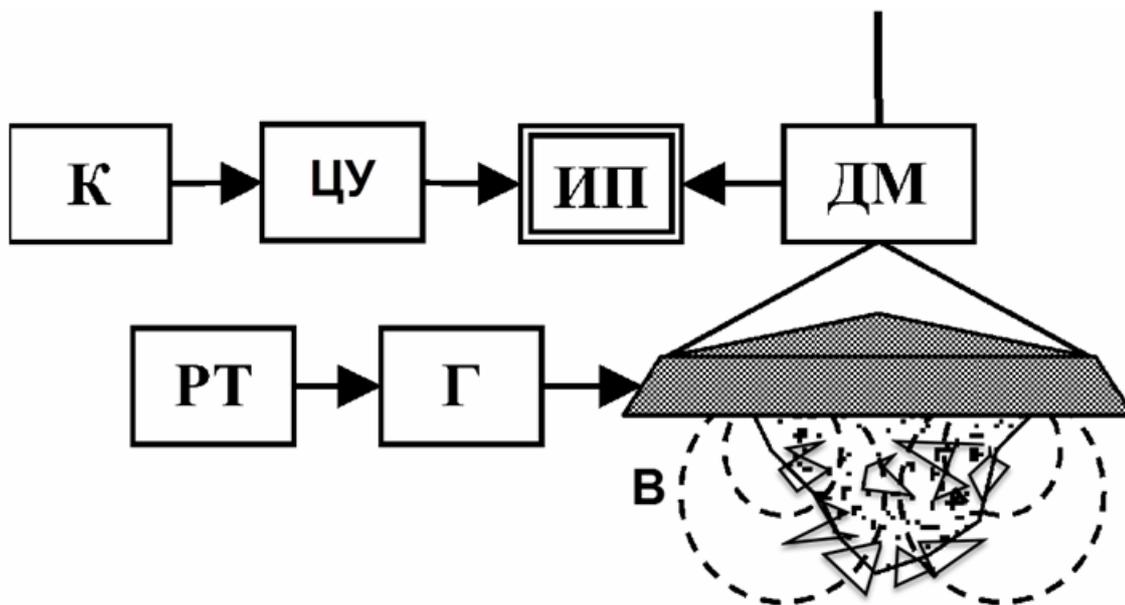


Рис. 1.2. Структурная схема электромагнитного кранового дозатора шихты

**Плавка.** Плавление металла осуществляется в печах различного типа: вагранках, дуговых (рис. 1.3), индукционных печах.

Вагранки представляют собой системы непрерывного действия и используются для плавки чугуна. Дуговые и индукционные печи представляют собой системы периодического действия. Использование математических моделей электрических, тепловых и технологических процессов позволяет прогнозировать ход плавки и разрабатывать оптимальные управляющие воздействия.

**Смесеприготовление.** Материал литейной оснастки – формы, стержни и другие – является многокомпонентным. Качество продукции зависит от точности рецептуры смесей, получаемых в дозаторах (рис. 1.4). Целевая функция АСУ ТП производства смеси представлена ведением рецептуры смесей и способов их производства, обеспечивающих минимальные затраты на изготовление определенного вида и количества отливок по известной технологии литья. Математическая модель может описывать характер влияния состава смеси на качество. Математическая модель может описать, как состав смеси влияет на качество. Стабилизация и поддержание оптимальной рецептуры смеси снижает брак литья на 2–3 %, а при ее отклонении от оптимального значения линейно зависит от квадрата этого отклонения [10].

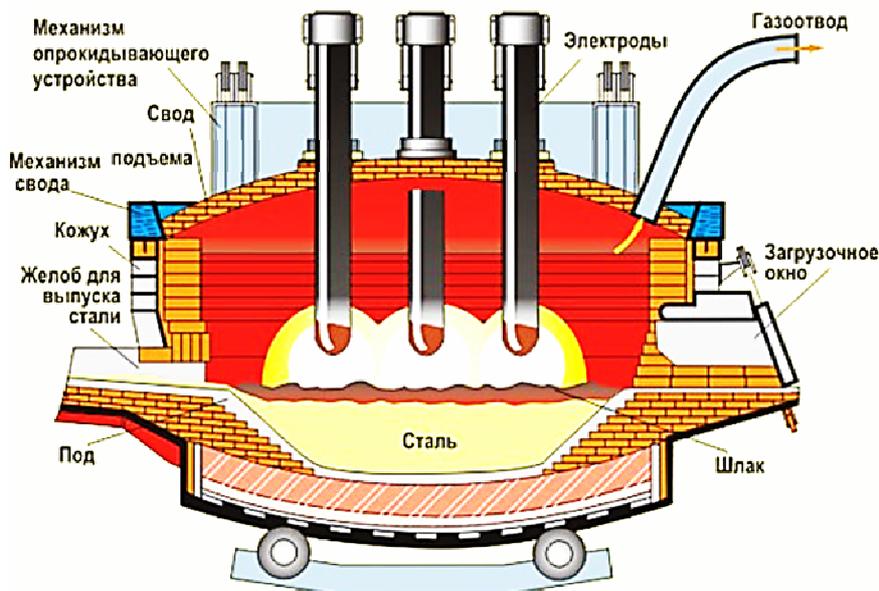


Рис. 1.3. Схема трехфазной дуговой плавильной печи



Рис. 1.4. Схема многокомпонентного дозатора

**Формовка.** Смеси для производства литейных форм подвергаются специальному уплотнению, обеспечивающему твердость поверхности и газонепроницаемость. При уплотнении прессованием и вибрацией степень уплотнения во многом зависит от давления сжатого воздуха в пневмоприводе вибромашины, частоты вибрации, условий сушки форм и стержней и др. Схема оборудования показана на рис. 1.5. Математические модели позволяют прогнозировать оптимальные условия формообразования, продолжительность движения формы по сушильной камере, скорость газоудаления из формы и т. д.

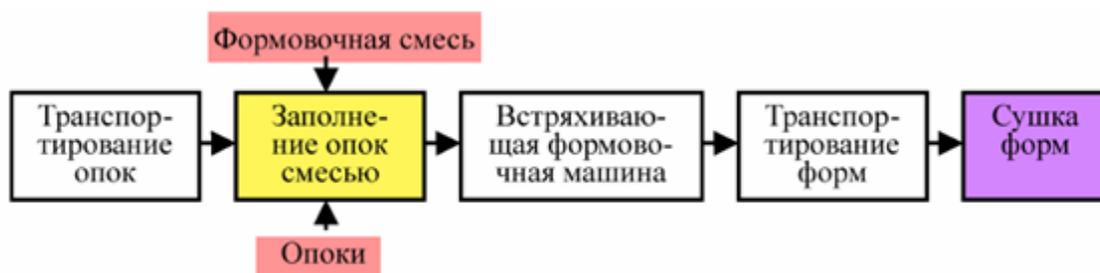


Рис. 1.5. Схема оборудования для изготовления форм и стержней

**Разливка.** Одной из важнейших целей является получение качественного слитка. Именно при затвердевании происходит формирование кристаллической структуры слитка, возникновение в нем физической и химической неоднородности и других дефектов, переходящих в готовые изделия. Проблемами, возникающими в процессе разливки в литейные формы, являются дозирование расплава и регулирование скорости его подачи [20, 38].

Стабилизация химического состава расплава, его чистота, простота дозирования достигаются при магнитодинамическом (МГД) способе (МГД-насосы, МГД-дозаторы). С тиглем 1 (рис. 1.6) сообщаются каналы 2, 3, 6, причем каналы 2, 6 охвачены индукторами, каждый из которых представляет замкнутый магнитопровод 7 с обмоткой питания, 4, 5 – активная часть МГД-дозатора. Суммарное действие электромагнитных сил вызывает движение расплава через выходной металлопровод 9 к приемнику.

По сравнению с дискретным литьем слитков в формы переход на непрерывное литье металла может значительно повысить производительность и обеспечить получение качественных заготовок.

Технология получения слитков на установках непрерывного литья заготовок (УНЛЗ) заключается (рис. 1.7) в том, что расплав подается из промковша в верхнюю часть кристаллизатора. Здесь при интенсивном первичном охлаждении затвердевают только поверхностные слои металла, поэтому вытянутый слиток имеет незакаленную часть (жидкое ядро) и высокую температуру поверхности под кристаллизатором. Образовавшаяся твердая корка слитка, выдерживающая статическое давление столба жидкой стали, имеет на выходе из кристаллизатора толщину 2–4 см, поступает в расширенную зону вторичного охлаждения, где полностью завершается формирование слитка.

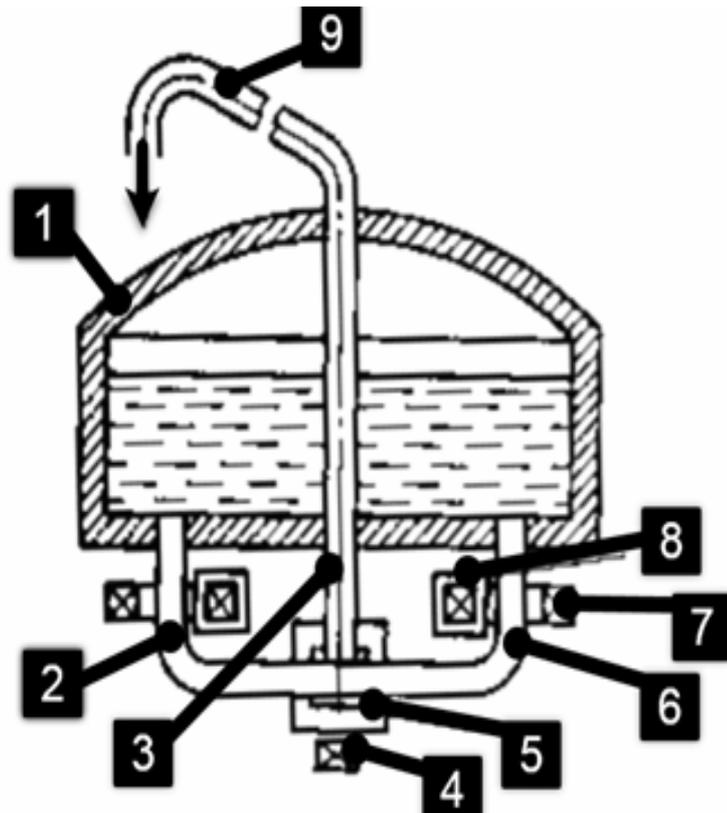


Рис. 1.6. Схема магнитодинамического способа подачи расплава в литейную форму

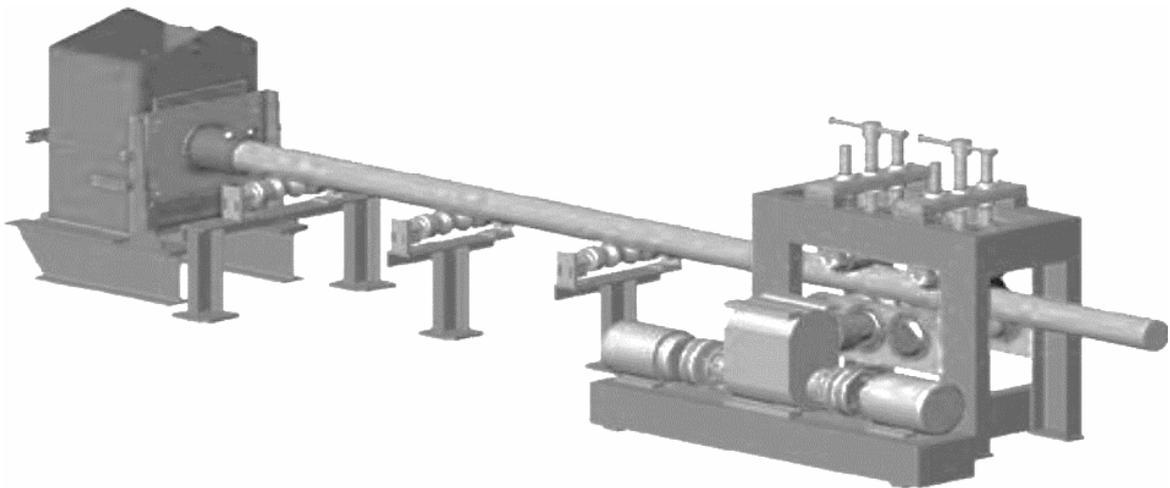
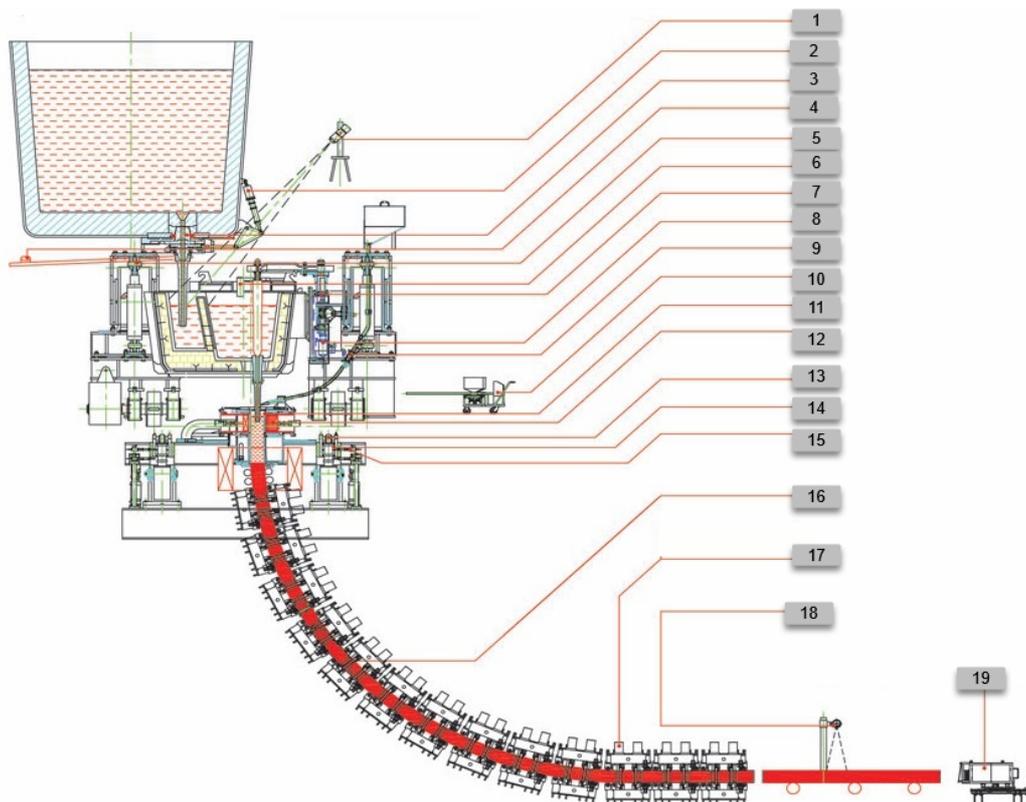


Рис. 1.7. Схема установки непрерывного литья заготовок

Процессы формирования стального слитка протекают при высоких температурах (рис. 1.8) и при экстремальных температурных градиентах как в самом слитке, так и в элементах технологического оборудования, сопровождаются фазовыми и структурными превращениями, появлением температурных напряжений, которые приводят к появлению трещин и других дефектов [18, 62].



*Рис. 1.8.* Схема машины непрерывного литья заготовок криволинейного типа:  
 1 – обнаружение ковшового шлака (многомерное); 2 – цифровая система управления шибером ковша; 3 – система обнаружения шлака в ковше (электромагнитная) сталеразливочного ковша; 4 – система обнаружения шлака в ковше (вибрация); 5 – промковшовая тележка с гидравлической подъемной системой; 6 – система измерения уровня промежуточного ковша; 7 – цифровая система управления стопором/шиберным затвором; 8 – система управления подачей антиадгезионного состава; 9 – автоматическая система управления запуском промковша; 10 – автоматическая система подачи порошка (заготовка и блюм); 11 – автоматическая система подачи порошка (заготовка плиты и балки); 12 – система прогнозирования прорыва; 13 – онлайн регулировка ширины кристаллизатора на машине для разлива слябов; 14 – автоматическая проверка зазора между роликами; 15 – система динамического мягкого обжатия; 16 – система обнаружения жидких сердечников (электромагнитная); 17 – автоматическая система контроля длины резки, 18 – автоматическая маркировочная машина; 19 – цифровая штамповочная машина/машина для маркировки горячим распылением

На рис. 1.9 представлены температурное поле и термоупругие напряжения, возникающие в твердой фазе в неглубоком растущем слое, моделирующем затвердевание стальной пластины от ее поверхности к плоскости симметрии. При температуре выше изотермы лик-

видуса (1773 К) металл находится в жидком состоянии. В области температур ликвидуса и солидуса (1703 К) наблюдается двухфазное состояние стали. При температурах ниже солидуса металл находится в твердом состоянии. Затвердевание завершается на расстоянии 6,5 м по технологической линии бесконечного стержня, но температурное поле остается неоднородным. Видно, что для слитка с неизотермической поверхностью вблизи границы солидуса (изотермы солидуса) возникают термические сжимающие напряжения, которые компенсируются растяжением поверхностных слоев слитка.

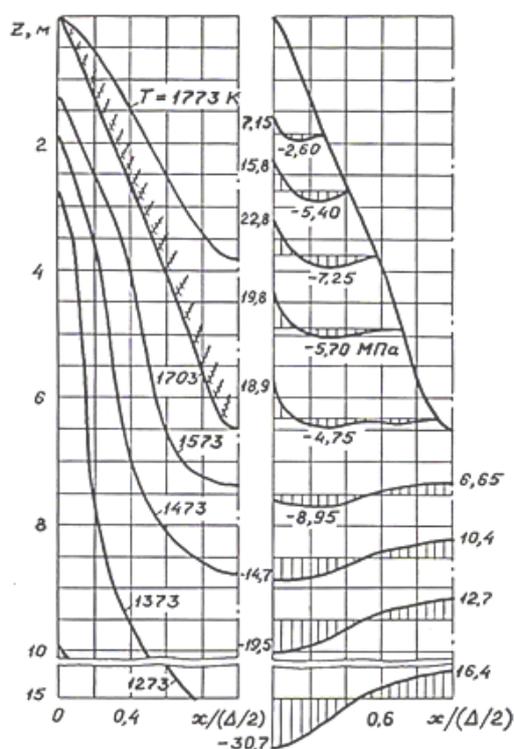


Рис. 1.9. Изотермы (слева) и термоупругие напряжения при кристаллизации и остывании плоского слитка

После окончания затвердевания при остывании слитка происходит перераспределение напряжений: его центральная часть расширяется, а поверхность сжимается. Возникновение растягивающих напряжений в осевой зоне после окончания кристаллизации характерно для непрерывнолитых заготовок и приводит к возникновению центральных трещин (прокрутки), которые не залечиваются при дальнейшей обработке заготовки давлением.

Градиенты температуры и напряжения в твердой фазе снижаются не только за счет выбора рациональных режимов охлаждения поверхности слитка, но и за счет увеличения теплоотдачи от жидкого ядра

к фронту затвердевания. На рис. 1.10 показана схема смещения жидкого ядра слитка в кристаллизаторе со специальной рабочей жидкостью – роторным активатором, вводимым в расплав. Охлаждение активатора, погруженного в расплав, приводит к образованию на его поверхности гарнисажа – тонкой корочки застывшего металла. Термическая эрозия выступа подаваемой струей расплава приводит к уменьшению его перегрева и образованию новых центров кристаллизации беспорядочно растущих кристаллов из фрагментов дендритов. Циркуляция расплава в жидком ядре в виде тороидальных вихрей (вихрей Тейлора) приводит к уменьшению градиентов температуры.

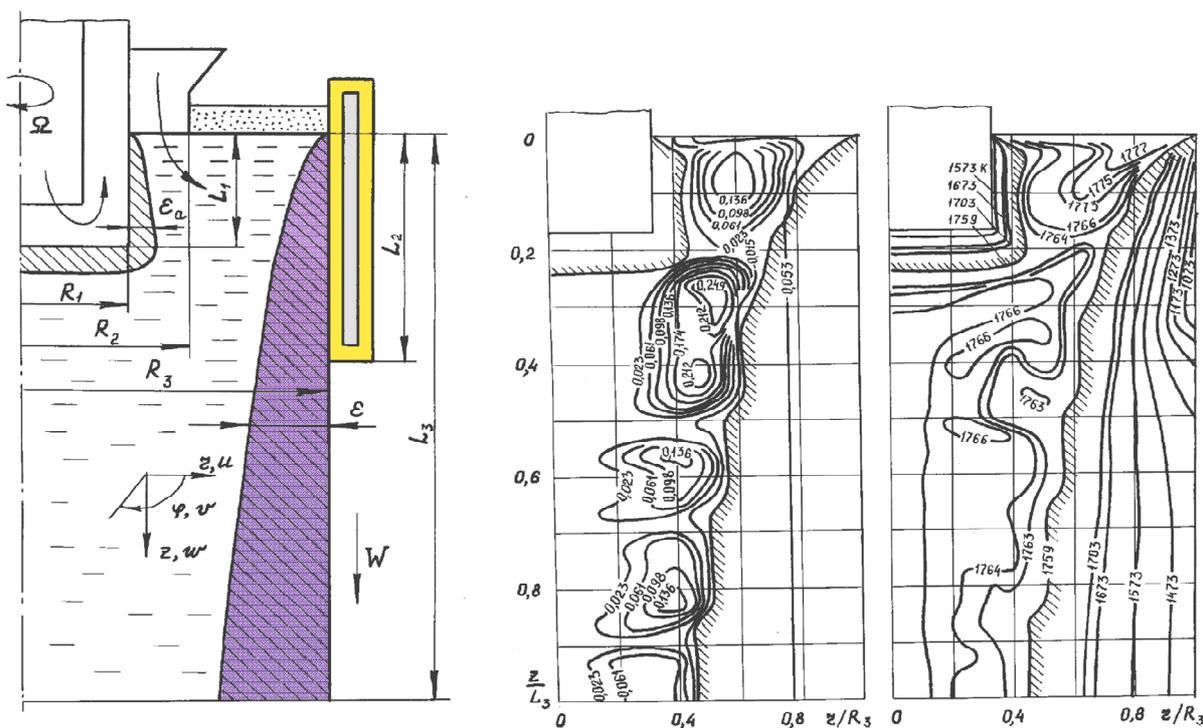


Рис. 1.10. Схема механического перемешивания жидкого ядра слитка (слева), линии тока (в центре) и поле температур в формирующемся слитке

Течения расплава в жидком ядре приводят не только к уменьшению градиентов температуры, но и к переносу легирующих компонентов и примесей по всему объему слитка. Явление неравномерного распределения примесей в массе слитка называют сегрегацией. На рис. 1.11 показан пример неравномерного распределения примесей в жидком ядре непрерывного горизонтального слитка. Полая заготовка вытягивается из неподвижного кристаллизатора длиной  $L_2$  и оправки длиной  $L_1$  с постоянной скоростью  $W$ . Течение в жидком ядре слитка

симметрично вертикальному диаметру. Частицы расплава, охлаждаясь на границах кристаллизации, опускаются в нижнюю часть слитка, образуя зоны нисходящих потоков. Восходящие потоки имеют место в центральной части жидкой фазы.

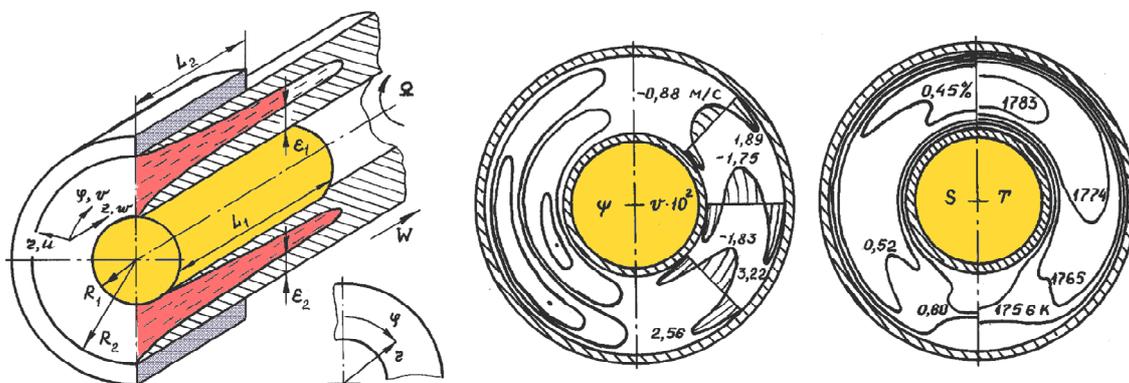


Рис. 1.11. Схема получения горизонтального слитка (слева), поля функции тока и окружной скорости (в центре), концентрации примеси и температуры

Свободная конвекция приводит к искажению изотерм: более теплые слои расплава скапливаются вверху слитка, а более холодные образуют застойную зону внизу.

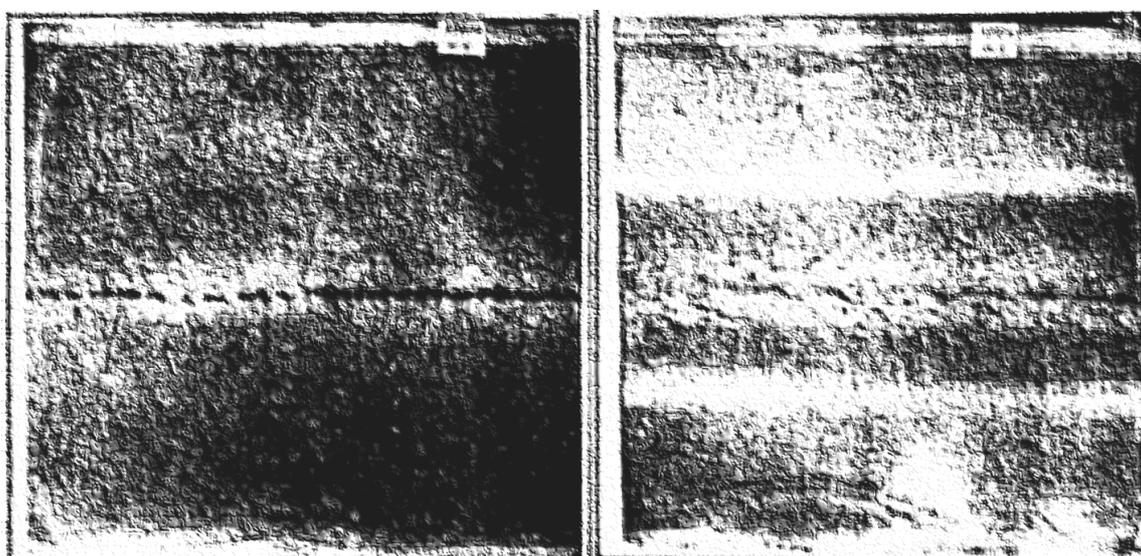
Течения расплава также вызывают неосесимметричное распределение примесей: слои расплава, обогащенные примесями, опускаются на дно жидкого ядра. Нерастворимая твердофазная примесь (в данном случае углерод) дрейфует в расплав, что приводит к возникновению обогащенных примесями диффузионных пограничных слоев вблизи границ кристаллизации. Вращение слитка во время процесса позволяет достичь положительных металлургических эффектов.

Дальнейшее продвижение в производстве качественных металлических изделий связано с развитием оборудования, в котором сочетаются машины непрерывного литья заготовок и устройства для дальнейшей обработки слитков – прокатных станов. Эти комбинированные агрегаты позволяют значительно экономить тепловую энергию за счет уменьшения промежуточного нагрева заготовки в прокатных станах.

В современных технологических процессах безслитковой прокатки металлическая корка вымораживается из расплава непосредственно на формующих валках и обрабатывается под давлением. Это дополнительно минимизирует потери тепла и энергоресурсы.

Электромагнитное перемешивание (ЭП) применяют для актив-

ного воздействия на процесс кристаллизации слитка. Энергия вводимого извне электромагнитного поля используется для измельчения зерна первичной отливки, повышения степени физико-химической неоднородности слитков, улучшения качества их поверхности. Устройства электромагнитного перемешивания разнообразны как по типу используемых электромагнитных полей (непрерывные, вращающиеся, пульсирующие), так и по типу конкретного исполнения. Резонансные смешанные режимы, при которых частота электромагнитного поля совпадает с частотой собственных колебаний жидкого ядра слитка, перспективны с точки зрения экономии энергии, вводимой в объем слитка. Применение ЭП приводит к положительному металлургическому эффекту в повышении качества слитка (рис. 1.12).



*Рис. 1.12.* Макроструктура продольных темплетов  
сляба трубной стали без электромагнитного перемешивание (слева)  
и с электромагнитным (справа)

На рис. 1.13 показаны варианты математического моделирования теплофизики деформирования твердой фазы кристаллизующегося слитка. Видно, что во всех вариантах охлаждения у фронта кристаллизации в температурном интервале хрупкости стали появляются участки, на которых эквивалентные температурные напряжения ( $\sigma > 1$ ) превышают предел прочности, и возможно образование трещин.

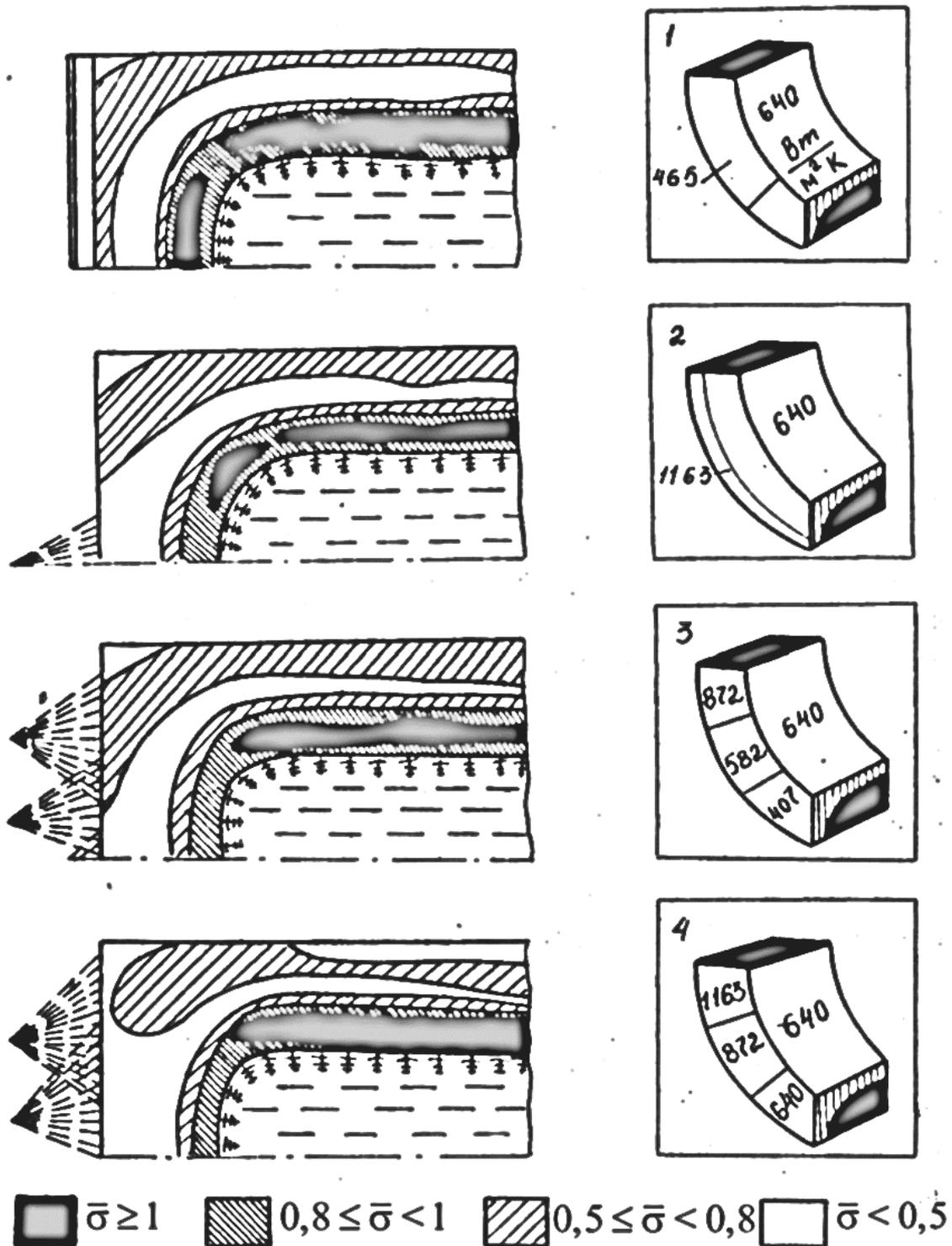


Рис. 1.13. Зоны относительных напряжений в поперечном сечении кристаллизующегося сляба на расстоянии 4 м от мениска металла при варьировании интенсивности теплоотдачи на узкой грани

Переход к интенсивному распылительному охлаждению на узкой кромке сляба (вариант 4) снижает локальное растрескивание, но в то же время увеличивает вероятность образования трещин на широ-

кой кромке сляба. Математическое моделирование физики теплового деформирования позволяет оперативно проектировать режимы охлаждения блоков при определенных технологических условиях.

Процесс непрерывного литья заготовок автоматически контролируется системой управления, включающей в себя устройства (рис. 1.14):

- 1) уровнемер расплава в кристаллизаторе;
- 2) уровнемер глубины лунки;
- 3) яркостной пирометр;
- 4) термометр измерения температуры воды на выходе из кристаллизатора;
- 5) дифманометр для определения расхода воды через кристаллизатор;
- 6) манометр для измерения давления воды в кристаллизаторе;
- 7) манометр для измерения давления воды в зоне вторичного охлаждения;
- 8) дифманометр для определения расхода воды в зоне вторичного охлаждения.

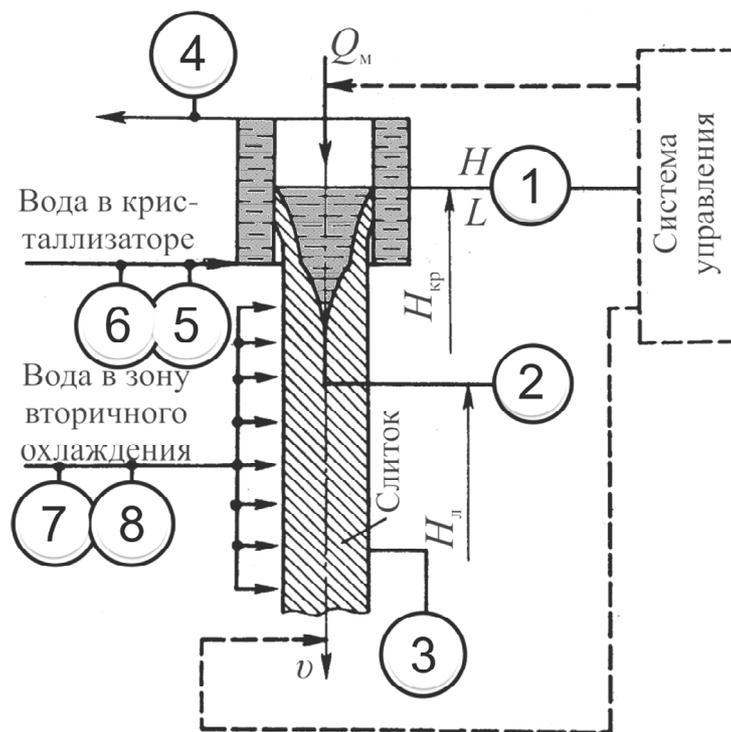


Рис. 1.14. Схема автоматизации процесса непрерывного литья

**Охрана окружающей среды.** Metallургическое производство связано со значительными выбросами загрязняющих веществ в окружающую среду. Например, при производстве и сушке 1 кг стержне-

вой смеси в воздух выделяется до 7,5 г различных углеводородов (фенол, формальдегид, метанол, ацетон и др.). При этом воздух рабочей зоны может содержать до 2,7 мг/м<sup>3</sup> фенола, 0,9 мг/м<sup>3</sup> формальдегида, 2,1 мг/м<sup>3</sup> метанола. Сточные воды литейного производства содержат до 10 г/л шлама в виде взвешенных частиц размером 100–200 мкм. Электродуговые печи выбрасывают в атмосферу до 12 кг пыли, 1,21 кг СО, 0,24–0,32 NO и NO<sub>2</sub> на 1 т металла [7, 38, 62].

Есть проблемы охраны окружающей среды, которые решаются за счет методов контроля и использования устройств, позволяющих эффективно устранять вредные выбросы. Дымовые газы очищаются от пыли и примесей с помощью фильтров перед выбросом в атмосферу. При этом перед фильтрами их предварительно охлаждают в теплообменниках с температуры 1600 до 100 °С.

На рис. 1.15 представлена схема управления газовым каналом. Газовый канал 1 снабжен термопарой 2, пробоотборным зондом 5. В одной части газохода перепад давления измеряется пробоотборными приборами 3, 4. Сигналы термометра, манометра, дифференциального манометра и пылемера через устройство связи с объектом (УЗЭ) вводят в компьютер, контролирующий массу пыли и теплосодержание дымовых газов.

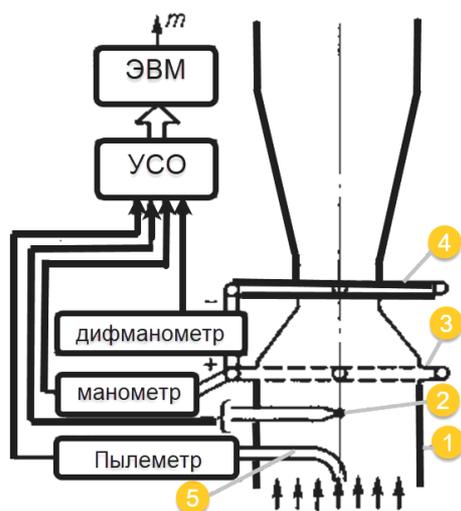


Рис. 1.15. Схема управления газовым каналом

Математическое моделирование процессов тепло- и массопереноса в этом случае позволяет прогнозировать оптимальные режимы и конструкции теплообменника для охлаждения дымовых газов, центрифуги для сбора пыли.

Масштабы и характер металлургических процессов производства неразрывно связаны с необходимостью постоянного совершенствования конструкций металлургических агрегатов. В решении этих задач особая роль принадлежит моделированию процессов и объектов в металлургии, позволяющему прогнозировать оптимальные условия производства.

Кроме перечисленных проблем существуют сотни примеров успешного сочетания методов математического моделирования и инженерного анализа, практического решения проблем в литье и металлургии. Проблемы оптимизации аэродинамики печей и рекуператоров успешно решаются с использованием гидрогазодинамического моделирования (рис. 1.16, 1.17). Моделирование позволяет повысить равномерность температурных полей, а также надежность и срок эксплуатации теплообменников и печей. Кроме того, можно значительно улучшить параметры накопления загрязнений на теплообменных поверхностях.

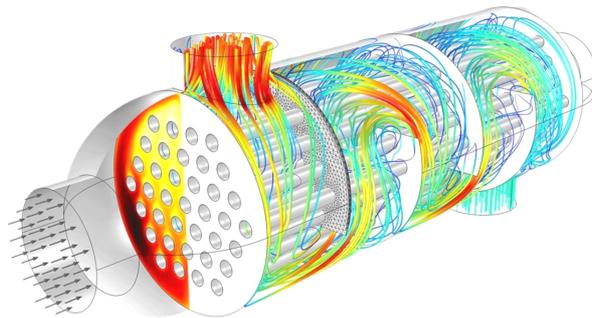


Рис. 1.16. Характер распределения газовых потоков в конвективном теплообменнике

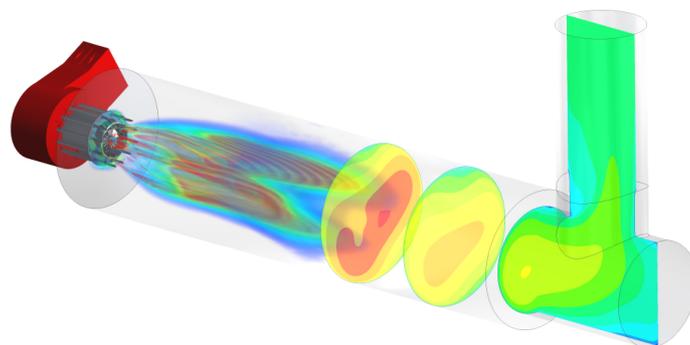


Рис. 1.17. Аэродинамика процесса сжигания топлива

При разливке и затвердевании металлов и сплавов протекает ряд физико-химических процессов, среди которых важное место занима-

ют тепло - и массообменные процессы. Качество слитков и отливок в значительной мере определяется взаимообусловленными процессами гидродинамики, тепломассопереноса и затвердевания в период перехода металла из жидкого состояния в твердое. Этот период является наиболее ответственным при формировании физической, химической и структурной неоднородности в кристаллизирующихся сплавах, то есть дефектов, часто практически не поддающихся устранению при последующей обработке металла. Постоянно растущие требования к качеству и свойствам литых изделий обуславливают необходимость глубокого и всестороннего исследования этих процессов, что связано со значительными трудностями как в технологическом, так и в теоретическом плане.

Одним из самых эффективных способов познания окружающего мира является моделирование. Благодаря способности воспроизводить реальные объекты и системы в абстрактном виде и прогнозировать, предвидя их поведение в различных вариантах, человечество достигла значительных высот и научилось в определенной степени управлять окружающими явлениями.

Моделирование дает возможность обойти многочисленные трудности, возникающие при изучении металлургических систем. К ним можно отнести помехи при производственном процессе, высокие температуры, агрессивные среды, труднодоступность, значительные затраты на испытания нескольких вариантов систем и т. д.

С точки зрения теории приближенного моделирования для изучения и прогнозирования поведения системы необходимо наличие модели. Модели могут быть разделены на концептуальные (феноменологические, словесные), физические, математические и аналоговые. В любом случае модель является упрощенным отражением существующей системы.

Очевидно, что и физическому, и математическому, и аналоговому моделированию предшествует концептуальное, определяющее направление действий исследователя. Именно от этого вида моделирования на 90 % зависит успех всей деятельности исследователя, достижение поставленной цели и (что очень важно сейчас) снижение затрат на проведение исследований. Поэтому рассмотрение физического и математического моделирования, как более прагматичных и, на первый взгляд, наиболее важных видах моделирования, отдельно от концептуального моделирования не только не целесообразно, но и ошибочно.

Иногда в литературе аналоговое и математическое моделирование сочетаются под названием математического моделирования. Методы аналогий применяются в теории теплообмена и гидромеханики систем в литейном производстве и металлургии. Они позволяют по изученному электрическому или магнитному полю в некоторой области системы делать выводы о количественных характеристиках течения или температурного поля в данной области.

К отрицательной стороне аналогового моделирования стоит отнести затратность и сложность таких экспериментов. Поэтому в настоящее время более часто используются физическое моделирование и вычислительный эксперимент.

Результаты математического моделирования необходимо сравнить с данными физического моделирования, данными других авторов или расчетами по другим математическим моделям. Такое сравнение позволяет усовершенствовать модель, внести в нее необходимые изменения и дополнения.

И наконец, любые результаты исследований теряют свое научно-практическое значение без комплексной математико-статистической обработки и основанных на ней технологических рекомендаций. Причем такие рекомендации должны быть основаны на результатах решения задач оптимизации – задач поиска наилучших условий для реализации поставленной цели.

## 1.2. Что такое модель

Построение любых моделей так или иначе связано с процессом научного познания. Познавательный процесс заключается в активном взаимодействии человека (субъекта) с реальной действительностью (объектом-оригиналом или объектом) и носит целенаправленный характер. В основе этого процесса всегда лежит задача, которую решает человек (осознанно или неосознанно) для достижения своих целей.

Неоднозначная трактовка научных понятий приводит к серьезным ошибкам при исследованиях и реализации их на практике. Поэтому знание основных понятий и определений моделирования является необходимостью [1, 8].

Понятие – высшая форма мысли, отражающая общие существенные признаки явлений и предметов окружающего мира (например, температура, теплопроводность, плотность и т. п.).

*Суждение* – форма мышления, с помощью которой соединяют

понятия, утверждая или отрицая наличие у явлений или предметов общих свойств.

*Умозаключение* – форма мышления, основанная на анализе суждений, что позволяет на этой основе вывести новое суждение, содержащее знание о системах.

*Система* – совокупность взаимозависимых элементов, мысленно изолированных от окружающей среды, с которой имеется связь по входным и выходным сигналам. Вид этих сигналов зависит от выбора границы между системой и средой. В общем случае под системой можно понимать как отдельный объект (например, стол, стул, даже человека, социальное общество и т. п.), так и любой процесс (революция, свадьбы, теплоперенос и т. п.), которые имеют возможность наложения на них контролируемых управляющих сигналов с получением измеряемой исходной информации.

*Измерение* – процедура определения численного значения характеристик исследуемой системы.

Наблюдение – целенаправленное и организованное восприятие системы, позволяющее получить информацию для ее изучения. Этот метод можно использовать самостоятельно или в сочетании с другими методами. В процессе наблюдения наблюдатель не имеет прямого влияния на объект исследования. Наблюдение должно вестись для определенной четко поставленной задачи; в первую очередь должны рассматриваться интересующие исследователя стороны явления; наблюдение должно быть активным; надо искать нужные объекты, определенные черты явления.

*Информация* – сведения о системе, позволяющие решить поставленную задачу или проблему.

*Задача* – решение конкретного научного вопроса, имеющего существенное значение для решения проблемы.

*Проблема* – целостный комплекс задач, решение которых представляет существенный теоретический или практический интерес.

Для постановки задач и проблемы нужны факты.

*Факт* – реальное явление, событие, результат, нечто конкретное и единичное в отличие от абстрактного, полученное на основе наблюдений или эксперимента.

*Эксперимент* – система операций, воздействий и (или) наблюдений, направленных на получение информации (фактов) об исследуемой системе. Может осуществляться на системе, моделироваться (натурный эксперимент), и на модели (модельный эксперимент). Лю-

бой эксперимент состоит из совокупности опытов, количество которых может быть рассчитано и не может быть меньше четырех. Это необходимо с целью определения системных и случайных погрешностей, а также нахождения общих закономерностей, определяющих поведение системы.

*Метод* – совокупность приемов и операций практического и теоретического освоения действительности, получения информации о каком-либо объекте, явлении или процессе.

*Методология* – система принципов и способов организации и построения теоретической и практической деятельности (например, проведения экспериментов).

*Анализ* – мысленное расчленение исследуемой системы на составные более простые части с целью выделения ее отдельных свойств и связей. Никогда не является (и не может ею быть!) конечной целью исследований, одновременно является одним из методов дедукции.

*Синтез* – мысленное сочетание связей отдельных частей системы. Выполняется на основе анализа и является заключительной частью исследований системы. Неразрывно связан с методом индукции.

*Аналогия* – метод научного познания, при котором знания о неизвестной системе достигаются на основе ее сравнения с общими признаками исследованных систем.

*Интуиция* – способность постижения истины, не основана на доказательствах. Интуиция лежит в основе создания гипотезы и идеи.

*Идея* – мысль, достигшая высокой степени объективности, полноты и конкретности и нацеленная на практическую реализацию. Чаще всего лежит в основе гипотезы.

*Гипотеза* – научное допущение или предположение, истинное значение которого не определено. Является возможным источником начала процесса моделирования.

*Моделирование* – это воспроизведение характеристик некоторого объекта на другом материальном или воображаемом объекте, специально созданном для их изучения.

*Модель* – отражение существенных сторон реальной или конструируемой системы.

*Физическая модель* – это материальная система, которая характеризуется тем, что основные процессы, протекающие в ней и в оригинале, имеют одинаковую физическую природу.

Математическая модель любого процесса представляет собой систему математических символов и внешне не имеет ничего общего

с оригиналом. Но она позволяет исследовать и анализировать реальный процесс, прогнозировать его протекание при определенных знаниях исходных величин [1, 6, 8].

Аналоговая модель, в отличие от математической, является не символьной, а вещественной системой. Но, в отличие от физического моделирования, процессы в такой модели и оригинале имеют разную физическую природу, но описываются теми же дифференциальными уравнениями, что и дает возможность исследовать на таких моделях процессы, протекающие на образце.

По возможности результаты математического моделирования следует сравнивать с данными физического моделирования или расчетами на основе других математических моделей. Эти сравнения позволяют улучшить модель и внести необходимые изменения и дополнения.

При любом виде моделирования сначала составляют совокупность абсолютных (размерных) величин, которые затем (при необходимости) превращают в безразмерный вид (относительные величины). Представление совокупности величин, определяющих систему, в безразмерном виде является более предпочтительным, так как в результате таких преобразований количество уравнений, описывающих систему, уменьшается, а следовательно, уменьшается и трудоемкость моделирования. Кроме этого значения безразмерных величин не зависят от системы единиц, в которых измеряются составляющие размерные величины, так как все единицы измерения сокращаются. Такие безразмерные величины называются критериями подобия, или числами подобия. При моделировании физическую систему упрощают, игнорируя второстепенные процессы. Поэтому при составлении совокупности величин, характеризующих изучаемую систему, в нее включают лишь существенные.

Как для составления совокупности, так и для последующего анализа физические величины разделяют на три группы: функции, аргументы и параметры.

*Функции* – зависимые переменные величины, ради определения которых и производится моделирование.

*Аргументы* – независимые переменные величины, значения которых можно задавать непосредственно в опыте.

*Параметры* – постоянные величины, остающиеся постоянными, по крайней мере, в течение одного опыта (вязкость, теплопроводность и т. д.).

Правильно составленная совокупность должна быть однозначной и однородной.

Однозначность означает, что при заданном значении параметров и аргументов каждая из функций должна принимать только одно значение.

Однородными называют совокупности, в которых единицу измерения каждой величины можно получить посредством степенной функции единиц измерения других величин. Если это требование не выполняется для какой-либо величины, то это значит, что оно либо излишне, либо в совокупности не хватает каких-либо величин.

Есть два метода составления совокупности: логический и математический.

При логическом способе мысленно воспроизводят исследуемую физическую систему во всех деталях и выписывают существенные характеризующие величины.

При математическом способе на основе мысленного воспроизведения физической системы пишут описывающие ее уравнения.

Как правило, при физическом моделировании эти уравнения не разрешаются, а из них извлекаются лишь существенные величины. Последний способ составления совокупности несколько более сложный, но гораздо более надежный.

Каждый материальный объект бесконечномерен: полностью в абсолютном смысле его можно охарактеризовать лишь бесчисленным множеством признаков, свойств и характеристик. Наши знания об объекте на каждом этапе развития относительно и конечны.

Непосредственным результатом познания объекта является формирование в сознании познающего идеального образа объекта, который отражает некоторые присущие объекту черты, свойства и характеристики.

Можно выделить несколько этапов в этом процессе.

На первом этапе у человека появляется осознание необходимости к изменению существующего положения вещей и определение цели как желательного результата будущих действий. Этот этап для нашего случая связан с построением и анализом проблемных ситуаций. В каждой из этих ситуаций мы хотим что-то изменить, хотя не всегда понимаем, как это можно сделать.

На втором этапе мы формулируем задачу, подлежащую решению. При этом уточняем цели с учетом свойств выбранного для решения задачи объекта и имеющихся в нашем распоряжении ресурсов и возможностей.

На следующем этапе мы производим выбор из множества (уже известных, познанных) свойств и характеристик объекта наиболее

существенных, на наш взгляд, для решаемой задачи и пренебрегаем остальными (т. е. «ограничиваем» объект).

Затем проверяем соответствие объема существенных свойств и характеристик объекта нашим ресурсам и условиям задачи. Если такого соответствия нет, то приходится производить дальнейшие ограничения этих свойств и характеристик, что дает возможность получить практическое решение поставленной задачи.

Три этапа познания можно увидеть, проанализировав ситуацию с нагревательными колодцами. Мы выбрали объект (слиток), ограничили его свойства (геометрические и теплофизические характеристики) и провели дальнейшее упрощение (перешли от объемного распределения температур к линейному), исходя из требований задачи управления нагревом в реальном масштабе времени.

На следующем этапе у нас формируется конкретный идеальный образ объекта (идеализированный слиток с упрощенной картиной распределения температур в нем), предназначенный для решения данной задачи, и мы приступаем к разработке плана практических действий, связанных только с этим идеальным образом, учитывая его связи с внешней средой.

И наконец, на последнем этапе мы реализуем этот план, обеспечивая достижение поставленной цели. Причем в процессе реализации плана и получения результатов может производиться корректировка (уточнение) решений, принятых на предыдущих этапах. Другими словами, весь этот процесс достижения цели осуществляется методом последовательных приближений (итераций).

Важно, что центральным моментом всего этого процесса является задача, так как только она позволяет ограничить практически бесконечное множество признаков, свойств и характеристик реального объекта и перейти к ограниченному по свойствам его идеальному образу [22, 27, 40].

Получается, что все наши научные знания и представления о мире природы (законы, теории, научные картины мира) носят модельный характер (рис. 1.18).

Модель представляет собой «четырёхместную конструкцию», компонентами которой являются:

- субъект (человек);
- задача, решаемая субъектом;
- объект-оригинал (фрагмент реальной действительности);
- язык описания или способ материального воспроизводства модели.

Особую роль в этой конструкции играет задача.

Можно сказать и о том, что каждому материальному объекту (фрагменту реальной действительности) соответствует бесчисленное множество различных моделей, связанных с разными задачами. Паре «задача–объект» тоже соответствует множество моделей, содержащих одну и ту же информацию, но отличающихся формами ее представления.



Рис. 1.18. Классификация математических моделей в зависимости от параметров

Важным свойством модели является обязательное наличие ограничений и допущений, связанных с решаемой задачей и свойствами объекта-оригинала. Однако независимо от природы объекта-оригинала, типа решаемой задачи и способа реализации модель представляет собой информационное образование.

Частным, но важным в технических приложениях, является случай, когда роль объекта-оригинала исполняет не фрагмент реального мира, а другая модель, созданная ранее и практически достоверная. Такие «модели-заготовки» имеют статус научных законов и представляют собой фундамент для конкретных инженерных моделей.

Принципиальное значение имеет и тот факт, что в конкретные инженерные модели, основанные на «моделях-заготовках», автомати-

чески входят все допущения и ограничения, содержащиеся в этих базовых моделях, что нередко упускается из вида исследователями.

Все модели отражают так или иначе лишь те свойства, признаки и характеристики объекта-оригинала, которые существенны для решаемой в данный момент задачи.

Собственно моделирование начинается с определения границ объекта, подлежащего моделированию, или, как говорят, с выделения объекта из внешней среды. Иногда проблемы выделения объекта моделирования вообще не возникает, так как он содержится в самой постановке задачи. Однако во многих случаях выделение объекта превращается в самостоятельную исследовательскую задачу, носящую итеративный характер, т. е. уточнение границ объекта, происходит в процессе построения модели.

Но объект не может существовать изолированно от других объектов (внешней среды). Обычно связи типа «среда–объект» называют входными воздействиями (входами), а связи «объект–среда» – выходными (выходами).

Достаточно полный учет входных и выходных связей объекта с внешней средой очень важен в процедуре моделирования. С другой стороны, с увеличением числа связей растет сложность и увеличивается громоздкость модели, что является не меньшим недостатком, чем ее неполнота.

*Непрерывными* объектами являются объекты, у которых выходные переменные (параметры) непрерывны. Подавляющее большинство реальных металлургических объектов, состояние которых характеризуется макроскопическими физическими величинами (температура, давление, пространственные координаты, скорость, ускорение и др.), обладают свойствами сплошности. При математическом описании сплошных объектов в основном используется аппарат дифференциальных и интегро-дифференциальных уравнений.

*Дискретные* объекты имеют выходные переменные, которые могут принимать конечное число известных значений. В связи с развитием возможностей вычислений дискретные методы анализа (например, методы конечных разностей и элементов) получили распространение при исследовании непрерывных объектов (например, сплошных сред). Модели непрерывных объектов, полученные с помощью дискретных методов, называют иногда непрерывными дискредитированными в отличие от дискретных моделей дискретных объектов.

Свойства «*стационарности*» – «*нестационарности*» характеризуют степень изменчивости объекта во времени.

Свойства *сосредоточенности*, или *распределенности*, параметров характеризуют объекты с точки зрения роли, которую играет в их модельном описании пространственная протяженность и конечная скорость распространения в пространстве физических процессов. Под параметрами понимаются количественные характеристики внутренних свойств объекта (температура, напряжения, деформации, скорости и т. п.).

Если пространственной протяженностью можно пренебречь и считать, что независимой переменной, характерной для объекта является только время, то говорят об объекте с сосредоточенными параметрами. К числу таких объектов, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями, относится подавляющее число механизмов, машин, а также другие объекты, у которых расстояние между отдельными частями не влияет (или принимается не влияющим) на исследуемые свойства и характеристики. Примером из области металлургического оборудования может служить описание механики системы электромеханического привода механизма качания кристаллизатора (рис. 1.19).

С математической точки зрения такие *объекты с распределенными параметрами* представляют собой поля одномерные и многомерные (скоростей, температур, перемещений), существующие во времени и пространстве той или иной размерности (одномерные, плоские, трехмерные). Выходные переменные соответствующих моделей являются функциями времени и пространственных координат с их производными [1, 8, 14].

Одним из важнейших признаков, определяющих возможные методы описания, а также выбор подходящего (адекватного) математического аппарата, является деление объектов на детерминированные и стохастические (случайные). Определение «детерминированные» означает лишь тот факт, что по условиям решаемой задачи и применительно к свойствам конкретного объекта случайными факторами в данном конкретном случае можно пренебречь. Однако всем реально существующим объектам присуще свойство стохастичности.

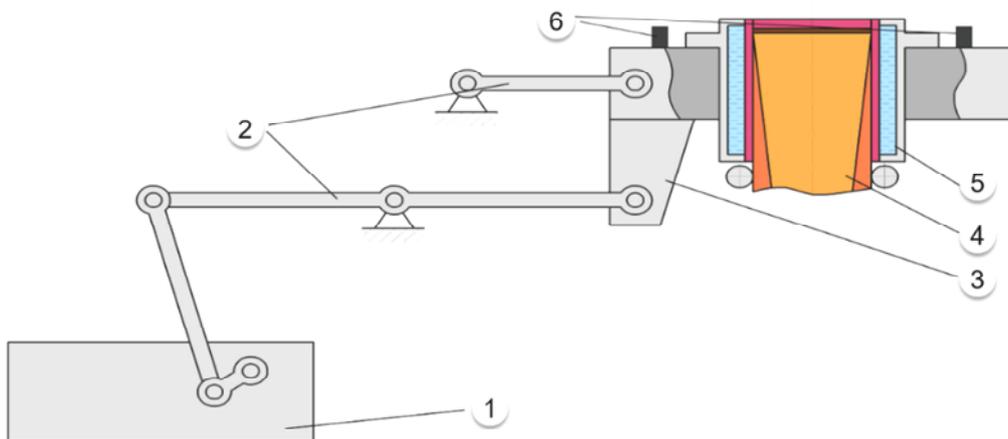


Рис. 1.19. Схема электромеханического привода механизма качания кристаллизатора (синусоидальные движения):  
 1 – привод механизма качания; 2 – система рычагов;  
 3 – стол качания кристаллизатора; 4 – непрерывнолитая заготовка;  
 5 – водоохлаждаемый кристаллизатор; 6 – места установки акселерометров

В протяженных объектах объемных систем (газы, жидкости, деформируемые твердые тела, с которыми мы имеем дело в металлургии) необходимо учитывать зависимость характеристик от координат. Эти объекты описываются дифференциальными уравнениями с частными производными. В основе формализованного исследования и описания стохастических объектов лежат методы теории вероятностей, математической статистики, теории случайных процессов.

Нужно отметить, что определения «случайный» и «стохастический» являются строгими синонимами. Оба только констатируют непредсказуемость будущих состояний объекта по данным о его прошлых состояниях. Слово «вероятностный» содержит дополнительное утверждение (предположение) относительно устойчивости частот появления различных состояний объекта. Определение «статистический» (вероятностно-статистический) несет в себе еще более сильное предположение о том, что такие характеристики, как закон распределения вероятностей, моменты и тому подобное не случайны для данного объекта.

Именно это свойство (которое еще надо установить в каждом конкретном случае) является необходимым условием адекватного (тождественного) описания объекта в форме стохастической модели.

Теперь перейдем к *динамическим объектам* (рис. 1.20). В технической литературе понятие динамики связывается с условиями протекания процессов, при которых проявляются инерционные эф-

фекты, определяемые конечной скоростью изменения запасов энергии и вещества, аккумулируемых объектом. Естественным следствием существования механической инерции является свойство последействия: состояние движущегося тела в определенный момент времени определяется не только силами, действующими на него в тот же момент, но и предшествующими воздействиями и состоянием объекта – его предысторией. Многие характеризуют динамику как просто изменение в течение времени.



*Рис. 1.20.* Мостовой металлургический кран – пример геометрической модели динамического объекта

Таким образом, само понятие динамического состояния в его наиболее общем смысле можно связать с проявлением последействия и рассматривать его как универсальное свойство, внутренне присущее реальным объектам макромира.

С динамическим состоянием тесно связано понятие памяти. «Память», обусловленная инерционным запаздыванием или другими факторами, есть неотъемлемое свойство объекта, однако ее проявление в форме последействия (динамичности) наблюдается при достаточно «быстрых» внешних воздействиях на объект.

Если свойства объекта, характер действующих на него переменных и особенности решаемой задачи таковы, что эффектами последействия можно пренебречь, то говорят о статическом состоянии объекта (статический режим).

Существенно деление объектов на *линейные* и *нелинейные*. Различие между ними заключается в том, что для первых справедлив принцип суперпозиции (наложения), когда каждый из выходов объекта характеризуется линейной зависимостью от соответствующих входных переменных.

Линейность объекта относительно переменных означает, что среди коэффициентов, входящих в его математическое описание, отсутствуют величины, зависящие от переменных, их производных и интегралов. Если коэффициенты не зависят от времени, то мы имеем наиболее распространенный случай – линейную стационарную модель.

Важно деление объектов на *одномерные* (с одним выходом) и *многомерные*. В общем случае каждый из выходов многомерного объекта зависит от значений нескольких переменных, и, таким образом, многомерный объект является, как правило, еще и многосвязным.

Деление объектов моделирования (соответственно и моделей) на *аналитические*, основанные на ранее изученных и описанных в математической форме закономерностях объекта, и *идентифицируемые*, которые строят на основе специального экспериментального исследования (рис. 1.21), связано главным образом со степенью сложности и изученности объекта. Реальные металлургические объекты обычно являются сложными динамическими объектами, а физико-химическая сложность металлургических процессов приводит к многосвязности объектов.

Металлургические объекты принадлежат, как правило, к классу нелинейных объектов, причем нелинейность обуславливается многими причинами, в том числе нелинейным характером физико-химических процессов [12, 38, 52].

Большая часть металлургических объектов является объектами с распределенными параметрами.

Если проблема состоит в разработке системы управления нагревательными колодцами, целью такого управления должно быть желаемое распределение температуры в слитке к моменту его выдачи на прокатку.



Рис. 1.21. Методы планирования измерительного эксперимента

Для решения поставленной проблемы необходимо решить несколько задач. Первая задача относится к нагреву слитка.

В этом случае мы имеем детерминированный объект с распределенными параметрами, так как решили учитывать неравномерность поля температур по длине слитка и пренебречь случайными колебаниями температур. Объект является динамическим, так как обладает последствием, что учитывается соответствующими краевыми условиями для дифференциального уравнения с частными производными. Входом служит поток тепла от нагревателей на слиток, а выходом – распределение температур в слитке.

При разработке системы управления целесообразно еще учитывать неопределенность, вносимую погрешностями измерений, случайные возмущения («шумы»), а также то обстоятельство, что модели объекта управления не всегда адекватно описывают реальный процесс. Для этого необходимо создать модель оценки распределения температуры в слитке в одинаковом темпе с процессом нагрева.

Также необходимо создать модель управляющей системы, т. е., по существу, решить задачу проектирования управляющего объекта в соответствии с заданными требованиями управления, в частности, с учетом стохастических воздействий на объект управления.

К сожалению, не существует универсального алгоритма (четкой последовательности операций) для построения любых моделей.

В этом процессе интуиция, знание дела и другие интеллектуальные качества, которые называют творческими способностями, играют важнейшую роль. Поэтому невозможно написать инструкцию или учебник по построению моделей.

Существует общая логика построения моделей, однако каждая конкретная модель пока требует для своего построения индивидуального подхода.

Можно выделить следующие основные этапы модельного исследования (рис. 1.22): постановка задачи, построение модели, отыскание решения, проверка модели и оценка решения, внедрение модели.

Модельное исследование, как и любой вид осознанной целенаправленной деятельности, начинается с потребности изменить в лучшую сторону ситуацию (существующее или ожидаемое положение вещей) в той или иной области.

Поставленная цель должна быть соотнесена с реальными возможностями ее достижения или, другими словами, с ресурсами, которые могут быть использованы для решения данной проблемы.

Сопоставление первоначально намеченных целей с ресурсами (что обычно ведет к сужению целей) дает возможность осуществить формулировку задачи, которая включает в себя и объект моделирования.



Моделирование – творческий процесс. Заключить его в формальные рамки очень сложно. В наиболее общем виде его можно представить поэтапно.

**I этап. Постановка задачи**

- > Описание задачи
- > Цель моделирования
- > Анализ объекта

**II этап. Разработка модели**

- > Информационная модель
- > Знаковая модель
- > Компьютерная модель

**III этап. Компьютерный эксперимент**

- > План моделирования
- > Технология моделирования

**IV этап. Анализ результатов моделирования**

Четвертый этап показывает, соответствуют ли полученные результаты цели или не соответствуют. В последнем случае, необходимо вернуться либо на второй, либо на третий этапы.

*Рис. 1.22.* Основные этапы разработки и исследования моделей на компьютере

Следующим шагом в построении модели является анализ системы «задача–объект» и выбор способа формирования модели. Если объект не слишком сложен, достаточно изучен и его свойства и характеристики могут быть выявлены на основе теоретических представлений и данных, целесообразно избрать аналитический путь формирования модели.

Если объект достаточно сложен или мало изучен, альтернативным является путь идентификации системы «задача–объект», т. е. экспериментального определения существенных для решаемой задачи свойств и характеристик объекта. Результаты такого экспериментального исследования представляются в виде вероятностно-статистической модели, для более сложных объектов имеет смысл применять методологию так называемого имитационного моделирования (рис. 1.23), используя в качестве моделей-блоков аналитические или экспериментальные модели отдельных элементов (или подсистем) сложной системы.

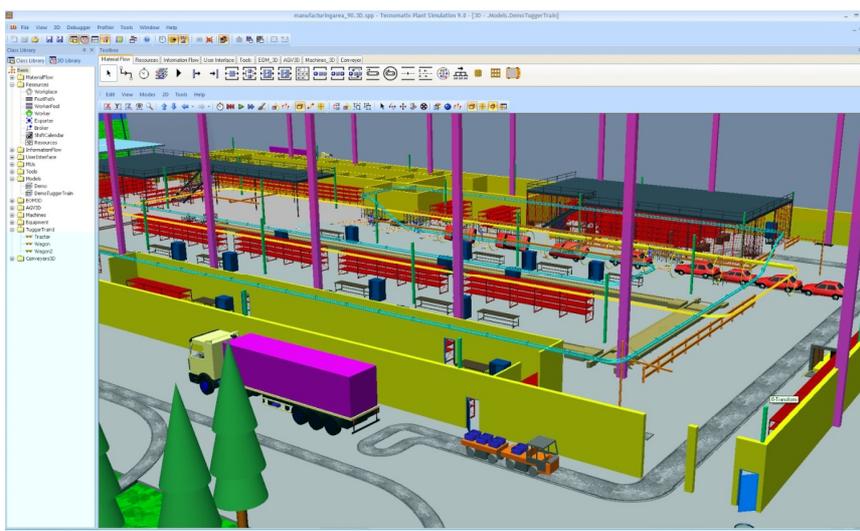


Рис. 1.23. Визуализация имитационной модели транспортных потоков промышленного предприятия [27]

Формализованная модель, построенная каким-либо образом, оценивается в соответствии с выбранным ранее критерием и либо отвергается как недостаточно совершенная, либо принимается. В случае создания неудовлетворительной модели приходится ее корректировать и начинать построение заново.

Решение о принятии модели влечет за собой переход к следующему этапу – опытной проверке. При этом возможны новые корректировки.

Наконец, следует заключительный этап процесса – внедрение модели.

Таким образом, построение модели представляет собой процесс последовательных приближений, в основе которого лежит самообучение исследователя. Начинаясь в условиях неопределенности, построение модели неизбежно связано с выдвижением ряда гипотез, предположений и допущений.

В основе большинства основополагающих аналитических моделей лежат законы сохранения вещества и энергии.

Они могут быть представлены либо в дифференциальной, либо в интегральной формах. Их также могут дополнять балансовые соотношения.

Если эффективности аналитических моделей недостаточно, приходится рассматривать объект как «черный ящик», внутрь которого заглянуть невозможно. Задача заключается в том, чтобы по наблюдаемым значениям входов и выходов выявить внутренние свойства объекта, т. е. построить его модель. Естественно, что входные и выходные переменные в общем случае носят случайный характер, а поэтому для обработки экспериментальных данных привлекаются статистические методы.

Исследователь практически всегда обладает какой-то информацией об объекте, поэтому ситуация «черного ящика» представляет собой предельный случай. Де-факто мы имеем дело с «серым», а иногда и отчасти «прозрачным ящиком».

Рассмотрим более подробно вопрос идеализации реальных объектов, который непосредственно связан с построением модели. Под идеализацией понимается выделение определяющих и отбрасывание второстепенных в условиях данной задачи характеристик какого-либо объекта реальной действительности.

Основные пути преодоления трудностей при идеализации реальных объектов:

1. Разделение данной сложной системы на совокупность более простых систем (декомпозиция). В металлургии декомпозиция применяется очень широко. Это связано с общей высокой сложностью технических систем металлургического производства, а также с тем, что задачи часто имеют мультифизическую природу.

2. Переход от системы с распределенными параметрами к системе с сосредоточенными или наоборот. Частным случаем такого подхода можно считать сокращение или увеличение размерности системы.

3. Сокращение числа переменных (входов и выходов), например за счет использования безразмерных комплексов. Каждая дополнительная переменная может увеличивать в несколько раз трудоемкость получения необходимого решения.

К этому можно добавить приемы, применяемые на практике:

1) использование свойства детерминированности вместо стохастичности;

- 2) замена переменных константами;
- 3) идеализация свойств системной среды (идеальный газ, идеальная жидкость, идеальная пластичность и т. п.);
- 4) усреднение свойств по объему (идеальное перемешивание) и по направлению (идеальное вытеснение, гипотезы плоских сечений и т. п.);
- 5) использование линейных зависимостей вместо нелинейных (так называемая линеаризация).

Необходимо учитывать, что решение нестрогое и неверное решение являются принципиально разными вещами.

При построении любой модели возникают две противоречивых цели: с одной стороны, нужно разработать модель, на которой проще всего получить решение задачи, а с другой – необходимо обеспечить максимальную точность модели. Выходом из этой ситуации является компромисс между *допустимой идеализацией* и приемлемой *точностью модели*.

Иногда считается, что основным математическим аппаратом, с помощью которого проводится моделирование, являются дифференциальные уравнения: обычные и частные производные. Это объясняется тем, что основные отрасли науки в значительной степени связаны с дифференциальными уравнениями, которые выступают в виде математических схем для описания явлений и процессов физической реальности [1, 22, 38].

Такие уравнения, как правило, являются математическими выражениями законов сохранения вещества и энергии в дифференциальной форме, законов состояния и движения сплошной среды, процессов протекания химических реакций, массо- и теплопереноса.

Законы сохранения также могут быть записаны в интегральном виде, т. е. не для одной материальной частицы, а для всего материального объема. В таком случае законы выражаются в виде так называемых балансовых соотношений. Например, под технологическим балансом понимаются результаты расчетов (выраженные в виде алгебраических уравнений, таблиц или диаграмм), отражающие количество материалов и энергии, вводимых и получаемых в производственном (или технологическом) процессе.

В некоторых случаях вместе с дифференциальными и алгебраическими уравнениями для построения математических моделей используют и интегральные уравнения.

В составе математического описания, основанного на физических закономерностях, можно выделить следующие группы уравнений:

- *Уравнения баланса масс и энергии.* Данная группа уравнений характеризует распределение в потоках температуры, составов и т. п. и связанные с ними свойства.

- *Уравнения «элементарных» процессов для локальных элементов потоков.* К этой группе относятся описания процессов массо- и теплопереноса, химических реакций и др.

- *Теоретические, полуэмпирические или эмпирические соотношения между различными параметрами процесса.*

- *Ограничения на параметры, которые необходимо принимать во внимание при моделировании.*

Модели, построенные с использованием этих зависимостей, называют аналитическими. При отсутствии или очень ограниченном объеме теоретических сведений об объекте модель представляется в виде зависимостей, полученных в результате обработки данных экспериментальных исследований. Такие модели называют вероятностно-статистическими, или просто статистическими. Они имеют вид регрессионных соотношений между входными и выходными переменными объекта. Однако в структуре уравнений подобных моделей не отражается сущность физических процессов.

Аналитические методы получили новый виток в развитии с появлением пакетов символьных вычислений (Derive, MatLab, Mathcad, Maple, Mathematica и др.).

### **1.3. Основные принципы построения математических моделей**

Если цель моделирования ясна, то сразу возникает проблема построения модели. Эта проблема оказывается разрешимой, если имеется информация или выдвинуты гипотезы относительно структуры, алгоритмов и параметров исследуемого объекта (рис. 1.24). К настоящему времени является общепризнанным, что *технологический процесс* современного металлургического производства представляет собой сложную систему, так как в общем случае он может включать совокупность различных механических, термомеханических, физико-химических, ионно-лучевых и других превращений, а также организационно-технических мероприятий, приводящих к получению материалов, заготовок, деталей машин с заданными свойствами [1, 8].

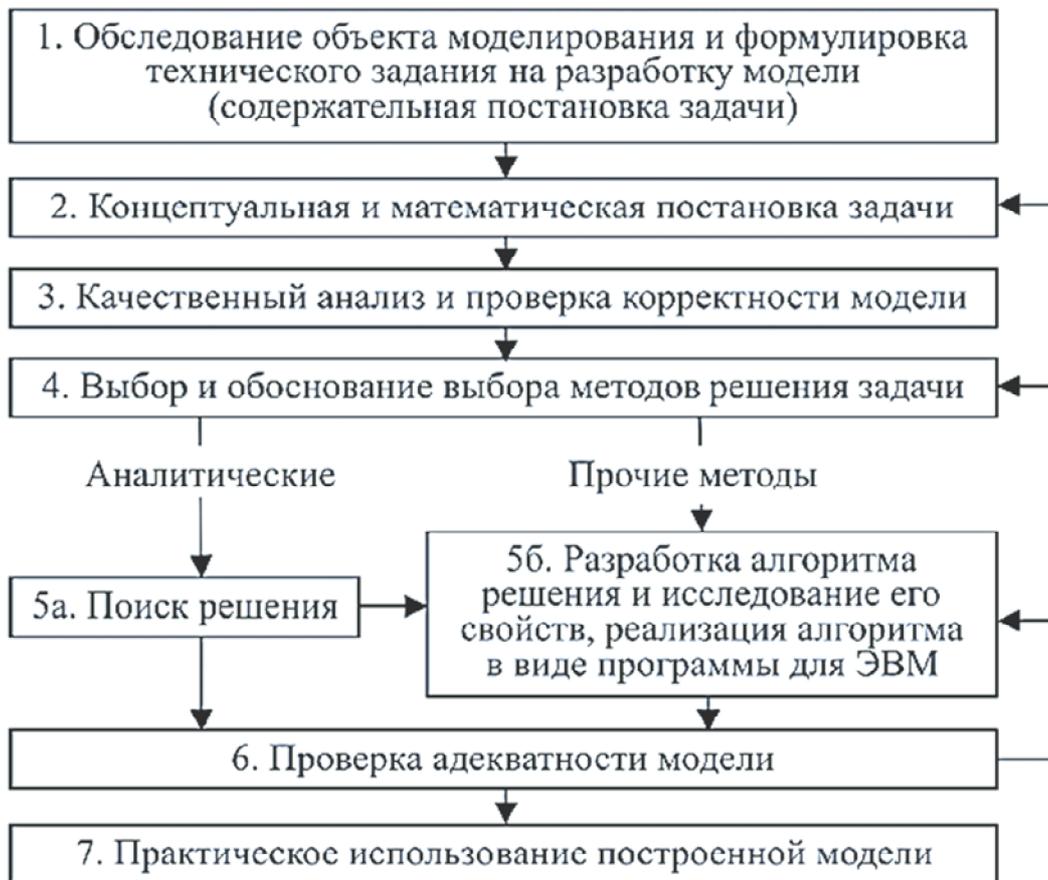


Рис. 1.24. Этапы построения математической модели

В качестве элементов такие системы включают как детали, инструменты, средства оснащения, измерения и другие объекты, так и реакции, явления, эффекты и другие элементарные процессы. Все это соответствует такому общему понятию, как *система* – совокупность определенным образом упорядоченных элементов. Взаимосвязанные и взаимодействующие между собой и внешней средой элементы объединяются в единое целое по некоторым общим признакам. Сущность системы и ее функций невозможно понять, рассматривая только свойства ее отдельных элементов и не учитывая их внутренних связей и взаимодействия с окружающей средой.

Системный подход к исследованию и описанию технологических процессов основан на декомпозиции системы на более простые подсистемы, взаимодействующие между собой, в отдельном изучении их структуры и функций с последующим синтезом полученных сведений. При синтезе учитываются выявленная иерархия процессов по масштабам области действия, их пространственное расположение и временная последовательность, а также *синергетические эффекты*,

общее действие которых превышает кажущуюся сумму отдельно взятых воздействий.

Составляющие сложный процесс элементарные явления протекают в областях, масштабы которых различаются от низшего (уровень атомов и молекул) до высшего (уровень технологической системы, участка или производства). Эта особенность находит отражение в иерархической структуре модели, которую целесообразно строить путем последовательного перехода в описании процесса с одного уровня на другой [1, 65].

*Атомный* или *молекулярный уровень* описывает физико-химические процессы микрокинетики, протекающие в областях, имеющих масштаб расстояний между атомами. *Уровень частиц* малого объема описывает процессы в масштабе отдельных включений, фаз, структур и тому подобного для неоднородной (негомогенной) технологической среды. Эти два уровня должны дополняться явлениями макрокинетики: тепло- и массопереноса, упругости и пластичности в однородной (гомогенной) среде с изотропными и анизотропными свойствами.

*Уровень рабочей зоны технологической системы* описывает процессы в областях, размеры которых соответствуют крупным агрегатам частиц: зонам термического влияния, деформации, диффузии, оплавления и т. п. Этот уровень учитывает характер движения потоков вещества и энергии. *Уровень технологической системы* (процесса и установки) учитывает взаимное расположение и размеры рабочих зон и элементов системы, последовательность технологических воздействий.

Кроме того, различные виды воздействий имеют свой структурный уровень эффектов и явлений. Так, для деформационных процессов используются структурные уровни, описывающие иерархию от молекулярного масштаба до размеров малых частиц разрушения.

Модель каждого уровня содержит в свернутом виде модели более низких уровней и соотношения, описывающие переход с одного уровня на другой.

Системный подход позволяет анализировать и моделировать технологический процесс, представленный в виде отдельных блоков, что существенно упрощает описание сложных явлений, не упуская из вида пространственно-временную структуру моделируемой системы, характер связи между отдельными уровнями и подсистемами.

Создаваемая модель  $\mathbf{M}$  с точки зрения системного подхода тоже является системой, т. е.  $S' - S''(\mathbf{M})$ , и может рассматриваться по от-

ношению к внешней среде  $E$ . Наиболее просты если сравнить модели, в которых сохраняется прямая аналогия явления. Применяют также модели, в которых нет прямой аналогии, а сохраняются лишь законы и общие закономерности поведения элементов системы  $S$ . Правильное понимание взаимосвязей как внутри самой модели  $M$ , так и взаимодействия ее с внешней средой  $E$  в значительной степени определяется тем, на каком уровне находится наблюдатель.

Рассмотрим различия между классическим и системным подходами.

**Классический (индуктивный) подход** к синтезу модели предусматривает изучение взаимосвязей между отдельными частями модели путем рассмотрения их в качестве отражения связей между отдельными подсистемами объекта. Такой классический подход может быть использован при создании достаточно простых моделей.

Процесс синтеза модели  $M$  на основе классического подхода представлен на рис. 1.25. Реальный объект, подлежащий моделированию, разбивается на отдельные подсистемы, т. е. выбираются исходные данные  $D$  для моделирования и ставятся цели  $C$ , отображающие отдельные стороны процесса моделирования. По отдельной совокупности исходных данных  $D$  ставится цель моделирования отдельной стороны функционирования системы, на базе этой цели формируется некоторая компонента  $K$  будущей модели. Совокупность компонент объединяется в модель  $M$ .

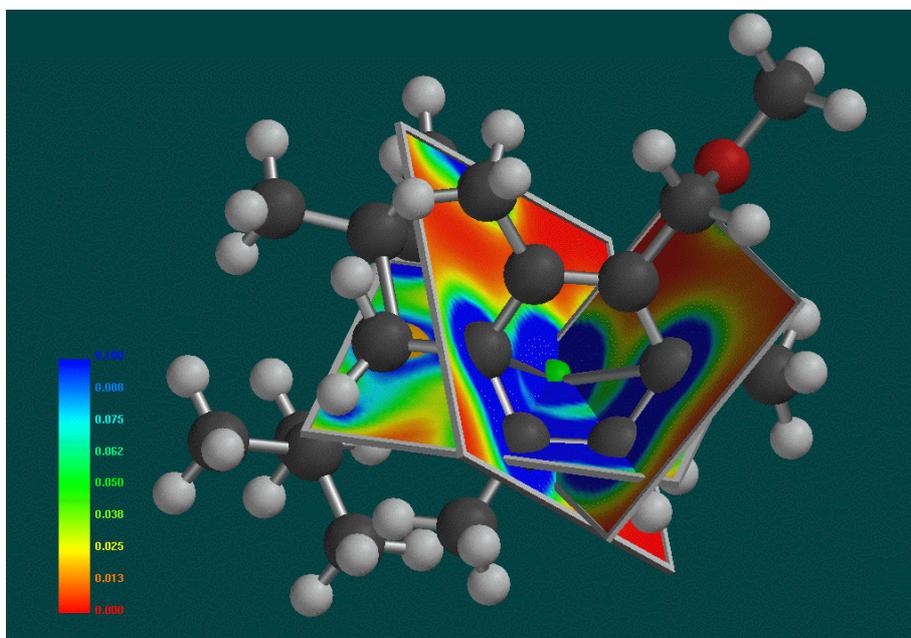


Рис. 1.25. Цветовая картина кодирования параметров атомарного состояния химически реагирующих веществ

Таким образом, разработка модели  $M$  на базе классического подхода означает суммирование отдельных компонент в единую модель, причем каждая из компонент решает свои собственные задачи и изолирована от других частей модели. Поэтому *классический подход может быть использован для реализации сравнительно простых моделей*. Для них возможно разделение и взаимно независимое рассмотрение отдельных сторон функционирования реального объекта.

Для модели сложного объекта такая разобщенность решаемых задач недоступна, так как приводит к значительным затратам ресурсов при реализации модели на базе конкретных программно-технических средств. Можно отметить следующие отличительные стороны классического подхода: наблюдается движение от частного к общему, создаваемая модель (система) образуется путем суммирования отдельных ее компонент и не учитывается возникновение нового системного эффекта.

С усложнением объекта моделирования возникает необходимость наблюдения их с более высокого уровня. В этом случае наблюдатель (разработчик) рассматривает систему  $S$  как некоторую подсистему какой-то метасистемы, т. е. системы более высокого ранга, и вынужден перейти на позиции системного подхода, который позволит ему построить не только исследуемую систему, решающую совокупность задач, но и создавать систему, являющуюся составной частью метасистемы.

*Системный подход* (рис. 1.26) наиболее эффективен при исследовании сложных реальных технических систем производства, когда сказывается недостаточность, и часто ошибочность принятия каких-либо частных решений [8, 65].

Возникновение системного подхода обусловило увеличивающееся количество исходных данных при разработке, а также необходимость учета стохастических связей в системе и воздействий внешней среды  $E$ .

Системный подход позволяет решить проблему построения сложной системы с учетом всех факторов и возможностей, пропорциональных их значимости, на всех этапах исследования системы  $S$  и построения модели  $M$ . Системный подход означает, что каждая система  $S$  является интегрированным целым даже тогда, когда она состоит из отдельных разобщенных подсистем. Таким образом, *в основе системного подхода лежит рассмотрение системы как интегрированного целого, причем это рассмотрение при разработке начинается с главного – формулировки цели функционирования*.



Рис. 1.26. Структура принципов системного подхода

Процесс синтеза модели  $M$  на базе системного подхода условно представлен на рис. 1.27, б. На основе исходных данных  $D$ , которые известны из анализа внешней среды, тех ограничений, которые накладываются на систему сверху либо исходя из возможностей ее реализации, и на основе цели функционирования  $C$  формулируются исходные требования  $T$  к модели системы  $S$ . На базе этих требований формируются ориентировочно некоторые подсистемы  $\Pi$ , элементы  $\mathcal{E}$  и осуществляется наиболее сложный этап синтеза – выбор составляющих системы, для чего используются специальные критерии выбора  $KB$ .

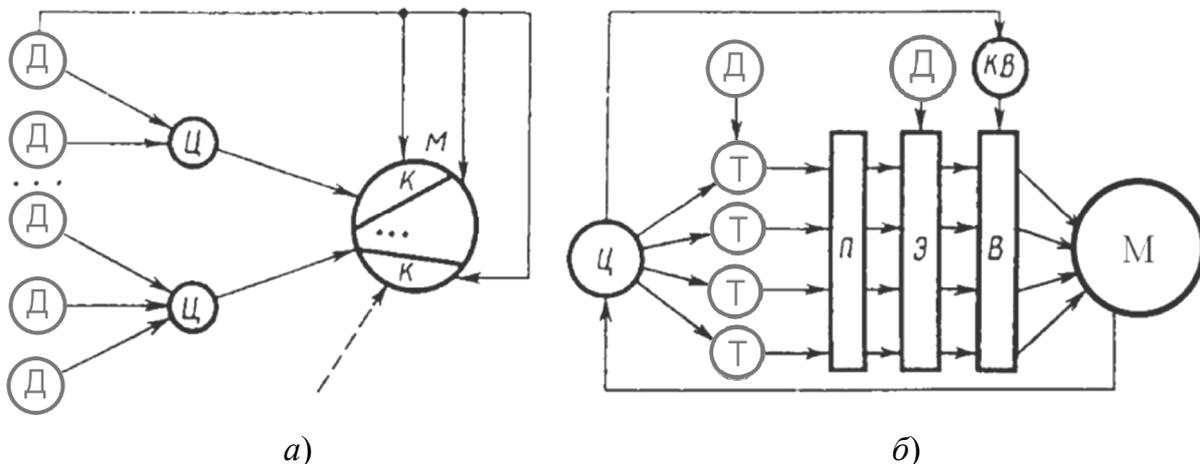


Рис. 1.27. Процесс синтеза модели на основе классического (а) и системного (б) подходов

При моделировании необходимо обеспечить максимальную эффективность модели системы. Эффективность обычно определяется как некоторая разность между какими-то показателями ценности результатов, полученных в итоге эксплуатации модели, и теми затратами, которые были вложены в ее разработку и создание.

Системный подход предполагает и некоторую последовательность разработки моделей, заключающуюся в выделении двух основных стадий проектирования: *макропроектирование* и *микропроектирование*.

*Стадия макропроектирования* – на основе данных о реальной системе  $S$  и внешней среде  $E$  строится модель внешней среды, выявляются ресурсы и ограничения для построения модели системы, выбираются модель системы и критерии, позволяющие оценить адекватность модели  $M$  реальной системы  $S$ . Построив модель системы и модель внешней среды, на основе критерия эффективности функционирования системы в процессе моделирования выбирают оптимальную стратегию управления, что позволяет реализовать возможность модели по воспроизведению отдельных сторон функционирования реальной системы  $S$ .

*Стадия микропроектирования* в значительной степени зависит от конкретного типа выбранной модели. В случае имитационной модели необходимо обеспечить создание информационного, математического, технического и программного обеспечения системы моделирования. На этой стадии можно установить основные характеристики созданной модели, оценить время работы с ней и затраты ресурсов для получения заданного качества соответствия модели процессу функционирования системы  $S$ .

Независимо от типа используемой модели  $M$  при ее построении необходимо руководствоваться рядом принципов системного подхода:

- пропорционально-последовательное продвижение по этапам и направлениям создания модели;
- согласование информационных, ресурсных, надежности и других характеристик;
- правильное соотношение отдельных уровней иерархии в системе моделирования;
- целостность отдельных обособленных стадий построения модели.

Модель  $M$  должна отвечать заданной цели ее создания, поэтому отдельные части должны компоноваться взаимно, исходя из единой

системной задачи. Цель должна быть сформулирована качественно, тогда она будет обладать большей содержательностью и длительное время может отображать объективные возможности системы моделирования. При количественной формулировке цели возникает целевая функция, которая точно отображает наиболее существенные факторы, влияющие на достижение цели.

Построение модели относится к числу системных задач, при решении которых синтезируют решения на базе огромного числа исходных данных на основе предложений больших коллективов специалистов. Использование системного подхода в этих условиях позволяет построить модель реального объекта. На базе этой модели можно выбрать необходимое количество управляющей информации в реальной системе, оценить показатели ее функционирования и тем самым на базе моделирования найти наиболее эффективный вариант построения и выгодный режим функционирования реальной системы  $S$ .

После построения модели следующая проблема – это проблема работы с ней, т. е. реализация модели, основные задачи которой состоят в минимизации времени получения конечных результатов и обеспечения их достоверности.

Характеризуя проблему моделирования в целом, необходимо учитывать, что между постановкой задачи моделирования и интерпретацией полученных результатов существует большая группа сложных научно-технических проблем, к основным из них можно отнести следующие:

- идентификацию реальных объектов;
- набор вида моделей;
- построение моделей и их машинную реализацию;
- взаимодействие исследователя с моделью в ходе машинного эксперимента;
- проверку правильности полученных в ходе моделирования результатов;
- выявление основных закономерностей, исследованных в процессе моделирования.

В зависимости от объекта моделирования и вида используемой модели эти проблемы могут иметь разную значимость.

В одних случаях наиболее сложной оказывается идентификация, в других – проблема построения формальной структуры объекта. Возможны трудности и при реализации модели, особенно в случае имитационного моделирования больших систем. При этом следует

подчеркнуть роль исследователя в процессе моделирования. *Постановка задачи, построение содержательной модели реального объекта во многом представляют собой творческий процесс и базируются на эвристике.* В этом смысле нет формальных путей выбора оптимального вида модели. Часто отсутствуют формальные методы, позволяющие достаточно точно описать реальный процесс. Поэтому выбор той или иной аналогии, выбор того или иного математического аппарата моделирования полностью основывается на имеющемся опыте исследователя, и ошибка исследователя может привести к ошибочным результатам моделирования.

#### **1.4. Способы получения и характеристика основных критериев подобия**

Применение математического анализа при исследовании физических явлений не всегда оказывается эффективным. В основном удается дать только математическую формулировку задачи, т. е. составить дифференциальные уравнения, описывающие рассматриваемое явление, и сопоставить условия однозначности, исходящие из целого класса явлений, охватываемых дифференциальными уравнениями [6, 22].

В таких сложных случаях приходится обращаться к эксперименту и находить связь между характеризующими явление величинами в форме эмпирического уравнения, составленного на основе данных единичного опыта. Полученная в этом случае эмпирическая зависимость справедлива только для рассмотренного конкретного случая и произвольное распространение ее на другие случаи, отличающиеся от изученного на опыте, неправомерно.

Метод обработки данных опыта основан на теории подобия явлений, которая изучает свойства заранее подобных систем и позволяет из дифференциальных уравнений и условий однозначности сформулировать некоторые выводы, не прибегая к интегрированию. На основе полученных выводов возможна и математическая обработка данных опыта, охватывающая все подобные явления. Так устанавливаются пределы распространения единичного опыта.

Подобие двух явлений обеспечивается, если они протекают в геометрически подобных условиях и, если безразмерные уравнения, описывающие их, тождественно одинаковы. Это позволяет путем простого перечисления определить параметры одного явления на основе параметров другого. Основное свойство подобия явлений за-

ключается в существовании и равенстве безразмерных комплексов, составленных из характеризующих величин и называемых числами или критериями подобия [14].

Критерии (числа) подобия принято называть именами ученых, работавших в соответствующей области науки, и обозначать двумя начальными буквами их фамилий, например **Ne** (Ньютон), **Re** (Рейнольдс), **Eu** (Эйлер), **Nu** (Нуссельт) или просто заглавными буквами **K**.

Если любой характерный размер модели  $r_m = r''$  отличается от соответствующего характерного размера образца в  $r_{об} = r'$ , то величина определяется как:

$$\frac{r''}{r'} = c_r. \quad (1.1)$$

Она представляет собой линейный масштаб моделирования.

Здесь длина представлена безразмерным числом. Измеряемые таким способом величины называются величинами, выраженными в относительных единицах, или, если речь идет о координатной системе, в относительных координатах.

Уравнение (1.1) содержит безразмерные величины (безразмерные параметры или безразмерные комплексы), под которыми подразумеваются любые величины, физические постоянные или любые комбинации или комплексы, образованные так, чтобы все размерности сократились.

В безразмерной величине сумма показателей степеней равна нулю. Например, отношение удельных теплоемкости  $k$  имеет следующую размерность  $k = C_p/C_v$ , т. е.  $(\text{кДж} \cdot \text{кг}^{-1}\text{T}^{-1})/(\text{кДж} \cdot \text{кг}^{-1}\text{T}^{-1}) = 1$ .

Для превращения в безразмерные переменные используют операцию, называемую нормализацией. В нашем случае это операция преобразования уравнений и предельных условий к безразмерному виду, содержащему безразмерные переменные.

Критерии подобия можно получить для любого физического явления двумя способами: способом интегральных аналогов (если известно уравнение процесса); способом, основанном на  **$\pi$ -теореме**. В последнем случае необходимо достаточно знать параметры процесса [14].

Способ интегральных аналогов основан на свойстве физических уравнений – одинаковой размерности всех членов.

Числа подобия в этом случае находят в такой способ.

Пусть есть два одинаковых уравнения, описывающих физический процесс в реальности (или еще говорят в натуре) (Н) и на модели (М):

$$\begin{aligned}\varphi_{1H} + \varphi_{2H} + \dots + \varphi_{nH} &= 0; \\ \varphi_{1M} + \varphi_{2M} + \dots + \varphi_{nM} &= 0,\end{aligned}\tag{1.2}$$

где  $\varphi$  – однородная функция параметров элементов системы.

Уравнения натуральной и моделируемой системы в результате деления на один из членов приводятся к безразмерному виду:

$$\begin{aligned}1 + \frac{\varphi_{2H}}{\varphi_{1H}} + \frac{\varphi_{3H}}{\varphi_{1H}} + \dots + \frac{\varphi_{nH}}{\varphi_{1H}} &= 0; \\ 1 + \frac{\varphi_{2M}}{\varphi_{1M}} + \frac{\varphi_{3M}}{\varphi_{1M}} + \dots + \frac{\varphi_{nM}}{\varphi_{1M}} &= 0.\end{aligned}\tag{1.3}$$

После этого в этих уравнениях опускают символы интегрирования и дифференцировки (если уравнения интегральные или дифференциальные), исключают имеющиеся неоднородные функции. Полученные комплексы считаются основными критериями подобия:

$$\pi_1 = \frac{\varphi_{2H}}{\varphi_{1H}} = \frac{\varphi_{2M}}{\varphi_{1M}}; \pi_2 = \frac{\varphi_{3H}}{\varphi_{1H}} = \frac{\varphi_{3M}}{\varphi_{1M}}; \dots; \pi_{n-1} = \frac{\varphi_{nH}}{\varphi_{1H}} = \frac{\varphi_{nM}}{\varphi_{1M}}.\tag{1.4}$$

Если в уравнении имеются неоднородные функции, то  $(n-1)$ -му числу необходимо добавить еще числа-аргументы неоднородных функций.

Рассмотрим такой способ нахождения критериев подобия на примере двух гидродинамически подобных потоков из условий тождества уравнений. Если записать уравнение Навье–Стокса в безразмерном виде, эти уравнения окажутся совсем идентичными.

Приведем к безразмерному виду уравнение Навье–Стокса, записанное для одномерного потока в виде:

$$\rho \frac{\partial w}{\partial t} + \rho \left( w \frac{\partial w}{\partial x} \right) = X - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) + \frac{1}{3} \mu \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial w}{\partial x} \right).\tag{1.5}$$

Для этого сначала все величины, входящие в уравнение, выразим в долях соответствующих величин для потока вдали от тела и характерных значений времени и размера:

$$\begin{aligned}
\frac{w_\infty}{t_0} \cdot \frac{\partial \frac{w}{w_\infty}}{\partial \frac{t}{t_0}} + \frac{w_\infty^2}{l} \left[ \frac{w \frac{\partial \frac{w}{w_\infty}}{\partial \frac{x}{l}}}{w_\infty \frac{\partial \frac{x}{l}}{\partial \frac{x}{l}}} \right] = \frac{X}{\rho} - \frac{p_\infty \rho_\infty}{l \rho_\infty \rho} \cdot \frac{\partial \frac{p}{p_\infty}}{\partial \frac{x}{l}} + \\
+ \frac{\mu_\infty w_\infty \rho_\infty \mu}{\rho_\infty l^2 \rho \mu_\infty} \left\{ \left[ \frac{\partial^2 \frac{w}{w_\infty}}{\partial \left( \frac{x}{l} \right)^2} \right] + \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial \frac{x}{l}} \left[ \frac{\partial \frac{w}{w_\infty}}{\partial \frac{x}{l}} \right] \right\},
\end{aligned} \tag{1.6}$$

а потом разделим на величину  $w^2/l$ , пропорциональную силе инерции для единицы массы:

$$\begin{aligned}
\frac{l}{t_0 w_\infty} \cdot \frac{\partial \frac{w}{w_\infty}}{\partial \frac{t}{t_0}} + \frac{w}{w_\infty} \cdot \frac{\partial \frac{w}{w_\infty}}{\partial \frac{x}{l}} = \frac{gl}{w_\infty^2} - \frac{p_\infty}{\rho_\infty w_\infty^2} \cdot \frac{\rho_\infty}{\rho} \cdot \frac{\partial \frac{p}{p_\infty}}{\partial \frac{x}{l}} + \\
+ \frac{\mu_\infty}{\rho_\infty w_\infty l} \cdot \frac{\rho_\infty \mu}{\rho \mu_\infty} \left\{ \left[ \frac{\partial^2 \frac{w}{w_\infty}}{\partial \left( \frac{x}{l} \right)^2} \right] + \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial \frac{x}{l}} \left[ \frac{\partial \frac{w}{w_\infty}}{\partial \frac{x}{l}} \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{1.7}$$

Здесь принято, что массовая сила  $X$  представляет собой силу земного тяготения, т. е.  $X/p = g$ .

Из уравнения (1.7) видно, что безразмерное уравнение Навье-Стокса содержит следующие безразмерные комплексы:

$$\frac{l}{t_0 w_\infty}, \frac{gl}{w_\infty^2}, \frac{p}{\rho_\infty w_\infty^2}, \frac{\mu}{\rho_\infty l w_\infty}.$$

Очевидно, что для геометрически и кинематически подобных потоков безразмерные уравнения движения будут одинаковы в том случае, если каждый из этих комплексов имеет такое же значение для образца и модели и если в подобных точках этих потоков относительные значения плотности и вязкости одинаковы:

$$\left. \begin{aligned} \frac{l_M}{t_{0M} w_{\infty M}} = \frac{l_H}{t_{0H} w_{\infty H}} = \text{Sh}; \quad \frac{gl_M}{w_{\infty M}^2} = \frac{gl_H}{w_{\infty H}^2} = \frac{1}{\text{Fr}}; \\ \frac{p_{\infty M}}{\rho_{\infty M} w_{\infty M}^2} = \frac{p_{\infty H}}{\rho_{\infty H} w_{\infty H}^2} = \text{Eu}; \\ \frac{\mu_{\infty M}}{\rho_{\infty M} l_{\infty M} w_{\infty M}^2} = \frac{\mu_{\infty H}}{\rho_{\infty H} l_{\infty H} w_{\infty H}^2} = \frac{1}{\text{Re}}. \end{aligned} \right\} \quad (1.8)$$

Безразмерные комплексы (1.7) являются, таким образом, критериями динамического подобия геометрически и кинематически подобных систем.

В несжимаемой жидкости число Эйлера не является определяющим, потому что как характерное давление  $p$  можно взять динамическое давление  $\rho w^2/2$ , и тогда  $Eu$  является постоянной.

Поскольку безразмерные комплексы  $Re$ ,  $Fr$ ,  $Sh$ ,  $Eu$  в своем составе обладают скоростью  $v$ , то они обладают свойством взаимозаменяемости, в связи с чем их можно умножать или делить друг на друга, получая при этом новые критерии. Есть и другие критерии, относящиеся к отдельным случаям – число Архимеда, число Прандтля и другие. Для среды переменной плотности в уравнение Навье–Стокса стоит включить объемные силы Архимеда. Безразмерный множитель в идеальном газе имеет вид:

$$\text{Ar} = \frac{\Delta T_0}{T_\infty} \cdot \frac{1}{\text{Fr}}, \quad (1.9)$$

где  $\Delta T_0 = T_h - T_{\text{ст}}$ , а  $T_h$  и  $T_{\text{ст}}$  – температура набегающего потока (вдали от тела) и стенки. Величину  $Ar$  называют числом Архимеда. Оно имеет значение для гидродинамического подобия в том случае, когда перепады температур в газовом потоке велики, а скорости малы. Как видим, число Архимеда можно получить в результате деления относительного перепада температур на число Фруда  $Fr$ .

В общем случае:

$$\text{Ar} = \frac{gl}{w^2} \beta \Delta T_0 = \frac{g\beta \Delta T_0 l^3}{v^2} \cdot \frac{v^2}{w_\infty^2 l^2} = \frac{\text{Gr}}{\text{Re}^2}, \quad (1.10)$$

где  $\beta$  – коэффициент объемного расширения.

Безразмерную величину

$$\text{Gr} = \frac{g\beta\Delta T_0 l^3}{\nu^2}, \quad (1.11)$$

которая является отношением силы Архимеда к силе вязкости, называют числом Грасгофа. Следовательно, для выполнения условий гидродинамического подобия нужно, чтобы у модели значение числа Рейнольдса:

$$\text{Re} = \frac{wl}{\nu} \quad (1.12)$$

и числа Грасгофа были такими же, как и в физической модели.

Для газовых потоков (в сжатой среде) должно соблюдаться также равенство числа Маха  $\text{Ma} = w/a$  и отношение теплоемкости  $k = C_p/C_v$ , где  $a$  – скорость звука.

Точная реализация условия (1.11) обычно бывает затруднена. Выполнение ее облегчается благодаря стабильности некоторых турбулентных потоков. Сущность стабильности состоит в том, что на некотором расстоянии от входа в канал или вообще в какой-либо аппарат влияние распределения скоростей во входном сечении становится исчезающим малым и устанавливается распределение скоростей, характерное для геометрической конфигурации рассматриваемого аппарата. Расстояние, которое должен пройти поток от входного сечения до места, где поток можно считать стабилизированным, зависит от геометрической конфигурации аппарата. Чем она сложнее, чем больше поворотов, внезапных расширений и т. п. местных сопротивлений, тем скорее наступает стабилизация течения, характеризующаяся вполне определенным распределением скоростей. Определенному распределению скоростей соответствуют вполне определенные средние значения скорости в любом сечении потока. При этом, разумеется, нет необходимости измерять поля скоростей в указанных сечениях. Достаточно измерить расход жидкости до входа в модель и затем определить среднюю скорость из-за объемного расхода жидкости и площади соответствующего сечения [1, 14].

Условия моделирования еще больше упрощаются для режима автомодели. Этот режим характеризуется малым влиянием сил трения по сравнению с силами давления и инерции. Прямым признаком автомодельности является подобие полей скорости и давлений в одной

и той же модели при разных значениях  $Re$ . Другими словами, подобие вязкостного, а также инерционного течения снабжаются одним лишь подобием распределения скоростей и давлений. Это свойство инерционного и вязкостного принято называть автомодельностью. О наступлении автомодели судят по опытам, когда, начиная с некоторого значения  $Re$ , критерий  $Eu$  не зависит от  $Re$ . Автомодель представляет исследователю неоспоримые удобства, позволяя проводить эксперименты на модели любых размеров и с любой рабочей жидкостью. Важно только, чтобы модель и образец работали в автомодели (приближенное моделирование) [1, 14].

Метод анализа размерностей применяется в том случае, если неизвестны уравнения, определяющие изучаемый процесс. Этот метод позволяет обработать, а затем обобщить данные, полученные опытным путем. Все физические величины, входящие в определяющее уравнение и являющиеся существенными для изучаемого процесса, делятся на две группы. К первой группе относятся величины, размерности которых являются первичными (базовыми): масса, длина, время и температура. Из таких величин нельзя образовать безразмерные комплексы. Во вторую группу входят величины, размерности которых komponуются из размерностей базовых величин: площадь, объем, скорость, ускорение, давление и т. д. Величины этой группы позволяют составлять при разных комбинациях безразмерные комплексы – числа подобия (критерии). Связь между числами физических параметров первой и второй группы, характеризующих течение процесса, позволяет установить  ***$\pi$ -теорема*** – основа теории метода анализа размерностей: ***совокупность из  $n$  размерных величин, единицы, измерения которых включают  $k$  основных величин, можно преобразовать без изменения имеющейся в ней информации в совокупность, содержащую  $n-k$  безразмерных величин*** [14, 18].

Таким образом, метод анализа размерностей позволяет находить числа подобия при отсутствии математического описания изучаемого явления. Для этого нужно только точно установить характеристики, от которых зависит явление. Однако следует отметить, что для полной уверенности в справедливости результатов выполненного анализа необходимо проведение дополнительной проверки. Значимость получаемых результатов будет зависеть от глубины проникновения в сущность изучаемого вопроса и от опыта практического использования теоретических положений.

Как простейший пример приведения совокупности к безразмерному виду и нахождению соответствующих критериев подобия рас-

смотрим систему, состоящую из подвешенного на пружине груза, приводимого в движение внешней силой (рис. 1.28).

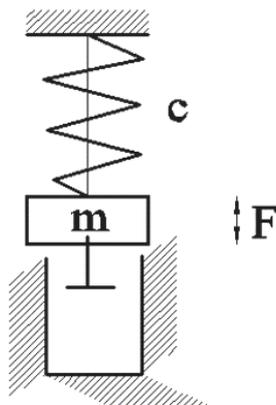


Рис. 1.28. Колебательная система с демпфированием подвешенного к пружине груза

В данном случае мы будем использовать достаточно простой и интуитивно понятный пример системы.

Согласно рис. 1.28 груз массой  $m$  колеблется на пружине жесткостью  $c$  в вязкой среде, сила сопротивления которой  $F_k = -kv$ . На груз действует возмущающая сила  $F_0 \sin(\omega t)$ . Перемещение груза  $x$  является функцией этих величин и времени  $t$ :

$$x = f(m, k, \omega, F_0, c, t). \quad (1.13)$$

Размерность данных величин:  $x$  (м) – перемещение груза;  $m$  (кг) – масса груза;  $k$  (кг/с) – коэффициент сопротивления среды;  $t$  (с) – время;  $\omega$  (1/с) – частота колебаний;  $F_0$  (кг · м/с<sup>2</sup>) – возмущающая сила;  $c$  (кг/с<sup>2</sup>) – жесткость пружины.

Согласно методу нулевых размерностей необходимо выбрать по числу основных единиц такое же число параметров из записанной совокупности, для которых определитель, составленный из показателей степеней основных единиц, не был бы равен нулю.

В нашем случае есть три основные единицы – м, кг, с. Из приведенной совокупности параметров выберем три – такими параметрами могут быть  $m$ ,  $\omega$ ,  $F_0$ . Размерности обозначим следующим образом: кг –  $M$ , м –  $L$ , с –  $T$ .

Произведем замену размерностей выбранных параметров  $m$ ,  $\omega$ ,  $F_0$  с помощью произведения основных размерностей в соответствующих степенях:

$$[m] = [M]^1 \cdot [L]^0 \cdot [T]^0; [\omega] = [M]^0 \cdot [L]^0 \cdot [T]^{-1}; [F_0] = [M]^1 \cdot [L]^1 \cdot [T]^{-2}.$$

Составим определитель по этим степеням, который при подсчетах не должен равняться нулю:

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & -2 \end{vmatrix} = 1 \neq 0.$$

Число величин, характеризующих этот процесс, равно семи, ранг матрицы равен трем. Поэтому, согласно  $\pi$ -теореме, число безразмерных комплексов, характеризующих этот процесс, определяется как разница между общим числом параметров и их основным количеством, т. е. количество безразмерных комплексов в нашем случае будет равно  $7 - 3 = 4$ .

Следовательно, уравнение (1.12) можно выразить следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{x}{m^{\alpha_x} \cdot \omega^{\beta_x} \cdot F_0^{\gamma_x}} = \\ & = \Phi \left( \frac{k}{m^{\alpha_k} \cdot \omega^{\beta_k} \cdot F_0^{\gamma_k}}; \frac{c}{m^{\alpha_c} \cdot \omega^{\beta_c} \cdot F_0^{\gamma_c}}; \frac{t}{m^{\alpha_t} \cdot \omega^{\beta_t} \cdot F_0^{\gamma_t}} \right) \end{aligned} \quad (1.14)$$

или в общем виде оно может быть представлено как совокупность критериев:

$$\pi_1 = \Phi(\pi_2, \pi_3, \pi_4). \quad (1.15)$$

Значения  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  для каждого из критериев находятся из условия, что размерность каждого критерия равна единице.

Для первого члена критериальной функции размерности, входящих в его величины записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{[x]}{[m]^{\alpha_x} \cdot [\omega]^{\beta_x} \cdot [F_0]^{\gamma_x}} = \\ & = \frac{[L]}{[M]^{\alpha_x} \cdot [T^{-1}]^{\beta_x} \cdot ([M] \cdot [L] \cdot [T]^{-2})^{\gamma_x}} = \\ & = [M]^{-\alpha_x - \gamma_x} \cdot [T]^{\beta_x + 2\gamma_x} \cdot [L]^{1 - \gamma_x} = 1. \end{aligned}$$

Если произведение размерностей в соответствующих степенях равно единице, то предполагаем, что и каждая размерность также равна 1, т. е.  $[M]^{-\alpha_x - \gamma_x} = 1$ ,  $[T]^{\beta_x + 2\gamma_x} = 1$  и  $[L]^{1 - \gamma_x} = 1$ . Из курса высшей математики известно, что если число, возведенное в некоторую степень, равно единице, то сама степень должна быть равна нулю. Согласно этому мы можем из степеней размерностей составить систему из трех уравнений:

$$\begin{cases} -\alpha_x - \gamma_x = 0; \\ \beta_x + 2\gamma_x = 0; \\ 1 - \gamma_x = 0. \end{cases}$$

Откуда находим  $\gamma_x = 1$ ,  $\alpha_x = -1$ ,  $\beta_x = -2$ .

Проверку размерностей найденного критерия осуществляем следующим образом:

$$[\pi_1] = \frac{[x]}{[m]^{-1} \cdot [\omega]^{-2} \cdot [F_0]^1} = \frac{[L]}{[M]^{-1} \cdot [T^{-1}]^{-2} \cdot ([M] \cdot [L] \cdot [T]^{-2})^1} = 1.$$

Согласно полученным степеням  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  критерий  $\pi_1$  будет иметь вид:

$$\pi_1 = \frac{x m \omega^2}{F_0}. \quad (1.16)$$

Аналогично находим и другие критерии. Так, для другого члена критериальной функции размерности, содержащих его величины, можно записать:

$$\begin{aligned} & \frac{[k]}{[m]^{\alpha_k} \cdot [\omega]^{\beta_k} \cdot [F_0]^{\gamma_k}} = \\ & = \frac{[M] \cdot [T]^{-1}}{[M]^{\alpha_k} \cdot [T^{-1}]^{\beta_k} \cdot ([M] \cdot [L] \cdot [T]^{-2})^{\gamma_k}} = \\ & = [M]^{1 - \alpha_k - \gamma_k} \cdot [T]^{-1 + \beta_k + 2\gamma_k} \cdot [L]^{-\gamma_k} = 1. \end{aligned}$$

$$\begin{cases} 1 - \alpha_k - \gamma_k = 0; \\ -1 + \beta_k + 2\gamma_k = 0; \\ -\gamma_k = 0. \end{cases}$$

Откуда находим  $\gamma_k = 0$ ,  $\alpha_k = 1$ ,  $\beta_k = 1$ .

Проверка размерностей критерия  $\pi_2$ :

$$[\pi_2] = \frac{[k]}{[m]^1 \cdot [\omega]^1 \cdot [F_0]^0} = \frac{[M] \cdot [T]^{-1}}{[M] \cdot [T]^{-1}} = 1.$$

Критерий  $\pi_2$  будет иметь вид:

$$\pi_2 = \frac{k}{m\omega}. \quad (1.17)$$

Для третьего члена критериальной функции размерности величин записываем следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{[c]}{[m]^{\alpha_c} \cdot [\omega]^{\beta_c} \cdot [F_0]^{\gamma_c}} = \\ & = \frac{[M] \cdot [T]^{-2}}{[M]^{\alpha_c} \cdot [T^{-1}]^{\beta_c} \cdot ([M] \cdot [L] \cdot [T]^{-2})^{\gamma_c}} = \\ & = [M]^{1-\alpha_c-\gamma_c} \cdot [T]^{-2+\beta_c+2\gamma_c} \cdot [L]^{-\gamma_c} = 1. \end{aligned}$$

$$\begin{cases} 1 - \alpha_c - \gamma_c = 0; \\ -2 + \beta_c + 2\gamma_c = 0; \\ -\gamma_c = 0. \end{cases}$$

Откуда находим  $\gamma_3 = 0$ ,  $\alpha_3 = 1$ ,  $\beta_3 = 2$ .

Проверка размерностей критерия  $\pi_3$ :

$$[\pi_3] = \frac{[c]}{[m]^1 \cdot [\omega]^2 \cdot [F_0]^0} = \frac{[M] \cdot [T]^{-2}}{[M] \cdot ([T]^{-1})^2} = 1.$$

Критерий  $\pi_3$  будет иметь вид:

$$\pi_3 = \frac{c}{m\omega^2}. \quad (1.18)$$

Размерность последнего (четвертого) члена критериальной функции запишем так:

$$\begin{aligned} & \frac{[t]}{[m]^{\alpha_t} \cdot [\omega]^{\beta_t} \cdot [F_0]^{\gamma_t}} = \\ & = \frac{[T]}{[M]^{\alpha_t} \cdot [T^{-1}]^{\beta_t} \cdot ([M] \cdot [L] \cdot [T]^{-2})^{\gamma_t}} = \\ & = [M]^{-\alpha_t - \gamma_t} \cdot [T]^{1 + \beta_t + 2\gamma_t} \cdot [L]^{-\gamma_t} = 1. \\ & \begin{cases} -\alpha_t - \gamma_t = 0; \\ 1 + \beta_t + 2\gamma_t = 0; \\ -\gamma_t = 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Откуда находим  $\gamma_t = 0$ ,  $\alpha_t = 0$ ,  $\beta_t = -1$ .

Проверка размерностей критерия  $\pi_4$ :

$$[\pi_3] = \frac{[c]}{[m]^1 \cdot [\omega]^2 \cdot [F_0]^0} = \frac{[M] \cdot [T]^{-2}}{[M] \cdot ([T]^{-1})^2} = 1.$$

Критерий  $\pi_4$  будет иметь вид:

$$\pi_3 = \frac{c}{m\omega^2}. \quad (1.19)$$

Уравнения (1.14) с учетом выражений (1.15)–(1.18) можно записать в виде:

$$\frac{xm\omega^2}{F_0} = \Phi\left(\frac{k}{m\omega}; \frac{c}{m\omega^2}; t\omega\right). \quad (1.20)$$

Следовательно, результаты эксперимента позволят определить взаимосвязь между указанными параметрами (критериями подобия), которая будет справедлива как для модели, так и для природы, а математическая формулировка этой связи будет иметь вид  $\pi_1 = \mathbf{idem}$ ,  $\pi_2 = \mathbf{idem}$ ,  $\pi_3 = \mathbf{idem}$ ,  $\pi_4 = \mathbf{idem}$  ( $\mathbf{idem}$  означает «соответственно одинаково для всех рассматриваемых процессов») [14, 18].

Большинство критериев подобия уже давно изучено достаточно подробно, и они описывают практически все возможные виды моделирования. Ниже приведены *основные критерии подобия, используемые в металлургии*, и кратко дана их характеристика:

1. Относительный линейный размер

$$L_i = \frac{l_i}{l} \quad (1.21)$$

характеризует любой линейный параметр системы  $l_i$ , в которой в качестве линейного параметра выбран параметр  $l$ .

2. Относительное время

$$T = \frac{\tau}{\tau_0} \quad (1.22)$$

определяет безразмерное время в системе, здесь  $\tau_0$  – параметрический промежуток времени.

3. Критерий гомохронности

$$Ho = \frac{\tau w}{l} \quad (1.23)$$

характеризует безразмерное время для систем, где не заданы параметрические отрезки времени.

4. Относительная скорость

$$W = \frac{w}{w_0} \quad (1.24)$$

отображает безразмерную скорость процессов с заданным параметрическим значением скорости.

5. Число Маха

$$Ma = \frac{w}{a} \quad (1.25)$$

– это критерий гидродинамического подобия движения сжимаемых газов со скоростями, сопоставимыми со скоростью звука ( $a$ ) в тех же точках.

6. Безразмерная скорость

$$W = \frac{w}{\sqrt{gl}} \quad (1.26)$$

характеризует меру отношения сил инерции и сил тяжести в однородном потоке газа или жидкости ( $g$  – ускорение свободного падения).

#### 7. Число Фруда

$$Fr = \frac{w^2}{gl} \quad (1.27)$$

применяется как безразмерная скорость для процессов, в которых существенна сила тяжести; это критерий гравитационного подобия, он характеризует отношение сил инерции и веса в однородном потоке.

#### 8. Относительная плотность

$$P = \frac{\rho}{\rho_0} \quad (1.28)$$

– это соотношение плотности взаимодействующих газов или жидкостей, а также твердых веществ для гетерогенных систем.

#### 9. Безразмерный объемный расход

$$V = \frac{v}{\sqrt{gl^5}} \quad (1.29)$$

– это безразмерная форма объемного расхода газа или жидкости для устойчивых процессов с существенным влиянием силы тяжести.

#### 10. Безразмерный массовый расход

$$M = \frac{m}{\rho \sqrt{gl^5}} \quad (1.30)$$

– это безразмерная форма массового расхода газа и жидкости для устойчивого движения с существенным влиянием силы тяжести.

#### 11. Число Архимеда

$$Ar = \frac{gl}{w^2} \cdot \frac{\rho_1}{\rho_2} \quad (1.31)$$

характеризует меру соотношения сил инерции и подъемной в движущейся жидкости или газе. Индексы 1 и 2 относятся к разным фазовым состояниям вещества.

## 12. Число Эйлера

$$Eu = \frac{\Delta p}{\rho w^2} \quad (1.32)$$

оценивает степень сил давления ( $p$ ) и инерции в потоке жидкости или газа.

## 13. Число Рейнольдса

$$Re = \frac{wl}{\nu} \quad (1.33)$$

характеризует степень соотношения сил инерции и вязкости (молекулярного трения) однородного потока, определяет также режим движения жидкости и газа (ламинарный или турбулентный). Тут  $\nu = \mu/\rho$  – кинематическая вязкость [18].

## 14. Безразмерный импульс потока

$$I = \frac{i}{\rho g l^3} \quad (1.34)$$

является мерой соотношения импульса ( $i$ ) и подъемной силы струи. Здесь  $i$  относится к газу,  $\rho$  – к жидкости.

## 15. Число Ньютона

$$Ne = \frac{\rho_1 w^2 l_1^2}{\rho_2 g l_2^3} \quad (1.35)$$

характеризует меру отношения количества движения струи к весу жидкости. Индексы 1 и 2 относятся, соответственно, к газу и жидкости.

## 16. Относительный импульс потока

$$I = \frac{\rho_1 v_1 w_1}{\rho_2 v_2 w_2} \quad (1.36)$$

является мерой соотношения импульсов потоков.

## 17. Число Галилея

$$Ga = \frac{gl^3}{\nu^2} = \frac{Re^2}{Fr} \quad (1.37)$$

является мерой соотношения сил тяжести и вязкости в однородном потоке.

#### 18. Безразмерная вязкость

$$N = \frac{\nu}{\sqrt{gl^3}} \quad (1.38)$$

– это критерий подобия процессов движения газа и жидкости, когда не задано параметрическое значение скорости.

#### 19. Критерий физических свойств жидкости

$$M = \frac{\mu^4 g}{\sigma^3 \rho} \quad (1.39)$$

характеризует степень соотношения свойств жидкости, влияющих на образование и движение пузырей, капель, брызг и других мелких частиц ( $\sigma$  – коэффициент поверхностного натяжения). Используется для выбора жидкостей модели для процессов в газожидкостных системах.

#### 20. Число Вебера

$$We = \frac{\sigma}{\rho gl^2} \quad (1.40)$$

характеризует соотношение линейных размеров свободных образований в жидкости (волдырей, капель и т. д.) и линейных размеров системы. Используется для выбора геометрического масштаба.

#### 21. Число Прандтля

$$Pr = \frac{\nu}{a} = \frac{Pe}{Re} \quad (1.41)$$

отражает степень подобия температурных и скоростных полей потока ( $\left(a = \frac{\lambda}{c\rho}\right)$  – температуропроводность). При  $Pr = 1$  поля температур и скоростей точно подобны друг другу.

#### 22. Число Пекле

$$Pe = \frac{wl}{a} = Re \cdot Pr \quad (1.42)$$

является степенью соотношения интенсивностей кондуктивного и конвективного переноса теплоты. Используется вместо  $Re$  при преобладании жидкости кондуктивного переноса теплоты.

### 23. Число Био

$$Bi = \frac{\alpha l}{\lambda} \quad (1.43)$$

характеризует степень соотношения интенсивностей переноса теплоты за счет конвекции ( $\alpha$ ) в газовой среде и теплопроводности ( $\lambda$ ) в омываемом им твердом теле. Является основным критерием подобия нестационарного теплообмена.

### 24. Число Грасгофа

$$Gr = \frac{gl^3}{\nu^2} \beta \Delta T \quad (1.44)$$

определяет степень соотношения силы тяжести, возникающей вследствие термического расширения жидкости (газа) и силы вязкости. Здесь  $\beta$  – коэффициент объемного расширения,  $\Delta t = t_{\text{пов}} - t_p$  при  $t_{\text{пов}} > t_p$  и  $\Delta t = t_p - t_{\text{пов}}$  при  $t_p > t_{\text{пов}}$ .

### 25. Число Фурье

$$Fo = \frac{\alpha \tau}{l^2} \quad (1.45)$$

характеризует безразмерную форму времени для нестационарного теплообмена (гомохронность процесса). Также определяет связь между скоростью смены температурного поля, физическими характеристиками и размерами тела.

### 26. Число Нуссельта

$$Nu = \frac{\alpha l}{\lambda_p} \quad (1.46)$$

– это мера соотношения интенсивности переноса теплоты конвекцией и теплопроводностью ( $\lambda_p$ ) в однородном потоке,  $Nu \neq Bi$ , потому что  $\lambda_p$  – теплопроводность жидкости.

### 27. Число Стентона

$$St = \frac{\alpha}{w_{cp}} \quad (1.47)$$

– это критерий конвективного переноса теплоты, характеризующий меру отношения интенсивности теплоотдачи и удельной теплоемкости потока. Применяется при  $Pr \ll 1$  та  $Re \rightarrow \infty$ .

### 28. Безразмерная температура

$$\Theta = \frac{t - t_0}{t_n - t_0} \quad (1.48)$$

– это форма безразмерной температуры. Здесь  $t_0$  – какая-нибудь параметрическая температура системы, принимаемая за нуль,  $t_n$  – еще одна параметрическая температура, например, начальная.

### 29. Безразмерная теплота фазового перехода

$$Q_\phi = \frac{q_\phi}{c\Delta T} \quad (1.49)$$

характеризует отношение теплоты фазового перехода к тепловой нагреву или охлаждению.

### 30. Число Лагранжа

$$La = \frac{\Delta p l}{\rho w v} = Eu \cdot Re \quad (1.50)$$

является мерой подобия для полей давления и скоростей. Характеризует связь между безразмерными полями давлений и скоростями данного канала.

### 31. Число Шмидта, или диффузное число Прандтля

$$Pr' = \frac{\nu}{D} \quad (1.51)$$

характеризует соотношение между силами вязкости и диффузии в процессе массообмена ( $D$  – коэффициент диффузии).

### 32. Число Шервуда или диффузное число Нуссельта

$$Nu' = \frac{\beta l}{D} \quad (1.52)$$

характеризует интенсивность массопередачи ( $\beta$  – коэффициент массообмена).

### 33. Диффузное число Пекле

$$Pe_D = \frac{wl}{D} \quad (1.53)$$

является мерой отношения распределения концентраций за счет конвекции в потоке к распределению концентраций за счет молекулярной диффузии.

Конечно же, приведенный перечень критериев подобия далеко не полон, однако с использованием приведенных методик, вышеуказанных чисел и критериев подобия можно произвести моделирование практически любых металлургических процессов.

При исследовании металлургических процессов часто возникает необходимость в моделировании достаточно сложных систем, описываемых большим числом величин. Конечно, для любых сложных процессов можно вывести условия точного подобия. Однако во многих случаях выполнить все требования точного подобия при моделировании оказывается невозможным. Особенно большие сложности возникают при моделировании таких процессов, как горение, тепломассообмен, продувка металлов газами и порошками, поскольку очень трудно воспроизвести на модели изменение объемов газов, их плотности при горении и нагревании, химических свойств реагентов и т. д.

В то же время для решения инженерных и научно-технических задач часто целесообразным оказывается выявление только основных, наиболее существенных факторов, включенных в безразмерные критерии.

Критерии моделирования можно разделить на три группы:

- 1) существенные;
- 2) вырожденные несущественные;
- 3) вырожденные формальные (несамостоятельные).

**Существенные.** Важны такие критерии, которые отражают соотношение между сопоставимыми физическими эффектами. Причем изменение их численного значения при неизменности любых других оказывает существенное влияние на значение безразмерной функции. Следует отметить обязательность равенства существенных критериев подобия образца и модели.

Понимание критериев как приблизительной степени соотношения интенсивности двух физических эффектов позволяет определить области вырождения влияния критериев по их числовым значениям. Бесконечное уменьшение и увеличение числового значения критерия указывает на несоизмеримость сравниваемых эффектов. Поэтому в этом случае влияние критериев на исследуемый процесс должно вырождаться.

Таким образом, **вырожденными** называются критерии, отражающие соотношение между несравнимыми эффектами. Любой критерий при его приближении к нулю или бесконечности вырождается.

Если изменение численного значения какого-либо критерия при неизменяемости других критериев данной системы практически не влияет на изменение безразмерных функций, то говорят о его незначительности и при моделировании нет необходимости обеспечивать равенство для модели и оригинала численных значений таких критериев. При этом необходимо и достаточно обеспечить совпадение областей этих критериев. **Незначительный** критерий может быть только в том случае, если несравненно мал по сравнению с другими (вырожденный) физический эффект входит только в этот критерий и не входит в другие.

В практике моделирования часто применяют понятие **автономности**, под которым понимают независимость изучаемого процесса от какого-либо безразмерного параметра в определенном интервале его изменения. При этом необходимо соответствие одной и той же области изменения данного критерия на образце и модели. Такая область называется автономной. На практике этот способ упрощения моделирования употребляется очень широко.

Решение задач оптимизации – важная, если не самая важная часть работы инженера. Термин «оптимальный» происходит от латинского слова «optimum», что буквально означает «наилучший» и описывает совокупность наиболее благоприятных условий для протекания какого-либо процесса. Под термином «оптимальный» в каждом конкретном случае можно понимать «наилучший» по отношению к изучаемому процессу или объекту. Расшифровка значения этого термина на практике обычно не вызывает затруднений. Так, если решается задача снижения себестоимости выпускаемой продукции, то оптимум в данном случае соответствует минимальной себестоимости, а оптимум соответствует максимальному качеству при решении задачи повышения качества. На практике оптимум часто соответствует среднему уровню критерия, например, твердость заготовки из серого чугуна должна иметь средний уровень, так как низкая твердость, а значит, и прочность не удовлетворяет конструктора, а высокая твердость вызывает резкое снижение производительности станков для металлообработки.

*Оптимизация* — это процесс перевода изучаемого процесса или явления в состояние, отвечающее оптимуму целевой функции. Идеи и методы оптимизации получили распространение в конце 50-х годов XX века, поскольку к тому времени достижения математики и кибернетики позволили эффективнее решать традиционные инженерные задачи. Оптимизационные задачи не представляют собой какой-то новый класс задач, обычно это старые задачи, решаемые новыми методами. Широкое применение методов оптимизации в технике вызва-

но двумя причинами. Во-первых, традиционный детерминистский подход, когда инженеры и ученые пытались строить модели реальных технологических процессов на основе небольшого количества физических законов, оказался малоэффективным и неконструктивным с точки зрения управления процессом и в какой-то момент в значительной степени исчерпал свои возможности. Так, несмотря на столетнюю историю развития металловедения и физики твердого тела, до настоящего времени отсутствуют хотя бы качественные формулы для прочности сплавов, выведенные теоретически на основе физических соображений. Во-вторых, возникшая в 40-х годах XX века кибернетика предложила заменить традиционное изучение механизма явления концепцией «черного ящика», при которой на первый план выдвигается решение задачи управления процессом или объектом на основе его математической модели, а в 50-х годах XX века на практике она показала жизнеспособность своих идей. Высокая эффективность такого подхода в сочетании с увеличивающимися возможностями его реализации, связанная с возникновением и широким применением электронной вычислительной техники, и составляет суть явления, которое обозначается термином «научно-техническая революция». Создание эффективных автоматизированных систем управления машиностроительными предприятиями неизбежно связано с решением ряда задач оптимизации литейного производства как основной материально-технической базы машиностроения.

Оптимальное решение задач литейного производства должно быть высокоэффективным, так как, во-первых, отливки составляют от  $\frac{1}{4}$  до  $\frac{1}{2}$  веса выпускаемых машин, поэтому качество выпускаемых отливок в значительной степени влияет на качество машин и механизмов, а во-вторых, литейное производство является одним из основных источников потерь в машиностроении, что указывает на недостаточную эффективность применяемых до настоящего времени методов управления литейной технологией.

Практика показала, что одним из основных препятствий на пути развития оптимизационного решения задач металлургического и литейного производств является недостаточно высокая подготовка инженера-литейщика и его ориентация на несложные расчетные методы. Что же касается профессионалов, в частности в области программирования, то они, имея необходимые теоретические знания, далеко не всегда могут решать практические задачи, поскольку этот процесс не может быть полностью формализован. При постановке и решении оптимизационных задач важную роль играет опыт и интуиция, которая

приобретается многолетней работой в избранном направлении и отсутствие которой не может компенсировать даже самое блестящее знание теоретических основ математики и программирования [12, 28].

Постановка и решение оптимизационных задач включает в себя решение последовательных вопросов. Прежде всего необходимо решить вопросы: надо ли оптимизировать, что оптимизировать и как оптимизировать. При решении вопроса о необходимости решения задачи оптимизации главную роль играет опыт и интуиция специалиста. В общем виде ответ на этот вопрос заключается в том, что оптимизировать необходимо в тех случаях, когда выигрыш от оптимизации превышает затраты на оптимизацию.

Необходимо понимать, что рекомендации по оптимизации отдельных процессов литейного производства часто справедливы только для тех конкретных условий производства, для которых они получены. В других условиях эти рекомендации могут быть далеки от оптимальных. Последнее обстоятельство объясняется значительной ролью неуправляемых переменных, количество которых в процессах литейного производства может в несколько раз превосходить количество управляемых переменных, в связи с чем положение оптимума процесса может самопроизвольно смещаться и процесс необходимо периодически настраивать на оптимум. В этих условиях решающую роль играет знание инженером и исследователем методологических основ моделирования и оптимизации.

### **1.5. Средства математического моделирования технических объектов**

Обеспечение требуемых показателей качества функционирования больших систем, связанное с необходимостью изучения протекания стохастических процессов в исследуемых и проектируемых системах  $S$ , позволяет проводить комплекс теоретических и экспериментальных исследований, взаимно дополняющих друг друга. Эффективность экспериментальных исследований сложных систем оказывается крайне низкой, поскольку проведение натуральных экспериментов с реальной системой либо требует больших материальных затрат и значительного времени, либо вообще практически невозможно (например, на этапе проектирования, когда реальная система отсутствует). Эффективность теоретических исследований с практической точки зрения в полной мере проявляется лишь тогда, когда их результаты с

требуемой степенью точности и достоверности могут быть представлены в виде аналитических соотношений или моделирующих алгоритмов, пригодных для получения соответствующих характеристик процесса функционирования исследуемых систем.

Особенностью использования математического моделирования на современном этапе стало применение компьютеров, что явилось решающим условием широкого внедрения аналитических методов в исследование сложных производственных систем. При этом достигнуты значительные успехи в создании новых математических методов решения задач аналитического плана, управления в сложных системах, в том числе и технических.

Аналитические модели и методы математического программирования в ряде случаев стали практически универсальным инструментом их решения. Но при необходимости учета вероятностных свойств технических систем, недетерминированности исходной информации, корреляционных связей между большим числом переменных и параметров, характеризующих процессы в моделируемых технических системах, чисто аналитических моделей и методов математического программирования оказывается недостаточно. Поэтому в последнее время все острее чувствуется потребность в разработке методов, которые дали бы возможность уже на этапе проектирования систем исследовать более адекватные модели. Указанные обстоятельства приводят к тому, что при исследовании больших систем все шире применяются методы имитационного моделирования [1, 65].

Применение компьютеров позволяет исследовать имитационную модель  $M$ , задаваемую в виде определенной совокупности отдельных блочных моделей и связей между ними, физико-статистических моделей, полученных на ранних стадиях математического моделирования, в их взаимодействии в пространстве и времени при реализации какого-либо процесса, что в совокупности составляет имитационную систему. Можно выделить три основные группы блоков: 1) блоки, характеризующие моделируемый процесс функционирования систем  $S$ ; 2) блоки, отражающие внешнюю среду  $E$  и ее воздействие на реализуемый процесс; 3) блоки, играющие служебную вспомогательную роль, обеспечивая взаимодействие первых двух, а также выполняющие дополнительные функции по получению и обработке результатов моделирования. Кроме того, имитационная система характеризуется набором переменных, с помощью которых удается

управлять изучаемым процессом и набором начальных условий, когда можно изменять условия проведения машинного эксперимента.

Как вытекает из вышеизложенного, математическое моделирование представляет собой сложный многоплановый процесс, который должен иметь определенное обеспечение. В общем случае имитационная система моделирования как одна из наиболее сложных характеризуется следующими видами обеспечения:

- **Математическое обеспечение** включает в себя совокупность математических соотношений, описывающих поведение реального объекта, совокупность алгоритмов, обеспечивающих как подготовку, так и работу с моделью. Сюда могут быть отнесены алгоритмы ввода исходных данных, имитации, вывода, обработки.

- **Программное обеспечение** по своему содержанию включает в себя совокупность программ: планирования эксперимента, построения имитационной модели, проведения машинного эксперимента над имитационной моделью, обработки и интерпретации его результатов. Кроме того, программное обеспечение имитационной системы должно обеспечивать синхронизацию процессов в модели, т. е. необходим блок, организующий псевдопараллельное выполнение процессов в модели. Машинные эксперименты с имитационными моделями не могут проходить без хорошо разработанного и реализованного информационного обеспечения.

- **Информационное обеспечение** включает в себя средства и технологию организации и реорганизации базы данных моделирования, методы логической и физической организации массивов, формы документов, описывающих процесс моделирования и его результаты. Информационное обеспечение имитационной системы является наименее разработанной частью, поскольку только в настоящее время наблюдается переход к созданию сложных имитационных моделей и разрабатывается методология их использования при анализе и синтезе сложных систем с использованием концепции базы данных и знаний.

- **Техническое обеспечение** имитационной системы включает в себя прежде всего средства вычислительной техники, связи и обмена между оператором и компьютерной сетью, ввода и вывода информации, управления проведением эксперимента. К техническому обеспечению предъявляются серьезные требования по надежности функционирования, так как сбои и отказы технических средств, ошибки оператора могут резко увеличить время работы с имитационной моделью и даже привести к неверным конечным результатам.

• **Организационно-методическое обеспечение** имитационной системы представляет собой совокупность научных и прикладных методик и методов, а также нормативно-технических и организационно-методических документов и мероприятий, используемых на всех этапах взаимодействия человека-экспериментатора с инструментальными средствами (компьютерами, гибридными комплексами и т. д.). Эти документы, используемые на всех стадиях разработки и эксплуатации имитационных систем и их элементов, предназначены для формирования и поддержания эргономического качества путем обоснования и выбора организационно-проектных решений, которые создают оптимальные условия для высокоэффективной деятельности человека во взаимодействии с моделирующим комплексом.

Необходимо помнить, что даже при всем совершенстве средств вычислительной техники, которые в настоящее время широко используются либо для вычислений при аналитическом моделировании, либо для реализации имитационной модели системы, могут помочь с точки зрения эффективности реализации сложной модели, так как не позволяют подтвердить правильность той или иной модели. Только на основе обработанных данных, опыта исследователя можно с достоверностью оценить адекватность модели по отношению к реальному процессу.

В ходе математического моделирования реальных процессов производства, в частности, технологических процессов, существенное место занимает **реальный физический эксперимент**. В этом случае для получения в итоге адекватных математических моделей в виде физико-статистических зависимостей важна надежность используемых инструментальных средств. Их отказы могут приводить к искаженным значениям выходных данных, отображающих протекание процесса. При проведении физических экспериментов необходимы специальная аппаратура, методика и средства ее тарировки, специально разработанное математическое, информационное обеспечение, позволяющее реализовать диагностику средств моделирования, чтобы отсеять те ошибки в выходной информации, которые вызваны неисправностями функционирующей аппаратуры. В ходе машинного эксперимента действия человека-оператора могут быть ошибочными. В этих условиях серьезные задачи стоят в области эргономического обеспечения процесса моделирования [18].

## Глава 2. ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ И ОСНОВНЫЕ ЭТАПЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ. ВЫБОР МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Металлургическое производство представляет собой комплекс сложных процессов, включающих многофазное турбулентное течение, тепломассоперенос и химические реакции между шлаком, металлом, газом и твердыми телами. Соответственно, для формулировки достаточно реалистичных моделей процессов выплавки и обработки стали используются многочисленные идеализации. Классическая математика не всегда подходит для решения модельных уравнений, поэтому очень часто используются численные методы. Без надежного программного обеспечения и мощных компьютеров было бы невозможно предсказать многие практически интересные явления в металлургии. В последние годы крупные прорывы в математическом моделировании стали возможными благодаря эффективным алгоритмам решения и удобному компьютерному программному обеспечению [20, 62].

Математическое моделирование дает много явных преимуществ, среди которых можно выделить следующие:

1. **Низкая стоимость:** во многих приложениях стоимость запуска компьютерной программы (кода) на много порядков ниже (или вообще бесплатна), чем стоимость соответствующего экспериментального исследования, особенно если эксперименты должны проводиться в полномасштабных обрабатывающих металл установках.

2. **Потрясающая скорость:** исследователь может изучить последствия сотен различных конфигураций с помощью математической модели за очень короткое время. Причем результаты могут быть также интегрально обработаны программой, подсказывая пользователю лучший вариант. Напротив, детальные экспериментальные наблюдения (которые не всегда возможно повторить многократно) требуют много человеко-дней работы.

3. **Моделирование реальных условий:** в вычислительной процедуре очень легко обеспечить воздействие любой, очень низкой или высокой температуры. Также размеры моделей могут быть очень большими или совсем миниатюрными и т. д. Таким образом, полно-

масштабная система с жидкой сталью в качестве жидкости может быть смоделирована также удобно, как уменьшенная масштабная модель с водой или другой модельной жидкостью.

**4. Полная информация:** результаты могут быть получены во всей области, в любой точке и в любой момент. В компьютерной симуляции практически нет недоступных для измерения мест. Аналогично не существует аналога возмущения потока, вызванного зондом.

Различные типы математических моделей применяются при анализе, проектировании, оптимизации и управлении процессом производства стали. Они включают:

1. Вычислительные гидродинамические модели на основе моделирования для реакции турбулентных течений и транспорта.

2. Ориентированные на методы искусственного интеллекта (ИИ) модели для управления и оптимизации процессов.

3. Термодинамические модели для расчета равновесия фаз и систем.

4. Имитационные для автоматизации и управления цехами. Это модели с редуцированной размерностью.

В дополнение к этим моделям в целом различные подходы к моделированию адаптированы для имитации обработки за пределами процессов затвердевания, включая механическую обработку, микроструктурную и формирование микроструктур [18].

Анализ и оптимизация процессов включают математическое моделирование в основном в автономном режиме. Напротив, управление процессом требует моделирования и прогнозирования в режиме реального времени. Модели в категории 1, как правило, слишком сложны и, следовательно, не подходят для применения в реальном времени в управлении процессом производства стали. Для текущего производственного контроля требуются более простые модели, и в этом контексте модели с уменьшенной размерностью достаточно эффективно применяются в цехах предприятий. Наиболее часто используемые методы в последней категории включают:

- 1) тепловой и материальный баланс;
- 2) анализ скорости отклика;
- 3) статистическое самообучение.

Масштабные эксперименты на промышленных агрегатах металлургического производства непомерно дороги и сложны в организации. Вместо этого проведение экспериментальных исследований на полупромышленных установках позволяет при условии наличия не-

обходимых ресурсов обеспечить проведение исследований и в большинстве случаев получить качественную продукцию. Экспериментальные промышленные установки обычно имеют 5–15 % от производительности моделируемой системы. В отличие от физического моделирования используемый материал, по существу, такой же, как и в полномасштабной системе. Экспериментальные системы – дорогостоящие в создании и эксплуатации, и проведение их испытаний, особенно при повышенных температурах, столь же затратное, как и в полноразмерных системах. Недоступность недорогих измерительных зондов, способных работать в условиях высокой температуры на постоянной основе, создает дополнительные проблемы. Физическое и математическое моделирование не является результатом, целью. Это средство и необходимая основа для следующих технически важных проблем и задач:

1. Разработать совершенно новый процесс или технологию обработки материалов.

2. Провести измерения и модификации, выполнить усовершенствование в технологиях или в их элементах, вызывавших проблемы в существующем производственном процессе.

3. Выпустить новый продукт на рынок и оценить его потенциал до начала крупномасштабного коммерческого производства.

При разработке и коммерциализации многих технологий производства чугуна и стали (от производства губчатого железа до литья тонких полос) применялся комплексный подход, включающий физическое моделирование, математическое моделирование и производственные эксперименты. Адекватный подход к анализу и проектированию сталеплавильного процесса должен состоять из трех вышеперечисленных компонентов.

В отсутствие таких подходов проектирование сталеплавильного или литейного производства само по себе включает в себя проведение крупномасштабных экспериментов на действующих предприятиях. Необходимая эффективность достигается в процессе длительных испытаний, включающих несколько десятков недель исследований, требующих значительных производственных расходов. Многие базовые разработки в области производства чугуна и стали были результатом прямых высокотемпературных испытаний (чаще всего на небольших по производительности агрегатах), более поздние разработки, с другой стороны, обязаны своим успехом подходу, который объединяет параллельно проводимые моделирование и высокотемпературные ис-

пытания. В общем случае нежелательно с точки зрения эффективности начинать исследовательские работы по оптимизации, контролю и проектированию процессов на полномасштабных или опытных производственных установках. Грамотная и всесторонняя предварительная проработка технологии с применением компьютерного эксперимента и инженерного анализа позволяет практически полностью исключить вероятность формирования ситуаций, когда недостаток интуитивного понимания процесса инженером приводит к невозможности реализации перспективной идеи или актуализации патентных разработок.

## 2.1. Требования к моделям

Независимо от класса, к которому принадлежит модель, она должна удовлетворять двум основным требованиям к моделям [62]:

1. **Экономичность.** Это требование означает, что исследования, которые могут быть выполнены с помощью модели, должны обеспечить экономию времени и материальных средств по сравнению с экспериментом на объекте. Здесь нужно иметь в виду, что некоторые исследования принципиально не могут быть проведены непосредственно на объекте моделирования.

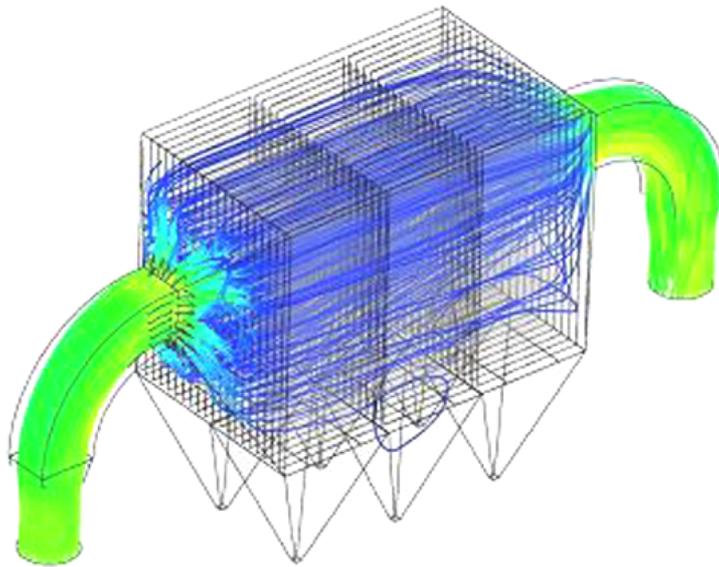
2. **Традуктивность** – возможность переноса результатов моделирования с модели на моделируемый объект. Пусть, например, задача моделирования состоит в изучении особенностей течения газов в рабочем пространстве печи и нас интересует при каких условиях (т. е. при какой скорости течения) характер течения газа в печи станет турбулентным. Для ответа на этот вопрос проведем исследования на физической (или численной – рис. 2.1) модели, являющейся геометрически уменьшенной масштабной копией печи. Пусть размеры печи соответствуют  $l_0$ , а соответствующие им размеры модели  $l_m$ . Характер течения газа зависит от величины критерия Рейнольдса:  $Re = \frac{wl}{\nu}$ , где  $\nu$  – вязкость,  $w$  – скорость,  $l$  – размер.

В теории подобия, являющейся теоретической основой методов физического моделирования, утверждается, что подобие модели и моделируемого объекта достигается тогда, когда одинаковы величины основных критериев подобия в модели и моделируемом объекте:

$$Re_m = Re_0. \quad (2.1)$$

Выразив величины критериев Рейнольдса в модели и моделируемом объекте, получаем выражение, которое позволит нам определить, при какой скорости газа в печи характер течения будет турбулентным, если известна (измерена нами экспериментально) такая скорость в модели и известен геометрический масштаб уменьшения модели:

$$\frac{w_M l_M}{v_M} = \frac{w_0 l_0}{v_0} \Rightarrow w_0 = \frac{w_M l_M}{l_0}. \quad (2.2)$$



*Рис. 2.1.* Пример моделирования турбулентного течения газа через систему очистки отходящих газов плавильных печей

Недостаточно измерить скорость турбулизации потока в модели, необходимо еще знать, как пересчитать результат измерения на модели и применить его на моделируемый объект. Это и есть правило традукции, и в случае физической модели оно устанавливается на основе теории подобия.

Для математических моделей правило традукции основано на аналогии дифференциальных уравнений, описывающих сходные свойства объекта и модели. Правила традукции выводятся на основе применения фундаментальных физических и химических законов.

Существует принципиально два пути построения модели объекта, если речь идет о математической модели:

- эмпирический;
- структурный.

Эмпирический подход применяется очень широко. Для построения модели в этом случае не требуется знать внутреннюю структуру моделируемого объекта, т. е. его элементы, характер связей между ними, нет необходимости описывать эти связи количественно.

Эмпирический подход также называется методом «черного ящика» (рис. 2.2), поскольку наши знания о моделируемом объекте не позволяют нам определить его внутреннюю структуру. По отношению к металлургическому процессу или объекту это означает, например, что мы не имеем точной информации об основных физико-химических взаимодействиях, мы не знаем, какие происходят химические реакции и последовательность их протекания в объекте, насколько полно они протекают и как быстро завершаются. Осталось представить объект как систему со своими входами и выходами в виде «черного ящика», внутренняя структура которого и операция нам неизвестны [1, 65].



Рис. 2.2. Принцип работы «черного ящика»

Но для практических задач было бы достаточно ответить на вопрос, каким будет состояние такой системы при известных величинах на ее входах. Для ответа на этот вопрос достаточно закономерным образом изменять состояния входов системы и наблюдать при этом, как изменяется состояние ее выхода в ответ на изменение состояния входов. В простейшем случае можно зафиксировать состояния всех входов, кроме одного. Изменяя величину на этом входе (температуру, например), получим зависимость выходной величины (например, извлечения металла в раствор при выщелачивании) от этого фактора.

Эта зависимость в общем случае может быть нелинейной, а ее график будет представлен некой кривой. Из математики известно, что нелинейные функции могут быть представлены с помощью их разложения в ряд. Используя такой подход, можно любую функцию представить в виде полинома  $n$ -й степени. Основная задача в процессе построения такой модели сводится к определению коэффициентов по-

линома  $b_0, b_1, \dots, b_n$ . Приемы построения таких моделей широко известны и приводятся в многочисленных литературных источниках. Более того, алгоритмы создания таких моделей реализованы в статистических пакетах прикладных программ, доступных для использования практически на любом персональном компьютере. От инженера-металлурга, желающего на основе использования эмпирического подхода получить модель технологического процесса, требуется только корректно провести системный анализ и выделить входы и выход системы:

$$y = b_0 + b_1x + b_2x_2 + \dots + b_nx_n. \quad (2.3)$$

К сожалению, эмпирические модели имеют существенный недостаток. Коэффициенты, входящие в полином, не имеют никакого физико-химического значения. В лучшем случае их размер и знак позволяют судить о направлении и силе влияния того или иного входа на выход, но они не дают информации о причинах этого влияния. Это ограничивает использование эмпирических моделей. Кроме того, эмпирические модели обладают нулевой прогностической силой: они могут быть использованы только тогда, когда изменение  $x$  на входе системы находится в пределах исследуемого диапазона.

При использовании структурного подхода необходимо знать внутреннюю структуру, ее элементы и взаимосвязи. Объектная модель создается на основе описания всех элементов и связей. В таком описании используются фундаментальные законы: закон сохранения вещества, закон сохранения энергии, закон эквивалентов, законы термодинамики и др. Для каждого элемента системы записываются материальные и тепловые балансы, которые затем объединяются в общее описание моделируемого объекта [65].

Независимо от того, на основе какого подхода создана модель, нужна оценка ее качества. На этом этапе необходим эксперимент с участием объекта моделирования. Идея состоит в том, что одинаковые значения входных величин задаются на соответствующих входах объекта и модели, как показано на рис. 2.3. Состояние выхода объекта  $y$  измеряется экспериментально, величина на выходе модели равна. Используя полученную модель, проводят расчет выхода и получают предсказанное значение  $\hat{y}$ . Для каждого состояния входа и выхода можно вычислить отклонение  $(y_i - \hat{y}_i)$ . Если повторить эксперимент многократно, изменяя состояния входа и фиксируя состояния выхода, возвести в квадрат и просуммировать все квадраты отклонений, получим их сумму.

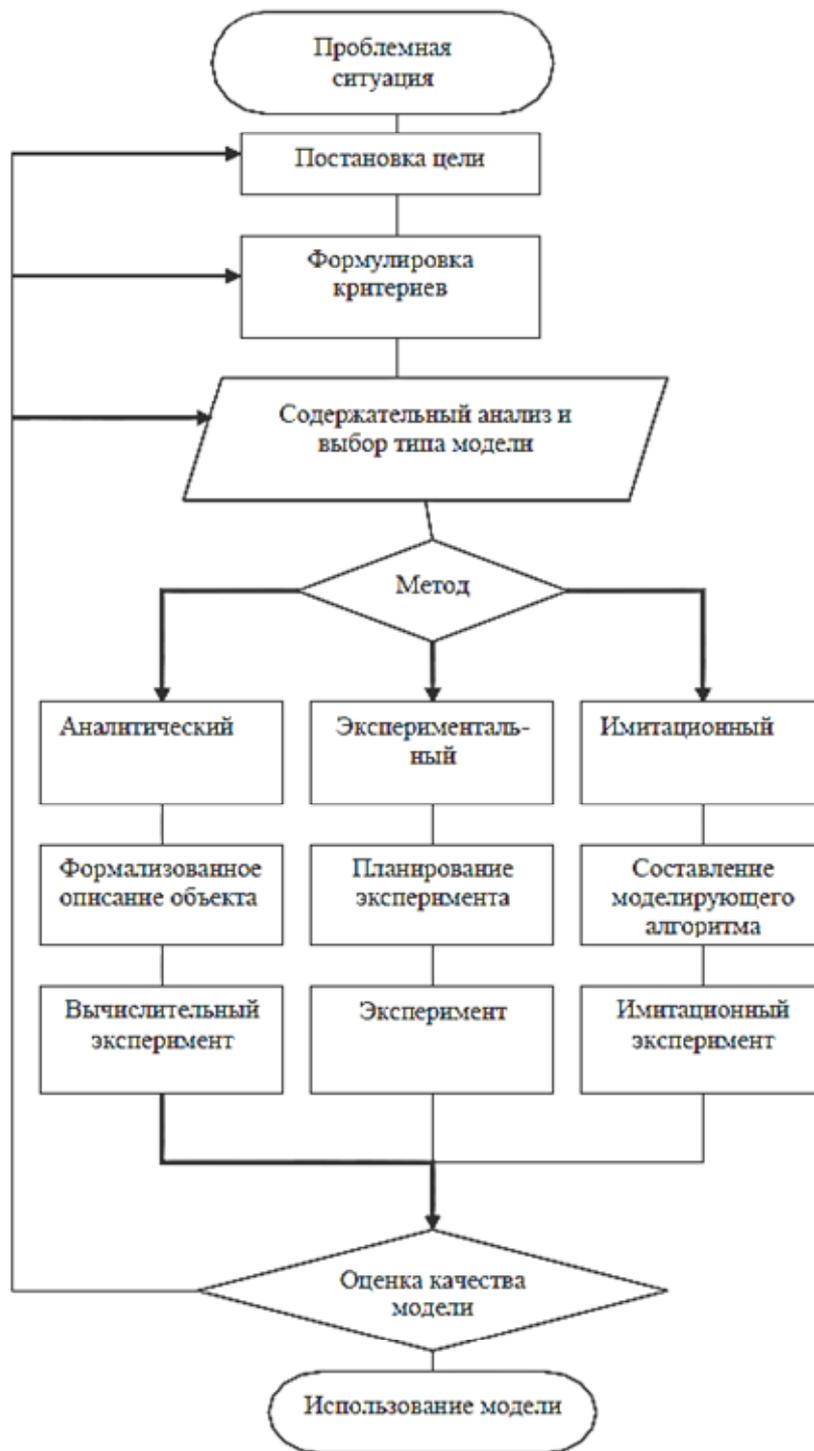


Рис. 2.3. Алгоритм создания модели

Критерием качества модели может быть (и чаще всего является) минимум суммы квадратов отклонения выходной величины, наблюдаемой на объекте и выходной величины, предсказанной с помощью модели. Чем меньше сумма квадратов отклонений, тем лучше модель воспроизводит моделируемый объект.

Выбор метода создания модели зависит от свойств моделируемого объекта. В целом алгоритм создания модели иллюстрирует рис. 2.3. Проблемная ситуация возникает, как правило, когда изменяются внешние условия функционирования технологического объекта. Это означает изменение либо на входе, либо на выходе (например, изменение состава перерабатываемого сырья, повышение требований к качеству готовой продукции). Изменившиеся условия требуют адекватных изменений в технологическом объекте. Необходимо ответить на вопрос о том, какие изменения в работе технологического объекта необходимы для достижения поставленной технологической цели при изменившихся условиях.

*Постановка цели* – определение цели создания модели.

Цели создания модели могут быть различными:

– уточнение закономерностей, управляющих технологическим процессом;

– модель создается как инструмент для прогнозирования поведения объекта;

– для поиска оптимальных условий работы технологических объектов;

– для прямого оптимального управления технологическим процессом (в результате поиска оптимальных условий найденные оптимальные условия используются для управления технологическим процессом).

*Формулировка критериев.* Необходимо оценить критерии для оценки качества модели.

*Содержательный анализ и выбор типа модели.* Применяя методы системного подхода необходимо определить границы моделируемой системы, выделить ее из внешней среды и определить ее входы и выходы. На следующем этапе системного анализа выявляется внутренняя структура объекта, определяются его элементы и связи этих элементов, образующие структуру моделируемого объекта. На этом этапе становится понятно, к какому классу в соответствии со своими свойствами принадлежит моделируемый объект. Завершение содержательного анализа является выбором метода построения модели. Здесь возможны три дальнейших направления.

*Аналитический метод* или *структурный подход*. Используется для детерминированных систем с известной нам структурой внутренних связей.

*Экспериментальный метод* или *эмпирический подход*. Применяется для стохастических систем, подверженных действию возму-

щений, которыми нельзя пренебречь. Характер и величина возмущений при этом нам неизвестны и учесть их действие аналитическим методом невозможно. Экспериментальный подход также является единственным выбором для систем, внутренняя структура которых нам недостаточно известна.

*Имитационный метод* используется для некоторых классов систем, например, дискретно-непрерывных систем массового обслуживания. После выбора метода построения модели содержание дальнейших шагов определяется выбранным методом.

*Составление формализованного описания.* На этом этапе создается математическое описание моделируемого объекта с использованием установленной структуры объектных связей и применением фундаментальных законов. В данном случае модель представляет собой алгоритм расчета, уравнение или систему уравнений разного рода. Выполняя расчеты по этому алгоритму, решая системы уравнений при заданных начальных условиях, можно рассчитать начальное состояние объекта. Наиболее распространенными формами описания металлургических процессов и объектов являются материальный и тепловой балансы. Уравнения баланса массы и тепла могут быть записаны в дифференциальной или интегральной форме.

*Планирование эксперимента.* На этом этапе выбирается количество опытов, условия каждого опыта, т. е. сочетание факторов на входе системы в каждом проводимом опыте.

Выполнение эксперимента – выполнение запланированных опытов. В частности, для системы с тремя входами  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $x_3$  и выходом  $y$  при постановке полного факторного эксперимента потребуется провести количество опытов  $2^3 = 8$ . В этих опытах сочетания величин факторов на входе не повторяются. Величины на входах будем задавать на двух уровнях, так называемых верхнем и нижнем, изменяя их в пределах выбранного диапазона. Например, температура в технологическом объекте может быть в пределах 1100–1300 °С. Для оценки влияния температуры на процесс будем проводить опыты либо при нижнем, либо при верхнем значении температуры из этого диапазона [65].

Для исключения влияния возмущений и случайных ошибок (связанных, например, с погрешностями измерения отклика) опыты проводят в случайной последовательности, например, первым проводят опыт, условия которого соответствуют третьей строке матрицы, вторым по порядку проводят опыт с условиями, соответствующими восьмой строке и т. д. Каждый раз измеряют значение выходной ве-

личины (отклика) и записывают результат в соответствующую строку матрицы, как показано в таблице. В результате такой обработки модель является полиномом первого порядка, содержащим свободный член и слагаемые, в которых присутствует коэффициент и значение фактора в первой степени.

Очень важно, что при таком планировании эксперимента матрица планирования обладает свойством ортогональности, а это позволяет выделить влияние каждого фактора на отклик отдельно от остальных факторов. Таким образом, величины коэффициентов в уравнении показывают направление и силу влияния каждого фактора на отклик. Если коэффициент при данном факторе имеет положительный знак и большую величину, то увеличение этого фактора способствует увеличению отклика. Как в любой эмпирической модели, величины коэффициентов  $b_0, b_1, b_2, b_3$  показывают степень проявления данных факторов, но они не имеют явного физико-химического смысла, т. е. не объясняют, почему какие-то факторы оказывают большее действие на отклик по сравнению с другими [1]:

1. «Прозрачный ящик» – объекты, у которых внутренние причинно-следственные связи и их математическое описание в основном известны, и задача исследования такого объекта состоит в том, чтобы уточнить лишь отдельные частные закономерности, которые проявляются при некотором изменении технологического процесса или состава вещества. Раскрытие исследуемой закономерности «прозрачного ящика» производят на основе приложения конкретных наук, таких как теория металлургии, теплофизика, металлография и другие науки, выбор которых следует из природы объекта и цели исследования.

2. «Черный ящик» – объекты, в которых причинно-следственная связь между входами и выходами неизвестна на момент исследования. Когда число действующих факторов велико и большинство из них оказываются переменными, включающими случайные компоненты, для обработки результатов исследования и получения математической модели в виде регрессионно-корреляционного анализа и планирования эксперимента используются формальные статистические методы. Эти методы основаны на применении законов теории вероятностей, теории ошибок, математической статистики и регрессии.

Рассмотрим для примера «черный ящик» – необходимо максимально увеличить относительное удлинение сплава, изменяя содержание никеля и железа, а также параметры термообработки (температуру нагрева и скорость охлаждения). Схема проведения экспериментов представлена на рис. 2.4.



Рис. 2.4. Схема проведения экспериментов по оптимизации пластических свойств железоникелевого сплава

После проведения ряда экспериментов и обработки их результатов можно построить зависимость вида  $\delta = f(\text{Fe}, \text{Ni}, t, v)$ . При этом функциональный вид зависимости может быть выбран произвольно, если заранее не наложены определенные ограничения.

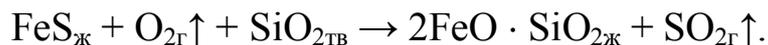
Часто результаты физического исследования объекта, подчиненного известным законам, существенно отличаются от теоретических представлений. Это может быть связано с тем, что существует неизвестный фактор, радикально изменяющий результаты эксперимента. И в этом случае для выявления влияющего фактора следует применять формально-статистические методы обработки результатов измерений [6].

## 2.2. Структурный подход для построения математических моделей

При использовании структурного подхода технологические объекты могут быть описаны на одном из следующих пяти уровней [8, 24]:

1. *Молекулярный уровень.* Металлургические процессы и объекты на этом уровне описываются как совокупность физико-химических явлений, в частности как совокупность химических реакций.

Например, конвертирование медного штейна в первом периоде на молекулярном уровне может быть описано основной химической реакцией окисления сульфида железа, входящего в состав штейна:



Исходными веществами-участниками этой реакции являются сульфид железа, кислород подаваемого дутья и кремнезем флюса. Продуктами реакции выступают фаялит (основной компонент шлака) и диоксид серы, удаляющийся в газовую фазу.

На молекулярном уровне описание объекта сводится к описанию стехиометрических соотношений масс исходных веществ и продуктов, равновесия и кинетики основных химических реакций [38].

2. *Уровень малого объема.* Пузырек, капля, твердая частица – элементы малого объема. При описании конвертирования на уровне малого объема следует учесть дополнительно, что реакция первого периода конвертирования является гетерогенной, происходит на поверхности элемента малого объема, каковым в данном случае является пузырек газа, всплывающий в расплаве (рис. 2.5).

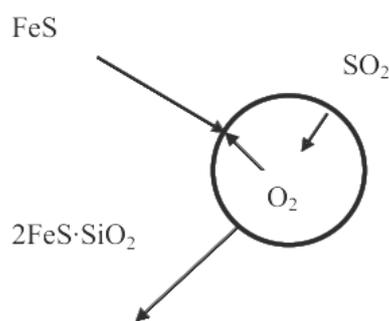


Рис. 2.5. Массоперенос с участием элемента малого объема

Первоначально пузырек образуется при распаде струи подаваемого в расплав дутья и содержит внутри кислород и азот. Окисление сульфида железа происходит на его поверхности и сопровождается переносом вещества из объема расплава и газового пузырька к этой поверхности. Образующийся диоксид серы отводится внутрь пузырька, а  $2FeO \cdot SiO_2$  – в объем расплава. Это показано на рис. 2.5. Для осуществления этой реакции отведено ограниченное время, поскольку пузырек всплывает в объеме расплава. Это время определяется скоростью движения пузырька и толщиной слоя расплава.

3. *Уровень рабочей зоны аппарата.* В дополнение к описанию предыдущего уровня необходимо учесть, что пузырек в расплаве не один. Одновременно в рабочей зоне присутствуют элементы малого объема в большом количестве. Рабочая зона характеризуется суммарной площадью поверхностей малых объемов. К тому же пузырьки имеют разные размеры, и необходимо учесть распределение размеров пузырьков и их средний размер суммарную поверхность.

4. *Уровень технологического аппарата в целом.* На этом уровне следует учесть, что помимо рабочей зоны аппарат имеет также и другие части, например устройства загрузки сырья и отвода продуктов,

функционирование которых существенным образом сказывается на результатах работы всего моделируемого объекта. Так, скорость загрузки компонентов сырья или подачи дутья может лимитировать производительность технологического аппарата, хотя собственно физико-химические превращения осуществляются достаточно быстро.

5. *Уровень технологической схемы.* Моделируемый объект описывается на этом уровне как совокупность технологических операций, осуществляющихся последовательно. В технологических схемах существует большое количество оборотов, когда полученные полупродукты возвращаются на предыдущие технологические операции. На уровне технологической схемы каждая операция или технологический аппарат является объектом с сосредоточенными параметрами.

### 2.3. Использование структурного подхода для составления моделей на молекулярном уровне

Химические реакции – источник вещества, в котором вещество либо появляется, либо исчезает. Для построения модели необходимо выполнить моделирование химической кинетики [44].

*Скорость реакции* – изменение количества вещества в единицу времени в единице объема:

$$W = \pm \frac{dm}{Vdt}. \quad (2.4)$$

Масса вещества нередко заменяется количеством вещества.

$$m = VC;$$
$$W = \pm \frac{d(VC)}{Vdt} = \pm \frac{dC}{dt} \pm \frac{dV}{V^2 dt}; \quad (2.5)$$
$$W = \pm \frac{dC}{dt}, \text{ при } V = \text{const.}$$

Часто в реальных процессах используют систему стабилизации уровня или объема реакционной смеси, в этом случае удобно рассматривать скорость как изменение концентрации.

Различаются гомогенные (по всему объему) и гетерогенные (на разделе фаз) реакции:

$$W = \pm \frac{dm}{Fdt}. \quad (2.6)$$

В соответствии с законом действующих масс скорость реакции пропорциональна концентрации веществ, участвующих в реакции.

$$A + B \xrightleftharpoons[K_{\text{обр}}]{K_{\text{пр}}} C;$$

$$W = \frac{dC_A}{dt} = -K_{\text{пр}} C_A C_B;$$

$$W = \frac{dC_B}{dt} = -K_{\text{пр}} C_A C_B;$$

$$2A + 3B \xrightleftharpoons[K_{\text{обр}}]{K_{\text{пр}}} C;$$

$$W = \frac{dC_A}{dt} = -K_{\text{пр}} C_A^2 C_B^3;$$

$$W = \frac{dC_B}{dt} = -K_{\text{пр}} C_A^2 C_B^3. \quad (2.7)$$

Существуют реакции различных порядков. Порядок реакции определяется суммой концентраций. Только реакции первого порядка описываются линейными дифференциальными уравнениями, поэтому моделировать химические реакции достаточно трудно.

Значение скорости химической реакции зависит от температуры. В соответствии с законом Аррениуса константа скорости изменяется при изменении температуры:

$$k = A e^{\frac{-E}{RT}}, \quad (2.8)$$

где  $A$  – предэкспоненциальный множитель;  $E$  – энергия активации;  $R$  – универсальная газовая постоянная, константа;  $T$  – температура.

$$K = K_0 e^{\frac{E}{RT}}, \quad (2.9)$$

где  $E$  – энергия активации, зависит от давления, катализатора и т. д.  $K_0$  – зависит от свойств веществ, обычно определяется из справочных данных.

Отсюда вывод: температура значительно, в определяющей степени влияет на реакцию. Обычно в процессах есть два источника изменения температуры:

- 1) внешний источник подвода тепла;
- 2) внутренний источник, т. е. тепло выделяется или поглощается в результате экзо- и (или) эндотермических реакций.

Тепловой эффект реакции определяется как

$$q = \pm WH. \quad (2.10)$$

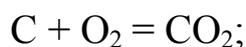
Здесь  $q$  – количество выделившегося или поглощенного тепла пропорционально скорости реакции и тепловому эффекту реакции.

Таким образом, химические реакции являются источником вещества и могут быть источником тепла, что необходимо учитывать при моделировании технологических процессов.

Характеристика технологического процесса или объекта на молекулярном уровне означает описание следующих его сторон:

- 1) стехиометрических соотношений между компонентами сырья, получаемых продуктов и вспомогательных материалов в системе химических реакций, составляющих сущность данного процесса;
- 2) равновесия в системе обратимых химических реакций, которыми сопровождается процесс;
- 3) скорости (кинетики) химических реакций.

**Описание стехиометрии системы химических реакций.** Реальные технологические процессы редко отображаются одной химической реакцией. Обычно процесс является совокупностью химических реакций, идущих одновременно. Часть химических реакций можно рассматривать в качестве основных, другая рассматривается как реакции побочные. При описании отдельной химической реакции используется закон эквивалентов, и никаких трудностей при этом не возникает. Например, горение углерода до диоксида описывается простой химической реакцией:



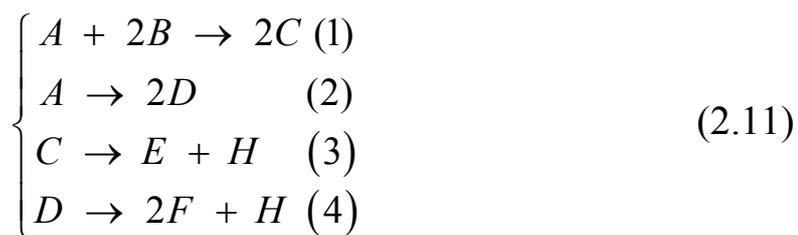
$$1 \text{ м} + 1 \text{ м} = 1 \text{ м};$$

$$12 \text{ г} + 32 \text{ г} = 44 \text{ г}.$$

Сложность описания возникает в том случае, когда несколько химических реакций осуществляются в едином реакционном пространстве в одно и то же время, а как раз это и происходит в любом технологическом процессе. При этом возможно осуществление последовательных, параллельных, обратимых химических реакций и их сочетание. Для расчетов стехиометрических соотношений в таких системах существует несколько методов.

**Метод направленных графов.** Граф – это фигура, построенная из элементов двух типов: вершин, которые изображаются в виде окружностей и связей, представляющих собой линии, направленные от вершины к вершине. Связи графа характеризуются направлением.

Вершины графа отображают массы веществ, а связи – переход веществ из одних в другие в ходе химической реакции. Применение метода направленных графов рассмотрим на следующем примере. Пусть технологический процесс является совокупностью следующих химических реакций:



Вещества  $A$  и  $B$  являются исходными,  $C$  и  $D$  – промежуточными, а  $E$ ,  $H$  и  $F$  – конечными продуктами реагирования. Как видно на схеме, процесс содержит последовательные и параллельные химические реакции. В частности,  $C$  вначале образуется по реакции (1), а затем расходуется по реакции (3), аналогично  $D$  образуется по реакции (2) и расходуется по реакции (4). Компонент  $A$  параллельно расходуется по реакциям (1) и (2). Очевидно, что в этом случае ответить на вопрос о том, какая масса вещества участвует в каждой из реакций более сложно, чем для отдельно протекающей химической реакции.

Для ответа на этот вопрос построим направленный граф, который позволяет изобразить путь всех химических реакций и массы всех участвующих в них веществ.

Пусть для упрощения дальнейших рассуждений в системе в начальный момент времени отсутствовали промежуточные вещества  $C$  и  $D$ , а также конечные продукты реагирования  $E$ ,  $F$  и  $H$ .

Построение графа начнем с начальных веществ. Вершиной 1 обозначим исходную массу  $A$  в системе. Часть вещества  $A$  расходуется по реакциям (1) и (2), обозначим ее вершиной 2. Другая часть  $A$  останется в системе, и эту остаточную массу  $A$  обозначим вершиной 3. Как видно на схеме, израсходованная масса  $A$  связана с реакциями (1) и (2), обозначим соответственно вершиной 4 расход вещества  $A$  по реакции (1), а вершиной 5 – расход вещества  $A$  по реакции (2).

Такие же рассуждения проведем в отношении вещества  $B$ . Исходную массу  $B$  в системе обозначим вершиной 6, расход  $B$  в реакции (1) изобразим вершиной 7, а остаток  $B$  в системе – вершиной 8.

Обратим внимание на реакцию (1). Продуктом ее является промежуточное вещество  $C$ , которого в начальный момент в системе не было. Обозначим массу  $C$ , образующуюся по реакции (1) вершиной 9. В реакции (1) принимают участие вещества  $A$  в количестве, соответствующем вершине 4, и  $B$ , в количестве, соответствующем вершине 7. Следовательно, необходимо направить связи от вершин 4 и 7 к вершине 9. Часть вещества  $C$ , являющегося промежуточным, расходуется по реакции (3). Отобразим эту массу  $C$  вершиной 11, другая часть  $C$  остается в системе, что отображает вершина 10.

Расход  $C$  обусловлен его участием в реакции (3), продуктами которой являются вещества  $E$  и  $H$ . Обозначим массу вещества  $E$ , образующуюся по реакции (3) вершиной 12, а массу вещества  $H$ , образующуюся по этой же реакции вершиной 13. Заметим, что  $H$  образуется также и в ходе реакции (4).

Другое направление процесса связано с реализацией реакции (2), в которой принимает участие вещество  $A$  в количестве, соответствующем вершине 5. Продуктом реакции 2 является вещество  $D$ , массу которого отобразим вершиной 14.

Часть промежуточного вещества  $D$  далее разрушается в ходе реакции (4), эту массу  $D$  обозначим вершиной 15, а другая часть останется в системе, что соответствует вершине 16.

Реакция (4) идет сообразованием веществ  $F$  и  $H$ . Масса образующихся в ней веществ обусловлена расходом  $D$  в количестве, соответствующем вершине 15. Обозначим вершиной 18 массу вещества  $F$ , образующуюся по реакции (4), а вершиной 17 – массу вещества  $H$ , образующуюся по этой же реакции. Общую массу вещества  $H$  в системе обозначим вершиной 19. Полученный граф, приведенный ниже на рис. 2.6, полностью отображает ход всех химических реакций в рассматриваемой системе.

Пусть все реакции осуществляются в изолированной по веществу системе, а компоненты находятся в растворе. В начальный момент времени концентрации исходных веществ равны:  $C_{A0} = 5$  моль/дм<sup>3</sup>;  $C_{B0} = 6$  моль/дм<sup>3</sup>. В системе отсутствуют промежуточные и конечные продукты:  $C_{C0} = C_{D0} = C_{E0} = C_{F0} = C_{H0} = 0$  моль/дм<sup>3</sup>.

Спустя некоторое время отобрали пробу раствора и определили текущие концентрации веществ:  $C_A = 1$  моль/дм<sup>3</sup>;  $C_H = 5$  моль/дм<sup>3</sup>;  $C_C = C_E = 2$  моль/дм<sup>3</sup>. Остальные концентрации определить не удалось. Как рассчитать  $C_B$ ,  $C_F$ ,  $C_D$  с их массами? Если дальнейшие рассуждения провести для объема системы, равного 1 дм<sup>3</sup>, то значения концентраций веществ численно совпадут.

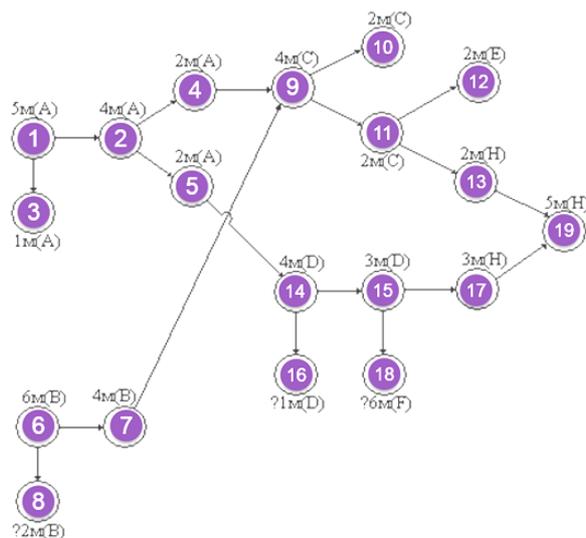


Рис. 2.6. Граф состояний системы:

- 1 – начальная масса вещества *A* в системе; 2 – расход вещества *A* по реакциям (1) и (2); 3 – остаток вещества *A* в системе;  
 4 – масса вещества *A*, участвующего в реакции (1); 5 – масса вещества *A*, участвующего в реакции (2); 6 – начальная масса вещества *B* в системе;  
 7 – расход вещества *B* по реакции (1); 8 – остаток вещества *B* в системе;  
 9 – масса вещества *C*, образующегося по реакции (1); 10 – остаток вещества *C* в системе; 11 – расход вещества *C* по реакции (3); 12 – масса вещества *E*, образующегося по реакции (3); 13 – масса вещества *H*, образующегося по реакции (3); 14 – масса вещества *D*, образующегося по реакции (2);  
 15 – масса вещества *D*, израсходованного в реакции (4);  
 16 – остаток вещества *D* в системе; 17 – количество вещества *F*, полученного по реакции (4); 18 – количество вещества *H*, полученного по реакции (4); 19 – общая масса вещества *H* в системе

Далее начнем движение по графу от известных вершин. В частности, начальная масса *A* равна 5 моль, а текущая (остаточная) – 1 моль. Следовательно, расход *A* составил 4 моль. В отношении *B* мы не можем провести подобные вычисления, поскольку остаток *B* нам неизвестен. К тому же неясно, какая масса *A* расходуется по реакции (1), а какая по реакции (2).

Воспользуемся другим направлением и будем двигаться по графу от продуктов к исходным веществам. В частности, вещество *E*, образующееся по реакции (3) представляет конечный продукт, и его масса соответствует вершине 12. В этой же реакции принимают участие вещества *C* и *H*, следовательно, расход *C* по реакции (3) в вершине 11 равен 2 моль, и такая же масса *H* образуется в вершине 13.

Общая масса образовавшегося *H* равна 5 моль, из них 2 – по реакции (3), другие  $5 - 3 = 2$  моль образуются по реакции (4), что ото-

бражено вершиной 17. Отсюда следует, что в реакции (4) образуется удвоенное количество молей  $F$ , покажем его в вершине 18. Масса  $F$  в вершине 18 равна 6 моль. Расход  $D$  по реакции (4) равен числу молей  $H$ , образующихся по этой реакции, что соответствует вершине 15.

Остаток вещества  $C$  в системе равен 2 моль, что показано в вершине 10, а его расход в вершине 11 также равен 2 моль. Следовательно, по реакции (1) образуется 4 моль вещества  $C$  (вершина 9), а это требует удвоенного расхода вещества  $B$  и такого же количества  $A$  (вершины 7 и 4 соответственно). Расход вещества  $A$  по реакции (2) составляет 2 моль, при этом образуется по реакции (4) вещество  $D$  в количестве 4 моль. Расход  $D$  равен 3 моль (вершина 15), остаток  $D$  в системе равен 1 моль.

Ответ:  $C_B = 2$  моль/дм<sup>3</sup>;  $C_D = 1$  моль/дм<sup>3</sup>,  $C_F = 6$  моль/дм<sup>3</sup>.

Преимущество метода направленных графов состоит в наглядности изображения хода процесса, но решение задачи требует сложных логических построений.

**Матричный метод.** Помимо метода направленных графов существуют и другие методы решения стехиометрических задач для сложных систем химических реакций. Матричный метод позволяет свести задачу к такой форме, которая в наибольшей степени пригодна для дальнейшего ее решения с использованием компьютерной техники.

Рассмотрим решение предыдущей задачи с использованием матричного метода. В системе из четырех химических реакций принимают участие семь веществ. Уравнения химических реакций с участием этих веществ можно записать так, как если бы в них участвовали все вещества одновременно. Если в какой-то химической реакции вещество не принимает участия, формально это означает, что стехиометрический коэффициент при этом веществе равен нулю. Условимся также, что стехиометрические коэффициенты для исходных веществ будем принимать положительными, а для продуктов – отрицательными. Тогда первое из химических уравнений системы химических реакций, рассмотренных в предыдущем примере, может быть записано следующим образом:



Отсюда остаток  $B$  в системе равен 2 моль.

Рассуждая аналогично для всех веществ и всех реакций, составим систему линейных уравнений, описывающих соотношение масс всех участвующих в реакциях веществ. Размерность системы  $4 \cdot 7$ , где 4 – число уравнений, 7 – число веществ, участвующих в химических

реакциях. Матрица коэффициентов этих уравнений приведена ниже, а вектор-столбец нулевой.

К полученной системе уравнений необходимо добавить еще несколько уравнений, имеющих ненулевую правую часть. Эти уравнения записываются исходя из начальных условий задачи:

$$\begin{array}{cccccc}
 & \text{A} & \text{B} & \text{C} & \text{D} & \text{E} & \text{F} & \text{H} \\
 \left| \begin{array}{cccccc}
 1 & 2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 1 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -2 & -1
 \end{array} \right| & \left| \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right| & (2.13)
 \end{array}$$

При определенных условиях, когда известны значения исходных и текущих масс некоторых компонентов системы, можно получить единственное решение методами линейной алгебры.

Описание систем путем расчета стехиометрии химических реакций с практической точки зрения позволяет рассчитать массы всех участвующих веществ. Таким образом, можно прогнозировать поведение системы, состав продуктов, количество израсходованных веществ.

Стехиометрические расчеты предполагают, что все химические реакции в данном технологическом процессе идут до конца вправо.

## 2.4. Моделирование равновесия в системах химических реакций

Значительная часть химических реакций, которые составляют основное содержание технологических процессов в цветной металлургии, являются обратимыми. Рассмотрим пример обратимой химической реакции:



Равновесие в такой химической реакции достигается при определенных значениях активностей участвующих веществ. Если эти вещества находятся в растворе, а их концентрации невелики (разбавленные растворы), то с некоторым приближением вместо величин активностей можно использовать величины концентраций. Равновесие в химической реакции характеризуется величиной константы равновесия:

$$k = \frac{a_C^2}{a_A a_B^2} \approx \frac{C_C^2}{C_A C_B^2}. \quad (2.15)$$

Величина константы равновесия связана с изменением энергии Гиббса и может быть рассчитана по термодинамическим данным участвующих веществ:

$$\ln k = -\frac{\Delta G_T}{RT}, \quad (2.16)$$

где  $\Delta G_T$  – изменение энергии Гиббса для данной химической реакции;  $T$  – температура;  $R$  – универсальная газовая постоянная.

Рассчитав величину константы равновесия для химической реакции, идущей при заданной температуре, можно определить соотношение концентраций исходных веществ и продуктов, которое установится при достижении равновесия.

Несколько более сложно определить равновесный состав системы, в которой одновременно происходит несколько обратимых химических реакций. Рассмотрим следующий пример. Пусть имеется система обратимых химических реакций с участием веществ  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$ . В данной системе вещество  $A$  последовательно и обратимо превращается в вещество  $C$ , предварительно образуя  $B$ . Возможен и параллельный путь: вещество  $A$  параллельно с образованием  $B$  разлагается с образованием  $D$ . При заданных условиях (температуре, давлении) в системе установится равновесие, и будут достигнуты равновесные концентрации веществ.

Для расчета равновесных концентраций запишем выражения для констант равновесия всех реакций через равновесные концентрации:

$$\begin{cases} A \rightleftharpoons B & k_1 = \frac{C_B}{C_A}; C_B = k_1 C_A; \\ B \rightleftharpoons C & k_2 = \frac{C_C}{C_B}; C_C = k_2 C_B = k_1 k_2 C_A; \\ A \rightleftharpoons D & k_3 = \frac{C_D}{C_A}; C_D = k_3 C_A. \end{cases} \quad (2.17)$$

Пусть в начальный момент отсутствуют промежуточные вещества  $B$  и  $C$ , а также конечный продукт  $D$ :

$$\left[ \begin{array}{l} \tau = 0 \\ C_A = C_{A_0} \end{array} \right]; C_{B_0} = 0; C_{C_0} = 0; C_{D_0} = 0. \quad (2.18)$$

Значения констант равновесия рассчитаем для каждой из реакций по термодинамическим данным:  $\Delta G_i = -RT \ln k_i$ . Таким образом, величины констант равновесия будем считать известными величинами.

На единицу объема данной системы  $C_{A0} - C_A$  представляет собой количество израсходованных молей компонента  $A$ . В соответствии со стехиометрией химических реакций и законом сохранения вещества убыль массы  $A$  равна сумме масс образующихся веществ  $B$ ,  $C$  и  $D$ , что можно выразить уравнением

$$C_{A0} - C_A = C_B + C_C + C_D. \quad (2.19)$$

Преобразуем уравнение к следующему виду:

$$C_{A0} = C_A + C_B + C_C + C_D. \quad (2.20)$$

Подставим в правую часть выражения для соответствующих концентраций веществ:

$$C_{A0} = C_A + k_1 C_A + k_1 k_2 C_A + k_3 C_A. \quad (2.21)$$

Сгруппируем однородные члены уравнения

$$C_{A0} = C_A(1 + k_1 + k_1 k_2 + k_3)$$

и получим выражение для равновесной концентрации  $C_A$ :

$$C_A = \frac{C_{A0}}{1 + k_1 + k_1 k_2 + k_3}. \quad (2.22)$$

Равновесные концентрации других веществ легко определить, поскольку значения всех констант равновесия нам известны из предыдущего расчета, а выражения содержат  $C_A$ .

При расчетах равновесий в системах химических реакций необходимо знать  $k_p$  каждой реакции, начальный состав системы – это дает возможность рассчитать равновесный состав системы.

Реальные задачи расчета равновесного состава систем гораздо сложнее: уравнения в этих задачах нелинейны; необходимо учитывать, что компоненты, участвующие в реакции, находятся в разных фазах; вместо концентраций правильно использовать значения активности компонентов. Практический смысл расчета равновесий в таких сложных системах сводится к тому, что рассчитанный равновесный состав системы является тем физико-химическим пределом, до которого может пойти реальный процесс, если на его реализацию выделено неограниченное время.

## 2.5. Моделирование кинетики химических реакций

В физической химии скорость химической реакции определяется в соответствии с уравнением

$$r = \frac{dq}{Vdt}, \quad (2.23)$$

где  $dq$  – изменение массы реагирующего вещества, моль;  $dt$  – приращение времени, с;  $V$  – мера реакционного пространства [43].

Различают гомогенные химические реакции, в которых все участвующие вещества находятся в пределах одной фазы (газовой или жидкой). Для таких реакций мерой реакционного пространства является объем, а размерность скорости будет:  $[r] = \left[ \frac{\text{МОЛЬ}}{\text{М}^3 \cdot \text{С}} \right]$ .

Гетерогенные химические реакции происходят между веществами, находящимися в разных фазах («газ–твердое тело», «газ–жидкость», «жидкость–жидкость», «твердое–жидкость»). Собственно химическая реакция при этом реализуется на поверхности раздела фаз, которая и является мерой реакционного пространства.

Для гетерогенных реакций размерность скорости иная:  $[r] = \left[ \frac{\text{МОЛЬ}}{\text{М}^3 \cdot \text{С}} \right]$ .

Изменение массы реагирующих веществ имеет свой знак. Для исходных веществ масса по ходу реакции убывает, изменение массы имеет отрицательный знак, и величина скорости принимает отрицательное значение. Для продуктов химической реакции масса возрастает, изменение массы положительно, также положительным принимают знак скорости.

Рассмотрим простую химическую реакцию:



К простым реакциям относятся те, которые осуществляются в одну стадию и идут до конца, т. е. являются необратимыми.

Определим скорость такой химической реакции. Для этого, прежде всего, необходимо решить, по какому из веществ будет определена скорость реакции: ведь  $A$  и  $B$  – исходные вещества, и изменение их масс отрицательно, а  $C$  является конечным продуктом, и его масса возрастает со временем. Кроме того, не все стехиометрические коэффициенты в реакции равны единице, а это значит, что, если расход  $A$

за какое-то время равен 1 молю, расход  $B$  за это же время будет 2 моля, и соответственно значения скорости, рассчитанные по изменению масс  $A$  и  $B$ , будут отличаться вдвое.

Для простой химической реакции можно предложить единую меру скорости, которая определяется следующим образом:

$$r = \frac{r_i}{S_i}, \quad (2.25)$$

где  $r_i$  – скорость по  $i$ -му участнику реакции;  $S_i$  – стехиометрический коэффициент  $i$ -го участника реакции.

Стехиометрические коэффициенты для исходных веществ принимаются положительными, для продуктов реакции они отрицательны.

Если реакции идут в изолированной системе, не обменивающейся веществом с внешней средой, то только химическая реакция приводит к изменению масс вещества в системе, и, следовательно, их концентраций. В такой системе единственной причиной изменения концентраций  $C$  является химическая реакция. Для этого частного случая:

$$r = \frac{dC}{dt}. \quad (2.26)$$

Скорость химической реакции (рис. 2.7, 2.8) зависит от концентраций участвующих веществ и от температуры:

$$r = kC_A^{n_1}C_B^{n_2} \cdot \dots,$$

где  $k$  – константа скорости химической реакции;  $C_A$ ,  $C_B$  – концентрации веществ;  $n_1$ ,  $n_2$  – порядки по соответствующим веществам. Это выражение известно в физической химии как закон действующих масс.

Чем выше значения концентраций, тем выше скорость химической реакции.

Порядок  $n$  определяется экспериментально и связан с механизмом химической реакции. Порядок может быть целым или дробным числом, существуют также реакции нулевого порядка по каким-то веществам. Если порядок по  $i$ -му веществу равен нулю, то скорость химической реакции не зависит от концентрации этого вещества. Как и величина порядка реакции, величины энергии активации и предэкспоненциального множителя определяются для конкретной реакции экспериментально.

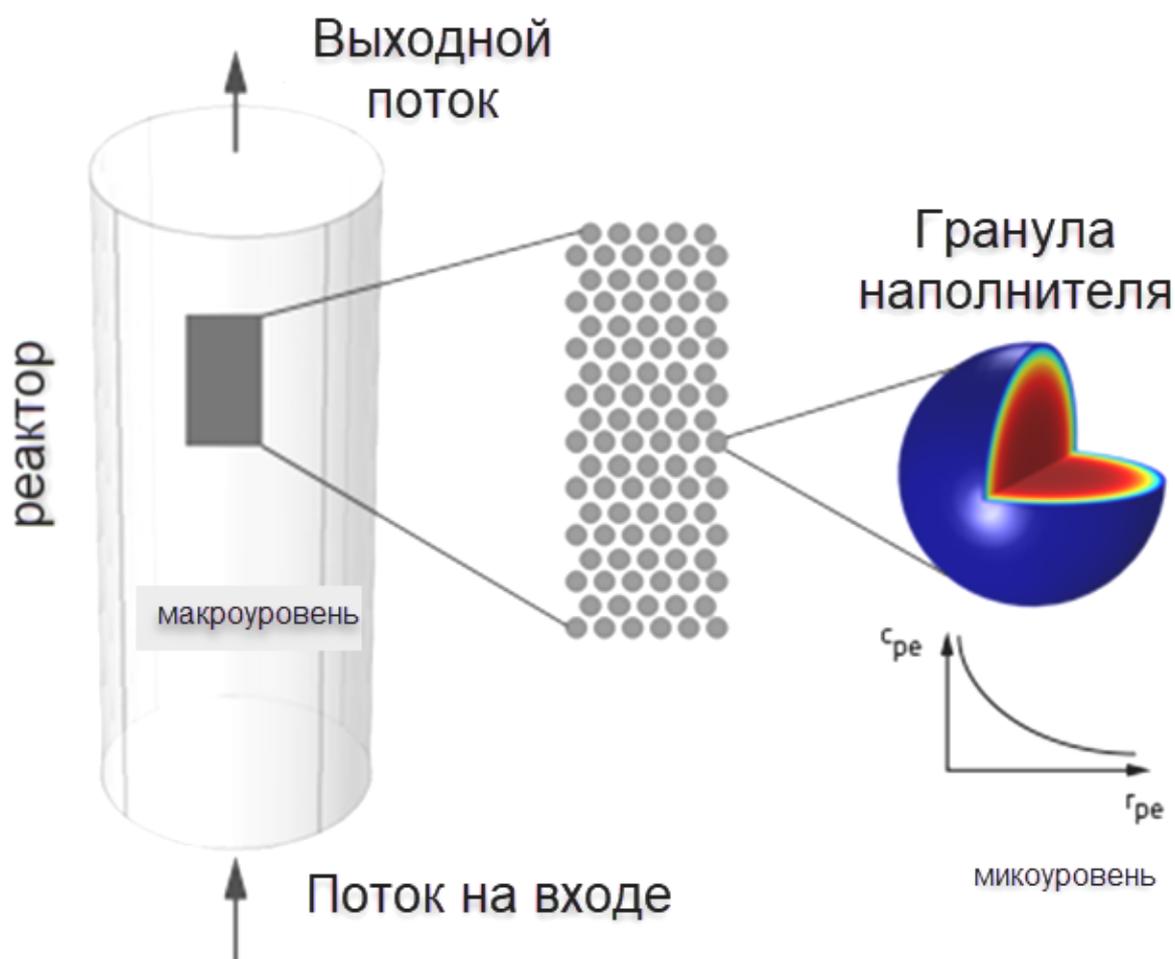


Рис. 2.7. Многоуровневая трехмерная модель реактора с каталитическим наполнителем демонстрирует простую необратимую химическую реакцию  $A \rightarrow B$ , происходящую в гранулах

Если химическая реакция осуществляется в гетерогенном процессе, то на ее скорость оказывает влияние также процесс подвода исходных веществ и отвода продуктов из зоны химической реакции. Таким образом, имеет место сложный процесс, в котором имеются диффузионные стадии (подвод, отвод) и кинетическая стадия – собственно химическая реакция. Скорость всего процесса в целом, наблюдаемого в эксперименте, определяется скоростью самой медленной стадии.

Таким образом, влияя на скорость диффузионной стадии процесса (перемешивание), влияем на скорость всего процесса в целом. Это влияние сказывается на величине предэкспоненциального множителя  $A$ .

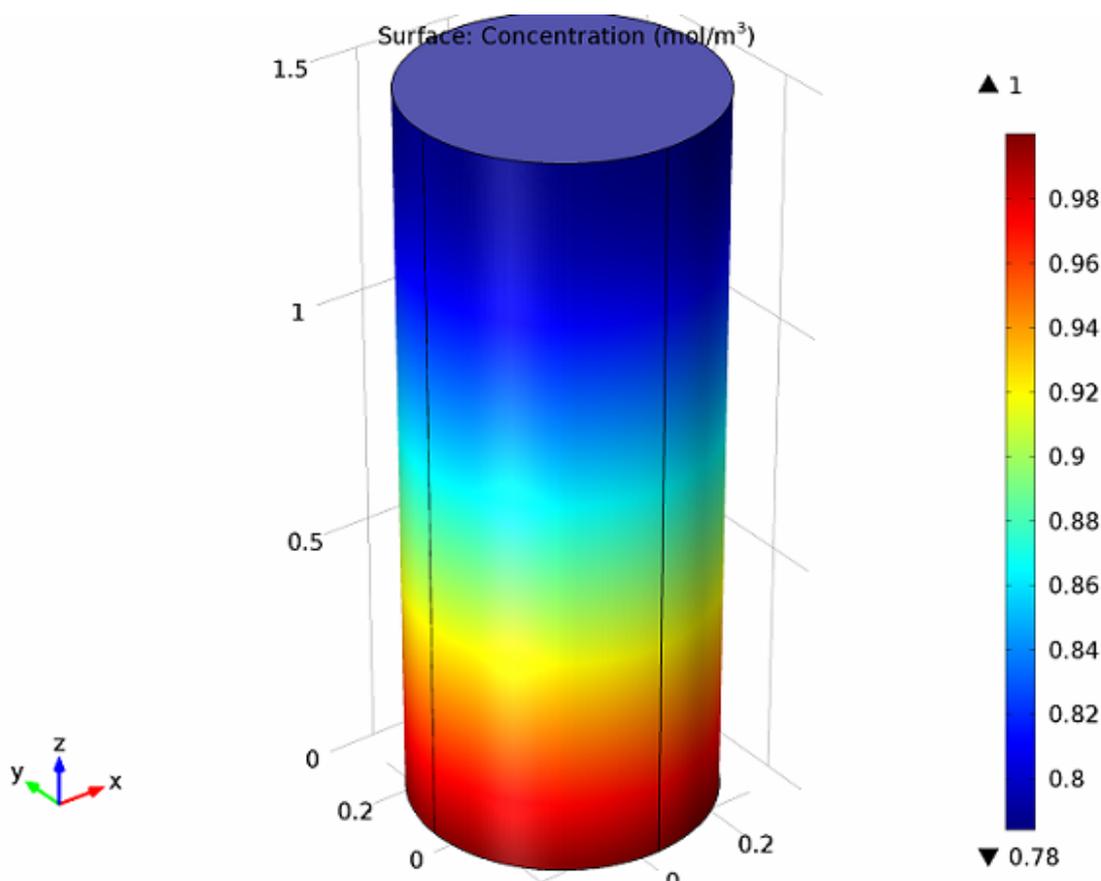


Рис. 2.8. График, показывающий концентрацию реагента  $C_A$  на макроуровне

Большинство химических реакций не являются простыми (т. е. идут не в одну стадию и не до конца) – сложные химические реакции:

- а)  $A \rightleftharpoons B$  – обратимые;
- б)  $A \rightarrow B; B \rightarrow C$  – последовательные;
- в)  $A \rightarrow B; A \rightarrow C$  – параллельные.

Для сложной химической реакции нет единой меры скорости. В отличие от простой, здесь можно говорить о скорости образования и разрушения каждого химического вещества. Таким образом, если в системе происходят химические реакции и участвуют  $n$  веществ, для каждого из  $n$  веществ есть свое значение скорости.

Для любого из веществ скорость образования и разрушения является алгебраической суммой скоростей всех стадий с участием этого вещества.

## Глава 3. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ МЕТОДАМИ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Экспериментальные методы широко используются как в науке, так и в промышленности, однако нередко с весьма различными целями. Обычно основная цель научного исследования состоит в том, чтобы показать статистическую значимость эффекта воздействия определенного фактора на изучаемую зависимую переменную. В условиях промышленного эксперимента основная цель обычно заключается в извлечении максимального количества объективной информации о влиянии изучаемых факторов на производственный процесс. Также желательно это сделать с помощью наименьшего числа дорогостоящих наблюдений.

Обычно любая машина или станок, используемый на производстве, позволяет операторам изменять различные настройки, влияя на качество производимого продукта. Эксперименты позволяют инженеру, ответственному за производство, улучшать настройки машины, а также выяснить какие факторы вносят наиболее важный вклад в качество продукции. Использование этой информации позволяет улучшить настройки системы, достигнув оптимального качества [10].

**Особенности экспериментальных исследований.** Объекты исследования в любом из направлений прикладных исследований, как правило, являются сложными и связаны со значительным количеством как контролируемых, так и неконтролируемых (независимых) факторов. На параметры их состояния могут существенно влиять элементы случайности, имеющие сложную природу происхождения. Для установления закономерностей функционирования этих объектов в реальных условиях одних теоретических исследований недостаточно, так как не всегда удается аналитически описать исследуемый объект с достаточной точностью. Такие объекты характерны практически для всех областей прикладных исследований как в технике, так и в машиностроении, и в области естественных наук.

Экспериментальные данные могут быть использованы для проверки и уточнения рабочих гипотез, а также обоснования направления исследований в соответствующей области. Эффективность исследований в целом повышается, если теоретические предпосылки уточняются опытным путем, а экспериментальные данные анализируются и

обобщаются на базе теоретических положений соответствующих отраслей наук.

Эксперимент – это метод исследования, заключающийся в целенаправленном воздействии на объект в заранее заданных контролируемых условиях, позволяющий контролировать его ход с точной фиксацией значений заранее заданных параметров исследуемого объекта с требуемой надежностью и точностью и воссоздавать его каждый раз по мере необходимости при повторении одних и тех же условий его проведения. При этом учитываются как условия, так и параметры исследуемого объекта (параметры рабочих органов машин и оборудования, отдельные операции технологических процессов, характеристики явлений и др.).

При проведении эксперимента исследователь прибегает к другим (более простым) методам исследования:

- наблюдению, основанному на целенаправленном восприятии явлений (причем исследователю на основе имеющихся у него знаний известно, что и как наблюдать);

- описанию, основанному на фиксации сведений, полученных на основе наблюдения;

- измерению, заключающемуся в сравнении объектов по каким-либо сходным свойствам, признакам с эталоном и установлении количественных характеристик.

Основной задачей любого эксперимента является не только получение неизвестных ранее сведений об объекте исследования, но и достоверное установление закономерностей его поведения в изменяющихся условиях, совпадающих с условиями его функционирования в природе, технике, общественной жизни и т. д. С помощью эксперимента могут быть получены данные, обработка которых позволит получить математические модели, достоверно описывающие изучаемый объект, вскрыть закономерности его поведения в изменяющихся условиях, т. е. решить задачу идентификации [43].

В зависимости от особенностей объекта и поставленных целей экспериментальные исследования могут быть проведены в различных условиях. При этом различают лабораторные, лабораторно-полевые, заводские и т. д.

Для получения надежных и достоверных результатов экспериментальных исследований необходимо осуществить:

- анализ характеристик исследуемого объекта во всем многообразии свойств, предусмотренных целью проведения исследования, на

основе имеющихся сведений, полученных другими исследователями и опубликованных в источниках информации;

- разработку программы экспериментальных исследований;
- обоснование выбора количественных параметров (критериев или измеряемых величин) оценки свойств объекта, выбрать их размерности и способы измерения в ходе эксперимента;

- определение всех факторов, влияющих на выбранные на основе поисковых исследований (если в этом есть необходимость) для наблюдения параметры рассматриваемого объекта в условиях протекания изучаемых явлений и процессов;

- рассмотрение причинно-следственных связей между параметрами оценки свойств объекта и выявленными факторами;

- ранжирование факторов по степени их влияния на параметры (критерии) оценки свойств объекта и выделение из них основных (доминирующих);

- определение рациональных интервалов варьирования выделенных факторов для установления соответствующих закономерностей, предусмотренных программой исследований;

- фиксирование остальных факторов на определенных (возможно, лучших) уровнях варьирования;

- разработка конструктивно-технологических схем опытно-экспериментальных установок или стендов, обеспечивающих реализацию намеченной программы исследований;

- изучение возможностей моделирования объекта;

- подбор соответствующей существующей или разработка новой измерительной аппаратуры, фиксирующей во время проведения экспериментов измеряемые величины через исполнительные органы (датчики, усилители, компьютеры и т. д.);

- разработка методики тарировки выбранных средств измерения, их установки для надежного измерения или регистрации контролируемых величин;

- разработка методики обработки первичной документации, в том числе журналов наблюдений, протоколов или актов исследований с обеспечением требований надежности, точности и достоверности результатов эксперимента [48].

В ходе обработки экспериментальных результатов устанавливаются закономерности изучаемых явлений и процессов, происходящих с участием исследуемого объекта, что позволяет получить достоверный ответ на интересующие исследователя проблемы и вопросы.

Для иллюстрации установленных закономерностей принято использовать таблицы, диаграммы, графики, математические модели и др.

При изучении сложных систем часто возникают ситуации, когда явно невозможно выделить и отдельно изучить те или иные явления или процессы. В этом случае при экспериментальном исследовании объекта используется построение математических моделей, которые с соответствующей степенью достоверности описывают реальный исследуемый объект. В этом случае точное понятие «закон» или «закономерность» «заменяется более приближенным и абстрактным понятием» «модель», которое несет в себе элемент неоднозначности и некоторой неопределенности, но практически более понятно и удобно в использовании. Конечно, здесь нет противоречия, если данная модель описывает объект исследования с требуемой достоверностью и точностью оцениваемых параметров. Как и в случае с теоретическими исследованиями, при построении моделей в эксперименте одни и те же системы и процессы могут описываться разными моделями и с разной точностью, в зависимости от конкретных условий.

Иногда при обработке экспериментальных данных ставится задача оптимизации параметров объекта по некоторым количественным или качественным критериям. Для этого используются известные методики, соответствующие программные и технические средства обработки данных. Достоверность того факта, что параметры оптимизации действительно позволяют оптимизировать свойства объекта, должна быть подтверждена прямым экспериментом, условия для которого соответствуют оптимизируемым параметрам. Только в этом случае можно говорить о достоверности практических выводов и рекомендаций.

**Вычислительный эксперимент.** Машинный эксперимент с моделью системы  $S$  при ее исследовании и проектировании проводится с целью получения информации о характеристиках процесса функционирования рассматриваемого объекта. Эта информация может быть получена как для анализа характеристик, так и для их оптимизации при заданных ограничениях, т. е. для синтеза структуры, алгоритмов и параметров системы  $S$ . В зависимости от поставленных целей моделирования системы  $S$  на компьютере имеются различные подходы к организации имитационного эксперимента с машинной моделью (ММ) [44].

Основная задача планирования машинных экспериментов – получение необходимой информации об исследуемой системе  $S$  при ограничениях на ресурсы (затраты машинного времени, памяти и т. п.).

К числу частных задач, решаемых при планировании машинных экспериментов, относятся задачи уменьшения затрат машинного времени на моделирование, увеличения точности и достоверности результатов моделирования, проверки адекватности модели и т. д.

Эффективность машинных экспериментов с *ММ* существенно зависит от выбора плана эксперимента, так как именно план определяет объем и порядок проведения вычислений на компьютере, приемы накопления и статистической обработки результатов моделирования системы *S*.

Поэтому основная задача планирования машинных экспериментов с моделью *ММ* формулируется следующим образом: необходимо получить информацию об объекте моделирования, заданном в виде моделирующего алгоритма (программы), при минимальных или ограниченных затратах машинных ресурсов на реализацию процесса моделирования.

Таким образом, при машинном моделировании рационально планировать и проектировать не только саму модель *ММ* системы *S*, но и процесс ее использования, т. е. проведение с ней экспериментов с использованием компьютера.

К настоящему времени в различных областях знаний сложилась теория планирования экспериментов, в которой разработаны достаточно мощные математические методы, позволяющие повысить эффективность таких экспериментов.

Несмотря на то, что цели экспериментального моделирования на компьютере и проведения натуральных экспериментов совпадают, между видами экспериментов существуют различия, поэтому для планирования эксперимента наиболее важное значение имеет следующее:

1) простота повторения условий эксперимента на компьютере с моделью *ММ* системы *S*;

2) возможность управления экспериментом с моделью *ММ*, включая его прерывание и возобновление;

3) легкость варьирования условий проведения эксперимента (воздействий внешней среды *E*);

4) наличие корреляции между последовательностью точек в процессе моделирования;

5) трудности, связанные с определением интервала моделирования  $(0, T)$ .

Преимуществом машинных экспериментов перед натурным является возможность полного воспроизведения условий эксперимента

с моделью исследуемой системы  $S$ . Сравнить две альтернативы возможно при одинаковых условиях, что достигается, например, выбором одной и той же последовательности случайных чисел для каждой из альтернатив. Существенным достоинством перед натурными является простота прерывания и возобновления машинных экспериментов, что позволяет применять последовательные и эвристические приемы планирования, которые могут оказаться нереализуемыми в экспериментах с реальными объектами. При работе с машинной моделью  $MM$  всегда возможно прерывание эксперимента на время, необходимое для анализа результатов и принятия решений об его дальнейшем ходе (например, о необходимости изменения значений параметров модели  $MM$ ) [48, 49].

Недостатком машинных экспериментов является то, что часто возникают трудности, связанные с наличием корреляции в выходных последовательностях, т. е. результаты одних наблюдений зависят от результатов одного или нескольких предыдущих, и поэтому в них содержится меньше информации, чем в независимых наблюдениях. Так как в большинстве существующих методов планирования экспериментов предполагается независимость наблюдений, то многие из этих методов нельзя непосредственно применять для машинных экспериментов при наличии корреляции.

### **3.1. Основные понятия корреляционного, регрессионного и дисперсионного анализа**

Для технологических экспериментов характерны статистические объекты исследований, в которых имеют место стохастические или корреляционные взаимосвязи между параметрами и факторами. Получить математическую модель технологического процесса – значит найти математическое описание этих взаимосвязей.

В методе активного регрессионного анализа, как правило, производится отсеивание незначимых (несущественно отличающихся с заданной вероятностью от нуля) коэффициентов регрессии. В обычном методе регрессионного анализа отсеивание незначимых коэффициентов регрессии, как правило, не проводится ввиду того, что требует вычисления определителей высокого порядка. Наиболее просто отсеивание производится для ортогональных планов.

В задачу корреляционного, регрессионного и дисперсионного анализа входит получение на основании экспериментальных данных

математической модели процесса и ее анализ. Методы корреляционного и регрессионного анализа применимы только для таких параметров, которые при изучении физической природы объекта являются взаимосвязанными [65].

На первом этапе обычно оценивают степень тесноты взаимосвязи значений функции отклика с одной или несколькими независимыми переменными. В первом случае используется *коэффициент парной корреляции*  $r_{yx}$ , во втором – *коэффициент множественной корреляции*  $R_{yx_1, x_2, \dots, x_m}$ .

Коэффициент парной корреляции:

$$r_{yx} = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{nS_y S_x}, \quad (3.1)$$

где  $n$  – объем выборки;  $\bar{y}$  и  $\bar{x}$  – средние арифметические значения  $y_i$  и  $X_i$  в рассматриваемой выборке;  $S_y$  и  $S_x$  – их средние квадратические отклонения.

Коэффициент множественной корреляции с использованием метода определителей находится по формуле

$$R_{1,2,3,\dots,m} = \sqrt{1 - \frac{D}{D_{11}}}, \quad (3.2)$$

где  $m$  – число независимых переменных;  $D$  – определитель, составленный из всех коэффициентов парной корреляции;  $D_{11}$  – определитель, получающийся из  $D$  исключением левого столбца и верхней строки:

$$D = \begin{vmatrix} 1 & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1m} \\ r_{21} & 1 & r_{23} & \dots & r_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{m1} & r_{m2} & r_{m3} & \dots & 1 \end{vmatrix}; \quad D_{11} = \begin{vmatrix} 1 & r_{23} & \dots & r_{2m} \\ r_{32} & 1 & \dots & r_{3m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{m2} & r_{m3} & \dots & 1 \end{vmatrix}. \quad (3.3)$$

Значения  $r_{yx}$  (3.1) и  $R_{yx_1, x_2, \dots, x_m}$  (3.2) находятся в пределах от  $-1$  до  $+1$ . Если они достоверны, т. е. существенно отличаются от  $0$ , значит между исследуемыми факторами имеется линейная корреляционная зависимость. В противном случае эта зависимость отсутствует либо является существенно нелинейной. В результате корре-

ляционным анализом подтверждается наличие взаимосвязей между исследуемыми факторами [50].

На следующем этапе обработки экспериментальных данных с помощью регрессионного анализа выбирают модель, в наилучшей степени описывающую указанные взаимосвязи. Уравнение, по которому могут быть найдены числовые значения выборочных средних функций отклика при соответствующих значениях независимых переменных, называется *уравнением регрессии*. В общем случае оно может быть записано в виде

$$\bar{y} = f(x_1, x_2, \dots, x_m). \quad (3.4)$$

При аппроксимации неизвестных функций отклика (3.4) в математической статистике часто используют полиномиальные модели, а наиболее часто – простейшие из них – квадратичные:

$$\bar{y} = b_0 + \sum_{i=1}^m b_i x_i + \sum_{i,j=1, i \neq j}^m b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^m b_{ii} x_i^2, \quad (3.5)$$

где  $b_0, b_i, b_{ij}, b_{ii}$  – коэффициенты регрессии.

С позиций статистики полиномиальная модель (3.4) удобна тем, что позволяет увеличить степень точности аппроксимации за счет повышения порядка полинома.

При определении параметров уравнения регрессии все переменные и соотношения между ними выгодно выражать в стандартизированном масштабе. Значения переменных в стандартизированном масштабе определяются по формуле

$$t_{x_i} = \frac{(x_i - \bar{x})}{S_x}, \quad (3.6)$$

где  $x_i$  – значения переменных в натуральном масштабе;  $S_x$  – их среднеквадратичные отклонения от среднеарифметического значения  $\bar{x}$ .

### ***Условия применимости статистического анализа***

Статистическое уравнение адекватно описывает результаты опытов, если квадратическое отклонение от экспериментальных данных  $y_i$  значений зависимой переменной  $y_{p_i}$ , рассчитанной по уравне-

нию регрессии, обусловлено только ошибкой воспроизведения (т. е. случайным характером этого параметра).

Применение корреляционного и регрессионного анализа правомерно и эффективно при соблюдении ряда условий:

1. Параметр оптимизации  $y$  – случайная величина с нормальным законом распределения.

2. Дисперсия  $S_y^2$  не зависит от абсолютных значений величины  $y$  и остается постоянной и однородной при различных наблюдениях  $y$ .

3. Значения независимых переменных  $x_1, x_2, \dots, x_m$  изменяются с пренебрежимо малыми ошибками по сравнению с ошибкой в определении  $y$ .

4. Переменные  $x_1, x_2, \dots, x_m$  линейно независимы.

5. Процесс изменения зависимой переменной  $y$  является стационарным и случайным.

6. Экспериментальные данные получены из ряда независимых испытаний и образуют случайную выборку из данной генеральной совокупности [48, 50].

Рассмотрим проверку выполнения этих условий:

1. Соответствие  $y$  нормальному закону распределения устанавливается либо по большим выборкам с помощью критериев Пирсона или Колмогорова, либо на основании анализа природы величины  $y$ .

2. Для оценки однородности дисперсии  $S_y^2$  проводят параллельные опыты в различных точках матрицы плана (т. е. при различных значениях  $x_1, x_2, \dots, x_m$ ).

Если сравниваются два значения  $S_{y_1}^2$  и  $S_{y_2}^2$  при различных числах степеней их свободы  $f$  ( $f = N - 1$ ,  $N$  – число параллельных опытов или объем выборки), то используется критерий Фишера, рассчитываемый как отношение большей дисперсии к меньшей:

$$F_p = \frac{S_{y_1}^2}{S_{y_2}^2}, \quad (3.7)$$

где  $S_{y_1}^2 > S_{y_2}^2$ .

Если наблюдаемое значение  $F_p$  (3.6) меньше критического  $F_{кр}$  для соответствующих чисел степеней свободы и принятого уровня значимости, то опыты считаются воспроизводимыми, а дисперсии однородными.

Однородность ряда дисперсий при одинаковом числе опытов (для определения каждой из них) оценивают с помощью критерия Кохрена – отношения максимальной дисперсии к сумме всех дисперсий ряда:

$$G_p = \frac{S_{y \max}^2}{(S_{y_1}^2 + S_{y_2}^2 + \dots + S_{y_N}^2)} = \frac{S_{y \max}^2}{\sum_{j=1}^N S_{y_j}^2}, \quad (3.8)$$

где  $N$  – число параллельных опытов или различных выборок. Дисперсии однородны, если расчетное значение  $G_p$  (3.7), не превышает критического  $G_{кр}$ .

При неравном числе степеней свободы для каждой из дисперсий ряда их однородность проверяют с помощью критерия Бартлета. Вначале определяют средневзвешенную дисперсию:

$$S_y^2 = \frac{\sum_{j=1}^N f_j S_{y_j}^2}{\sum_{j=1}^N f_j}, \quad (3.9)$$

а затем вычисляют:

$$B = 2,303 \left[ \lg S_y^2 \sum_{j=1}^N f_j - \sum_{j=1}^N (f_j \lg S_{y_j}^2) \right]; C = 1 + \frac{\left[ \sum_{j=1}^N \frac{1}{f_j} - \frac{1}{\sum_{j=1}^N f_j} \right]}{3(N-1)}, \quad (3.10)$$

где  $f_j = n_j - 1$ ;  $n_j$  – объем  $j$ -й выборки.

В случае, когда все  $S_{y_j}^2$  соответствуют одной генеральной дисперсии, отношение  $B/C$  распределено аналогично критерию Пирсона  $\chi^2$  с  $N - 1$  степенями свободы. Это значит, что при  $B/C \leq \chi_{1-p}^2$ , данном числе степеней свободы  $N - 1$  и заданном уровне значимости  $p$  дисперсии однородны.

3. Воспроизводимость опытов и однородность дисперсий достигается, когда выявлены и устранены источники нестабильности экс-

перимента, а также с помощью более точных средств и методов измерений.

Проверку достаточной точности измерения значений независимых переменных можно произвести, сопоставив ее с диапазоном изменения последних. Считается, что ошибки определения независимых переменных не должны превышать 5–7 % интервала их варьирования. Ошибки в определении значений зависимой переменной не влияют столь значительно на точность регрессионного анализа и могут составить до 30 % интервала варьирования.

4. Отсутствие коррелированности независимых переменных проверяется расчетом парных коэффициентов корреляции между ними.

5. Случайные процессы называют стационарными в том случае, если основные характеристики процесса (математическое ожидание, дисперсия и др.) постоянны или однородны во времени. Поскольку при пассивном эксперименте свойства процесса определяются по одной представительной выборке, распространять полученные результаты на весь процесс можно лишь при условии его стационарности [49].

Проверка стационарности процесса производится в следующем порядке.

По результатам измерения параметра строится случайная последовательность его значений, соответствующая порядку проведения измерений. Полученную реализацию разбивают на несколько (5–10) равных отрезков, для каждого отрезка устанавливают дисперсию  $S_{y_j}^2$  и с помощью критерия Кохрена (3.8) определяют, являются ли значения  $S_{y_j}^2$  на каждом из отрезков оценками одной и той же генеральной дисперсии  $\sigma^2$ .

Затем на каждом отрезке проводится сравнение среднеарифметических  $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N$ , соответствующих выборочным дисперсиям  $S_1^2, S_2^2, \dots, S_N^2$ , числам степеней свободы  $f_1, f_2, \dots, f_N$  ( $f_j = n_j - 1$ , где  $n_j$  – объем соответствующей выборки). Всем выборкам соответствует генеральная дисперсия  $\sigma^2$ , в качестве ее оценки можно взять средневзвешенную дисперсию  $S_{y_j}^2$  (3.9).

Чтобы гипотеза о равенстве всех генеральных средних была справедлива, должно соблюдаться условие:

$$\frac{\bar{S}_y^2}{S_y^2} \leq F_{1-p(N-1, f)},$$

в котором  $\bar{S}_y^2 = \frac{\sum_{j=1}^N n_j (\bar{y}_j - \bar{\bar{y}})^2}{N-1}$ , где  $F_{1-p(N-1, f)}$  – табличное значение критерия Фишера;  $\bar{\bar{y}}$  – общее среднее всех элементов, отрезков при объединении их в одну выборку

Проверку гипотезы о случайности выборки, необходимую при пассивном эксперименте, можно произвести методом последовательных разностей.

По значениям  $X_1$  выборки, расположенным в последовательности их наблюдения  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , образуется  $n - 1$  разностей между соседними членами:  $a_1 = x_2 - x_1, a_2 = x_3 - x_2, \dots, a_{n-1} = x_n - x_{n-1}$ .

Для оценки случайности выборки используется критерий  $\tau = \frac{c^2}{s^2}$ , в котором:

$$c^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} a_i^2}{2(n-1)}; \quad s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} (x_i - \bar{x})^2}{n-1}. \quad (3.11)$$

Если  $\tau < \tau_q$ , где  $\tau_q$  – критическое значение при уровне значимости  $q$ , то гипотеза о случайности выборки верна.

### 3.2. Оценка достоверности результатов анализа

Поскольку результаты корреляционно-регрессионного анализа, полученные на базе ограниченного числа экспериментальных данных, являются случайными величинами, необходимо оценить их достоверность, определить доверительные интервалы, в которых находятся их истинные значения.

Для этого производится комплекс операций:

- оценка достоверности коэффициентов корреляции;
- оценка значимости коэффициентов регрессии;
- оценка адекватности уравнения регрессии.

Рассмотрим последовательность проведения операций.

При любом объеме выборки и многомерном нормальном распределении рассматриваемых факторов вычисляется статистика, имеющая распределение Стьюдента с  $f = n - 2$  степенями свободы:

$$t = r \sqrt{\frac{n-2}{1-r^2}}, \quad (3.12)$$

где  $r$  – коэффициент корреляции.

Для проверки нулевой гипотезы  $H_0$  (согласно которой коэффициент корреляции генеральной совокупности равен нулю) находят по таблицам при фиксированном уровне значимости  $\alpha$  и числе степеней свободы  $f = n - 2$ , критическое значение  $t_{\alpha/2, n-2}$ , удовлетворяющее условию  $P(|t| \geq t_{\alpha/2, n-2}) = \alpha$ . Если наблюдаемое значение  $t_H \geq t_{\alpha/2, n-2}$ , то нулевую гипотезу об отсутствии линейной зависимости между переменными  $x$  и  $y$  следует отвергнуть. Такой метод часто применяют при малом объеме выборок [49, 65].

При числе наблюдений  $n > 50$  надежность коэффициента корреляции можно оценить по его среднему квадратичному отклонению

$$S_r = \frac{1-r^2}{\sqrt{n}} \quad (3.13)$$

и нормированному отклонению

$$t_r = \frac{|r|}{S_r}. \quad (3.14)$$

Достоверность коэффициента корреляции считается доказанной с вероятностью 0,997, если  $t_r \geq 3$ , с вероятностью 0,990 при  $t_r \geq 2,58$ ; с вероятностью 0,95 при  $t_r \geq 1,96$ . Если  $n$  достаточно велико, а  $r$  близко к 0,5, то границы доверительного интервала для коэффициента корреляции генеральной совокупности  $\rho$ :

$$r - t_{кр} S_r \leq \rho \leq r + t_{кр} S_r. \quad (3.15)$$

Значение  $t_{кр}$  устанавливается по таблице функции Лапласа для выбранной вероятности. Если левая и правая части неравенства имеют одинаковый знак, то  $r$  имеет достоверный знак и является значимым.

Соотношения (3.13)–(3.15) справедливы и при оценке достоверности коэффициента множественной корреляции и корреляционных отношений.

Проверку значимости коэффициентов регрессии можно производить двумя способами: сравнением абсолютного значения коэффициента с доверительным интервалом и с помощью  $t$ -критерия Стьюдента.

В первом случае доверительный интервал для коэффициента  $b_i$  вычисляют по формуле  $\Delta b_i = \pm t_T S_{b_i}$ , где  $t_T$  – табличное значение критерия Стьюдента при уровне значимости и числе степеней свободы, для которых определялось  $S_{b_i}$ ,  $S_{b_i}$  – среднеквадратичное отклонение  $b_i$ . Коэффициент значим, если его абсолютное значение больше доверительно интервала.

При проверке значимости коэффициентов вторым способом вычисляют  $t_p = \frac{|b_i|}{S_{b_i}}$  и сравнивают его с критическим значением этого критерия  $t_{кр}$ . Коэффициент значим, если  $t_p > t_{кр}$  для принятого уровня значимости и числа степеней свободы, при которых определялось  $S_{b_i}$ .

Методика определения  $S_{b_i}$  зависит от способа получения уравнения регрессии. В случае применения планирования эксперимента:  $S_{b_i}^2 = \frac{S^2(y)}{nN}$ , где  $S^2(y)$  – дисперсия воспроизводимости эксперимента;  $n$  – число параллельных опытов в каждой точке матрицы при равномерном дублировании опытов (при отсутствии дублирования  $n = 1$ );  $N$  – общее число опытов в матрице плана.

При равномерном дублировании опытов во всех строках матрицы плана число параллельных опытов одинаково. Для каждой строки этой матрицы вычисляют дисперсию  $S_j$  результатов по данным  $n$  па-

раллельных опытов  $S_j^2 = \frac{\sum_{u=1}^n (y_{ju} - \bar{y}_j)^2}{n-1}$ , где  $y_{ju}$  – значение функции отклика в  $j$ -й строке для  $u$ -го опыта.

Если  $S_j^2$  результатов опытов однородны, то дисперсия  $S^2(y)$  воспроизводимости эксперимента:

$$S^2(y) = \frac{\sum_{j=1}^N S_j^2}{N}, \quad (3.16)$$

где  $N$  – число опытов или число строк матрицы плана.

При отсутствии дублирования опытов для определения дисперсии воспроизводимости эксперимента выполняют  $n_0$  параллельных опытов при средних уровнях всех независимых факторов. По результатам этих опытов вычисляют:

$$S^2(y) = \frac{\sum_{u=1}^{n_0} (y_u - \bar{y})^2}{n_0 - 1}, \quad (3.17)$$

где  $y_u$  – значение функции отклика в  $u$ -м параллельном опыте.

При равномерном дублировании опытов число степеней свободы для расчета  $S^2(y)$  и, следовательно,  $S_{b_i}$  находится как  $f = N(n - 1)$ , при отсутствии дублирования опытов  $f = n_0 - 1$ .

3. В зависимости о наличии сведений о дисперсии воспроизводимости эксперимента  $S^2(y)$  проверку адекватности уравнения регрессии можно производить по двум схемам.

Схема I, состоящая из трех этапов, А–В применяется при отсутствии оценки дисперсии воспроизводимости, что характерно для пассивного эксперимента:

**А.** Вычисляется дисперсия относительно среднего значения параметра оптимизации:

$$S_{y_0}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{N - 1}. \quad (3.18)$$

**Б.** Рассчитывается дисперсия, характеризующая отклонение экспериментальных значений величин от найденных по уравнению регрессии. Если порядок уравнения заранее неизвестен, то в случае многофакторного пространства имеет смысл начинать с уравнения первого порядка:

$$S_{y_1}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{f}, \quad (3.19)$$

где  $\hat{y}_i$  – значение параметра оптимизации, вычисленное по уравнению регрессии для условий  $i$ -го опыта;  $f = N - g$  – число степеней свободы;  $g$  – число коэффициентов регрессии.

**В.** Вычисляется опытное значение отношения дисперсий  $F_0 = S_{y_0}^2 / S_{y_1}^2$ , которое затем сравнивают с критическим  $F_{кр}(f_1, f_2)$ . Если  $F_0 \leq F_{кр}$ , пользоваться уравнением регрессии первого порядка не имеет смысла, так как в изученном интервале изменения уровней факторов оно описывает исследуемую систему не лучше, чем уравнение нулевого порядка. Затем составляют уравнение второго порядка, рассчитывают  $S_{y_2}^2$  и  $F_1 = S_{y_2}^2 / S_{y_1}^2$ . Далее проверяют значимость этого отношения по критерию Фишера. Процедуру повторяют до тех пор, пока не будет выполнено условие  $F_r \geq F_{кр}(f_r, f_{r+1})$ .

Схема II применяется, если известна дисперсия воспроизводимости  $S^2(y)$  эксперимента.

Для оценки адекватности модели вначале рассчитывают дисперсию адекватности  $S_{ад}^2$  по формуле (3.18), а затем вычисляют опытное значение критерия Фишера:  $F_p = S_{ад}^2 / S^2(y)$ . Если  $F_p < F_{кр}(f_r, f_{r+1})$ , модель считают адекватной. Значение  $S^2(y)$  определяют в зависимости от характера дублирования опытов по формулам (3.18) и (3.17).

При отборе факторов, предназначенных для включения в статистическую модель, принимается во внимание, что они должны быть управляемыми по величине и измеримыми с необходимой точностью. Факторы должны быть взаимно не коррелированы и однозначно связаны с выходными параметрами.

Отбор некоторого числа (3–7) наиболее существенных факторов производится путем построения диаграммы ранжирования, т. е. расположения всех изучаемых факторов в порядке убывания силы их влияния на выходной параметр. Для построения такой диаграммы используются методы априорного ранжирования и случайного баланса.

Априорное или доопытное ранжирование выполняется в форме опроса группы экспертов, которым предлагается расположить рассматриваемые факторы по степени их значимости. При этом каждому порядковому месту в ряду значимости приписывают ранг, например, равный номеру этого места [65].

Диаграмма ранжирования может быть построена по сумме рангов, если согласие между экспертами подтверждается статистически значимым по  $\chi^2$  – критерию коэффициентом конкордации:

$$W = \frac{\left( \sum_{j=1}^l R_j \right)_{\text{cp}} \sum_{i=1}^k \Delta_j^2}{l^2 (k^3 - 1)}, \quad (3.20)$$

где  $\left( \sum_{j=1}^l R_j \right)_{\text{cp}}$  – средняя сумма рангов  $R_j$  для всех факторов;  $\Delta_j$  – отклонение суммы рангов для  $j$ -го эксперта от средней суммы рангов;  $l$  – число экспертов;  $k$  – число ранжируемых факторов. Чем выше значение  $W$ , тем сильнее согласованность мнений экспертов и выше достоверность полученной ранжировки.

*Метод случайного баланса* используется для экспериментального отсеивания факторов по данным небольшой серии опытов со случайным выбором наибольшего или наименьшего значения исследуемых факторов в каждом опыте. Для удобства записи плана эксперимента вводят нормированное обозначение величины фактора  $(-1; 0; +1)$ .

Результаты опытов используют для построения диаграммы рассеяния (рис. 3.1) откладывая для каждого фактора отдельно по ординате значения  $y$  в тех опытах, когда фактор  $x$  был на нижнем уровне  $-1$  и на верхнем уровне  $+1$  при любых значениях остальных факторов.

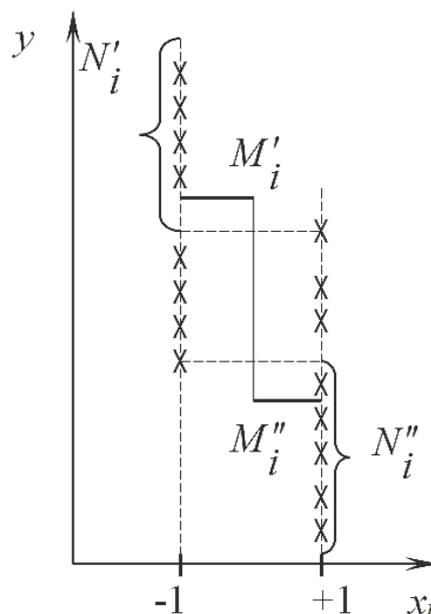


Рис. 3.1. Построение диаграммы рассеяния значений  $y$  для ранжирования факторов  $x$  с помощью медиан  $M_i$

Произведение разности медиан  $\Delta M = M_i'' - M_i'$  полученных двух групп точек на количество выделяющихся точек  $\Delta N = N_i'' + N_i'$ , расположенных ниже нижней и выше верхней точек другого уровня, является мерой влияния фактора  $X_I$  на  $y$ . Величина ранга  $R = \Delta N \cdot \Delta M$  служит для ранжирования факторов.

*Параметром* у статистической модели может быть только такая выходная переменная, которая поддается измерению с достаточной точностью и однозначно зависит от исследуемых факторов, являясь чувствительной к их изменениям. Важно, чтобы число параметров было минимальным, а в случае построения оптимизационной модели надо свести задачу к однопараметрической. Однако в большинстве случаев исследуемый процесс характеризуется целым набором разноплановых выходных параметров.

Для отбора наиболее важных параметров может быть использовано априорное ранжирование, а также анализ взаимной корреляции между параметрами с целью выявления сильно коррелированных параметров, не являющихся независимыми и не дающих дополнительной информации.

*Обобщенным параметром оптимизации*  $Y$  называют параметр, сформированный на основе группы частных параметров  $y_1, y_2, \dots, y_m$ . Для его получения используют неравноценные по трудоемкости и эффективности приемы.

*Линейная «свертка» параметров* проводится с помощью весовых коэффициентов  $\mu_i$ , величина которых задается с учетом значимости вклада каждого частного параметра:

$$Y = \mu_1 y_1 + \mu_2 y_2 + \dots + \mu_m y_m. \quad (3.21)$$

Если значения  $y_1, y_2, \dots, y_m$  приведены к относительным единицам измерения, тогда  $\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_m = 1$ . Если по каждому из частных параметров ввести норматив  $y^*$ , тогда коэффициенты  $\mu_i$  целесообразно задать с таким учетом, чтобы они давали наибольший вес параметру, для которого экспериментально достигнуто наилучшее приближение к нормативу. В этом случае оптимизация процесса по формуле (3.17) будет происходить преимущественно в направлении улучшения параметров, наиболее далеких от заданного норматива.

*Ранжирование частных параметров* осуществляется по номеру занимаемого места с введением обобщенного рангового параметра:

$$Y' = \sum_{i=1}^m R_i \quad (3.22)$$

или

$$Y'' = \sqrt[m]{R_1 R_2 \cdot \dots \cdot R_m} \quad (3.23)$$

В случае одинаковой величины параметрам присваиваются дробные значения рангов, при которых сохраняется их общая сумма.

Функция желательности  $d$  позволяет нормировать частные значения параметров  $y_i$  и пересчитать их в значения желательности  $d_i$ , из которых формируется обобщенная функция желательности:

$$D = \sqrt[m]{d_1 \cdot d_2 \cdot \dots \cdot d_m}, \quad (3.24)$$

выступающая в качестве параметра оптимизации.

Шкала желательности задается в пределах от 0 до 1 оценками «Очень хорошо» (1,00–0,80), «Хорошо» (0,80–0,63), «Удовлетворительно» (0,63–0,37), «Плохо» (0,37–0,20) и «Очень плохо» (0,20–0) (рис. 3.2).

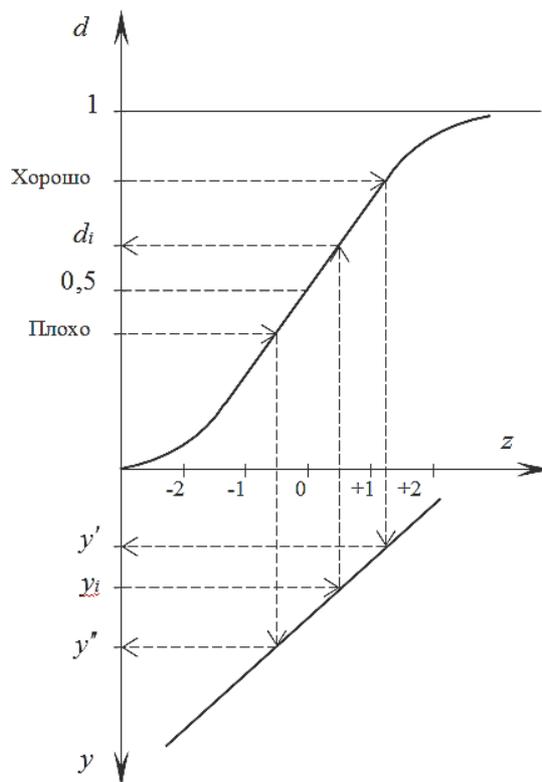


Рис. 3.2. Нормирование параметра  $y_i$  с помощью функции желательности  $d_i$

Определив, что такое «Хорошо» ( $y'$ ) и что такое «Плохо» ( $y''$ ) для частного параметра, графически преобразуют значения  $y_i$  в  $d_i$  (рис. 3.2) с использованием нормирующей функции:

$$d = \exp(-\exp(-z)),$$

где  $z$  – кодированная шкала, пропорциональная натуральным значениям параметров.

Значения  $d_i$  (3.21) используют для расчета и поиска максимума  $D$  (3.20), аналогично рангам  $R_i$  при оптимизации параметра  $Y''$  (3.18) или  $Y'''$  (3.19).

*Адекватностью* называют соответствие математической модели процесса экспериментальным данным. Проверка адекватности аналитической модели состоит в поиске ответа на вопрос о том, соответствует ли натурным данным полученные теоретические зависимости [65].

Для однозначного ответа на вопрос об адекватности детерминированной модели применительно к стохастическим переменным системы целесообразно воспользоваться процедурой корреляционного анализа, вычислив значения коэффициента линейной корреляции между переменными  $y$  и  $x$ :

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}, \quad (3.25)$$

где  $x_i$  и  $y_i$  – пара соответствующих значений  $x$  и  $y$  в каждой  $i$ -й опытной точке;  $\bar{x}$  и  $\bar{y}$  – средние значения  $x$  и  $y$ .

Адекватность модели обеспечивает статистически значимая линейная корреляция с уровнем значимости  $\alpha$  (обычно берут  $\alpha \geq 0,95$ ). Если  $r > r_{кр}(\alpha, n)$ , в котором критическое значение  $r_{кр}$  зависит от принятого уровня значимости  $\alpha$  и числа опытных точек  $n$ , то модель адекватна.

Для программных моделей проверка адекватности является этапом более сложным, чем для теоретических моделей, так как коэффициент корреляции (3.25) может быть использован ограниченно лишь для тех стадий процесса, которые приближенно описываются полученными для упрощенных условий аналитическими моделями.

В общем случае проверка адекватности для программных моделей состоит в сопоставлении расчетных  $y_p$  и экспериментальных  $y_э$

значений, и оценке величины коэффициентов парной корреляции  $r_{y_p y_3}$  по формуле (3.25) и коэффициента линейной регрессии:

$$b = r_{y_p y_3} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_p - \bar{y}_p)^2}{\sum_{i=1}^n (y_3 - \bar{y}_3)^2}}, \quad (3.26)$$

где  $y_p$  и  $y_3$  – пары соответственных значений расчетных и экспериментальных данных;  $\bar{y}_p$  и  $\bar{y}_3$  – средние значения  $y_p$  и  $y_3$  по совокупности всех  $n$  сопоставляемых величин.

Когда  $r < r_{кр}$ , модель неадекватна, в связи с чем следует пересмотреть начальные этапы построения модели и внести в них необходимые корректировки.

Если  $r > r_{кр}$ , а  $b \approx 1$  (3.26), то можно сделать вывод об адекватности модели. Если при  $r > r_{кр}$ ,  $b \ll 1$  можно говорить о принципиальной адекватности полученной модели на основе тесной зависимости между расчетными и экспериментальными данными, а также заключить о необходимости корректировки параметров модели, количественной мерой которой является отличие коэффициента регрессии  $b$  от 1.

Корректировка параметров модели является частным случаем более общей процедуры *параметризации модели*, т. е. подбора таких значений коэффициентов уравнений, входящих в математическую модель, при которых достигается наилучшее согласование модели и натуры.

Обычно используют наиболее доступные возможности оценки параметров модели, т. е. обращение к табличным данным или теоретическому расчету, а также их независимое экспериментальное определение по другим методикам. Если это невозможно, тогда для установления величины какого-либо неопределенного параметра  $k$  полученной программной модели проводят серию вычислений, каждый раз варьируя значение этого параметра в пределах предполагаемого интервала его изменения. При этом рассчитывают значения одного или нескольких *индикаторов*, т. е. таких выходных характеристик процесса  $y^*$ , которые наиболее чувствительны к параметру  $k$  и поддаются экспериментальному определению  $y_3^*$ . Получив расчетную зави-

симось  $y^*(k)$ , нетрудно установить искомое значение параметра  $k_0$ , при котором  $y_3^* = y^*(k_0)$ .

Модели основных физико-технических процессов в рабочей зоне технологической системы на основе систем балансовых уравнений и граничных условий (или с использованием структурных представлений для идеальных и неидеальных технологических потоков) позволяют создавать адекватные математические модели детерминированных систем. Это касается как систем с концентрированными, так и с распределенными параметрами. Также это позволяет находить методы и алгоритмы решения технологических задач.

### **3.3. Математическое планирование экспериментов в технологических процессах**

Приступая к построению статистической модели, экспериментатор обычно имеет начальные представления о том, как влияют изучаемые факторы на выходные параметры.

При выборе вида модели обычно отвечают на вопрос, допустимо ли представлять функцию отклика линейной или заведомо известно, что зависимости являются немонотонными или сильно нелинейными. В области, где функция отклика имеет экстремум, предположение о линейном характере модели, скорее всего, не будет подтверждено. Если в дальнейшем потребуется, могут быть проведены дополнительные опыты по уточнению вида модели. При этом результаты первой серии опытов не пропадают и используются в полной мере для построения нелинейной модели.

При планировании экспериментов исходный этап включает определение основного уровня факторов ( $X = 0$ ) и выбор интервалов варьирования  $\Delta X$  с учетом области действия разрабатываемой модели, предполагаемого характера поверхности отклика и вероятной погрешности определения параметров  $Y$ , а также точности фиксирования принятых уровней факторов. Чем больше погрешность опытов и ниже точность поддержания факторов, тем шире должны быть приняты их интервалы варьирования [43].

Рассмотрим основные виды линейных и нелинейных статических моделей.

При разработке линейной модели ограничиваются обычно варьированием факторов на двух уровнях. Для проведения *полного факторного эксперимента* (ПФЭ) при  $k$  факторах необходимо осуществ-

вить  $N = 2^k$  опытов со всевозможными сочетаниями двух ( $x = -1$  и  $x = +1$ ) уровней факторов (табл. 3.1).

Таблица 3.1

Матрица планирования ПФЭ  $2^2$

Номер опыта	Факторы $X_1$	
	$x_1$	$x_2$
1	+	+
2	+	-
3	-	+
4	-	-

Матрица планирования ПФЭ  $2^3$  получается повторением матрицы ПФЭ  $2^2$  для факторов  $x_1$  и  $x_2$  при  $x_3 = -1$  и  $x_3 = +1$  (табл. 3.2).

Таблица 3.2

Матрица планирования ПФЭ  $2^3$

Номер опыта	Факторы $X_1$		
	$x_1$	$x_2$	$x_3$
1	+	+	+
2	+	-	+
3	-	+	+
4	-	-	+
5	+	+	-
6	+	-	-
7	-	+	-
8	-	-	-

Аналогичным образом могут быть построены матрицы планирования с большим числом факторов, однако при этом число опытов быстро растет и при  $k \geq 5$  становится весьма значительным. При этом количество опытов ( $2^k$ ) намного превышает число неизвестных коэффициентов регрессии ( $k + 1$ ) линейной модели.

Для построения трехфакторной модели необходимо определить четыре коэффициента ( $b_0, b_1, b_2, b_3$ ), поэтому достаточно всего четырех опытов и можно воспользоваться *дробным факторным экспериментом* (ДФЭ) – половиной ПФЭ  $2^3$ , называемой *полурепликой*  $2^{3-1}$ . Для этого надо выбрать из опытов матрицы ПФЭ  $2^3$  (табл. 3.2), такие,

в которых бы факторы  $x_1, x_2, x_3$  равномерно принимали все возможные значения. Если воспользоваться генерирующим соотношением,  $x_3 = +x_1x_2$  (или  $x_3 = -x_1x_2$ ), то можно получить две антисимметричные экономные матрицы ДФЭ, одинаково пригодные для построения модели  $2^{3-1}$  (табл. 3.3).

Таблица 3.3

Матрица планирования ДФЭ  $2^{3-1}$  ( $x_3 = -x_1x_2$ )

Номер опыта	Факторы $X_1$		
	$x_1$	$x_2$	$x_3$
1	+	+	-
2	+	-	+
3	-	+	+
4	-	-	-

Аналогичным образом могут быть построены полуреплики, четверть реплики и реплики более высокой дробности ПФЭ  $2^k$ , что дает существенную экономию количества опытов.

Например, для  $k = 6$  ПФЭ требует проведения  $2^6 = 64$  опытов. Однако для определения 7 коэффициентов линейного уравнения регрессии задачу можно решать, проведя всего 8 опытов, т. е. осуществив ДФЭ  $2^{6-3}$ , в котором реплика дробности  $1/8$ . Рекомендуемыми генерирующими соотношениями при этом могут быть  $x_4 = x_1x_2x_3$ ,  $x_5 = x_1x_2$ ,  $x_6 = x_1x_3$  или др.

При построении нелинейной модели, учитывающей кроме линейных членов также некоторые взаимодействия ( $x_i x_j$ ), в матрицу вводят дополнительные столбцы, содержащие соответствующие произведения факторов (табл. 3.4) и увеличивают число опытов.

Так, планируя выявить эффекты взаимодействия факторов  $x_1x_2$ ,  $x_2x_4$  и  $x_2x_3$  при  $k = 4$  можно воспользоваться 8 опытами, если для построения матрицы экспериментов воспользоваться генерирующим соотношением, например,  $x_4 = x_1x_2x_3$  (табл. 3.4). Это позволяет найти четыре коэффициента для линейных членов ( $b_1, b_2, b_3, b_4$ ), свободный член ( $b_0$ ) и три эффекта взаимодействия ( $b_{12}, b_{24}, b_{23}$ ).

Условия проведения опытов задают значения факторов в столбцах  $x_1, x_2, x_3, x_4$ . Столбец  $x_0$  заполнен знаками «+», а столбцы  $x_1x_2, x_2x_4, x_2x_3$  образованы как произведения соответствующих столбцов и применяются при последующем вычислении коэффициентов регрессии [48].

Матрица планирования ДФЭ  $2^{4-1}$  ( $x_4 = x_1x_2x_3$ )

Номер опыта	Факторы $X_i$					Взаимодействующие факторы $X_i X_j$		
	$x_0$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_1 x_2$	$x_2 x_4$	$x_2 x_3$
1	+	+	+	+	+	+	+	+
2	+	-	+	+	-	-	-	+
3	+	+	-	+	-	-	+	-
4	+	-	-	+	+	+	-	-
5	+	+	+	-	-	+	-	-
6	+	-	+	-	+	-	+	-
7	+	+	-	-	+	-	-	+
8	+	-	-	-	-	+	+	+
9	+	0	0	0	0	0	0	0
10	+	0	0	0	0	0	0	0
11	+	0	0	0	0	0	0	0

Матрицы планирования экспериментов (табл. 3.1–3.4) формируются таким образом, чтобы выполнить обеспечивающие простоту вычисления и оптимальные оценки коэффициентов модели требования:

1. *Нормировки* – сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу элементов  $N$ :

$$\sum_{u=1}^N (x_n^2)_u = N.$$

2. *Симметрии* – сумма элементов каждого столбца равна нулю:

$$\sum_{u=1}^N (x_n)_u = 0.$$

3. *Ортогональности* – сумма произведений элементов каждой пары столбцов равна нулю:  $\sum_{u=1}^N (x_n x_m)_u = 0$ ; ( $n, m = 1, 2, \dots, k$ ;  $n \neq m$ ).

При выполнении этих требований все коэффициенты регрессии определяются независимо друг от друга с одинаковой погрешностью по результатам всех  $N$  опытов.

**Ортогональное планирование экспериментов.** Если поверхность отклика является существенно нелинейной, тогда в уравнение модели необходимо ввести квадратичные члены второго порядка. Для этого достраивают матрицу в соответствии с планами эксперимента второго порядка.

Расширенная матрица содержит:

- $N_1$  опытов в точках ДФЭ – ядро плана, из которого определяются линейные члены и их взаимодействия;
- $n_0$  опытов в центре плана, для оценки ошибки опытов;
- $2k$  дополнительных опытов в «звездных» точках, расположенных по координатным осям на расстоянии  $\pm\alpha$ .

Отсюда общее число опытов:

$$N = N_1 + n_0 + 2k.$$

Число уровней варьирования каждого фактора ( $-\alpha; -1; 0; +1; +\alpha$ ) равно 5. Для облегчения вычислений и для того, чтобы параметры модели определялись независимо, план должен быть ортогональным. Это достигается введением вместо  $x_i^2$  нового нормализованного фактора:

$$x'_i = x_i^2 - \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = x_i^2 - \bar{x}_i^2, \quad (3.27)$$

где  $x'_i$  при числе факторов  $k = 2, 3, 4, 5$ , соответственно, равняется 0,667; 0,73; 0,80; 0,776 (при  $k = 5$  применяется полуреплика  $\bar{x}_i^2$  – среднее значение  $x_i^2$ ;  $x'_i$ );  $u$  – номер опыта. Кроме того, выбирается «звездное» плечо  $\alpha$  по формуле

$$\alpha = \sqrt{0,5\sqrt{N_1(N_1 + n_0 + 2k)} - N_1}. \quad (3.28)$$

В силу ортогональности планирования все параметры нормализованной модели второго порядка определяются независимо друг от друга:

$$b_i = \frac{\sum_{u=1}^N x_{iu} y_u}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2}; \quad (3.29)$$

$$b_{ij} = \frac{\sum_{u=1}^N (x_i x_j)_u y_u}{\sum_{u=1}^N (x_i x_j)_u^2}; (i \neq j); \quad (3.30)$$

$$b_{ii} = \frac{\sum_{u=1}^N (x'_i)_u y_u}{\sum_{u=1}^N (x'_i)_u^2}; \quad (3.31)$$

$$b_0 = \frac{\sum_{u=1}^N y_u}{N} - \sum_{i=1}^k b_{ii} \bar{x}_i^2. \quad (3.32)$$

В числителях данных формул находятся суммы произведений значений отклика  $y_u$  и значений нормализованного фактора в соответствующем столбце  $x_{iu}$ , а в знаменателе – сумма квадратов значений нормализованных факторов из соответствующих столбцов.

Дисперсия оценок параметров модели находится по формулам:

$$S^2(b_i) = \frac{S_b^2}{\sum_{u=1}^N (x_i)_u^2}; \quad (3.33)$$

$$S^2(b_{ij}) = \frac{S_b^2}{\sum_{u=1}^N (x_i x_j)_u^2}; \quad (3.34)$$

$$S^2(b_{ii}) = \frac{S_b^2}{\sum_{u=1}^N (x'_i)_u^2}; \quad (3.35)$$

$$S^2(b_0) = \frac{S_b^2}{N} + \sum_{i=1}^k (\bar{x}_i^2) S^2(b_{ii}). \quad (3.36)$$

Недостаток *центрального композиционного ортогонального планирования* (ЦКОП) второго порядка заключается в том, что параметры модели определяются с различной точностью, так как у них

различны дисперсии. Поэтому информация о поверхности отклика, содержащаяся в модели, полученной после реализации ЦКОП второго порядка, различна в разных направлениях факторного пространства.

**Рототабельное планирование экспериментов.** Существует другой способ центрального композиционного планирования второго порядка, позволяющий при помощи полученной модели описывать поверхность отклика с одинаковой точностью по всем направлениям, при этом остаточные дисперсии на одинаковых расстояниях от центра плана являются равными и наименьшими из возможных [65]. Такое планирование получило название *рототабельного*. При центральном композиционном рототабельном планировании (ЦКРП) значение звездного плеча определяется по формуле

$$\alpha = \sqrt[4]{N_1},$$

где  $N_1$  – число опытов ядра плана.

В зависимости от выбора числа опытов в центре плана обеспечивается либо так называемая *униформность*, либо *ортогональность* плана. В первом случае дисперсия предсказания сравнительно мало изменяется или совсем не изменяется в радиусе  $x_n = \pm 1$  от центра плана. Для обеспечения униформности плана должно соблюдаться равенство  $n_0 = \lambda(N_1 + 4\sqrt{N_1} + 4) - N_1 - 2k$ , в котором  $\lambda$  для числа факторов  $k = 2, 3, 4, 5, 6, 7$  равно, соответственно, 0,7844; 0,8385; 0,8705; 0,8918; 0,9070; 0,9185.

Чтобы рототабельный план был ортогональным, число опытов в центре плана должно соответствовать равенству  $n_0 = 4\sqrt{N_1} - 2k + 4$ , полученному из предыдущего при  $\lambda = 1$ . Расчет по нему в некоторых случаях дает дробные значения  $n_0$ , поэтому их приходится округлять до ближайшего целого числа, нарушая при этом условия униформности. Однако эти отклонения оказываются настолько незначительными, что ими можно пренебречь.

Для построения матриц центрального композиционного рототабельного равномерного планирования (ЦКРУП) рассчитывается и используется ряд характеристик (табл. 3.5).

Характеристики ЦКРУП второго порядка

Число факторов $k$	Число опытов ядра $N_1$	Число «звездных» точек $2k$	Число нулевых точек $n_0$	«Звездное» плечо $\alpha$	Общее число опытов $N$
2	4	4	5	1,414	13
3	8	6	6	1,682	20
4	16	8	7	2	31
5	16	10	6	2	32

Матрицы рототабельного униформ планирования не ортогональны, поэтому параметры модели рассчитываются более сложным способом, чем при ортогональном планировании:

$$b_0 = d_1 \sum_{u=1}^N y_u - d_2 \sum_{i=1}^k \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 y_u; \quad (3.37)$$

$$b_i = d_3 \sum_{u=1}^N x_{iu} y_u; \quad (3.38)$$

$$b_{ij} = d_4 \sum_{u=1}^N (x_i x_j)_u y_u \quad (i^1 j); \quad (3.39)$$

$$b_{ii} = d_5 \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 y_u + d_6 \sum_{i=1}^k \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 y_u - d_2 \sum_{u=1}^N y_u. \quad (3.40)$$

Дисперсии параметров модели:

$$S^2(b_0) = d_1 S_b^2; \quad (3.41)$$

$$S^2(b_i) = d_3 S_b^2; \quad (3.42)$$

$$S^2(b_{ij}) = d_4 S_b^2; \quad (3.43)$$

$$S^2(b_{ii}) = d_7 S_b^2. \quad (3.44)$$

Соответствующие условиям опытов значения  $d_i$  выбираются для конкретных случаев планирования эксперимента (табл. 3.6)

Значения  $d_i$  для вычисления параметров модели

$k$	$N$	$d_1$	$d_2$	$d_3$	$d_4$	$d_5$	$d_6$	$d_7$
2	13	0,2	0,1	0,1250	0,2500	0,1251	0,0187	0,1438
3	20	0,1663	0,0568	0,0732	0,1250	0,0625	0,0069	0,0695
4	31	0,1428	0,0357	0,0417	0,0625	0,0312	0,0037	0,0350
5	32	0,1591	0,0341	0,0417	0,0625	0,0312	0,0028	0,0341

Так как при планировании экспериментов несколько опытов проводятся параллельно при основном уровне факторов, то их результаты позволяют оценить дисперсию воспроизводимости:

$$S_b^2 = \frac{\sum_{u=1}^{n_0} (y_{oi} - \bar{y}_o)^2}{n_0 - 1}. \quad (3.45)$$

Проверка адекватности модели производится при помощи критерия Фишера. Дисперсия адекватности определяется по формуле

$$S_{ад}^2 = \frac{\sum_{u=1}^N (y_{ир} - y_{иэ})^2 - \sum_{u=1}^{n_0} (y_{oi} - \bar{y}_o)^2}{N - k' - (n_0 - 1)}, \quad (3.46)$$

где  $y_{ир}$  и  $y_{иэ}$  – расчетные и экспериментальные значения;  $k'$  – число статистически значимых параметров модели.

При использовании рототабельных планов исключать из модели без пересчета остальных можно только незначимые оценки  $b_i$  и  $b_{ij}$ . Исключение любого из незначимых параметров  $b_0$  и  $b_{ii}$  требует пересчета остальных в данной группе.

При реализации намеченных планированием экспериментов важно учитывать требования *рандомизации* опытов, т. е. проведения опытов в однородных условиях, с одинаковой погрешностью в случайном порядке. Рандомизация проводится для того, чтобы изменения свойств материалов, характеристик оборудования, средств оснащения, установок и измерительных приборов вследствие их износа и разрушения, смены персонала и так далее не вызывали искажающего влияния изучаемых факторов и временного «дрейфа» параметров. Поэтому рандомизируют опыты, проводя их в случайном порядке, в отличие от нумерации в матрице планирования [65].

## Глава 4. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТА. ЭМПИРИЧЕСКИЕ ЗАВИСИМОСТИ

При постановке и решении оптимизационных задач огромную роль играют опыт и интуиция, которые приобретаются многолетней работой в избранном направлении, и их отсутствие не может компенсировать даже самое блестящее знание теоретических основ метрических и топологических пространств, линейных несамосопряженных операторов или теории множеств.

Постановка и решение оптимизационных задач включают в себя решение ряда последовательных задач. Прежде всего, необходимо решить вопросы: надо ли оптимизировать, что оптимизировать и как оптимизировать. При решении первого вопроса о необходимости решения задачи оптимизации решающую роль играет опыт и интуиция специалиста. В общем виде ответ на этот вопрос заключается в том, что оптимизировать необходимо в тех случаях, когда выигрыш от оптимизации превышает затраты на оптимизацию [10, 32].

### 4.1. Характеристика видов связей между рядами наблюдений

На практике сама необходимость измерений большинства величин вызывается тем, что они не остаются постоянными, а изменяются в функции от изменения других величин. В этом случае целью проведения эксперимента является установление вида функциональной зависимости  $\hat{y} = f(X)$ . Для этого должны одновременно определяться как значения  $X$ , так и соответствующие им значения  $\hat{y}$ , а задачей эксперимента является установление математической модели исследуемой зависимости. Фактически речь идет об установлении связи между двумя рядами наблюдений (измерений).

Определение связи включает в себя указание вида модели и определения ее параметров. В теории экспериментов независимые параметры  $X = (x_1, \dots, x_n)$  принято называть факторами, а зависимые переменные  $y$  – откликами. Координатное пространство с координатами  $x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n$  называется *факторным пространством*. Эксперимент по определению вида функции:

$$\hat{y} = f(x), \quad (4.1)$$

где  $x$  – скаляр, называется однофакторным. Эксперимент по определению функции вида

$$\hat{y} = f(\mathbf{X}), \quad (4.2)$$

где  $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k)$  – вектор, называется многофакторным.

Геометрическое представление функции отклика в факторном пространстве является поверхностью отклика. При однофакторном эксперименте  $k = 1$  поверхность отклика представляет собой линию на плоскости, при двухфакторном  $k = 2$  – поверхность в трехмерном пространстве.

Связи в общем случае являются достаточно многообразными и сложными. Обычно выделяют следующие виды связей.

**Функциональные связи (или зависимости).** Это такие связи, когда при изменении величины  $X$  другая величина  $Y$  изменяется так, что каждому значению  $X_i$  соответствует совершенно определенное (однозначное) значение  $y_i$  (рис. 4.1, а). Таким образом, если выбрать все условия эксперимента абсолютно одинаковыми, то, повторяя испытания, получим одну и ту же зависимость, т. е. кривые идеально совпадут для всех испытаний.

К сожалению, таких условий в реальности не встречается. На практике не удастся поддерживать постоянство условий (например, колебания физико-химических свойств шихты при моделировании процессов тепломассопереноса в металлургических печах). При этом влияние каждого случайного фактора в отдельности может быть мало, однако в совокупности они существенно могут повлиять на результаты эксперимента. В этом случае говорят о стохастической (вероятностной) связи между переменными.

**Стохастичность связи** состоит в том, что одна случайная переменная  $Y$  реагирует на изменение другой  $X$  изменением своего закона распределения (рис. 4.1, б). Таким образом, зависимая переменная принимает не одно конкретное значение, а некоторое из множества значений. Повторяя испытания, мы станем получать другие значения функции отклика, и одному и тому же значению  $x$  в различных реализациях будут соответствовать различные значения  $y$  в интервале  $[x_{\min}; x_{\max}]$ . Искомая зависимость  $\hat{y} = f(x)$  может быть найдена лишь в результате совместной обработки полученных значений  $x$  и  $y$ .



Рис. 4.1. Виды связей:

- a* – функциональная связь, все точки лежат на линии;  
*б* – связь достаточно тесная, точки группируются возле линии регрессии, но не все они лежат на ней; *в* – связь слабая

На рис. 4.1, *б* эта кривая зависимости, проходящая по центру полосы экспериментальных точек (математическому ожиданию), которые могут и не лежать на искомой кривой  $\hat{Y} = f(x)$ , а занимают некоторую полосу вокруг нее. Эти отклонения вызваны погрешностями измерений, неполнотой модели и учитываемых факторов, случайным характером самих исследуемых процессов и другими причинами [65].

При анализе стохастических связей можно выделить следующие основные типы зависимостей между переменными:

1. Зависимости между одной случайной переменной  $X$  от другой случайной переменной  $Y$  и их условными средними значениями называются *корреляционными*. Условное среднее  $\bar{y}_i$  – это среднее арифметическое для реализации случайной величины  $Y$  при условии, что случайная величина  $X$  принимает значение  $\bar{x}_i$ .

2. Зависимость случайной переменной  $Y$  от неслучайной переменной  $X$ , или зависимость математического ожидания  $M_y$  случайной величины  $Y$  от детерминированного значения  $X$  называется **регрессионной**. Приведенная зависимость характеризует влияние изменений величины  $X$  на среднее значение величины  $Y$ .

Стохастические зависимости характеризуются *формой, теснотой связи и численными значениями коэффициентов уравнения регрессии*.

*Форма связи* устанавливает вид функциональной зависимости  $\hat{y} = f(X)$  и характеризуется *уравнением регрессии*. Если уравнение связи линейное, то имеем линейную многомерную регрессию, в этом

случае зависимости  $Y$  от  $X$  описываются уравнением прямой линии в  $k$ -мерном пространстве:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j, \quad (4.3)$$

где  $b_0, \dots, b_j, \dots, b_k$  – коэффициенты уравнения. Для пояснения существа используемых методов ограничимся сначала случаем, когда  $x$  скаляр. В общем случае виды функциональных зависимостей в технике достаточно многообразны: показательные  $y = b_0 x^{b_1}$ , логарифмические  $y = b_0 \lg(x)$  и т. д.

Задача выбора вида функциональной зависимости – задача не формализуемая, так как одна и та же кривая на данном участке примерно с одинаковой точностью может быть описана самыми различными аналитическими выражениями. Отсюда следует важный практический вывод: *принятие решения о выборе той или иной математической модели остается за исследователем*. Только экспериментатор знает, для чего будет в дальнейшем использоваться эта модель, на основе каких понятий будут интерпретироваться ее параметры.

Желательно при обработке результатов эксперимента вид функции  $\hat{y} = f(X)$  выбирать, исходя из условия соответствия физической природе изучаемых явлений или имеющихся представлений об особенностях поведения исследуемой величины. К сожалению, такая возможность не всегда имеется, так как эксперименты чаще всего проводятся для исследования недостаточно или неполно изученных явлений.

При изучении зависимости  $\hat{y} = f(X)$  от одного фактора при заранее неизвестном виде функции отклика для приближенного определения вида уравнения регрессии полезно предварительно построить эмпирическую линию регрессии (рис. 4.2).

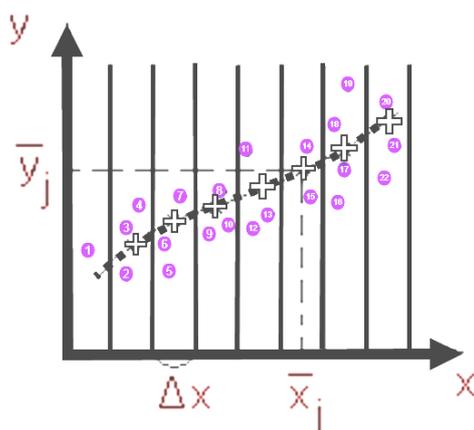


Рис. 4.2. Корреляционное поле

Для этого весь диапазон изменения  $x$  на поле корреляции разбивают на равные интервалы  $\Delta x$ . Все точки, попавшие в данный интервал  $\Delta x_j$ , относят к его середине  $\bar{x}_j$ . Для этого подсчитывают частные средние для каждого интервала:

$$\bar{y}_j = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} y_{ji}}{n_j}. \quad (4.4)$$

Здесь  $n_j$  – число точек в интервале  $\Delta x_j$ , причем  $\sum_{j=1}^{k^*} n_j = n$ , где  $k^*$  – число интервалов разбиения;  $n$  – объем выборки.

Затем последовательно соединяют точки  $(\bar{x}_j; \bar{y}_j)$  отрезками прямой. Полученная ломаная называется *эмпирической линией регрессии*. По виду эмпирической линии регрессии можно в первом приближении подобрать вид уравнения регрессии  $\hat{y} = f(X)$ .

Под *теснотой связи* понимается степень близости стохастической зависимости к функциональной, т. е. это показатель тесноты группирования экспериментальных данных относительно принятого уравнения модели (см. рис. 4.1, б). В дальнейшем уточним это положение.

## 4.2. Определение коэффициентов уравнения регрессии

Будем полагать, что вид уравнения регрессии уже выбран и требуется определить только конкретные численные значения коэффи-

коэффициентов этого уравнения  $\mathbf{b} = \{b_0, \dots, b_j, \dots, b_k\}$ . Отметим предварительно, что если выбор вида уравнения регрессии, как это уже отмечалось, процесс неформальный и не может быть полностью передан компьютеру, то *расчет коэффициентов выбранного уравнения регрессии – операция достаточно формальная и ее следует решать с использованием компьютера*. Это трудный и утомительный расчет, в котором человек не застрахован от ошибок, а компьютер выполнит его значительно быстрее и качественнее [65].

Существуют два основных различных подхода к нахождению коэффициентов  $b_j$ . Выбор того или иного из них определяется целями и задачами, стоящими перед исследователем, точностью полученных результатов, их количеством и т. д.

*Первый подход – интерполирование, базируется на удовлетворении условию, чтобы функция  $\hat{y} = f(X, \mathbf{b})$  совпадала с экспериментальными значениями в некоторых точках, выбранных в качестве опорных (основных, главных)  $y_i$ .*

В этом случае для определения  $k + 1$  неизвестных значений параметров  $b_j$  используется система  $k + 1$  уравнений:

$$f(x_i, b_0, \dots, b_j, \dots, b_k) = y_i, \quad 1 < i < n.$$

В данном случае число независимых уравнений системы равно числу опорных точек, в пределе –  $n$  поставленных опытов. С другой стороны, для определения  $k + 1$  коэффициентов необходимо не менее  $k + 1$  независимых уравнений. Но если число  $n$  поставленных опытов и число независимых уравнений равно числу искомых коэффициентов  $k + 1$ , то решение системы может быть единственно, а следовательно, точно соответствует случайным значениям исходных данных. Таким образом, в предельном случае, когда число коэффициентов уравнения регрессии равно числу экспериментальных точек  $n = k + 1$ , все экспериментальные точки будут совпадать с их расчетными значениями.

Следует отметить, что достижение такого точного соответствия путем значительного увеличения числа коэффициентов уравнения регрессии зачастую просто нецелесообразно, так как экспериментальные результаты были получены с большей или меньшей погрешностью, и такая функция может попросту не отражать действительный характер изменения исследуемого значения вследствие влияния помех (возмущений) (рис. 4.3).

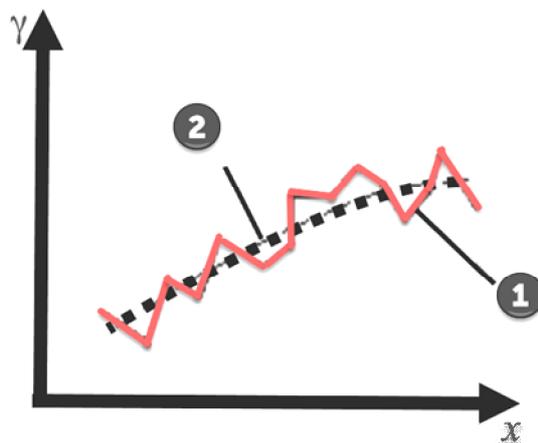


Рис. 4.3. Аппроксимация функции с большим (1) и небольшим (2) числом коэффициентов  $b_i$

Таким образом, задача в конечном счете сводится к решению системы  $k + 1$  уравнений с  $k + 1$  неизвестными. Основная сложность такого решения состоит в нелинейности системы, хотя в принципе при использовании компьютера она преодолима.

При числе опытов  $n$ , большем, чем  $k + 1$  искомым коэффициентов, число независимых уравнений системы избыточно. Избыточность информации можно использовать по-разному.

После определения численных значений параметров  $k + 1$  проверяется качество аппроксимации путем сопоставления значений функции и экспериментальных данных в оставшихся, не использованных точках. Если обнаруженные между ними расхождения превышают допустимые по условиям точности, то процедуру определения коэффициентов  $b_j$  можно повторить, приняв в качестве опорных (основных) другие точки.

Из этих уравнений в разных комбинациях можно составить несколько систем уравнений, каждая из которых в отдельности даст свое решение. Но между собой они будут несовместимыми. Каждое решение будет соответствовать своим значениям коэффициентов  $b_j$ . Если все их построить на графике, то получим целый пучок аппроксимирующих кривых.

Это открывает при  $n > k + 1$  совершенно новые возможности. Во-первых, этот пучок кривых показывает форму и ширину области неопределенности проведенного эксперимента. Во-вторых, может быть произведено усреднение всех найденных кривых, и полученная усредненная кривая будет гораздо точнее и достовернее описывать

исследуемое явление, так как она в значительной степени освобождена от случайных погрешностей, приводивших к разбросу отдельных экспериментальных точек. Поясним суть этого подхода на примере двух методов:

1. *Метод избранных точек* (рис. 4.4). На основании анализа данных выдвигают гипотезу о виде (форме) зависимости ( $X$ ). Предположим, что она линейная, т. е. статистическая связь – это линейная одномерная регрессия:

$$\hat{y} = b_0 + b_1x. \quad (4.5)$$

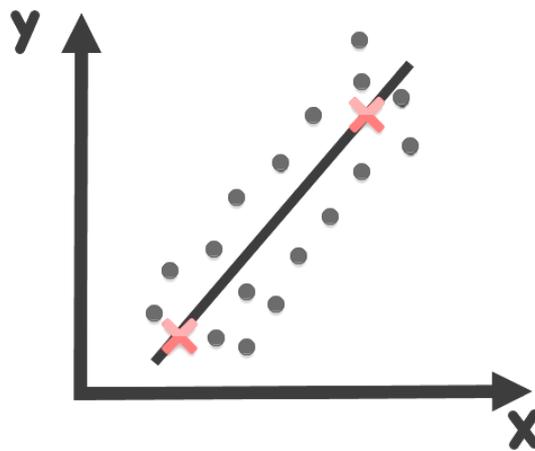


Рис. 4.4. Метод избранных точек ( $x$  – избранные точки)

Выбирают две наиболее характерные, по мнению исследователя, точки, через которые и проходит линия регрессии (см. рис. 4.4). Задача вычисления коэффициентов  $b_0$  и  $b_1$  модели в этом случае тривиальная. Если предполагается, что уравнение регрессии более высокого порядка, то соответственно увеличивают число избранных точек. Недостатки такого подхода очевидны. Так, избранные точки выбираются субъективно, а подавляющая часть экспериментального материала не используется для определения параметров (коэффициентов) уравнения регрессии, хотя ее можно использовать в дальнейшем для оценки надежности полученного уравнения.

2. *Метод медианных центров*. Сущность этого метода поясняет рис. 4.5.

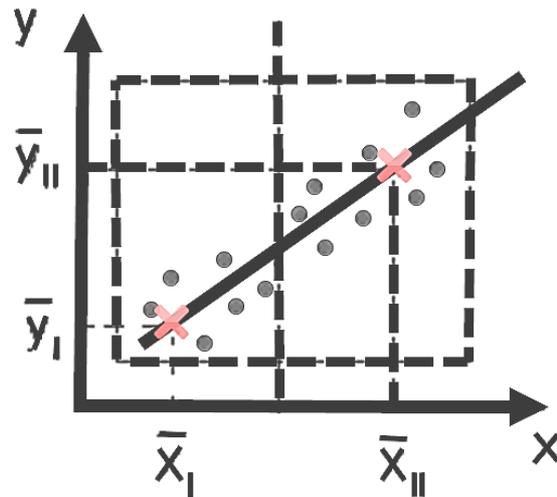


Рис. 4.5. Метод медианных точек

Обведенное контуром поле точек делят на несколько частей, число которых равно числу определяемых коэффициентов уравнения регрессии. В каждой из этих частей находят медианный центр, т. е. пересечение вертикали и горизонтали слева и справа, выше и ниже которых оказывается равное число точек. Затем через эти медианные центры проводят плавную кривую и из решения системы уравнений определяют коэффициенты регрессии  $b_j$ . Так, в случае линейной зависимости (4.5) поле делится на две группы и определяют средние значения  $\bar{x}_I, \bar{y}_I; \bar{x}_{II}, \bar{y}_{II}$  для каждой из групп, а неизвестные коэффициенты  $b_0, b_1$  определяют из решения системы уравнений:

$$\begin{aligned} \bar{y}_I &= b_0 + b_1 \bar{x}_I; \\ \bar{y}_{II} &= b_0 + b_1 \bar{x}_{II}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Если при выборе вида уравнения регрессии число его коэффициентов  $b_j$  окажется больше числа уравнений (имеющихся результатов измерений)  $k + 1 > n$ , система (4.4) не будет иметь однозначного решения, в этом случае необходимо либо уменьшить число определяемых коэффициентов  $k + 1$ , либо увеличить число опытов  $n$ , другого выхода здесь нет.

**Второй подход. Метод наименьших квадратов.** Усреднение несовместимых решений избыточной системы уравнений  $n > k$  может быть устранено методом наименьших квадратов, который был разработан еще Лежандром и Гауссом. Определение коэффициентов  $b_j$  основано на выполнении требования, чтобы сумма квадратов отклонений экспериментальных точек от соответствующих значений уравне-

ния регрессии была минимальна. В принципе можно оперировать и суммой других четных степеней этих отклонений, но тогда вычисления будут сложнее. Однако руководствоваться суммой невязок нельзя, так как она может оказаться малой при больших отклонениях отрицательного знака [53].

Математическая запись приведенного выше требования имеет вид:

$$\Phi(b_0, b_1, \dots, b_j, \dots, b_k) = \sum_{i=1}^n [f(x_i, b_0, b_1, \dots, b_j, \dots, b_k) - y_i]^2 \rightarrow \min_{b_j}, \quad (4.6)$$

где  $n$  – число экспериментальных точек в рассматриваемом интервале изменения аргумента  $x$ .

Необходимым условием минимума функции  $\Phi(b_0, b_1, \dots, b_j, \dots, b_k)$  является выполнение равенства

$$\partial\Phi / \partial b_j = 0, \quad 0 \leq j \leq k, \quad (4.7)$$

или

$$\sum_{i=1}^n [f(x_i, b_0, b_1, \dots, b_j, \dots, b_k) - y_i] \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_j} = 0, \quad 0 \leq j \leq k. \quad (4.7a)$$

После преобразований получим:

$$\sum_{i=1}^n [f(x_i, b_0, b_1, \dots, b_j, \dots, b_k) \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_j} - \sum_{i=1}^n y_i \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_j}] = 0. \quad (4.8)$$

Система уравнений (4.8) содержит столько же уравнений, сколько неизвестных коэффициентов  $b_0, b_1, \dots, b_k$  входит в уравнение регрессии, и называется в математической статистике *системой нормальных уравнений*.

Поскольку  $\Phi \geq 0$  при любых  $b_0, \dots, b_k$ , величина  $\Phi$  обязательно должна иметь хотя бы один минимум. Поэтому, если система нормальных уравнений имеет единственное решение, оно и является минимумом для этой величины.

При  $n > k + 1$  система имеет единственное решение, при  $n = k + 1$  численные значения коэффициентов уравнения регрессии по первому и второму подходам идентичны, а все опытные точки совпадают с уравнением регрессии.

Очевидно, что при  $k + 1 > n$  система уравнений (4.8) переопределена и имеет множество решений, преодолеть эту проблему можно,

как уже отмечалось, либо увеличением числа наблюдений, либо уменьшением числа неизвестных коэффициентов  $b_j$ .

Расчет коэффициентов по методу наименьших квадратов можно применять при любых статистических данных, распределенных по любому закону.

### 4.3. Определение тесноты связи между случайными величинами

Определив уравнение теоретической линии регрессии, необходимо дать количественную оценку тесноты связи между двумя рядами наблюдений. Уравнения линий регрессии, проведенные на рис. 4.1, б, в, одинаковы, однако на рис. 4.1, б точки значительно ближе (теснее) расположены к теоретической линии регрессии, чем на рис. 4.1, в.

При корреляционном анализе предполагается, что факторы и отклики носят случайный характер и подчиняются нормальному закону распределения.

*Тесноту связи между случайными величинами характеризуют корреляционным отношением  $\rho_{xy}$ .* Остановимся подробнее на физическом смысле этого показателя. Для определения физического смысла этого показателя введем новые понятия.

*Остаточная дисперсия (дисперсия адекватности)  $S_{y \text{ ост}}^2$*  характеризует разброс экспериментально наблюдаемых точек относительно линии регрессии и представляет собой показатель ошибки предсказания параметра  $Y$  по уравнению регрессии (рис. 4.6):

$$S_{y \text{ ост}}^2 = \frac{1}{n-l} \sum_{i=1}^n [y_i - \hat{y}_i]^2 = \frac{1}{n-1-k} \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i, b_0, b_1, \dots, b_k)]^2, \quad (4.9)$$

где  $l = k + 1$  – число коэффициентов уравнения модели.

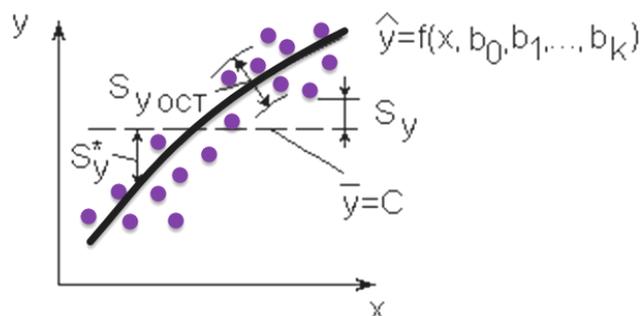


Рис. 4.6. К определению дисперсий

Общая дисперсия (дисперсия выходного параметра)  $S_y^2$  характеризует разброс экспериментально наблюдаемых точек относительно среднего значения  $\bar{y}$ , т. е. линии  $C$  (см. рис. 4.6):

$$S_y^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [\hat{y}_i - \bar{y}]^2, \quad (4.10)$$

где

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i.$$

Средний квадрат отклонения линии регрессии от среднего значения линии  $\bar{y} = C$  (см. рис. 4.6):

$$S_y^{*2} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [\hat{y}_i - \bar{y}]^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [f(x_i, b_0, b_1, \dots, b_k) - \bar{y}]^2. \quad (4.11)$$

Очевидно, что общая дисперсия  $S_y$  (сумма квадратов относительно среднего значения  $\bar{y}$ ) равна остаточной дисперсии  $S_{y \text{ ост}}^2$  (сумме квадратов относительно линии регрессии) плюс средний квадрат отклонения линии регрессии  $S_y^{*2}$  (сумма квадратов, обусловленная регрессией):

$$S_y^2 = S_{y \text{ ост}}^2 + S_y^{*2}. \quad (4.11a)$$

Разброс экспериментально наблюдаемых точек относительно линии регрессии характеризуется безразмерной величиной – выборочным корреляционным отношением, которое определяет долю, которую привносит величина  $X$  в общую изменчивость случайной величины  $Y$ :

$$\rho_{xy}^* = \sqrt{\frac{S_y^2 - S_{y \text{ ост}}^2}{S_y^2}} = \sqrt{\frac{S_y^{*2}}{S_y^2}} = \frac{S_y^*}{S_y}. \quad (4.12)$$

Проанализируем свойства этого показателя:

1. В том случае, если связь является не стохастической, а функциональной, корреляционное отношение равно 1, так как все точки корреляционного поля оказываются на линии регрессии, остаточная дисперсия равна  $S_{y \text{ ост}}^2 = 0$ , а  $S_y^{*2} = S_y^2$  (рис. 4.7, а).

2. Равенство нулю корреляционного отношения указывает на отсутствие какой-либо тесноты связи между величинами  $x$  и  $y$  для данного уравнения регрессии, поскольку разброс экспериментальных точек относительно среднего значения и линии регрессии одинаков, т. е.  $S_y^2 = S_{y_{\text{ост}}}^2$  (рис. 4.7, б).

3. Чем ближе расположены экспериментальные данные к линии регрессии, тем теснее связь, тем меньше остаточная дисперсия и тем больше корреляционное отношение.

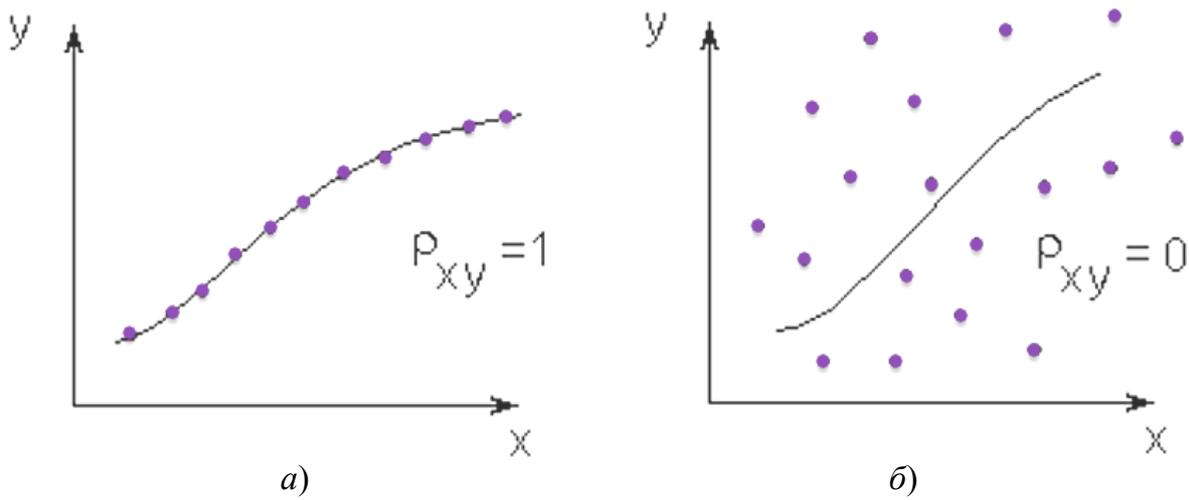


Рис. 4.7. Значения выборочного корреляционного отношения  $\rho_{xy}$ :  
 а – функциональная связь; б – отсутствие связи

Следовательно, корреляционное отношение может изменяться в пределах от 0 до 1.

Учитывая, что имеются пакеты программ для статистической обработки результатов исследований, рассмотрим методологию этого подхода на примере простейших линейных и одномерных задач [уравнение (4.5)]. Идеология этого способа для решения более сложных задач принципиально не отличается. Более того, как мы увидим в дальнейшем, многие нелинейные зависимости можно свести к линейным.

**Линейная регрессия от одного фактора.** Уравнение линии регрессии на плоскости в декартовых координатах имеет вид выражения (4.5).

Задачу метода наименьших квадратов аналитически можно выразить следующим образом:

$$\Phi(b_0, b_1) = \sum_{i=1}^n [y_i - (b_0 + b_1 x_i)]^2 \rightarrow \min_{b_0, b_1}. \quad (4.13)$$

Для решения этой задачи, как известно из математического анализа, необходимо вычислить частные производные функции  $\Phi$  по коэффициентам  $b_0$ ,  $b_1$  и приравнять их нулю:

$$\frac{\partial \Phi(b_0, b_1)}{\partial b_0} = 0; \quad \frac{\partial \Phi(b_0, b_1)}{\partial b_1} = 0. \quad (4.14)$$

Система нормальных уравнений (4.8) в этом случае примет вид:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n [y_i - (b_0 + b_1 x_i)] = 0; & n b_0 + b_1 \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i; \\ \sum_{i=1}^n [y_i - (b_0 + b_1 x_i)] \cdot x_i = 0; & b_0 \sum_{i=1}^n x_i + b_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i. \end{cases} \quad (4.15)$$

Решение этой системы относительно  $b_0$  и  $b_1$  дает:

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \sum_{i=1}^n (x_i)^2 - \sum_{i=1}^n (x_i y_i) \sum_{i=1}^n x_i}{n \sum_{i=1}^n (x_i)^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2}; \quad (4.16a)$$

$$b_1 = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n (x_i)^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}, \quad (4.16b)$$

т. е. необходимо определить  $\sum x_i$ ,  $\sum y_i$ ,  $\sum x_i y_i$ ,  $\sum (x_i)^2$ .

Коэффициент  $b_0$  (свободный член уравнения регрессии) геометрически представляет собой расстояние от начала координат до точки пересечения линии регрессии с ординатой, а коэффициент  $b_1$  характеризует тангенс угла наклона линии регрессии к оси  $OX$  [65].

Если же определяют уравнение регрессии в виде  $\hat{y} = b_0 + b_1 x + b_{11} x^2$ , то система уравнений для нахождения  $b_0$ ,  $b_1$ ,  $b_{11}$  будет иметь вид:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n y_i = b_0 n + b_1 \sum_{i=1}^n x_i + b_{11} \sum_{i=1}^n x_i^2; \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i = b_0 \sum_{i=1}^n x_i + b_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 + b_{11} \sum_{i=1}^n x_i^3; \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i = b_0 \sum_{i=1}^n x_i^2 + b_1 \sum_{i=1}^n x_i^3 + b_{11} \sum_{i=1}^n x_i^4. \end{cases} \quad (4.16\text{в})$$

Из уравнений (4.15) и (4.16, в) вытекает правило записи любых систем: *необходимо записать столько уравнений в системе, сколько неизвестных членов в искомом уравнении, всякий раз суммируя произведения членов исходного уравнения на переменную при искомом коэффициенте.*

Оценку силы *линейной связи* осуществляют по *выборочному* (эмпирическому) коэффициенту парной корреляции  $r_{xy}$ . Выборочный коэффициент корреляции может быть вычислен двумя способами [1, 6]:

1. Как частный случай корреляционного отношения для линейного уравнения регрессии.

С учетом того, что  $\bar{y} = b_0 + b_1 \bar{x}$ ,

$$S_y^{*2} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [b_0 + b_1 x_i - b_0 - b_1 \bar{x}]^2 = b_1^2 S_x^2, \quad (4.17)$$

величина отношения  $\frac{S_y^*}{S_y}$  будет равна:

$$r_{xy} = \frac{b_1 S_x}{S_y}, \quad (4.18)$$

где  $S_x$  и  $S_y$  – выборочные средние квадратичные отклонения.

2. Как среднее значение произведения центрированных случайных величин, отнесенное к произведению их среднеквадратичных отклонений:

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{(n-1)S_x S_y} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}. \quad (4.19)$$

Покажем, что обе последние формулы эквивалентны. Для этого преобразуем выражение (4.19) к виду

$$\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = r_{xy} (n-1) S_x S_y.$$

Подставляя последнее выражение в формулу (4.16б), имеем:

$$b_1 = \frac{r_{xy} (n-1) S_x S_y}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \frac{r_{xy} S_y}{S_x},$$

откуда

$$r_{xy} = \frac{b_1 S_x}{S_y}.$$

Как правило, по результатам экспериментов находят  $S_x$ ,  $S_y$ ,  $\bar{x}$ ,  $\bar{y}$  и рассчитывают  $r_{xy}$  по формуле (4.19), а затем, используя эти величины, определяют коэффициенты уравнения регрессии:

$$b_1 = \frac{r_{xy} S_y}{S_x}; \quad b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x}. \quad (4.20)$$

Коэффициент корреляции  $r_{xy}$  изменяется в пределах  $-1 \leq r_{xy} \leq +1$ .

Положительная корреляция между случайными величинами характеризует такую стохастическую зависимость между величинами, когда с возрастанием одной из них другая в среднем также будет возрастать. При отрицательной корреляции с возрастанием одной случайной величины другая в среднем будет уменьшаться. Чем ближе значение  $r_{xy}$  к единице, тем теснее статистическая связь.

Отметим еще раз область применимости выборочного коэффициента корреляции для оценки тесноты связи:

1. Коэффициент парной корреляции значений  $y$  и  $x$  применительно к однофакторной зависимости характеризует тесноту группирования данных лишь относительно прямой (например, линия  $A$  на рис. 4.8, *a*). При более сложной зависимости (рис. 4.8, *б*) коэффициент корреляции  $r_{xy}$  будет оценивать тесноту экспериментальных точек относительно некоторой прямой, обозначенной буквой  $A$ , что, естественно, дает мало сведений о тесноте их группирования относительно искомой кривой  $\hat{y} = f(x)$ .

2. Коэффициент парной выборочной корреляции имеет четкий физический смысл только в случае двумерного нормального распределения параметров, т. е. когда для каждого значения  $X$  существует совокупность нормального распределения  $Y$  и наоборот, а дисперсия зависимой переменной при изменении значения аргумента остается постоянной (рис. 4.9).

Даже при выполнении этих достаточно жестких условий не всякое значение выборочного коэффициента корреляции является достаточным для статистического обоснования выводов о наличии действительно надежной корреляционной связи между фактором и откликом. Надежность статистических характеристик ослабевает с уменьшением объема выборки  $n$ . Так, при  $n = 2$  через две экспериментальные точки можно провести только одну прямую и зависимость будет функциональной, при этом выборочный коэффициент корреляции равен единице  $r_{xy} = 1$ . Однако это не означает надежность полученных статистических характеристик в силу весьма и весьма ограниченного объема выборки. Значит, вычислять коэффициент корреляции по результатам двух наблюдений бессмысленно, так как он заведомо будет равен единице, и это будет обусловлено не свойствами переменных и их взаимным отношением, а только числом наблюдений.

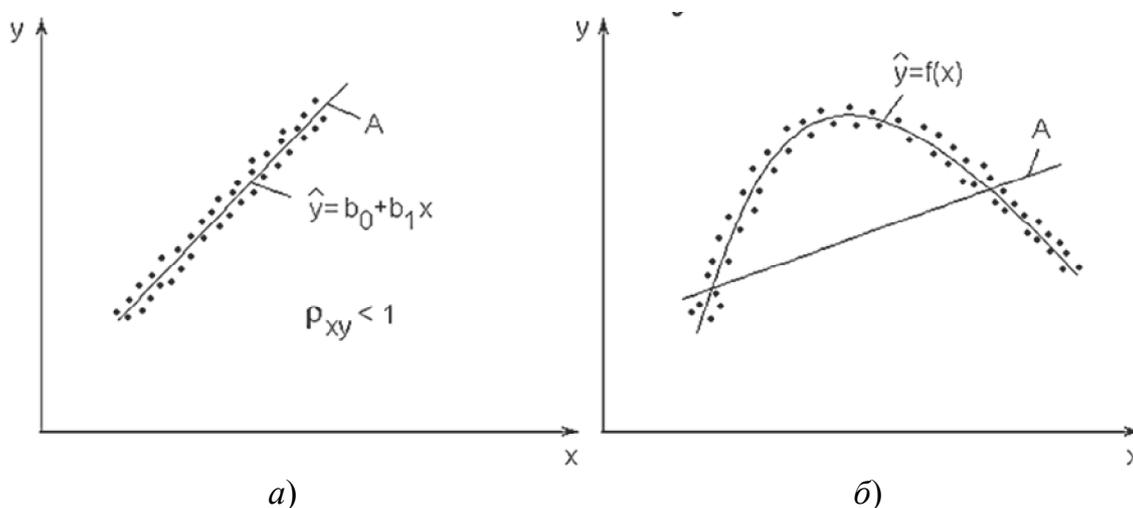


Рис. 4.8. К понятию коэффициента парной корреляции

В связи с этим требуется проверка того, насколько значимо отличается выборочный коэффициент корреляции  $r_{xy}$  от его действительного значения  $r_{xy}^*$ . При достаточно большом объеме выборки  $n \rightarrow N$ , где  $N$  – достаточно большое число,  $r_{xy}^* = r_{xy}$ . Таким образом,

требуется проверка значимости выборочного коэффициента парной корреляции и оценка его доверительного интервала [65].

Для определения значимости  $r_{xy}$  сформулируем нуль-гипотезу  $H_0: r_{xy} = 0$ , т. е. корреляция отсутствует. Для этого рассчитывается экспериментальное значение  $t$ -критерия Стьюдента:

$$t_{\text{эксп}} = |r_{xy}^*| \frac{\sqrt{n-2}}{\sqrt{1-(r_{xy}^*)^2}} \quad (4.21)$$

и сравнивается с теоретическим при числе степеней свободы  $n - 2$ .

Если  $t_{\text{эксп}} \geq t_{\alpha; n-2}$ , то нулевая гипотеза отклоняется, а гипотеза, что коэффициент корреляции существует, принимается.

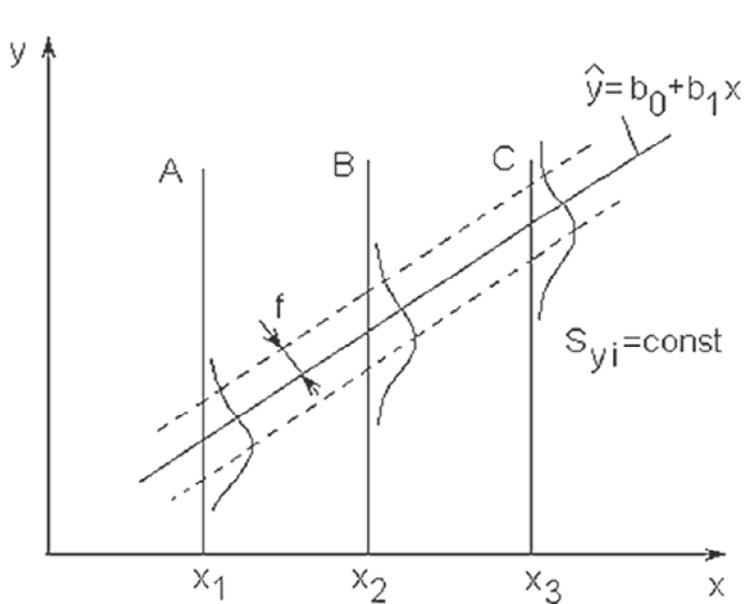


Рис. 4.9. К понятию коэффициента парной корреляции в случае двумерного нормального распределения параметров

Для определения доверительного интервала коэффициента корреляции Р. Фишер предложил такое нелинейное преобразование величины  $r_{xy}$ , при котором закон распределения этой оценки, говоря, довольно сложный, практически приближается к нормальному. Это преобразование производится по формуле

$$Z^* = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + |r_{xy}|}{1 - |r_{xy}|}. \quad (4.22)$$

Среднеквадратичное отклонение случайной величины  $Z^*$  зависит от числа опытов:

$$S_{Z^*} = \frac{1}{\sqrt{n-3}}, \quad (4.23)$$

а математическое ожидание очень близко к числу, получаемому после подстановки в формулу (4.22) вместо  $r_{xy}$  истинного значения коэффициента корреляции  $r_{xy}^*$ . Эти свойства величины  $Z^*$  позволяют просто оценить, в каких пределах может находиться истинное значение коэффициента корреляции, если по  $n$  опытам получены некоторые значения его выборочного значения (оценки)  $r_{xy}$ . Если граничное значение  $r_{xy}$  имеет тот же знак, что и  $r_{xy}^*$ , то можно считать в первом приближении, что корреляционная связь между переменными достоверна.

**Пример.** При обработке 17 пар данных  $x$  и  $y$  получены следующие значения:  $n = 17$ ;  $\bar{x} = 26$ ;  $\bar{y} = 5,07$ ;  $S_y^2 = 7,8$ ;  $S_x^2 = 102$ . Выборочный коэффициент корреляции  $r_{xy} = -0,94$ , т. е. величина  $y$  связана с  $x$  достаточно сильной причинной связью, близкой к функциональной зависимости.

Определение значимости коэффициента  $r_{xy}$ :

$$t_{\text{эксп}} = \left| r_{xy}^* \right| \frac{\sqrt{n-2}}{\sqrt{1-(r_{xy}^*)^2}} = 0,94 \frac{\sqrt{17-2}}{\sqrt{1-(0,94)^2}} = 10,6; t_{0,05;15} = 1,75.$$

Так как  $t_{\text{эксп}} > t_{\alpha; n-2}$ , то коэффициент корреляции существенен.

**Определение доверительного интервала.** По формулам (4.22) и (4.23) определим величину  $Z^*$ :  $Z^* = \frac{1}{2} \ln \frac{1+0,94}{1-0,94} = 1,738$  и ее средне-

квадратичное отклонение  $S_{Z^*} = \frac{1}{\sqrt{17-3}} = 0,267$ .

Зададимся вероятностью того, что истинное значение  $Z$  отличается от вычисленного на основании оценки коэффициента корреляции  $Z^*$  не более, чем на  $\delta_Z$ . Учитывая нормальный закон распределения  $Z$ , имеем при вероятности:

$$95 \%: \delta_Z = 1,96 \cdot S_Z = 1,96 \cdot 0,267 = 0,523;$$

$$90 \%: \delta_Z = 1,67 \cdot 0,267 = 0,446;$$

$$99,7 \%: \delta_Z = 3,00 \cdot 0,267 = 0,801.$$

Таким образом, истинное значение  $Z$  с вероятностью, например, 95 %, лежит в пределах  $Z_1 \leq Z \leq Z_2$ , где  $Z_1 = 1,738 - 0,523 = 1,215$  и  $Z_2 = 1,738 + 0,523 = 2,261$ .

Этим двум значениям  $Z$  соответствуют коэффициенты корреляции, полученные из формулы (4.22):  $-0,84 \leq r_{xy} \leq -0,98$ . Следовательно, доверительные интервалы подтверждают достаточно сильную причинную связь между анализируемыми параметрами.

Таким образом, корреляционный анализ устанавливает связь между исследуемыми случайными переменными и оценивает тесноту этой связи.

#### 4.4. Регрессионный анализ

Ниже представлены основные положения регрессионного анализа, использование которого для обработки результатов наблюдений имеет меньше ограничений, чем корреляционный анализ. Как и корреляционный анализ, регрессионный анализ включает создание уравнения регрессии, например, с использованием метода наименьших квадратов, и статистическую оценку результатов. Если в регрессионном анализе расчет коэффициентов осуществляется теми же методами, например, методом наименьших квадратов, то теоретические положения для регрессионного анализа, требуют иных методов статистической оценки результатов [48].

При проведении регрессионного анализа примем следующие допущения:

1. Входной параметр  $x$  измеряется с пренебрежимо малой ошибкой. Появление ошибки в определении  $y$  объясняется наличием в процессе не выявленных переменных и случайных воздействий, не вошедших в уравнение регрессии.

2. Результаты наблюдений  $y_1, y_2, \dots, y_i, \dots, y_n$  над выходной величиной представляют собой независимые нормально распределенные случайные величины.

3. При проведении эксперимента с объемом выборки  $n$  при условии, что каждый опыт повторен  $m^*$  раз, выборочные дисперсии  $S_1^2, \dots, S_i^2, \dots, S_n^2$  должны быть однородны. При выполнении измерений в различных условиях возникает задача сравнения точности измерений. Здесь следует подчеркнуть, что сравнение экспериментальных

данных возможно только в том случае, если их дисперсии однородны. Это означает, что экспериментальные данные принадлежат одной и той же совокупности. Однородность дисперсий свидетельствует о том, что среди сравниваемых дисперсий нет ни одной, которая с заданной надежностью превосходила бы все остальные, т. е. была бы большая ошибка. При одном и том же числе параллельных экспериментов однородность дисперсии можно оценить по критерию Кохрена, а для сравнения двух дисперсий целесообразно использовать  $F$ -критерий Фишера.

После того как уравнение регрессии найдено, необходимо провести статистический анализ результатов. Этот анализ состоит в следующем: проверяется значимость всех коэффициентов и устанавливается адекватность уравнения.

**Проверка адекватности модели.** При моделировании приходится формализовать связи исследуемого явления (процесса), из-за чего возможна потеря некоторой информации об объекте. Иногда некоторые связи не учитываются. В то же время основное требование к математической модели заключается в ее пригодности для решения поставленной задачи и адекватности процессу.

Так, построив модель в виде линейного уравнения регрессии, мы хотим, в частности, убедиться, что никакие другие модели не дадут значительного улучшения в описании предсказания значений  $Y$ .

Сформулируем нуль-гипотезу  $H_0$ : уравнение регрессии адекватно. Альтернативная гипотеза  $H_1$ : уравнение регрессии неадекватно. Для проверки этих гипотез принято использовать  $F$ -критерий Фишера.

При этом общую дисперсию (дисперсию выходного параметра)  $S_y^2$  сравнивают с остаточной дисперсией (дисперсией адекватности)  $S_{y \text{ ост}}^2$ .

Напомним, что

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^n [y_i - \bar{y}]^2}{n-1}; S_{y \text{ ост}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n [y_i - \hat{y}_i]^2}{n-l}, \quad (4.24)$$

где  $l = k + 1$  – число членов аппроксимирующего полинома;  $k$  – число факторов. Так, для линейной зависимости (4.5)  $k = 1$ ,  $l = 2$ .

В дальнейшем определяется экспериментальное значение  $F$ -критерия Фишера:

$$F_{\text{эксп}} = \frac{S_y^2}{S_{y \text{ ост}}^2}, \quad (4.25)$$

который в данном случае показывает, во сколько раз уравнение регрессии предсказывает результаты опытов лучше, чем среднее:

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i = C = \text{const.}$$

Если  $F_{\text{эксп}} > F_{a, m_1, m_2}$ , то уравнение регрессии адекватно. Чем больше значение  $F_{\text{эксп}}$  превышает  $F_{a, m_1, m_2}$  для выбранного  $\alpha$  и числа степеней свободы  $m_1 = n - 1$ ,  $m_2 = n - l$ , тем эффективнее уравнение регрессии.

Рассмотрим также случай, когда в каждой  $i$ -й точке  $X_i$  для повышения надежности и достоверности осуществляется не одно, а  $m^*$  параллельных измерений (примем для простоты, что  $m^*$  одинаково для каждого фактора). Тогда число экспериментальных значений величины  $Y$  составит  $n_{\Sigma} = nm^*$ .

В этом случае для оценки адекватности модели:

1. Определяется  $\bar{y}_i = \sum_{j=1}^{m^*} \frac{y_{ij}}{m^*}$  – среднее из серии параллельных

опытов при  $x = X_i$ , где  $y_{ij}$  – значение параметра  $Y$  при  $x = X_i$  в  $j$ -м случае.

2. Рассчитываются значения параметра  $\hat{y}_i$  по уравнению регрессии при  $x = X_i$ .

3. Рассчитывается дисперсия адекватности (аналог остаточной дисперсии):

$$S_{\text{ост}}^2 = \frac{m^* \sum_{i=1}^n [\bar{y}_i - \hat{y}_i]^2}{n - l},$$

где  $n$  – число значений  $X_i$ ;  $l$  – число членов аппроксимирующего полинома (коэффициентов  $b_i$ ), для линейной зависимости  $l = 2$ .

4. Определяется выборочная дисперсия  $Y$  при  $x = X_i$ :

$$S_i^2 = \frac{\sum_{j=1}^{m^*} [y_{ij} - \bar{y}_i]^2}{m^* - 1}.$$

5. Определяется дисперсия воспроизводимости (аналог общей дисперсии):

$$S_{\text{восп}}^2 = \sum_{i=1}^n \frac{S_i^2}{n}.$$

Число степеней свободы этой дисперсии равно  $m_1 = n(m^* - 1)$ .

6. Определяется экспериментальное значение критерия Фишера

$$F_{\text{эксп}} = \frac{S_{\text{ад}}^2}{S_{\text{восп}}^2}.$$

7. Теоретическое значение этого же критерия  $F_{\alpha, m_1, m_2}$ , где  $m_1 = m^*(n - 1)$ ,  $m_2 = n - 1$ .

8. Если  $F_{\text{эксп}} \leq F_{\alpha, m_1, m_2}$ , то уравнение регрессии адекватно, в противном случае – нет.

**Проверка значимости коэффициентов уравнения регрессии.** Надежность оценок  $b_i$  уравнения регрессии можно охарактеризовать их доверительными интервалами  $\Delta b_i$ , в которых с заданной вероятностью находится истинное значение параметра [49, 65].

Наиболее просто построить доверительные интервалы для параметров линейного уравнения регрессии, т. е. коэффициентов  $b_0$  и  $b_1$ . При этом предполагается, что для каждого значения случайной величины  $x = X_1$  имеется распределение со средним значением  $\hat{y}_i = b_0 + b_1 x_i$  и дисперсией  $S_{y_i}^2 = S_{\text{восп}}^2$ . Иными словами, делается допущение, что случайная величина  $Y$  распределена нормально при каждом значении  $X_1$ , а дисперсия  $S_{y_i}^2$  во всем интервале изменения  $x$  постоянна  $S_{y_i}^2 = \text{const}$  (см. рис. 4.9).

Для линейного уравнения среднеквадратичное отклонение  $i$ -го коэффициента уравнения регрессии  $S_{b_i}$  можно определить по закону накопления ошибок:

$$S_{b_i} = \sqrt{\sum_{j=1}^n \left( \frac{\partial b_j}{\partial y_i} \right)^2 S_j^2}. \quad (4.26)$$

При условии, что  $S_{y1}^2 = S_{y2}^2 = \dots = S_{yi}^2 = \dots = S_{yn}^2 = S_{\text{восп}}^2$ , получим:

$$S_{b_0} = \sqrt{\frac{S_{\text{восп}}^2 \sum_{i=1}^n x_i^2}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2}}; \quad (4.27a)$$

$$S_{b_1} = \sqrt{\frac{S_{\text{восп}}^2 \cdot n}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2}}. \quad (4.27б)$$

Здесь  $S_{b_0}$  и  $S_{b_1}$  называются, соответственно, *стандартной ошибкой свободного члена* и *стандартной ошибкой коэффициента регрессии*.

Проверка значимости коэффициентов выполняется по критерию Стьюдента. При этом проверяется нуль-гипотеза  $H_0: b_i = 0$ , т. е.  $i$ -й коэффициент генеральной совокупности при заданном уровне значимости  $\alpha$  отличен от нуля.

Построим доверительный интервал для коэффициентов уравнения регрессии:

$$\Delta b_i = t_{\alpha; n-l} \cdot S_{b_i}, \quad (4.28)$$

где число степеней свободы в критерии Стьюдента определяется по соотношению  $n - 1$ . Потеря  $l = k + 1$  степеней свободы обусловлена тем, что все коэффициенты  $b_i$  рассчитываются взаимозависимо, что следует из уравнений (4.16а) и (4.16б).

Тогда доверительный интервал для  $\Delta b_i$  коэффициента уравнения регрессии составит  $(b_i - \Delta b_i; b_i + \Delta b_i)$ . Чем уже доверительный интервал, тем с большей уверенностью можно говорить о значимости этого коэффициента.

Необходимо всегда помнить рабочее правило: если абсолютная величина коэффициента регрессии больше, чем его доверительный интервал, то этот коэффициент значим.

Таким образом, если  $|b_i| > |\Delta b_i|$ , то  $b_i$  коэффициент значим, в противном случае – нет.

*Незначимые коэффициенты исключаются из уравнения регрессии, а оставшиеся коэффициенты пересчитываются заново, так как они зависимы и в формулы для их расчета (4.16а) и (4.16б) входят разноименные переменные.*

## 4.5. Линейная множественная регрессия

Целью множественной линейной регрессии является построение линейной модели взаимосвязи между множеством непрерывных предикторов и непрерывной зависимой переменной.

Такая линейная модель хорошо описывает многие проблемы в различных предметных областях, например, в экономике, промышленности и медицине. Это связано с тем, что некоторые задачи носят линейный характер [65].

Приведем простой пример. Пусть потребуется спрогнозировать стоимость строительства литейного цеха по ее известным параметрам. В то же время у нас есть данные по уже построенным цехам с указанием площади, высоты, количества рабочего материала, количества рабочих и т. д.

Понятно, что стоимость цеха в конечном итоге станет равной сумме затрат всех этих факторов в отдельности. Потребуется также определенное количество, например, железобетонных конструкций, с известной стоимостью за тонну, определенное количество вспомогательного оборудования с известной стоимостью.

Возможно, придется расчищать площадку для строительства, что также приведет к дополнительным затратам. Все это вместе даст стоимость создания дороги.

При этом в модель войдет свободный член, который, например, будет отвечать за дополнительные организационные расходы (они будут примерно одинаковы для всех строительно-монтажных работ на данном уровне) или налоговые вычеты.

Ошибка будет включать в себя факторы, которые мы не учитывали при построении модели (например, погоду во время строительства – ее вообще невозможно учесть).

При изучении множественной регрессии не существует графической интерпретации многофакторного пространства. При проведении экспериментов в такой ситуации исследователь записывает показания приборов о состоянии функции отклика  $y$  и всех факторов, от которых она зависит  $X_j$ . Результат исследований – это матрица наблюдений:

$$\begin{pmatrix} y_1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1j} & \dots & x_{1k} \\ y_2 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2j} & \dots & x_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ y_i & x_{i1} & x_{i2} & \dots & x_{ij} & \dots & x_{ik} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ y_n & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nj} & \dots & x_{nk} \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

Здесь  $n$  – число опытов;  $k$  – число факторов;  $x_{ij}$  – значение  $j$ -го фактора в  $i$ -м опыте;  $y_i$  – значение выходного параметра для  $i$ -го опыта.

Задача линейной множественной регрессии состоит в построении плоскости в  $(k + 1)$ -мерном пространстве, отклонения результатов наблюдений  $y_i$  от которой были бы минимальными. Или, другими словами, следует определить значения коэффициентов  $b_0, \dots, b_j, \dots, b_k$

в линейном полиноме  $\hat{y} = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j$ , что равносильно минимизации выражения

$$\Phi = (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_i^n [y_i - (b_0 + b_1 x_{i1} + \dots + b_j x_{ij} + \dots + b_k x_{ik})]^2 \rightarrow \min_{b_j}. \quad (4.30)$$

Процедура определения коэффициентов  $b_0, \dots, b_j, \dots, b_k$  в принципе не отличается от одномерного случая, рассмотренного выше и поэтому здесь не приводится.

Для оценки тесноты связи между функцией отклика  $\hat{y}$  и несколькими факторами  $x_1, x_2, \dots, x_k$  используют коэффициент множественной корреляции  $R$ , который всегда положителен и изменяется в пределах от 0 до 1. Чем больше  $R$ , тем лучше качество предсказаний данной моделью опытных данных с точки зрения близости ее к функциональной. При функциональной линейной зависимости  $R = 1$ .

Расчеты обычно начинают с вычисления парных коэффициентов корреляции, при этом вычисляются два типа парных коэффициентов корреляции:

- 1)  $r_{y x_j}$  – коэффициенты, определяющие тесноту связи между функцией отклика  $\hat{y}$  и одним из факторов  $x_j$ ;
- 2)  $r_{x_j x_u}$  – коэффициенты, показывающие тесноту связи между одним из факторов  $x_j$  и фактором  $x_u$  ( $j, u = 1 \div k$ ).

После вычисления всех парных коэффициентов корреляции можно построить матрицу коэффициентов корреляции следующего вида:

$$\begin{pmatrix} 1 & r_{yx_1} & r_{yx_2} & \dots & r_{yx_j} & \dots & r_{yx_k} \\ r_{x_1y} & 1 & r_{x_1x_2} & \dots & r_{x_1x_j} & \dots & r_{x_1x_k} \\ r_{x_2y} & r_{x_2x_1} & 1 & \dots & r_{x_2x_j} & \dots & r_{x_2x_k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{x_jy} & r_{x_jx_1} & r_{x_jx_2} & \dots & 1 & \dots & r_{x_jx_k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{x_ky} & r_{x_kx_1} & r_{x_kx_2} & \dots & r_{x_kx_j} & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (4.31)$$

Используя матрицу (4.31), можно вычислить *частные коэффициенты корреляции*, которые показывают степень влияния одного из факторов  $x_j$  на функцию отклика  $\hat{y}$  при условии, что остальные факторы остаются на постоянном уровне. Формула для вычисления частных коэффициентов корреляции имеет вид:

$$r_{yx_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_k} = D_{1j} / \sqrt{D_{11} D_{jj}}, \quad (4.32)$$

где  $D_{1j}$  – определитель матрицы, образованной из матрицы (4.32) вычеркиванием 1-й строки  $j$ -го столбца. Определитель  $D_{11}$  и  $D_{jj}$  вычисляются аналогично. Как и парные коэффициенты, частные коэффициенты корреляции изменяются от  $-$  до  $+1$ .

Значимость и доверительный интервал для коэффициентов частной корреляции определяются так же, как и для коэффициентов парной корреляции, только число степеней свободы вычисляются по формуле

$$m = n - k^* - 2, \quad (4.33)$$

где  $k^* = k - 1$  – порядок частного коэффициента парной корреляции.

Для вычисления коэффициента множественной корреляции  $R_{yx_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_k}$  используют матрицу:

$$R_{yx_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_k} = \sqrt{1 - D / D_{11}}, \quad (4.34)$$

где  $D$  – определитель матрицы (4.31).

Если число опытов  $n$  сравнимо с числом коэффициентов  $l = k + 1$ , связи оказываются преувеличенными. Поэтому следует исключить

систематическую погрешность, физический смысл которой состоит в следующем. Если разность  $n$  и  $l$  будет уменьшаться, то коэффициент множественной корреляции  $R$  будет возрастать и при  $n - l = 0$  окажется равным  $R = +1$ , а уравнение регрессии превратится в функциональное уравнение гиперплоскости, которая пройдет через все  $n$  экспериментальных точек. Однако ясно, что случайный характер переменных процесса при этом не может измениться. В связи с этим требуется оценка значимости коэффициента множественной корреляции.

Значимость коэффициента множественной корреляции проверяется по критерию Стьюдента:  $t_{\text{эксп}} = \frac{R}{\bar{S}_R} \geq t_{\alpha, m}; \quad m = n - k - 1,$

где  $\bar{S}_R$  – среднеквадратичная погрешность коэффициента множественной корреляции, рассчитываемая по выражению

$$\bar{S}_R = (1 - R^2) \sqrt{n - k - 1}. \quad (4.35)$$

Значимость  $R$  можно проверить также по критерию Фишера:

$$F_{\text{эксп}} = \frac{R(n - k - 1)}{(1 - R^2)n}. \quad (4.36)$$

Если расчетное значение  $F_{\text{эксп}}$  превышает теоретическое  $F_{\text{теор}}$ , то гипотезу о равенстве коэффициента множественной корреляции нулю отвергают и связь считают статистически значимой. Теоретическое (табличное) значение критерия Фишера определяется для выбранного уровня значимости  $\alpha$  и числа степеней свободы  $m_1 = n - k - 1$  и  $m_2 = k$ .

Если коэффициент множественной корреляции оказался неожиданно малым, хотя априори известно, что между выходом  $y$  и входами  $x_1, \dots, x_k$  должна существовать достаточно тесная корреляционная связь, то возможными причинами такого явления могут быть:

а) ряд существенных факторов не учтен и следует включить в рассмотрение дополнительно эти существенные входные параметры;

б) линейное уравнение плохо аппроксимирует в действительности нелинейную зависимость  $\hat{y} = f(x_1, \dots, x_n)$  и следует определить коэффициенты уже нелинейного уравнения регрессии методами регрессионного анализа;

в) рабочий диапазон рассматриваемых факторов находится в районе экстремума функции отклика – в этом случае следует расширить диапазон изменения входных переменных и так же перейти к нелинейной математической модели объекта.

## 4.6. Нелинейная регрессия

Используя подходы, изложенные выше, можно построить практически любые формы нелинейной связи. С этой целью в инженерной практике очень часто используют линеаризующие преобразования [65].

В табл. 4.1 приведены часто встречающиеся парные зависимости и линеаризующие преобразования переменных.

Качество преобразования результатов проверяют с помощью уравнения  $\hat{y} = b_0' + b_1'x'$ . После вычисления коэффициентов  $b_0'$  и  $b_1'$ , в частности, по методу наименьших квадратов, как для линейной зависимости от одного фактора (см. параграф 4.2) выполняют обратные преобразования, т. е. по  $b_0'$  и  $b_1'$  определяют  $b_0$  и  $b_1$ . Аналогичный подход обычно широко используют и при множественном нелинейном регрессионном анализе.

Таблица 4.1

Функции и линеаризующие преобразования

Функция	Линеаризующие преобразования			
	Преобразование переменных		Выражения для величин $b_0$ и $b_1$	
	$y'$	$x'$	$b_0'$	$b_1'$
$y = b_0 + b_1/x$	$y$	$1/x$	$b_0$	$b_1$
$y = 1/(b_0 + b_1x)$	$1/y$	$x$	$b_0$	$b_1$
$y = x/(b_0 + b_1x)$	$x/y$	$x$	$b_0$	$b_1$
$y = b_0b_1^x$	$\lg(y)$	$x$	$\lg(b_0)$	$\lg(b_1)$
$y = b_0 \cdot e^{b_1x}$	$\ln(y)$	$x$	$\ln(b_0)$	$b_1$
$y = 1/(b_0 + b_1e^{-x})$	$1/y$	$e^{-x}$	$b_0$	$b_1$
$y = b_0x^{b_1}$	$\lg(y)$	$\lg(x)$	$\lg(b_0)$	$b_1$
$y = b_0 + b_1 \lg(x)$	$y$	$\lg(x)$	$b_0$	$b_1$
$y = b_0/(b_1 + x)$	$1/y$	$x$	$b_1/b_0$	$1/b_0$
$y = b_0x/(b_1 + x)$	$1/y$	$1/x$	$b_1/b_0$	$1/b_0$
$y = b_0e^{b_1/x}$	$\ln(y)$	$1/x$	$\ln(b_0)$	$b_1$
$y = b_0 + b_1x^n$	$y$	$x^n$	$b_0$	$b_1$

В случае невозможности подбора линеаризующего преобразования для оценки параметров используют методы нелинейной оптимизации на основе исходных данных.

На практике наилучшую нелинейную модель выбирают обычно на основе наименьшей остаточной стандартной ошибки, рассчитанной для различных моделей. При сопоставимой точности нескольких нелинейных моделей выбирать всегда следует более простую модель.

## **Глава 5. МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ. ПОИСК ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

Ассортимент изделий, получаемых в виде отливок, очень разнообразен. При смене изделий технолог вынужден менять технологические режимы литья. Процесс выбора нужного режима достаточно сложен и, при традиционном подходе, требует специальных физических экспериментов, а также большого количества времени, которое иногда измеряется месяцами. Существенно снизить материальные затраты и временные потери можно, заменив физический эксперимент вычислительным, который проводится не на реальном технологическом процессе, а на его виртуальном физико-математическом аналоге. Поэтому задача использования компьютерного моделирования для управления технологическим процессом и повышения его эффективности, направленная на повышение качества продукции и повышение производительности оборудования, является, безусловно, актуальной [6].

Современное управление качеством заготовок должно быть оперативным, так как необходимо принимать правильные решения в процессе литья в режиме реального времени. Это требует максимального учета всех факторов, значимых для качества заготовки и обеспечения взаимодействия и обратной связи всех компонентов управляющего комплекса с фактическими параметрами, характеризующими процесс, который непрерывно изменяется в процессе литья.

В общем случае задача управления качеством сводится к получению требуемых значений контролируемых параметров процесса, т. е. под управлением процессом понимается совокупность действий, выбранных из множества возможных на основе определенной информации и обеспечивающих достижение заданной цели.

В свою очередь, задача повышения эффективности управления может быть сведена к задаче оптимизации технологического режима и получения заданных критериев качества обрабатываемой детали (минимизация тепловых напряжений, трещин, структурной и химической неоднородности и др.).

Решение проблемы управления и оптимизации технологических процессов в настоящее время не может ограничиваться эмпирическим

подходом, основанным на обобщении производственного опыта. Совершенствование технологии непрерывной разливки идет в направлении математического моделирования этого технологического процесса с учетом большого количества технологических факторов.

Оптимизация в широком смысле слова – это поиск лучшего из возможных вариантов. Применительно к автоклаву периодического действия, в котором реализуется эндотермическая химическая реакция (рис. 5.1), это может быть поиск наилучшей конструкции аппарата (диаметр, высота, объем, поверхность теплообмена) или наиболее приемлемых параметров ведения технологического процесса (температура  $t^\circ$ , продолжительность  $\tau$ , первоначальные концентрации компонентов  $c_A, c_B$ ). Поиск всегда предполагает наличие цели, например, максимум выхода продукта, минимальное время достижения заданной концентрации продукта, минимальный расход компонента  $A$  при заданном выходе продукта. Методы оптимизации – это численные методы решения оптимизационных задач – задач, имеющих множество выполнимых решений, из которых нужно выбрать одно, лучшее в любом, заранее определенном смысле.

## 5.1. Структура и постановка задач оптимизации

Формулировка задачи оптимизации включает три этапа: 1) вербальное представление параметров задачи, ее множества решений и цели; 2) запись критерия оптимальности (целевой функции) в виде функции параметров задачи; 3) запись условий, определяющих диапазон допустимых значений параметров [65].

Параметры задачи  $X_i, i = 1, 2, \dots, n$  – это переменные, значения которых необходимо определить в результате ее решения (на рис. 5.1 – температура в реакторе). Критерий оптимальности может быть представлен в виде функции параметров (целевой функции)  $f(\bar{X})$ , где  $\bar{X} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  – одно из допустимых решений задачи, или функционала  $I(\bar{X}, t)$ , который при фиксированных значениях параметров задачи представляет собой не число, а функцию времени или пространственной координаты, например:

$$f(\bar{X}) = \sum_{i=1}^n (x_i - x_i^{(0)})^2; \quad I(\bar{X}, t) = \int_0^t \varphi(\bar{X}, t) dt.$$

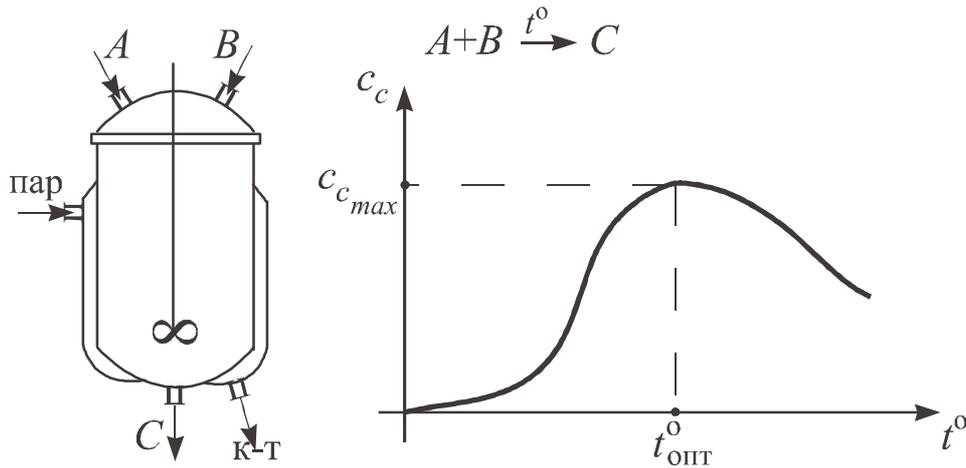


Рис. 5.1. Пример объекта оптимизации

Область допустимых значений параметров  $x_i, i = 1, 2, \dots, n$  может быть определена с помощью ограничений  $g_j(\bar{X}) \geq 0; j = 1, 2, \dots, m$  (условия типа неравенств) и связей  $h_k(\bar{X}) = 0; k = 1, 2, \dots, p$  (условия типа равенств).

Таким образом, обобщенная постановка оптимизационной задачи имеет вид: найти решение  $\bar{X}^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ , которому соответствует экстремум функции  $f(\bar{X})$  (минимум или максимум), при выполнении условий:

$$g_j(\bar{X}) \geq 0; j = 1, 2, \dots, m; \quad (5.1)$$

$$h_k(\bar{X}) = 0; k = 1, 2, \dots, p. \quad (5.2)$$

**Пример.** Задача проектирования цилиндрической емкости.

*Словесная постановка задачи:* найти такие значения диаметра и высоты цилиндра, чтобы при фиксированном объеме  $V$  общая длина сварных швов была минимальна.

*Критерий оптимальности:* сварные швы – это две окружности и высота цилиндра, поэтому  $f(d, l) = 2\pi d + l$ .

*Множество допустимых решений задачи:* диаметр и высота емкости не могут быть отрицательными числами, т. е.  $d > 0, l > 0$ ; объем проектируемой емкости фиксирован и равен  $V$ , т. е.  $\pi d^2 l / 4 = V$ .

Таким образом, задача состоит в определении таких значений  $d^*$  и  $l^*$ , что функция  $f(d, l) = 2\pi d + l$  достигает минимума и выполняются условия:  $\pi d^2 l / 4 = V; d > 0; l > 0$ .

Задачи оптимизации классифицируются по следующим признакам:

1) наличие или отсутствие ограничений и связей – задачи на *безусловный экстремум* [условия (5.1), (5.2) отсутствуют] и на *условный экстремум* [имеется условие (5.1), условие (5.2) или оба];

2) вид критерия оптимальности – *вариационные* задачи (критерий – функционал) и задачи *математического программирования* (критерий – функция);

3) характер функций  $f$ ,  $g$ ,  $h$  – задачи *линейного программирования* (все функции – линейные) и задачи *нелинейного программирования* (хотя бы одна из функций – нелинейная).

4) характер параметров – если параметры задачи могут принимать только строго определенные значения, то это задача *дискретного (целочисленного) программирования*, а если число этих значений конечно – *комбинаторная* задача.

Решение задачи выбора независимых переменных и параметра оптимизации представляет собой одну из важнейших задач теории и практики моделирования реальных процессов, от успешного решения которой зависит успех оптимизации изучаемого процесса. Выбор параметра оптимизации определяется задачей исследования и обычно решение задачи его выбора не вызывает затруднений. Такими параметрами в литейном производстве обычно являются структурно-механические и технологические свойства литейных сплавов, физико-механические свойства формовочных и стержневых смесей, физико-химические характеристики процессов плавки литейных сплавов.

Задача выбора независимых переменных при моделировании процессов вообще и литейных в частности очень сложна.

## **5.2. Основные типы вычислительных процедур оптимизации**

Теоретической основой методов решения задач оптимизации являются условия оптимальности решения различных типов задач, т. е. условия, при которых критерий оптимальности той или иной задачи достигает минимального или максимального значения. Условия оптимальности подразделяются на необходимые и достаточные [8].

*Примеры необходимых условий оптимальности* (условие  $A$  необходимо для выполнения  $B$ , если при выполнении  $B$  всегда выполняется  $A$ ):

– если дифференцируемая функция  $f(x)$  имеет в точке  $x = x^*$  экстремум, то  $f'(x^*) \equiv 0$ ;

– для дифференцируемой функции многих переменных  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  необходимое условие экстремума  $\frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_i} = 0$ ,  
 $i = 1, 2, \dots, n$ ;

– если в окрестности некоторой точки  $x^*$  ( $x \in [x^* - \delta, x^* + \delta]$ ,  $\delta > 0$ )  $f(x) > f(x^*)$ , то в точке  $x = x^*$  функция  $f(x)$  имеет локальный минимум (в окрестности другой точки  $x$  значения  $f(x)$  могут быть еще меньше).

*Обобщенное необходимое условие оптимальности* (рис. 5.2): для того, чтобы  $\bar{X}^*$  был лучшим элементом множества  $D$  решений некоторой оптимизационной задачи необходимо, чтобы он был лучшим элементом подмножества  $L$ , которое образует, окрестность точки  $\bar{X}^*$  (необходимым условием существования глобального экстремума целевой функции задачи является существование хотя бы одного локального экстремума).

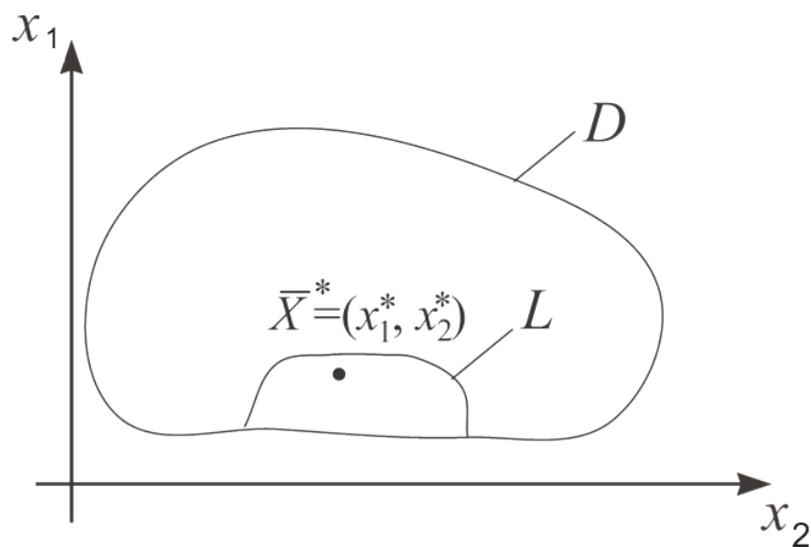


Рис. 5.2. Необходимое условие оптимальности

*Примеры достаточных условий оптимальности* (условие  $A$  достаточно для выполнения  $B$ , если при выполнении  $A$  всегда выполняется  $B$ ):

– если в точке  $x = x^*$  функция  $f(x)$  имеет минимум, то в некоторой окрестности этой точки  $x \in [x^* - \delta, x^* + \delta]$ ,  $\delta > 0$  выполняется условие  $f(x) > f(x^*)$ ;

– если  $f'(x^*) = 0$  и  $f''(x^*) \neq 0$ , то в точке  $x^*$   $f(x)$  имеет экстремум (при  $f''(x^*) > 0$  – минимум, при  $f''(x^*) < 0$  – максимум);

– для того, чтобы дифференцируемая функция  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  имела в точке  $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$  минимум достаточно, чтобы  $\frac{\partial f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_i} = 0$ ,

$i = 1, 2, \dots, n$  и все миноры матрицы Гессе были положительны:

$$\left( \begin{array}{ccc} \frac{\partial^2 f(x_1^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x_1^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots \frac{\partial^2 f(x_1^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(x_1^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x_1^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_2^2} & \dots \frac{\partial^2 f(x_1^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 f(x_1^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x_1^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_n \partial x_2} & \dots \frac{\partial^2 f(x_1^*, \dots, x_n^*)}{\partial x_n^2} \end{array} \right)$$

(если миноры нечетного порядка отрицательны, а четного – положительны, то в точке  $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$   $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  имеет максимум).

*Обобщенное достаточное условие оптимальности* (рис. 5.3): для того, чтобы  $\bar{X}^*$  был лучшим элементом множества  $D$  допустимых решений рассматриваемой задачи, достаточно, чтобы  $\bar{X}^*$  был лучшим элементом множества  $V \supset D$  (если  $\bar{X}^* \in D$  – глобальный экстремум функции  $f(x_1, x_2)$  на множестве  $V$ , то  $\bar{X}^*$  является глобальным экстремумом  $f(x_1, x_2)$  и на множестве  $D$ ).

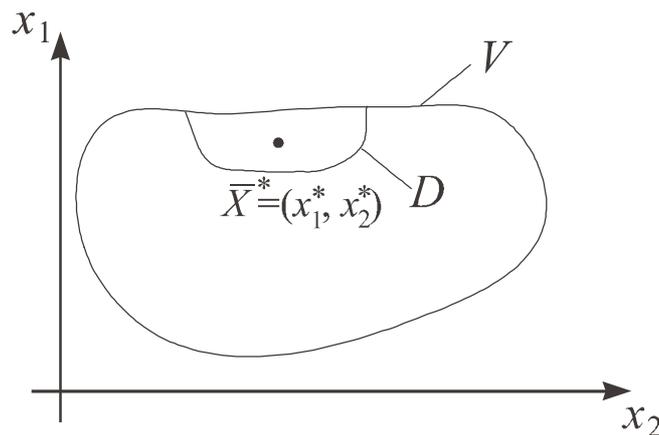


Рис. 5.3. Достаточное условие оптимальности

После того как сформулированы условия оптимальности критерия конкретной задачи, необходимо организовать вычислительную процедуру поиска оптимального решения. Имеется пять основных

типов вычислительных процедур решения задач оптимизации, на основе которых разрабатываются методы оптимизации:

1. *Сравнение значений целевой функции на сетке значений аргументов.* Сетка образуется в результате разбиения областей допустимых значений аргументов на равные интервалы (рис. 5.4). Оптимальному решению соответствует минимальное или максимальное значение целевой функции в «узлах» сетки. Процедура обычно применяется многократно: вначале шаг сетки «крупный», а затем вокруг лучшей точки строится более «мелкая» сетка [65].

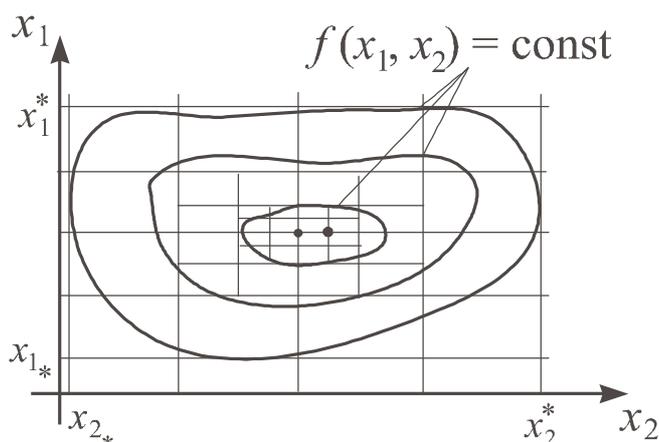


Рис. 5.4. Сетка значений аргументов  $f(x_1, x_2)$

Аналогом этой процедуры для задач дискретного программирования и комбинаторных является поиск лучшего допустимого решения путем полного или локального перебора.

2. *Использование необходимых условий экстремума* целевой функции, т. е. формирование и решение систем уравнений вида:

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

3. *Использование достаточных условий оптимальности:* образуется вспомогательная задача, множество решений которой шире допустимого, а критерий оптимальности на допустимом множестве совпадает с критерием исходной задачи [например, задача условной оптимизации заменяется задачей безусловной оптимизации, в критерий которой вводится «штраф» за выход из допустимой области, т. е. за невыполнение условий (5.1), (5.2)].

4. *Отсечение множеств заведомо неоптимальных решений* (рис. 5.5) на основе правил, различных для каждой конкретной задачи

(метод «золотого сечения», ветвей и границ для экстремальных комбинаторных задач).

5. *Построение оптимизирующей последовательности допустимых решений* задачи: выбирается одно из допустимых решений  $\bar{X}^{(0)}$ , называемое начальным приближением, и на его базе строится последовательность допустимых решений  $\bar{X}^{(0)}, \bar{X}^{(1)}, \bar{X}^{(2)}, \dots, \bar{X}^{(n)}$ , где  $\bar{X}^{(k+1)} = \bar{X}^{(k)} + \Delta\bar{X}^{(k)}$ ;  $k = 0, 1, \dots, n$ , причем  $\Delta\bar{X}^{(k)}$  выбирается так, чтобы при поиске  $\min f(\bar{X})$  выполнялось условие  $f(\bar{X}^{(k)}) > f(\bar{X}^{(k+1)})$ , а при поиске  $\max f(\bar{X})$  – условие  $f(\bar{X}^{(k)}) < f(\bar{X}^{(k+1)})$ . Приращение  $\Delta\bar{X}^{(k)}$  чаще всего является функцией одного или нескольких предыдущих членов последовательности:  $\Delta\bar{X}^{(k)} = \varphi(\bar{X}^{(k)})$  или  $\Delta\bar{X}^{(k)} = \varphi(\bar{X}^{(k)}, \bar{X}^{(k-1)})$ . Построение последовательности заканчивается в момент выполнения необходимых условий  $\text{ext } f(\bar{X})$ .

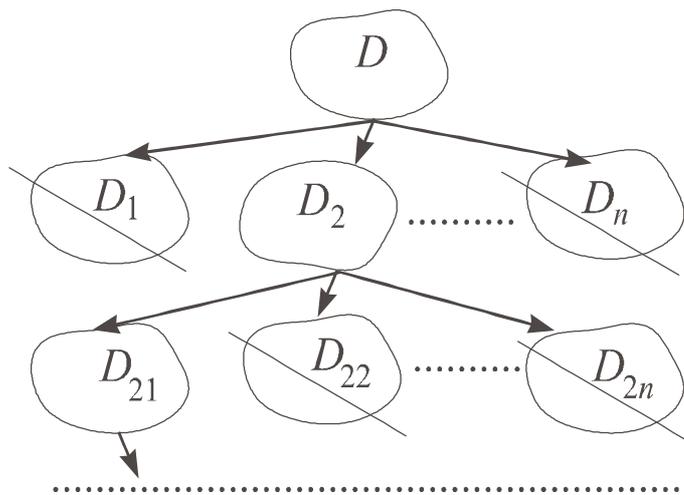


Рис. 5.5. Отсечение множеств неоптимальных решений

Процедура типа 1 применяется в вычислительной практике всегда, когда это не связано со слишком большим объемом вычислений. Применению процедуры 2 препятствует необходимость получения аналитических выражений производных целевой функции. Процедурой типа 3 использует один из методов условной оптимизации – метод штрафных функций, процедуру типа 4 – два метода одномерной оптимизации (методы Больцано и «золотого сечения»). Большинство методов оптимизации основаны на процедуре типа 5.

### 5.3. Методы одномерной оптимизации

К числу наиболее популярных численных методов одномерной оптимизации, т. е. поиска экстремума функции  $f(x)$ , относятся: метод Больцано (деления интервала пополам), метод «золотого сечения» и пошаговый метод. Первые два метода ориентированы на поиск  $\text{ext } f(x)$  внутри фиксированного интервала  $(a; b)$  оси  $x$ , последний – на поиск  $\text{ext } f(x)$  в окрестности заданной точки  $x_0$ .

Будем рассматривать эти методы как методы поиска  $\min f(x)$  (поиск  $\max f(x)$  можно заменить поиском  $\min [-f(x)]$ ) [11].

Метод Больцано при поиске минимума функции  $f(x)$  предусматривает определенные действия (рис. 5.6).

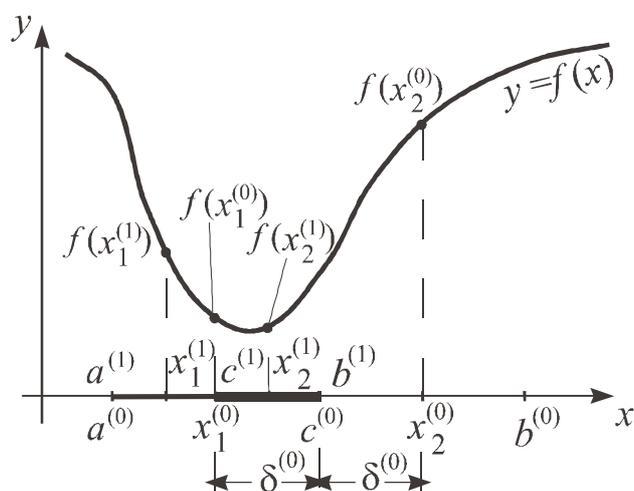


Рис. 5.6. Иллюстрация к методу Больцано

Последовательность действий следующая:

- 1) определяется средняя точка интервала  $(a; b)$   $c = (a + b) / 2$ ;
- 2) выбирается число  $0 < \delta < (b - a) / 2$  (наиболее применяемая рекомендация:  $\delta = (b - a) / 4$ ) и определяются точки  $x_1 = c - \delta$  и  $x_2 = c + \delta$ ;
- 3) вычисляются необходимые значения функции в этих точках  $f(x_1)$  и  $f(x_2)$ ;
- 4) если  $f(x_1) < f(x_2)$ , то интервал  $(a; b)$  стягивается в свою левую половину:  $b \rightarrow c$ , в противном случае – в правую:  $a \rightarrow c$ .

Для нового интервала  $(a; b)$  вновь выполняются действия п. 1–4. Процесс деления интервала продолжается до тех пор, пока его длина не станет меньше заданной точности:  $b - a < \varepsilon$ . При завершении процесса поиска за точку минимума  $f(x)$  принимается середина последнего отрезка:  $x^* = (a + b) / 2$ .

*Достаточные условия сходимости алгоритма метода Больцано:*

- а) функция  $f(x)$  непрерывна внутри интервала  $(a; b)$  оси  $x$ ;
- б)  $f(x)$  унимодальна на интервале  $(a; b)$ , т. е. имеет внутри него единственный экстремум;
- в) в некоторой окрестности искомой точки  $x^*$   $f(x)$  является монотонной (с одной стороны возрастает, а с другой – убывает).

При тех же условиях сходится алгоритм метода «золотого сечения».

*Определение:* «золотым сечением» отрезка называется его деление на две части таким образом, что отношение длины отрезка к его большей части равно отношению большей части к меньшей.

Следовательно, для отрезка единичной длины:  $1/t = t/(1-t) \rightarrow t^2 + t - 1 = 0$ , откуда

$$t = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{4} + 1\right)}; |t| < 1 \rightarrow t = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} = 0,618, 1 - t = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} = 0,382.$$

Алгоритм *метода «золотого сечения»* при поиске минимума функции  $f(x)$  включает операции (рис. 5.7):

- 1) деление интервала  $(a; b)$  точками  $x_1, x_2$  в отношении «золотого сечения»:  $x_1 = a + (b - a)(3 - \sqrt{5}) / 2, x_2 = b - (b - a)(3 - \sqrt{5}) / 2$ ;
- 2) вычисление значений функции  $f(x_1)$  и  $f(x_2)$ ;
- 3) при  $f(x_1) < f(x_2)$  – отсечение от интервала  $(a; b)$  его правой части:  $b \rightarrow x_2, x_2 \rightarrow x_1$ ; в противном случае – левой:  $a \rightarrow x_1, x_1 \rightarrow x_2$ ;
- 4) если  $b \rightarrow x_2$ , то определяется точка  $x_1$  нового интервала  $(a; b)$ , а если  $a \rightarrow x_1$ , то точка  $x_2$ ).

Для нового интервала  $(a; b)$  вновь выполняются действия п. 2–4, причем в п. 2 значение функции  $f(x)$  вычисляется один раз: только для вновь определяемой точки  $x_1$  или  $x_2$ . Процесс деления интервала продолжается до тех пор, пока не выполнится условие  $b - a < \varepsilon$ . При завершении процесса поиска за точку минимума  $f(x)$  принимается значение  $x^* = (a + b) / 2$ .

Число модификаций исходного интервала  $(a; b)$  при использовании метода «золотого сечения» больше, чем при использовании метода Больцано (от интервала отсекается не половина, а 0,382 его длины), но количество вычислений значения функции  $f(x)$  существенно меньше. Поэтому в случаях, когда значение  $f(x)$  вычисляется достаточно долго, метод «золотого сечения» имеет заметное преимущество перед методом Больцано.

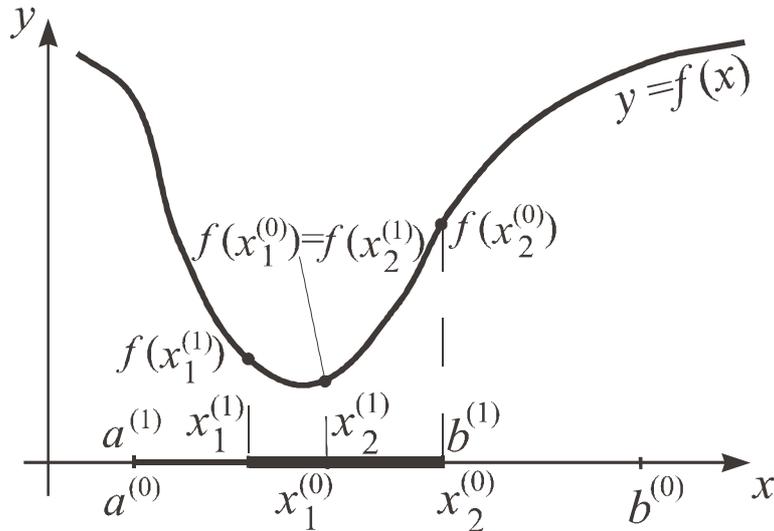


Рис. 5.7. Иллюстрация к методу «золотого сечения»

*Пошаговый метод* применяется в тех случаях, когда интервал  $(a; b)$  оси  $x$ , содержащий точку экстремума функции  $f(x)$ , неизвестен, но известно, что экстремум находится в окрестности экспериментально найденной точки  $x_0$ . Этот метод применяется на практике значительно чаще методов Больцано и «золотого сечения», так как условие сходимости его алгоритма намного проще: достаточно, чтобы функция  $f(x)$  была непрерывна в окрестности точки  $x_0$ .

При поиске минимума  $f(x)$  метод заключается в следующем (рис. 5.8): 1) выполняется пробный шаг от точки  $x_0$  с целью выбора направления поиска:  $x = x_0 + \Delta x$  ( $\Delta x \sim 0,5\varepsilon$ ) и вычисляются значения  $f(x_0), f(x)$ ;

2) если  $f(x) < f(x_0)$ , то величина основного шага, с которым осуществляется движение в направлении убывания функции, положительна ( $h > 0$ ), в противном случае – отрицательна ( $h < 0$ );

3) движение в выбранном направлении с шагом  $h$ :  $x_{k+1} = x_k + h$ ,  $k = 0, 1, \dots$  осуществляется до тех пор, пока  $f(x_{k+1}) < f(x_k)$ ;

4) если  $f(x_{k+1}) \geq f(x_k)$ , то при выполнении условия  $h < \varepsilon$  процесс поиска заканчивается:  $x^* = (x_{k+1} + x_k)/2$ ; если  $h \geq \varepsilon$ , то шаг уменьшается  $h = |h| / p$ ,  $p > 1$  (часто используют  $p = e \approx 2,71828$ ) и осуществляется возврат к п. 1) с начальной точкой  $x_0 = x_k$ .

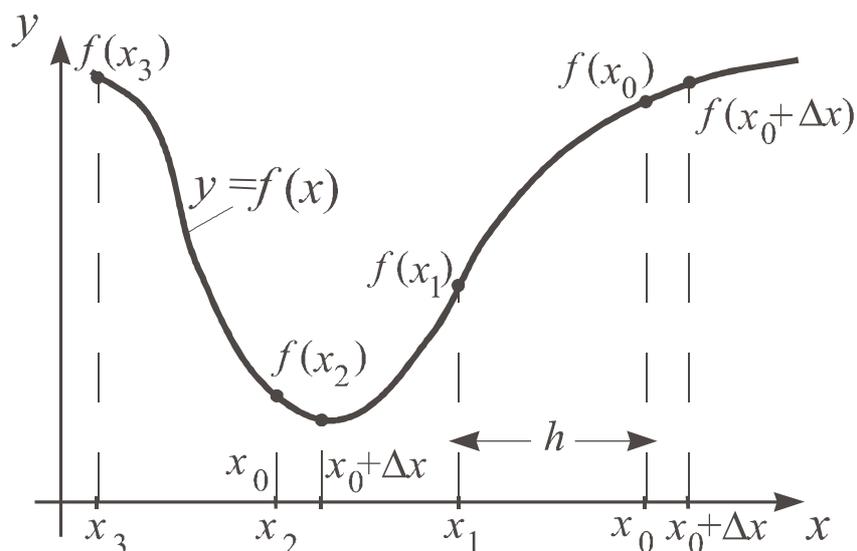


Рис. 5.8. Иллюстрация к пошаговому методу

## 5.4. Методы поиска экстремума функций многих переменных

Методы поиска экстремумов функций  $f(x_1, \dots, x_n)$  подразделяются на градиентные и безградиентные по следующему признаку: градиентные основаны на вычислении и анализе частных производных функции  $f(x_1, \dots, x_n)$ , безградиентные не используют значений производных [65].

Будем рассматривать эти методы как методы поиска  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ . Вначале рассмотрим некоторые градиентные методы.

*Замечание.* В практических задачах найти значения производных целевых функций вида  $f(x_1, \dots, x_n)$  аналитически, как правило, не удастся и их вычисляют приближенно:

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_i} \approx \frac{f(x_1, x_2, \dots, x_i + \partial x_i, \dots, x_n) - f(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n)}{\partial x_i}.$$

Выбор величин приращений по координатам  $\partial x_i, i = 1, 2, \dots, n$  зависит от необходимой точности вычислений.

**Метод координатного спуска.** *Идея метода:* движение от начальной точки по направлению одной из осей координат до момента начала возрастания целевой функции, переход к направлению другой оси и т. д., пока не будет достигнута точка, движение из которой по любой оси координат с минимально возможным шагом приводит к увеличению значения целевой функции (рис. 5.9).

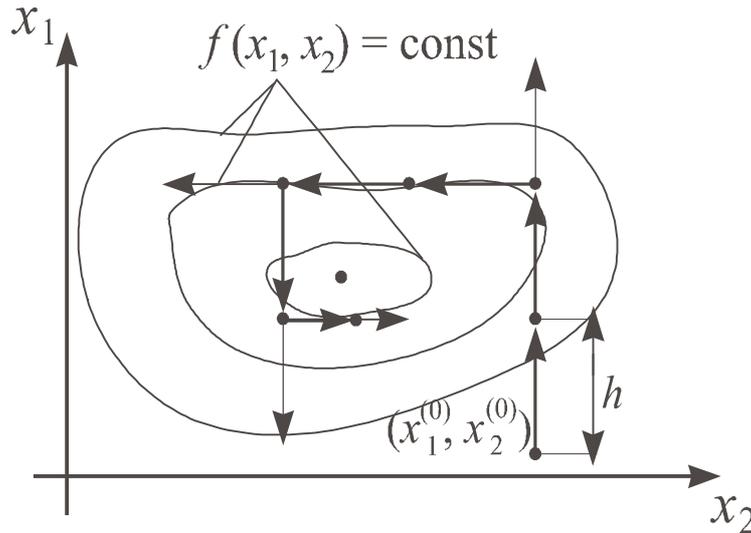


Рис. 5.9. Иллюстрация к методу координатного спуска

Основные этапы поиска  $\min f(x_1, \dots, x_n)$  методом координатного спуска:

1) выбор начального приближения  $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ ;

2) выбор направления поиска, т. е. номера  $i \in (1, 2, \dots, n)$  компоненты вектора  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , которая будет изменяться;

3) вычисление значения производной целевой функции по выбранному аргументу  $f'_i = \frac{\partial f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})}{\partial x_i}$  (если  $f'_i > 0$ , то с ростом  $x_i$  значение  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  увеличивается, а если  $f'_i < 0$ , то уменьшается);

4) изменение значений  $x_1, x_2, \dots, x_n$  в соответствии с выражением

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - h \operatorname{sign} \left( \frac{\partial f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_i} \right); i \in (1, 2, \dots, n); k = 0, 1, 2, \dots; \quad (5.3)$$

$$x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)}; j = 1, 2, \dots, i-1, i+1, \dots, n$$

до тех пор, пока  $f(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_n^{(k+1)}) < f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$ ; в противном случае производится возврат на п. 2 и выбор следующего направления поиска, при этом  $x_i^{(0)} = x_i^{(k)}$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  ( $h$  – шаг поиска,  $\operatorname{sign}(z)$  – знак выражения ( $z$ ));

5) если попытка движения с шагом  $h$  в любом из  $n$  возможных направлений приводит к ситуации  $f(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_n^{(k+1)}) \geq f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$ , то осуществляется дробление шага:  $h = h/p$  ( $p > 1$ ) и вновь выполняется п. 4);

б) поиск считается законченным, когда значение  $h$  становится меньше заданной точности  $\varepsilon$ .

**Методы градиента.** *Определение:* градиент функции  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  в точке  $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$  – это вектор, длина которого характеризует скорость возрастания функции в этой точке, а направление соответствует направлению быстрейшего возрастания функции. Антиградиент – это вектор такой же длины, направленный в противоположную сторону (рис. 5.10):

$$\left| \text{grad } f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) \right| = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})}{\partial x_i} \right)^2}. \quad (5.4)$$

*Идея методов:* каждая следующая точка поиска  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  (каждый новый член минимизирующей последовательности) получается в результате перемещения из предыдущей точки по направлению антиградиента целевой функции. Если в результате этого перемещения наблюдается увеличение значения целевой функции, то значение рабочего шага поиска  $h$  уменьшается. Поиск прекращается, когда выполняется необходимое условие  $\text{ext } f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , например, длина градиента становится меньше требуемой точности:

$$\sqrt{\sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_i} \right)^2} < \varepsilon \quad (5.5)$$

либо меньше требуемой точности становится величина шага поиска:

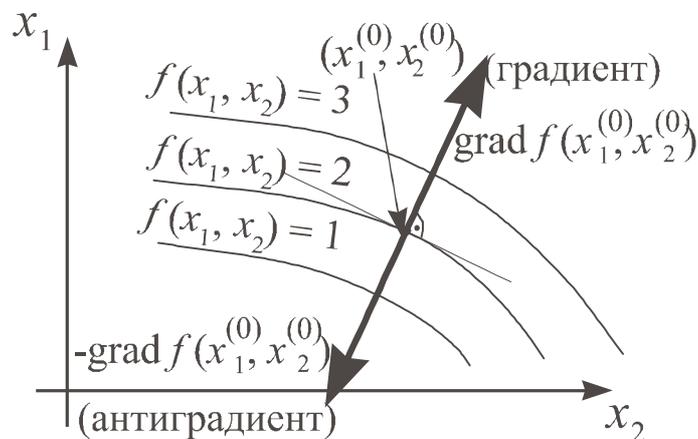


Рис. 5.10. Градиент и антиградиент функции  $f(x_1, x_2)$

$$h < \varepsilon. \quad (5.6)$$

Различают методы градиента с переменным шагом и с постоянным шагом (рис. 5.11). При использовании метода градиента с *переменным шагом* изменение значений  $x_1, x_2, \dots, x_n$  производится согласно выражению

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - h \frac{\partial f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.7)$$

а останов поиска – при выполнении неравенства (5.5). При возникновении ситуации  $f(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_n^{(k+1)}) \geq f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$  значение  $h$  уменьшается, например, делится на число  $p > 1$ . Характер изменения значений  $x_1, x_2, \dots, x_n$  согласно (5.7) зависит от величины и знака соответствующих частных производных целевой функции. По мере приближения к точке  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  абсолютные величины частных производных уменьшаются, следовательно, и шаг поиска является переменным – уменьшается по мере приближения к искомой точке. Такой характер поиска  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  требует иногда весьма значительных затрат времени.

Применение метода градиента с *постоянным шагом* позволяет сократить затраты времени, но требует несколько большего объема вычислений при изменении значений аргументов целевой функции. Его основное соотношение приведено на рис. 5.11.

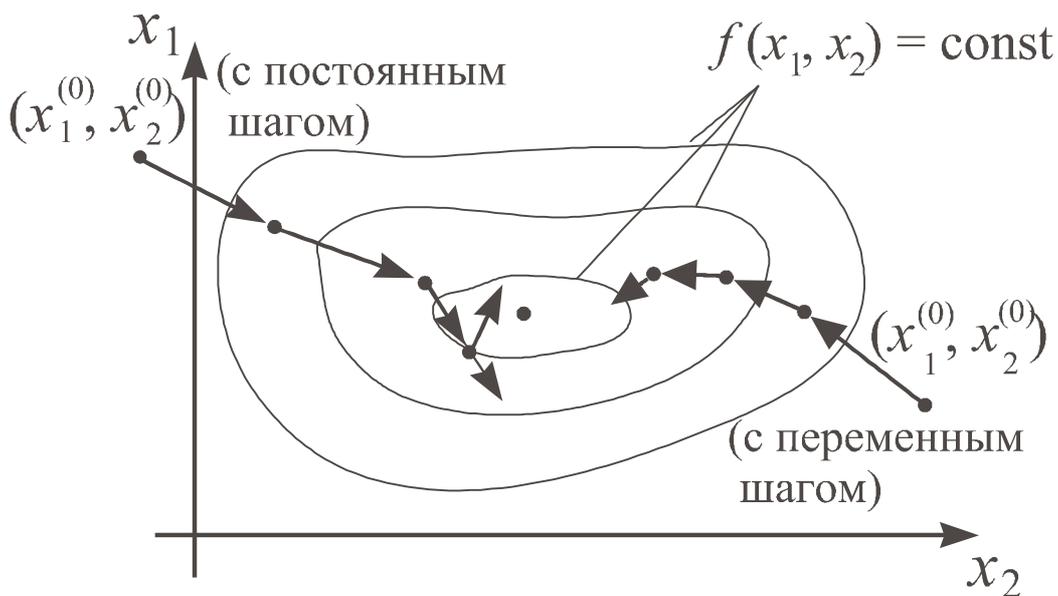


Рис. 5.11. Иллюстрация к методам градиента

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - h \frac{\frac{\partial f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_j}}{\sqrt{\sum_{j=1}^n \left( \frac{\partial f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_j} \right)^2}} \quad i = 1, 2, \dots, n; k = 0, 1, 2, \dots,$$

т. е. расстояние между точками  $(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$  и  $(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_n^{(k+1)})$  равно:

$$\sqrt{\sum_{j=1}^n \left( x_j^{(k+1)} - x_j^{(k)} \right)^2} = \frac{\sqrt{h^2 \sum_{j=1}^n \left( \frac{\partial f(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_j} \right)^2}}{\sum_{j=1}^n \left( \frac{\partial f(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_j} \right)^2} = h, \quad (5.8)$$

следовательно, величина шага поиска в данном случае постоянна и равна выбранному значению  $h$ . Если изменение аргументов целевой функции в соответствии с (5.8) приводит к увеличению ее значения, шаг поиска уменьшается. Останов поиска  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  по методу градиента с постоянным шагом осуществляется при выполнении неравенства (5.6).

**Метод наискорейшего спуска.** Так называют модификацию метода градиента с постоянным шагом, позволяющую сократить общий объем вычислений при некотором увеличении числа членов минимизирующей последовательности за счет меньшего количества вычислений частных производных целевой функции. При использовании этого метода аргументы целевой функции изменяются в соответствии с выражением (5.8), но значения ее производных не пересчитываются до тех пор, пока не сложится ситуация  $f(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_n^{(k+1)}) \geq f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$  (рис. 5.12). Дробление шага поиска производится, когда во вновь выбранном направлении (после пересчета значений частных производных) не удастся сделать ни одного результативного шага, останов поиска – при выполнении неравенства (5.6).

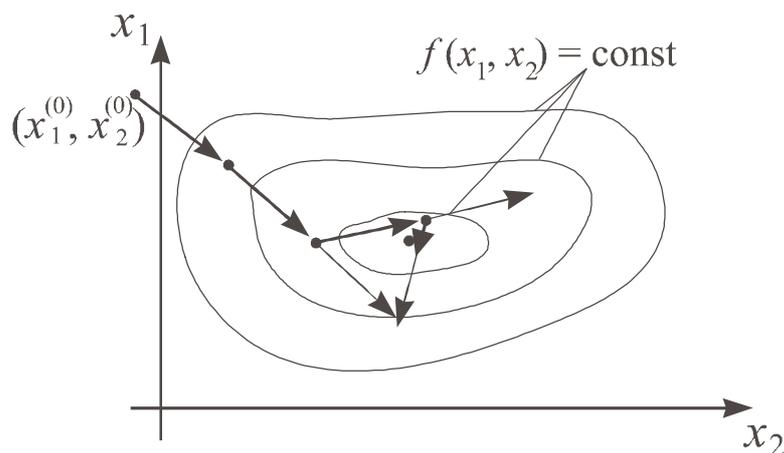


Рис. 5.12. Иллюстрация к методу наискорейшего спуска

Основные этапы поиска  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  методом наискорейшего спуска:

- 1) выбор начального приближения  $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ ;
- 2) определение значений частных производных  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  в этой точке;
- 3) изменение значений  $X_i, i = 1, 2, \dots, n$  в соответствии с выражением (5.8) до момента начала возрастания целевой функции без пересчета ее частных производных;
- 4) если ситуация  $f(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_n^{(k+1)}) \geq f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$  возникает при  $k > 0$ , то начальным приближением становится предыдущая точка:  $X_i^{(0)} = X_i^{(k)}, i = 1, 2, \dots, n$  и вновь выполняются п. 2 и 3);
- 5) если  $f(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_n^{(k+1)}) \geq f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$  уже при  $k = 0$ , то осуществляется дробление шага  $h = h/p$  ( $p > 1$ ); при  $h \geq \varepsilon$  (заданная точность) выполняется п. 3), иначе поиск заканчивается,  $X_i^* = X_i^{(k)}, i = 1, 2, \dots, n$ .

Рассмотренные методы поиска экстремума функций многих переменных носят общее название: *градиентные методы первого порядка* (порядок метода равен наивысшему порядку производной целевой функции, участвующей в вычислениях). Им свойственны следующие общие недостатки:

1. Нахождение локального экстремума целевой функции, а не глобального (рис. 5.13). Это недостаток абсолютного большинства методов решения оптимизационных задач. Его можно устранить, если удастся обосновать выбор начального приближения, находящегося вблизи глобального экстремума.

2. Использование значений частных производных целевой функции. Это, с одной стороны, увеличивает объем вычислений (ко-

личество вычислений значений целевой функции), а с другой – увеличивает погрешность решения, т. к. производные чаще всего вычисляются через разностные отношения.

3. «Застревание в овраге» целевой функции, т. е. в области значений  $X_i, i = 1, 2, \dots, n$ , в которой значения  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  почти не меняются (рис. 5.14).

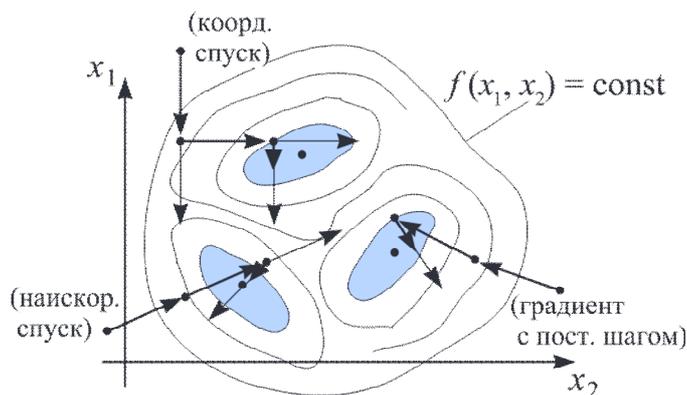


Рис. 5.13. Поиск локальных экстремумов многоэкстремальной функции

Градиентные методы с остановкой по условию (5.6) «застревают в овраге», т. е. наблюдается иллюзия достижения минимума. Если же в качестве условия останова используется длина градиента, то поиск в «овраге» будет продолжаться бесконечно долго: значения частных производных целевой функции на «дне оврага» достаточно велики, но продвижения к точке минимума функции почти нет.

Если результирующие точки поиска  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  с различных, достаточно далеко отстоящих друг от друга начальных точек не совпадают, а значения функции в них близки, значит она имеет «овраг», а если значения функции отличаются существенно, значит она имеет несколько экстремумов.

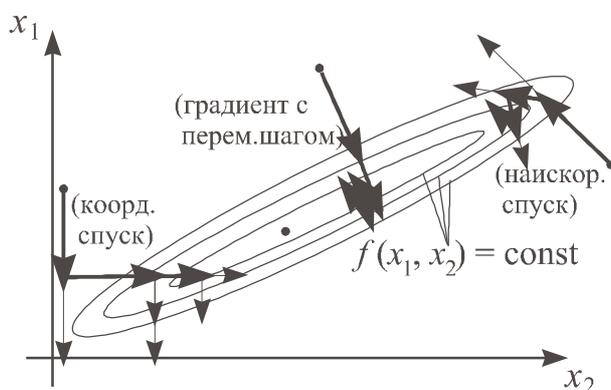


Рис. 5.14. Поиск минимума функции, имеющей «овраг»

Перейдем к рассмотрению безградиентных методов поиска  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  (их также называют методами нулевого порядка).

Можно выделить две группы этих методов. Первые требуют предварительного определения множества допустимых значений аргументов и используют стратегию его перебора (метод сеток). Общая схема вторых (методы случайных направлений и многогранника) предусматривает построение оптимизирующей последовательности значений аргументов целевой функции.

**Метод сеток (сравнения значений функции на сетке значений аргументов).** Схему работы метода иллюстрирует рис. 5.15. Отрезки  $[a_i, b_i]$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , определяющие область поиска минимума функции  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , делятся на равные части длиной  $h_i = (b_i - a_i) / n_i$ . Значения  $n_i$  подбираются так, чтобы обеспечить одинаковый порядок чисел  $h_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Во всех «узлах» полученной сетки, т. е. в точках  $(a_1 + i \cdot h_1, a_2 + j \cdot h_2, \dots, a_n + k \cdot h_n)$ ,  $i = 0, 1, \dots, n_1, j = 0, 1, \dots, n_2, \dots, k = 0, 1, \dots, n_n$ , вычисляются значения функции и выбирается «узел» сетки  $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ , которому соответствует минимальное значение [65].

Если этот «узел» лежит на границе заданной области, то положение границ изменяется и описанная процедура повторяется до тех пор, пока он не станет внутренним. Если  $\max_{i=1,2,\dots,n} \{h_i\} > \varepsilon$  (заданной точности), то вокруг этого «узла» формируется новая область:  $a_i = X_i^* - h_i$ ,  $b_i = X_i^* + h_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  – вычисляются новые значения  $h_i$  и т. д. В противном случае за точку минимума функции принимается  $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ .

Главной проблемой при использовании метода сравнения значений целевой функции на сетке значений аргументов является выбор значений  $n_i$ , при которых, с одной стороны, исключается потеря точки экстремума между «узлами» слишком крупной сетки, а с другой – обеспечивается приемлемый объем вычислений. Применение этого метода связано с большим объемом вычислений, однако при правильном выборе значений  $n_i$  он гарантирует нахождение глобального экстремума функции в заданной области.

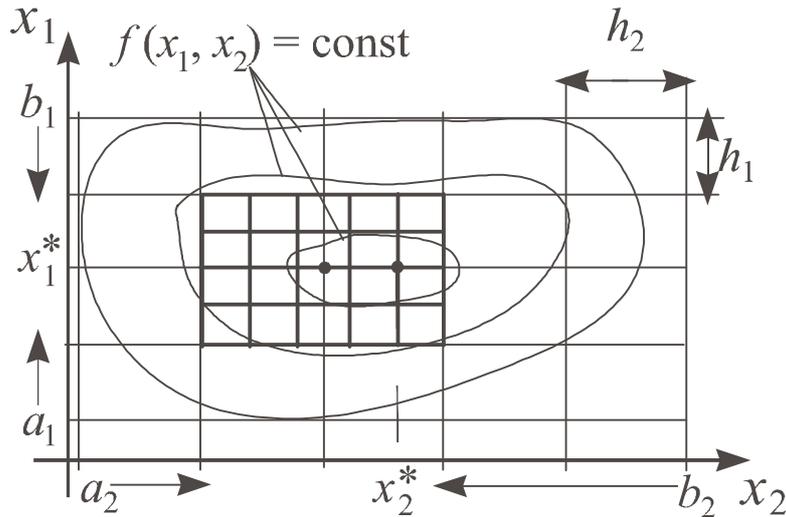


Рис. 5.15. Иллюстрация к методу сеток

**Метод случайных направлений.** Случайный выбор направления в системе координат  $x_1, x_2$  обеспечивается использованием в качестве приращений значений аргументов ( $p_1, p_2$  на рис. 5.16) случайных чисел. Величина шага в выбранном таким образом направлении будет единичной, если разделить  $p_1$  и  $p_2$  на  $P = \sqrt{p_1^2 + p_2^2}$ .

При поиске  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  метод случайных направлений включает определение начальной точки поиска  $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$  и величины рабочего шага  $h$ , выбор случайных чисел  $p_1, p_2, \dots, p_n$  и изменение значений аргументов целевой функции по правилу:

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - hp_i / \sqrt{p_1^2 + p_2^2 + \dots + p_n^2}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad k = 0, 1, \dots \quad (5.9)$$

Если выполняется неравенство

$$f(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_n^{(k+1)}) < f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}),$$

то движение в выбранном направлении с шагом  $h$  продолжается. Если неравенство не выполняется после второго, третьего и так далее шагов, то определяется новое случайное направление и движение продолжается без изменения величины шага. Если неудачным оказывается первый шаг в выбранном направлении, то путем изменения знаков чисел  $p_i, i = 1, 2, \dots, n$  оно меняется на противоположное, а при повторении ситуации – на новое случайное направление. Если ситуация  $f(x_1^{(k+1)}, \dots, x_n^{(k+1)}) \geq f(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$  складывается после первого шага в любом из заданного числа случайных направлений, то величина шага

поиска  $h$  уменьшается. Для функции  $f(x_1, x_2)$  обычно достаточно перебрать четыре взаимно перпендикулярных направления.

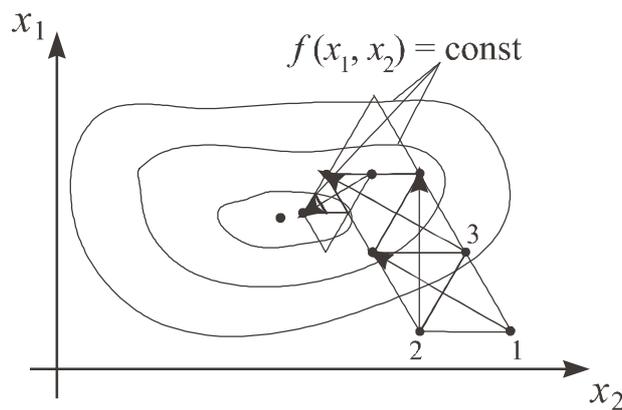
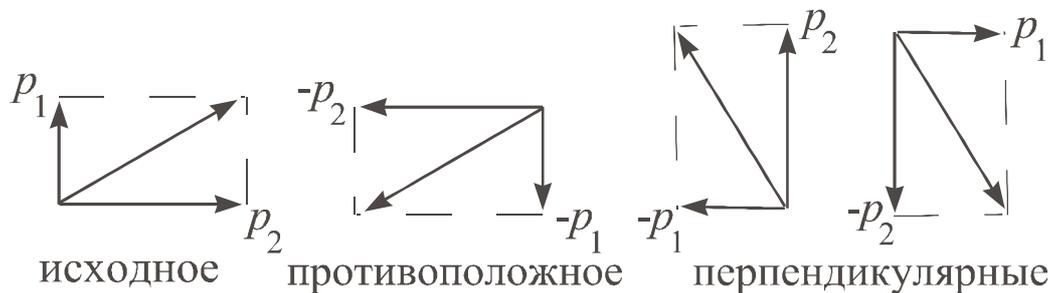


Рис. 5.16. Иллюстрация к методу случайных направлений

Поиск закончится, когда значение  $h$  станет меньше заданной точности.

Характер движения от начальной точки к точке минимума функции при использовании метода случайных направлений не зависит от особенностей функции. Случайный выбор направления, как правило, не обеспечивает кратчайшего пути к искомой точке, но может привести к уменьшению общего объема расчетов за счет единственного вычисления целевой функции на каждом шаге поиска.

**Метод многогранника.** При поиске минимума функции двух переменных метод предусматривает формирование на плоскости  $x_1, x_2$  правильного треугольника и определение значений функции  $f(x_1, x_2)$  в точках плоскости, соответствующих его вершинам. Вершина, которой отвечает наибольшее значение функции (вершина 1 на рис. 5.17), исключается, а новая образуется в результате симметричного отражения исключаемой через центр противоположной грани треугольника:  
 $x_1^{(i)} = x_1^{(1)} + x_1^{(2)} + x_1^{(3)} - 2x_1^{(i)}$ ,  $x_2^{(i)} = x_2^{(1)} + x_2^{(2)} + x_2^{(3)} - 2x_2^{(i)}$ ,  $i \in (1, 2, 3)$ .

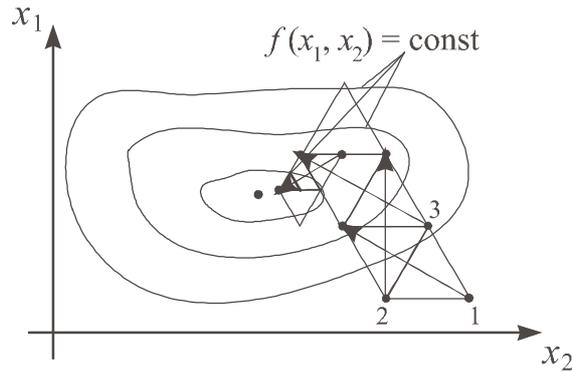


Рис. 5.17. Иллюстрация к методу многогранника

Процесс перемещения треугольника по плоскости  $x_1, x_2$  путем изменения положения одной из его вершин продолжается до момента, когда значение функции во вновь образованной вершине оказывается наибольшим. В этом случае длина ребра треугольника уменьшается, причем неподвижной остается вершина ( $k$ ), которой соответствует наименьшее значение функции:  $x_1^{(j)} = \frac{x_1^{(j)} + x_1^{(k)}}{S}$ ;  $x_2^{(j)} = \frac{x_2^{(j)} + x_2^{(k)}}{S}$ ;  $j \neq k, S > 1$ .

Поиск прекращается в момент выполнения неравенства  $\max_{i=1,2,3; i \neq k} \left\{ |x_1^{(k)} - x_1^{(i)}|, |x_2^{(k)} - x_2^{(i)}| \right\} < \varepsilon$ .

За точку  $\min f(x_1, x_2)$  принимается лучшая вершина последнего треугольника.

В случае поиска  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  в  $n$ -мерном пространстве формируется выпуклый многогранник, имеющий  $(n + 1)$  вершин и столько же граней. Если  $\max_{k=1,2,\dots,n+1} \left\{ f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \right\} = f(x_1^{(j)}, x_2^{(j)}, \dots, x_n^{(j)})$ , то положение новой  $j$ -й вершины определяется по правилу:

$$x_i^{(j)} = \frac{2}{n} \sum_{k=1}^{n+1} x_i^{(k)} - \left( 1 + \frac{2}{n} \right) x_i^{(j)}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (5.10)$$

В ситуации, когда вновь образованной вершине соответствует максимальное значение целевой функции, многогранник деформируется – положение  $j$ -й вершины может быть определено по формуле

$$x_i^{(j)} = \frac{3}{2n} \sum_{k=1}^{n+1} x_i^{(k)} - \left( \frac{1}{2} + \frac{3}{2n} \right) x_i^{(j)}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (5.11)$$

где  $k$  – вершина, которой соответствует наименьшее значение функции.

Поиск прекращается при выполнении неравенства

$$\max_{j=1, \dots, n+1; j \neq k} \left\{ |x_i^{(j)} - x_i^{(k)}| \right\} < \varepsilon, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (5.12)$$

Применение метода многогранника, как и метода случайных направлений, связано с вычислением единственного значения целевой функции на каждом шаге поиска, но характер движения обычно обеспечивает более короткий путь и меньший объем вычислений. Доказано, что при использовании правильного многогранника достаточно малых размеров направление движения совпадает с направлением антиградиента целевой функции.

В заключение остановимся на методах поиска  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  при наличии «оврагов» (см. рис. 5.14).

Причина образования «оврагов» функций многих переменных – неодинаковая чувствительность целевой функции к изменению различных аргументов (например, когда в качестве критерия оптимизации используются приведенные затраты на какое-либо мероприятие или прибыль от его реализации). Довольно часто в вычислительной практике приходится сталкиваться с разными пределами изменения различных аргументов  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , например,  $x_1 \in [0,1; 0,8]$ ,  $x_2 \in [100; 1000]$ . Если при вычислении частных производных целевой функции использовать одинаковые значения  $\delta x_i$ , то ее чувствительность к изменению разных аргументов будет неодинаковой – возникнет ситуация, характерная для наличия «оврага».

Использовать различные значения  $\delta x_i$  неудобно, вместо этого рекомендуют применять процедуру *нормирования аргументов целевой функции*:  $z_i = (x_i - x_i^{\min}) / (x_i^{\max} - x_i^{\min})$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , тогда  $z_i \in [0; 1]$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Такая замена позволяет вычислять частные производные функции  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  с одинаковыми приращениями  $\delta z_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  и использовать в процессе поиска значения  $z_i$  вместо  $X_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , но перед вычислением значений функции необходимо выполнять обратную процедуру:  $x_i = x_i^{\min} + z_i(x_i^{\max} - x_i^{\min})$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ .

Если нормирование значений, аргументов не помогает избежать «оврага», для поиска  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  используются специальные методы.

*Метод сопряженных градиентов* (рис. 5.18). Это модификация метода градиента, позволяющая избежать «застревания в овраге» (в «правильном овраге», примером которого может служить эллипс с

соотношением полуосей менее 1/50). Первый шаг делается в направлении антиградиента целевой функции, а второй и последующие – в направлении векторной суммы антиградиента в текущей точке и предыдущего направления. Для преодоления «застревания в овраге» через  $n$  шагов осуществляется обновление направления: делается шаг в направлении антиградиента целевой функции. Основное соотношение метода:

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - hp_i^{(k)}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (5.13)$$

где

$$p_i^{(0)} = \frac{\frac{\partial f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})}{\partial x_i}}{\sqrt{\sum_{j=1}^n \left( \frac{\partial f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})}{\partial x_j} \right)^2}};$$

$$p_i^{(k)} = \frac{\frac{\partial f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_i}}{\sqrt{\sum_{j=1}^n \left( \frac{\partial f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_j} \right)^2}} + p_i^{(k-1)} \cdot \frac{\sum_{j=1}^n \left( \frac{\partial f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_j} \right)^2}{\sum_{j=1}^n \left( \frac{\partial f(x_1^{(k-1)}, \dots, x_n^{(k-1)})}{\partial x_j} \right)^2},$$

$$k = 0, 1, \dots$$

При обновлении направления второе слагаемое в последней формуле зануляется. Дробление шага и останов осуществляется аналогично методу градиента с постоянным шагом.

Метод «шагов по оврагу» представлен на рис. 5.19.

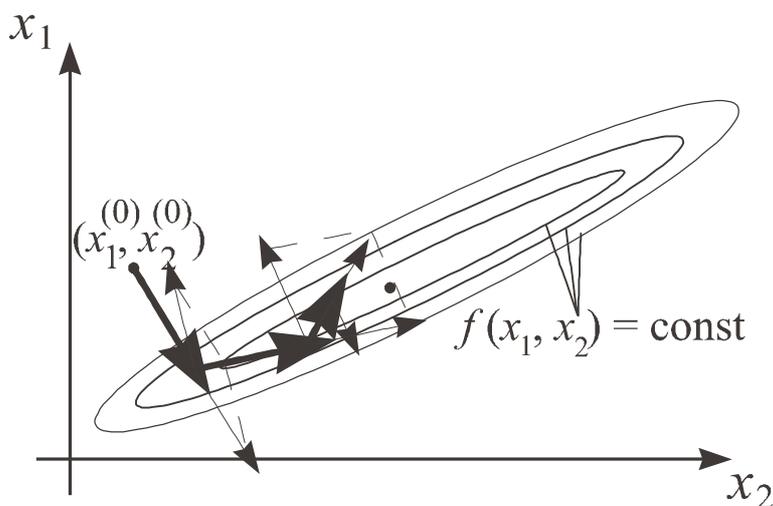


Рис. 5.18. Иллюстрация к методу сопряженных градиентов

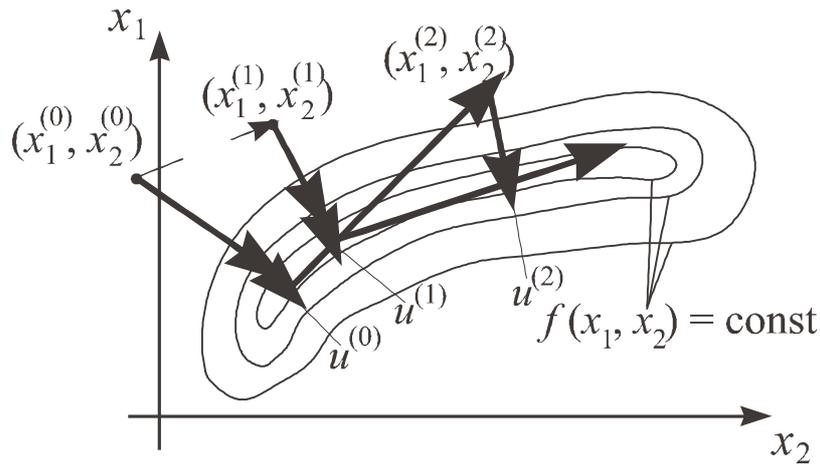


Рис. 5.19. Иллюстрация к методу «шагов по оврагу»

Последовательность действий при поиске минимума функции  $f(x_1, x_2)$  следующая:

1) аргументы целевой функции разбиваются на две группы – существенно влияющие на ее изменение ( $x_1$ ) и мало влияющие ( $x_2$ );

2) из начальной точки  $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)})$  производится поиск  $\min f(x_1, x_2)$  любым методом – в результате получается точка  $u^{(0)}$ , лежащая на дне «оврага»;

3) путем изменения переменных, мало влияющих на изменение функции или случайным образом выбирается новая начальная точка  $(x_1^{(1)}, x_2^{(1)})$ , из которой производится поиск  $\min f(x_1, x_2)$  и находится точка дна «оврага»  $u^{(1)}$ ;

4) точки  $u^{(0)}$  и  $u^{(1)}$  соединяются прямой и в направлении уменьшения значения функции делается «шаг по оврагу» – в результате получается новая начальная точка  $(x_1^{(2)}, x_2^{(2)})$ ;

5) поиск  $\min f(x_1, x_2)$  из точки  $(x_1^{(2)}, x_2^{(2)})$  даст следующую точку дна оврага  $u^{(2)}$  и так далее до тех пор, пока значение функции в точке  $u^{(k+1)}$  не окажется больше, чем в точке  $u^{(k)}$ ;

6) делается вывод, что точка минимума  $f(x_1, x_2)$  находится между  $u^{(k-1)}$  и  $u^{(k+1)}$ , поиск с точки  $u^{(k-1)}$  повторяется с меньшим «шагом по оврагу» и так далее, пока этот шаг не станет меньше заданной точности.

## 5.5. Методы условной оптимизации

Задача оптимизации технической системы по существу сводится к поиску некоторого компромисса между выбором определенных условий процесса (характер цели) и ограниченными ресурсами (средства достижения цели). Характер компромисса, принятого при решении конкретной проблемы, влияет на форму критерия оптимизации и в большинстве случаев подразумевает явное указание ограниченных ресурсов определенного типа, например, затрат на сырье. Кроме того, при работе конкретной технической системы обычно должны соблюдаться определенные условия, т. е. ограничения, накладываемые на значения ее переменных. Эти ограничения связаны с характером принятой технологии и т. д. Ограничения-неравенства, возникающие в задачах оптимизации технических систем, можно разделить на две группы [19, 65].

К первой группе относятся те, которые налагаются на зависимые переменные системы. К ним относятся выходные и промежуточные переменные системы, а также фазовые переменные устройств, которые являются объектами с распределенными параметрами. Ограничения первой группы появляются в случае:

- Постановка задачи оптимизации в следующем виде – найти минимальную стоимость при заданной производительности целевого продукта и максимальную производительность при заданной стоимости и т. д.

- Наличие ограничений по качеству выпускаемой продукции, т. е. когда требуется, чтобы количество непрореагировавших или побочных продуктов не превышало указанные значения.

- Существуют ограничения на переменные потока внутри аппарата (объекты с распределенными параметрами), например, иногда устанавливается ограничение на температуру реакционной смеси в каталитическом реакторе. Другие ограничения, относящиеся к первой группе, могут быть указаны.

Вторая группа включает ограничения, налагаемые на независимые переменные системы: входные переменные технической системы и управляющие переменные устройства. Их можно разделить следующим образом:

- Ограничения на переменные технологического контроля из-за возможностей (в данном случае мощности) оборудования. Таким об-

разом, нагрузка на реактор ограничена мощностью компрессора, температурой реактора-холодильника – некоторым максимальным значением, определяемым конструкцией холодильника, температурой куба ректификационной колонны – необходимостью предотвращения необратимых изменений в разделенная смесь и т. д.

- Ограничения на структурные переменные (например, длина трубы, диаметр реактора).

Вначале рассмотрим методы поиска  $\min f(x_1, \dots, x_n)$  при условиях (5.1).

*Постановка задачи:* найти вектор  $\bar{X}^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ , доставляющий минимум функции  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  при условиях  $g_j(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq 0$ ;  $j = 1, 2, \dots, m$ . Другими словами (см. рис. 5.20), требуется найти точку  $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ , в которой функция  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  достигает минимума, но эта точка должна принадлежать области  $D$  значений  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , в которой справедливы все ограничения (5.1). Число ограничений  $m$  может быть как больше, так и меньше числа переменных  $n$  (рис. 5.21).

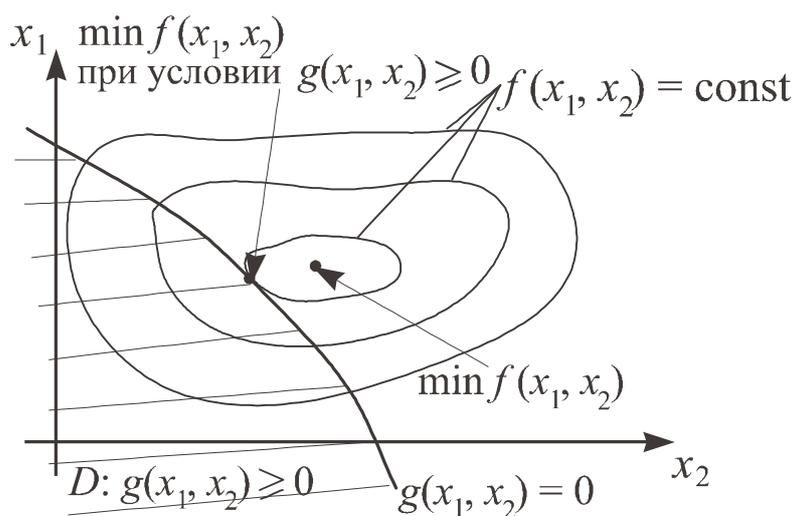


Рис. 5.20. Иллюстрация к постановке задачи условной оптимизации

Наиболее популярными методами поиска  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  при условиях (5.1) являются методы штрафных функций, прямого поиска с возвратом, возможных направлений, случайных направлений, сравнения значений функции на сетке значений аргументов.

**Метод штрафных функций.** *Идея метода* (рис. 5.22): наличие ограничений учитывается путем изменения целевой функции – введения в нее штрафа за нарушение ограничений. Одним из методов безусловной оптимизации осуществляется поиск минимума функции:

$$F(x_1, \dots, x_n) = f(x_1, \dots, x_n) + \alpha \cdot \text{Ш}(x_1, \dots, x_n), \quad (5.14)$$

где  $\alpha$  – положительное число, выбираемое таким образом, чтобы всюду за пределами области  $D$  выполнялось неравенство

$$\alpha \cdot \left| \frac{\partial \text{Ш}(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_j} \right| \gg \left| \frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_j} \right|; \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Функцию штрафа обычно записывают в виде:

$$\text{Ш}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{j=1}^m q_j(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (5.15)$$

где

$$q_j(x_1, x_2, \dots, x_n) = \begin{cases} [g_j(x_1, x_2, \dots, x_n)]^2, & g_j(x_1, x_2, \dots, x_n) < 0; \\ 0, & g_j(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq 0. \end{cases}$$

Если ограничение одно ( $m = 1$ ), то необходимо найти минимум функции  $F(x_1, \dots, x_n) = f(x_1, \dots, x_n) + k\alpha [g(x_1, \dots, x_n)]^2$ , где

$$k = \begin{cases} 1, & g(x_1, x_2, \dots, x_n) < 0 \\ 0, & g(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq 0, \quad a \gg 0. \end{cases}$$

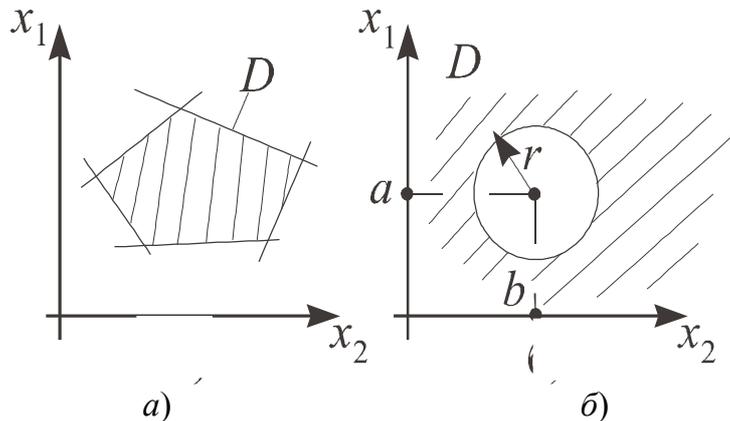


Рис. 5.21. Иллюстрация видов ограничений:  
 а – пять ограничений вида  $a_i x_1 + b_i x_2 + c_i \leq 0$ ;  
 б – одно ограничение вида  $(x_1 - a)^2 + (x_2 - b)^2 - r^2 \geq 0$

В области  $D$  функция  $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$  совпадает с функцией  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  и процесс поиска ее минимума протекает так же, как и при отсутствии ограничений. В момент выхода за допустимую об-

ласть функция  $\Pi(x_1, x_2, \dots, x_n)$  изменяет направление градиента функции  $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$  и осуществляется возврат в допустимую область (рис. 5.23). Заметим, что возврат осуществляется не по нормали к линии ограничения, а под некоторым углом к ней в сторону уменьшения значений исходной целевой функции  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ . При использовании метода штрафных функций очень важен правильный выбор значения  $\alpha$ . При слишком малом значении  $\alpha$  может быть найдена точка за пределами допустимой области, а при слишком большом – функция  $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$  образует овраг вдоль поверхности  $g(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$ . Метод не чувствителен к выбору начальной точки поиска: если она окажется за пределами допустимой области, то штраф будет включен сразу.

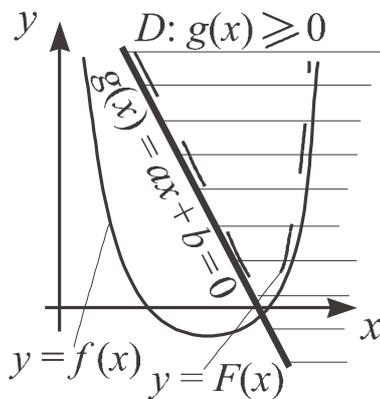


Рис. 5.22. Идея метода штрафных функций

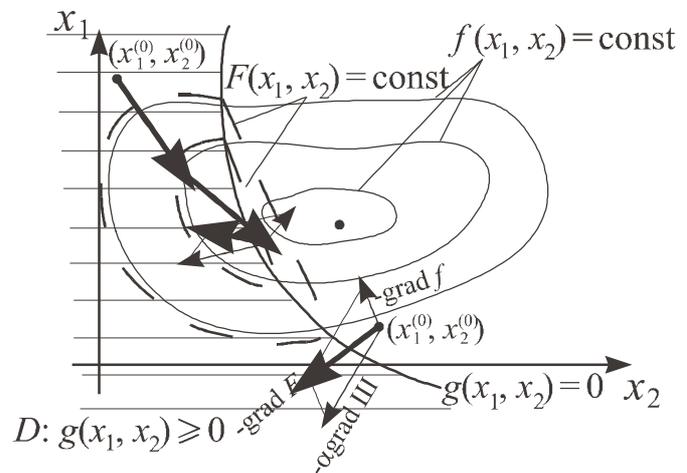


Рис. 5.23. Иллюстрация к алгоритму метода штрафных функций

Наиболее популярный алгоритм метода штрафных функций предусматривает формирование функции  $\Pi(x_1, x_2, \dots, x_n)$  согласно (5.15) в начальной точке  $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$  и использование для поиска  $\min F(x_1, x_2, \dots, x_n)$  метода градиента с постоянным шагом, где после каждого изменения значений  $x_1, x_2, \dots, x_n$  [см. (5.8)] вновь формируется функция  $\Pi(x_1, x_2, \dots, x_n)$ .

**Метод прямого поиска с возвратом.** В области  $D$  допустимых значений аргументов поиск  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  осуществляется любым методом безусловной оптимизации (чаще всего используют метод градиента с постоянным шагом и наискорейшего спуска).

При нарушении в ходе поиска хотя бы одного из неравенств (5.1) поиск прекращается и осуществляется возврат в область  $D$  по направлению векторной суммы градиентов соответствующих функций  $g_j(x_1, x_2, \dots, x_n)$ ,  $j \in (1, 2, \dots, m)$ .

Возврат в область  $D$  выполняется по градиенту функции

$$G(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{j=1}^m d_j(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (5.16)$$

где

$$d_j(x_1, x_2, \dots, x_n) = \begin{cases} g_j(x_1, x_2, \dots, x_n), & g_j(x_1, x_2, \dots, x_n) < 0; \\ 0, & g_j(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq 0, \end{cases}$$

т. е. значения параметров задачи изменяются следующим образом:

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + h \frac{\frac{\partial G(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_i}}{\sqrt{\sum_{j=1}^n \left[ \frac{\partial G(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_j} \right]^2}}, \quad (5.17)$$

где  $(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$  – точка, в которой нарушаются ограничения;  $h$  – текущее значение шага поиска в области  $D$ . Дробление шага производится, когда значение функции в допустимой области увеличивается. Признаком окончания поиска – выполнение неравенства  $h < \varepsilon$ . Так же как и метод штрафных функций, метод прямого поиска с возвратом нечувствителен к выбору начальной точки поиска: движение из точки  $(x_1^{(1)}, x_2^{(1)})$  на рис. 5.24 начнется сразу с применения формулы (5.17).

На практике ограничения часто задаются в виде:  $x_i^{\min} \leq x_i \leq x_i^{\max}$ ,  $i \in (1, 2, \dots, n)$ .

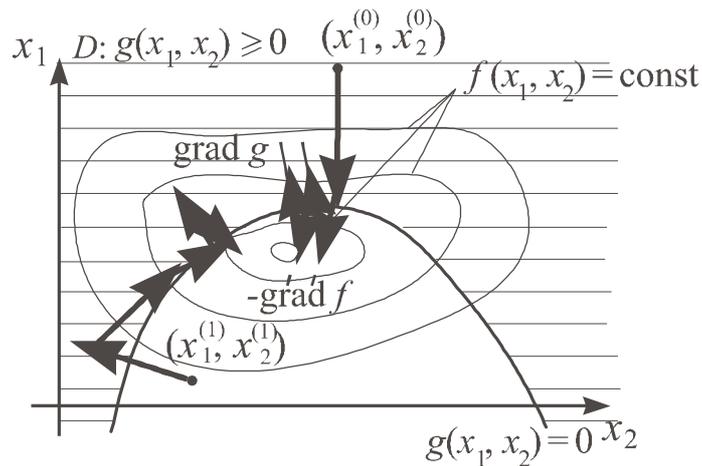


Рис. 5.24. Иллюстрация к методу прямого поиска с возвратом

При нарушении некоторых из них для возврата в область  $D$  по нормали к линии ограничения нет необходимости использовать соотношение (5.17) – достаточно уменьшить или увеличить соответствующие параметры на величину шага поиска (рис. 5.25).

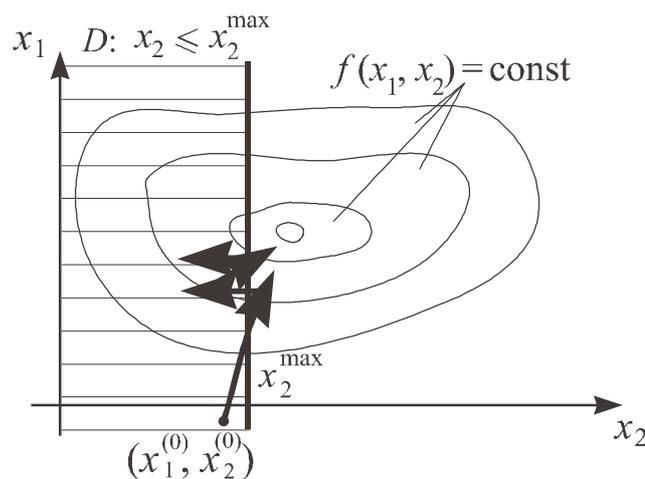


Рис. 5.25. Прямой поиск с возвратом при ограничении  $x_2 \leq x_2^{\max}$

Поскольку возврат в область  $D$  производится по нормали к линии ограничения, этот метод проигрывает в скорости методу штрафных функций, но не связан с образованием «оврагов» целевой функции.

Алгоритм метода прямого поиска с возвратом предусматривает проверку выполнения ограничений (5.1) в начальной точке и после каждого изменения значений  $x_1, x_2, \dots, x_n$ . В случае невыполнения некоторых из них согласно (5.16) формируется функция  $G(x_1, x_2, \dots, x_n)$  и значения  $x_1, x_2, \dots, x_n$  изменяются в соответствии с соотношением (5.17) до тех пор, пока не будет обеспечено выполнение всех ограничений (5.1).

**Метод возможных направлений.** *Определения:* а)  $\Omega_0$  – конус допустимых направлений поиска  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  при условиях  $g_j(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq 0, j = 1, 2, \dots, m$  – все направления в окрестности текущей точки, не приводящие к выходу за область  $D$ ;

б)  $\Omega_1$  – конус подходящих направлений – все направления, вдоль которых функция  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  убывает в окрестности текущей точки;

в)  $\Omega_0 \cap \Omega_1$  – конус возможных направлений – пересечение конусов допустимых и подходящих направлений (все направления, вдоль которых функция  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  убывает при выполнении ограничений).

Для любой точки  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , лежащей на поверхности ограничений, в центре конуса  $\Omega_1$  находится вектор  $[-\text{grad } f(x_1, x_2, \dots, x_n)]$ , в центре конуса  $\Omega_0$  – вектор  $\text{grad } G(x_1, x_2, \dots, x_n)$  [функция  $G(x_1, x_2, \dots, x_n)$  формируется согласно (5.16)]. Центру конуса возможных направлений будет соответствовать векторная сумма  $[-\text{grad } f(x_1, x_2, \dots, x_n)]$  и  $\text{grad } G(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , т. е. направление:

$$P_i(x_1, \dots, x_n) = -\frac{\frac{\partial f(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_i}}{\sqrt{\sum_{j=1}^n \left[ \frac{\partial f(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_j} \right]^2}} + \frac{\frac{\partial G(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_i}}{\sqrt{\sum_{j=1}^n \left[ \frac{\partial G(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_j} \right]^2}}, \quad i=1, \dots, n. \quad (5.18)$$

В точке условного минимума функции  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  (рис. 5.26), конусы допустимых и подходящих направлений не пересекаются, т. е.  $\Omega_0 \cap \Omega_1 = \emptyset$ : векторы  $[-\text{grad } f(x_1, x_2, \dots, x_n)]$  и  $\text{grad } G(x_1, x_2, \dots, x_n)$  лежат на одной прямой и направлены в противоположные стороны.

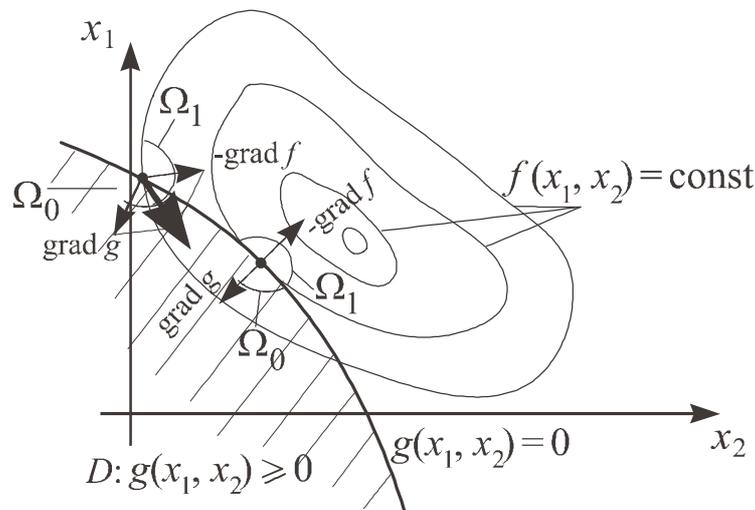


Рис. 5.26. Иллюстрация к методу возможных направлений

Алгоритм поиска условного минимума функции  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  методом возможных направлений сводится к следующему: из начальной точки внутри области  $D$  осуществляется поиск  $\min f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  любым методом безусловной оптимизации; при выходе за пределы области  $D$  поиск с предыдущей точки ведется в направлении, определяемом формулой (5.18); дробление шага поиска осуществляется, когда движение в центре конуса возможных направлений приводит к возрастанию целевой функции, либо когда первый же шаг в этом направлении приводит к нарушению ограничений; окончания поиска – при выполнении неравенства  $h < \varepsilon$ .

Величина шага поиска в определяемом направлении должна быть постоянной (равной  $h$ ), т. е. значения переменных  $x_1, x_2, \dots, x_n$  следует изменять в соответствии с выражением (5.18), иначе возможны ситуации, когда величина шага поиска  $h$  значительна, а движения в конусе возможных направлений почти нет:

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + h P_i(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) / \sqrt{\sum_{j=1}^n [P_j(x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})]^2}; \quad i = 1, \dots, n;$$

$$k = 0, 1, \dots \quad (5.19)$$

Метод возможных направлений чувствителен к выбору начальной точки поиска – за пределами области допустимых значений параметров  $x_1, x_2, \dots, x_n$  возможные направления отсутствуют и алгоритм метода неработоспособен.

Метод случайных направлений и метод сеток, используемые для решения задач на условный экстремум, почти полностью подобен методам безусловной оптимизации. При использовании первого к числу неперспективных дополнительно относятся все направления из текущей точки, которые приводят к нарушению хотя бы одного ограничения  $g_j(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq 0, \quad j \in (1, 2, \dots, m)$ , а при использовании второго значение целевой функции вычисляется только в тех точках  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , для которых выполняются все ограничения.

Методика поиска экстремума функции многих переменных при наличии связей состоит в том, чтобы найти вектор  $X^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ , доставляющий минимум функции  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  при условиях (5.2), т. е.  $h_k(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, p$ . При решении подобных задач связи  $h_k(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \quad k = 1, \dots, p$  заменяются ограничениями (рис. 5.27) и задача решается методом штрафных функций, прямого

поиска с возвратом или возможных направлений. Чем меньше значения  $\delta_k$ , тем ближе решение новой задачи к исходной, но сложнее поиск. Обычно задают начальные значения  $\delta_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, p$  (не слишком маленькие), находят решение новой задачи, а затем постепенно уменьшают  $\delta_k$ , пока они не станут меньше заданной точности. Так же поступают со связями в случае решения задачи условной оптимизации при наличии и ограничений, и связей.

При решении задач на условный экстремум производится замена связей ограничениями:

$$\begin{aligned} h_k(x_1, \dots, x_n) + \delta_k &\geq 0; \\ h_k(x_1, \dots, x_n) - \delta_k &\leq 0; \\ k &= 1, \dots, p. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Для нахождения начальной точки поиска, удовлетворяющей неравенствам (5.20), рекомендуется найти значения  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , доставляющие минимум функции  $\sum_{k=1}^p [h_k(x_1, x_2, \dots, x_n)]^2$ .

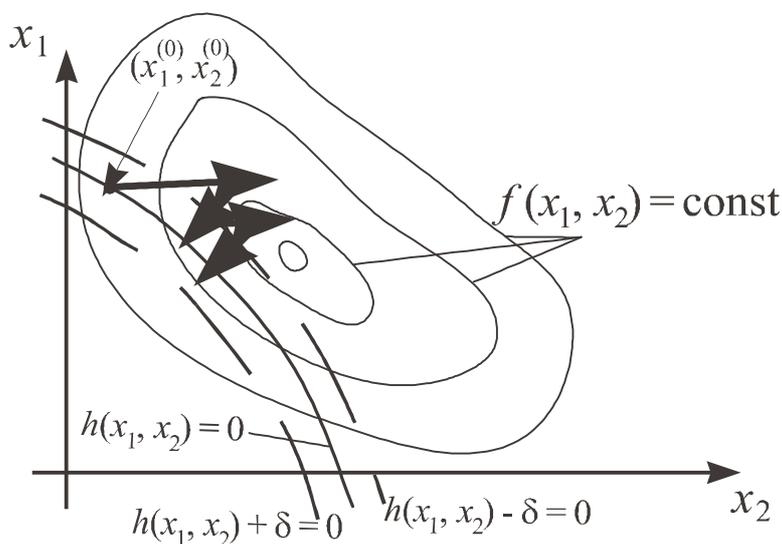


Рис. 5.27. Поиск  $\min f(x_1, x_2)$  при условии  $h(x_1, x_2) = 0$

В металлургическом производстве часто решаются две основные задачи оптимизации:

- оптимизация ТП или отдельных операций;
- оптимизация составов и свойств многокомпонентных материалов (сплавов, смесей, компонентов шихты и т. д.).

Для решения этих задач по существу используются вся номенклатура методов оптимизации, в частности:

- однофакторная оптимизация (метод поочередного изменения параметров, метод Гаусса–Зейделя);
- методы многофакторного эксперимента.

Кроме того, используют методы параметрической оптимизации, методы математического программирования (линейное программирование, в том числе симплекс-метод, динамическое программирование), методы статистической оптимизации (теория игр, планирование эксперимента).

Большинство задач принятия решений может быть сформулировано в терминах теории математического программирования, т. е. в виде набора критериев качества и ограничений.

Как правило, при оптимизации целесообразно изменять не все внутренние параметры, а только те, которые оказывают наиболее существенное влияние на выходные параметры. Выбор контролируемых параметров осуществляется либо по результатам анализа чувствительности, либо в интерактивном режиме по запросу проектировщика.

Для нахождения оптимальных решений необходимо знать математическую модель объекта проектирования, задающую зависимость выходных параметров  $Y$  от контролируемых параметров  $X$ , адекватно описывающую работу объекта проектирования.

Задача оптимизации не может быть сформулирована в отсутствие математической модели объекта проектирования, в то время как тип математической модели во многом определяет целесообразность и целесообразность применения того или иного метода.

На каждом этапе проектирования конструкции или технологии в начале работ решения должны приниматься в условиях неопределенности. Чаще всего это относится к построению или выбору варианта структуры объекта проектирования в рамках блочно-иерархического подхода, т. е. к задачам структурной оптимизации.

Выбор структурного варианта в значительной степени снимает неопределенность, что позволяет построить математическую модель и осуществить на ее основе параметрическую оптимизацию, т. е. выбор наилучшего набора значений контролируемых параметров (например, значений параметров активных элементов, температур, расходов, и др.), при которых выполняются ограничения (технические требования технических условий) и достигаются их предельные значения (максимум или минимум), критерии качества объекта испыта-

ний (наиболее важные с точки зрения проектировщика, принципиальные и конструктивные выходные параметры объекта проектирования, по которым оценивается его качество), например, частотные характеристики, коэффициент передачи, потребляемая мощность и выходная мощность, габаритные размеры, длина соединительных проводников, перегрев, температура и др. Если параметрической оптимизации достаточно при небольших затратах времени (простые устройства, использование упрощенных математических моделей, отсутствие жестких требований к точности результатов и др.), может быть выполнена некоторая сортировка различных структур для построения проектируемого объекта, т. е. структурная оптимизация устройства [22, 65].

# Глава 6. ОСНОВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ

## 6.1. Метод конечных элементов

В настоящее время метод конечных элементов (МКЭ) является одним из наиболее популярных методов решения краевых задач в САПР. В математическом плане метод относится к группе вариационно-разностных. Строгое доказательство таких важных свойств, как устойчивость, сходимостъ и точность метода осуществляется в соответствующих разделах математики и часто является сложной задачей.

С точки зрения математики МКЭ является численным методом решения дифференциальных уравнений, найденных в физике и технике. Дифференциальные уравнения используются для математического описания различных процессов, происходящих в сплошных средах, например, теплопроводности, распределения электромагнитных и акустических полей, движений жидкости и плазмы, перемещений и сил деформируемых тел и многих др.

Область применения МКЭ достаточно широка: авиация, автомобилестроение, судостроение, подвижной состав железных дорог, стальные и железобетонные мосты; каркасы зданий; исследование влияния землетрясений на плотины; механика горных пород; механика пластичности и разрушения конструкционных материалов; динамика обводненных конструкций: композиционные материалы; вязкие, дозвуковые и сверхзвуковые течения; звуковое расположение; акустические системы; электромагнитные поля; магнитные системы; газоплазменная динамика; течения в ядерных реакторах; движение ледников; тектонические движения плит; потоки поверхностных и подземных вод; проектирование объектов хранения нефти и газа; биомеханика; распространение загрязнений в морских заливах; поверхностные волны; самовозгорание.

К основным достоинствам МКЭ можно отнести доступность и простоту ее понимания и применимость метода для задач с произвольной формой области решения, возможность создания высококачественных универсальных компьютерных программ на основе метода [7, 65].

Наиболее распространенными особенностями МКЭ являются следующие:

1) физическая область задачи разбита на подобласти или конечные элементы (рис. 6.1);

2) зависимая переменная (одна или несколько) аппроксимируется функцией специального вида на каждом конечном элементе и, следовательно, на всей площади. Параметры этих приближений впоследствии становятся неизвестными параметрами задачи. В задачах структурной аппроксимационной механики поле перемещений точек конечного элемента или сил в них подчинено, а неизвестными параметрами являются узловые перемещения или узловые силы;

3) подстановка приближений в определяющие уравнения дает систему многих уравнений с неизвестными параметрами. Решая эти уравнения, определяют значения этих параметров и, соответственно, получают приближенное решение задачи.

Для двумерных областей достаточно часто применяются элементы в виде треугольников и четырехугольников. Кроме того, элементы могут иметь как прямые, так и изогнутые границы, что позволяет аппроксимировать границу любой формы с достаточной степенью точности.

Для трехмерных областей наиболее часто используются элементы в виде тетраэдра и параллелепипеда, которые также могут иметь прямолинейные и криволинейные границы.

При использовании МКЭ в виде метода перемещений в пределах конечного элемента строятся аппроксимирующие функции, формирующие кинематически приемлемые поля перемещений в пределах всей исследуемой области. Узловые смещения определяются на основе вариационного принципа Лагранжа, согласно которому из всех кинематически допустимых полей смещения реальным является поле смещения, удовлетворяющее условиям равновесия.

Вариационное уравнение Лагранжа имеет вид:

$$\delta \mathcal{E} = \delta(\Pi - A) = 0, \quad (6.1)$$

где  $\delta \mathcal{E}$  – полная потенциальная энергия упругой системы, которая складывается из потенциальной энергии деформации  $\Pi$  и потенциальной энергии внешних сил  $A$ ;  $\delta$  – знак вариации – изменения функции при бесконечно малом изменении одного из аргументов.

Таким образом, для получения разрешающих уравнений МКЭ, необходимо иметь уравнение полной потенциальной энергии рассматриваемой упругой системы.

Общая потенциальная энергия системы определяется на основе известных соотношений теории упругости. Под действием объемных

и поверхностных внешних сил отдельные точки конструкции получают перемещения, при которых деформируются несущие элементы и в них возникают напряжения.

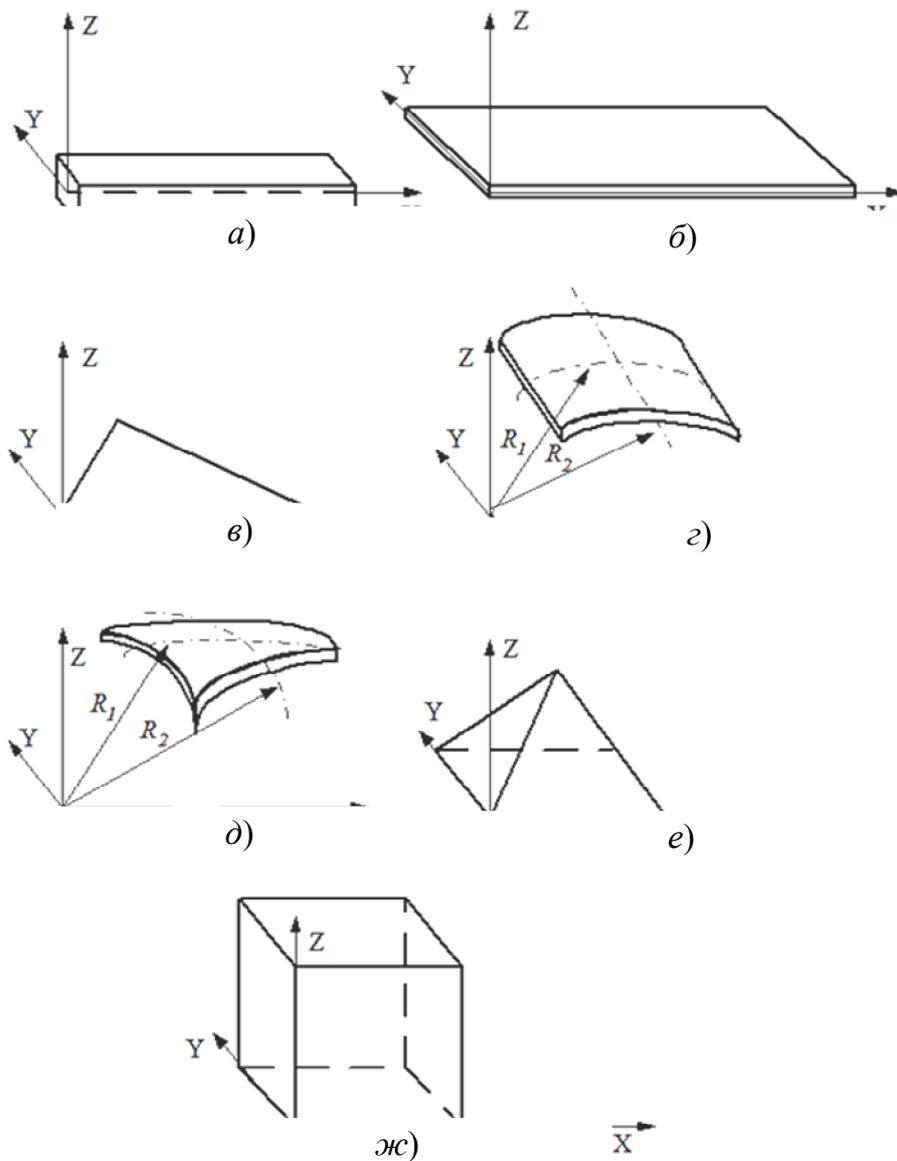


Рис. 6.1. Типы конечных элементов:  
*a* – стержень; *б* – прямоугольная пластина;  
*в* – треугольная пластина; *г* – четырехугольный элемент оболочки;  
*д* – треугольный элемент оболочки; *е* – тетраэдр;  
*ж* – параллелепипед

Перемещения, деформации, напряжения неодинаковы в различных точках конструкции и являются функциями координат. Для удоб-

ства расчетов указанные величины, включая нагрузки, рассматриваются в проекциях на оси координат [4].

Введем следующие обозначения:

а) матрица – столбец объемных сил:

$$\bar{G} = \begin{vmatrix} G_x \\ G_y \\ G_z \end{vmatrix}, \quad (6.2)$$

где  $G_x, G_y, G_z$  – проекции объемных сил на соответствующие декартовые оси координат, в которых располагается рассматриваемая конструкция;

б) матрица – столбец поверхностных сил:

$$\bar{Q} = \begin{vmatrix} Q_x \\ Q_y \\ Q_z \end{vmatrix}, \quad (6.3)$$

где  $Q_x, Q_y, Q_z$  – аналогично предыдущей проекции поверхностных сил;

в) матрица – столбец перемещений:

$$\bar{U} = \begin{vmatrix} u(x, y, z) \\ v(x, y, z) \\ w(x, y, z) \end{vmatrix}, \quad (6.4)$$

где  $u(x, y, z), v(x, y, z), w(x, y, z)$  – проекции перемещений точек на оси координат  $X, Y, Z$ . Эти проекции являются функциями, аргументами которых служат координаты  $x, y$  и  $z$ ;

г) матрица – столбец деформаций:

$$\bar{\xi} = \begin{vmatrix} \xi_x(x, y, z) \\ \xi_y(x, y, z) \\ \xi_z(x, y, z) \\ \gamma_{xy}(x, y, z) \\ \gamma_{yz}(x, y, z) \\ \gamma_{zx}(x, y, z) \end{vmatrix}, \quad (6.5)$$

где  $\xi_x(x, y, z), \xi_y(x, y, z), \xi_z(x, y, z)$  – проекции линейных деформаций, а  $\gamma_{xy}(x, y, z), \gamma_{yz}(x, y, z), \gamma_{zx}(x, y, z)$  – проекции угловых деформаций;

д) матрица – столбец напряжений:

$$\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x(x, y, z) \\ \sigma_y(x, y, z) \\ \sigma_z(x, y, z) \\ \tau_{xy}(x, y, z) \\ \tau_{yz}(x, y, z) \\ \tau_{zx}(x, y, z) \end{pmatrix}, \quad (6.6)$$

где  $\sigma_x(x, y, z), \sigma_y(x, y, z), \sigma_z(x, y, z)$  – проекции нормальных напряжений, а  $\tau_{xy}(x, y, z), \tau_{yz}(x, y, z), \tau_{zx}(x, y, z)$  – касательных.

Между деформациями и перемещениями существует дифференциальная зависимость, выражаемая уравнениями Коши:

$$\bar{\xi} = [d]\bar{U}, \quad (6.7)$$

где  $[d]$  – дифференциальный матричный оператор вида

$$[d] = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}.$$

В результате матричной операции  $[d]\bar{U}$  получается матрица, элементами которой являются частные производные.

Между напряжениями и деформациями также имеется линейная зависимость (при работе материала конструкции в пределах закона Гука). В матричной форме эта зависимость имеет вид:

$$\bar{\sigma} = [E_{\xi}] \bar{\xi}, \quad (6.8)$$

где  $[E_{\xi}]$  – матрица упругости вида;

$$[E_{\xi}] = \frac{E}{(1+\nu) \cdot (1-2\nu)} \begin{vmatrix} (1-\nu) & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & (1-\nu) & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & \nu & (1-\nu) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1-2\nu)/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (1-2\nu)/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (1-2\nu)/2 \end{vmatrix},$$

где  $E$  – модуль упругости материала;  $\nu$  – коэффициент Пуассона.

Потенциальная энергия деформации, численно равная работе внутренних сил, определяется из следующих выражений:

$$\Pi = \frac{1}{2} \int_V \bar{\sigma}^T \bar{\xi} dv = \frac{1}{2} \int_V ([E_{\xi}] \bar{\xi})^T \bar{\xi} dv = \frac{1}{2} \int_V \bar{\xi}^T [E_{\xi}] \bar{\xi} dv, \quad (6.9)$$

где  $T$  – знак транспонирования – замены столбцов матрицы строками путем их поворота против часовой стрелки:

$$\Pi = \frac{1}{2} \int_V ([d]\bar{U})^T [E_{\xi}] ([d]\bar{U}) dv. \quad (6.10)$$

В выражениях (6.7)–(6.9) интеграл берется по объему  $V$ .

Потенциальная энергия внешних сил, численно равная работе этих сил на перемещениях  $U(x, y, z)$ :

$$A = \frac{1}{2} \left( \int_V G^T \bar{U} dv + \int_S Q^T \bar{U} ds \right). \quad (6.11)$$

В выражении второй интеграл берется по поверхности тела  $S$ .

Полная потенциальная энергия всей конструкции равна сумме работ внешних и внутренних сил:

$$\Theta = \Pi - A = \frac{1}{2} \left\{ \int_V ([d]\bar{U})^T [E_{\xi}] ([d]\bar{U}) dv - \left( \int_V G^T \bar{U} dv + \int_S Q^T \bar{U} ds \right) \right\}. \quad (6.12)$$

При определении полной потенциальной энергии конечного элемента задаются законом изменения перемещений  $F_{ik}(x, y, z)$ , позволяющим выразить перемещения любой точки через перемещения узлов и функцию координат. В матричной форме для  $i$ -го конечного элемента.

$$\bar{U}_i = [F_j(x, y, z)]_i \bar{q}_i, \quad (6.13)$$

где  $\bar{q}_i^T = |q_1 \quad q_2 \quad q_3 \quad \dots \quad q_j \dots \quad q_n|$  – транспонированная матрица – столбец узловых перемещений  $i$ -го конечного элемента;  $j$  – номер узлового перемещения;  $n$  – количество степеней свободы (узловых перемещений) конечного элемента;

$$[F_j(x, y, z)]_i = \left\| \begin{array}{ccccccc} Y_{x1} & 0 & 0 & \dots & Y_{xn} & 0 & 0 \\ 0 & Y_{y1} & 0 & \dots & 0 & Y_{yn} & 0 \\ 0 & 0 & Y_{z1} & \dots & 0 & 0 & Y_{zn} \end{array} \right\| - \text{матрица функций форм}$$

конечного элемента.

Обычно функции формы принимают кусочно-полиномиальными, отличными от нуля в окрестности только одного узла.

С учетом выражения (6.13) полная потенциальная энергия конечного элемента:

$$\begin{aligned} \mathfrak{E} = & \frac{1}{2} \left[ \int_{V_i} ([d][F_j(x, y, z)]_i \bar{q}_i)^T [E_\xi][d][F_j(x, y, z)]_i \bar{q}_i dv - \right. \\ & \left. - \left( \int_{V_i} G^T [F_j(x, y, z)]_i \bar{q}_i dv + \int_{S_i} Q^T [F_j(x, y, z)]_i \bar{q}_i ds \right) \right]. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Учитывая, что  $\bar{q}_i$  не зависит от координат, этот вектор можно вынести за знак интеграла. Выражение (6.14) при этом преобразуется к виду

$$\mathfrak{E}_i = \frac{1}{2} (\bar{q}_i^T [K]_i \bar{q}_i - \bar{P}_i \bar{q}_i), \quad (6.15)$$

где  $[K]_i = \int_{V_i} ([d][F_j(x, y, z)]_i)^T [E_\xi][d][F_j(x, y, z)]_i dv$  – матрица жесткости  $i$ -го конечного элемента (КЭ). Она определяет жесткостные свой-

ства КЭ;  $\bar{P}_i = \int_{V_i} G^T [F_j(x, y, z)]_i dv + \int_{S_i} Q^T [F_j(x, y, z)] ds$  – грузовой вектор  $i$ -го конечного элемента.

Полная потенциальная энергия рассматриваемой системы (конструкции), состоящей из  $N$  конечных элементов, равна сумме энергий конечных элементов:

$$\Theta = \sum_{i=1}^N \Theta_i = \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^N \bar{q}_i^T [K]_i \bar{q}_i - \sum_{i=1}^N \bar{P}_i \bar{q}_i \right). \quad (6.16)$$

Продифференцировав полную энергию  $\Theta$  по узловым перемещениям  $q_j$  и используя принцип Лагранжа, получим:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial q_j} = \sum_{i=1}^N [K]_i \bar{q}_i - \sum_{i=1}^N \bar{P}_i = 0. \quad (6.17)$$

Сумма  $\sum_{i=1}^N [K]_i = [C_0]$  является общей матрицей жесткости системы в целом. Как видно из приведенного выше выражения, она получается суммированием матриц жесткости отдельных конечных элементов. Вектор-столбец  $\bar{q} = \sum_{i=1}^N \bar{q}_i$  составлен из векторов, элементами которых являются неизвестные узловые перемещения.  $\sum_{i=1}^N \bar{P}_i = \bar{P}$  – грузовой вектор, элементами которого являются значения внешней нагрузки, приведенной к узловой. Как и общая матрица жесткости  $[C_0]$ , грузовой вектор  $\bar{P}$  получается суммированием грузовых векторов отдельных конечных элементов. С учетом принятых выше обозначений, можно записать в виде:

$$[C_0] \bar{q} - \bar{P} = 0. \quad (6.18)$$

Уравнение (6.18) является основным разрешающим уравнением МКЭ. С физической точки зрения оно описывает равновесие узлов системы, а с математической – систему обыкновенных алгебраических уравнений. В приведенном виде (6.18) представляет собой тождество, так как не учтены условия закрепления конструкции. Чтобы получить единственное решение отличное от нуля, необходимо учесть связи, наложенные на систему. Эта процедура выполняется

вычеркиванием строк и столбцов в матрицах уравнения (6.18), которые соответствуют перемещениям, запрещенным связями. После этого матрицы «сжимаются» и производится решение уравнения (6.18).

Решение системы алгебраических уравнений производится методами линейной алгебры. Наиболее распространенным является метод Гаусса [4, 65].

После решения уравнения (6.18) и определения ранее неизвестных перемещений производится формирование векторов узловых перемещений для каждого конечного элемента. При выполнении этой операции учитываются связи, наложенные на рассматриваемую систему. Далее определяются узловые усилия:

$$\bar{R}_i = [K]_i \bar{q}_i - \bar{P}_i. \quad (6.19)$$

По найденным узловым усилиям и приложенным внешним нагрузкам строятся эпюры внутренних усилий (изгибающих и крутящих моментов, нормальных и поперечных усилий). Далее в наиболее опасных сечениях по формулам сопромата находятся напряжения.

Следует отметить, что изложенное выше отражает сущность МКЭ в самой общей форме.

**Приведем пример использования МКЭ** для расчета одномерного температурного поля в однородном стержне. Пусть имеется стержень длиной  $L$  и площадью поперечного сечения  $S$  (рис. 6.2). Один конец стержня жестко закреплен, и к нему подводится тепловой поток  $q$  заданной интенсивности. На свободном конце стержня происходит конвективный теплообмен с внешней средой. Известны коэффициент теплообмена  $\alpha$  и температура окружающей среды  $T$ . Вдоль боковой поверхности стержень теплоизолирован.

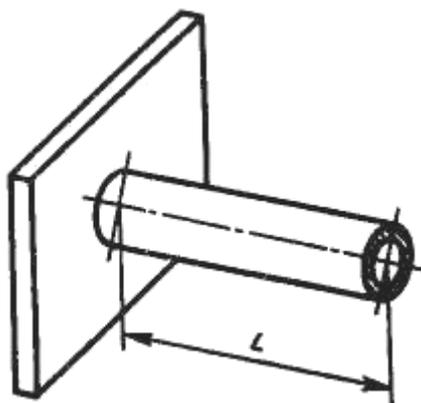


Рис. 6.2. Однородный стержень, находящийся под воздействием теплового потока

Температурное поле в стержне описывается уравнением теплопроводности, которое в одномерном приближении имеет вид:

$$\lambda_x \frac{d^2 T}{dx^2} = 0. \quad (6.20)$$

Краевые условия определяются уравнениями:

$$\lambda_x \frac{dT}{dx} + q = 0 \text{ при } x = 0; \quad (6.21)$$

$$\lambda_x \frac{dT}{dx} + \alpha(T - T_*) = 0 \text{ при } x = L. \quad (6.22)$$

Искомое температурное поле является непрерывной функцией координаты  $x$  (рис. 6.3, а).

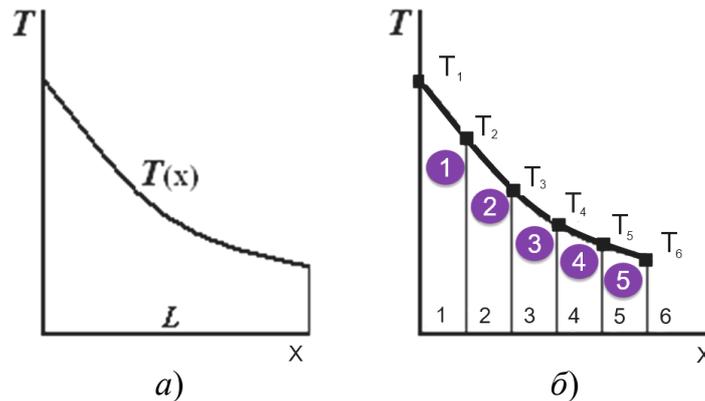


Рис. 6.3. Расчет одномерного температурного поля в однородном стержне методом МКЭ

В МКЭ стержень разбивается произвольным образом на конечные элементы, которые в данном случае являются отрезками неравной длины. На каждом элементе непрерывная функция  $T(x)$  аппроксимируется некоторой линейной зависимостью, как показано на рис. 6.3, б (в скобках указаны номера элементов). Аппроксимирующая кусочно-линейная функция определяется через узловые значения  $T_1-T_6$ , которые в общем случае сначала неизвестны и подлежат определению в МКЭ.

**В общем случае алгоритм МКЭ состоит из четырех этапов:**

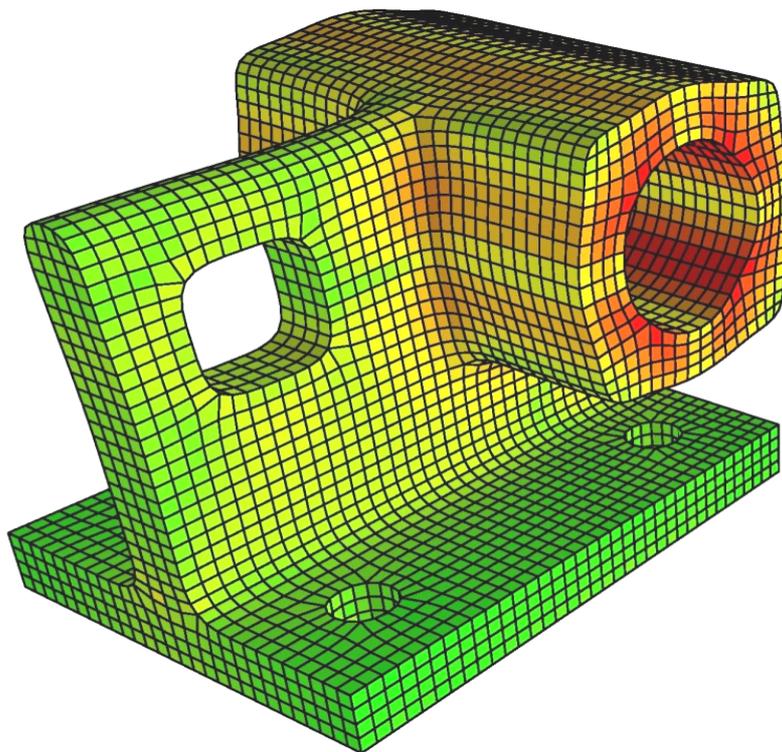
*Этап 1. Выделение конечных элементов (разбиение заданной области на конечные элементы (рис. 6.4)).*

*Этап 2. Определение аппроксимирующей функции* для каждого элемента (определение функции элемента). На данном этапе значение непрерывной функции  $\varphi^{(e)}$  в произвольной точке  $e$ -го конечного элемента аппроксимируется полиномом  $\varphi^{(e)} = A^{(e)}R + A_0$ , где  $A^{(e)}$  – вектор-строка коэффициентов полинома;  $A_0$  – свободный член;  $R = (x, y, z)$  – вектор координат в рассматриваемой точке.

Задача этапа заключается в определении неизвестного вектора  $A^{(e)}$  и свободного члена  $A_0$ . Для этого, используя условие непрерывности функции в узлах, коэффициенты полинома выражают через вектор  $\Phi^{(e)}$  узловых значений функции и координаты узлов и, проделав эквивалентные преобразования, получают:

$$\varphi^{(e)} = N^{(e)}\Phi^{(e)}, \quad (6.23)$$

где  $N^{(e)}$  – матрица-строка, элементы которой называют функциями формы конечного элемента.



*Рис. 6.4.* Пример качественного объемного разбиения сложной детали на сглаженные кубические элементы

Функции формы легко вычисляются в каждой точке конечного элемента через координаты самой точки и координаты узлов элемента.

*Этап 3. Объединение конечных элементов в ансамбль.* На этом этапе уравнения (6.23), относящиеся к отдельным элементам, объединяются в ансамбль, т. е. в систему алгебраических уравнений:

$$\varphi = N\Phi. \quad (6.24)$$

Система (6.24) является моделью искомой непрерывной функции.

*Этап 4. Определение вектора узловых значений функции.* В общем случае вектор  $\Phi$  в начале неизвестен. Его определение – наиболее сложная процедура в МКЭ.

Разработано несколько *алгоритмов вычисления вектора  $\Phi$* . Один из алгоритмов основан на минимизации функционала, связанного с физическим смыслом решаемой задачи, он состоит из четырех этапов.

Найденные значения вектора  $\Phi$  подставляют в (6.23), после чего значение функции  $\varphi$  легко вычисляется в любой точке заданной области.

Рассмотрим подробно этапы алгоритма МКЭ.

**Этап I. Выделение конечных элементов.** Разделение области на элементы является важным этапом в МКЭ. Точность результатов во многом зависит от качества разбиения. Например, разбиение на двумерные элементы, близкие по форме к равносторонним треугольникам, дает лучшие результаты, чем разбиение на удлиненные треугольные элементы. Возможность легкого изменения размеров элементов (пример, сгущения сетки локально, для повышения точности) является важным свойством МКЭ [65].

Деление области на элементы обычно начинают с ее границы, чтобы максимально приблизить форму, затем разбивают внутренние области. Площадь часто делится на элементы в несколько этапов. Во-первых, область разбивается на достаточно большие подобласти (подконструкции), на границах которых изменяются свойства материала, геометрия, приложенная нагрузка и тому подобное. Затем каждый поддомен разбивается на элементы. При этом желательно избегать резких изменений размеров конечных элементов на границах подобластей. На рис. 6.5 приведен пример разбиения двумерной области произвольной формы на треугольные конечные элементы с криволинейными границами.

Нумерация узлов элементов (глобальная нумерация узлов) – это следующая процедура этапа выбора конечных элементов. Порядок нумерации в этом случае имеет важное значение, поскольку он влияет на эффективность последующих вычислений.

Матрица коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений, к которой приводит МКЭ, является сильно разреженной матрицей ленточной структуры. Ненулевые элементы такой матрицы параллельны главной диагонали (рис. 6.6).

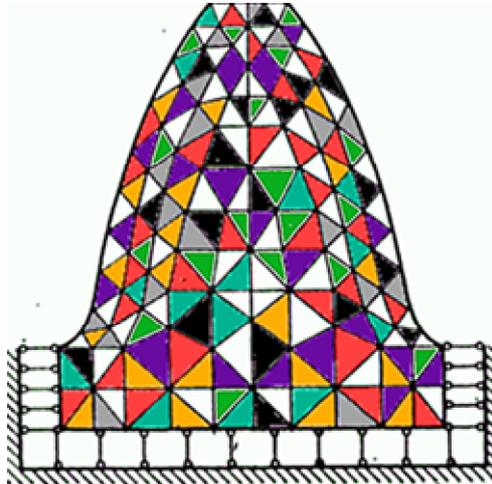


Рис. 6.5. Разбиение двухмерной области произвольной формы на треугольные конечные элементы с криволинейными границами

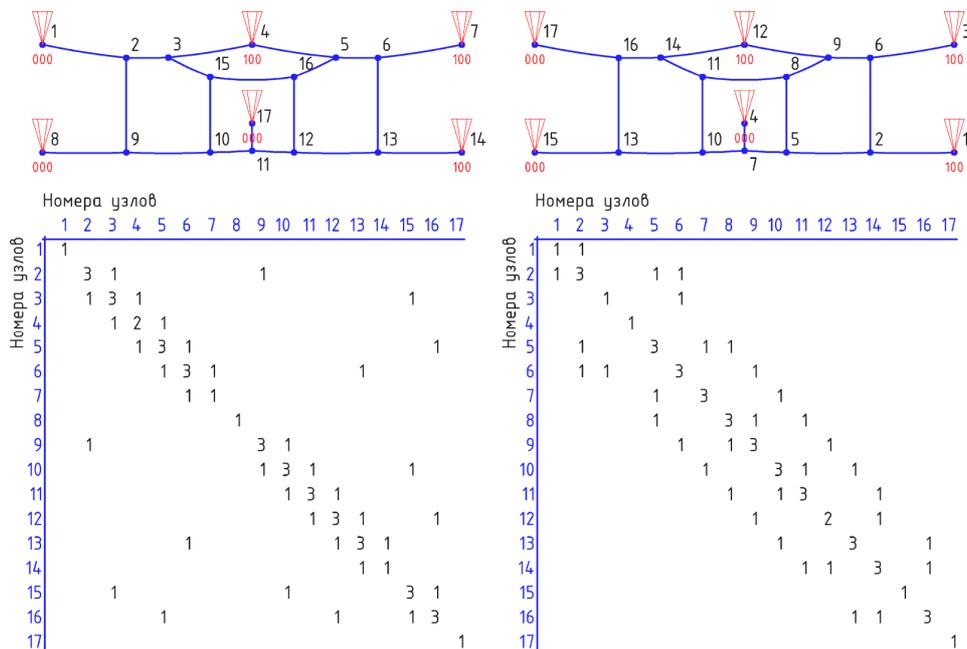


Рис. 6.6. Матрица ленточной структуры

Целое число  $L$ , представляющее наибольшую разницу между количеством ненулевых элементов в строке, называется шириной полосы. Чем меньше ширина полосы, тем меньше оперативной памяти требуется для хранения матрицы при реализации МКЭ в САПР и тем

меньше компьютерного времени тратится на решение полученной системы уравнений. Ширина полосы, в свою очередь, зависит от количества степеней свободы узлов и способа их нумерации. Количество степеней свободы — это количество неизвестных функций, найденных в каждом узле. Например, для двумерных гидравлических задач в каждом узле определяются три величины: составляющие давления и скорости по осям  $X$  и  $Y$ .

При нумерации узлов предпочтителен метод, обеспечивающий минимальную разницу между номерами узлов в каждом отдельном элементе. Если максимальную разность между номерами узлов для отдельного элемента обозначить  $N$ , а число степеней свободы —  $M$ , то ширина полосы  $L = (N + 1)M$ .

В некоторых случаях уменьшение числа  $N$  может быть достигнуто последовательной нумерацией узлов при движении в направлении наименьшего размера рассматриваемой области.

На рис. 6.7 приведены два различных способа нумерации узлов произвольной области, разбитой на конечные элементы. При первом способе (рис. 6.7, а)  $N = 14$ , при втором (рис. 6.7, б)  $N = 5$ . Ширина полосы для представленных способов при одной степени свободы в узле получается равной, соответственно, 15 и 6; при двух степенях свободы — 30 и 12. Рациональная нумерация в случае на рис. 6.7, б сокращает необходимый объем оперативной памяти почти в три раза по сравнению со случаем на рис. 6.7, а.

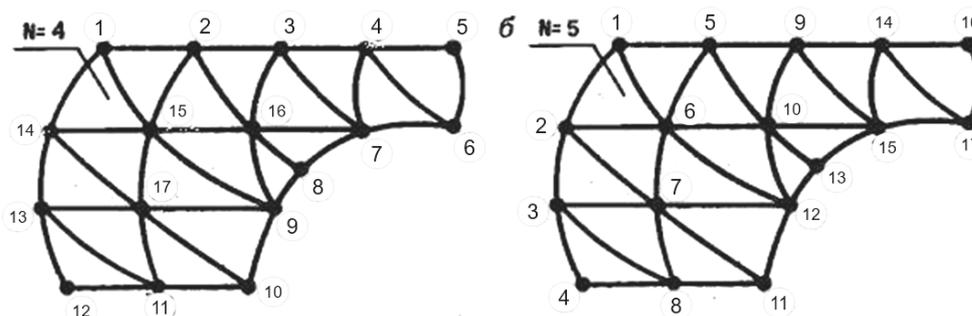


Рис. 6.7. Способы нумерации узлов при разбиении двумерной области на конечные элементы

Информация о способе разбиения поверхности на конечные элементы и нумерации узлов является исходной для всех последующих этапов алгоритмов МКЭ. При этом необходимо указать не только номер, но и координаты каждого узла и его связь с определенными

конечными элементами. Этот тип информации называется топологическим и обычно содержит в 6 раз больше чисел, чем количество узлов в системе.

При описании области, разделенной на конечные элементы, указываются: тип конечного элемента; его порядковый номер; номера узлов элементов; координаты узлов, информация о соединении элементов между собой; значение физических параметров объекта в пределах каждого конечного элемента. Практическая работа программ долгое время сдерживалась сложностью обработки исходных данных, объем которых иногда достигает нескольких сотен тысяч.

Усилия разработчиков программ МКЭ в рамках САПР были направлены на создание подсистем автоматизированной обработки топологической информации, в основе которых лежат специальные программы, так называемые препроцессоры. Препроцессоры либо включаются напрямую, либо интегрируются в программные комплексы, реализующие МКЭ; или существуют как отдельные программы.

**Этап II. Определение аппроксимирующей функции элементов.** Эту процедуру можно выполнить один раз для типичного элемента области без учета его топологического положения в ней. Полученная функция затем используется для всех других элементов поверхности того же вида. Эта функция является важным аспектом МКЭ. В результате элементы с однажды определенными функциями просто включаются в библиотеку элементов соответствующего программного пакета. Кроме того, эти элементы используются для решения различных краевых задач.

Полиномы чаще всего используются в качестве аппроксимационных функций элементов. Конечные элементы делятся на симплексные, комплексные и мультиплексные элементы в зависимости от степени многочлена. Многочлены симплексных элементов содержат константы и линейные члены, многочлены комплексных элементов – константы, линейные члены и члены высших степеней. Сложные элементы обычно имеют дополнительные внутренние узлы в дополнение к граничным элементам. Многочлены мультиплексных элементов также содержат члены более высоких степеней. На элементы мультиплекса накладывается дополнительное условие: их границы должны быть параллельны осям координат.

*Одномерный симплекс-элемент* представляет собой отрезок (рис. 6.8).

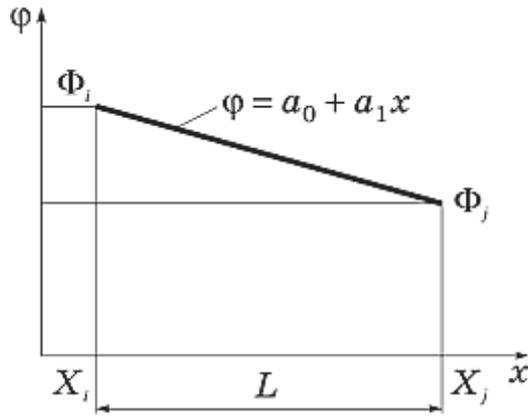


Рис. 6.8. Одномерный симплекс-элемент

При определении функции этого элемента для простоты будем считать, что известны узловые значения искомой непрерывной функции, определенные на концах отрезка. По длине отрезка значение функции  $\varphi$  аппроксимируется полиномом

$$\varphi = a_1 + a_2x. \quad (6.25)$$

Коэффициенты  $a_1$  и  $a_2$  определяются через узловые значения функции  $\Phi_i$  и  $\Phi_j$  в соответствии с условием непрерывности:

$$\begin{aligned} \varphi &= \Phi_i \text{ при } x = X_i; \\ \varphi &= \Phi_j \text{ при } x = X_j. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Подставив (6.25) в (6.26), получим систему уравнений:

$$\begin{aligned} \Phi_i &= a_1 + a_2X_i; \\ \Phi_j &= a_1 + a_2X_j, \end{aligned}$$

решая которую определим  $a_1$  и  $a_2$ :

$$\begin{aligned} a_1 &= \Phi_i - a_2X_i; & L &= X_j - X_i; \\ \Phi_j &= \Phi_i - a_2X_i - a_2X_j; & a_2 &= \frac{\Phi_j - \Phi_i}{X_j - X_i} = \frac{\Phi_j - \Phi_i}{L + X_i - X_i} = \frac{\Phi_j - \Phi_i}{L}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_1 &= \Phi_i - \left( \frac{\Phi_j - \Phi_i}{L} \right) X_i = \frac{\Phi_i L - (\Phi_j - \Phi_i) X_i}{L} = \\ &= \frac{\Phi_i (X_j - X_i) - (\Phi_j - \Phi_i) X_i}{L} = \frac{\Phi_i X_j - \Phi_j X_i}{L}, \end{aligned}$$

$$\text{т. е. } a_1 = \frac{(\Phi_i X_j - \Phi_j X_i)}{L}; a_2 = \frac{(\Phi_j - \Phi_i)}{L}.$$

Подставив вычисленные значения коэффициентов аппроксимирующего полинома в (6.25), получим:

$$\varphi = \frac{\Phi_i X_j - \Phi_j X_i}{L} + \left( \frac{\Phi_j - \Phi_i}{L} \right) x.$$

Проведем эквивалентные преобразования правой части:

$$\begin{aligned} \varphi &= \frac{\Phi_i X_j - \Phi_j X_i}{L} + \left( \frac{\Phi_j - \Phi_i}{L} \right) x = \frac{\Phi_i X_j - \Phi_j X_i + \Phi_j x - \Phi_i x}{L} = \\ &= \Phi_i \frac{X_j - x}{L} + \Phi_j \frac{x - X_i}{L}. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Члены полученного уравнения, заключенные в скобки, являются функциями формы одномерного симплекс-элемента:

$$\begin{aligned} N_i &= \frac{(X_j - x)}{L}; \\ N_j &= \frac{(x - X_i)}{L}. \end{aligned} \quad (6.28)$$

С учетом обозначений (6.26) уравнение (6.27) принимает вид:

$$\varphi = N_i \Phi_i + N_j \Phi_j, \quad (6.29)$$

или в матричной форме:

$$\varphi = N\Phi, \quad (6.30)$$

где  $N = [N_i, N_j]$  – матрица-строка;  $\Phi = \begin{bmatrix} \Phi_i \\ \Phi_j \end{bmatrix}$  – вектор-столбец.

Функция формы обладает следующим свойством: функция формы с номером  $i$  равна 1 в узле с соответствующим номером и равна 0 во всех других узлах.

**Этап III. Объединение конечных элементов в ансамбль.** Основу этого этапа составляет замена произвольно назначенных выше номеров узлов  $i, j, k$  на номера, присвоенные узлам в процессе разбиения рассматриваемой области. Эта процедура приводит к системе

линейных алгебраических уравнений, позволяющей при известных узловых значениях искомой функции получить значение этой функции в любой точке области.

Рассмотрим процедуру составления ансамбля конечных элементов для сформулированной выше задачи нахождения поля температур в стержне (рис. 6.7, *a*). Кусочно-элементная модель области приведена на рис. 6.7, *б*, а функция отдельного элемента определяется уравнением (6.28).

Можно написать следующее соответствие между произвольными номерами  $i, j$ , фигурирующими в уравнении (6.30), и глобальными номерами узлов рассматриваемой дискретной модели

$$- \text{элемента 1: } i = 1, j = 2; \quad (6.31a);$$

$$- \text{элемента 2: } i = 2, j = 3; \quad (6.31б);$$

$$- \text{элемента 3: } i = 3, j = 4; \quad (6.31в);$$

$$- \text{элемента 4: } i = 4, j = 5; \quad (6.31г);$$

$$- \text{элемента 5: } i = 5, j = 6. \quad (6.31д).$$

Подставив значения номеров узлов, получим:

$$\begin{aligned} \varphi^{(1)} &= N_1^{(1)}T_1 + N_2^{(1)}T_2; \\ \varphi^{(2)} &= N_2^{(2)}T_2 + N_3^{(2)}T_3; \\ \varphi^{(3)} &= N_3^{(3)}T_3 + N_4^{(3)}T_4; \\ \varphi^{(4)} &= N_4^{(4)}T_4 + N_5^{(4)}T_5; \\ \varphi^{(5)} &= N_5^{(5)}T_5 + N_6^{(5)}T_6, \end{aligned} \quad (6.32)$$

где верхние индексы в скобках относятся к номеру элемента.

В выражениях для функций формы элемента (6.32) значения произвольных номеров  $i, j$  также необходимо изменить в соответствии с (6.3). Тогда значения  $N_3^{(2)}$ ,  $N_3^{(3)}$ , например, определяются по формулам:

$$N_3^{(2)} = \frac{(x - X_2)}{L^{(2)}};$$

$$N_3^{(3)} = \frac{(X_4 - x)}{L^{(3)}}.$$

Очевидно, что  $N_3^{(2)}$  и  $N_3^{(3)}$  не равны друг другу даже в случае равенства длин элементов  $L^{(2)}$  и  $L^{(3)}$ . При известных значениях узловых величин  $T_1-T_6$  уравнения (6.32) позволяют определить значение температуры в любой точке стержня.

Расширенная форма описания моделей имеет некоторые преимущества при реализации следующих этапов алгоритма МКЭ.

**Этап IV. Определение вектора узловых значений функций.** Для этой цели используется несколько методов.

*Метод, основанный на вариационной постановке задачи,* требует минимизации некоторого специально подобранного функционала, который связан с физическим смыслом задачи. Подбор функционала является нетривиальной процедурой, требующей глубоких знаний в конкретной предметной области.

Приведем пример минимизации функционала в задаче о нахождении распределения температуры в стержне (рис. 6.9).

При указанном методе минимизируется функционал:

$$F = \int_V 0,5\lambda_x \left( \frac{dT}{dx} \right)^2 dV + \int_S [qT + 0,5\alpha(T - T_*)^2] dS, \quad (6.33)$$

где  $V$  – объем тела;  $S$  – площадь границы.

В функционал  $F$  входят оба граничных условия. При минимизации функционала используется множество функций элементов дискретизированной области. Для простоты вычислений будем считать, что стержень разбит всего на два элемента (в практических случаях этого недостаточно) Тогда

$$T^{(1)} = N_1^{(1)}T_1 + N_2^{(1)}T_2; \quad T^{(2)} = N_2^{(2)}T_2 + N_3^{(2)}T_3.$$

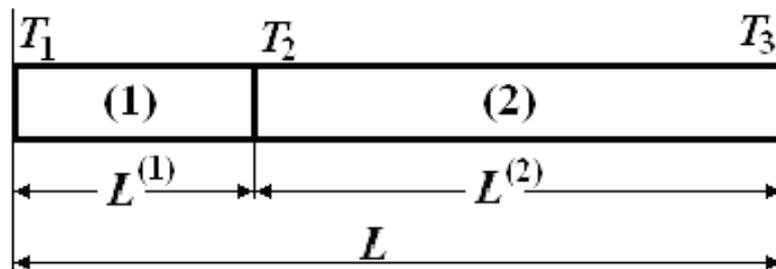


Рис. 6.9. Пример минимизации функционала при нахождении распределения температуры в стержне

Функционал (6.34) удобно представить в виде

$$F = \int_V 0,5\lambda_x \left( \frac{dT}{dx} \right)^2 dV + \int_{S_1} qT dS_1 + \int_{S_2} 0,5\alpha(T - T_*)^2 dS_2, \quad (6.34)$$

где  $S_1$  и  $S_2$  – площади сечений стержня, на которых заданы граничные условия.

Для вычисления объемного интеграла в (6.33) его необходимо разбить на два слагаемых в соответствии с принятой конечной элементной моделью:

$$\int_V 0,5\lambda_x \left( \frac{dT}{dx} \right)^2 dV = \int_{V_1} 0,5\lambda_x \left( \frac{dT^{(1)}}{dx} \right)^2 dV_1 + \int_{V_2} 0,5\lambda_x \left( \frac{dT^{(2)}}{dx} \right)^2 dV_2. \quad (6.35)$$

Производные вычисляются с учетом (6.32) и (6.26):

$$\begin{aligned} \frac{dT^{(1)}}{dx} &= \frac{(-T_1 + T_2)}{L^{(1)}}, \\ \frac{dT^{(2)}}{dx} &= \frac{(-T_2 + T_3)}{L^{(2)}}. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Подставив (6.36) в (6.35) и считая, что  $dV^{(e)} = S^{(e)} dx$ , получим:

$$\int_V 0,5\lambda_x \left( \frac{dT}{dx} \right)^2 dV = 0,5 \frac{\lambda_x^{(1)} S^{(1)}}{L^{(1)}} (-T_1 + T_2)^2 + 0,5 \frac{\lambda_x^{(2)} S^{(2)}}{L^{(2)}} (-T_2 + T_3)^2.$$

Второе и третье слагаемые в (6.33) вычисляются просто, так как подынтегральным функциям соответствуют узловые значения  $T_1$  и  $T_3$ :

$$\int_{S_1} qT dS_1 = qT_1 S_1; \quad \int_{S_2} 0,5\alpha(T - T_*)^2 dS_2 = 0,5\alpha S_2 (T_3^2 - 2T_* T_3 + T_*^2),$$

где  $S_1$  и  $S_2$  – площади поверхностей, на которых заданы  $q$  и  $\alpha$  (для рассматриваемого примера  $S_1 = S^{(1)}$  и  $S_2 = S^{(2)}$ ).

Значение функционала  $F$  вычисляется простым суммированием последних трех выражений:

$$\begin{aligned} F &= 0,5C^{(1)} (T_1^2 - 2T_1 T_2 + T_2^2) + 0,5C^{(2)} (T_2^2 - 2T_2 T_3 + T_3^2) + \\ &+ qS_1 T_1 + 0,5\alpha S_2 (T_3^2 - 2T_* T_3 + T_*^2), \end{aligned}$$

где  $C^{(1)} = S^{(1)}\lambda_x^{(1)} / L^{(1)}$  и  $C^{(2)} = S^{(2)}\lambda_x^{(2)} / L^{(2)}$ .

Для минимизации функционала  $F$  необходимо выполнение условий:

$$\begin{aligned} \partial F / \partial T_1 &= C^{(1)}T_1 + C^{(1)}T_2 + qS_1 = 0; \\ \partial F / \partial T_2 &= -C^{(1)}T_1 + [C^{(1)} + C^{(2)}]T_2 - C^{(2)}T_3 = 0; \\ \partial F / \partial T_3 &= -C^{(2)}T_2 + [C^{(2)} + \alpha S_2]T_3 - \alpha S_2 T_* = 0, \end{aligned} \quad (6.37)$$

или в матричной форме:

$$\begin{bmatrix} C^{(1)} & -C^{(1)} & 0 \\ -C^{(1)} & C^{(1)} + C^{(2)} & -C^{(2)} \\ 0 & -C^{(2)} & C^{(2)} + \alpha S_2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -qS_1 \\ 0 \\ \alpha S_2 T_* \end{bmatrix} \quad (6.38)$$

Матрица коэффициентов  $K$  в (6.38) называется *матрицей жесткости* (рис. 6.10), хотя по физическому смыслу данной задачи ее удобнее было бы назвать матрицей теплопроводности. Название матрицы  $K$  пришло из *строительной механики*, где МКЭ начал применяться раньше, чем в других областях техники.

Зная характеристики материала, из системы (6.38) можно определить узловые значения  $T_1$ – $T_3$ . Из (6.37) и (6.38) нетрудно заметить, что однотипные конечные элементы вносят в эти выражения слагаемые одного вида. Поэтому при реализации МКЭ в САПР вклад элемента определенного типа в матрицу жесткости вычисляется только один раз, а затем используется во всех необходимых случаях.

При практическом применении МКЭ следует иметь в виду проблемы, связанные с точностью расчета и временем его проведения. Чем меньше размер конечных элементов, тем точнее расчет. Если конечные элементы слишком велики, результат может быть в принципе неверным, несмотря на корректный ввод данных и корректную работу программы. К сожалению, нет возможности заранее предсказать размер конечных элементов, достаточный для получения требуемой точности расчета. В большинстве случаев характер физики процесса и сложность геометрии модели позволяют ориентироваться на примеры решения подобных задач.

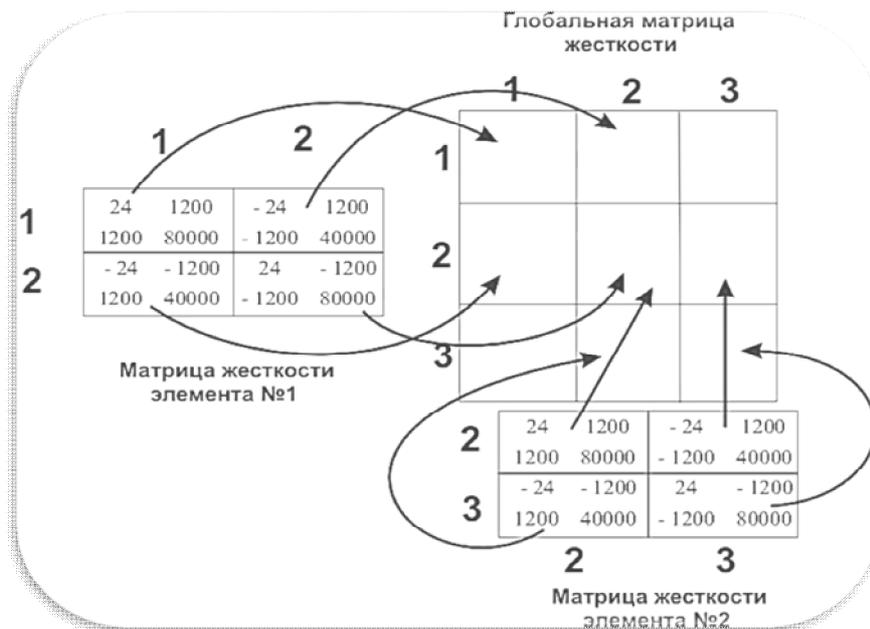


Рис. 6.10. К определению матрицы жесткости

Правильность расчета проверяют пересчетом с элементами, уменьшенными на 20–30 % по сравнению с конечноэлементным разложением в предыдущем расчете. Если результаты этих двух расчетов отличаются менее чем на требуемую погрешность расчета, можно считать, что расчет проведен корректно в пределах требуемой погрешности. Если результаты этих расчетов больше отклоняются друг от друга, конечные элементы должны быть уменьшены еще больше. Требуемое время вычислений и память компьютера пропорциональны квадрату числа узлов. Поэтому при уменьшении размера элементов (и, соответственно, увеличении количества элементов и узлов) может возникнуть ситуация, когда не хватает ресурсов компьютера или слишком долго идет обработка результатов.

Возможные способы экономии времени и памяти для расчета:

1. Использование неравномерного разбиения на конечные элементы. Элементов должно быть меньше в местах концентрации напряжений, приложения сосредоточенных сил, точечных фиксаций. В других местах детали элементов могут быть немного больше без ущерба для точности расчета.

2. Расчет части симметричной части (сегмента диска, половины или даже четверти, к примеру, отливки автомобильного поршня и т. д.). Отброшенные части детали учитываются как граничные условия.

3. Использование конечных элементов, возможно, более простого типа.

Инструментально скорость выполнения рутинных операций при подготовке моделей и запуске вычислений можно повысить, используя возможности параметризации. Перевод физических величин, таких как уровень теплового потока, температура, скорость, сила, коэффициент конвекции в параметрический вид представления позволяет (при наличии соответствующих инструментов препроцессоров и решателей) автоматизировать процессы задания параметров, их оптимизации и анализа результатов.

## 6.2. Метод конечных разностей

Вычисление конечных разностей связано с изучением свойств и приложений разностей между соседними элементами последовательности или между значениями функции в точках, расположенных на постоянном интервале в определенном пространстве. Слово «конечное» употребляется здесь в несколько устаревшем смысле «не бесконечно малое», т. е. не связанное с предельными переходами. Поскольку дифференциальное исчисление имеет дело с изучением пределов различий, а исчисление конечных разностей с самими различиями, естественно, что между этими двумя теориями существует много параллелей. Вычисления конечных разностей используются для интерполяции в математических таблицах, для суммирования числовых рядов, для вычисления интегралов и дифференцирования функций. Различия также обнаруживаются в любой ситуации, когда необходимо описать поведение объекта, на который влияют изменяющиеся условия на определенном расстоянии (во времени и в пространстве). Например, термостату требуется значительное время, чтобы отреагировать на изменение температуры, поэтому он реагирует не на текущую температуру, а на ту, что была минуту назад [65].

Метод конечных разностей (МКР) широко используется для приближенного решения задач теплопроводности и некоторых задач газовой динамики. В нем область непрерывного изменения функциональной зависимости заменяется вычислительной сеткой – дискретным набором точек (узлов).

Частные производные, включенные в дифференциальные уравнения и граничные условия, заменяются разностными соотношениями. В результате этой замены решение задачи в частных производных сводится к решению системы разностных алгебраических уравнений. Несмотря на то, что количество неизвестных в этой системе является

значительным, ее решение упрощается, а использование компьютера не вызывает проблем.

Пусть температура тела изменяется от  $a = 100 \text{ }^\circ\text{C}$  до  $b = 500 \text{ }^\circ\text{C}$ . При равномерном разбиении интервала имеем:  $X_i = a + ih$ , где  $i = 0, 1, \dots, N + 1$ , а  $h = \frac{b - a}{N + 1}$ .

Пусть некоторая функция  $f(x) = u$  является аналитической, разложим ее в ряд Тейлора в окрестностях точки  $X_i$ :

$$\begin{cases} u(x + h) = u(x_i) + hu'(x_i) + \frac{h^2}{2!}u''(x_i); \\ u(x - h) = u(x_i) - hu'(x_i) + \frac{h^2}{2!}u''(x_i). \end{cases}$$

Сложив оба выражения, получим изменение функции в узле  $i$ :  $u''(x_i) = \frac{1}{h^2}[u(x_i + h) - 2u(x_i) + u(x_i - h)]$ , а если вычтем, то получим с точностью до более высокого порядка малости:  $u'(x_i) = \frac{1}{2h}[u(x + h) - u(x - h)]$ .

Имеем метод конечных разностей для одномерной задачи (рис. 6.11).

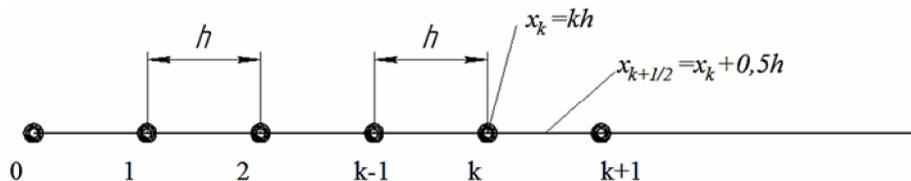


Рис. 6.11. Метод конечных разностей для одномерной задачи

Для двумерной величины получаем сетку на плоскости: с шагом  $h$  по оси  $x$  и  $\eta$  по оси  $y$ .

В точках задаются граничные условия:  $u(x = k = 0) = a$ ;  $u(x = k = N + 1) = b$ , или значения  $u_0$  и  $u_{N+1}$  определяются из граничных условий.

При использовании МКР нужно выбирать правильно шаг сетки и вид шаблона. Под шаблоном понимают множество узловых точек, значения в которых используются для аппроксимации производной в одной конкретной точке.

Примеры шаблонов для одномерных и двумерных задач приведены на рис. 6.11 и 6.12. Кругом большего диаметра обозначены уз-

лы, в которых аппроксимируется производная. Черными точками обозначены узлы, значения переменной в которых входят в вычисление искомой производной. Числа около узла – это коэффициент, с которым значение переменной узла входит в шаблон вычисления. Для одномерных шаблонов (см. рис. 6.11) показана аппроксимация производных  $\frac{\partial u}{\partial x} = u'(x)$  в точке  $K$ .

На рис. 6.12 показаны шаблоны для двумерных задач:

$$h^2 \Delta^2 U = h^2 (U_1'' + U_2'') = U_{k+i,j} + U_{k-i,j} + U_{k,j+1} + U_{k,j-1} - 4U_{k,j};$$

$$2h^2 \Delta^2 U = U_{k+i,j+1} + U_{k-i,j+1} + U_{k+1,j+1} + U_{k-1,j-1} - 4U_{k,j};$$

$$4h^2 U''_{x_1 x_2} = U_{k+i,j+1} - U_{k-i,j+1} - U_{k+1,j-1} + U_{k-1,j-1};$$

$$U(x+h) - U(x-h) = 2hU'(x_i), \quad U'(x) = \frac{U(x+h) - U(x-h)}{2h} \quad \text{-- центральная разность:}$$

$$U'(x) = \frac{U(x+h) - U(x)}{h} \quad \text{-- правое разностное отношение;}$$

$$U'(x) = \frac{U(x) - U(x-h)}{h} \quad \text{-- левое разностное отношение.}$$

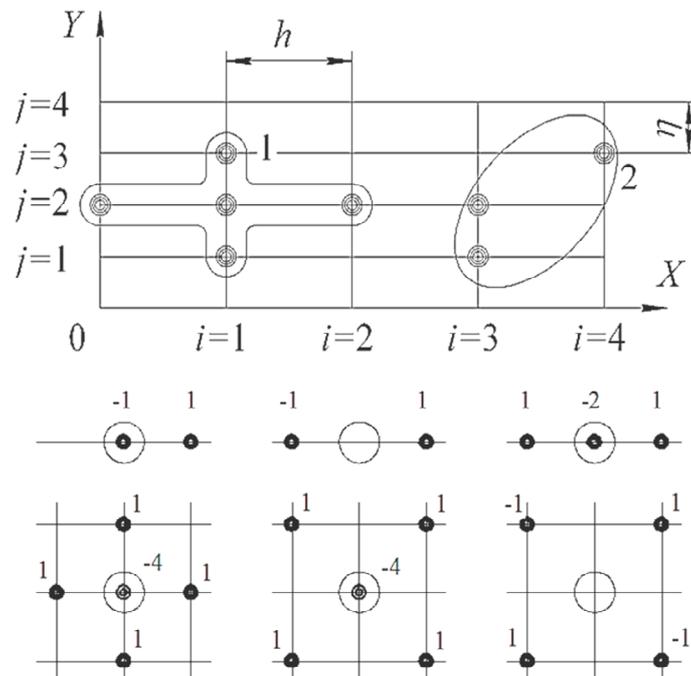


Рис. 6.12. Шаблоны метода конечных разностей для двумерных задач

К недостаткам метода следует отнести плохую аппроксимацию границ сложных областей, что не слишком принципиально для уравнений теплопроводности, но довольно существенно для уравнений гидродинамики. Кроме того, метод плохо работает в случае тонкостенных отливок, когда толщина стенок становится сравнимой с шагом сетки. То есть применять данный метод стоит лишь в условиях, пригодных для решения конкретной задачи, когда ставится вопрос точности и скорости вычислений.

### 6.3. Метод граничных элементов

При решении краевых задач приближенные модели технических объектов могут быть построены на основе интегральных уравнений. Первый шаг на пути к решению состоит в переходе от уравнений в частных производных к эквивалентным интегральным уравнениям. Во многих случаях, когда такой переход успешен, решение исходной задачи может быть получено с минимальными вычислительными затратами и высокой степенью точности. Кроме того, размерность исходной задачи понижается на 1, двумерные задачи преобразуются в одномерные.

Примером указанного подхода к решению краевых задач служат методы интегральных граничных элементов (МГЭ). Развитие МГЭ началось сравнительно недавно, причем мощным стимулом к этому послужило создание быстродействующих компьютеров. Все разновидности МГЭ используют принцип суперпозиции, поэтому область их применения ограничена классом полностью линейных или линейных относительно приращений задач. Однако к такому классу относятся многие важные для развития техники задачи, например, МГЭ успешно используются для решения задач теории упругости, механики жидкости и газов.

Все МГЭ строятся на основе общих принципов. При этом различают прямые и непрямые МГЭ.

В *прямых* МГЭ искомыми переменными краевой задачи являются величины, имеющие реальный физический смысл, например, в задачах теории упругости – усилия и смещения, возникающие в элементах конструкции.

В *непрямых* МГЭ решение исходной задачи выражается через функции плотности, которые сами по себе не имеют реального физического смысла. После того как функции плотности найдены, значения реальных физических параметров задачи могут быть получены из них путем простого интегрирования.

В любом варианте МГЭ результатом перехода от уравнений в частных производных к интегральным уравнениям в конечном счете является система уравнений, включающая значения переменных только на границе заданной области. Поэтому, в отличие от МКЭ и МКР, последующая дискретизация задачи осуществляется только на границе исследуемой области. Последнее определяет, во-первых, более высокую точность решения по сравнению с МКР и МКЭ, а во-вторых, значительно меньший объем входных данных при реализации компьютерных методов.

**Переход от исходного дифференциального уравнения к интегральному.** Рассмотрим на простом примере алгоритм перехода. В двумерной однородной области произвольной формы с коэффициентом проницаемости  $k$  требуется найти распределение функции  $\varphi$ , описанной уравнением

$$\partial^2 \varphi / \partial x_1^2 + \partial^2 \varphi / \partial x_2^2 = 0, \quad (6.39)$$

которое является частным случаем квазигармонического уравнения

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + Q = 0, \quad (6.40)$$

при  $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$ .

На границе  $L$  рассматриваемой области заданы граничные условия первого рода:

$$\varphi(x_0) = g(x_0). \quad (6.41)$$

**Этап I. Нахождение сингулярного решения.** В МГЭ используется то обстоятельство, что для большинства уравнений в частных производных существуют сингулярные (фундаментальные) решения, отвечающие единичным возмущающим воздействиям в неограниченной области. Для рассматриваемой задачи сингулярное решение записывается в виде

$$\varphi(x) = G(x, \xi) g(\xi), \quad (6.42)$$

где  $\varphi(x)$  – значение искомой функции в произвольной точке области;  $g(\xi)$  – единичное возмущающее воздействие, приложенное в точке  $\xi$ .

Начала координат для систем  $x$  и  $\xi$  совпадают. Величина

$G(x, \xi)$  определяется, в свою очередь, уравнением

$$G(x, \xi) = -\frac{1}{2\pi k} \ln \left| \frac{r}{r_0} \right|,$$

где  $r^2 = x_1^2 + x_2^2$  и  $r_0$  выбрано так, что  $G = 0$  при  $r = r_0$ . Уравнение (6.42) определяет искомую функцию  $\varphi(x)$  относительно некоторого нулевого значения при  $r = r_0$ .

**Этап II. Введение фиктивных источников.** Рассматриваемая область  $GI$  «помещается» в бесконечную область, для которой известно решение (6.42). Потребуем, чтобы значения  $\varphi(x)$  на границе области совпадали с заданным граничным условием (6.41). Чтобы это требование выполнялось, введем на границе фиктивные источники неизвестной интенсивности  $p(\xi)$  в расчете на единицу длины границы  $L$ . Подставив  $p(\xi)$  в (6.42) и проинтегрировав его по длине границы, получим искомое решение:

$$\varphi(x) = \int_L G(x, \xi) p(\xi) dL(\xi) + C. \quad (6.43)$$

В результате проделанных действий от исходного дифференциального уравнения (6.40) удалось перейти эквивалентному интегральному уравнению (6.43), в котором появилась произвольная постоянная  $C$ , обеспечивающая единственное решение в связи с тем, что функция  $\varphi(x)$  рассчитывается относительно некоторого нулевого значения. В дальнейшем  $C$  подбирается таким образом, чтобы суммарное «излучение» от всех источников обращалось в нуль на бесконечно удаленной границе. Для обеспечения заданных граничных условий необходимо, чтобы выполнялось равенство

$$\varphi(x_0) = \int_L G(x_0, \xi) p(\xi) dL + C. \quad (6.44)$$

На основании равенства (6.44) строится система интегральных уравнений относительно неизвестных фиктивных источников  $p(\xi)$ . После того как они будут найдены значения искомой функции  $\varphi(x)$  в любой внутренней точке области легко определяются из (6.43).

Если бы (6.44) удалось проинтегрировать аналитически, то для исходной задачи было бы найдено точное решение. На практике

(6.44) решается приближенно, что является единственным источником погрешности в МГЭ.

### Дискретизация границы рассматриваемой области

Для приближенного решения (6.44) производится дискретизация границы рассматриваемой области. Аналогично МКЭ разбиение границы на элементы можно производить различными способами. В простейшем случае граница аппроксимируется линейными элементами. Отдельный элемент определяется координатой своей средней точки. Интенсивность неизвестных источников  $p(\xi)$  в пределах элемента принимается постоянной. С учетом принятых допущений выражение (6.44) запишется в виде

$$\varphi(x_0^q) = \sum_{e=1}^N p(\xi^{(e)}) \int_L G(x_0^q, \xi^{(e)}) dL(\xi^{(e)}) + C, \quad (6.45)$$

где  $x_0^q$  – координата средней точки  $q$ -го граничного элемента.

Уравнение (6.45) определяет значение функции в средней точке  $q$ -го граничного элемента.

В матричной форме (6.54) принимает вид

$$\varphi^q = \left( \int_{\Delta L} G^{qe} dL \right) p^{(e)} + C, \quad (6.46)$$

где  $\Delta L$  – длина  $q$ -го граничного элемента;  $p^{(e)}$  – вектор-столбец размерности  $N$ ;  $\int_{\Delta L} G^{qe} dL$  – вектор-строка той же размерности.

При этом каждый элемент вектора-строки определяется по формуле

$$G^{qe} = \int_{\Delta L^{(e)}} G(x_0^q, \xi^{(e)}) dL(\xi^{(e)}). \quad (6.47)$$

С учетом (6.47) уравнение (6.46) переписывается так:

$$\varphi^q = G^{qe} p^{(e)} + C.$$

Составляя аналогичные уравнения для каждого граничного элемента и проводя суммирование по всем элементам, получим систему алгебраических уравнений:

$$\varphi = G^S p^{(e)} + IC,$$

где  $\varphi$  и  $p$  –  $N$ -мерные векторы;  $I$  – единичный  $N$ -мерный вектор-столбец;  $G^S$  – матрица коэффициентов размерности  $N \times N$ .

При реализации на компьютере алгоритм МГЭ состоит из следующих этапов:

*Этап 1.* Формирование входных данных (номера узлов граничных элементов, номера самих элементов и т. д.).

*Этап 2.* Интегрирование функций  $G(x, \xi)$  для получения матрицы коэффициентов  $G^S$ .

*Этап 3.* Составление разрешающей системы алгебраических уравнений.

*Этап 4.* Решение системы для определения неизвестных фиктивных источников.

*Этап 5.* Подстановка найденных значений в определяющее интегральное уравнение и вычисление значений функций во внутренних точках области.

Многие этапы рассмотренного алгоритма аналогичны соответствующим этапам МКЭ. Достаточно нетривиальным является этап 2 алгоритма, связанный с интегрированием функции  $G(x, \xi)$ . Поэтому в целом программирование МГЭ требует несколько больших усилий по сравнению с реализацией МКЭ. Однако последующая эксплуатация программы проще с точки зрения пользователя, так как объем задаваемой входной информации значительно меньше, чем в МКЭ.

#### **6.4. Применение численных методов для моделирования технологических процессов подготовки производства отливок**

В литейном производстве отливки изготавливают путем заливки расплавленного металлического сплава определенного химического состава в форму. После охлаждения сплав затвердевает и сохраняет геометрию полости формы. Отливки могут быть готовыми деталями или заготовками, которые в дальнейшем обрабатываются на металлообрабатывающих станках [12].

Литье в песчаные формы представляет собой универсальный процесс производства отливок. Этот процесс используется для получения отливок различной сложности практически любого веса и размера из стали, чугуна и сплавов цветных металлов.

Компьютерный анализ литейных процессов на этапе виртуального проектирования литейной технологии (до производства отливок) позволяет минимизировать возможные просчеты и ошибки, неизбежно возникающие в процессе разработки, снизить финансовые и временные затраты, повысить эффективность, конкурентоспособность, качество и надежность выпускаемой продукции. Экономятся материалы, энергоресурсы, рабочее время, ресурс оборудования, а взамен получается много уникальной информации о технологическом процессе. Только технология компьютерного моделирования позволяет в условиях производства «заглянуть внутрь» изделия, увидеть характер протекающих в нем процессов, понять причины дефектов [12].

В настоящее время основным преимуществом систем моделирования является то, что они позволяют технологу наблюдать за процессами, происходящими в отливке, и понимать причины образования того или иного дефекта именно в этой отливке при определенных конкретных технологических параметрах. Это позволяет нам предлагать эффективные технологические решения, которые, в свою очередь, можно проверить с помощью моделирования. Когда технолог принимает то или иное технологическое решение, он руководствуется некоторыми представлениями о ходе литейных процессов, сложившимися на основе предыдущего опыта. Поскольку технолог обычно может оценить протекание процесса только по косвенным признакам (наличию или отсутствию дефекта на завершающем этапе), эти представления не всегда соответствуют действительности. И это происходит вследствие многофакторности и неоднозначности процессов литья, сложности геометрии отливки, нестабильности технологических параметров и т. д. Для того чтобы технолог имел правильное представление о протекании реального процесса при любом виде литья, значительный опыт правильных и неправильных решений должен быть накоплен и подтвержден объективным результатом. Для того чтобы разработать адекватное решение для конкретной отливки, опытный технолог-литейщик должен в определенном смысле иметь определенное количество неудачных разработанных и примененных технологий. Моделирование, с другой стороны, избавляет от необходимости накапливать этот дорогостоящий опыт методом проб и ошибок в течение многих лет, так как позволяет анализировать ход процесса непосредственно, а не по косвенным признакам. Так можно понять, какие технологические факторы действительно оказывают существенное влияние на результат в данном случае, в какую сторону

изменяются параметры процессов и почему. Поэтому основная цель системы моделирования состоит не только в том, чтобы удешевить процесс проверки предлагаемых технологических вариантов с помощью компьютера, но и в том, чтобы помочь технологу конкретно искать именно тот вариант, который обеспечивает требуемое качество литья. При этом важно и то, что моделирование позволяет проверить не только работоспособность выбранной технологии, но и устойчивость технологии к изменению технологических параметров. В реальном производстве технологические параметры всегда изменяются в определенных пределах. Моделирование можно использовать для проверки того, обеспечивает ли технология качество, необходимое для таких изменений. Это гораздо выгоднее, чем принимать «аварийные» меры, когда уже в освоённой отливке «вдруг» обнаруживаются дефекты, не возникшие при отработке литейной технологии [28].

Внедрение компьютерных технологий позволяет повысить эффективность создания и обработки информации: происходит реальный переход от бумажного документооборота к электронному.

С внедрением компьютерных технологий сокращаются затраты, снижается трудоемкость проектирования и освоения производства сложных новых изделий. Стоимость подготовки технологической документации снижается на 25–50 %. Сокращается более чем на 1/3 времени изготовления сложных новых изделий. Реальный выигрыш в производстве полной партии готовых отливок в несколько тысяч единиц может достигать двух-трех раз.

Использование компьютерных технологий в литейном производстве во многом связано с обработкой информации об изделии, которая создается в виде электронных моделей деталей, поступающих из САПР конструкторских бюро. Информация о технологических процессах, используемых в литейном производстве, представлена в виде математических моделей, созданных на основе деятельности систем инженерного анализа [41, 42].

Виртуальное литейное производство, созданное на базе современной САЕ-системы, не только моделирует затвердевание отливки (тепловая задача), но и позволяет прогнозировать макро- и микроструктуру отливки, а также создает информационную картину электронной модели изделия. Созданная цифровая модель (двойник технологического процесса) позволяет использовать технику быстрого прототипирования для получения высокоточных моделей, необходимых для изготовления отливок в литейном производстве.

Центральным звеном виртуального производства литых заготовок является программное обеспечение моделирования затвердевания отливки и формирования макро- и микроструктуры. Выбор программного обеспечения зависит от используемого процесса литья и ассортимента выпускаемых отливок.

Для авиакосмических производств, где много деталей ответственного назначения с тонкими стенками, тонкими ребрами, щелевыми каналами сложной формы, (например, лопасти газотурбинного двигателя), анализ МКЭ имеет определенное преимущество, заключающееся в том, что он позволяет более точно передавать геометрию отливки. Данный численный метод используется в программном продукте ProCast (рис. 6.13).

Этапы моделирования включают подготовку геометрии (3D-модель и 3D-сетка), определение теплофизических свойств материалов, определение граничных условий (т. е. повторение реального технологического процесса) [12].

Программа ProCast имеет отличный встроенный генератор 2D- и 3D-сетки, который в кратчайшие сроки, в абсолютном большинстве случаев автоматически, создает наиболее правильную расчетную сетку.

ProCast предлагает возможность моделирования заполнения формы, затвердевания и формирования микроструктуры. Расположение питателей и использование изолирующих или экзотермических элементов, их влияние на усадку можно изучить на компьютере и отобразить на экране для достижения оптимального качества литья.

Программный комплекс ProCast отвечает современным требованиям и позволяет генерировать расчетную модель на основе соответствующих физических процессов литейной технологии с подключением необходимых решателей в процессе моделирования.

Успех заполнения формы, затвердевания и формирования микроструктуры связан с оптимизацией литниковой системы и устранением возможных участков усадки. Размеры элементов литниковой (или литниково-питающей) системы и их влияние на усадку можно изучить на компьютере и отобразить на экране для поиска путей достижения оптимального качества литья.

В идеале инженер-литейщик или технолог должен иметь в качестве инструмента моделирования программный комплекс, ориентированный на полный цикл компьютерного моделирования процессов литья, – от формообразования до чистовой обработки деталей с возможностью оптимизации технологии по стандартным или собственным (уникальным) алгоритмам.

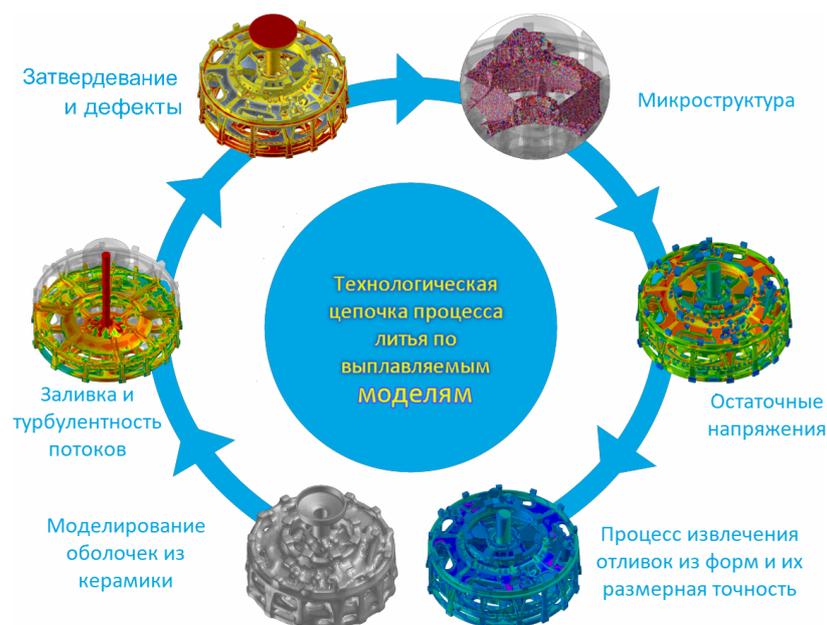


Рис. 6.13. Стадии и этапы моделирования литья по выплавляемым моделям в пакете Procast

Для описания факторов, влияющих на наличие дефектов в отливках (а их насчитывается несколько сот, по данным разных исследователей), необходимо прежде всего оценить современный уровень развития компьютерного моделирования в этой области. Общий уровень решения инженерами задач моделирования процессов дискретного литья в целом неоднозначен. В то же время компьютерное моделирование лучше подходит для обучения основным техническим понятиям, чем лабораторные эксперименты, которые, в свою очередь, могут служить важным, но не самостоятельным дополнением.

Эффективное использование систем компьютерного моделирования требует от пользователя осмысленных действий, творческого подхода и определенной квалификации. С другой стороны, использование литейным технологом системы моделирования повышает его квалификацию, причем в сравнительно короткие сроки. Таким образом, назначение системы моделирования заключается в том, что использование пакетов класса Procast автоматически повышает профессиональную литейную квалификацию пользователя до необходимого уровня. Те представления о протекании реальных процессов, которые технологи нарабатывали десятилетиями, можно получить с помощью моделирования примерно за один год и при минимальных дополнительных производственных затратах. Моделирование – это современный, эффективный и безопасный способ разработки и оптимизации литейных технологий. В рамках идеи цифрового проектирования в

виде сквозных стадий, без промежуточных этапов использования бумажных носителей информации, ценным является возможность систем моделирования переносить результаты моделирования технологии литья в другие пакеты (рис. 6.14). Даже с учетом того, что передаваемый результат в большей степени несет информацию качественную, а не точную количественную, потенциальный переход к мультисистемному анализу несет очевидные перспективы для продолжения этапного совершенствования производственных технологий в рамках литейных и металлургических процессов [52].

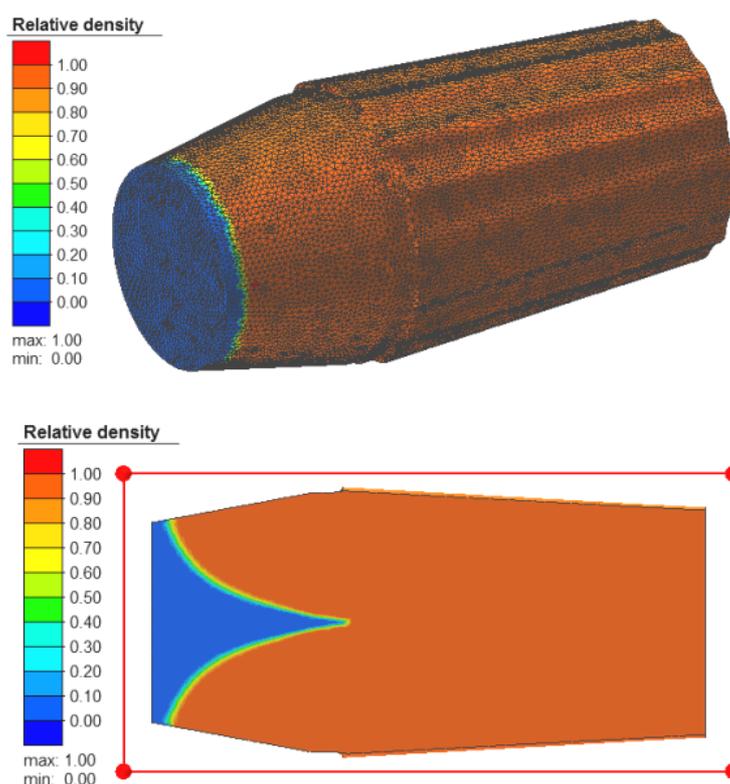


Рис. 6.14. Импорт результатов моделирования (относительная плотность/объемная усадка) в систему разработки технологииковки Simufact

Растущий интерес к методам математического моделирования в литейном производстве связан с неоспоримым преимуществом перед другими методами: возможностью проведения «удаленного» эксперимента без привлечения физических ресурсов. Это, в свою очередь, позволяет:

- 1) снизить стоимость проведения экспериментов (затраты труда, материальные затраты и время);
- 2) расширить исследовательские возможности, сняв ограничения на варьирование входных параметров системы;

3) обеспечить безопасность эксперимента за счет минимизации воздействия опасных и вредных факторов в процессе исследования.

С другой стороны, остается еще ряд причин, препятствующих распространению и активному внедрению систем моделирования в литейном производстве:

- 1) высокая стоимость специального программного обеспечения;
- 2) ограниченное количество подготовленных специалистов;
- 3) некорректная и ограниченная оценка результатов моделирования;
- 4) многофакторные процессы литейного производства, неопределенность возрастает при сравнении фактических и расчетных результатов;

- 5) высокая ресурсоемкость вычислений, требующих достаточно мощных компьютеров.

Важно отметить, что некоторые из этих недостатков могут быть устранены путем развития вычислительной техники и расширения ее использования в производстве. Например, для моделирования литейных процессов необходимо создать 3D-модель литейного цеха и литниковой системы, даже если так было уже некоторое время.

Если раньше разработка и оптимизация процессов литья требовала обязательно этапа ее создания, то сейчас, когда модели изготавливаются на станках с ЧПУ, 3D-модель отливки уже существует по умолчанию.

Важно отметить, что современное состояние техники не позволяет использовать системы моделирования литейного производства для автоматической генерации готовых технологических решений, как это часто ожидается от САПР. Использование систем инженерного анализа позволяет получить прогноз некоторых характеристик техники по заданным входным параметрам системы, которые так или иначе должен оценить и проанализировать на корректность опытный пользователь – технолог. В этом смысле часто возникают сложности при внедрении систем типа ПО Procast в литейном производстве.

Для уточнения места средств компьютерного моделирования литейных процессов (СКМ ЛП) в производственном цикле рассмотрим три схемы организации производственного процесса: традиционную (без использования средств моделирования литейных процессов) и две «прогрессивные», предполагающие введение современный метод разработки и оптимизации технологических процессов.

**Традиционный подход (метод проб и ошибок).** Недостаток этой схемы заключается в том, что опыт технолога и традиционные

средства расчета не в состоянии охватить все тонкости и факторы процесса производства отливок. В результате всегда есть шанс получить не только неоптимальную технологическую схему, но и откровенно неудачный вариант с высоким уровнем брака. Главный минус такого подхода в том, что проявление ошибок проявляется только после тестирования технологии в цехе. Это требует инициализации процесса корректировки технологии, который затрагивает весь цикл и все отделы подготовки производства, что приводит к значительным финансовым и временным затратам компании. Это сказывается на общей эффективности производства [12, 52].

**Разработка нового технологического процесса с системой компьютерного моделирования литейных процессов.** Отличие схемы от традиционного подхода заключается во внедрении инструментов анализа на этапе технологической разработки. Принципиальное значение имеет возможность виртуального тестирования технологии на основе прогнозов, полученных с помощью СКМ ЛП, без привлечения ресурсов подразделений, расположенных ниже по цепочке. Таким образом, значительно повышается вероятность использования оптимальной технологии с первого раза, т. е. с минимальным количеством ошибок.

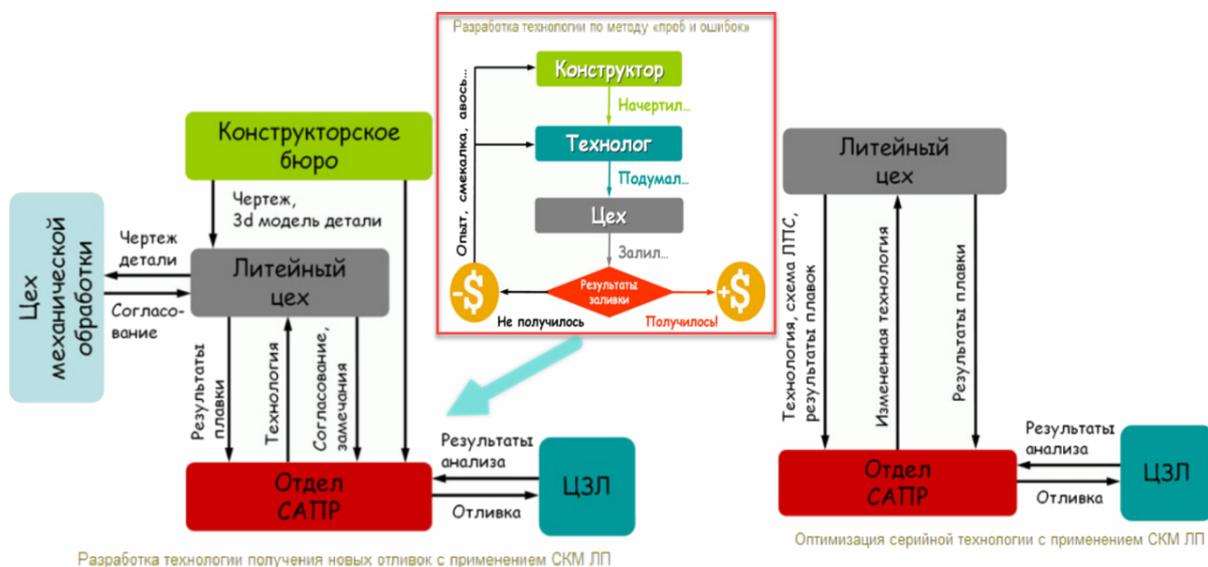


Рис. 6.15. Подходы к проектированию и разработке литейных технологий

Новая схема предусматривает два цикла (рис. 6.15). В первом случае затрагиваются ресурсы только двух отделов: технолога и САПР-ЛП. Обычно в конце этого цикла оптимизированный техноло-

гический проект запускается в основной этап подготовки к производству. Важно понимать, что даже наличие виртуального изучения технологии не исключает полностью возможности получения отливки с дефектами, что не исключает наличия второго, повторного цикла, характерного для первой схемы.

Эффективность новой схемы будет оцениваться на основе общего объема ресурсов, выделенных на фазу виртуальной разработки и пилотного тестирования. Конечно, количество пилотных испытаний резко сократится, но ведь есть и затраты на виртуальную разработку, которые, в свою очередь, необходимо минимизировать. Для этих целей можно с успехом использовать экспериментальные методы планирования.

**Разработка и оптимизация литейных процессов. Оптимизация существующей технологии с помощью системы компьютерного моделирования литейных процессов.** Отличие методики оптимизации существующей технологии от разработки новой состоит в том, что уже имеется базовая отправная точка, а именно информация о параметрах технологии и результаты анализа брака в производстве. В этом случае появляется прекрасная возможность определить корреляцию между результатами виртуального технологического прогноза и фактическими показателями процесса изготовления отливки. Наличие такой связи повышает объективность оценки технологических вариантов разработки воротных систем и позволяет более точно рассмотреть то или иное конкретное производство.

# **Глава 7. ОСОБЕННОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ПРОИЗВОДСТВЕ**

## **7.1. Интеллектуальные технологии в металлургии и их развитие**

Металлургическое производство включает широкий диапазон распределенных процессов сложного характера – от подготовки сырья до производства металлопроката. Каждый из них характеризуется некоторой степенью неточности (неуверенности). В этом случае эффективно используется «мягкое вычисление». Можно с уверенностью утверждать, что «soft computing» уже способствовало значительному прогрессу в металлургической промышленности.

Математическая основа искусственного интеллекта – «soft computing» («мягкое вычисление») – интенсивно развивалась в последние десятилетия. В настоящее время оно внедряется непосредственно в фундамент индустриальной автоматизации. В ближайшем будущем прогнозируется существенный рост использования систем искусственного интеллекта в основных производственных процессах, в том числе в металлургии [16].

Путь «мягкого вычисления» от кабинетов ученых до производственных цехов был тяжелым. Предпосылки, которые способствовали этому переходу, сформировались в недрах различных дисциплин. Кроме теоретических исследований, успех во многом обязан развитию VLSI – Very Large Scale Integration-технологии, повышению чувствительности датчиков, разработке открытых технологий, стыкующих различные вычислительные платформы и др. Средства VLSI в режиме реального времени гарантировали огромный вычислительный потенциал микропроцессоров. Например, стало возможным осуществлять управление в интерактивном режиме реального времени. Появление уникальных датчиков не только имплантировало интеллект в периферийные устройства, но и значительно повысило быстродействие управления делегированным и распределенным интеллектом.

В настоящее время с развитием концепции нейронных сетей и нечеткой логики «мягкие вычисления» являются значимым лидером в

отрасли, включающей следующие направления: нечеткие множества; генетические алгоритмы; эволюционные вычисления; теория хаоса; искусственный интеллект; моделирование систем; вероятностное мышление; изучение принципов работы механизма; изучение интеллектуальных алгоритмов управления; распознавание образов и понимание образов; самоорганизация сложных систем; нечеткие базы данных; нечеткий поиск информации и др.

Вначале было очевидным соревнование различных направлений развития «мягкого вычисления», пока не было осознано, что они дополняют друг друга, а не конкурируют.

Перечисленные направления нашли широкое применение в металлургии как в автономном, так и в комбинированном вариантах использования. Области, в которых они эффективно используются, различны: оценка и прогноз технологических параметров; контроль и диагностика технологических процессов; оптимизация и планирование результатов; моделирование процессов и интерактивное моделирование в режимах диалога. В частности, достигнуты существенные результаты при прогнозе изменения содержания кремния в чугуне в процессе доменной плавки, содержания водорода в металле при вакуумировании; контроле лазерной сварки, проверке качества сварных швов; обнаружении скрытых дефектов в рельсах; оптимизации горячей прокатки и контроле деформации заготовки при прокатке; планировании сокращения допусков при прокатке; моделировании отвердевания непрерывнолитой заготовки, технологии холодной прокатки; контроле изменения температуры полосы при горячей прокатке и толщины покрытия металла в линии гальванизации; контроле уровня металла в промежуточном ковше при непрерывной разливке и др. [17].

Прошло почти полвека с момента создания первых моделей искусственного интеллекта. Первоначально искусственный интеллект базировался на строгом и точном вычислении. Позже из-за осознания неточности реального мира акцент исследований сместился к «мягкому вычислению». Причина изменения парадигмы – понимание, что традиционные точные двужначные логические системы, исследования в области теории множеств и теории вероятности являются неадекватными, чтобы оперировать с неточностью, неуверенностью и сложностью реального мира.

«Мягкое вычисление» основано на нейронной сети (NN – Neural Network), нечеткой логике (FL – Fuzzy Logic – рис. 7.1) и вероятностном описании (PR – Probabilistic Reasoning). Функции нейронных сетей – изучение степени соответствия данных, идентификация пара-

метров, а также систем и образов. Нечеткая логика оперирует с не-точностью и вероятностным описанием процессов. В последнее время FL сливается с информационной генетикой, оценивает неуверенность, систематизирует случайный поиск и оптимизацию [9].

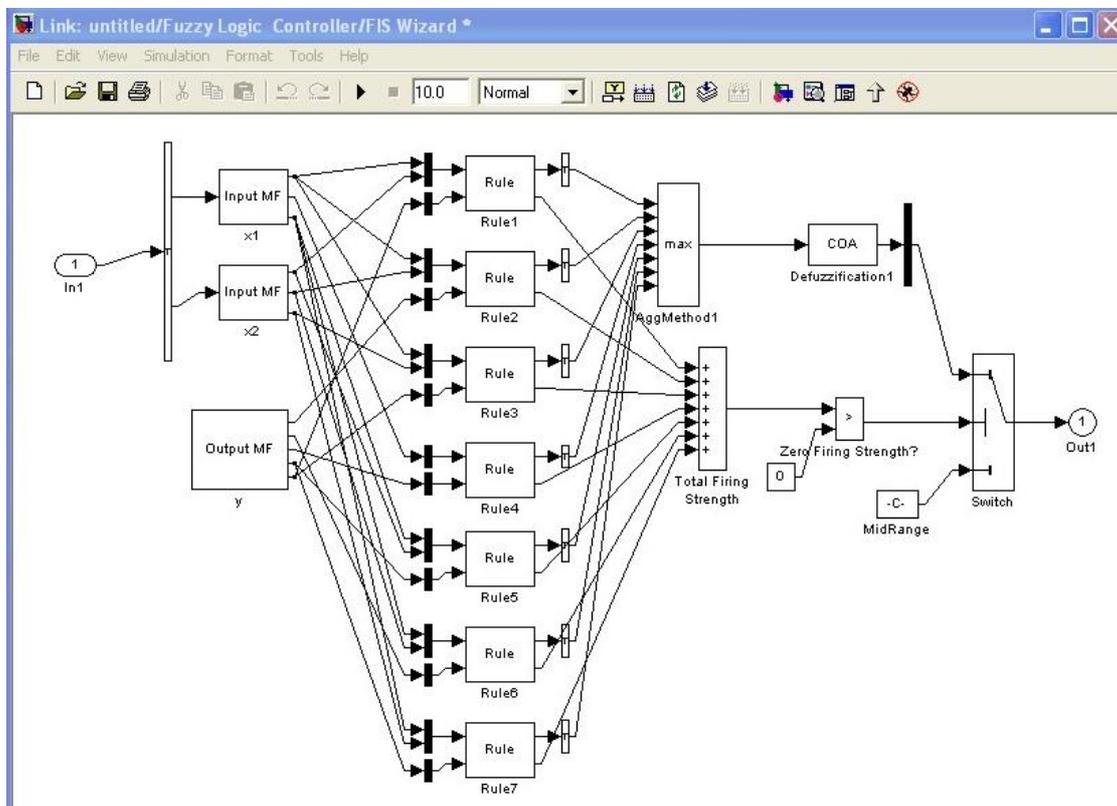


Рис. 7.1. Пример структуры модели в формулировке «нечеткой логики»

В начале 1980-х гг. эти методы были ограничены главным образом кабинетными стенами и не превышали масштабов лабораторных исследований. В конце 80-х произошел резкий скачок в развитии и использовании этих методов (более 2500 патентов только в одной Японии). «Мягкое вычисление» также способствовало коммерческому успеху в производстве изделий для потребителя – видеокамер, кондиционеров, стиральных машин, мобильных роботов, автомобилей и поездов метро. Системы искусственного интеллекта (MIQ – Machine Intelligent Quotient) быстро стали составной частью многих изделий постоянного обихода. Интеллектуальная система, объединяя известные методы и технологии, позволяет проектировать практические системы в области автоматизации и информатики, принимающие наиболее эффективные решения по результатам анализа исходных данных.

## 7.2. Применение нечеткой логики

**Коксовые батареи.** Система управления разогревом коксовых батарей (рис. 7.2) постоянно исследуется и совершенствуется. Системой первого поколения была статистическая модель нагрева. Принцип работы системы второго поколения (динамической) – вычисление баланса энергии. Она базировалась на прямой и обратной связи при определении температуры окончания. Система третьего поколения дополнена нечеткими логическими контроллерами. В результате разброс при определении температуры окончания коксования не превышает 15 °С. Надежность системы была значительно улучшена.

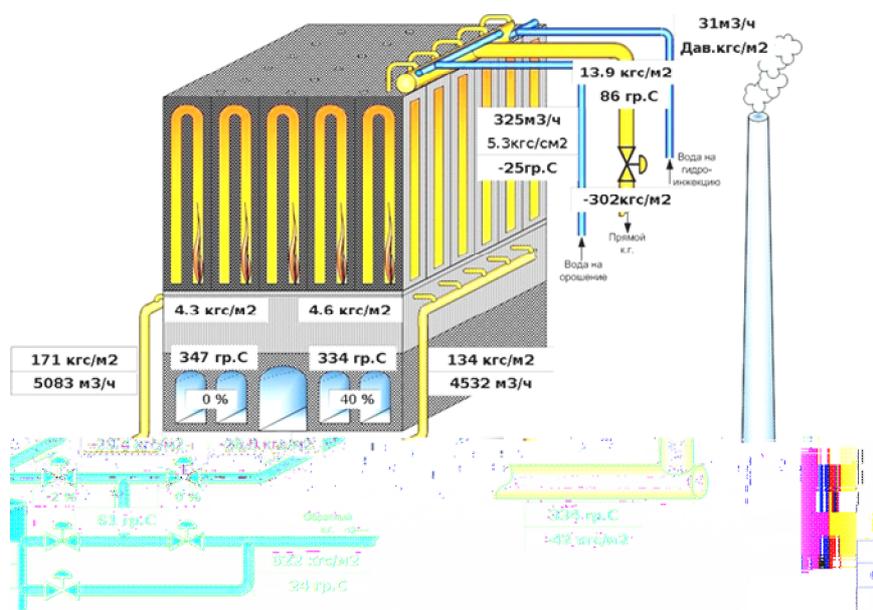


Рис. 7.2. Система визуализации работы коксовой батареи

**Холодная прокатка.** На стане холодной прокатки полоса последовательно уменьшается в толщине после каждого обжатия. В связи с этим задача управления сводится к оптимизации процесса обжатия при минимизации мощности нагрузки и удовлетворении некоторых ограничений. Так как свойства материалов и коэффициент трения точно не известны, их рассматривают как нечеткие числа. Теория нечетких множеств применена для определения оптимального значения обжатия. Обычно по установленному графику максимальное уменьшение толщины достигается после первых проходов с минимальной нагрузкой обжатия. Однако надежность такого управления невелика. Оптимизация процесса с использованием теории нечетких множеств обеспечивает решение, удовлетворяющее требованиям воспроизвод-

ства режимов обжатия с высокой надежностью и минимальной нагрузкой.

Была разработана дополнительная система нечеткого контроля заданной толщины стальной полосы. Она состоит из контроллера нечеткого вывода и адаптивного контроллера нейронечеткого вывода, параллельно моделирующего процесс прокатки. Нечеткий контроллер вывода генерирует сигнал управления, а адаптивная нейронечеткая модель преодолевает проблему задержки выходного сигнала процесса и обеспечивает структуру и точность контроля. Эта схема управления превосходно работает.

**Линии покрытия.** На линиях гальванизации толщину покрытия регулируют, контролируя его массу на основе баланса общего количества металла и электролита в ванне. Так как эффективность процесса – нелинейная функция от входных переменных, они представляют особую ценность для полного текущего расчета. Эффективность процесса зависит от состояния электролита. Вычисление точки оптимума нуждается в постоянной адаптации к фактическому процессу, кроме учета изменения заданной массы покрытия. Из-за значительного расстояния между измерительным шаблоном и контролирующими датчиками установлены специальные мониторы. Система сокращает расход металла на гальванизацию до минимума. Эффективность гальванической линии основана на использовании диалоговой нечеткой системы, а диалоговый процесс обучения системы постоянно приспосабливает математическую модель к фактическим условиям работы оборудования. В результате использования таких объединенных систем управления масса покрытия практически соответствует заданной. В последнее время в линиях гальванизации все больше используются нейронные сети.

### **7.3. Применение нейронных сетей**

Нейронные сети имеют возможность извлекать значимые результаты из сложных и «замусоренных» входных экспериментальных данных. Обученная нейронная сеть является экспертом для анализа данной информации и предоставляет новые прогнозы, прогнозы и возможности в любой интересующей ситуации. Нейронные сети обладают большим количеством свойств и возможностей, таких как нелинейность, отображение ввода-вывода, адаптивность, доказательный ответ, контекстная информация, отказоустойчивость за счет избыточного кодирования информации [3].

**Выплавка и непрерывная разливка стали.** В кислородно-конвертерном цехе завода в Великобритании (Port Talbot Basic Oxygen Steelmaking plant) автоматизированные нейронные сети (рис. 7.3) позволяют точно прогнозировать температуру и содержание углерода в жидкой стали в конце продувки, а также расход кислорода и охлаждающих добавок по ходу продувки. В качестве обучающего массива использованы результаты фактических замеров температуры и определения углерода в образцах, отобранных по окончании продувки. Эти замеры использованы как вход в модели нейронной сети для прогнозирования расхода дополнительного кислорода или охладителей и получения желаемого результата окончания продувки.

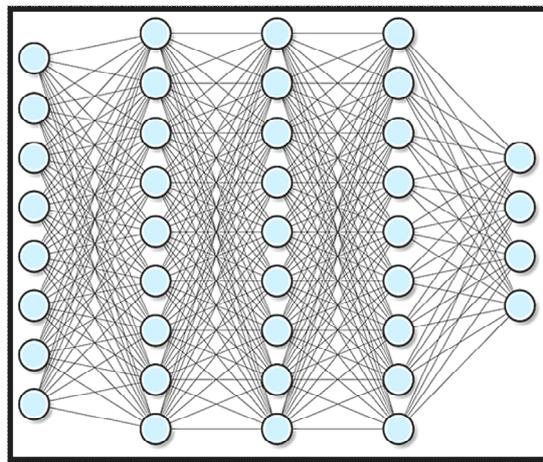


Рис. 7.3. Топологическая структура многослойной нейронной сети

На заводе в Италии (Danieli Automation) нейронные сети используются для управления процессом непрерывной разливки по уровню металла в кристаллизаторе. В одном из вариантов система обнаруживает уровень жидкого металла и затем контроллер с нечеткой логикой его выравнивает. В другом варианте – сохранение устойчивого уровня металла было важно для обеспечения необходимого качества заготовки. Обычными методами было бы трудно достичь точного управления уровнем металла из-за нелинейных характеристик процесса. Модель нейронной сети, обученная на основе временного ряда входных параметров, управляет стопором посредством интеллектуального контроллера в главной цепи управления.

Фирма Siemens использовала эти типы контроллеров для расчета температуры непрерывнолитого сляба, усилия вытягивания и моделирования скорости при непрерывной разливке на заводе Hoesch, Дортмунд, а Nippon Steel применила нечеткую модель для автомати-

ческого управления скоростью вытягивания и сечением литого сляба. В другом случае для предсказания температуры и управления зоной первичного охлаждения установлена основанная на обратном распространении нейронная сеть. Пилотная модель контроля открытой зоны первичного охлаждения построена на основе T–S нечеткой нейронной сети. Ее структура улучшена в результате использования нечеткого управления первичной зоной охлаждения с контролем точности по обратной связи.

Содержание водорода в стали – важный показатель качества железнодорожных рельсов. Система классификации на базе нейронной сети для управления агрегатом позволяет точно прогнозировать содержание водорода при дегазации в вакууматоре.

Внутренние дефекты в рельсах, если они не обнаружены, могут привести к авариям на железных дорогах. Поэтому нейронные сети обучены идентифицировать возможные скрытые дефекты металла, распознавая показания ультразвуковых датчиков.

При затвердевании непрерывнолитой заготовки нейронная сеть используется для моделирования эффектов и параметров отвердевания и предназначена для управления их переменной реакцией в течение процесса разливки.

На заводе в Германии нейронные сети обеспечили 2%-е сокращение потребления энергии и 5%-е увеличение производительности, эффективно управляя процессом выплавки в электродуговых печах.

**Прокатное производство.** Оценка нагрузки на вращающиеся валки, прогнозирование параметров рулонов при прокатке металла и так далее – некоторые области применения нейронных сетей. Использование нейронной сети и анализ конечного продукта позволили оптимизировать прокатку заготовки неправильной формы для получения однородности свойств металла. В листопрокатном цехе было уменьшено изменение ширины готового проката по обратной связи алгоритма, на основе чего точно прогнозировалась ширина полосы по отношению ширины заготовки к усилию обжатия и температуре, отношению ширины к толщине и др.

Нейронные сети применены для определения влияния различных параметров (обжатия, нагрузки и вращающих моментов) на процесс прокатки. Обучение сети было выполнено с использованием экспериментальных данных – результатов замеров нагрузки во время холодной прокатки. Свойства смазки (коэффициент трения) использованы как входные переменные. Главное назначение модели – точ-

ное прогнозирование нагрузки и вращающих моментов при холодной прокатке в изменяющихся режимах обжата. Рекомендации системы были сравнены с расчетными значениями каждого параметра. При этом подтверждена хорошая прогнозирующая «способность» модели нейронной сети.

Для каждой клетки прокатного стана управляющий алгоритм – нелинейная функция нескольких параметров (толщины заготовки, нагрузки и вращающего момента, среднего обжата за проход, коэффициента трения и т. д.). Любое изменение каждого из них приводит к изменению других. Автоматизированная нейронная сеть выбирает управляющий алгоритм от трех параметров контроля, включая длину рулона.

**Линии покрытия.** В управлении толщиной покрытия на линии гальванизации обычные модели контроля имеют ограничения и не удовлетворяют следующим требованиям: адекватный расчет временных интервалов; быстрая адаптация к изменению скорости полосы; оптимизация при изменении параметров процесса. Для преодоления этих ограничений были использованы модели процесса, основанные на нейронных сетях. Это обеспечило лучшую однородность толщины покрытия (соответствующую ISO 10142) при минимальных затратах. Так, в Thyssen Stahl возможности нейронной сети использовали для идентификации процесса покрытия по фиксируемым параметрам режимов работы управляемой секции. Модель процесса, разработанная на базе этой процедуры, принимала во внимание фактор наибольшей выгоды, который зависел от операционно-технологического режима получения однородного покрытия. Сеть была интерактивно обучена, а модель процесса приспособлена к непрерывно изменяющимся потребностям предприятия. Параметры, которые определяли толщину покрытия и не могли быть приняты во внимание при разработке модели, были автоматически изучены нейронной сетью и, соответственно, ею компенсировались. Этот гарантируемый автоматический подбор параметров осуществляется нейронной сетью непрерывно. Он устраняет потребность в автоматическом контроле и контрольно-измерительном оборудовании. Выходной контроль мгновенно осуществляет нечеткая функция.

**Применение генетических алгоритмов (GA).** Основная философия генетических алгоритмов – оптимизация на основе эволюционных принципов естественных хромосом, т. е. отбор, скрещивание и мутация популяций параметров по принципу «выживания» теории

Дарвина. Как первый шаг, вероятность отбора используется для воспроизводства. Пересекающиеся операторы применяются для обмена и повторного комбинирования исходной информации, и, наконец, операторы мутации изменяют полученную информацию для объединения отдельных решений.

Генетические алгоритмы первоначально считали методами исследования, пригодными только для академических целей. Однако вскоре они обеспечили хорошие решения в широком диапазоне производственных проблем и, что наиболее важно, эти алгоритмы легко корректировались в соответствии с решаемыми задачами и ограничениями. Необходимо лишь постичь искусство кодирования задач оптимизации в генетическую информацию. Генетические алгоритмы обеспечивают большой потенциал, который широко используется для оптимизации производства, планирования и управления металлургическими предприятиями.

В любой задаче оптимизации на основе генетических алгоритмов есть два главных процесса. Сначала проектируют модуль генетических алгоритмов, а затем моделируют испытания и оценки. Граничные условия определены параметрами исследуемого процесса. Постановка задачи оптимизации для достижения главной цели и возможных альтернатив осуществляется на базе анализа структуры основных массивов производственных данных предприятия. Генетический алгоритм использует некоторый начальный фактический массив этих данных. Если этот предварительный массив адаптируется моделью с ограничениями, происходит возврат к модулю генетических алгоритмов. Если функция соответствия удовлетворена, получаем решение задачи. Во втором поколении модуль генетических алгоритмов обрабатывает первую популяцию параметров и создает новый список параметров, продолжая поиск необходимых мутаций, пока окончательный вариант не удовлетворит функцию соответствия или не закончится заданное пользователем время работы алгоритма. Этот тип системы с использованием разработанных фирмой Siemens инструментов и генетических алгоритмов был внедрен на заводах Megasteel (Малайзия); Zhuijang (Китай); Thyssen Krupp Stahl (Германия) и др.

**Гибридные применения «мягких вычислений».** *Нейро-нечеткие системы управления.* Проблема, с которой сталкиваются, применяя нечеткий логический вывод, заключается в том, что установленная неадаптивная функция состояния не может иногда гарантировать необходимую работу системы, а нечеткие правила существенно опираются на опыт эксперта.

Необходим симбиоз с нейронной сетью для адаптации функции состояния и самоорганизации нечетких правил. Кроме того, в чистом применении нейронной сети иногда веса синапсов, осуществляющих связь между нейронами, испытывают потребность в конвергенции или оптимизации. Результаты существенно улучшаются, если эти веса – нечеткие. В промышленности реализуется использование многочисленных комбинированных нейронечетких вариантов систем управления.

Схема самоприспосабливающегося управления, основанного на нейронной сети с последовательными связями нейронов и нечетком выходе (искусственный интеллект-AFC) была реализована для достижения качества и усовершенствования процесса производства холоднокатаной полосы. Прокатка рассматривалась как сложный нелинейный процесс с дефектами, свойственными традиционным линейным моделям управления. Результаты моделирования показали, что система AFC достаточно хорошо работает и может использоваться для улучшения качества готового проката и увеличения производительности прокатного стана.

Процесс производства штрипса (рис. 7.4) или полосы весьма сложен и не линеен по контролируемым параметрам. Трудно разработать достаточно точную многофакторную математическую модель этого процесса. В соответствии со специальными характеристиками процесса для автоматического управления изменением толщины заготовки была разработана интеллектуальная система с нечетким методом кодирования. Результат испытания модели в промышленных условиях доказал, что нейронная сеть с нечеткой системой управления является выполнимой и обеспечиваемая ею точность управления лучше других традиционных методов.



Рис. 7.4. Процесс производства штрипса

*Нечеткие генетические и нейрогенетические системы управления.* Генетические вычисления эффективно используются для многовариантной оптимизации, которая не может быть достигнута обычными методами оптимизации. Применение лингвистических терминов в виде списков номинальных переменных делает доступными методы нечеткого кодирования информации. Кодирование облегчает установление степени информационной детализации и обеспечивает поиск решения с помощью моделей генетических алгоритмов. Оно обеспечивает разумные вычисления функций соответствия. Поведение генетических алгоритмов базируется на отношении «исследование/эксплуатация», сохраняемом в течение генетического цикла. Нечеткие выводы гарантируют адаптацию генетических алгоритмов, влияя на эти отношения так, чтобы не было никакой преждевременной конвергенции.

Интеллектуальная поддержка предприятия может быть использована для эффективного обслуживания заказов потребителей производимой предприятием продукции на том или ином агрегате. Возможности обслуживания по продукции широколиствого стана горячей прокатки, сделанная на «Voest Alpine» (Австрия) с использованием нейронных сетей для улучшения точности описания процессов обработки металла давлением, превышает диапазон возможностей обычных математических моделей. Генетические алгоритмы в данном случае использовались для оптимального приспособления модели к требованиям клиента.

Метод Pawelski, Rasp и другие методы разработаны для резки полосы и рулона с учетом свойств металла. При использовании аналитического подхода типа мягкой модели Форда-Эл-лис с формулой Хичкока для искаженного радиуса рулона для каждой полосы могут быть рассчитаны нагрузка и деформация. Эффекты изгиба, резки и сглаживания рассчитывают через коэффициенты влияния. Программа работает многократно. Вычисление матрицы коэффициентов влияния для сглаживания требует много времени. Усовершенствование программы достигнуто заменой входов модели обученной нейронной сетью, работающей равноправным партнером в полной математической модели с существующими выходами. Нейронная сеть может быть также обучена в обратном направлении. Это делает возможной очень быструю инверсию сглаживающей матрицы. Последнее весьма важно для металлопрокатных цехов, использующих больше двух рулонов. Объединенная модель более адекватна, так как не является «черным ящиком».

Она основана на нейронных сетях и может быть приспособлена для диалогового управления производственным процессом. Существенное сокращение времени обработки информации получено без потери точности, так как сглаживающим шагом вычисления заменяется сумма полиномов с соответствующей функцией активации.

Физическая микроструктура моделируется нейронной сетью для точного вычисления механических свойств – предела прочности, твердости и др. Входные параметры для модели – реальная температура и напряжение, нормируемые величины напряжения и охлаждения, химический состав, скорость прокатки и др. Фирмой «Siemens» было проведено испытание модели на различных заводах при производстве горячекатаного листа и «Salzgitter AG», «Rautaruukki Stal» и др.

На заводе «Steel Dynamics» (Штат Индиана, США) нейронная сеть выполняет прогноз механических свойств металла и для его обеспечения работает параллельно с математической моделью для точного расчета графиков циклов прокатки.

#### 7.4. Компьютерное моделирование сложных нагруженных узлов печей

Ротационные наклоняющиеся плавильные печи (РНП) – новый тип печей, популярность которых стремительно растет в литейном производстве и металлургии. Сегодня эти печи выходят на лидирующее место в металлургии вторичных цветных сплавов: при производстве алюминиевых, цинковых, свинцовых, медных и других сплавов из стружки, мелкого скрапа, шлама, шлака и т. д. (рис. 7.5).

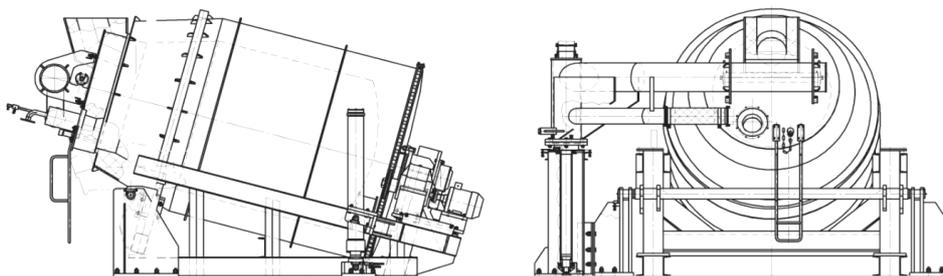


Рис. 7.5. Общий вид ротационный наклоняющийся плавильной печи полезной емкостью 3,75 м<sup>3</sup>

Ротационные наклоняющиеся плавильные печи обладают рядом преимуществ при обработке дисперсных материалов, особенно при рециклинге металлоотходов. Вместе с тем печи имеют сложный привод,

который должен обеспечить вращение корпуса печи с регулируемой скоростью, наклон печи на  $180^\circ$ , отвод крышки на  $180^\circ$  и др. Расчет и конструирование основных узлов РНП представляет большие трудности, так как все элементы печи являются тяжело нагруженными, работают при высокой температуре и должны обладать высокой жесткостью и большим запасом прочности с учетом случайных динамических нагрузок. В большинстве случаев единственным методом разработки является компьютерное моделирование. Примером такого конструирования служит разработка одного из узлов РНП – стойки поворотной крышки, на которой установлены горелки, отвод газов, аппаратура управления и др.

Стойка крышки РНП является одним из наиболее ответственных узлов данного агрегата. Ее функции заключаются в повороте крышки печи и удержании ее в статическом положении. Данный узел должен обладать достаточной жесткостью и прочностью, так как на нее действуют большие изгибающие моменты и напряжения.

В результате эксплуатации РНП емкостью 15 т произошла пластическая деформация стойки крышки, повлекшая за собой аварийную остановку работы печи (рис. 7.6). Причиной послужил малый запас прочности и недостаточная жесткость конструкции.

Цель исследования: улучшение конструкции стойки крышки РНП и математическое моделирование данного узла под нагрузкой.



Рис. 7.6. Фотографии вышедшей из строя стойки крышки ротационной наклоняющейся плавательной головки

В качестве ПО для проверки конструкции на прочность использовался модуль инженерного анализа Simulation программного комплекса SolidWorks. В процессе моделирования выполнен следующий ряд действий:

1. Построена 3D-модель узла согласно чертежам (рис. 7.7).
2. Выбран статический тип исследования.
3. Для деталей модели выбраны материалы: 90MnCrV8 – для шариков и колец подшипников, AISI 1035 (SS) – для всех остальных деталей.
4. Определены соединения деталей.
5. Нагрузка приложена на верхнюю грань фланца посредством дистанционной нагрузки в 3000 кг.
6. Крепления определены посредством фиксированной геометрии. Для данного узла креплениями являются нижняя и вертикальная плита.
7. Построена сетка на основе кривизны.
8. Построены эпюры напряжения, перемещения, деформации и запаса прочности.

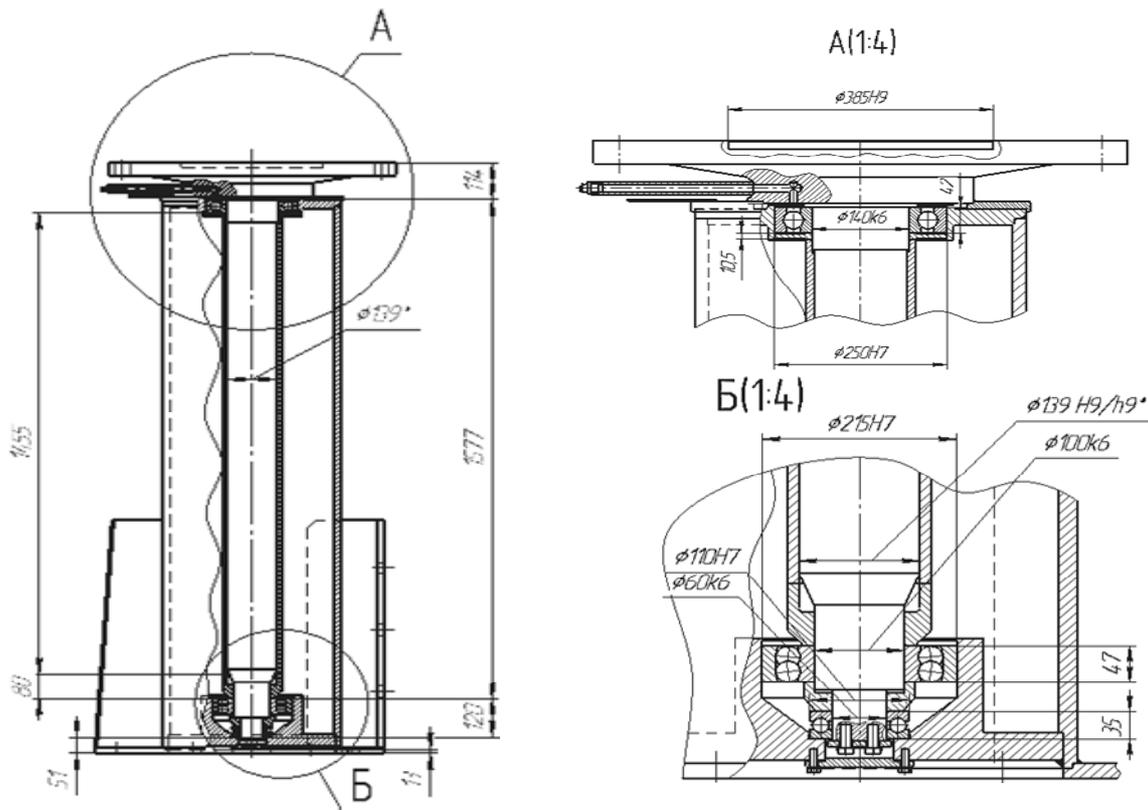


Рис. 7.7. Первоначальная конструкция стойки крышки ротационной наклоняющейся плавильной печи

Максимальные напряжения, действующие в кольце верхнего радиального подшипника улучшенной конструкции стойки крышки РНП (рис. 7.8), составляют 578,5 МПа. Величина коэффициента запаса прочности составляет 0,63.

Для наглядности результатов проведено моделирование первоначальной конструкции стойки крышки РНП с аналогичными настройками исследования. В результате получена эпюра, представленная на рис. 7.9.

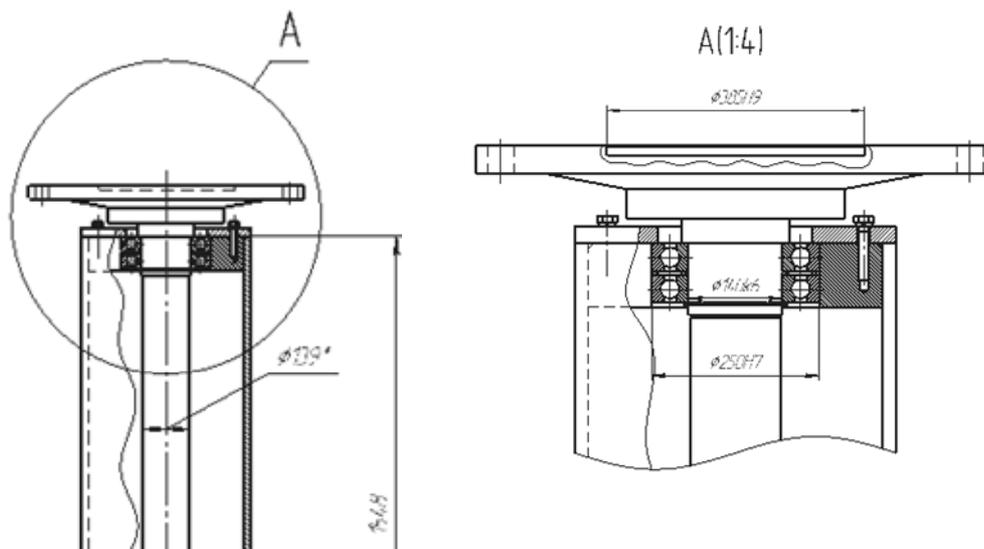


Рис. 7.8. Улучшенная конструкция стойки крышки ротационной наклоняющейся плавильной печи

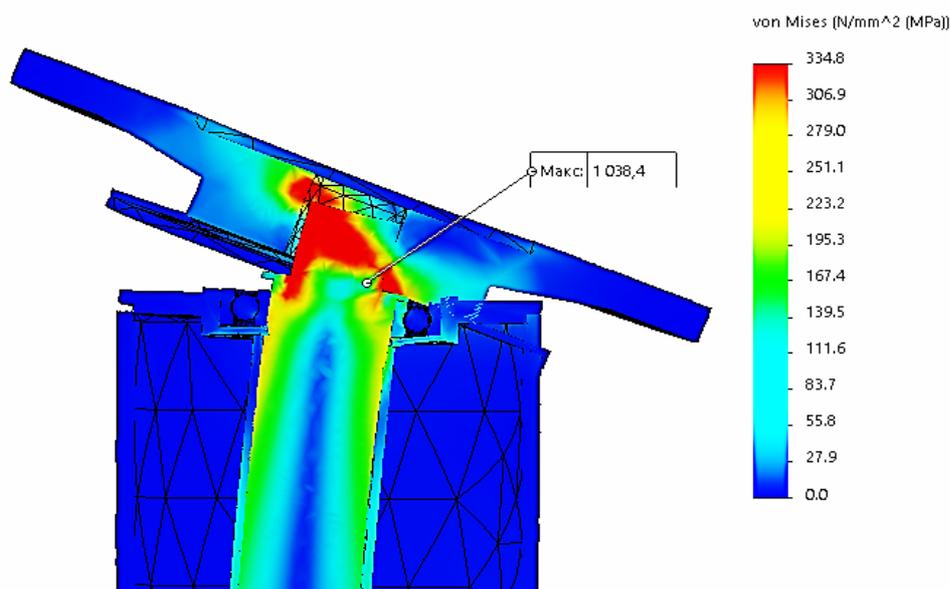


Рис. 7.9. Эпюра напряжений стойки крышки ротационной наклоняющейся плавильной печи первоначальной конструкции

Эпюра напряжений представлена в деформированном результате при шкале деформации, равной 21,3. Максимальные напряжения, действующие на нижней грани контакта фланца и оси стойки, составляют 1038,4 МПа. Минимальное значение коэффициента запаса прочности составляет 0,32.

Сравнивая полученные эпюры, видно, что модель с первоначальной конструкцией подвергается более значительным деформациям, при аналогичном приложении нагрузки, способе соединения и крепления.

Численно анализируя полученные результаты, делаем вывод, что стойка крышки РНП с улучшенной конструкцией обладает лучшими механическими характеристиками по сравнению с исходным вариантом узла. Максимальное напряжение, действующее в модели, снизилось на 80 %, а минимальное значение коэффициента запаса прочности увеличилось вдвое.

Для достижения наиболее высокого запаса прочности, удовлетворяющего требованиям рабочей установки в литейном цеху, разработана инновационная конструкция стойки крышки РНП. Отличительная особенность данного устройства узла заключается в верхней части изделия.

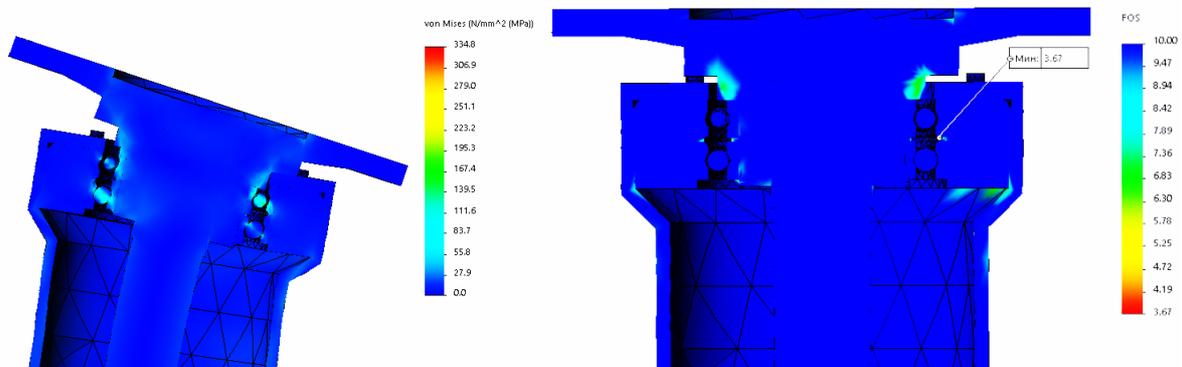


Рис. 7.10. Эпюра напряжений и запаса прочности стойки крышки ротационной наклоняющейся плавильной печи инновационной конструкции

Эпюра напряжений представлена в деформированном результате при шкале деформации, равной 235,1. Максимальные напряжения, действующие при контакте внутреннего кольца и шариков подшипника, составляют 334,8 МПа. Используя инновационную конструкцию стойки крышки, напряжения по критерию фон Мизеса уменьшаются в 4,4 раза, по сравнению с первоначальной конструкцией, а ми-

нимальный запас прочности возрастает на порядок. Полученные результаты полностью удовлетворяют требованиям эксплуатации РНП. Разработанная на их основе конструкция изготовлена и успешно внедрена на производстве.

## **7.5. Расчеты процесса нагрева шихты в слое в нестационарных условиях**

Сравнительный анализ эффективности известных способов сокращения удельных затрат электроэнергии на плавку дает ориентировочно следующее соотношение (при общих затратах  $\sim 650\text{--}680$  кВт · ч/т): дожигание СО непосредственно в рабочем пространстве путем дополнительной подачи воздуха или кислорода – 6 %; работа на вспененных шлаках – 9 %; повышение удельной мощности печных трансформаторов (работа на длинных дугах) – 10 %; вдувание кислорода в ванну металла (с корректировкой углеродосодержащего компонента) – 10 %; использование в завалке жидкого чугуна – 10 %; использование топливокислородных или плазменных горелок – 12 %; высокотемпературный подогрев шихты – до 22 %.

При этом эффект высокотемпературного подогрева шихты (ВПШ) очевидно пропорционален температуре нагрева или энтальпии загружаемых материалов. Верхний предел может быть ограничен только опасностью угара тонколистового скрапа при длительном нагреве свыше  $700$  °С в окислительной среде или свариванием кусков скрапа при температурах выше  $900\text{--}1000$  °С.

До настоящего времени представляют определенные трудности расчеты процесса нагрева шихты в слое в нестационарных условиях, в частности, определение времени продолжительности нагрева до заданной температуры.

По сложившейся практике его определяют опытным путем на уже изготовленной установке, изменяя режимы: количество подаваемого топлива, величину разряжения, высоту слоя и тому подобное, устанавливая длительность подогрева, требуемую по условиям работы плавильного отделения или экономическим показателям.

Исследования режимов нагрева шихты в слое в бадьях и шахтах позволяют сделать вывод о применимости для расчета процессов теплопередачи уравнения Фурье для нестационарной теплопроводности с граничными условиями I рода. При этом в уравнении вместо коэффициента теплопроводности слоя  $\lambda$  (как в каноническом) используется приведенный коэффициент конвекции  $\alpha_k$ , умноженный на эквива-

лентный диаметр элементов слоя – куска шихты или канала, для, соответственно, внешней или внутренней задачи:

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} = \frac{\alpha_k d_3}{c_p} \frac{\partial^2 t}{\partial x^2}.$$

Для установок с бадьями небольшой емкости (до 10 т) приемлемым является использование одномерной схемы расчета, для бадей диаметром свыше 3 м более корректно расчет вести в цилиндрических координатах, считая распределение температур в горизонтальных сечениях пропорциональным радиусу.

Так как  $\alpha_k$  является функцией скорости потока, целесообразно при проектных работах провести расчеты параметров движения газов в слое на основе решений уравнений Навье–Стокса и Фурье–Кирхгофа, задавая градиенты температур по высоте слоя. Для этой цели можно использовать ППП ANSYS.

Примеры полученных решений представлены на рис. 7.11.

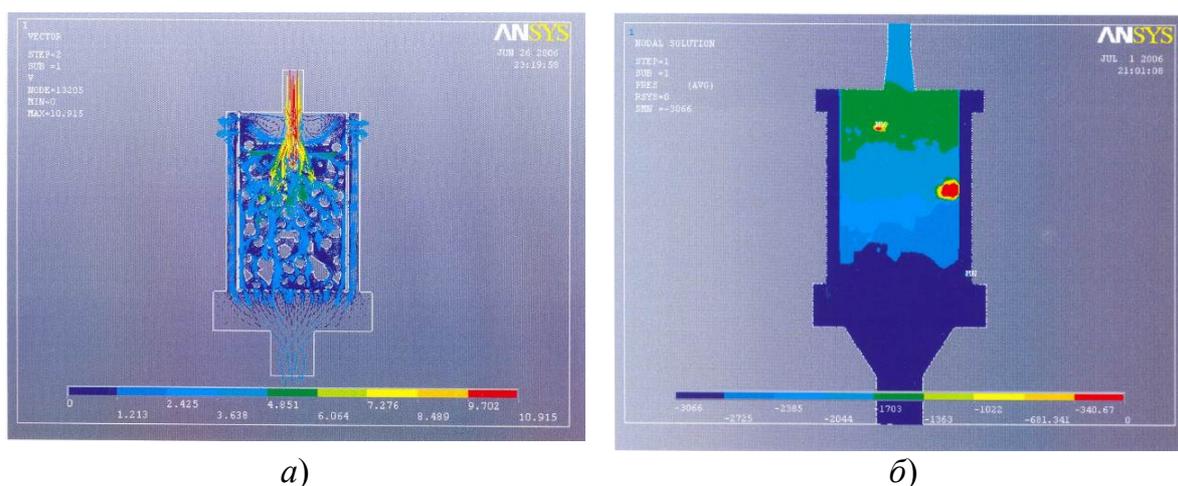


Рис. 7.11. Моделирование движения газов в слое шихты

Расчеты теплопередачи в кольцевом зазоре бадьи-термоса не представляют трудностей и могут быть выполнены путем расчета суммарной передачи тепла турбулентным воздушным потоком от стенки вставки к корпусу бадьи и излучением от той же вставки, учитывая принцип суперпозиции. При отсутствии движения – теплопроводностью через воздушный зазор и излучением. Последний фактор практически незначим до температуры вставки  $\leq 500$  °С.

Как показала практика, при использовании бадей емкостью 5–6 т и интенсивности нагрева 10–15 мин с интервалом до очередного ис-

пользования этой же бадьи 30–45 мин (работа с тремя бадьями) подача охлаждающего воздуха в кольцевой зазор не требуется (не обязательна). Потери тепла при этом уменьшаются на 5–10 %.

В выбросах установок подогрева шихты, работающих на природном газе, не содержится вредных веществ, присущих выбросам дуговых печей, и концентрации вредных веществ в отходящих газах, как правило, существенно ниже.

Однако при использовании сильно загрязненного тонколистового скрапа, стружки или брикетов, количество вредных веществ и прежде всего органики (ЛОС) соответственно возрастает. В этом случае необходимо их дожигать на выходе из бадьи. Время реакции горения отходящих газов рассчитывается по кинетическим уравнениям для каждого компонента включая ЛОС, и задается наибольшее. При температурах горения больших 750 °С это время составляет десятые доли секунды. Для увеличения эффективности дожигания целесообразно вводить факел горелки в камеру дожигания тангенциально.

Учитывая, что основание установок ВПШ в бадьях-термосах представляет собой футерованную камеру объемом, соизмеримым с бадьей, что обеспечивает необходимое время пребывания газов в зоне горения, для дожигания отходящих газов достаточно ввести в основании установки горелку-запальник.

По результатам промышленной эксплуатации получены следующие соотношения расходов энергоносителей, позволяющие оценить эффективность разработанных установок ВПШ в бадьях-термосах: при затратах природного газа на уровне 11–13 м<sup>3</sup>, сокращение расхода электроэнергии составило 150–180 кВт · ч на 1 т шихты. Меньшие расходы газа соответствуют условиям нагрева шихты с меньшей интенсивностью (скорость нагрева 1 м слоя за 10 мин) и приведенной толщиной кусков шихты 30–50 мм, большие цифры – для быстрого нагрева: примерно 2 м слоя за 10 мин и тонколистовом скрапе.

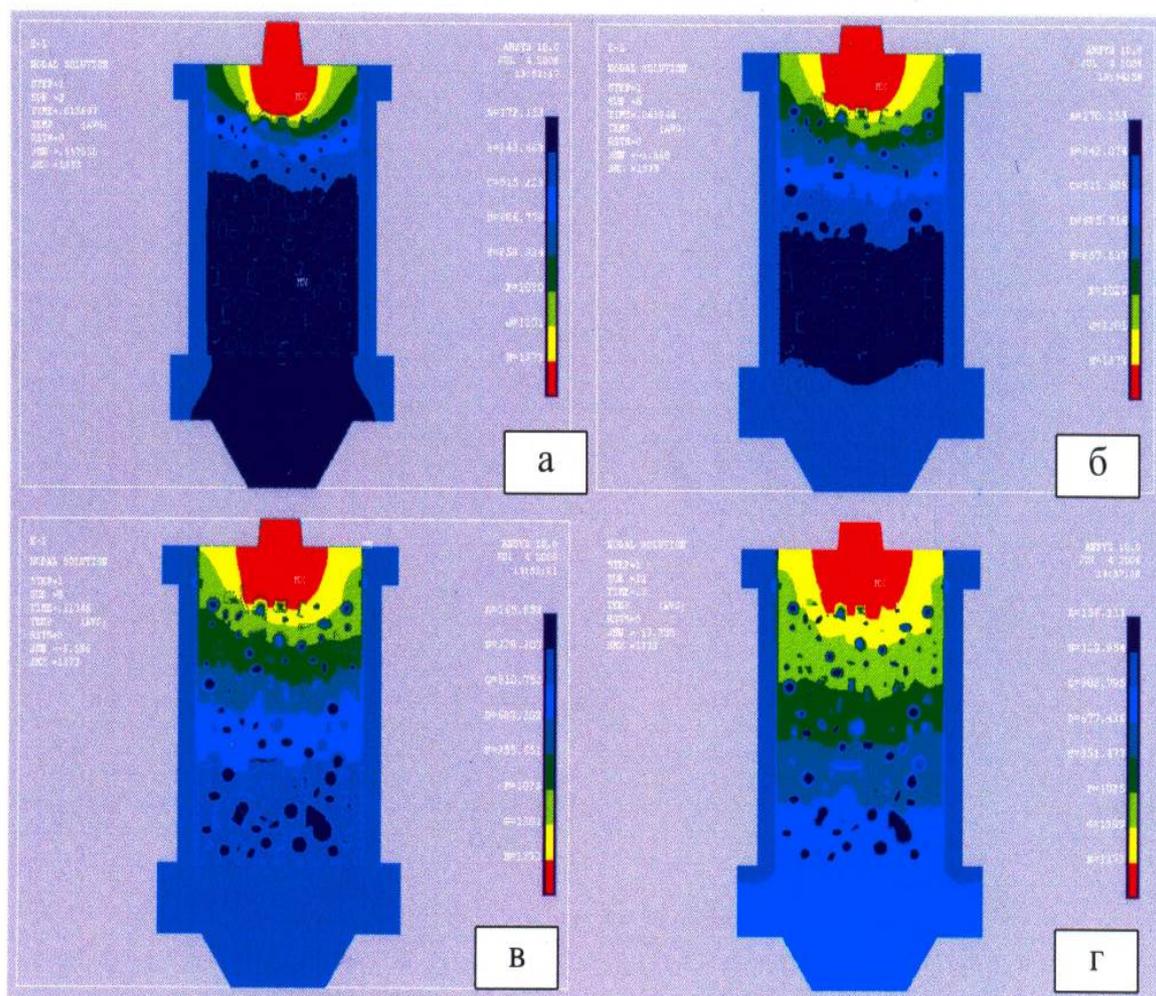
Высокий КПД установок ВПШ в бадьях-термосах обусловлен двумя факторами: во-первых, приведенная аккумулирующая теплоемкость слоя шихты – «водяное число» в расчете теплопередачи по методике Б. В. Китаева значительно больше «водяного числа» теплоносителя – продуктов сжигания газа, во-вторых – достаточно низкие температуры корпуса бадьи (корзины).

Количество тепла, теряемое бадьей в данных установках, при нагреве шихты до 750 °С незначительно. За время работы температура корпуса повышается от 0 до 300 °С (максимум). При этом потери тепла за счет естественной конвекции от вертикальной стенки корпуса (рис. 7.12)

со средней температурой 140–200 °С могут быть рассчитаны по уравнению

$$q = \alpha(t_H t_0) F \tau, \text{ кВт} \cdot \text{ч},$$

где  $\alpha_k = \kappa^4 \sqrt{t_H - t_0} + \frac{\sigma_0 \varepsilon (T_H^4 + T_0^4)}{t_H - t_0}$ , Вт/м<sup>2</sup>К – приведенный коэффициент теплоотдачи, учитывающий естественную конвекцию и излучение;  $\tau$  – время.



*Рис. 7.12.* Компьютерное моделирование нагрева шихты в загрузочных бадьях-термосах:

- а* – распределение давлений в бадье при наличии дополнительной подачи воздуха со скоростью 3 м/с в зазор;
- б* – суммарные значения мгновенных скоростей газового потока в моделируемом слое шихты,  $v_0 = 10$  м/с;
- в* – изменение во времени поля температур в слое шихты при  $v_0 = 10$  м/с и  $t_{\text{газ}} = 1200$  °С

Для вертикальных поверхностей коэффициент  $\kappa = 2,4$ ; коэффициент излучения  $\sigma_0 = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт/м}^2\text{К}^4$ , при степени черноты  $\varepsilon = 0,8$  (для стального листа). Отсюда:  $\alpha \approx 2 - 9 \text{ Вт/м}^2\text{К}$ . За 15 мин работы потери составят примерно 2–3 МДж на 1 т шихты, что эквивалентно расходу газа  $\sim 0,12 \text{ м}^3/\text{т}$  шихты.

Количество тепла, уносимое воздухом, продуваемым через кольцевой зазор, зависит от интенсивности продувки и температуры вставки.

Тепло передается конвекцией (вынужденной), так как излучение от вставки не может сколько-нибудь заметно восприниматься воздухом.

Плотность теплового потока в зазоре можно рассчитать при этом по формуле для расчета количества тепла, передаваемого от дымовых газов к воздуху через металлическую стенку:

$$Q = K \Delta t_{\text{cp}} F_3, \text{ кДж},$$

где  $K$  – суммарный коэффициент теплопередачи;  $K = \alpha_{\text{в}} \alpha_{\text{д}} / (\alpha_{\text{в}} + \alpha_{\text{д}})$ ;  $\Delta t_{\text{cp}}$  – средняя логарифмическая разность температур газов и воздуха;

$$\Delta t_{\text{cp}} = \frac{\Delta t_{\text{н}} - \Delta t_{\text{к}}}{\ln \Delta t_{\text{н}} / \Delta t_{\text{к}}}.$$

Здесь  $\Delta t_{\text{н}}$ ,  $\Delta t_{\text{к}}$  – разность температур газов внутри бадьи и воздуха в кольцевом зазоре в верхней и нижней части бадьи. В данном случае отношение  $\Delta t_{\text{н}}/\Delta t_{\text{к}} \approx 3$ , т. е. больше критического значения – 0,6, и поэтому  $\Delta t_{\text{cp}}$  можно рассчитывать как среднеарифметическое.

В данном случае тепло передается практически только за счет конвекции от дымовых газов к стенке обечайки и от нее воздуху, т. е.  $\alpha_{\text{в}} = \alpha_{\text{кв}}$  и  $\alpha_{\text{в}} \alpha_{\text{кд}}$ .

Скорость движения дымовых газов внутри бадьи составляет ориентировочно 10–15 м/с при рабочих условиях и порозности  $< 0,4$ .

Коэффициент теплопередачи в этих условиях составляет  $K = 18 - 20 \text{ Вт/м}^2 \cdot \text{К}$ .

Отсюда потери составят при максимальной продувке до 30 МДж/т, или  $\sim 0,86 \text{ м}^3$  природного газа на 1 т шихты. Эти потери могут быть исключены при использовании для нагрева шихты нескольких сменных бадей, позволяющих обеспечить паузу между циклами нагрева шихты для охлаждения корпуса. На практике это количество составляет 2–3 бадьи на одну установку ВПШ.

Таким образом, потери тепла в установках ВПШ с бадьями-термосами обусловлены практически только температурой отходящих газов и легко поддаются контролю и управлению.

## 7.6. Моделирование режимов работы и оптимизация конструкций литниково-питающих систем для условий получения отливок из чугуна в разовых песчано-глинистых формах

Проблема автоматизированного выбора литниковых систем (рис. 7.13) на основе задач классификации объектов типа «отливка – литниковая система – литейная форма – стержни» является актуальной, так как от ее решения зависит уровень потенциала автоматизации технологической подготовки производства, а также снижение себестоимости, повышение качества отливок и снижение удельных материальных затрат на их производство.

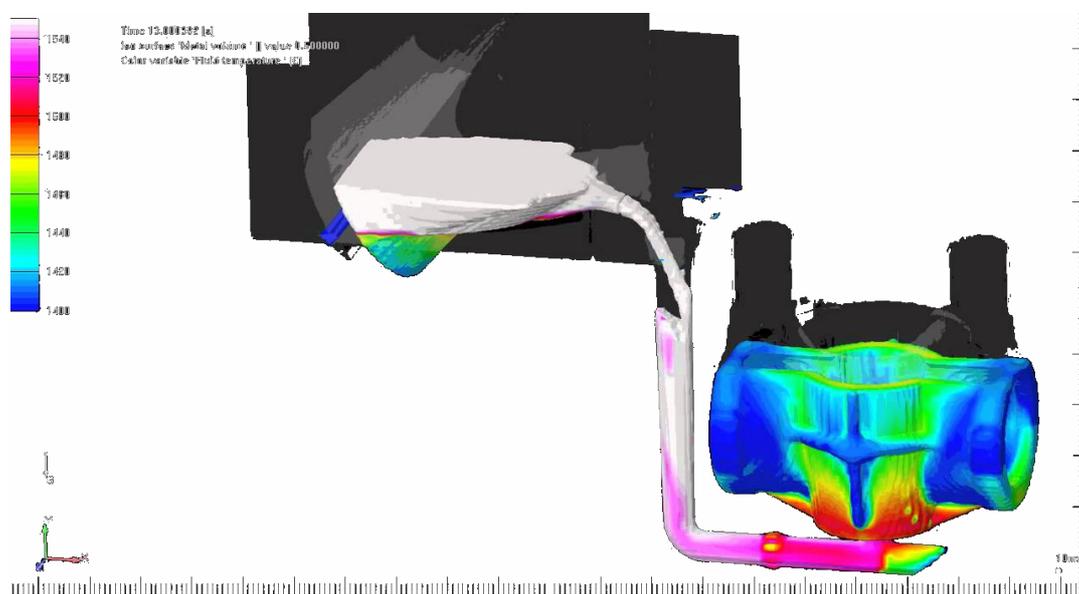


Рис. 7.13. Пример комплексной имитации процесса заливки отливки расплавом

Методы, сочетающие компьютерное моделирование проектируемого изделия с экспериментальным подтверждением адекватности принятых конструкторских решений и используемых моделей, при сокращенном объеме экспериментальных исследований обеспечивают оптимальный баланс между точностью и стоимостью проекта. В дальнейшем, при проектировании аналогичных конструкций и устройств, проведение экспериментов на натуральных образцах не требуется, достаточно получить подтверждение технических характеристик на верифицированных компьютерных моделях.

Фактический цикл оптимизации (рис. 7.14) инициируется путем создания первого поколения ограничений, т. е. набора условий решений, содержащих определенное пользователем количество индивидуальных параметров, называемое начальной группой. В общем случае такое планирование может быть реализовано с использованием теории планирования экспериментов. Каждый индивид представляет одну конфигурацию для рассматриваемого набора переменных проектирования. Для каждой из этих конструкций выполняется анализ затвердевания и твердотельного охлаждения и рассчитываются значения для запрашиваемых выходных переменных. Выходные данные используются для оценки и сравнения различных конструкций. После вычисления первого поколения алгоритм оптимизации оценивает конструкции по объективным функциям и ограничениям, а затем генерирует новый набор решений с использованием математических механизмов, которые следуют концепции естественной генетики.

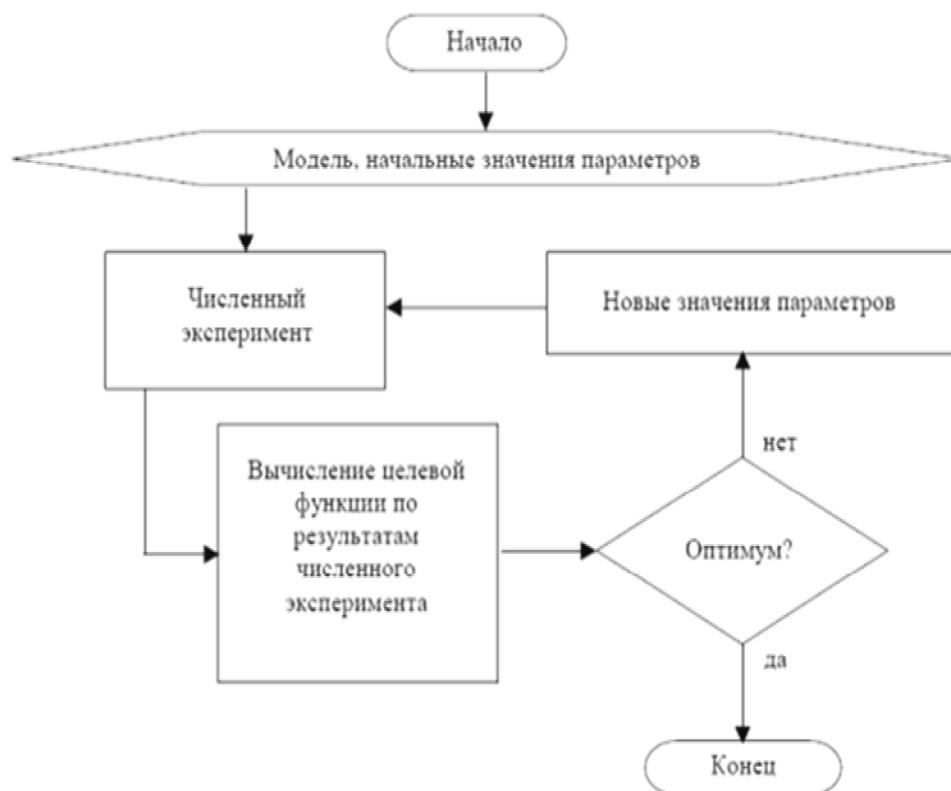


Рис. 7.14. Цикл оптимизации

В связи с тем, что понятие «качество отливки» является весьма емким и содержит большое число показателей, ни один из которых не может быть измерен непосредственно в процессе работы, можно

управлять качеством процесса по косвенным показателям. Выбор косвенного показателя качества (критерия оптимальности) должен удовлетворять двум условиям: он должен быть связан с варьируемыми параметрами процесса и отражать качество отливки. В качестве критериев оптимальности были предложены критерии, приведенные в табл. 7.1 и являющиеся функциями температурного поля.

Таблица 7.1

**Критерии оптимальности**

<b>Критерий</b>	<b>Описание</b>
$I_1 = \int_0^L \int_{\xi}^R \sqrt{\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial r}\right)^2} dxdr \rightarrow \min$	Минимизация градиентов температур по толщине затвердевшей корки
$I_2 = \int_0^L \int_{\xi}^R \left  \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right) - \left(\frac{\partial T}{\partial r}\right) \right  dxdr \rightarrow \min$	Равномерность теплоотвода внутри затвердевшей корочки
$I_3 = \int_0^L \int_{\xi}^R \left  \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial r} \right  dxdr \rightarrow \min$	Линейность распределения температуры в продольном сечении затвердевающей части слитка
$I_4 = \int_0^L \int_0^R \left  \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial r} \right  dxdr \rightarrow \min$	Равенство скорости охлаждения поверхности слитка в каждый момент времени скорости охлаждения при окончании затвердевания (приближение к режиму охлаждения, без термических напряжений)
$I_5 = \int_0^L \int_0^R \left  \frac{\text{grad}_x T}{\text{grad}_r T} \right  dxdr \rightarrow \min$	Скорость продвижения фронта затвердевания, которая определяет направление и характер роста кристаллов
$I_6 = \frac{1}{5} I_1 + \frac{1}{5} I_2 + \frac{1}{5} I_3 + \frac{1}{5} I_4 + \frac{1}{5} I_5 \rightarrow \min$	«Свертка» по пяти критериям с весовыми коэффициентами 1/5

Задача оптимизации ставилась следующим образом: необходимо получить отливку слиток, температурное поле которой в процессе получения удовлетворяет заданным критериям ( $I_1$ – $I_6$ ) при заданных ограничениях на технологические параметры литья.

Математическая постановка задачи может быть сформулирована как минимизация функционала:

$$\Phi = I_j \rightarrow \min; \quad j = 1 \dots 6 \quad (7.1)$$

при заданных краевых условиях

$$\varphi_i(X) = 0; \quad i = 1, \dots, m_1 \quad (7.2)$$

и ограничениях

$$U_i^{\min} \leq U_i \leq U_i^{\max}; i = 1, \dots, n; \quad (7.3)$$

$$\Psi_i(U) = 0; i = 1, \dots, m_2; \quad (7.4)$$

$$S_i(U) \leq 0; i = 1, \dots, m_3, \quad (7.5)$$

где  $x$  – вектор фазовых координат, вектор параметров состояния, компоненты которого измеряются (контролируются), но не регулируются;  $U$  – вектор параметров управления, компоненты которого контролируются и регулируются;  $n$  – количество оптимизируемых параметров (координат вектора управления);  $U_i^{\max}$  и  $U_i^{\min}$  – максимальное и минимальное значения  $i$ -го оптимизируемого параметра  $U_i$ ;  $m_1$  – количество ограничений типа (7.1);  $m_2$  – количество ограничений типа (7.3);  $m_3$  – количество ограничений типа (7.4).

В качестве оптимизируемых технологических параметров литья были взяты следующие параметры:  $U_1$  – скорость литья;  $U_2$  – температура расплава;  $U_3$  – температура охлаждающей воды;  $U_4$  – длина кристаллизатора;  $U_5$  – время останова для дискретно-непрерывного литья.

### **Метод случайного поиска с самообучением и адаптацией рабочего шага**

1. Формируется вспомогательная функция:

$$F = \Phi + \sum_{i=1}^{m_1} K_i \lambda_i \varphi_i^2(X) + \sum_{i=1}^{m_2} K_i \lambda_i \psi_i^2(U) + \sum_{i=1}^{m_3} K_i \lambda_i S_i^2(U), \quad (7.6)$$

где  $K_i = 1$  при выполнении условий (7.3)–(7.5) и  $K_i = 0$  при их не выполнении;  $\lambda_i = 1$  – случайные числа, равномерно распределенные на интервале  $[-1, 1]$ .

2. Из начальной точки  $U_k = 0$  делаются пробные шаги исходя из соотношений:

$$U_{ik}^z = U_{ik} + CA_i^z \Delta U_i,$$

где  $z$  – номер пробного шага;  $k$  – номер рабочего шага;  $C$  – величина

пробного шага;  $\Delta U_i$  – заданные значения приращений оптимизируемых параметров;

$$A_i^z = \frac{\eta \lambda_i + W_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (\eta \lambda_i + W_i)^2}}, \quad i = 1, \dots, n,$$

здесь  $W_i$  – компоненты вектора памяти;  $\eta$  – параметр сектора поиска.

3. На каждом пробном шаге определяется значение функции  $F$  и ее приращение:

$$\Delta F_z = F_k - F_z.$$

4. После того как произведено  $z_{\text{зад}}$  пробных шагов, находится минимальное значение приращения функции:

$$\Delta F_{\min} = \min \{ \Delta F_k \}.$$

5. Самообучение производится либо на пробных шагах по формуле

$$W_i^{z+1} = K_{\text{заб}} W_i^z - \delta_{\text{об}} \text{sign}(\Delta F_k \Delta X_i),$$

либо на рабочем шаге:

$$W_i^{k+1} = K_{\text{заб}} W_i^k - \delta_{\text{об}} \text{sign}(\Delta F_{\min} \Delta X_{i \min}),$$

где  $\delta_{\text{об}}$  – параметр обучения;  $K_{\text{заб}}$  – коэффициент забывания.

6. Рабочий шаг делается в направлении лучшей пробы:

$$X_{i,k+1} = X_{ik} + a \Delta X_{i \min},$$

где  $a$  – величина рабочего шага, адаптация которого производится исходя из соотношений:

$$a = \begin{cases} a + \Delta a & \text{при } \Delta F_{\min_{i+1}} < \Delta F_{\min_i}, \\ a - \Delta a & \text{при } \Delta F_{\min_{i+1}} \geq \Delta F_{\min_i}, \end{cases}$$

здесь  $\Delta a$  – величина приращения рабочего шага.

7. Выход из процесса осуществляется при условии  $\Delta F_{\min} > 0$ . Предварительно перед этим производится  $\beta$ -кратное увеличение числа пробных шагов и  $\alpha$ -кратное деление величины пробного шага.

8. Для достижения заданной точности выполнения условий производится  $\eta$ -кратное увеличение штрафных коэффициентов для невыполненных ограничений.

9. Для повышения эффективности случайного поиска желательна предварительная настройка его параметров ( $K_{заб}$ ,  $\delta_{об}$ ,  $\eta$ ,  $S_0$ ,  $\lambda_{зад}$ ) и др.

При этом предполагается, что процесс литья описывается некоторой системой дифференциальных уравнений. Алгоритм метода случайного поиска представлен на рис. 7.15.

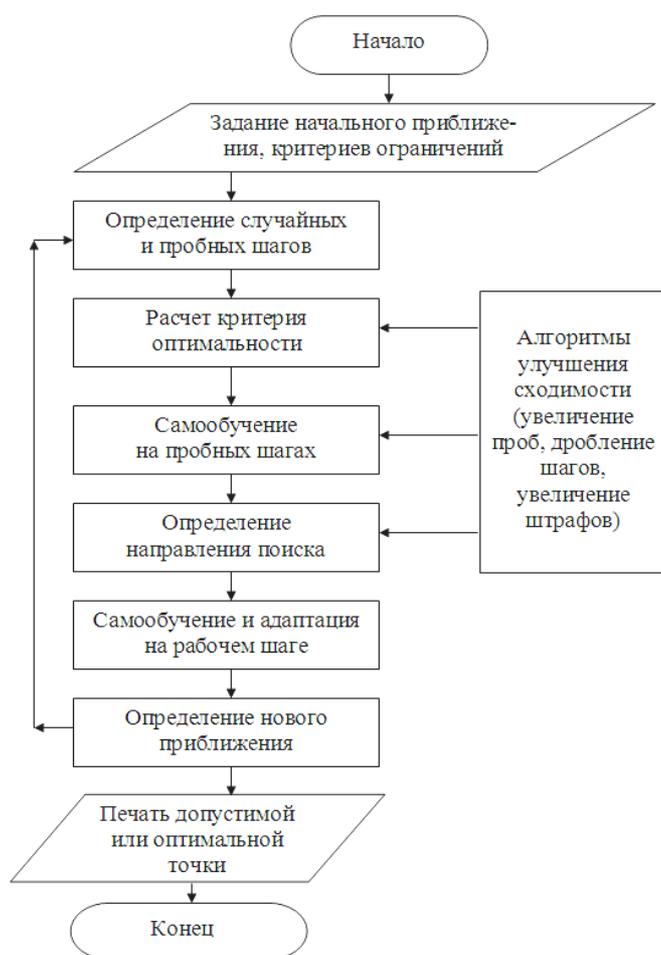


Рис. 7.15. Алгоритм решения задачи оптимизации

К несомненным преимуществам данного метода оптимизации по сравнению с градиентными методами следует отнести существенно меньшие затраты машинного времени при большом числе оптимизируемых параметров, простоту учета функциональных ограничений и краевых условий, высокую помехозащищенность.

Как показал опыт использования данного метода для оптимизации процессов литья металлов, затраты машинного времени для него определяются в основном затратами времени на расчет критерия оптимальности (решения уравнений процесса). Так, при решении задачи получения оптимальных значений технологических параметров размерность вектора управления равнялась пяти, а время решения на компьютере составляло (в зависимости от выбранного функционала) от 10 до 30 минут.

Переход на цифровое описание изделий – CAD и появившиеся вслед за CAD аддитивные технологии произвели настоящую революцию в литейном деле, что особенно рельефно проявилось именно в высокотехнологичных отраслях – авиационной и аэрокосмической области, атомной индустрии, медицине и приборостроении, в отраслях, где характерным является мелкосерийное, а зачастую штучное (в месяц, год) производство. Именно здесь уход от традиционных технологий, применение новых методов получения литейных синтез-форм и синтез-моделей за счет технологий послойного синтеза дало возможность радикально сократить время на создание продукции.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Современный этап развития технологий характеризуется чрезвычайно быстрой сменой моделей выпускаемой продукции, все большим количеством разработок, осуществляемых по новым, ранее неизвестным принципам, предлагающим продукцию более высоких потребительских качеств и жесткой конкуренцией на рынке сбыта товаров и услуг. Эти факторы в металлургической отрасли даже более актуальны, чем в среднем по совокупности экономических направлений производства товаров, технологий, информационных продуктов и сервиса. Энергоемкость и ресурсоемкость металлургии формирует разнонаправленную динамику тенденций роста или наоборот снижения производства по странам и регионам. При этом главным фактором стратегий успешного роста производства является интегральная эффективность на базе интеллектуальных инженерных и экономических инноваций.

Это приводит к необходимости интенсификации процессов создания новых технологий, повышения качества проектов, разработки и организации производства конкурентоспособной продукции в сжатые сроки. При этом достигается снижение затрат финансовых и трудовых ресурсов, рентабельности производства и прогнозируемой прибыли.

В этих условиях большое значение имеют время и качество выполнения проектных работ. Соответствие современным требованиям может быть обеспечено применением новых технологий, основанных на использовании методов математического моделирования и компьютерных инструментов геометрического моделирования.

Безусловно, новый технический объект должен превосходить существующие. Это достигается за счет соответствующей стратегии проектирования, направленной на достижение высокого технического уровня и высокой эффективности создаваемого продукта. Задачи, решаемые в соответствии с этой стратегией, носят оптимизационный характер и требуют разработки и применения новой технологии проектирования. Во многих случаях проблемы решаются за счет эффективного применения технологий планирования эксперимента. Также они актуальны в сфере научных исследований, в том числе проводимых в производственных условиях металлургических цехов.

Учебным планом подготовки металлургов предусмотрен ряд дисциплин, позволяющих освоить программирование, математиче-

ское моделирование технических объектов, компьютерную графику, технологии автоматизированного проектирования, программные приложения, а также изучить современные компьютерные технологии и научиться использовать их в прикладной работе. Математическое моделирование технических объектов как дисциплина в подготовке инженеров-металлургов является фундаментальной дисциплиной, которая формирует не только профессиональный профиль будущего специалиста, но и одновременно закладывает основы для его непрерывного самообучения и повышения квалификационной ценности. Несомненно, что инженер-проектировщик металлургического оборудования должен иметь четкое представление о типах математических моделей и методах их построения, о том, как работают технические объекты и о методах их моделирования, о разработке алгоритмических моделей и их эффективной реализации с использованием современных компьютерных технологий.

## Литература

1. Аверченков, В. И. Основы математического моделирования технических систем : учеб. пособие / В. И. Аверченков, В. П. Федоров, М. Л. Хейфец. – 4-е изд., стер. – М. : ФЛИНТА, 2021. – 271 с.
2. Анисович, Г. А. Затвердевание отливок / Г. А. Анисович. – Минск : Наука и техника, 1979. – 242 с.
3. Асаи, К. Прикладные нечеткие системы : пер. с яп. / К. Асаи, Д. Ватада, С. Иван. – М. : Мир, 1993. – 368 с. : ил.
4. Бахвалов, Н. С. Численные методы / Н. С. Бахвалов. – М. : Наука, 1975. – 631 с.
5. Белоцерковский, О. М. Численные методы в механике сплошных сред / О. М. Белоцерковский. – М. : Наука, 1984. – 519 с.
6. Берестова, С. А. Математическое моделирование в инженерии: учебник / С. А. Берестова, Н. Е. Мисюра, Е. А. Митюшов. – Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2018. – 244 с.
7. Новый политехнический словарь / под ред. А. Ю. Ишлинского. – М. : Большая рос. энцикл., 2003. – 671 с.
8. Компьютерное моделирование и автоматизация технологических процессов в машиностроении : учеб. пособие / Б. В. Бондин [и др.]. – Самара : Самар. гос. техн. ун-т, 2008. – 91 с.
9. Борисов, А. Н. Принятие решения на основе нечетких моделей / А. Н. Борисов, О. А. Крумберг, И. П. Федоров. – Рига : Зинатне, 1990. – 184 с.
10. Булгакова, А. И. Планирование эксперимента в литейной технологии : учеб. пособие / А. И. Булгакова ; ГАЦ-МиЗ. – Красноярск, 2003. – 64 с.
11. Бусленко, Н. П. Моделирование сложных систем. – М. : Наука, 1978. – 400 с.
12. Вдовин, Р. А. Компьютерное моделирование технологического процесса литья деталей двигателей в модуле Visual-Mesh программного продукта ProCast : учеб. пособие / Р. А. Вдовин. – Самара : Изд-во Самар. ун-та, 2019. – 108 с.
13. Вейник, А. И. Расчет отливки / А. И. Вейник. – М. : Машиностроение, 1964. – 249 с.
14. Веников, В. А. Теория подобия и моделирования / В. А. Веников, Г. В. Веников. – М. : Высш. шк., 1984. – 439 с.
15. Габасов, Р. Методы оптимизации / Р. Габасов, Ф. М. Кирилова. – Минск : Изд-во БГУ, 1975. – 279 с.

16. Гаврилова, Т. А. Базы знаний интеллектуальных систем / Т. А. Гаврилова, В. Ф. Хорошевский. – СПб. : Питер, 2001. – 384 с.
17. Горбань, А. Н. Нейронные сети на персональном компьютере / А. Н. Горбань, Д. А. Россиев. – Новосибирск : Наука, 1996. – 276 с.
18. Физическое моделирование технических систем сталеплавильного производства : учеб. пособие / С. П. Еронько [и др.]. – Москва ; Вологда : Инфра-Инженерия, 2021. – 324 с.
19. Ефименко, А. З. Системы управления предприятиями строительной индустрии и модели оптимизации : учеб. пособие / А. З. Ефименко – М. : МГСУ, 2011. – 304 с.
20. Ефимов, В. А. Разливка и кристаллизация стали / В. А. Ефимов. – М. : Металлургия, 1976. – 552 с.
21. Ефимов, В. А. Физические методы воздействия на процессы затвердевания сплавов / В. А. Ефимов, А. С. Эльдарханов. – М. : Металлургия, 1995. – 272 с. : ил.
22. Жуков, А. Д. Решение технологических задач методами математического моделирования : монография / А. Д. Жуков, А. В. Чугунков, В. А. Рудницкая. – М. : МГСУ, 2011. – 176 с.
23. Зиндлер, Е. З. Реинжиниринг + информационные технологии = новое системное проектирование / Е. З. Зиндлер // Открытые системы. – 1996. – № 1. – С. 56–59.
24. Информационные технологии в наукоемком машиностроении. Компьютерное обеспечение индустриального бизнеса / под ред. А. Г. Братухина. – Киев : Техника, 2001. – 625 с.
25. Каллан, Р. Основные концепции нейронных сетей / Р. Каллан. – М. : Вильямс, 2001. – 288 с.
26. Каплун, А. Б. ANSYS в руках инженера : практ. рук. / А. Б. Каплун, Е. М. Морозов, М. А. Олферьева. – М. : Едиториал УРСС, 2003. – 272 с.
27. Карпов, Ю. Г. Имитационное моделирование систем. Введение в моделирование с AnyLogic 5. – СПб. : БХВ-Питер, 2005. – 400 с.
28. Технология литейного производства : учеб. для вузов / Ю. И. Категоренко [и др.] ; под ред. Ю. И. Категоренко, В. М. Миляева ; Рос. гос. проф.-пед. ун-т. – 2-е изд., перераб. и доп. – Екатеринбург : Изд-во РГППУ, 2018. – 684 с. – Режим доступа: <http://elab.rsvpu.ru/handle/978-5-8050-0641-9>.
29. Клебанов, Я. М. Современные методы компьютерного моделирования процессов деформирования конструкций : учеб. пособие / Я. М. Клебанов, В. Г. Фокин, А. Н. Давыдов. – Самара : Самар. гос. техн. ун-т, 2004. – 100 с.

30. Кондаков, А. И. САПР технологических процессов : учеб. для студентов высш. учеб. заведений / А. И. Кондаков. – М. : Академия, 2007. – 272 с.
31. Краснов, М. В. UNIGRAPHICS для профессионалов / М. В. Краснов, Ю. В. Чигищев. – М. : Лори, 2004. – 319 с.
32. Краснова, Е. В. Организация эксперимента : учеб, пособие / Е. В. Краснова ; Краснояр. гос. акад. цвет. металлов и золота. – Красноярск : КГАЦМиЗ, 1996. – 134 с.
33. Круглов, В. В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика. / В. В. Круглов, В. В. Борисов. – М. : Горячая линия – Телеком, 2002. – 382 с. : ил.
34. Кутателадзе, С. С. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление / С. С. Кутателадзе. – М. : Энергоатомиздат, 1990. – 366 с.
35. Ли, К. Основы САПР (CAD/CAM/CAE) / К. Ли. – СПб. : Питер, 2004. – 560 с.
36. Львовский, Е. Н. Статистические методы построения эмпирических формул / Е. Н. Львовский. – М. : Высш. шк., 1988. – 239 с.
37. Макаров, Е. Инженерные расчеты в MathCAD / Е. Макаров. – СПб. : Питер, 2003. – 448 с.
38. Максимов, Ю. М. Математическое моделирование металлургических процессов / Ю. М. Максимов, И. М. Рожков, М. А. Саакян. – М. : Металлургия, 1976. – 288 с.
39. Медведев, В. С. Нейронные сети / В. С. Медведев, В. Г. Потемкин. – М. : ДИАЛОГ-МИФИ, 2002. – 496 с.
40. Морозов, В. К. Моделирование информационных и динамических систем : учеб. пособие для студентов высш. учеб. заведений / В. К. Морозов, Г. Н. Рогачев. – М. : Академия, 2011. – 384 с.
41. Моисеев, В. С. Методология автоматизированного проектирования литниково-питающих систем для отливок / В. С. Моисеев, А. А. Неуструев // Литейное пр-во. – 1992. – № 12. – С. 9–10.
42. Моисеев, В. С. Оптимизационный подход к расчету литниково-питающих систем и средств воздействия на направленное затвердевание / В. С. Моисеев, А. Ф. Смыков // Литейное пр-во. – 2000. – № 7. – С. 49–51.
43. Новик, Ф. С. Планирование эксперимента на симплексе при изучении металлических систем / Ф. С. Новик – М. : Металлургия, 1985. – 256 с.
44. Новик, Ф. С. Оптимизация процессов технологии металлов методами планирования экспериментов / Ф. С. Новик, Я. Б. Арсов. – М. : Машиностроение, 1980. – 304 с.

45. Норенков, И. П. Информационная поддержка наукоемких изделий. CALS – технологии / И. П. Норенков, П. К. Кузьмик. – М. : Изд-во МГГУ им. Баумана, 2002. – 320 с.
46. Норенков, И. П. Основы автоматизированного проектирования / И. П. Норенков. – М. : Изд-во МГГУ им. Баумана, 2002. – 336 с.
47. Носов, Н. В. Расчет надежности и качества технологических процессов / Н. В. Носов. – Самара : СамГТУ, 1992. – 127 с.
48. Организация эксперимента. Планирование эксперимента в процессах ОДМ : метод. указания к выполнению курсовой работы / С. Д. Прокошкин [и др.]. – М. : МИСиС, 2003. – 156 с.
49. Организация эксперимента : метод. указания к лаборатор. и практ. работам для студентов специальностей 110500 «Металловедение и термическая обработка металлов» и 110400 «Литейное производство черных и цветных металлов» / сост. Е. В. Краснова, Т. Р. Гильманшина ; ГОУ ВПО «Гос. ун-т цвет. металлов и золота». – Красноярск, 2006. – 72 с.
50. Организация эксперимента : метод. указания к практ. и лаборатор. занятиям по курсу «Организация эксперимента» для студентов специальности «Литейное производство черных и цветных металлов» / сост. А. И. Булгакова ; Краснояр. гос. акад. цвет. металлов и золота. – Красноярск : КГАЦМиЗ, 1999. – 44 с.
51. Потемкин, А. Трехмерное твердотельное моделирование / А. Потемкин. – М. : КомпьютерПресс, 2002. – 296 с.
52. Программа моделирования литейных процессов LVMFlow. Версия 4.5. Руководство пользователя / сост. В. В. Турищев ; НПО «МКМ» – Ижевск, 2012. – 153 с.
53. Рогов, В. А. Методика и практика технических экспериментов : учеб. пособие для студентов высш. учеб. заведений / В. А. Рогов, Г. Г. Позняк. – М. : Академия, 2005. – 288 с.
54. Рутковская, Д. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы : пер. с пол. / Д. Рутковская, М. Пилиньский, Л. Рутковский. – М. : Горячая линия – Телеком, 2004. – 452 с.
55. Рыжиков, Ю. И. Имитационное моделирование. Теория и технологии / Ю. И. Рыжиков. – М. : Альтекс, 2004. – 384 с.
56. Самарский, А. А., Михайлов, А. П. Математическое моделирование : Идеи, Методы. Примеры. – М. : Физматлит, 2001. – 320 с.
57. Семенкин, Е. С. Метод обобщенного адаптивного поиска для синтеза систем управления сложными объектами / Е. С. Семенкин, В. А. Лебедев. – М. : МАКС Пресс, 2002. – 320 с.

58. Семенкин, Е. С. Оптимизация технических систем : учеб. пособие / Е. С. Семенкин, О. Э. Семенкина, С. П. Коробейников. – Красноярск : СИБУП, 1996.

59. Семенкин, Е. С. Адаптивные поисковые методы оптимизации сложных систем / Е. С. Семенкин, О. Э. Семенкина, С. П. Коробейников. – Красноярск : СИБУП, 1997. – 355 с.

60. Советов, Б. Я. Моделирование систем : учеб. для вузов / Б. Я. Советов, С. А. Яковлев. – М. : Высш. шк., 2003. – 320 с.

61. Информационно-вычислительные системы в машиностроении: САЛ-Технологии / Ю. М. Соломенцев [и др.] – М. : Наука, 2003. – 292 с.

62. Математическое моделирование металлургических процессов в АСУ ТП / Н. А. Спиринов [и др.] ; под ред. Н. А. Спирина. – Екатеринбург, 2014. – 558 с.

63. Судов, Е. В. Интегрированная поддержка жизненного цикла машиностроительной продукции. Принципы. Технологии. Методы. Модели / Е. В. Судов. – М. : Издат. дом МВМ, 2003. – 264 с.

64. Тихонов, А. Н. Методы и системы поддержки принятия решений / А. Н. Тихонов, В. Я. Цветков. – М. : МАКС Пресс, 2001. – 312 с.

65. Тарасик, В. П. Математическое моделирование технических систем : учеб. для вузов / В. П. Тарасик. – Минск : Новое знание ; М. : ИНФРА-М, 2016. – 591 с. : ил.

66. Введение в математическое моделирование / под ред. П. В. Трусова. – М. : Логос, 2007. – 440 с. : ил.

67. Трушин, С. И. Метод конечных элементов. Теория и задачи / С. И. Трушин. – М. : Ассоциация строит. вузов, 2008. – 256 с.

68. Хайкин, С. Нейронные сети : полный курс : пер. с англ. / С. Хайкин. – 2-е изд. – М. : Вильямс, 2006. – 1104 с. : ил.

69. Хакимянов, Г. С. Математическое моделирование : учеб. пособие : в 2 ч. / Г. С. Хакимянов. – Новосибирск : Новосиб. гос. ун-т, 2010. – Ч. 1. – 148 с.

70. Хаммер, М. Реинжиниринг корпорации: Манифест революции в бизнесе / М. Хаммер, Дж. Чампи ; пер с англ. Ю. Е. Корилюкович. – М. : МАНН, Иванов и Фербер, 2006. – 71 с.

71. Химмельблау, Д. Анализ процессов статистическими методами / Д. Химмельблау ; пер. с англ. В. Д. Скаржинского ; под ред. В. Г. Горского. – М. : Мир, 1973. – 960 с.

72. Черепашков, А. А. Компьютерные технологии. Создание, внедрение и интеграция промышленных автоматизированных систем

в машиностроении : учеб. пособие / А. А. Черепашков. – Самара : Самар. гос. техн. ун-т, 2008. – 143 с.

73. Черепашков, А. А. Основы САПР в машиностроении : учеб. пособие / А. А. Черепашков. – Самара : Самар. гос. техн. ун-т, 2008. – 133 с.

74. Шелофаст, В. В. Основы проектирования машин / В. В. Шелофаст. – М. : Изд-во АПМ, 2000. – 472 с.

75. Branke, J. Memory Enhanced Evolutionary Algorithms for Changing Optimization Problems / J. Branke // in: Congress on Evolutionary 6–9 July 1999 co-simulation, Institute AIFB, University of Karlsruhe, 1999. – P. 1875–1882.

76. Coello Coello, C. A. A comprehensive survey of evolutionary-based multiobjective optimization techniques / A. Coello Coello Carlos // Knowledge and Information Systems. – Laboratorio Nacional de Informatica Avanzada, Veracruz, Mexico, 1999. – P. 269–308.

77. Coello Coello, C. A. An empirical study of evolutionary techniques for multiobjective optimization in engineering design / C. A. Coello Coello // PhD thesis / Department of computer science ; Tulane university, New Orleans, apr. 1996. – P. 311.

78. Deb, K. Multi-objective Optimization using Evolutionary Algorithms. / K. Deb. – Chichester, UK : Wiley, 2001. – 518 p.

79. A Fast and Elitist Multi-objective Genetic Algorithm: NSGA II / K. Deb [et al.] // KanGAL Report No. 6 (2) 200001. Indian Institute of Technology; Kanpur, India, 2000. – P. 149–177 (2002).

80. Fonseca, C. M. Multiobjective optimization and multiple constraint handling with evolutionary algorithms / C. M. Fonseca, P. J. Fleming, – Part I: A unified formulation // Technical report 564 // EEE Transactions on Systems Man, and Cybernetics University of Sheffield, UK, January 1998. – P. 128(1).

81. Goldberg, D. E. Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning / D. E. Goldberg. – Massachusetts : Addison-Wesley, 1989. – 432 p.

82. Koski, J. Multi-criteria Design Optimization / J. Koski, A. Oszczycka. – Springer. – Verlag, 1990. – 154 p.

83. Michalewicz, Z. Genetic algorithms, numerical optimization and constraints / Z. Michalewicz // proc. of the 6 th Int. Conf. on Genetic Algorithms and their Applications. – Pittsburgh : PA, 1995. – P. 151–158.

84. Режим доступа: <http://www.3ds.com/>.

85. Режим доступа: <http://www.ansys.ru/>.

86. Режим доступа: <http://www.apm.ru/>.
87. Режим доступа: <http://www.arenasimulation.com/>.
88. Режим доступа: <http://www.ascon.ru/>.
89. Режим доступа: <http://www.autodesk.ru/>.
90. Режим доступа: <http://www.autoform.com/>.
91. Режим доступа: <http://www.bee-pitron.ru/>.
92. Режим доступа: <http://www.bham.ac.uk/>.
93. Режим доступа: <http://www.bmstu.ru/>.
94. Режим доступа: <http://www.cadcamcae.lv/>.
95. Режим доступа: <http://www.cadfem.ru/>.
96. Режим доступа: <http://www.cals.ru/>.
97. Режим доступа: <http://www.calscenter.com/>.
98. Режим доступа: <http://www.calsnet.ru/>.
99. Режим доступа: <http://www.cam.ac.uk/>.
100. Режим доступа: <http://www.camwork.de/>.
101. Режим доступа: <http://www.castech.fi/>.
102. Режим доступа: <http://www.cimatron.com>.
103. Режим доступа: <http://www.cimdata.com/>.
104. Режим доступа: <http://www.cnews.ru/news/top/index.shtml/2006/2006/12/12/227859>.
105. Режим доступа: <http://www.columbia.edu/>.
106. Режим доступа: <http://www.cosmosm.com/>.
107. Режим доступа: <http://www.csoft.ru/>.
108. Режим доступа: <http://www.deform.com/>.
109. Режим доступа: <http://www.extendsim.com>.
110. Режим доступа: <https://www.esi-group.com/ru>
111. Режим доступа: <http://www.fidia.it/>.
112. Режим доступа: <http://www.flow3d.ru/>.
113. Режим доступа: <http://www.focad.ru/>.
114. Режим доступа: <http://www.gartner.com/>.
115. Режим доступа: <http://www.gpss.ru/>.
116. Режим доступа: <http://www.intermech.host.ru/>.
117. Режим доступа: <http://www.ispu.ru/>.
118. Режим доступа: <http://www.ledas.com/>.
119. Режим доступа: <http://www.lotsia.com/>.
120. Режим доступа: <http://www.lvm.mkmssoft.ru/>.
121. Режим доступа: <http://www.magmasoft.com/>.
122. Режим доступа: <http://www.mai.ru/>.
123. Режим доступа: <http://www.mathworks.com/>.

124. Режим доступа: <http://www.mati.ru/>.
125. Режим доступа: <http://www.minutemansoftware.com/>.
126. Режим доступа: <http://www.mit.edu/>.
127. Режим доступа: <http://www.moldflow.com/>.
128. Режим доступа: <http://www.mssoftware.ru/>.
129. Режим доступа: <http://www.nicask.ru/>.
130. Режим доступа: <http://www.nicask.ru/cals/>.
131. Режим доступа: <http://www.opencascade.org/>.
132. Режим доступа: <http://www.procasts.com/>.
133. Режим доступа: <http://www.ptc.com/russia/>.
134. Режим доступа: <http://www.purdue.edu/>.
135. Режим доступа: <http://www.samgtu.ru/>.
136. Режим доступа: <http://www.sapr.ru/>.
137. Режим доступа: <http://www.solidworks.ru/>.
138. Режим доступа: <http://www.solver.ru/>.
139. Режим доступа: <http://www.spatial.com/>.
140. Режим доступа: <http://www.sprut.ru/>.
141. Режим доступа: <http://www.ssau.ru/>.
142. Режим доступа: <http://www.stankm.ru/>.
143. Режим доступа: <http://www.systemdynamics.org/>.
144. Режим доступа: <http://www.tehnopro.com/>.
145. Режим доступа: <http://www.thesis.com.ru/>.
146. Режим доступа: <http://www.think3.com/>.
147. Режим доступа: <http://www.tu-brynsk.ru/>.
148. Режим доступа: <http://www.ugs.ru/>.
149. Режим доступа: <http://www.vstu.ru/>.
150. Режим доступа: <http://www.smlib.com/>.

Учебное электронное издание комбинированного распространения

Учебное издание

**Одарченко Игорь Борисович**  
**Жарков Виталий Александрович**  
**Прусенко Иван Николаевич**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ И ЛИТЕЙНЫХ  
ПРОЦЕССОВ**

**Учебное пособие**

**Электронный аналог печатного издания**

Редактор *Н. Г. Мансурова*  
Компьютерная верстка *И. П. Минина*

Подписано в печать 20.05.23.  
Формат 60x84/16. Бумага офсетная. Гарнитура «Таймс».  
Ризография. Усл. печ. л. 15,81. Уч.-изд. л. 19,49.

Изд. № 12.  
<http://www.gstu.by>

Издатель и полиграфическое исполнение  
Гомельский государственный  
технический университет имени П. О. Сухого.  
Свидетельство о гос. регистрации в качестве издателя  
печатных изданий за № 1/273 от 04.04.2014 г.  
пр. Октября, 48, 246746, г. Гомель