УДК 519.2:661.8

Т. В. Бойко[1]
Д. М. Складанний[1]
Т. Є. Потапенко[1]

МОДЕЛЮВАННЯ І ОПТИМІЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ ЦЕМЕНТАЦІЇ РТУТІ В УМОВАХ СТАТИСТИЧНОЇ НЕВИЗНАЧЕНОСТІ

[1]Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

Подано результати розв'язання наукової задачі побудови математичної моделі та оптимізації на її основі технологічного процесу цементації ртуті з використанням алюмінію як замінного металу. У задачі враховані умови часткової статистичної невизначеності отриманих експериментальних даних. Подано результати оптимізації процесу в умовах невизначеності за різних гіпотез про вид регресійної залежності між технологічними факторами та показником якості процесу.

Ключові слова: цементація ртуті, статистична невизначеність, інтервальні оцінки коефіцієнтів, гіпотеза про вид регресійної залежності.

Вступ

Процес цементації металів, зокрема ртуті, заснований на витісненні їх з розчинів менш цінним металом. Солянокислі розчини (пульпи), утворені в процесі оброблення бідних шламів мокрим хлоруванням, містять до 0,5 % ртуті. Прийнятна ефективність процесу цементації досягається шляхом використання алюмінію як замінного металу [1]. Кінетичні дослідження, які проводилися за участю співробітників кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів КПІ, показали, що процес цементації доцільно проводити в неперервному режимі в проточному реакторі. За результатами кінетичних досліджень також встановлені фактори, що найбільше впливають на процес цементації [2], а саме температура розчину, 70…90 °C (X_1), швидкість протікання розчину, 0,125…0,292 мл/с (X_2) та маса завантаженого алюмінію, 10…14 г (X_3). За показник якості процесу цементації (y) взято концентрацію ртуті у розчині після очищення, мг/л.

Оскільки ефективність цементації сильно залежить від кожного окремого варіанта реалізації процесу [2], математичну модель процесу доцільно шукати у вигляді регресійного рівняння — лінійно-параметризованої функції: $\left[y\right] = f\left(\bar{x}\right) = \bar{\phi}^T\left(\bar{x}\right)\cdot\bar{\beta}$, де: $\bar{\beta} = \left\{\beta_0, \beta_1, ..., \beta_l\right\}$ — вектор параметрів, у цьому випадку коефіцієнтів рівняння регресії; $\bar{\phi}^T\left(\bar{x}\right) = \left\{\phi_0\left(\bar{x}\right), \phi_1\left(\bar{x}\right), ..., \phi_l\left(\bar{x}\right)\right\}^T$ — вектор базисних функцій відомого вигляду. У якості базисних функцій використано регресори повної експериментально-статистичної моделі другого порядку, а саме

$$\bar{\phi}^T\left(\bar{x}\right) = \left\{1;\ x_1; x_2;\ x_3;\ x_1x_2;\ x_1x_3; x_2x_3;\ x_1^2; x_2^2\ x_3^2\right\}. \qquad (1)$$

Для визначення числових оцінок параметрів проведено та реалізовано низку експериментальних досліджень за планами Бокса-Хантера [3]. У результаті, методом найменших квадратів отримані точкові оцінки коефіцієнтів рівняння регресії

$$\bar{\beta} = \{0,1306; -0,1282; 0,0780; -0,1110; -0,0310; 0,0329; -0,0301; 0,0402; 0,0332; 0,1304\}. \qquad (2)$$

За результатами розв'язання задачі оптимізації на основі регресійного рівняння (1), (2) отримано оптимальні умови проведення процесу цементації у вигляді точки факторного простору: температура розчину 90 °C, швидкість протікання розчину 0,156 мл/с, маса завантаженого алюмінію

12,5 г, очікуване значення концентрації ртуті після очищення визначено на рівні 0,022 мг/л.

Проведені авторами детальніші дослідження наявних експериментальних даних показали, що після перевірки за різними критеріями узгодженості [4] результати паралельних експериментів, а отже і похибки цих експериментів, у частині випадків не підпорядковуються нормальному закону розподілу випадкових величин. Таким чином, задача моделювання та оптимізації процесу цементації ртуті має розв'язуватися в умовах невизначеності [5]. Така невизначеність класифікується як статистична і характеризується, зокрема тим, що точкові оціночні значення коефіцієнтів рівняння регресії, зокрема оцінки, отримані за методом найменших квадратів, не можуть слугувати оптимальними оцінками істинних значень цих коефіцієнтів [6].

Таким чином, *метою роботи* є побудова експериментально-статистичної моделі процесу цементації ртуті та розв'язання на її основі задачі оптимізації з урахуванням умов статистичної невизначеності отриманих експериментальних даних.

Результати дослідження

Першим етапом проведених досліджень є побудова регресійної залежності, яка буде експериментально-статистичною моделлю досліджуваної задачі. Оскільки в умовах статистичної невизначеності точкові оцінки не можуть бути застосовані для оцінювання дійсних значень коефіцієнтів, така залежність буде лінійно-параметризованою функцією з інтервальними оцінками параметрів [6], тобто кожен коефіцієнт отримає оцінку $\left[\beta_j^-;\beta_j^+\right]$ $j = 0, 1, 2,\ldots$. Для визначення цих інтервальних оцінок використана умова адекватності регресійних залежностей для інтервального аналізу даних, згідно з якою у випадку, коли цільова змінна задана інтервалами значень, адекватною регресійною моделлю об'єкта є будь-яка функція, що проходить через усі інтервали вимірювань, тобто у нашому випадку задовольняє умові

$$y_i^{\min} \le \bar{\phi}^T\left(\bar{x}\right)\cdot\bar{\beta} \le y_i^{\max},\quad i = 1\ldots N, \tag{3}$$

де N — кількість точок дослідження, тобто кількість точок плану експерименту (для плану Бокса–Хантера $N = 15$); $y_i^{\min}, y_i^{\max}$ задають для i-го досліду (фіксованого вектора $\bar{x}$) межі можливих значень вихідної величини.

Оскільки для задачі, яка розв'язувалася у цьому дослідженні, прийнято рішення про описання процесу цементації лінійно-переметризовано функцією з набором базисних функції (1), авторами запропоновано алгоритм визначення інтервальних оцінок коефіцієнтів рівняння регресії, що базується на методі Монте-Карло [7]. На першому кроці алгоритму проведено розіграш достатньо великої кількості випадкових точкових значень коефіцієнтів та відділено ті вектори $\bar{\beta}$, для яких виконується умова (3). В результаті сформована вибірка векторів адекватних точкових оцінок коефіцієнтів регресійних залежностей. На їх основі визначено розширені відрізки інтервальних оцінок $\left[\beta_j^{\min};\beta_j^{\max}\right]$, $j = 0,\ 1,\ 2,\ldots$ для кожного окремого коефіцієнта. На другому кроці алгоритму відрізки інтервальних оцінок скорочувалися. Як інтервальну оцінку значення коефіцієнта регресії залишено ту частину відрізку $\left[\beta_j^{\min};\beta_j^{\max}\right]$, на якій відносна частота потрапляння випадкових точкових оцінок була найбільшою. Для одного з коефіцієнтів (β_0) ця процедура показана на рис. 1. Гістограма зображає відносну частоту адекватних випадкових точкових оцінок.

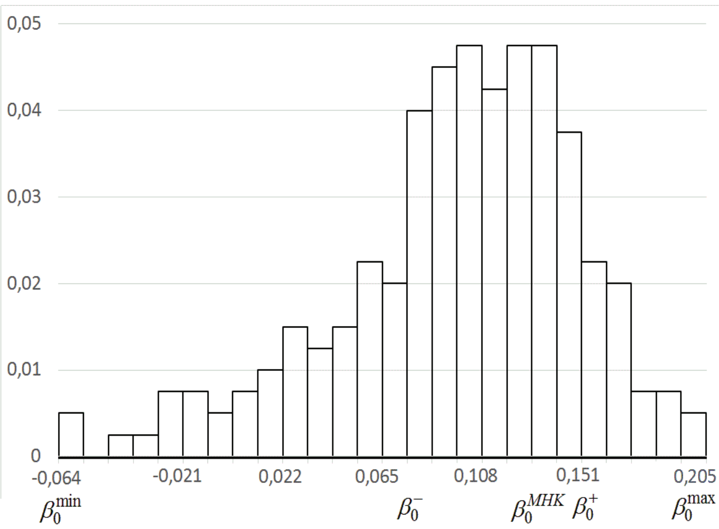

Рис. 1. Процедура визначення інетрвальної оцінки коефіцієнта β_0. (β_0^-, β_0^+, $\beta_0^{МНК}$ — нижня, верхня та МНК оцінки кофіцієнта, відповідно)

В результаті отримано такі інтервальні оцінки коефіцієнтів рівняння регресії:

$$\bar{\beta} = \{[0,0865; 0,1538]; [-0,1446; -0,0807]; [0,0489; 0,0858]; [-0,1245; -0,0714];$$
$$[-0,0354; -0,0199]; [0,0204; 0,0362]; [-0,0351; -0,0196]; [0,0243; 0,0433]; \tag{4}$$
$$[0,0200; 0,0352]; [0,0806; 0,1435]\}.$$

Слід зазначити, що отримані інтервальні оцінки коефіцієнтів покривають точкові оцінки, які отримані за методом найменших квадратів (2). Водночас, отримані МНК-оцінки (2) не є середніми значеннями інтервалів оцінок (4), що є непрямим свідченням відмінності закону розподілу похибок експериментів від нормального та наявності статистичної невизначеності у задачі.

Другим етапом дослідження є розв'язання задачі оптимізації процесу цементації ртуті на основі отриманої моделі (1)—(4). Алгоритм розв'язання задачі оптимізації в умовах статистичної невизначеності залежить від прийнятої гіпотези про дійсний вид регресійної залежності між вхідними і вихідними величинами. Згідно з [6] передбачається декілька можливих гіпотез, проте з погляду авторів найбільшої уваги заслуговують дві з них, а саме:

H1: регресійна залежність є лінійною комбінацією верхньої та нижньої меж, описаних інтервальною моделлю, тобто лінійною комбінацією $[y^-] = \bar{\phi}^T(\bar{x}) \cdot \bar{\beta}^-$ і $[y^+] = \bar{\phi}^T(\bar{x}) \cdot \bar{\beta}^+$, де $\bar{\beta}^-$ і $\bar{\beta}^+$ вектори нижніх і верхніх точкових оцінок коефіцієнтів у (4), відповідно;

H2: регресійна залежність є лінійно-переметризованою функцією невизначеного виду, яка повністю лежить в межах $[y^-] = \bar{\phi}^T(\bar{x}) \cdot \bar{\beta}^-$ і $[y^+] = \bar{\phi}^T(\bar{x}) \cdot \bar{\beta}^+$.

Очевидно, що в результаті розв'язання задачі оптимізації, буде отримана множина оптимальних розв'язків, у якій значення технологічних факторів матимуть інтервальний характер. Відомо, що розв'язок, знайдений за умови справедливості гіпотези H2, буде містити ширші інтервали значень, ніж знайдений за умови справедливості гіпотези H1. Оскільки у нас відсутня будь-яка інформація про дійсний вид регресійної залежності, немає підстав віддати перевагу будь-якій з цих гіпотез. Знайдемо розв'язки задачі оптимізації для кожної гіпотези окремо.

Якщо для математичного опису процесу цементації справедлива гіпотеза H1, то множина оптимальних значень визначається як множина недомінуючих точок (множина Паретто) у просторі технологічних факторів [8]. Найпопулярнішим способом визначення такої множини є розв'язання задачі багатокритеріальної, у цьому випадку двокритеріальної, оптимізації адитивною згорткою окремих цільових функцій з ваговим коефіцієнтом γ. Як окремі цільові функції розглядаються верхня та нижня межі інтервалу, $[y^-]$ та $[y^+]$, що описуються відповідними рівняннями. Тоді для досліджуваної задачі шукана множина рішень буде визначатися так:

$$\left[\bar{x}^0\right] = \left\{ x_i \in \left(\gamma \begin{pmatrix} \beta_1^+ + \beta_{12}^+ x_2 + \beta_{13}^+ x_3 + 2\beta_{11}^+ x_1 \\ \beta_2^+ + \beta_{12}^+ x_1 + \beta_{23}^+ x_3 + 2\beta_{22}^+ x_2 \\ \beta_3^+ + \beta_{13}^+ x_1 + \beta_{23}^+ x_2 + 2\beta_{33}^+ x_3 \end{pmatrix} + (1-\gamma) \begin{pmatrix} \beta_1^- + \beta_{12}^- x_2 + \beta_{13}^- x_3 + 2\beta_{11}^- x_1 \\ \beta_2^- + \beta_{12}^- x_1 + \beta_{23}^- x_3 + 2\beta_{22}^- x_2 \\ \beta_3^- + \beta_{13}^- x_1 + \beta_{23}^- x_2 + 2\beta_{33}^- x_3 \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix};\ \begin{matrix} i = 1,2,3 \\ \gamma \in [0,1] \end{matrix} \right\}. \tag{5}$$

Практичну цінність мають лише розв'язки задачі, для яких значення досліджуваних факторів не виходять за межі технологічних обмежень. У нашому випадку такі розв'язки відповідають значенням вагового коефіцієнта γ = {0,714…0,991}. Таким чином, за умови справедливості гіпотези H1, отримано таку множину оптимальних розв'язків: X_1 = {86,7…90,0 °C}, X_2 = {0,125…0,144 мл/с}, X_3 = {12,2…12,3 г}.

Для розв'язання задачі оптимізації за умови справедливості гіпотези H2, спершу зведемо отриману нами експериментально-статистичну модель з інтервальними коефіцієнтами до такого вигляду:

$$\left[y(\bar{x})\right] = \left[\beta_0^-;\ \beta_0^+\right] + \bar{x}^T[c] + \bar{x}^T[W]\bar{x}, \tag{6}$$

де $[c]$ і $[W]$ — перетворені матриці коефіцієнтів регресійної залежності. Для цієї задачі

$$[c]=\begin{pmatrix}[-0{,}1446;-0{,}0807]\\ [0{,}0489;\ 0{,}0858]\\ [-0{,}1245;-0{,}0714]\end{pmatrix};$$

$$[W]=\begin{pmatrix}[0{,}0243;0{,}0433] & -\frac{2}{3}[-0{,}0354;-0{,}0199] & \frac{1}{3}[0{,}0204;0{,}0362]\\ -\frac{2}{3}[-0{,}0354;-0{,}0199] & [0{,}0200;\ 0{,}0352] & -\frac{2}{3}[-0{,}0351;-0{,}0196]\\ \frac{1}{3}[0{,}0204;0{,}0362] & -\frac{2}{3}[-0{,}0351;-0{,}0196] & [0{,}0806;0{,}1435]\end{pmatrix}.$$

Після чого, розв'язання задач оптимізації можливе лише за умови невиродженої матриці $[W]$. Множина оптимальних рішень буде визначатися як $\left[\overset{-0}{x}\right]=-\frac{1}{r}[W]^{-1}[c]$.

Для досліджуваної задачі розраховано визначник інтервальної матриці: $det[W]=\{1{,}23\cdot10^{-4}\ldots$ $\ldots2{,}23\cdot10^{-4}\}$. Оскільки $0\notin[\det[W]]$, матриця $[W]$ невироджена для всіх можливих комбінацій значень коефіцієнтів. Ранг матриці $[W]$, у такому випадку буде відповідати її розміру, тобто $r = 3$.

Пошук зворотної матриці $[W]^{-1}$ для матриці, елементами якої є інтервальні значення вдалося виконати методом алгебраїчних доповнень [9]. Процедура знаходження доповнень полегшується тим, що матриця $[W]$ симетрична. З урахуванням наявних технологічних обмежень за умови справедливості гіпотези Н2, отримано множину оптимальних розв'язків: $X_1 = \{82{,}5\ldots90{,}0\ °C\}$, $X_2 = \{0{,}125\ldots0{,}205$ мл/с$\}$, $X_3 = \{12{,}1\ldots13{,}1$ г$\}$.

Висновки

Викладено досвід розв'язання задачі оптимізації процесу цементації ртуті з урахуванням статистичної невизначеності експериментальних даних. У залежності від прийнятої гіпотези про дійсний вид регресійної залежності, яка описує процес цементації, знайдено дві множини розв'язків задачі оптимізації. Слід відмітити такі особливості отриманих результатів:

– результати оптимізації, отримані у попередніх дослідженнях на основі регресійного рівняння з коефіцієнтами, оціненими за МНК, суттєво різняться з результатами, отриманими з урахуванням статистичної невизначеності. Зокрема, отримані за моделлю (1)—(2) точкові оптимальні значення за факторами X_2 і X_3 знаходяться за межами інтервалів, знайдених за умови справедливості гіпотези Н1. Потрапляння цих значень в межі інтервалів, знайдених за умови справедливості гіпотези Н2, можна пояснити надмірною шириною останніх. Тобто, неврахування статистичної невизначеності для розв'язання задачі оптимізації приводить до суттєвого спотворення результатів;

– з технологічної точки зору, результати, отримані в умовах статистичної невизначеності прийнятніші, оскільки підтримання параметрів процесу у заданих межах технологічно зручніше, ніж їх утримання у заданій точці;

– за наявності будь-якої можливості, слід віддати перевагу результатам оптимізації, отриманим за умови справедливості гіпотези Н1, оскільки множина оптимальних розв'язків у цьому випадку вужча.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Алкацев М. И. Процессы цементации в цветной металлургии / М. И. Алкацев. — М. : Металлургия, 1981. — 116 с.
2. Бондарь А. Г. Исследование кинетики цементации ртути из растворов / А. Г. Бондарь, И. А. Потяженко // Вестник КПИ. — 1975. — № 12. — С. 50—51. — (Химическое машиностроение и технология).
3. Бондарь А. Г. Планирование эксперимента при оптимизации процессов химической технологии (алгоритмы и примеры) / А. Г. Бондарь, Г. О. Статюха, И. А. Потяженко. — Киев : Вища школа, 1980. — 264 с.
4. Кобзарь А. И. Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников / А. И. Кобзарь. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2006. — 816 с. — ISBN 5-922100707-0.
5. Островский Г. М. Технические системы в условиях неопределенности: анализ гибкости и оптимизация / Г. М. Островский, Ю. М. Волин. — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. — 319 с. — ISBN 978-5-94774-732-4.
6. Вощинин А. П. Оптимизация в условиях неопределенности / А. П. Волошин, Г. Р. Сотиров. — М. : МЭИ (СССР), «Техника» (НРБ), 1989. — 224 с. — ISBN 5-7046-0001-8.
7. Кособуцький П. С. Статистичні та Монте-Карло алгоритми моделювання випадкових процесів у макро- і мікросистемах у MathCAD / П. С. Кособуцький. — Львів : вид-во «Львівська політехніка», 2014. — 412 с. — ISBN 978-617-607-611-7.
8. Семенкин Е. С. Методы оптимизации в управлении сложными системами / Е. С. Семенкин, О. Э. Семенкина, В. А. Терсков. — Красноярск : Сибирский юридический институт, 2000. — 254 с. — ISBN 5-93182-008-6.

9. Лінійна алгебра та аналітична геометрія / [В. В. Булдигін, І. В. Алєксєєва, та ін.] ; за ред. В. В. Булдигіна. — Київ : ТВіМС, 2011. — 224 с. — ISBN 966-8725-05-0.

Рекомендована кафедрою комп'ютерних систем управління ВНТУ

Стаття надійшла до редакції 13.11.2017

Бойко Тетяна Владиславівна — канд. техн. наук, доцент, в. о. завідувача кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів;

Складанний Денис Миколайович — канд. техн. наук, доцент, доцент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів, e-mail: skl_den@ukr.net ;

Потапенко Тетяна Євгеніївна — студентка хіміко-технологічного факультету.

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Київ

T. V. Boiko[1]
D. M. Skladannyi[1]
T. Ye. Potapenko[1]

Modeling and Optimization of Mercury Carburization Process in Statistical Uncertainty Conditions

[1]National Technical University of Ukraine «Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute»

The results of solving the scientific problem of mathematical modelling and optimising of the mercury carburization technological process have been presented. Aluminium as a substitute metal is used. The conditions for the partial statistical uncertainty of the experimental data obtained are taken into account. The results of process optimization under uncertainty are presented for various hypotheses about the form of regression between technological factors and the process quality indicator.

Keywords: mercury carburizing, statistical uncertainty, interval coefficients estimation, hypotheses about the form of regression.

Boiko Tatiana V. — Cand. Sc. (Eng.), Assistant Professor, Acting Head of the Chair of Cybernetics of Chemical Technology Processes;

Skladannyi Denys M. — Cand. Sc. (Eng.), Assistant Professor, Assistant Professor of the Chair of Cybernetics of Chemical Technology Processes, e-mail: skl_den@ukr.net ;

Potapenko Tatiana Ye. — Student of the Chemical-technological Department

Т. В. Бойко[1]
Д. Н. Складанный[1]
Т. Е. Потапенко[1]

Моделирование и оптимизация процесса цементации ртути в условиях статистической неопределенности

[1]Национальный технический университет Украины
«Киевский политехнический институт имени Игоря Сикорского»

Представлены результаты решения научной задачи построения математической модели и оптимизации на ее основе технологического процесса цементации ртути с использованием алюминия в качестве замещающего металла. В задаче учтены условия частичной статистической неопределенности полученных экспериментальных данных. Представлены результаты оптимизации процесса в условиях неопределенности для различных гипотез о виде регрессионной зависимости между технологическими факторами и показателем качества процесса.

Ключевые слова: цементация ртути, статистическая неопределенность, интервальные оценки коэффициентов, гипотеза о виде регрессионной зависимости.

Бойко Татьяна Владиславовна — канд. техн. наук, доцент, и. о. зав. кафедрой кибернетики химико-технологических процессов;

Складанний Денис Николаевич — канд. техн. наук, доцент, доцент кафедры кибернетики химико-технологических процессов, e-mail: skl_den@ukr.net ;

Потапенко Татьяна Евгеньевна — студент химико-технологического факультета