

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ імені І. І. МЕЧНИКОВА
ФАКУЛЬТЕТ ХІМІЇ ТА ФАРМАЦІЇ

Л. М. Солдаткіна

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ
І ОПТИМІЗАЦІЯ ХІМІЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ**

КОНСПЕКТ ЛЕКЦІЙ

до змістового модуля «Моделювання, планування
та оптимізація хімічних досліджень»
для здобувачів другого (магістерського) рівня вищої освіти
спеціальності 102 «Хімія»

ОДЕСА
ОНУ
2024

УДК 615.012;004.942
C60

Автор:

Л. М. Солдаткіна, кандидат хімічних наук, доцент кафедри фізичної та колоїдної хімії.

Рецензенти:

Р. Є. Хома, доктор хімічних наук, професор кафедри аналітичної та токсикологічної хімії Одеського національного університету імені І. І. Мечникова;

А. О. Ширикалова, кандидат хімічних наук, доцент кафедри клінічної хімії та лабораторної діагностики Одеського національного медичного університету.

*Рекомендовано до видання науково-методичною радою
ОНУ імені І. І. Мечникова.
Протокол № 5 від 7 грудня 2023 р.*

Солдаткіна Л. М.

C60

Комп'ютерне моделювання і оптимізація хімічних досліджень : конспект лекцій до змістового модуля «Моделювання, планування та оптимізація хімічних досліджень» для здобув. другого (магістер.) рівня вищ. освіти спец. 102 «Хімія» / Л. М. Солдаткіна. Електронні текстові дані (1 файл: 1,4 МБ). Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2024. – 69 с.

ISBN 978-617-689-550-3

Конспект лекцій підготовлено відповідно до програми навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання і оптимізація хімічних досліджень» до змістового модуля «Моделювання, планування та оптимізація хімічних досліджень». Містить теоретичний матеріал, контрольні питання та тести для самоконтролю, а також список рекомендованої літератури.

Призначений магістрам ЗВО спеціальності 102 «Хімія» ОНП «Фармацевтична хімія» і ОПП «Хімія». Буде корисними також аспірантам і молодим науковцям при плануванні та організації хімічних досліджень із застосуванням комп'ютерного і математичного моделювання.

УДК 615.012;004.942

ISBN 978-617-689-550-3

© Солдаткіна Л. М., 2024

© Одеський національний університет
імені І. І. Мечникова, 2024

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА	4
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ. МОДЕЛЮВАННЯ, ПЛАНУВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ХІМІЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ	5
ТЕМА 1. Вступ до навчальної дисципліни. Історія застосування моделювання в хімії	7
Контрольні питання до теми 1	12
Тести до теми 1	13
ТЕМА 2. Поняття моделі та моделювання. Класифікація моделей	16
Контрольні питання до теми 2	25
Тести до теми 2	26
ТЕМА 3. Математичне моделювання при плануванні та проведенні хімічного експерименту	29
Контрольні питання до теми 3	36
Тести до теми 3	36
ТЕМА 4. Багатофакторний експеримент в хімічних дослідженнях	39
Контрольні питання до теми 4	55
Тести до теми 4	56
ТЕМА 5. Оптимізація хімічних процесів на основі статистичних методів і моделей	60
Контрольні питання до теми 5	66
Тести до теми 5	67
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ	68

ПЕРЕДМОВА

Протягом багатьох років проведення хімічного експерименту в різних галузях промисловості, зокрема в хімічній і фармацевтичній, було засновано на особистому досвіді та інтуїції дослідників, а метод проб та помилок (евристичний метод) був найбільш поширеним при проведенні хімічного експерименту.

Застосування математичного моделювання, розвиток та поширення комп'ютерних технологій дозволили значно підвищити ефективність як хімічних, так і фармацевтичних досліджень, а саме скоротити термін виконання експерименту, підвищити точність і достовірність, а також оптимізувати хімічні процеси і прогнозувати властивості нових сполук і матеріалів.

В останні роки важливою складовою практично будь-якого дослідження в хімії та фармації є моделювання із застосуванням комп'ютерів. Наприклад, при плануванні хімічних експериментів, дослідженні механізмів хімічних реакцій, конструюванні нових молекул з певними властивостями і певними геометричними характеристиками, створенні нових лікарських засобів активно застосовуються можливості комп'ютерного моделювання. У сучасних дослідженнях особливої актуальності набуває можливість застосування методів комп'ютерного моделювання майбутніми фахівцями хіміко-фармацевтичного профілю, його оптимізації та прогнозування властивостей нових сполук і матеріалів.

Мета навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання і оптимізація хімічних досліджень» – сформувати у здобувачів вищої освіти систему знань щодо сучасних теоретичних принципів та методології комп'ютерного моделювання та застосування їх у розв'язанні прикладних задач в хімії та фармацевтичній хімії.

Конспект лекцій підготовлено відповідно до робочої програми з дисципліни «Комп'ютерне моделювання і оптимізація хімічних досліджень» і охоплює 5 тем змістового модуля «Моделювання, планування та оптимізація хімічних досліджень».

В конспекті лекцій представлено теоретичний матеріал здобувачами вищої освіти методів комп'ютерного моделювання в галузі хімії та фармацевтичної хімії, а також їх застосування для розв'язання практичних завдань. Кожна з запропонованих тем містить мету, перелік основних питань, основні поняття, теоретичний матеріал, тести та питання для самоконтролю.

Змістовий модуль

***Моделювання, планування
та оптимізація хімічних
досліджень***

Тема 1

Вступ до навчальної дисципліни. Історія застосування моделювання в хімії

Мета: ознайомити здобувачів вищої освіти з дослідженнями українських і закордонних науковців щодо комп'ютерного моделювання в галузі хімії та фармацевтичної хімії.

Основні питання:

- значення математичної хімії в розв'язанні хімічних проблем;
- методи математичної хімії;
- значення комп'ютерного моделювання для досліджень в галузі хімії та фармацевтичної хімії;
- можливості комп'ютерного моделювання;
- основні етапи створення методології математичного моделювання;
- розробки українських і закордонних науковців щодо комп'ютерного моделювання в галузі хімії та фармацевтичної хімії.

Основні поняття: математична хімія, комп'ютерна хімія, моделювання, математичне моделювання, комп'ютерне моделювання, хімічна кібернетика, комп'ютерний експеримент.

Пізнання та дослідження хімічних явищ доцільно здійснювати шляхом моделювання, успішне застосування якого вимагає від дослідника знань з хімії, математики і основ інформатики.

Першим вченим, який застосував математику в хімії, вважають М. В. Ломоносова, який в 1741 році написав книгу «Елементи математичної хімії». Теоретик і математик К. Гульдберг, який ніколи не займався експериментом, і хімік-експериментатор П. Вааге в середині ХІХ століття запропонували формулу закону діючих мас, яка виражає швидкість реакції через концентрації реагентів.

Видатний фізико-хімік Я. Вант-Гофф писав про себе: «Подвійне прагнення до математики, з одного боку, і до хімії, з іншого, проявилось в усіх моїх наукових проявах». Відомі вчені М. М. Се-

менов, Д. А. Франк-Каменецький, Д. Хоріуті, які працювали в середині ХХ ст., також належать до науковців, які в своїх дослідженнях активно поєднували хімію та математику.

Термін «математична хімія» запроваджено в 1970-х р.р. Математична хімія застосовує математичне моделювання гіпотетично можливих фізико-хімічних і хімічних процесів, а також вивчає їх залежність від властивостей атомів і структури молекул. Слід зазначити, що математична хімія допускає побудову моделей без залучення квантової механіки, а до її критеріїв істини відносять:

- 1) наявність математичного доказу;
- 2) проведення обчислювального експерименту;
- 3) порівняння результатів обчислювального експерименту з даними хімічного експерименту.

В математичній хімії досліджуються важливі хімічні задачі і проблеми із застосуванням методів сучасної математики. Новизна таких досліджень зазвичай виражається розвитком нової хімічної теорії або розвитком нових математичних підходів.

До методів математичної хімії відносять такі теорії:

- Теорія графів (використовують в дослідженнях ізомерії, хімічної кінетики, хімічній фізиці полімерів).
- Топологія (застосовують в стереохімії та дослідженні властивостей поверхонь потенційної енергії).
- Теорія інформації і методи штучного інтелекту (застосовують в хемоінформатиці).
- Теорія інтегро-диференціальних рівнянь (застосовують для опису гетерогенного каталізу та адсорбції).
- Теорія нелінійних диференціальних рівнянь (застосовують в хімічній кінетиці).
- Теорія катастроф і біфуркацій (застосовують для опису структурних змін в молекулах) тощо.

Наприклад, на мові теорії графів представляють ряд неемпіричних та напівемпіричних методів квантової хімії, тобто полегшується якісне розуміння взаємозв'язку структури та властивостей молекул. В хімічній кінетиці теорія графів дозволяє проводити детальний аналіз стаціонарних і нестаціонарних кінетичних залежностей, дозволяє встановити механізм реакції. Методи теорії графів також істотно спрощують вирішення багатьох традиційних

завдань хімічної фізики полімерів, зокрема завдань, що вимагають обліку просторової структури полімеру.

В останні роки важлива роль в математичній хімії належить математичному моделюванню з використанням сучасних комп'ютерів. У зв'язку з цим математичну хімію, у вузькому сенсі, іноді називають *комп'ютерною хімією*.

Комп'ютерна хімія базується на квантово-хімічних обчисленнях, а також застосовує різноманітні емпіричні і напівемпіричні методи розрахунку фізико-хімічних властивостей речовин, застосування методів штучного інтелекту і нейронних мереж, бази даних, чисельне моделювання статистичних характеристик і динаміки хімічних процесів.

З появою сучасних комп'ютерів і розвитком комп'ютерних технологій з'явився новий термін «комп'ютерне моделювання», який інколи вважають синонімом терміну «математичне моделювання». В наш час більшість математичних моделей потребує проведення складних розрахунків на комп'ютері або, як часто кажуть, комп'ютерних експериментів. В свою чергу, будь-які комп'ютерні обчислення можливі тільки на основі математичного моделювання.

Під *математичним моделюванням* розуміють метод наукового пізнання систем, явищ або процесів за допомогою математичних моделей і проведення з моделями теоретичного дослідження.

Комп'ютерне моделювання розглядають як метод наукового пізнання систем, явищ або процесів за допомогою побудови комп'ютерних моделей та проведення з ними комп'ютерного експерименту. Тобто комп'ютерне моделювання – це математичне моделювання за допомогою засобів обчислювальної техніки.

Комп'ютерне моделювання є важливим у тих випадках, коли реальний хімічний експеримент *неможливий, небезпечний, потребує значних витрат, довготривалий або навпаки занадто швидкий*. Наприклад: дослідження процесів корозії може перебігати роками, дослідження вибухових речовин небезпечно і крім цього такий процес занадто швидкий.

В останні роки математичне моделювання стрімко розвивається, охоплюючи найскладніші процеси (хімічні, фармацевтичні, медичні, економічні, соціальні тощо).

Можна виділити три етапи розвитку методології математичного моделювання:

1) Застосовування моделювання почалося в давнину в будівництві та архітектурі, астрономії, а в подальшому поширилося на такі галузі наукових знань, як природничі та суспільні науки. Наприклад, до моделювання відносяться уявлення Демокрита і Епікура про атоми, їхню форму і способи з'єднання, які є прообразами сучасних моделей про ядерно-електронну будову атома.

2) Друге «народження» моделювання відбулося в кінці 40-х років – на початку 50-х років ХХ століття і обумовлене двома причинами:

- поява електронних обчислюваних машин (ЕОМ), які позбавили науковців величезної за обсягом обчислювальної роботи;
- розробка ядерних технологій та розробка космічної техніки, які не можна реалізувати із застосуванням традиційних методів.

3) В ХХІ ст. досягнуто величезний прогрес щодо накопичення, зберігання та передачі інформації, саме математичне моделювання стає ядро для інформаційних технологій.

В другій половині ХХ століття і на початку ХХІ століття науковцями розроблені різні методи і програми, які дозволили розв'язати багато практично важливих завдань за допомогою комп'ютерного моделювання. В наш час, у розвинених країнах жоден масштабний технологічний, екологічний, соціально-політичний чи економічний проєкт не розглядається без застосування математичного моделювання із застосуванням комп'ютерних технологій.

Прагнення до розв'язання складних проблем в галузі хімічної та фармацевтичної промисловості сприяло інтенсивному нагромадженню знань на стику двох наук – *кібернетики* (наука, яка вивчає загальні закономірності отримання, зберігання, передачі й перетворення інформації в складних системах управління) й *хімічної технології* (наука, яка вивчає методи та процеси виробництва продуктів за участю хімічних реакцій).

Застосування методів і засобів кібернетики для вирішення проблем хімічної технології було реалізовано в новому науковому напрямку, який називається *хімічна кібернетика*. Предмет вивчен-

ня хімічної кібернетики – це хімічні об'єкти та хімічне виробництво, до наукового метода належить математичне моделювання, а до засобів реалізації – комп'ютерна техніка. За допомогою хімічної кібернетики можна отримати кількісні результати, прогнозувати і синтезувати різноманітні речовини, свідомо керувати хімічними процесами.

В ХХІ столітті комп'ютерні моделі, що відображають реальність, стали ключовим елементом сучасних провідних хімічних досліджень. В 2013 році було присуджено Нобелівську премію в галузі хімії за «розроблення мультимасштабних моделей складних хімічних систем». Лауреати Нобелівської премії: Мартін Карплус – науковець Страсбурзького та Гарвардського університетів й громадянин Австрії та США, Майкл Левітт – науковець Стенфордського університету й громадянин США та Великої Британії, Арі Варшель – науковець університету Південної Кароліни й громадянин США та Ізраїлю.

Наукова заслуга нобелівських лауреатів 2013 року полягала в розробці нових можливостей в розробці лікарських засобів та їх випробуванні «*in silico*» (латинська фраза, яка вживається у значенні «зроблено за допомогою комп'ютера або за допомогою комп'ютерної симуляції»).

В Україні над проблемами математичного і комп'ютерного моделювання працюють:

- 1) Кібернетичний центр НАН України.
- 2) Інститут проблем моделювання в енергетиці ім. Г. Є. Пухова НАН України.
- 3) Інститути Відділення хімії НАН України, хімічні факультети українських університетів.

Найбільш систематичні дослідження щодо розробки та реалізації моделей QSAR/QSPR науковці проводять у Фізико-хімічному інституті (ФХІ) ім. О. В. Богатського НАН України. У 1973 році засновник ФХІ академік Богатський О. В. був першим науковцем в Україні, який в науковій статті розглянув QSAR-аналіз психотропної активності похідних 1,4-бенздіазепінів.

Видатним фахівцем в галузі QSAR-аналізу органічних сполук є нинішній директор ФХІ імені О. В. Богатського, член-кореспон-

дент НАН України, доктор хімічних наук Кузьмін В. Є. Визнаним здобутком його наукової діяльності є розробка QSAR/QSPR технології та запровадження універсального підходу щодо структурної інтерпретації QSAR/QSPR моделей, що дозволяє оцінювати внесок окремих молекулярних фрагментів у прояві органічними сполуками тих чи інших властивостей.

Отже, для сучасного фахівця в галузі хімії та фармацевтичної хімії важливими є навички в галузі комп'ютерного моделювання. *Мета* навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання і оптимізація хімічних досліджень»: сформувати систему знань у здобувачів щодо сучасних теоретичних принципів та методології комп'ютерного моделювання та застосування їх у розв'язанні прикладних задач в хімії та фармацевтичній хімії. *Предметом* вивчення навчальної дисципліни є методи і засоби комп'ютерного моделювання в хімії.

Основні завдання навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання і оптимізація хімічних досліджень»:

- 1) ознайомити здобувачів з видами і етапами моделювання в хімії;
- 2) поглибити знання здобувачів щодо математичного моделювання та оптимізації хімічних процесів;
- 3) надати здобувачам знання щодо прогнозування властивостей речовин на основі їх хімічної будови за допомогою комп'ютерного моделювання.

Контрольні питання до теми 1

1. Яка роль математики в хімії? Дайте визначення математичній хімії.
2. Що вивчає комп'ютерна хімія?
3. Дайте визначення математичному і комп'ютерному моделюванню.
4. Обґрунтуйте, чи можна вважати синонімами математичне і комп'ютерне моделювання.
5. Які можливості комп'ютерного моделювання?
6. Охарактеризуйте основні етапи розвитку методології математичного моделювання.

7. Що таке кібернетика? хімічна кібернетика?
8. Що є предметом і науковим методом хімічної кібернетики?
9. Який внесок лауреатів Нобелівської премії 2013 року з хімії в розробці та випробуванні лікарських засобів?
10. Який внесок українських вчених в розвиток математичного і комп'ютерного моделювання?
11. Який внесок в комп'ютерне моделювання науковців ФХІ імені О.В. Богатського?
12. Обґрунтуйте необхідність для сучасних хіміків знань і навичок в галузі комп'ютерного моделювання.

Тести до теми 1

1. Вкажіть, в яких роках було вперше запроваджено термін «математична хімія»?
 - А) 1970-х
 - Б) 1980-х
 - В) 1990-х
 - Г) Після 2000 року
2. Вкажіть предмет вивчення хімічної кібернетики.
 - А) Хімічні об'єкти та хімічне виробництво
 - Б) Хімічні прилади та методи дослідження
 - В) Комп'ютерна техніка
 - Г) Математичне моделювання
3. Скільки виділяють основних етапів розвитку методології математичного моделювання?
 - А) 3
 - Б) 4
 - В) 5
 - Г) 6
4. Вкажіть науковий метод, який застосовують в хімічній кібернетичі.
 - А) Математичне моделювання
 - Б) Термодинамічний метод
 - В) Статистичний метод
 - Г) Квантово-механічний метод

5. Як називається наука, що вивчає загальні закони отримання, перетворення, зберігання й передавання інформації у складних системах управління?
- А) Кібернетика
 - Б) Комп'ютерне моделювання
 - В) Математичне моделювання
 - Г) Молекулярне моделювання
6. Вкажіть, яка наука дозволяє розробляти алгоритми управління процесами.
- А) Хімічна кібернетика
 - Б) Хімічна технологія
 - В) Фізична хімія
 - Г) Квантова хімія
7. Вкажіть лауреатів Нобелівської премії 2013 р. з хімії.
- А) Мартін Карплус, Майкл Левітт, Арі Варшель
 - Б) Роберт Керл, Гаролд Крото, Річард Смолі
 - В) Алан Хігер, Алан Макдіармід, Хідекі Сіракава
 - Г) Вільям Ноулз, Ріоджі Нойорі, Баррі Шарплес
8. Вкажіть, в чому полягає внесок нобелівських лауреатів 2013 року в галузі хімії.
- А) Важливий внесок в розробці лікарських засобів та їх випробуванні «*in silico*»
 - Б) Важливий внесок в розробці лікарських засобів та їх випробуванні «*in vitro*»
 - В) Важливий внесок в розробці лікарських засобів та їх випробуванні «*in vivo*»
 - Г) Важливий внесок в розробці лікарських засобів та їх випробуванні «*in situ*»
9. Вкажіть, в якій українській установі/закладі проводять систематичні дослідження щодо розроблення та реалізації моделей QSAR/QSPR для створення нових лікарських препаратів.
- А) ФХІ ім. О. В. Богатського НАН України
 - Б) ОНУ імені І. І. Мечникова
 - В) Кібернетичний центр НАН України
 - Г) КНУ імені Тараса Шевченка

10. Вкажіть, хто з українських науковців опублікував першу роботу, присвячену QSAR-аналізу психотропної активності похідних 1,4-бенздіазепінів.

- А) О. В. Богатський
- Б) В. Є. Кузьмін
- В) Г. Є. Пухов
- Г) О. П. Яворовський

Тема 2 Поняття моделі і моделювання. Класифікація моделей

Мета: поглибити знання здобувачів щодо видів моделей, вимог і етапів математичного і комп'ютерного моделювання.

Основні питання:

- класифікація моделей;
- види абстрактних моделей;
- основні завдання моделювання;
- види моделювання;
- вимоги до математичного і комп'ютерного моделювання;
- етапи математичного і комп'ютерного моделювання.

Основні поняття: подібні об'єкти; об'єкт моделювання; модель; моделювання; знакові та реальні моделі.

Навчальна дисципліна «Комп'ютерне моделювання і оптимізація хімічних досліджень» є дисципліною, в межах якої моделювання застосовується для розв'язання сучасних хімічних і фармацевтичних задач за допомогою комп'ютерних технологій. При опануванні навчальної дисципліни важливими поняттями є *модель і моделювання*.

Моделлю (від лат. *modulus* – міра, зразок, норма) називають фізичну або абстрактну систему, що відтворює об'єкт дослідження і є зручною для проведення експериментів. Іншими словами, *моделлю* називають систему, досліджуючи яку можна отримати важливу інформацію про іншу систему.

Менделєєв Д. І. визначав модель як «пошук кінцевого в нескінченному». Тобто в модель включаються лише істотні аспекти, що характеризують об'єкт, і відкидається решта (нескінченна більшість). Дослідник, починаючи моделювання, повинен визначити конкретну мету, відокремивши її від усіх можливих інших цілей, кількість яких можливо є нескінченною.

Застосування моделі дозволяє спрощувати одержання інформації про властивості об'єкта й проводити свідоме прогнозування.

Основні функції моделей:

- зменшення витрат при проведенні досліджень;
- дослідження явищ, які неможливо вивчати за допомогою реального експерименту;
- споживча (створення фото, картини, скульптури тощо).

Експеримент на моделі має бути *простішим, швидшим, вигіднішим та безпечнішим*, ніж дослідження оригіналу, а також модель повинна адекватно відображати поведінку оригіналу в заданих умовах дослідження.

На рис. 2.1 представлена класифікація моделей за способом представлення.

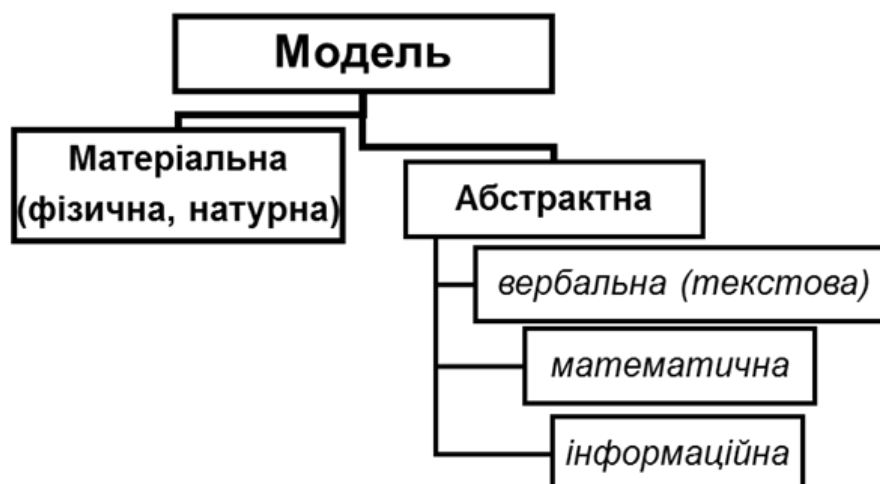


Рис. 2.1. Класифікація моделей за способом представлення

Матеріальною моделлю називають копію об'єкта, яка може бути виконана з іншого матеріалу, в іншому масштабі, з відсутністю деяких деталей. Наприклад, іграшковий корабель, будиночок із кубиків, модель літака тощо.

Абстрактна модель – це сукупність інформації щодо властивостей та стану об'єкта, а також взаємозв'язку між об'єктом і зовнішнім світом.

Абстрактна вербальна модель – модель, в якій використовують певну послідовність формалізованих речень для опису тієї чи іншої діяльності (наприклад, протокол засідання вченої ради, правила дорожнього руху).

Абстрактною математичною моделлю називається наближений опис об'єкта моделювання, який виражають за допомогою математичних символів (наприклад, математична модель зірки – це складна система рівнянь, які описують фізичні процеси в надрах зірки).

Абстрактна інформаційна модель – це модель, що надає інформацію про стан і властивості об'єктів і процесів. Наприклад, енциклопедії, довідники, а також загадки, в яких сформульовані основні властивості об'єкта, за якими маємо вгадати назву об'єкта («У вогні не горить, у воді не тоне»).

В прикладних науках розглядаються також інші види абстрактних моделей:

1) *аналітичні математичні моделі*, які не використовують комп'ютерних засобів;

2) *інформаційні моделі*, що мають додатки в інформаційних системах;

3) *вербальні мовні моделі*, які можуть використовуватися для чисельного математичного моделювання, а також візуалізації явищ та процесів або спеціалізованих прикладних технологій, які використовують комп'ютер.

Моделювання – це відповідальне наукове завдання, яке можна охарактеризувати як процес створення та дослідження моделі. *Моделювання* можна також визначити як метод дослідження об'єктів на їх моделях (математичних або фізичних) або реальних установках. В моделюванні замість дослідження оригіналу проводять дослідження на іншому об'єкті – моделі, а отримані результати кількісно переносяться на оригінал.

Методи моделювання основані на подібності об'єктів (частковій або повній), що мають однакову або різну природу.

Подібними об'єктами називають об'єкти, якщо їх параметри (властивості) відрізняються в певне число разів. У разі часткової (неповної) подібності, об'єкт може мати тільки найбільш значущі параметри (властивості).

Об'єктом моделювання або *оригіналом* називають один із двох об'єктів, між якими є подібність, а інший об'єкт – це його *модель*. Наприклад, в хімії об'єктами моделювання, можуть бути молекули та хімічні процеси.

Моделювання має реалізовуватися, враховуючи низку вимог:

- чітке формулювання основних понять та припущень, засноване на досвіді;
- аналіз адекватності застосованих моделей;
- гарантована точність обчислювальних алгоритмів.

До основних завдань моделювання відносять:

- прогнозування стану і поведінки об'єкта;
- планування і оптимізацію експериментів (виявлення найважливіших факторів) з інтерпретацією отриманих результатів;
- навчання фахівців із застосуванням тренажерів.

Слід зазначити, що через багатозначність поняття «модель», яке сьогодні використовується в техніці, науці, мистецтві, повсякденному житті, не розроблено єдиної класифікації видів моделювання.

Враховуючи різні підходи до моделювання, можна більшість з них об'єднати в дві групи (рис. 2.2): *матеріальне* (предметне) та *ідеальне* (теоретичне).

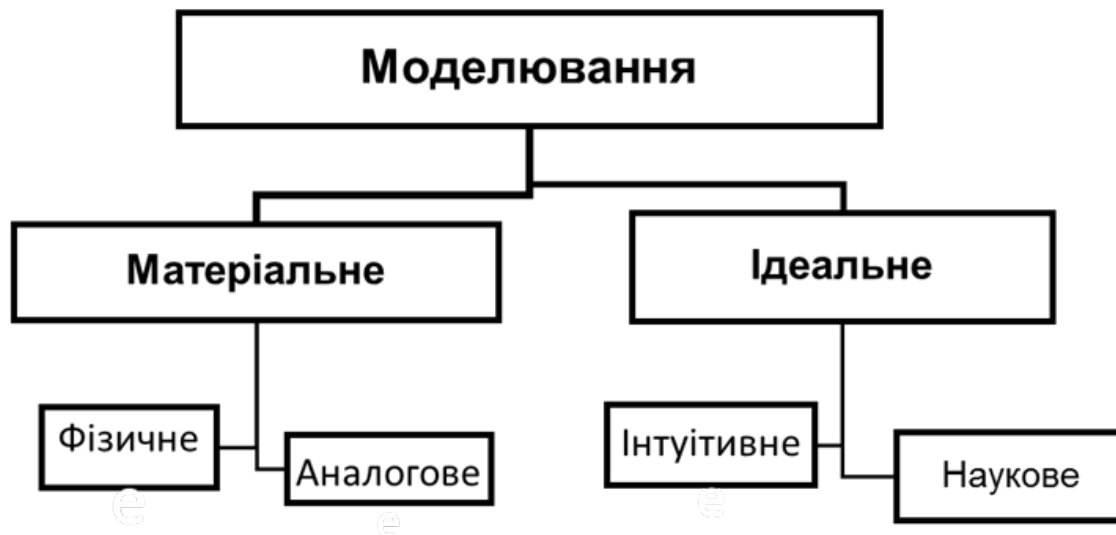


Рис. 2.2. Класифікація моделювання

В матеріальному моделюванні фізичне і аналогове моделювання базуються на властивостях геометричної або фізичної подібності. Вивченням умов подібності займається теорія подібності.

Матеріальним фізичним моделюванням називають таке моделювання, коли реальному об'єкту ставиться у відповідність при

певному масштабі матеріальний аналог, що допускає дослідження (як правило, в лабораторних умовах) за допомогою наступного перенесення властивостей процесів (явищ) з моделі на об'єкт на основі теорії подібності. Наприклад: моделі літаків, космічних апаратів, макети будівель тощо.

Матеріальне аналогове моделювання відомо як моделювання, засноване на подібності процесів (явищ) різної фізичної природи, але їх можна однаково описати формально за допомогою математичних співвідношень, логічних або структурних схем. Наприклад: при деяких припущеннях можна вважати аналогічними процеси проникнення тепла в тілі дифузії речовин.

Матеріальне моделювання доцільно використовувати в хімії для дослідження будови речовини і особливостей перебігу хімічних і фізико-хімічних процесів, а також для визначення оптимальних умов їх перебігу тощо.

При матеріальному моделюванні моделі фізичного і аналогового типу відносяться до матеріального відбиття реального об'єкта і пов'язані з реальним об'єктом.

Ідеальне моделювання є первинним по відношенню до матеріального, тому що спочатку у свідомості людини формується ідеальна модель, а потім на її основі створюється матеріальна модель.

Інтуїтивне моделювання – це ідеальне моделювання, яке базується на інтуїтивному представленні об'єкта дослідження, що не підлягає формалізації або її не потребує. Наприклад: досвід, який передається в народній медицині. Важливо зазначити, що будь-яке знання, отримане з експерименту, але яке не має пояснення причин і механізмів явища, вважають інтуїтивним. Слід зазначити також, що інтуїтивні моделі дуже важливі в науці, тому що без них не можна отримати нові знання.

Науковим моделюванням називають логічно обґрунтоване моделювання, яке містить найменше число припущень, прийнятих як гіпотези на основі спостережень за об'єктом моделювання. При застосуванні наукового моделювання дослідник знає, як потрібно моделювати і чому саме так потрібно це робити.

Інтуїтивне і наукове моделювання доповнюють один одного, розділяючи області свого застосування. Інтуїтивні знання – це ге-

нератор нового знання, але не всі інтуїтивні ідеї далі підтверджуються експериментом і методом формальної логіки.

Найпоширеніші види моделювання в природничих науках:

- *концептуальне* (моделювання, при якому пояснення відомих уявлень щодо досліджуваного об'єкта відбувається за допомогою спеціальних символів і операцій над ним або за допомогою реальної чи штучної мови; застосовується в соціальних науках, філософії та психології);
- *фізичне* (моделювання, при якому модель та об'єкт реальні, зі схожою або різною фізичною природою, мають деякі співвідношення подібності між процесами в об'єкті-оригіналі та в моделі, які впливають з подібності фізичних явищ);
- *структурно-функціональне* (моделювання, при якому моделями слугують графіки, діаграми, таблиці, рисунки тощо, доповнені спеціальними правилами їх об'єднання та перетворення);
- *математичне* (моделювання, яке включає будівництво моделі за допомогою засобів математики та логіки);
- *комп'ютерне* (моделювання, при якому логіко-математична модель досліджуваного об'єкта реалізована за допомогою комп'ютерних програм).

Зазначені вище види моделювання можуть застосовуватися як окремо, так і одночасно, або в певній комбінації.

Математичне моделювання реалізується за допомогою трьох основних етапів : *1 етап (модель)* — *2 етап (алгоритм)* — *3 етап (програма)* (див. рис. 2.3).



Рис. 2.3. Основні етапи (тріада) математичного моделювання

1 етап математичного моделювання: потрібно обрати або побудувати математичну модель, яка описує найважливіші закони, яким об'єкт об'єктивно підкоряється, а також закономірності, які властиві його складовим частинам тощо.

2 етап математичного моделювання: розробляють алгоритм для реалізації моделі із застосуванням комп'ютера. Модель представляють у формі, зручній для застосування чисельних методів, визначають послідовність логічних і розрахункових операцій, які потрібно реалізувати, щоб знайти необхідні значення із заданою точністю.

3 етап математичного моделювання: створюють спеціальні програми, які допомагають «переводити» модель і алгоритм на доступну комп'ютеру мову. Їх називають «електронним» еквівалентом досліджуваного об'єкта, який є придатним для випробування на комп'ютері.

За допомогою тріади «модель – алгоритм – програма» маємо важливий інструмент, який спочатку тестується в «пробних» комп'ютерних експериментах. У разі адекватності моделі реалізують різноманітні «досліди», в результаті яких отримують властивості й характеристики об'єкта як якісні, так і кількісні.

До *основних вимог*, які висувають до математичних моделей відносять:

- адекватність (відображає задані властивості з прийнятною точністю);
- універсальність (визначається в моделі числом і складом зовнішніх та вихідних параметрів);
- економічність (характеризується витратами обчислювальних ресурсів для її реалізації);
- простоту (результат досягається за той же час з тією ж точністю, але при врахуванні меншої кількості факторів при розрахунку);
- передбачуваність (можливість отримання нових знань про об'єкт, що досліджується, за допомогою застосування моделі);
- точність результатів (достатня точність результатів розв'язання задачі та надійність функціонування моделі);
- здатність до вдосконалення (вдосконалення моделі без її корінної переробки).

Слід зазначити, що математичне моделювання не конкурує і не підмінює такі дисципліни, як математика і хімія. Воно базується на методах різних наук і дає нові стимули розвитку різноманітних напрямів науки.

В останні роки завдяки розвитку комп'ютерних технологій широкий розвиток отримало *комп'ютерне моделювання* – моделювання для певної моделі щодо отримання як якісних, так і кількісних результатів за допомогою комп'ютерної моделі. Кількісні результати важливі для прогнозування параметрів, що характеризують систему.

Будь-який реальний об'єкт або процес в будь-якій галузі науки або технології може бути обраним в якості предмета комп'ютерного моделювання.

Комп'ютерною моделлю називають комп'ютерну програму на окремому комп'ютері або на сукупності комп'ютерів і яка здатна реалізувати алгоритмічний опис стану системи на підставі її математичної моделі.

Комп'ютерні моделі бувають:

- *структурно-функціональні*, коли об'єкт описаний за допомогою взаємозв'язаних комп'ютерних таблиць, діаграм, графіків тощо, що відображають взаємозв'язки між елементами об'єкта (наприклад, моделі інформаційних систем, моделі баз даних тощо);
- *імітаційні*, коли окрема програма (сукупність програм або програмний комплекс) дозволяє відтворювати процеси функціонування об'єкта за умови впливу на нього різних випадкових факторів (наприклад, імітація поділу клітин у біології, імітація руху космічних тіл).

Основні вимоги, які потрібно враховувати, застосовуючи комп'ютерні моделі:

- адекватність (здатність відображати необхідні властивості об'єкта із заданою величиною похибки);
- точність (перевіряється ступінь збігу значень характеристик реального об'єкта та значень цих характеристик, розрахованих за допомогою моделей);
- універсальність (перевіряється повнота відображення моделлю властивостей реального об'єкта);

- економічність (враховуються витрати (ресурси ЕОМ, час виконання).

На рис. 2.4. представлені основні етапи комп'ютерного моделювання.

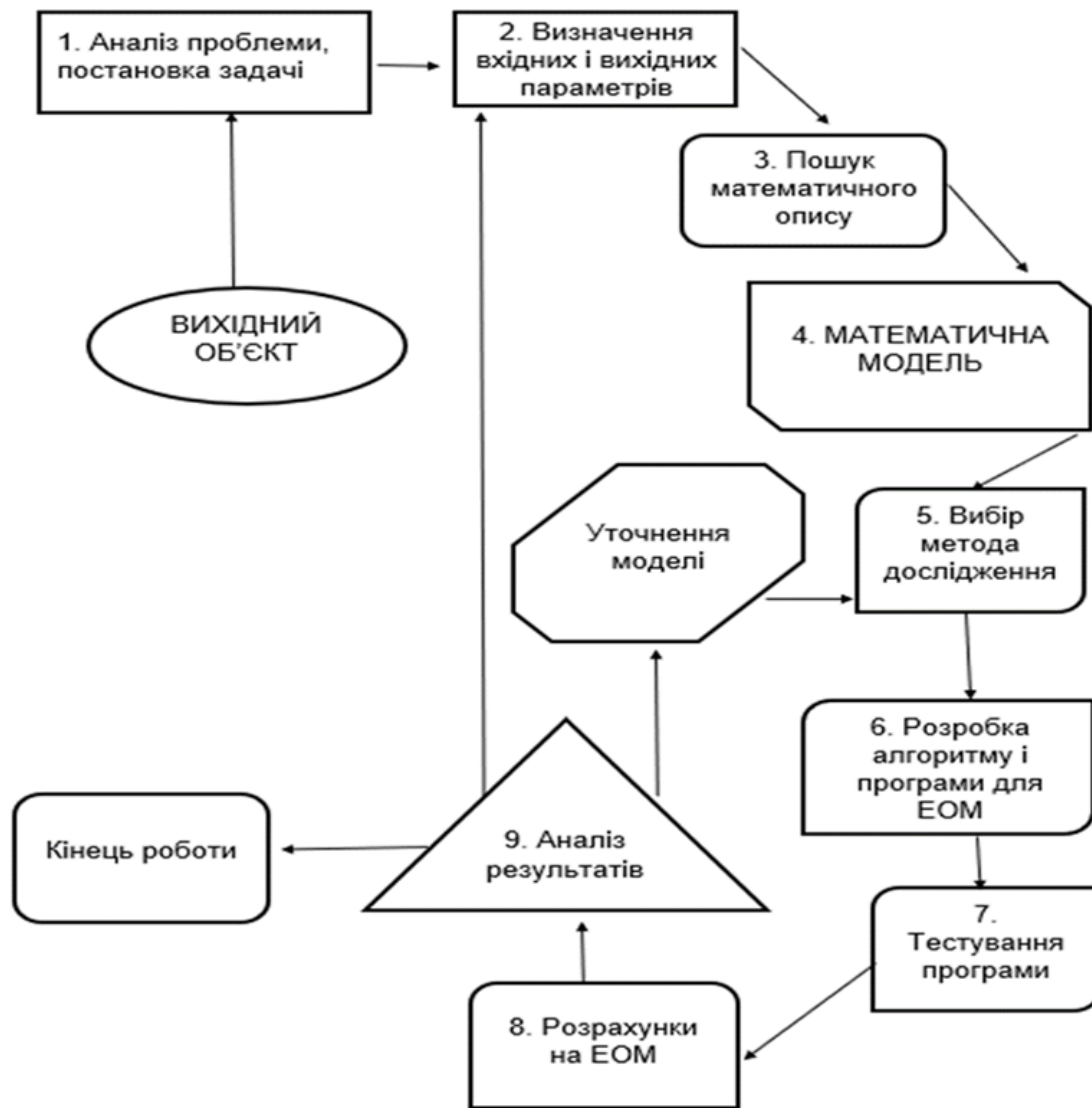


Рис. 2.4. Основні етапи комп'ютерного моделювання

Для реалізації комп'ютерного моделювання необхідні мови програмування, електронні таблиці, математичні пакети.

Комп'ютерні програми, написані будь-якою мовою програмування, які дозволяють побудувати моделі об'єктів, процесів, явищ, називають *моделюючими програмами*, і вони можуть мати три основні блоки.

1. Блок вихідних даних, який визначає мету (стратегію) моделювання і може містити такі дані: статичні параметри – гравітацій-

на стала, прискорення сили тяжіння, маса, розміри тощо; динамічні параметр – час, швидкість, прискорення. Ці дані у програмі можуть бути константами або змінними, значення для змінних можуть вводитися з клавіатури, з файлу або надаватися в самій програмі.

2. Робочий блок, який містить алгоритм задачі, записаний у вигляді сукупності операторів мови програмування, якщо програма написана алгоритмічною мовою. Цей блок зазвичай містить процедури та функції обробки різних ситуацій.

3. Блок результатів містить висновок результатів моделювання у будь-якому вигляді: словесному, числовому, графічному, у вигляді демонстрації чи імітації процесу чи явища.

В останні роки в дослідженнях активно застосовують *комп'ютерний експеримент* – експеримент над математичною моделлю об'єкта-оригіналу на комп'ютері, який полягає в тому, що за певними параметрами моделі проводять обчислення інших її параметрів та визначають властивості об'єкта-оригіналу.

Комп'ютерний експеримент (віртуальний експеримент) лише умовно можна віднести до експерименту, тому що він є реалізацією створеної людиною математичної моделі. Наприклад, якщо математична модель складена некоректно, її чисельне рішення може розходитися з результатами хімічного експерименту.

Отже, комп'ютерне моделювання як новий метод наукового дослідження змушує вдосконалювати математичний апарат, що використовується при побудові та дослідженні математичних моделей, дозволяє, використовуючи математичні методи, уточнювати та ускладнювати математичні моделі, застосовуючи їх для розв'язання складних хімічних, науково-технічних та інших проблем сучасності.

Контрольні питання до теми 2

1. Дайте визначення моделі. Яке головне призначення моделі?
2. Розгляньте і охарактеризуйте класифікацію моделей.
3. Назвіть і поясніть моделі, які застосовують при навчанні хімії в 7–9 класах, в 10–11 класах середньої школи.
4. Назвіть і поясніть моделі, які застосовують в навчальному процесі на хімічних факультетах в університетах.

5. Дайте визначення моделюванню. Охарактеризуйте основні види моделювання в природничих науках.
6. Які вимоги висуваються до математичного моделювання?
7. Охарактеризуйте основні етапи математичного моделювання.
8. Які вимоги висуваються до комп'ютерного моделювання?
9. Охарактеризуйте основні етапи комп'ютерного моделювання.
10. Які блоки можуть містити моделюючі програми? Яке призначення кожного блока?
11. Який експеримент називають комп'ютерним?
12. Поясніть, чому комп'ютерний експеримент умовно відносять до експерименту.

Тести до теми 2

1. Вкажіть, кому з вчених належить цитата: «Модель – пошук кінцевого в нескінченному»?
 - А) Менделєєв
 - Б) Морковніков
 - В) Лавуазьє
 - Г) Вант-Гофф
2. Виберіть, як перекладається термін «модель»?
 - А) Зразок
 - Б) Точна копія
 - В) Подібний
 - Г) Ідеальна система
3. Вкажіть, яке головне призначення моделі.
 - А) Спрощення одержання інформації про властивості об'єкта й забезпечення можливості прогнозування й діагностики.
 - Б) Визначення стану об'єкта у будь-який момент часу й у будь-якій точці простору
 - В) Можливість дослідження явищ, які неможливо вивчати за допомогою реального експерименту
 - Г) меншення витрат при проведенні досліджень
4. Виберіть, що не відноситься до функцій моделі.
 - А) Спрощення одержаної інформації про властивості об'єкта
 - Б) Зменшення витрат при проведенні досліджень
 - В) Дослідження неможливих явищ
 - Г) Споживча

5. Вкажіть, як називається будь-яке знання, отримане з експерименту, але яке не має пояснення причин і механізмів явища, яке спостерігається.
- А) Інтуїтивне
 - Б) Наукове
 - В) Фізичне
 - Г) Аналогове
6. Виберіть види абстрактної моделі.
- А) Вербальна, математична, інформаційна
 - Б) Фізична, хімічна, натурна
 - В) Текстова, вербальна, хімічна
 - Г) Інформаційна, фізична, матеріальна
7. Вкажіть, як називаються об'єкти, якщо властивості, що визначають їхній стан у будь-який момент часу й у будь-якій точці простору, відрізняються в певне число разів.
- А) Подібні
 - Б) Однакові
 - В) Схожі
 - Г) Ідеальні
8. Виберіть класифікацію моделей за представленням.
- А) Матеріальна і абстрактна
 - Б) Інформаційна і вербальна
 - В) Математична і інформаційна
 - Г) Вербальна і фізична
9. Виберіть види ідеального моделювання.
- А) Інтуїтивне і наукове
 - Б) Фізичне і аналогове
 - В) Аналогове та ідеальне
 - Г) Фізичне і наукове
10. Виберіть, які моделі тісно пов'язані з реальним об'єктом фізичними, геометричними характеристиками.
- А) Фізичні та натурні
 - Б) Інформаційні та вербальні
 - В) Аналітичні та фізичні
 - Г) Натурні та вербальні

11. Виберіть основні етапи математичного моделювання.
- А) Модель – алгоритм – програма
 - Б) Модель – програма – алгоритм
 - В) Модель – гіпотеза – комп'ютерний експеримент
 - Г) Комп'ютерний експеримент – модель – програма
12. Виберіть види комп'ютерних моделей.
- А) Структурно-функціональні та імітаційні
 - Б) Концептуальні та фізичні
 - В) Математичні та фізичні
 - Г) Логіко-математичні та концептуальні

Тема 3

Математичне моделювання при плануванні та проведенні хімічного експерименту

Мета: поглибити знання здобувачів щодо застосування математичного моделювання при плануванні та проведенні хімічного експерименту

Основні питання:

- види експериментів;
- об'єкт наукового дослідження і мета експерименту;
- обмеження при плануванні експерименту;
- вибір параметрів оптимізації;
- вибір факторів, які впливають на параметри оптимізації;
- форми представлення математичної моделі;
- вимоги до поверхні відгуку;
- перевірка відтворюваності дослідів.

Основні поняття: експеримент, планування експерименту, параметри оптимізації, вхідні та вихідні фактори, поверхня відгуку, критерій Кохрена.

Виконання експерименту в хімічній лабораторії вимагає від дослідників мати програму дій, яка називається *плануванням експерименту*. Мета будь-якого експерименту полягає в отриманні нової інформації про досліджуваний об'єкт.

Для проведення хімічних і фармацевтичних досліджень, як правило, використовується дороге обладнання і необхідні хімічні реактиви. Для того, щоб експеримент провести оптимально, важливо звести до мінімуму всі витрати на його здійснення.

Розглянемо найбільш важливі терміни та їх визначення, які застосовують при плануванні експерименту.

Експеримент – це метод дослідження, який базується на активному і свідомому втручанні дослідника у процес наукового пізнання реальних процесів (явищ) та предметів при певних умовах.

Експерименти, які спрямовані на вирішення завдань оптимізації, називають *екстремальними*, а експерименти, що спрямовані на прогнозування параметра, який залежить від низки факторів, називають *інтерполяційними*.

На першому етапі планування експерименту потрібно визначитися з об'єктом дослідження та сформулювати мету експерименту.

Об'єктом наукового дослідження називають процес чи явище, яке відбиває проблемну ситуацію і є обраним для вивчення. **Метою експерименту** називають очікуваний кінцевий результат. Формулюючи мету експерименту, потрібно відповісти на питання: «Для чого проводиться дослідження?»

Класифікація експериментів наведена на рис. 3.1.

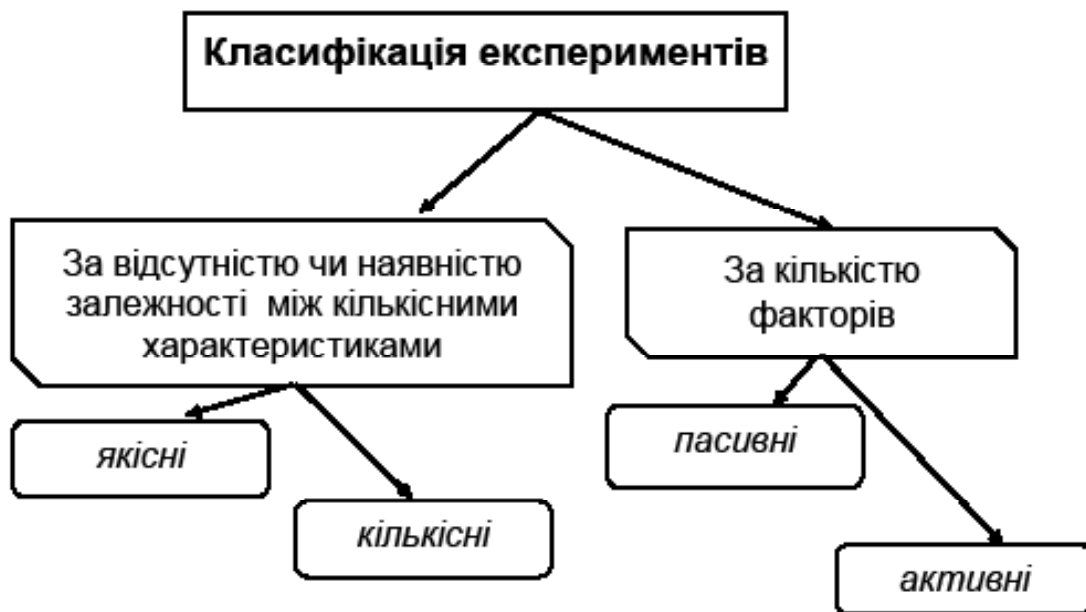


Рис. 3.1. Класифікація експериментів

Якісним експериментом називають експеримент, який встановлює лише факт наявності будь-якого явища, властивості тощо. До *кількісного експерименту* відносять експеримент, який не тільки фіксує факт наявності, але і дозволяє встановити залежність між кількісними характеристиками явища і кількісними характеристиками способів зовнішньої дії на об'єкт.

Пасивний експеримент припускає проведення великої серії дослідів з почерговою зміною значень різних вхідних змінних і

аналізом результатів вимірювань вихідної змінної. В пасивному експерименті рівні факторів у кожному досліді дослідником реєструються, але не задаються.

Активний експеримент важливо провести по заздалегідь складеному плану, відповідно до якого формулюється задача не тільки визначення оптимальних умов проведення експерименту, але і оптимізації процесу (оптимальне проведення експерименту). В активному експерименті рівні факторів у кожному досліді дослідником задаються.

При *плануванні експерименту* обирають число та умови проведення дослідів, необхідних для розв'язання задачі з необхідною точністю.

При плануванні експерименту важливо враховувати такі обмеження:

- обрати мінімальну загальну кількість дослідів;
- забезпечити одночасну зміну всіх змінних, які впливають на об'єкт дослідження;
- застосовувати в дослідженнях математичний апарат;
- дотримуватись у процесі планування та проведення експерименту чіткої стратегії, що дозволяє приймати обґрунтовані рішення після кожної серії експериментів.

Параметром оптимізації або *відгуком системи* на вплив називають величину, яка буде результатом проведення дослідів. Правильний вибір параметра оптимізації є дуже відповідальним етапом при підготовці експерименту, оскільки від вибору параметра оптимізації залежить вигляд математичної моделі експерименту.

До параметрів оптимізації висувають наступні вимоги:

- 1) дослідник повинен мати можливість їх вимірювати за будь-якого фіксованого набору рівнів факторів;
- 2) заданому набору рівнів факторів має відповідати значення параметра оптимізації;
- 3) вибирати параметр оптимізації слід таким чином, щоб він визначався з максимальною точністю;
- 4) параметр оптимізації має всебічно охарактеризувати об'єкт дослідження;
- 5) параметр оптимізації повинен мати фізичний зміст, бути простим і легко обчислюваним;

б) параметр оптимізації повинен існувати для всіх станів системи.

Успіх планування і оптимізації експерименту залежить від успішного вибору факторів. **Факторами** називають величини, що впливають на об'єкт дослідження. Кожен фактор може приймати у досліді лише одне з кількох значень. Фіксований набір рівнів кількох факторів визначатиме умови проведення експерименту. Зміна одного з факторів у такому наборі призведе до зміни умов експерименту і, як наслідок, зміни значення параметра оптимізації.

Фактори – незалежні змінні величини, що впливають на перебіг хіміко-технологічного процесу. Наприклад, тиск, температура, склад вихідної реакційної суміші тощо.

Фактори, які характеризуються певними цифровими значеннями (температура, тиск, концентрація), називаються **кількісними**. Фактори, які характеризуються наявністю або відсутністю каталізатору, модифікованого матеріалу чи немодифікованого матеріалу, застосування різних за природою кислот, називають **якісними**.

При виборі факторів експериментатору необхідно враховувати, вимоги, які до них висуваються:

- 1) керованість (значення кожного фактора підтримується сталим протягом усього експерименту);
- 2) операційність (можна вказати послідовність операцій, необхідних для призначення фактора);
- 3) точна вимірюваність (точність визначається діапазоном змін фактора);
- 4) однозначність (безпосередньо впливати на об'єкт дослідження).

Під час планування експерименту необхідно враховувати не один фактор, а кілька факторів одночасно. У разі вибору декількох обраних факторів висуваються такі вимоги:

- 1) сумісність (всі комбінації факторів повинні бути здійсненні та безпечні);
- 2) незалежність (можливість визначення вхідних факторів на будь-якому рівні незалежно від значень рівнів інших факторів).

Для знаходження оптимальних умов експерименту застосовують математичну модель експерименту, за допомогою якої можна передбачити відгук системи в станах, які експериментально не

вивчалися, але знаходяться в оптимальних умовах поставленого завдання.

Для успішної побудови математичних моделей важливі джерела інформації (рис. 3.2).



Рис. 3.2. Основні джерела інформації для побудови математичних моделей

Математичні моделі, які отримали за допомогою методів планування експерименту, називають *експериментально-статистичними моделями*.

При плануванні експерименту слід враховувати, що математичних моделей існує багато, а експериментатору важливо обрати єдину модель, яка була б простою і передбачала подальший напрямок дослідів з необхідною точністю.

Представити математичну модель можна:

- в алгебраїчній формі (вибрати вид функції, що встановлює залежність між параметром оптимізації та факторами, та записати її математичне рівняння);
- у геометричній формі (графічно побудувати поверхню відгуку, але така форма реалізується лише тоді, якщо кількість факторів не перевищує двох).

Представлення математичної моделі в геометричній формі більш наочне, ніж в алгебраїчній формі. Наприклад, для двох факторів будують поверхню відгуку як у тривимірному просторі, так і на площині.

Поверхнею відгуку називають графічну модель експерименту (рис. 3.3), а координатний простір, по осях якого відкладені фактори, що впливають на процес, – *факторним простором*.

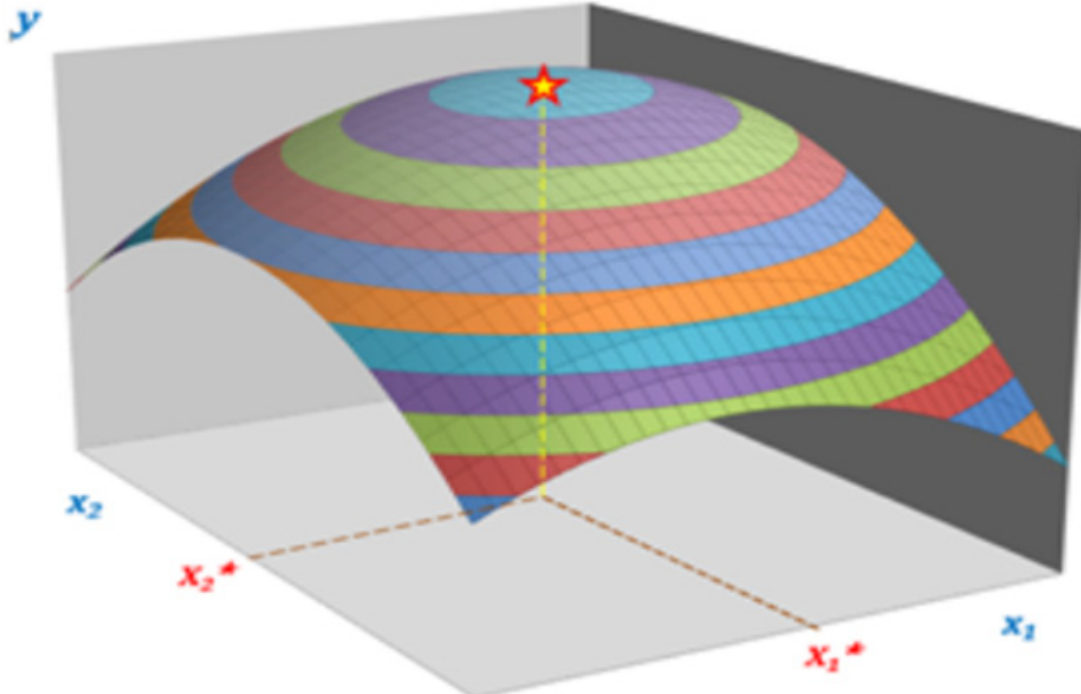


Рис. 3.3. Поверхня відгуку

Слід враховувати, що поверхня відгуку, за допомогою якої буде проведено прогнозування, має відповідати таким вимогам:

1) бути безперервною і гладкою (якщо в будь-якій точці факторного простору функція відгуку має розрив, ймовірність попадання в цю критичну область буде досить великою);

2) мати єдиний оптимум (за наявності кількох нерівноцінних оптимумів можливі невірний вибір розв'язання).

Важливість і необхідність математичного опису в хімії під час розв'язання практичних завдань полягає в наступному:

- можна отримати інформацію про вплив комбінації варіювання рівнів факторів;
- можна кількісно визначити значення функції відгуку при заданому режимі ведення процесу;
- можна застосувати для проведення оптимізації.

При реалізації експерименту, досліднику необхідно впевнитися у відтворюваності дослідів. Результати паралельних дослідів,

які проводяться в однакових умовах, повинні мати близькі значення. Число дослідів для всіх паралельних серій має бути однаковим.

Для кожної серії паралельних дослідів розраховують середнє арифметичне значення функції відгуку

$$\bar{Y}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k Y_{j,i}, \quad (3.1)$$

де j – номер серії; n – число паралельних дослідів, проведених при однакових умовах.

Оцінку дисперсію відтворюваності S_j^2 розраховують для кожної серії паралельних дослідів за рівнянням:

$$S_j^2 = \frac{1}{n-1} \sum (Y_{j,i} - \bar{Y}_j)^2. \quad (3.2)$$

Серед усіх значень дисперсії відтворюваності знаходять найбільшу величину і розраховують **критерій Кохрена** (відношення найбільшої величини дисперсії до суми розрахованих дисперсій):

$$G_p = \frac{S_j^2(\max)}{\sum_{j=1}^N S_j^2}. \quad (3.3)$$

Отримане значення порівнюють з табличним значенням $G_{\text{табл}}$ для знаходження якого необхідно знати загальну кількість оцінок дисперсій N та число ступенів свободи $f = n-1$ при довірчій імовірності $P=0,95$, з якою приймається гіпотеза про відтворюваність дослідів ($p=1-P$ називається рівнем значущості).

У разі $G_p < G_{\text{табл}}$, оцінки дисперсії вважають *однорідними*, а досліді відтворюваними, в протилежному випадку – *неоднорідними*, а досліді невідтворюваними.

Якщо досліді не відтворювані, намагаються виявити та усунити джерела нестабільності досліду, а також застосувати більш точні прилади для вимірювання. Математичні методи планування не використовуються у випадках, коли забезпечити відтворюваність дослідів неможливо.

В останні роки широке застосування комп'ютерної техніки в хімічних та фізико-хімічних дослідженнях, а також поява низки пакетів прикладних програм (Excel; Statgraphics Plus; Origin;

Statistika; Mathcad 8 Pro та ін.) значною мірою дозволили спростити розрахунки, пов'язані з моделюванням хімічного експерименту.

Контрольні питання до теми 3

1. Що таке експеримент? Чим екстремальний експеримент відрізняється від інтерполяційного?
2. Що називають об'єктом наукового дослідження?
3. Що розуміють під плануванням експерименту? Назвіть основні вимоги при плануванні експерименту.
4. Що таке параметр оптимізації? Які основні вимоги при виборі параметрів оптимізації?
5. Що таке фактор? Чим однофакторний експеримент відрізняється від багатфакторного? Які вимоги при виборі факторів?
6. Які моделі називають експериментально-статистичними?
7. В якій формі представляють математичні моделі в хімії?
8. Що називають поверхнею відклику? Які вимоги при побудові поверхні відклику?
9. Як перевірити відтворюваність дослідів?
10. Що характеризує критерій Кохрена? Як розрахувати критерій Кохрена?
11. Назвіть найпоширеніші прикладні програми, які застосовують при математичному моделюванні в хімічних і фізико-хімічних дослідженнях.

Тести до теми 3

1. Виберіть вірну відповідь: «Метод дослідження, який базується на активному і цілеспрямованому втручанні дослідника у процес наукового пізнання реальних процесів, явищ та предметів шляхом створення певних умов –це ...»:
 - А) експеримент
 - Б) планування
 - В) моделювання
 - Г) лабораторний синтез
2. Вкажіть, як називаються експерименти, спрямовані на прогнозування параметра, який залежить від низки факторів.
 - А) Інтерполяційні
 - Б) Екстраполяційні

- В) Нормальні
Г) Модельні
3. Вкажіть види експериментів за кількістю факторів.
А) Пасивні та активні
Б) Безфакторні і мультифакторні
В) Якісні і кількісні
Г) Реальні та комп'ютерні
4. Виберіть, що є результатом проведення дослідів.
А) Параметр оптимізації
Б) Критерій моделювання
В) Інформаційний звіт
Г) Вхідний параметр
5. Вкажіть, як називаються математичні моделі, які отримують за допомогою методів планування експерименту.
А) Експериментально-статистичні моделі
Б) Диференціальні моделі
В) Факторні моделі
Г) Інтегральні моделі
6. Вкажіть, як називаються експерименти, спрямовані на вирішення завдань оптимізації.
А) Екстремальні
Б) Інтерполяційні
В) Комп'ютерні
Г) Віртуальні
7. Що є критерієм істини в математичній хімії?
А) Тільки математичний доказ
Б) Обчислювальний експеримент
В) Дані хімічного експерименту
Г) Математичний доказ
Д) Тільки хімічний експеримент
8. Що таке критерій Кохрена?
А) Відношення найбільшої величини дисперсії до суми розрахованих дисперсій
Б) Відношення найменшої величини дисперсії до суми розрахованих дисперсій

- В) Найбільша величина дисперсії
 - Г) Сума всіх розрахованих дисперсій
9. Виберіть хибні твердження: «Математичне моделювання»
- А) замінює математику і хімію
 - Б) можливе без опори на методи інших наукових дисциплін
 - В) вдосконалює модель лише при її корінній переробці
дає нові стимули розвитку нових напрямів науки
 - Г) не підмінює математику і хімію
10. Враховуючи види комп'ютерних моделей, вкажіть до якого виду відноситься модель інформаційних систем.
- А) Структурно-функціональні
 - Б) Імітаційні
 - В) Фізичні
 - Г) Математичні
 - Д) Концептуальні

Тема 4 Багатофакторний експеримент в хімічних дослідженнях

Мета: сформуванати у здобувачів знання щодо планування багатофакторного експерименту в хімічних дослідженнях.

Основні питання:

- основний принцип повного факторного експерименту;
- складання матриці планування;
- рандомізація дослідів;
- перевірка відтворюваності експерименту;
- обчислення коефіцієнтів у регресійному рівнянні та його помилок значущості;
- вибір значущих коефіцієнтів регресії та запис спрощеного рівняння регресії;
- перевірка адекватності математичної моделі;
- інтерпретація одержаних результатів.

Основні поняття: «чорна скринька», повний факторний експеримент, матриця планування, рандомізація, рівняння регресії.

Планування експерименту за допомогою експериментально-статистичного моделювання є універсальним і може бути ефективно застосованим в хімічних дослідженнях. Для описання будь-якого хімічного об'єкта, що досліджується, можна застосувати кібернетичну систему («чорну скриньку»), яка схематично наведена на рис. 4.1.

«*Чорною скринькою*» називають систему, внутрішня структура якої при дослідженні не розглядається, а висновки про поведінку такої системи робляться лише за реакцією результуючих величин на зміну вхідних величин.

На рис. 4.1 позначення x_1, x_2, \dots, x_k – фактори (вхідні параметри); y_1, y_2, \dots, y_k – параметри оптимізації (вихідні параметри, параметри стану, критерії оптимізації); w_1, w_2, \dots, w_n – випадкові фактори («шум» об'єкта).

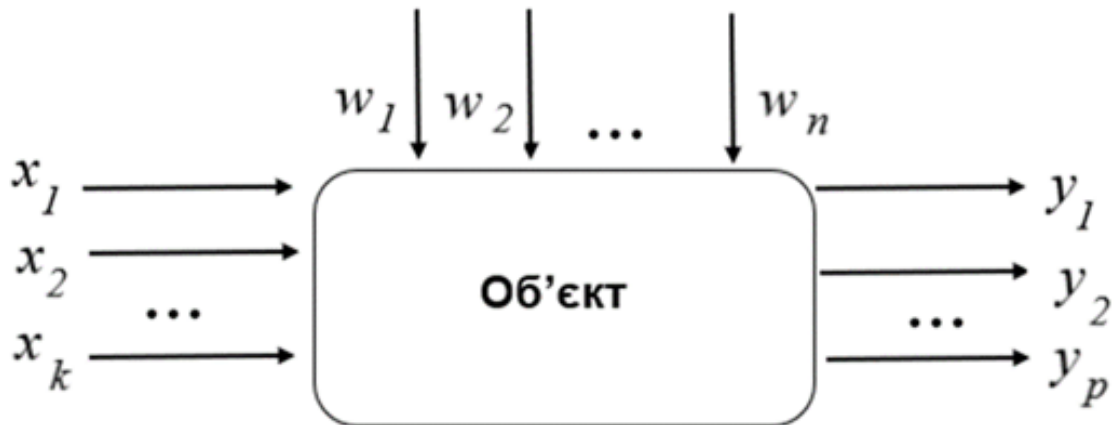


Рис. 4.1. Схема об'єкта дослідження у вигляді «чорної скриньки»

Припускають, що випадкові фактори (w) не підлягають контролю, а кожний вхідний параметр (x) має певну область визначення, яку потрібно встановити до проведення експерименту.

Суть системи «чорна скринька» полягає у встановленні залежності відгуку системи y при зміні вхідних вимірюваних та керованих параметрів x (x_1, x_2, \dots, x_k), при дії випадкових факторів w (w_1, w_2, \dots, w_n).

При розв'язанні хімічної задачі застосовують математичну модель, тобто рівняння, яке показує зв'язок між параметром оптимізації та факторами. Таке рівняння в загальному вигляді можна записати так:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k). \quad (4.1)$$

Кожен фактор x може приймати у досліді одне з декількох значень, які називаються **рівнями**. Фіксований набір рівнів факторів визначає один із можливих станів «чорної скриньки». Одночасно це є умовою проведення одного з можливих дослідів. Якщо перебрати всі можливі варіанти станів, тоді отримують безліч різних станів «чорної скриньки».

Повним факторним експериментом (ПФЕ) називають експеримент, в якому реалізуються всі можливі поєднання рівнів факторів. *Основний принцип ПФЕ* полягає у тому, що дослідник експериментально змінює кожен рівень будь-якого фактора разом із усіма рівнями інших факторів.

Якщо позначити число чинників, які впливають на експеримент, як k , а кількість рівнів, прийнятих кожним із чинників, лі-

терою m , тоді число можливих станів системи, тобто число всіх можливих дослідів, розраховують за рівнянням

$$N = m^k. \quad (4.2)$$

На практиці, як правило, зустрічаються плани ПФЕ типу 2^k (такий запис означає два рівні варіювання k факторів) для побудови функції відклику першого порядку, типу 3^k для побудови регресійних моделей у вигляді полінома другої степені та дуже рідко реалізуються експерименти при $m > 3$ у зв'язку з різким збільшенням числа незалежних дослідів (табл. 4.1).

Таблиця 4.1

Число дослідів в ПФЕ типу m^k

m	k		
	2	3	4
2	4	8	16
3	9	27	81
4	16	64	256

Слід враховувати, що реальні хімічні об'єкти зазвичай дуже складні системи. Важливим для хіміка-дослідника є таке питання: «Скільки дослідів потрібно включити до експерименту, щоб розв'язати завдання»? Для відповіді на це питання доцільно застосувати планування експерименту за допомогою ПФЕ – метода експериментально-статистичного планування, який заснований на регресійному аналізі.

У методі ПФЕ математичний опис об'єкта здійснюють за допомогою полінома n -степені, тобто відрізка ряду Тейлора, в який розкладається невідома функція

$$y(x_1, \dots, x_N) = \beta_0 + \sum_{i=1}^N \beta_i \cdot x_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \beta_{ij} \cdot x_i \cdot x_j + \\ + \sum_{\substack{i,j,u=1 \\ i \neq j \neq u}}^N \beta_{iju} \cdot x_i \cdot x_j \cdot x_u + \sum_{i=1}^N \beta_{ii} \cdot x_i^2 + \dots \quad (4.3)$$

де β_0 – вільний член; β_i – лінійні ефекти; β_{ij} – ефекти парної взаємодії; β_{ii} – квадратичні ефекти; β_{iju} – ефекти потрійної взаємодії.

Рівняння (4.3) називають *рівнянням регресії*, а коефіцієнти, які входять до нього, – *коефіцієнтами регресії*.

Важливо зазначити, що обмеженням такого підходу є жорстка прив'язка одержаних моделей до певного об'єкта дослідження, тобто результати моделювання, одержані на одному об'єкті, не можуть бути поширені на інші, навіть на подібні за структурою об'єкти. Причиною такого обмеження є те, що всі параметри об'єктів дослідження, зокрема геометричні розміри, коефіцієнти масо- і теплопередачі, константи швидкостей хімічних реакцій входять в математичну модель в неявному вигляді – вони лише враховуються при розрахунку коефіцієнтів поліномів.

На практиці найчастіше застосовують рівняння полінома першої (рівняння 4.4), другої (рівняння 4.5) або третьої степені (рівняння 4.6)

$$y = b_o + \sum_1^k b_i x_i + \sum_1^k b_{ij} x_i x_j \quad (4.4)$$

$$y = b_o + \sum_1^k b_i x_i + \sum_1^k b_{ij} x_i x_j + \sum_1^k b_{ii} x_i^2 \quad (4.5)$$

$$y = b_o + \sum_1^k b_i x_i + \sum_1^k b_{ij} x_i x_j + \sum_1^k b_{iij} x_i^2 x_j + \sum_1^k b_{ijj} x_j^2 x_i + \sum_1^k b_{iii} x_i^3 \quad (4.6)$$

В рівняннях регресії (4.4–4.6) замість символів β , що означають справжні значення, зазвичай записують символи b , які розраховують на основі експериментальних даних, тому їх чисельне значення залежить від похибки експерименту.

Вибір рівняння регресії обмежується лінійними поліномами першої степені, і якщо вони недостатньо точні, тоді застосовують поліноми другої степені. Високі степені поліномів, незважаючи на збільшення точності прогнозування, використовуються на практиці рідше, оскільки з кожним новим ступенем ускладнюється обчислення числових коефіцієнтів, а зі збільшенням коефіцієнтів зростає і число дослідів.

При реалізації ПФЕ типу m^k пропонується наступний *алгоритм дій дослідника*:

- 1) складання матриці планування експерименту;
- 2) рандомізація дослідів;
- 3) проведення експерименту та перевірка його відтворюваності;
- 4) розрахунок коефіцієнтів у регресійному рівнянні;

5) вибір значущих коефіцієнтів регресії та запис спрощеного рівняння регресії;

6) перевірка адекватності математичної моделі;

7) інтерпретація одержаних результатів.

Розглянемо більш детально алгоритм дій дослідника при плануванні та реалізації ПФЕ.

Складання матриці планування експерименту

Матрицею планування або планом експерименту називають спеціальні таблиці, кожен стовпець якої відповідає значенням (рівням) факторів, а кожен рядок – різним незалежним дослідом. Кожен стовпець матриці називають *вектор-стовпцем*, а кожен рядок *вектор-рядком*. Останній стовпець такої таблиці зазвичай містить значення параметра оптимізації, які він приймає при заданих значеннях фактора.

Приклади матриць планування представлені для експериментів типу 2^2 , 2^3 та 2^4 у табл. 4.2–4.4.

Таблиця 4.2

Матриця планування для експерименту типу 2^2

№	Фактори в безрозмірній системі координат		Параметр оптимізації
	x_1	x_2	y
1	+1	+1	y_1
2	-1	+1	y_2
3	+1	-1	y_3
4	-1	-1	y_4

Для спрощення запису умов експерименту в матриці планування та обробки експериментальних даних проводять перетворення натуральних значень факторів (які відрізняються один від одного фізичною природою і одиницями вимірювання) в кодовану форму. Для цього натуральні значення рівнів факторів X замінюють на безрозмірні x . Так, наприклад, для дворівневого експерименту рівень із меншим значенням (нижній рівень) приймається таким, що дорівнює -1, а рівень із більшим значенням (верхній рівень) приймається таким, що дорівнює +1. Для простоти запису цифру

Таблиця 4.3

Матриця планування для експерименту типу 2^3

№	Фактори в безрозмірній системі координат			Параметр оптимізації
	x_1	x_2	x_3	y
1	+1	+1	+1	y_1
2	-1	+1	+1	y_2
3	+1	-1	+1	y_3
4	-1	-1	+1	y_4
5	+1	+1	-1	y_5
6	-1	+1	-1	y_6
7	+1	-1	-1	y_7
8	-1	-1	-1	y_8

Таблиця 4.4

Матриця планування для експерименту типу 2^4

№	Фактори в безрозмірній системі координат				Параметр оптимізації
	x_1	x_2	x_3	x_4	y
1	+1	+1	+1	+1	y_1
2	-1	+1	+1	+1	y_2
3	+1	-1	+1	+1	y_3
4	-1	-1	+1	+1	y_4
5	+1	+1	-1	+1	y_5
6	-1	+1	-1	+1	y_6
7	+1	-1	-1	+1	y_7
8	-1	-1	-1	+1	y_8
9	+1	+1	+1	-1	y_9
10	-1	+1	+1	-1	y_{10}
11	+1	-1	+1	-1	y_{11}
12	-1	-1	+1	-1	y_{12}
13	+1	+1	-1	-1	y_{13}
14	-1	+1	-1	-1	y_{14}
15	+1	-1	-1	-1	y_{15}
16	-1	-1	-1	-1	y_{16}

«1» в позначенні рівнів факторів іноді не пишуть, але мають на увазі, що вона є.

Кодування факторів виконують за допомогою рівняння:

$$x_i = \frac{X_i - \bar{X}_i}{\Delta X_i}, \quad (4.7)$$

де X_i – натуральне значення i -го фактора; \bar{X}_i – середнє натуральне значення i -го фактора ΔX_i – інтервал варіювання.

Відповідно до рівняння (4.7) значення незалежної змінної x_i – це значення відхилення фактора від середнього, яке виражене в одиницях інтервалу варіювання.

Центром експерименту називають точку з координатами $x_1 = 0; x_2 = 0; x_3 = 0; \dots; x_k = 0$, що відповідає певному місцю на поверхні відгуку. Середнє між максимальним і мінімальним рівнями фактора називають основним (середнім, базовим або нульовим) рівнем фактора ($X_{i0} = \bar{X}_i$) і розраховують за наступним рівнянням

$$X_{i0} = \frac{X_{imax} + X_{imin}}{2} \quad (4.8)$$

Різниця між верхнім і нульовим рівнями фактора (або між нульовим і нижнім) називається інтервалом варіювання фактора (ΔX_i) і розраховують таким чином

$$\Delta X_i = \frac{X_{imax} - X_{imin}}{2} \quad (4.9)$$

Схематично розглянуті вище поняття можна проілюструвати рис. 4.2.



Рис. 4.2. Область визначення та область варіювання фактора

ПФЕ вважають найефективнішим методом при побудові лінійних моделей за рахунок таких властивостей:

1) симетричності щодо центру експерименту (алгебраїчна сума значень кожного зі стовпців матриці дорівнює нулю);

2) умови нормування (сума квадратів елементів кожного стовпця матриці дорівнює числу дослідів, що є наслідком того, що значення факторів у матриці задаються як +1 та -1);

3) ортогональності (сума почленних добутків двох стовпців матриці дорівнює нулю);

4) ротатабельності (експериментальні точки в матриці розташовуються таким чином, що точність передбачення периметра оптимізації однакова на рівних відстанях від центру плану і не залежить від напрямку).

Рандомізація дослідів

Для виключення впливу систематичних помилок, спричинених зовнішніми умовами (наприклад, зміною температури, сировини тощо) рекомендується застосовувати рандомізацію.

Методом рандомізації («*random*» – випадковий) називають випадкову послідовність під час постановки дослідів, запланованих матрицею. Цей метод ґрунтується на принципі перетворення систематичних похибок у випадкові. Зменшення систематичних похибок можна досягти при зміні методики та умов проведення дослідів. Наприклад, якщо реалізують план експерименту 2^k , тоді, залежно від кількості запланованих паралельних дослідів, проводять загальну кількість дослідів, зазначену в табл. 4.5. Для визна-

Таблиця 4.5

Загальне число дослідів ПФЕ типу 2^k

ПФЕ	Число повторень кожного дослідів	Загальне число дослідів
2^2	2	8
2^3	2	16
2^4	2	32
2^2	3	12
2^3	3	24
2^4	3	48

чення порядку проведення дослідів можна скористатися таблицею випадкових величин. Слід також пам'ятати, що обрану випадковим чином послідовність дослідів не рекомендується порушувати.

Плануючи експеримент, на першому етапі доцільно отримати лінійну модель. Для двофакторного, трифакторного і чотирифакторного повного факторного експерименту, відповідно типу 2^2 , 2^3 і 2^4 можна записати такі рівняння регресії у формі лінійних поліномів, які не враховують квадратичні ефекти:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 \quad (4.10)$$

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{23}x_2x_3 + b_{31}x_3x_1 + b_{123}x_1x_2x_3 \quad (4.11)$$

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_{12}x_1x_2 + b_{23}x_2x_3 + b_{31}x_3x_1 + b_{14}x_1x_4 + b_{24}x_2x_4 + b_{34}x_3x_4 + b_{123}x_1x_2x_3 + b_{234}x_2x_3x_4 + b_{134}x_1x_3x_4 + b_{234}x_2x_3x_4 + b_{1234}x_1x_2x_3x_4 \quad (4.12)$$

В регресійних рівняннях 4.10–4.12 коефіцієнти взаємодії b_{12} , b_{23} , b_{31} , b_{14} , b_{24} , b_{34} враховують ефект подвійної взаємодії факторів, а b_{123} , b_{124} , b_{234} – потрійної та b_{1234} – четверної. Ефекти взаємодії факторів характеризують взаємозв'язок факторів в процесі.

Проведення експерименту та перевірка його відтворюваності

При плануванні експерименту необхідно врахувати всі коефіцієнти регресії та записати *розширену матрицю планування* (табл. 4.6–4.8).

Відтворюваність експерименту перевіряють, розраховуючи дисперсію відтворюваності та критерій Кохрена (див. рівняння 3.1–3.3).

Таблиця 4.6

Розширена матриця планування для експерименту типу 2^2

№	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	+1	+1	+1	+1	y_1
2	+1	-1	+1	-1	y_2
3	+1	+1	-1	-1	y_3
4	+1	-1	-1	+1	y_4

Таблиця 4.7

Розширена матриця планування для експерименту типу 2^3

№	x_0	x_1	x_2	x_3	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$x_2 x_3$	$x_1 x_2 x_3$	y
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_1
2	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	y_2
3	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	y_3
4	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	y_4
5	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	y_5
6	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	y_6
7	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	y_7
8	+	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	y_8

Таблиця 4.8

Розширена матриця планування для експерименту типу 2⁴

№	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$x_2 x_3$	$x_1 x_4$	$x_2 x_4$	$x_3 x_4$	$x_1 x_2 x_3$	$x_1 x_3 x_4$	$x_2 x_3 x_4$	$x_1 x_2 x_3 x_4$	y
1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	y_1
2	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	y_2
3	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	1	1	y_3
4	1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	y_4
5	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	1	y_5
-6	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	y_6
7	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	y_7
8	1	1	1	1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	y_8
9	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	y_9
10	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	y_{10}
11	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	y_{11}
12	1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	y_{12}
13	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	y_{13}
14	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	y_{14}
15	1	-1	1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	y_{15}
16	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	y_{16}

Розрахунок коефіцієнтів регресії

Коефіцієнти регресії розраховують незалежно один від одного за допомогою рівнянь:

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j, \quad (4.13)$$

$$b_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_{ji} y_j, \quad (4.14)$$

$$b_{lm} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_{jl} x_{jm} y_j \quad (\text{де } l \neq m), \quad (4.15)$$

$$b_{lmp} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_{jl} x_{jm} y_{jp} y_j \quad (\text{де } l \neq m \neq p), \quad (4.16)$$

$$b_{lmpq} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_{jl} x_{jm} y_{jp} y_{jq} y_j \quad (\text{де } l \neq m \neq p \neq q). \quad (4.17)$$

Для розрахунку коефіцієнтів в рівняннях 4.13–4.17 залишають кодовані значення вхідних факторів, тобто одиничні вектори взяті з розширених матриць планування (табл. 4.6–4.8).

Вибір значущих коефіцієнтів регресії та запис спрощеного регресійного рівняння

Величини коефіцієнтів у рівнянні регресії характеризують вплив кожного фактора на функцію відгуку y . Перевірку значущих коефіцієнтів регресії необхідно провести для спрощення рівняння регресії, виключаючи з нього незначущі коефіцієнти. Якщо будь-який коефіцієнт незначимий, він відкидається без перерахунку інших коефіцієнтів.

Незначущість коефіцієнтів регресії може бути обумовлена такими причинами:

- 1) фактор, що відповідає незначущому коефіцієнту не впливає на функцію відгуку;
- 2) обрано малий крок варіювання незалежної змінної;
- 3) екстремум функції змінної знаходиться поблизу центру планування;
- 4) має місце велика помилка експерименту.

Фактори, що мають коефіцієнти, які значно відрізняються від нуля, можуть бути вилучені зі складу рівняння; їхній вплив на параметр відгуку буде віднесено до помилки експерименту. Деякі з коефіцієнтів регресії, які незначно відрізняються від нуля, також можуть бути незначущими.

Значущість кожного коефіцієнта регресії окремо можна перевірити двома способами:

1) Перший спосіб заснований на розрахунку похибок коефіцієнтів та побудові довірчого інтервалу. В ПФЕ для всіх коефіцієнтів рівняння регресії визначаються з однаковою точністю, а довірчі інтервали всіх коефіцієнтів рівні. Розрахунок помилок коефіцієнтів проводять за допомогою рівняння:

$$s_b = \frac{s(y)}{\sqrt{N}}, \quad (4.18)$$

де $s(y)$ – похибка всього експерименту; N – кількість незалежних дослідів.

Величину довірчого інтервалу розраховують за рівнянням:

$$\Delta b = \pm t_f \cdot s_b, \quad (4.19)$$

де t_f – табличне значення коефіцієнта Стюдента при числі ступенів свободи $f = \sum_{j=1}^N (n - 1)$ при відповідному рівні значущості (як правило, рівень значущості дорівнює 0,05).

Коефіцієнт регресії вважають значущим, якщо виконується умова $|b| \geq \Delta b$, інакше – незначимим.

2) Другий спосіб заснований на порівнянні табличного значення коефіцієнта Стюдента ($t_f^{табл}$) з розрахунковим значенням ($t_f^{розн}$).

Теоретичне значення коефіцієнта Стюдента визначають за довідковими таблицями, попередньо розрахувавши ступінь свободи $f = \sum_{j=1}^N (n - 1)$, обравши рівень значущості 0,05.

Розрахункове значення коефіцієнта Стюдента визначають за рівнянням:

$$t_f^{розн} = \frac{|b|}{s_b}. \quad (4.20)$$

Коефіцієнт регресії є значущим, якщо виконується умова, що $t_f^{розн} > t_f^{табл}$, інакше – є незначимим і під час роботи з моделлю його можна виключити з рівняння регресії.

У разі, коли тільки частина коефіцієнтів регресії значущі, а частина незначущі, слід проаналізувати причини незначущості коефіцієнтів, які можуть бути обумовлені, наприклад:

- невдалим вибором інтервалів варіювання;
- великою похибкою досліду;
- вибраним малим кроком варіювання незалежної змінної;
- включенням у матрицю планування чинників, які впливають на параметр оптимізації тощо.

Після проведеного аналізу причин незначущості коефіцієнтів регресії експериментатор може розширити інтервали варіювання за статистично незначущими факторами, провести паралельні досліді, добудувати план, переходячи до репліки меншої дрібності, планів другого порядку тощо.

Спрощене рівняння є регресійним рівнянням, у якому записані лише значущі коефіцієнти регресії, а не значущі коефіцієнти регресії не враховуються.

Перевірка адекватності моделі

Важливе питання, яке цікавить експериментатора після знаходження коефіцієнтів математичної моделі – це перевірка адекватності, тобто перевірка її придатності для вирішення поставленого завдання у межах помилки відтворюваності.

Для перевірки гіпотези адекватності отриманого рівняння регресії можна використовувати критерій Фішера (F -критерій), розрахунок якого проводять за рівнянням:

$$F_p = \frac{s_{\text{адекв}}^2}{s_i^2}, \quad (4.21)$$

де $s_{\text{адекв}}$ – дисперсія адекватності; s_i – дисперсія паралельних дослідів, розрахована за рівнянням:

$$s_i^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^N (y_{iu} - \bar{y}_i)^2,$$

де n – число паралельних дослідів; \bar{y}_i – середні значення величини y , які отримані при паралельних дослідіах; y_{iu} – значення величин y , які отримані при постановці кожного з паралельних дослідів.

Дисперсію адекватності розраховують за рівнянням:

$$S_{\text{адекв}}^2 = \frac{n \sum_{i=1}^N (y_i - \tilde{y}_i)^2}{N-L}, \quad (4.22)$$

де L – число коефіцієнтів у регресійному рівнянні, які залишилися після перевірки їхньої значущості, враховуючи вільний член; N – кількість дослідів в матриці; \bar{y}_i – середнє значення функції відгуку паралельних дослідів; \tilde{y}_i – значення функції відгуку, розраховане за регресійним рівнянням в i -му досліді.

Табличне значення критерію Фішера ($F_{\text{табл}}$) знаходять, попередньо розрахувавши числа ступенів свободи: $f_1=N-L$ і $f_2=N(n-1)$ при рівні значущості 0,05.

Розрахункове значення критерію Фішера порівнюють із табличним значенням. Якщо розрахункове значення критерію Фішера менше табличного, тобто якщо виконується умова $F_{\text{розрах}} < F_{\text{табл}}$, то отримане регресійне рівняння адекватно описує експеримент. Якщо умова не виконується, тоді регресійне рівняння вважають неадекватним і потрібна зміна полінома (вводять нові фактори, змінюють порядок полінома тощо).

Таким чином, процедура оцінки статистичної коректності результатів експерименту і регресійного рівняння передбачає:

- обчислення значень коефіцієнтів кореляції між кожною парою факторів та виключення з розгляду факторів, які не містять додаткової інформації про об'єкт дослідження;
- попередня обробка експериментальних даних;
- перевірка умови відтворюваності дослідів шляхом обчислення значення критерію Кохрена;
- отримання регресійного рівняння вибраного виду;
- перевірка значущості коефіцієнтів регресійного рівняння за критерієм Стюдента, виключення із рівняння незначущих коефіцієнтів;
- визначення рівня стохастичного зв'язку між результатами експерименту та регресійним рівнянням шляхом обчислення коефіцієнта кореляції;
- перевірка адекватності рівняння регресії об'єкта дослідження шляхом обчислення значення критерію Фішера та порівняння з табличним значенням.

Інтерпретація моделі

Інтерпретацією моделі називають тлумачення математичної моделі мовою експериментатора. Завдання інтерпретації дуже складне та його зазвичай вирішують у кілька етапів.

На першому етапі встановлюють, якою мірою кожен із чинників впливає на параметр оптимізації. Коефіцієнти регресії в рівнянні математичної моделі є похідними функції відгуку за відповідними змінними. Їхній геометричний зміст полягає в тому, що вони дорівнюють тангенсам кутів нахилу гіперплощини до відповідної осі. Більший по абсолютній величині коефіцієнт регресії відповідає більшому куту нахилу і, отже, більшій зміні параметра оптимізації при зміні даного фактора.

Додатне значення коефіцієнта регресії свідчить, що зі збільшенням значення фактора зростає величина параметра оптимізації, а від'ємне значення коефіцієнта регресії свідчить, що зі збільшенням значення фактора зменшується величина параметра оптимізації.

Інтерпретація знаків при оптимізації залежить від того, шукає дослідник максимум чи мінімум функції відгуку.

Якщо $y \rightarrow \max$, тоді збільшення значень всіх факторів, коефіцієнти яких мають додатні значення, буде сприятливо, а збільшення значень всіх факторів, коефіцієнти яких мають від'ємні значення – несприятливо. Для умови $y \rightarrow \max$, якщо коефіцієнт регресії від'ємний, то для збільшення параметра оптимізації треба зменшувати значення фактора, а якщо додатний, то збільшувати.

Якщо $y \rightarrow \min$, тоді навпаки, сприятливим буде збільшення значень тих факторів, знаки коефіцієнтів яких від'ємні, а у разі, якщо вони мають додатні значення – збільшення значень цих факторів буде несприятливим.

Далі з'ясовується, як розташувати сукупність факторів у ряд за силою їхнього впливу на параметр оптимізації, не враховуючи фактори, коефіцієнти яких незначущі.

На другому етапі зіставляють апріорні відомості про характер дії факторів, джерелом яких можуть бути досвід роботи з аналогічними процесами, попередньо проведені досліди тощо з отриманими коефіцієнтами регресії. Наприклад, прогнозується, що зі збільшенням температури має відбуватися збільшення оптиміза-

ції параметра, а коефіцієнт регресії матиме від'ємне значення. У цьому випадку основними причинами такої суперечності можуть бути наступні причини: або в експерименті припущена помилка, і він повинен бути перевірений, або невірні апріорні уявлення. Слід також враховувати, що апріорна інформація часто ґрунтується на однофакторних залежностях та при переході до багатофакторного експерименту ситуація може змінитися. Для подолання протиріччя доцільно пропонувати різні гіпотези та перевіряти їх експериментально.

При інтерпретації ефектів взаємодії не завжди можна отримати однозначну інформацію, як у разі лінійних ефектів. Насамперед, враховують знаки лінійних ефектів відповідних факторів. Наприклад, якщо ефект взаємодії двох факторів має знак плюс, відповідні лінійні ефекти від'ємні. Однак можливий випадок коли знаки лінійних ефектів будуть різними. Тоді доводиться враховувати чисельні значення коефіцієнтів і жертвувати найменшим ефектом.

Якщо значущим виявився ефект взаємодії трьох чинників, його можна пояснити так. Цей ефект може мати знак плюс, якщо від'ємні знаки будуть у парних факторів (нуль або будь-які два). Знак мінус буде, якщо непарна кількість факторів матиме знак мінус (усі три або будь-який один). Це поширюється на взаємодії будь-яких порядків. Користуються ще таким прийомом: добуток двох факторів умовно вважають одним фактором та зводять трифакторну взаємодію до парної взаємодії тощо.

Отже, інтерпретація рівняння регресії важлива як для розуміння хімічного процесу, так й для прийняття рішень при його оптимізації.

Контрольні питання до лекції 4

1. Сформулюйте основний принцип ПФЕ.
2. Поясніть, що означає ПФЕ типу 2^k ?
3. Що називають методом ПФЕ?
4. Назвіть алгоритм планування і реалізації ПФЕ типу m^k .
5. Що таке рандомізація?
6. Які величини застосовують в ПФЕ для перевірки відтворюваності експерименту?

7. Що таке регресійне рівняння і як розрахувати коефіцієнти в регресійному рівнянні?
8. Як обрати значущі коефіцієнти регресії?
9. Як провести перевірку адекватності математичної моделі?
10. Що таке інтерпретація математичної моделі? Яка задача інтерпретації математичної моделі і як її розв'язують?

Тести до теми 4

1. План експерименту – це ...
 - А) матриця експерименту
 - Б) спеціальні таблиці, кожен стовпець якої відповідає рівням факторів, а кожен рядок – різним незалежним дослідом
 - В) алгоритм дії дослідника, записаний у вигляді складного плану
 - Г) методика виконання досліджень
2. Розрахуйте кількість дослідів, яку потрібно реалізувати в ПФЕ на двох рівнях, якщо на екстракцію антоціанів з ягід чорниці етанолом впливає концентрація етанолу, час екстракції та температура, а вихідними параметрами обрано концентрацію антоціанів в екстракті та антиоксиданту активність екстракту.
 - А) 6
 - Б) 8
 - В) 10
 - Г) 12
3. Вкажіть, що зазвичай записують в останній стовпець матриці?
 - А) вихідний параметр
 - Б) параметр оптимізації
 - В) вхідний параметр
 - Г) вхідний фактор
4. Виберіть вірні координати центру експерименту на поверхні відгуку.
 - А) $x_1 = 0; x_2 = 0; x_3 = 0; \dots; x_k = 0$
 - Б) $x_1 = 1; x_2 = 1; x_3 = 1; \dots; x_k = 1$
 - В) $x_1 = 0; x_2 = 1; x_3 = 0; \dots; x_k = 1$
 - Г) $x_1 = 1; x_2 = 0; x_3 = 1; \dots; x_k = 0$

5. Що називають основним рівнем фактора?
- А) середнє значення між максимальним і мінімальним рівнями фактора
 - Б) різницю між верхнім і нульовим рівнями фактора
 - В) різницю між нульовим і нижнім рівнями фактора
 - Г) відхилення фактора від середнього значення
6. Вкажіть, як називаються математичні моделі, які отримують за допомогою метода ПФЕ:
- А) математично-статистичні
 - Б) диференціальні
 - В) факторні
 - Г) інтегральні
7. Вкажіть, на якому принципі базується метод рандомізації.
- А) перетворення систематичних похибок на випадкові
 - Б) перетворення випадкових похибок на систематичні
 - В) відповідності
 - Г) непереривності
8. При якій умові досліди вважаються відтворюваними і спостерігається однорідність дисперсії?
- А) $G_p < G$
 - Б) $G_p = G$
 - В) $G_p > G$
 - Г) $G_p < 0$
9. Виберіть вірне твердження: «За результатами повного факторного досліду всі регресійні коефіцієнти визначаються ...»
- А) з однаковою похибкою
 - Б) з різною похибкою
 - В) без врахування похибки
 - Г) з мінімальною похибкою
 - Д) з максимальною похибкою
10. Виберіть умову, при якій коефіцієнт регресії є значущим.
- А) $t_f^{\text{розр}} \geq t_f^{\text{табл}}$
 - Б) $t_f^{\text{розр}} = t_f^{\text{табл}}$
 - В) $t_f^{\text{розр}} \leq t_f^{\text{табл}}$
 - Г) $t_f^{\text{розр}} \approx t_f^{\text{табл}}$

11. Виберіть умову, при якій регресійне рівняння вважається адекватним.

- А) $F_{\text{розр}} \geq F_{\text{табл}}$
- Б) $F_{\text{розр}} = F_{\text{табл}}$
- В) $F_{\text{розр}} \leq F_{\text{табл}}$
- Г) $F_{\text{табл}} \approx F_{\text{розр}}$

12. Виберіть вірну відповідь: «За допомогою математичних методів моделювання експерименту ...»

- А) можна одержати математичну модель хіміко-технологічного процесу при відсутності інформації про механізм його перебігу
- Б) не можна одержати математичну модель хіміко-технологічного процесу при відсутності інформації про механізм його перебігу
- В) можна одержати математичну модель хіміко-технологічного процесу при відсутності інформації про швидкість
- Г) не можна одержати математичну модель хіміко-технологічного процесу при відсутності інформації про швидкість

13. Виберіть причини, які обумовлюють незначущість коефіцієнтів регресії:

- А) невдалий вибір інтервалів варіювання
- Б) маленька похибка дослідів
- В) великий крок варіювання незалежної змінної
- Г) включення у матрицю планування чинників, які впливають на параметр оптимізації

14. Вкажіть вірне твердження: «Для розрахунку значення оцінки дисперсії адекватності потрібно знати»

- А) число значущих коефіцієнтів регресії і число незначущих коефіцієнтів регресії
- Б) загальне число дослідів і критерій Фішера
- В) число експериментів в паралельних дослідів і критерій Кохрена
- Г) число значущих коефіцієнтів регресії та загальне число дослідів

- Д) загальне число дослідів та число експериментів
в паралельних дослідах
15. Для знаходження табличного значення критерію Фішера потрібно знати:
- А) число значущих коефіцієнтів регресії і число незначущих коефіцієнтів регресії
 - Б) загальне число дослідів і критерій Фішера
 - В) число експериментів в паралельних дослідах і критерій Кохрена
 - Г) число значущих коефіцієнтів регресії та загальне число дослідів
 - Д) загальне число дослідів та число експериментів
в паралельних дослідах
16. Виберіть вірне твердження: «ПФЕ – це...»
- А) експеримент, у якому використовуються всі можливі комбінації всіх рівнів факторів
 - Б) експеримент, у якому використовуються деякі можливі комбінації всіх рівнів факторів
 - В) експеримент, у якому використовується всі можливі комбінації всіх рівнів одного фактора
 - Г) експеримент, у якому використовуються різні фактори

Тема 5

Оптимізація хімічних досліджень на основі статистичних методів і моделей

Мета: сформуванати у здобувачів знання щодо застосування регресійних рівнянь багатofакторного експерименту для оптимізації хімічних досліджень

Основні питання:

- оптимізація хімічного процесу;
- критерій оптимальності;
- задача оптимізації;
- розрахунок крутого сходження;
- причини зупинення руху до оптимуму в методі крутого сходження;
- оптимізація симплексним методом.

Основні поняття: оптимізація процесу, критерій оптимальності, цільова функція, метод крутого сходження, симплекс.

Оптимізація хімічних досліджень – це одна з найважливіших прикладних задач. *Оптимізацією* хімічного процесу називають цілеспрямований пошук найкращих у певному розумінні умов його проведення, тобто цілеспрямований пошук значень вхідних факторів, що впливають, і при яких досягається екстремум критерію оптимальності.

Критерій оптимальності або *цільова функція* – це величина, що характеризує рівень оптимізації. Хімічний процес, як правило характеризують декількома показниками. Бажано, щоб усі показники одночасно досягали своїх найкращих значень. На практиці, як правило, неможливо знайти таке поєднання значень вхідних факторів, при якому одночасно досягаються екстремуми всіх необхідних функцій відгуку.

Одержане за допомогою ПФЕ рівняння регресії використовують для побудови математичної моделі хімічного процесу, а також для його оптимізації.

Задача оптимізації полягає в тому, щоб при дослідженні залежності вихідного параметра Y від вхідних параметрів X_1, X_2, \dots, X_n визначити ті значення факторів, при яких величина Y приймає екстремальне (максимальне або мінімальне) значення. Наприклад, при синтезі лікарської сполуки важливо отримати максимальний вихід речовини. При очистці стічної води гальванічного виробництва від йонів важких металів потрібно отримати очищену воду з концентрацією йонів важких металів нижче ГДК у воді водойм господарсько-питного водокористування.

Більшість відомих методів експериментальної оптимізації базуються на принципі послідовного проведення експериментів, тобто умови проведення чергової серії дослідів визначаються кожного разу за результатами попередньої серії дослідів.

Зазвичай для характеристики хімічного процесу застосовують декілька функцій відгуку. На практиці, як правило, неможливо знайти таке поєднання значень вхідних факторів, при якому одночасно досягаються екстремуми всіх необхідних функцій відгуку. При реалізації експерименту або технологічного режиму слід враховувати, що вхідні фактори і функції відклику можуть змінюватися лише в певних межах, тобто оптимізація можлива в умовах обмежень на вхідні фактори і функцію відклику.

Після одержання адекватної математичної моделі досліджують рух по градієнту до екстремуму функції відгуку. Оптимальний шлях – це напрямок градієнта. Градієнт визначається через частинні похідні функції відгуку за i -м фактором і оцінками таких частинних похідних є коефіцієнти рівняння регресії. Змінюючи незалежні змінні пропорційно величинам коефіцієнтів регресії, можна рухатися в напрямку градієнта функції відгуку по найбільш короткому шляху тобто *методом крутого сходження* (методом Бокса-Уілсона).

Суть розрахунку крутого сходження полягає в наступному. Значення коефіцієнта регресії дорівнює тангенсу кута між лінією регресії і віссю даного фактора (рис. 5.1). Якщо його помножити на інтервал варіювання фактора (відрізок ОА на рисунку), то вийде протилежний катет (відрізок АВ) прямокутного трикутника ОАВ, що і дає координати точки (точка В на рис. 5.1), що лежить на градієнті.

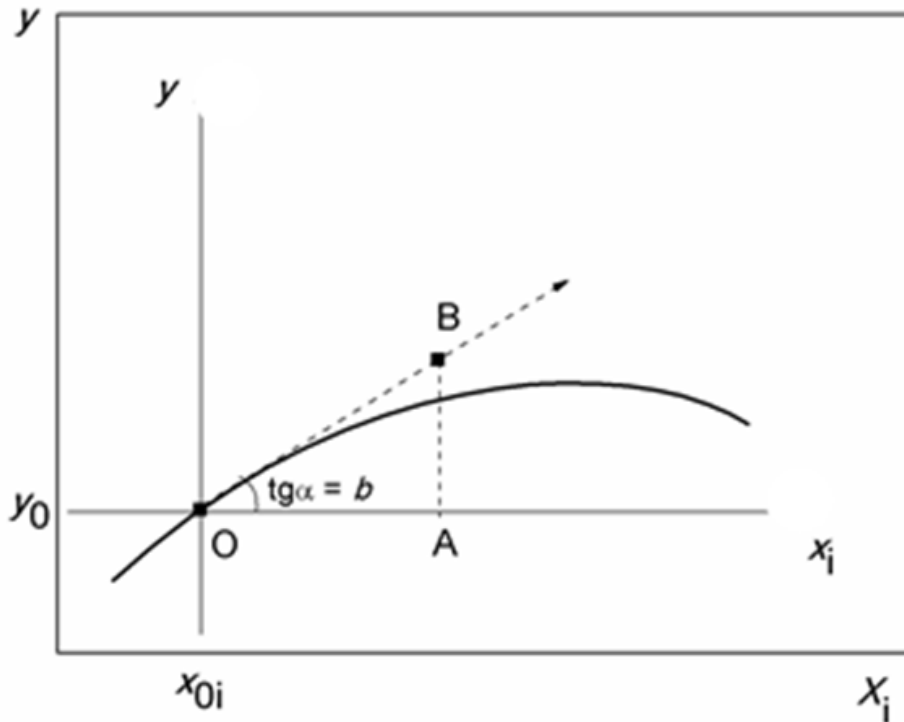


Рис. 5.1. Схема розрахунку координат точок при русі в напрямку градієнта функції відгуку

Один з факторів, що впливає, приймають за *базовий* і обчислюють добуток відповідного коефіцієнта регресії на крок варіювання. Наприклад, для першого фактора x_1 такий добуток має вигляд $b_1 \Delta x_1$. Далі для базового фактора визначають крок руху Δx_1^* , де $\Delta x_1^* \leq \Delta x_1$ і розраховують співвідношення:

$$\gamma = \frac{\Delta x_1^*}{b_1 \Delta x_1} \quad (5.1)$$

Для всіх інших факторів кроки руху до оптимальних значень розраховують за рівнянням:

$$\Delta x_i^* = \gamma b_i \Delta x_i \quad (5.2)$$

Величина кроку Δx_i^* вибирається дослідником апріорно, а всі наступні кроки визначають шляхом алгебраїчного (тобто з урахуванням знака) додатка Δx_i^* до нульового рівня відповідного фактора. Кроки, як правило, доцільно округлити до цілих значень.

При виконанні оптимізації рух до оптимуму може бути зупиненим з двох причин:

1. Значення одного або декількох факторів або функції відгуку вийшли за межі припустимих значень (наприклад: концентрація реагентів не може бути від'ємною, а тиск в апараті не може перевищувати припустимого).

2. Досягнутий екстремум критерію оптимальності (функції відгуку).

У першому випадку на цьому оптимізація закінчується.

У другому випадку в області екстремума функції $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ шукають її новий математичний опис, але тепер у вигляді:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_nx_n + b_{12}x_1x_2 + \dots + b_{(n-1)n}x_{n-1}x_n,$$

враховуючи можливі взаємодії параметрів. Використовують повний факторний експеримент і враховують тільки значимі фактори. Якщо вдається одержати адекватний опис цієї функції, то приступають до інтерпретації отриманого рівняння регресії. Якщо є апріорне припущення про можливість існування декількох екстремумів досліджуваної функції відгуку, то продовжують оптимізацію методом крутого сходження, оскільки існує ймовірність того, що оптимум, знайдений у результаті першого крутого сходження, міг бути локальним.

Якщо ж в області оптимуму не вдається одержати адекватного рівняння регресії, то переходять до планування експерименту для одержання математичного опису функції y у вигляді багаточлена другого ступеня:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_nx_n + b_{12}x_1x_2 + \dots + b_{(n-1)n}x_{n-1}x_n + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + \dots + b_{nn}x_n^2$$

Приклад розрахунків з оптимізації

Потрібно провести оптимізацію синтезу деякої лікарської сполуки. Як параметр оптимізації обрано вихід продукту Y , %. Вхідні фактори: вміст розчинника (відношення кількості розчинника до основної речовини) – X_1 , температура – X_2 і час перебігу реакції

– X_3 . Кодоване регресійне рівняння: $y=67,81-2,49x_1+2,14x_2+1,81x_3$.
Умови проведення синтезу наведені в табл. 5.1. Крок зміни Δx_i^* прийняти рівним «- 0,05».

Таблиця 5.1

Умови проведення повного факторного експерименту синтезу деякої лікарської сполуки

УМОВИ	X_1	$X_2, ^\circ C$	$X_3, хв$
X_i^o	0,5	150	60
D	0,05	5	10
X_i, max	0,55	155	70
X_i, min	0,45	145	50

Розв'язання

Таблиця 5.2

Застосування методу крутого сходження

УМОВИ	X_1	$X_2, ^\circ C$	$X_3, хв$	$Y, \%$
X_i^o	0,5	150	60	4,95
D	0,05	5	10	67,8
b_i	-2,49	2,14	1,81	-
$b_i \cdot D$	-0,12	10,7	18,1	-
Δx_i^*	-0,05	4,45 \approx 5	7,54 \approx 8	-
1-й крок	0,45	155	68	74,8
2-й крок	0,40	160	76	81,9
3-й крок	0,35	165	84	89,0
4-й крок	0,30	170	92	96,0

Записуємо регресійне рівняння в натуральному вигляді, враховуючи рівняння

$$x_i = \frac{X_i - X_i^o}{\Delta X_i}$$

$$Y = -12,35 - 49,8X_1 + 0,628X_2 + 0,181X_3$$

Розраховуємо значення вхідних параметрів для 1, 2, 3 і 4 кроку і теоретичне значення вихідного параметра при цих значеннях вхідних параметрів. Роблять висновок щодо оптимальних умов процесу.

Для оптимізації хіміко-технологічних процесів також використовується *симплексний метод*. Симплексом називають правильний багатогранник з $n+1$ вершинами, де n – число впливаючих факторів. При кількості факторів, що дорівнює двом, симплекс являє собою правильний трикутник (рис. 5.2).

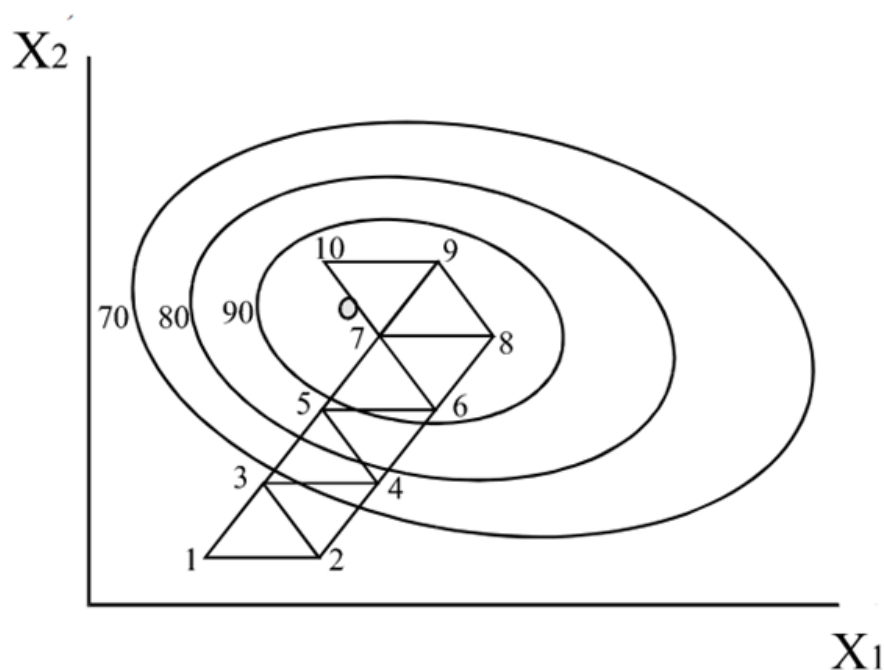


Рис. 5.2. Оптимізація симплексним методом

Початкова серія дослідів відповідає вершинам вихідного симплексу (т. 1, 2, 3). Порівнюючи між собою результати дослідів в даних точках, знаходимо серед них “найгірший” з точки зору обраного критерію оптимальності. Нехай, самим “невдалим” є дослід в т. 1. Даний дослід вилучають з симплексу, замість нього вводять дослід в т. 4, що розташований симетрично до т. 1 відносно протилежної сторони трикутника. Далі процедуру порівняння нового симплексу проводимо знову, вилучаючи “невдалий” дослід і замінюючи його новими. Таким чином одержують нові симплекси, що описують залежність між впливаючими факторами та функціями відгуку.

Якщо досягнуто екстремум критерію оптимальності, подальше проходження симплексу закінчується. Це визначає, що новий крок повертає дослідника в попередню точку факторного простору (т. 8 і т. 10). Необхідно відмітити, що симплексний метод є локальним методом пошуку екстремуму. Це означає, що в разі існування в факторному просторі, що розглядається, декількох екстремумів

критерію оптимальності, даний метод дозволяє знайти той з них, що розташований ближче до точки вихідного симплексу. Тому, якщо існує декілька екстремумів, оптимізацію необхідно здійснювати з нової точки факторного простору з наступним порівнянням знайдених критеріїв оптимальності до вимог проведення хіміко-технологічного процесу.

У процесі оптимізації необхідно враховувати ті обмеження, що накладаються на впливаючі фактори та функції відгуку. При використанні симплексного методу дублювання дослідів є необов'язковим. Похибка в окремому досліді може тільки уповільнити процес оптимізації. Симплексний метод широко використовується при вивченні властивостей сумішей, що залежать від концентрації компонентів суміші.

Контрольні питання до лекції 5

1. Що називають оптимізацією процесу? Що таке критерій оптимальності?
2. Сформулюйте задачу оптимізації.
3. Охарактеризуйте оптимізацію процесу методом крутого сходження.
4. Які особливості метода крутого сходження?
5. Що називають критерієм оптимальності?
6. Що таке симплекс? Охарактеризуйте оптимізацію симплексним методом.
7. Поясніть переваги та недоліки симплексного методу оптимізації.
8. Який алгоритм дій дослідника щодо проведення оптимізації хімічного експерименту?
9. Що потрібно врахувати при оптимізації хімічного експерименту із застосуванням метода крутого сходження?
10. Як розрахувати крок змін вхідних параметрів?
11. Скільки кроків потрібно врахувати при оптимізації методом крутого сходження?
12. Як розкодувати рівняння регресії?
13. Що таке симплекс?
14. Охарактеризувати оптимізацію симплексним методом.

Тести до теми 5

1. Виберіть вірне твердження: «Якщо здійснюється пошук мінімуму критерію оптимальності, то нові значення факторів x_1, x_2, \dots, x_n розраховуються шляхом ...»
 - А) віднімання Δx_1^*
 - Б) віднімання Δx_i
 - В) додавання Δx_i
 - Г) додавання Δx_1^*
2. Виберіть вірне твердження: «Якщо здійснюється пошук максимуму критерію оптимальності, то нові значення факторів x_1, x_2, \dots, x_n розраховуються шляхом ...»
 - А) додавання Δx_1^*
 - Б) додавання Δx_i
 - В) віднімання Δx_i
 - Г) віднімання Δx_1^*
3. Виберіть вірні відповіді: «Одержане за допомогою методу ПФЕ рівняння регресії використовують»
 - А) тільки для оптимізації процесу
 - Б) тільки для побудови математичної моделі процесу
 - В) для побудови математичної моделі процесу і його оптимізації
 - Г) прогнозування перебігу процесу
4. Величина, яка характеризує рівень оптимізації, називається ...
 - А) параметром оптимальності
 - Б) показником оптимальності
 - В) критерієм оптимальності
 - Г) цільовою функцією
5. Хто з вчених запропонував проводити оптимізацію методом крутого сходження?
 - А) Бокс і Уїлсон
 - Б) Фішер і Кохрен
 - В) Гаусс і Жордан
 - Г) Берч і Клейман

Список літератури

1. Солтис М. М., Закордонський В. П. Математичне моделювання у хімії та хімічній технології. Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2011. 328 с.
2. Булах І. Є., Войтенко Л. П., Кривенко І. П. Комп'ютерне моделювання в фармації: навч. посібник. 2-е вид., випр. К.: ВСВ «Медицина», 2017. 208 с.
3. Комп'ютерне моделювання у фармації: підручник для студентів фармацевтичного факультету спеціальностей «Фармація», «Промислова фармація» за програмою навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання у фармації»/ Рижов О. А., Страхова О. П., Іванькова Н. А. Львів: Видавець Марченко Т. В., 2023. 300 с.
4. Кислий В. М. Організація наукових досліджень: навчальний посібник. Суми: Університетська книга, 2011. 224 с.
5. Karimifard S., Moghaddam M. R. A. Application of response surface methodology in physicochemical removal of dyes from wastewater: A critical review. *Science of The Total Environment*. 2018. V. 640–641. P. 772–797.

Навчальне видання

Солдаткіна Людмила Михайлівна

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ І ОПТИМІЗАЦІЯ ХІМІЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

КОНСПЕКТ ЛЕКЦІЙ

до змістового модуля «Моделювання, планування
та оптимізація хімічних досліджень»
для здобувачів другого (магістерського) рівня вищої освіти
спеціальності 102 «Хімія»

Електронне видання мережевого використання

В авторській редакції

Верстка С. О. Остапенко

Затвердж. авт. 19.04.2024. Шрифт Times New Roman.
Системні вимоги: операційна система сумісна з програмним забезпеченням
для читання файлів формату PDF.
Обсяг 1,4 МБ. Зам. № 2789.

Видавець і виготовлювач
Одеський національний університет імені І. І. Мечникова
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4215 від 22.11.2011 р.
65082, м. Одеса, вул. Університетська, 12, Україна
Тел.: (048) 723 28 39, e-mail: druk@onu.edu.ua