

Экспериментальный метод построения моделей технологических объектов

Основным принципом моделирования технологических систем, содержащих стохастические или вероятностные элементы, является разыгрывание выборок по методу Монте-Карло. В этом методе данные предшествующего опыта вырабатываются искусственно путем использования некоторого генератора случайных чисел в сочетании с интегральной функцией распределения вероятностей для исследуемого процесса. Таким генератором может быть таблица, колесо рулетки, подпрограмма ЭВМ или какой-либо другой источник равномерно распределенных случайных чисел. Подлежащее разыгрыванию распределение вероятностей может быть основано на эмпирических данных или представлять собой известное теоретическое распределение. Случайные числа используются для получения дискретного ряда случайных переменных, имитирующего результаты, которые можно было бы ожидать в соответствии с разыгрываемым вероятностным распределением.

Способ применения метода Монте-Карло по идее довольно прост. Чтобы получить искусственную случайную выборку из совокупности величин, описываемую некоторой функцией распределения вероятностей, следует обеспечить возможность получения равномерно распределенных случайных чисел и далее использовать эти числа для генерации случайных величин с требуемыми характеристиками. Библиотеки программ большинства ЭВМ включают с этой целью специальные стандартные программы для наиболее распространенных законов распределения. При разработке имитационной модели, содержащей стохастические или вероятностные элементы, всегда возникает вопрос, следует ли при методе Монте-Карло применять непосредственно эмпирические данные или же нужно воспользоваться одним из теоретических распределений. Этот вопрос очень важен и фундаментален по трем причинам. Во-первых, при использовании «сырых» эмпирических данных подразумевается, что моделируется только прошлое. Данные полученные вчера, строго говоря, отображают лишь вчерашнее поведение системы; возможными событиями оказываются только те, что уже произошли. Следовательно, необходимо предположить, что основная форма распределения вероятностей останется неизменной во времени и что его особенности, относящиеся к определенному периоду времени, будут повторяться. Во-вторых, использование теоретического распределения в большинстве случаев дает лучшие результаты с точки зрения затрат машинного времени и требуемого объема памяти ЭВМ. В-третьих, при использовании теоретического распределения гораздо легче изменять параметры генератора случайных чисел, когда требуется проверить чувствительность модели или «проиграть» на ней различные возможные ситуации. Поэтому целесообразно сразу же проверить, не согласуются ли имеющиеся эмпирические данные с известным теоретическим распределением (на статистически приемлемом доверительном уровне). Если да, то следует воспользоваться теоретическим распределением.

Для проверки совместимости экспериментальных данных (гистограмм) с некоторым теоретическим распределением исследователь подбирает одно или несколько теоретических распределений (например, нормальное, Пуассона, биномиальное, экспоненциальное, гамма-распределение и т.д.). После этого ему следует определить параметры распределения с тем, чтобы подвергнуть их проверке по статистическим критериям.

Для статистической оценки гипотезы о том, что совокупность эмпирических, или выборочных данных незначительно отличается от той, которую можно ожидать при некотором теоретическом законе распределения, применяется критерий «хи-квадрат», предложенный Пирсоном. В этом случае статистика χ^2 определяется выражением

$$\chi^2 = \sum (f_0 - f_i)^2 / f_i,$$

где f_0 – наблюдаемая частота для каждой группы или интервала; f_i – ожидаемая частота для каждой группы или интервала; \sum – предсказанная теоретическим распределением сумма по всем группам или интервалам.

Если $\chi^2 = 0$, то наблюдаемые и теоретически предсказанные значения частот точно совпадают; если $\chi^2 > 0$, то полного совпадения нет. В последнем случае мы должны сравнивать наши расчетные значения с табличными (критическими) значениями χ^2 , полученными Фишером для различных чисел степеней свободы и уровней доверительной вероятности $1-\alpha$. При практическом использовании этой статистики высказывается так называемая нулевая гипотеза H_0 о том, что между наблюдаемым и ожидаемым теоретическим распределением с теми же параметрами нет значительных расхождений. Если расчетная величина χ^2 оказывается больше критического табличного значения, то можно заключить, что при данном уровне доверительной вероятности наблюдаемые частоты значительно отличаются от ожидаемых, и тогда следовало бы отвергнуть гипотезу H_0 .

Еще один широко используемый критерий для статистической проверки гипотез был предложен Смирновым и Колмогоровым. Он применяется в тех случаях, когда применяемое распределение непрерывно. Проверка осуществляется путем задания интегральной функции, следующей из теоретического распределения, и ее сравнения с интегральной функцией распределения эмпирических данных. Сравнение основывается на выборочной группе, в которой экспериментальное распределение имеет наибольшее абсолютное отклонение от теоретического. Далее эта абсолютная разность сопоставляется с критическими значениями с целью определения, может ли такое отклонение быть случайным при данном законе распределения.

Естественно возникает вопрос, когда следует пользоваться критерием χ^2 , а когда критерием Смирнова-Колмогорова? При относительно малых объемах выборок критерий χ^2 вообще неприменим и следует пользоваться критерием Смирнова-Колмогорова. Однако, если объем выборки велик, предпочтителен, по всей вероятности, критерий χ^2 .

Во многих подсистемах технологического объекта имеет место функциональная связь между двумя или более переменными, и желательно эту связь выявить. Чаще всего эта связь чрезвычайно сложна или совершенно не известна. В таких случаях мы можем столкнуться с необходимостью ввести некоторую гипотезу о характере функциональной зависимости, т.е. аппроксимировать ее некоторым относительно простым математическим выражением, например, многочленом. Для поиска таких функциональных или структурных зависимостей между двумя или более переменными по накопленным экспериментальным данным весьма полезны методы регрессионного и корреляционного анализа [6]. Регрессионный анализ дает возможность построить, исходя из имеющейся совокупности экспериментальных данных, уравнение, вид которого задает исследователь, а корреляционный анализ позволяет судить о том, насколько хорошо экспериментальные данные согласуются с выбранным уравнением («ложатся» на соответствующую кривую).

Экспериментальный метод заключается в проведении на действующем объекте эксперимента (подаче экспериментального сигнала x^3 и записи реакции на него выходных координат y^3) и аппроксимации опытных данных x^3, y^3 некоторой формальной математической зависимостью F . Структура F не зависит явно от свойств перерабатываемых в объекте веществ и характеристик физико-химических процессов и выбирается из условий удобства определения вектора a и применения ММ (обычно задается линейная по a структура F).

В зависимости от способа задания x^3 различают активные и пассивные экспериментальные методы. В активных методах экспериментатор сам создает испытательный сигнал x^3 желаемой формы, в пассивных методах используются естественные случайные изменения входных и выходных координат объекта.

Экспериментальный метод построения ММ базируется на трех допущениях: 1) объект есть система с сосредоточенными координатами; 2) статические и динамические свойства объекта неизменны во времени, т.е. ММ стационарны; 3) уравнения статики и динамики линеаризуемы в малом, т.е. при небольших отклонениях y от установившегося состояния.

Справедливость второго и третьего допущений проверяется экспериментальным путем.

Активный метод исследования статики технологических объектов

Важным этапом построения модели технологического объекта активным методом является планирование эксперимента [7]. План эксперимента и, в частности вычислительного эксперимента, представляет собой метод получения с помощью эксперимента необходимой информации, стоимость которой зависит от способа сбора и обработки данных. Чем больше средств вложено экспериментатором в данное исследование, тем меньше их остается на остальные исследования, и поэтому необходимо иметь план, позволяющий извлекать из каждого эксперимента максимально возможное количество информации. Основная цель экспериментального следования состоит в возможно более глубоком изучении поведения исследуемого объекта (системы) при наименьших затратах. Следовательно, мы должны рассматривать вопросы такого стратегического планирования эксперимента, которое позволит получить желаемую информацию при минимальных затратах.

Очевидным преимуществом вычислительного эксперимента перед физическим является легкость воспроизведения условий эксперимента. Если мы проводим сравнение двух альтернатив, то можем сравнивать их при одинаковых условиях (при одинаковой последовательности событий). Это достигается путем использования одной и той же последовательности случайных чисел, в результате чего уменьшается разностная вариация усредненных характеристик альтернатив, что позволяет осуществлять статистически значимое различие этих характеристик при значительно меньших размерах выборки. Если же нам нужно оценить абсолютные характеристики системы, мы можем на каждом шаге использовать новую последовательность случайных чисел.

Обсудим процесс построения плана эксперимента, разбив его на три этапа: построение структурной модели, функциональной модели и экспериментальной модели. Вид экспериментальной модели определяется подобранными критериями планирования, к которым относятся: 1) число варьируемых факторов; 2) число уровней (значений) квантования каждого фактора; 3) необходимое число измерений переменной отклика.

Структурная модель характеризуется числом факторов и числом уровней для каждого фактора. Выбор этих параметров определяется целями эксперимента, точностью измерения факторов, интересом к нелинейным эффектам и т.п. Структурная модель эксперимента имеет вид:

$$N_s = (q_1)(q_2)(q_3)...(q_k),$$

где N_s - число элементарных экспериментов; k – число факторов эксперимента, q_i – число уровней i -го фактора, $i=1,2,3...k$.

Под элементарным экспериментом мы понимаем эксперимент в случае одного фактора и одного уровня.

После определения переменных отклика и выделения существенных факторов необходимо классифицировать эти факторы в соответствии с тем, как они войдут в будущий эксперимент. Исследователю необходимо знать, какие переменные ему понадобится измерять и контролировать в процессе проектирования и проведения эксперимента.

Следующий шаг состоит в определении уровней, на которых следует измерять и устанавливать данный фактор. Минимальное число уровней фактора, не являющегося постоянным, равно двум. Для количественного фактора необходимо выделить интересующую нас область его изменения и определить степень нашей заинтересованности нелинейными эффектами. Если нас интересуют только линейные эффекты, достаточно выбрать два уровня количественной переменной на концах интервала области ее изменения. Если же исследователь предполагает изучать квадратичные эффекты, он должен использовать три уровня. Соответственно для кубического случая необходимы четыре уровня и т.д. Число уровней равно минимальному числу необходимых для восстановления функций точек. Анализ данных существенно упрощается, если сделать уровни равноотстоящими друг от друга. Такое расположение позволяет рассматривать *ортогональное разбиение* и тем самым упрощает определение коэффициентов экспериментальной модели (обычно полиномиальной функции). Поэтому

обычно две крайние точки интересующей нас области изменения количественной переменной выбирают как два ее уровня, а остальные уровни располагают так, чтобы они делили полученный отрезок на равные части. Если принять число уровней всех факторов одинаковым, то получим симметричную структурную модель вида $N_s = q^k$.

Функциональная модель определяет количество элементов структурной модели, которые должны служить действительными измерителями отклика, т.е. определять, сколько необходимо иметь различных информационных точек. Функциональная модель называется совершенной, если в измерении отклика участвуют все ее элементы, т.е. $N_f = N_s$, и несовершенной, если $N_f < N_s$. Так как структурная модель определяет то, что мы хотели бы иметь, то идеальным был бы случай, когда функциональная модель совпадает со структурной. Однако, большинство модельных исследований имеет ограничения, наложенные на время, денежные средства и производительность вычислительных систем. Эти ограничения устанавливают довольно жесткие границы для возможностей экспериментального исследования и не позволяют применять классические статистические процедуры. Функциональная модель призвана помочь нам выбрать приемлемый компромисс между нашими желаниями и ресурсами.

Наиболее прост в планировании однофакторный эксперимент, в котором изменятся лишь единственный фактор. Уровни исследуемого фактора могут быть количественными или качественными, фиксированными или случайными. Число наблюдений или прогонов модели для каждого уровня режима или фактора определяется допустимыми затратами, желаемой мощностью проверки или статистической значимостью результатов.

Факторным экспериментом называется такой эксперимент, в котором все уровни данного фактора комбинируются со всеми уровнями всех других факторов [7]. Под симметричностью понимается одинаковое количество уровней для всех факторов. Полный факторный анализ может потребовать слишком много машинного времени, и поэтому необходимо располагать методами отбора переменных, оказывающих решающее влияние на отклик системы. Оказывается, если нас не интересуют взаимодействия факторов высокого порядка, то мы можем получить большое количество информации с помощью исследования лишь некоторой части (1/2, 1/4, 1/8 и т.д.) всех возможных комбинаций. В этом случае план эксперимента называется *неполным факторным планом*. Этот метод позволяет исследователю построить серию коротких экспериментов для выявления среди громадного числа переменных небольшого количества наиболее существенных, а затем сконцентрировать на них все свое внимание и провести полный факторный эксперимент.

В дополнение к рассмотренным стратегическим проблемам планирования эксперимента необходимо остановиться и на другой группе проблем, которые можно назвать тактическими. Так как флуктуации присущи всем стохастическим имитационным моделям, то для достижения заданной точности результатов эксперимента необходимо повторять эксперимент (каждый раз меняя значения входящих в модель случайных или неопределенных факторов). Время одного машинного прогона вычислительного эксперимента может быть достаточно большим, и поэтому необходимо стремиться к получению максимальной информации с помощью небольшого числа прогонов. Кроме того, исследователь должен проводить эксперимент таким образом, чтобы не только получить результаты, но и оценить их точность, т.е. степень доверия к тем выводам, которые будут сделаны на основе этих результатов.

При моделировании стохастических систем мы представляем одну или более переменную вероятностными распределениями, в соответствии с которыми распределены их выборочные значения. Исследователь не добивается значительного прогресса в планировании эксперимента до тех пор, пока он не сталкивается с проблемой определения необходимого объема выборки. Размер выборки может определяться по одному из двух путей: 1) априорно, т.е. независимо от работы модели; 2) в процессе работы модели и на основе полученных с помощью модели результатов. Пусть мы хотим построить такую оценку \bar{X} истинного среднего значения μ совокупности, что $P\{\mu - d \leq \bar{X} \leq \mu + d\} = 1 - \alpha$, где \bar{X} - выборочное среднее, $(1 - \alpha)$ - вероятность того, что интервал $\mu \pm d$ содержит \bar{X} . Задача состоит в определении необходимого для выполнения условия $P\{\mu - d \leq \bar{X} \leq \mu + d\} = 1 - \alpha$, объема выборки. В работе [8] доказано, что в предположении нормальности

распределения выборочных значений из нашей генеральной совокупности можно показать, что

$n = (\sigma \cdot Z_{\alpha/2})^2 / d^2$, где n – объем выборки, $Z_{\alpha/2}$ – двусторонняя стандартная нормальная статистика. Предположим, что мы хотим оценить среднесуточный выход продукции химического завода так, чтобы с вероятностью 0.95 ошибка оценивания составляла не более ± 4 т. Это означает, что наша оценка \bar{X} должна лежать внутри интервала $\mu \pm 4$ т с вероятностью 0.95. Пусть дополнительно известно, что разумный допустимый размах колебаний выхода составляет 80 т. Тогда $4 \cdot \sigma = 80$, или $\sigma = 20$, $d = 4$, $Z_{\alpha/2} = 1.96$. Следовательно, $n = (\sigma \cdot Z_{\alpha/2})^2 / d^2 = 96$.

Предположим, что мы не знаем максимального размаха выхода и не знаем истинного значения σ . В этом случае необходимо задать d в виде некоторой доли от σ , например, $d = \sigma/4$, $Z_{\alpha/2} = 1.96$ и получим $n = (\sigma \cdot Z_{\alpha/2})^2 / d^2 = 61$.

Если возможно определить оценку дисперсии σ^2 экспериментально и получить s^2 , то размер выборки n определится выражением $n = t^2 \cdot s^2 / d^2$, где t – табулированная величина для заданного доверительного интервала и числа степеней свободы начальной выборки.

Для определения объема выборки можно воспользоваться неравенством Чебышева, которое имеет вид

$$P\{|x - \mu| > k \cdot \sigma\} \leq 1/k^2,$$

где k – заданное число (не меньшее единицы).

Неравенство Чебышева говорит, что при заданном числе k и произвольной выборке x_1, x_2, \dots, x_n размера n по меньшей мере $1 - 1/k^2$ измерений находятся вблизи среднего значения на расстоянии не более k среднеквадратических отклонений. Это неравенство справедливо для любых распределений совокупностей.

Пусть мы хотим, чтобы наша оценка попала в интервал $\mu \pm \sigma/4$ с вероятностью 0.95, т.е. $P\left\{\left|\bar{X} - \mu\right| > \frac{\sigma}{4}\right\} \leq 0.005$.

Тогда для нашего примера объем выборки, полученный из неравенства Чебышева при $k = \sqrt{n}/4$, $1/k^2 = 4^2/n$, составит $n = 320$. Полученный размер выборки существенно больше того, который оказывается достаточным в случае нормального распределения совокупности. Однако он позволяет получить гарантированную точность при отклонениях распределения совокупности от нормального.