

*Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), г. Санкт-Петербург, Россия*

***Аннотация.** Описано математическое и программное обеспечение лабораторного практикума, который предназначен для формирования у студентов навыков разработки программных комплексов, позволяющих решать задачи построения эмпирических моделей для оценки показателей качества химической продукции и поиска по ним управляющих воздействий на химико-технологические процессы, обеспечивающих требуемое качество продукции. Практикум позволяет изучить основные стадии жизненного цикла проблемно-ориентированных программных комплексов – от постановки задач обработки информации и управления качеством продукции до получения их решения с использованием созданного программного комплекса. Практикум реализуется в рамках программы бакалавриата по направлению «Прикладная информатика».*

Ключевые слова: методы статистической обработки данных; прикладное программное обеспечение; базы данных; управление качеством продукции; промышленные химико-технологические процессы

Программа бакалавриата по направлению подготовки 09.03.03 «Прикладная информатика» (ПИ), имеющая направленность «ПИ в химии», реализуемая на кафедре систем автоматизированного проектирования и управления СПбГТИ(ТУ) и созданная с учетом профессиональных стандартов (ПС), определяет, что одной из профессиональных компетенций выпускника является способность создавать, настраивать, эксплуатировать и сопровождать информационные системы (ИС), автоматизирующие задачи управления промышленными химико-технологическими процессами (ХТП). Компетенция определена на основе ПС 06.015 «Специалист по ИС» и с учетом объектов профессиональной деятельности выпускников. Формирование элементов компетенции – знаний, умений и навыков в области разработки программных комплексов (ПК) обработки информации и управления качеством химической продукции – осуществляется при изучении студентами одноименной дисциплины. Целью практикума по дисциплине, описываемого в настоящей работе, является освоение технологии разработки ПК для статистической обработки данных, получаемых с установок ХТП, и поиска рациональных (оптимальных) режимов проведения ХТП с точки зрения обеспечения качества (потребительских характеристик) продукции.

Исходными данными D для выполнения практикума являются: характеристики H исследуемого ХТП – наименование ХТП, марка аппарата M_A , компонентный состав сырья K_R , регламентные диапазоны управляющих воздействий (УВ) $[U_i^{\min}; U_i^{\max}]$, $i = 1, \dots, m$, марка M_P и требования к качеству Q_k^{\min} , Q_k^{\max} , $k = 1, \dots, r$ продукции; массивы, содержащие значения УВ на ХТП, изменяе-

мые в регламентных диапазонах, и измеренные при них значения показателей качества: $P = \{U_{i,j}, Q_{k,j}, i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n, k = 1, \dots, r\}$. Здесь $U_{i,j}$ – значение i -го УВ в j -м опыте, $Q_{k,j}$ – значение k -го показателя качества в j -м опыте. Данные P , выдаваемые студентам, представляют собой Excel-файлы, содержащие результаты пассивных экспериментов, проведенных на основных стадиях производств полимерных пленок и полых объемных изделий из них для упаковки, твердых сплавов в рамках научных исследований кафедры с отечественными промышленными партнерами.

Методика выполнения практикума включает несколько этапов, соответствующих основным стадиям жизненного цикла проблемно-ориентированных ПК. На первом этапе студенты на основе анализа исходных данных $D = \{H, P\}$, $H = \{M_A, K_R, U_i^{\min}, U_i^{\max}, i=1, \dots, m, M_P, Q_k^{\min}, Q_k^{\max}, k=1, \dots, r\}$ составляют информационное описание ХТП как объекта управления путем структурирования параметров ХТП на входные параметры X , УВ U и выходные параметры Y : $Y = F(X, U)$, $Y = \{Q_k, k=1, \dots, r\}$, $X = \{M_A, K_R, M_P\}$, $U = \{U_i, i=1, \dots, m\}$. На основе информационного описания ставятся задачи обработки производственных данных (ПД) и управления качеством продукции ХТП. Для этого используются формулируемые на лекциях обобщенные постановки задач (ОПЗ), в которые вводятся характеристики заданного ХТП. ОПЗ обработки ПД (1) и управления (2) имеют вид:

1) для ПД $P = \{U_{i,j}, Q_{k,j}, i=1, \dots, m, j=1, \dots, n, k=1, \dots, r\}$, полученных в результате эксперимента на ХТП изготовления продукта марки M_P из сырьевой смеси состава K_R в аппарате марки M_A , выбрать структуру математической модели (вид уравнения регрессии), связывающей каждый показатель качества продукта Q_k с УВ $U_i, i=1, \dots, m$: $Q_k = f_k(U_1, \dots, U_m, a_{k,0}, \dots, a_{k,p}), k=1, \dots, r$ и определить значения ее коэффициентов $a_{k,l}, l=0, \dots, p$, которые обеспечивают минимум суммы квадратов отклонений расчетных значений $Q_{k,j}^{calc}$ показателя качества от измеренных значений:

$$\sum_{j=1}^{j=n} (Q_{k,j} - Q_{k,j}^{calc})^2 \rightarrow \min;$$

2) для заданных входных параметров ХТП $X = \{M_A, K_R, M_P\}$, варьируя УВ в регламентных диапазонах $U_i \in [U_i^{\min}; U_i^{\max}]$, $i=1, \dots, m$, определить по синтезированной математической модели ХТП $Y = \Phi(X, U, A)$ значения УВ U^* , обеспечивающие экстремум заданного показателя качества продукта Q_0 : $Q_0(U^*) = \text{extr } Q_0(U)|_{\text{var } U}$ при условии выполнения требований к другим показателям качества: $Q_g^{\min} \leq Q_g(U^*) \leq Q_g^{\max}, g=1, \dots, w, w=r-1$, где $A = \{a_{k,0}, \dots, a_{k,p}, k=1, \dots, r\}$ – вектор коэффициентов модели, которая представляет собой систему уравнений регрессии для вычисления показателей качества продукции.

ОПЗ управления качеством продукции подразумевает поиск оптимальных решений, но в зависимости от варианта задания может быть поставлена и задача поиска допустимых решений (УВ), обеспечивающих выполнение ограничений $Q_k^{\min} \leq Q_k \leq Q_k^{\max}, k=1, \dots, r$.

Второй этап практикума заключается в разработке студентами функциональной структуры (ФС) ПК для решения поставленных задач и структуры интерфейса пользователя (ИП) – технолога (инженера по качеству) ХТП. Типовой ПК для обработки ПД и управления качеством продукции ХТП включает базу данных (БД) характеристик ХТП, результатов натурных экспериментов и результатов управления качеством, подсистему структурно-параметрического синтеза эмпирических моделей для оценки качества продукции, подсистему поиска допустимых (оптимальных) УВ на ХТП, подсистему визуализации (ПВ) результатов моделирования и управления. ИП позволяет выполнить

загрузку характеристик ХТП H и массивов ПД P (из Excel-файлов) в БД, выбрать тип постановки задачи управления (поиск допустимых или оптимальных УВ), целевую функцию Q_0 и тип ее экстремума, задать шаги варьирования УВ (исходя из возможностей физической реализации УВ) при поиске их допустимых (оптимальных) значений. Подсистема синтеза эмпирических моделей включает модули статистического и регрессионного анализа ПД, библиотеку синтезированных моделей. Подсистема поиска УВ содержит модуль вычисления показателей качества в зависимости от УВ, варьируемых в регламентных диапазонах, модуль формирования диапазонов значений УВ, в которых обеспечивается заданное качество, модуль поиска оптимальных УВ. ПВ представляет результаты в виде таблиц и 3D графиков зависимостей показателей качества от УВ с отображением найденных значений УВ. Результатом является описание ФС ПК для обработки ПД и управления ХТП и схема взаимодействия пользователя с ПК в виде UML-диаграммы вариантов использования.

На третьем этапе разрабатывается структура информационного и математического обеспечения (МО) ПК. Студенты, анализируя данные, выделяют родительские и дочерние сущности предметной области («Оборудование», «Сырье», «Продукция», «Регламентные ограничения», «Параметр», «Эксперимент», «Результат эксперимента», «Результат управления»), их ключевые и неключевые атрибуты, специфические и неспецифические отношения между сущностями и представляют результаты в виде концептуальной модели «сущность – связь» (диаграмма Чена). На ее основе в выбранной СУБД (Access, MySQL, SQLite) разрабатывается даталогическая (реляционная) модель БД характеристик ХТП и результатов экспериментов и управления. МО ПК составляют: алгоритм проверки близости распределений показателей качества Q_k , $k=1, \dots, r$ к нормальному распределению; алгоритм корреляционного анализа ПД; алгоритм синтеза и анализа эмпирических моделей для оценки показателей качества; алгоритм поиска значений УВ, обеспечивающих требуемое качество продукции. Учитывая небольшие объемы обрабатываемых ПД ($n \sim 30$), для проверки гипотезы о законе распределения студентам предлагается реализовать метод, основанный на сравнении коэффициентов асимметрии и эксцесса нормального и анализируемого распределения [1]. В соответствии с ним, если $|\gamma_{skew}| \leq 3[D(\gamma_{skew})]^{1/2}$ и $|\gamma_{kurt}| \leq 5[D(\gamma_{kurt})]^{1/2}$ (γ_{skew} , γ_{kurt} – коэффициенты асимметрии и эксцесса распределения показателя качества Q_k , $D(\gamma_{skew})$, $D(\gamma_{kurt})$ – дисперсии этих величин, зависящие от объема n), то показатель Q_k имеет нормальное распределение. В противном случае предлагается реализовать ограничение массива значений показателя Q_k по правилу 3σ с повторной проверкой основной гипотезы. В ходе корреляционного анализа определяются коэффициенты парной корреляции между факторами (U_i , $i=1, \dots, m$), и оценивается близость их абсолютных значений к 1, что свидетельствует о сильной коррелированности факторов и необходимости исключения того из них, у которого коэффициент корреляции с показателем Q_k по абсолютному значению меньше. Для построения нелинейных многофакторных эмпирических моделей применяется метод Брандона, позволяющий выполнить как параметрический, так и структурный синтез регрессионных моделей [1]. Уравнение регрессии имеет вид: $Q_k = K \prod_{i=1}^{i=m} f_i(U_i)$, $f_i(U_i) = \sum_{q=0}^{q=d_i} b_{i,q} U_i^q$, где K – общий коэффициент; d_i , $b_{i,q}$ – степень и q -й коэффициент многочлена, описывающего влияние i -го УВ на показатель Q_k (при условии ранжирования УВ по убыванию степеней их влияния, оцениваемых модулями коэффициентов корреляции). Коэффициенты $b_{i,q}$, $q=0, \dots, d_i$ на каждом i -м этапе определяются методом наименьших квадратов: система (d_i+1) неоднородных линейных алгебраических уравнений $\sum_{q=0}^{q=d_i} \left[\left(\sum_{j=1}^{j=n} U_{i,j}^{q+s} \right) b_{i,q} \right] = \sum_{j=1}^{j=n} \left[U_{i,j}^s Q_{k,j}^{(i)} \right]$, $s=0, \dots, d_i$ решается одним из прямых методов – методом Гаусса или методом Гаусса–Жордана (в зависимости от варианта задания). Здесь

$Q_{k,j}^{(i)}$ – j -е значение показателя Q_k , применяемое на i -м этапе и не учитывающее влияние УВ $U_{h,j}$, $h=1, \dots, i-1$ ($Q_{k,j}^{(1)}=Q_{k,j}$). Степень d_i выбирается из условия минимума остаточной дисперсии, характеризующей погрешность оценки показателя Q_k на i -м этапе. После реализации m этапов вычисляется коэффициент K . В результате получается модель $Q_k = a_{k,0} + \sum_{l=1}^{l=m} a_{k,l} U_l + \sum_{l=m+1}^{l=2m-1} a_{k,l} U_{l-m} U_{l-m+1} + \sum_{l=2m}^{l=3m-1} a_{k,l} U_l^2 + \dots$ для оценки k -го показателя качества по УВ. Здесь коэффициенты $a_{k,l}$ зависят от коэффициентов K и $b_{i,q}$, $p = \prod_{i=1}^{i=m} (d_i + 1) - 1$. Оценка модели выполняется по среднеквадратичному отклонению, критерию Фишера и коэффициенту детерминации. Студенты разрабатывают алгоритм поиска оптимальных УВ по модели, который включает этапы формирования диапазонов УВ, обеспечивающих выполнение критериальных ограничений, и поиска (методом полного перебора) в них значений УВ, доставляющих экстремум целевой функции Q_0 .

Четвертый этап заключается в том, что студенты с использованием выбранных прикладных программных средств (СУБД, язык и среда программирования) разрабатывают ПК для обработки ПД и управления качеством продукции, настраиваемый на характеристики ХТП, реализующий созданные алгоритмы и осуществляющий визуализацию результатов для пользователя в виде поверхностей отклика показателей качества и советов по управлению. Функциональное тестирование ПК осуществляется по данным D .

На пятом этапе создается методическое обеспечение ПК, включающее пояснительную записку (по ГОСТ 19.404-79) и руководство оператора (по ГОСТ 19.505-79).

Прием результатов практикума осуществляется путем проверки программных документов и оценки работоспособности ПК при загрузке и обработке данных D с измененными (относительно задания на практикум) значениями характеристик ХТП Н и ПД Р.

Апробация практикума в учебном процессе показала рост уровня освоения студентами результатов обучения при формировании заданной профессиональной компетенции.

Список литературы:

1. Ахназарова С. Л., Кафаров В. В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. – М.: Высш. шк., 1985. 327 с.

A. N. Polosin

Mathematical methods and software for teaching students the development of software packages for information processing and quality control of chemical products

Saint Petersburg State Institute of Technology (Technical University), Russia

Abstract. *Mathematical ware and software of laboratory practical work have been described. The practical work is designed to form students' skills in developing software packages that allow solving the problems of building empirical models for evaluating the quality indices of chemical products and determining control actions on chemical and technological processes that ensure the required product quality. The practical work allows you to study the main stages of the life cycle of problem-oriented software packages – from setting tasks for information processing and product quality control to obtaining their solution using the created software package. The practical work is implemented as part of the undergraduate program in Applied Information Science.*

Keywords: *methods of statistical data processing; application software; databases; product quality control; industrial chemical and technological processes*