

O. P. PRISHCHENKO, T. T. CHERNOGOR

CONSTRUCTION OF STATISTICAL MODELS OF CHEMICAL AND TECHNOLOGICAL OBJECTS ON THE BASIS OF A COMPLETE FACTOR EXPERIMENT

The article deals with the construction of a mathematical model of the process, which is created based on the results of a full factorial experiment. Often, only the results of experimental studies carried out at such objects are the information, based on the processing of which, according to the obtained mathematical model of the object, a high-quality control algorithm for this object can be implemented. At the same time, the construction of a mathematical model that describes the technological process with the required accuracy often involves a huge amount of work at the stage of experiments. The task of planning experiments is to establish the minimum required number of them and the conditions for their implementation, to choose methods for mathematical processing of the results, and to make decisions. Designing experiments significantly reduces the number of experiments required to obtain a process model. An active experiment involves a purposeful choice of factor values. Compared to a passive experiment, such an experiment turns out to be more efficient and economical, since the amount of experimental work is significantly reduced. In this article, in relation to chemical technology, the issues of organizing an experiment, mathematical processing of experimental data and mathematical planning of an experiment in the search for optimal conditions for conducting a technological process are described. Mathematical modeling and optimization of chemical technology objects is of great importance for obtaining higher professional education for students of the Educational and Scientific Institute of Chemical Technology and Engineering.

Keywords: experiment planning, mathematical model, active experiment, chemical technology, technological process, full factorial experiment, adequacy check.

O. П. ПРИЩЕНКО, Т. Т. ЧЕРНОГОР

ПОБУДУВА СТАТИСТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ОБ'ЄКТІВ НА ОСНОВІ ПОВНОГО ФАКТОРНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ

У статті розглядається побудова математичної моделі процесу, що створюється за наслідками повного факторного експерименту. Найчастіше лише результати експериментальних досліджень, які проводяться на таких об'єктах, є тією інформацією, на підставі обробки якої за отриманою математичною моделлю об'єкта може бути реалізований якісний алгоритм управління цим об'єктом. У той самий час побудова математичної моделі, що описує технологічний процес із необхідною точністю, найчастіше пов'язані з величезним обсягом роботи у стадії проведення експериментів. Завдання планування експериментів полягає у встановленні мінімально необхідної їх кількості та умов їх проведення, у виборі методів математичної обробки результатів та у прийнятті рішень. Планування експериментів значно скорочує їх кількість, необхідне отримання моделі процесу. Активний експеримент передбачає цілеспрямований вибір значень факторів. Порівняно з пасивним експериментом такий експеримент виявляється більш ефективним та економічним, оскільки значно скорочується обсяг експериментальної роботи. У цій статті викладено стосовно хімічної технології питання організації експерименту, математичної обробки експериментальних даних та математичного планування експерименту при пошуку оптимальних умов проведення технологічного процесу. Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології має велике значення для здобуття вищої професійної освіти для студентів Навчально-наукового інституту хімічних технологій та інженерії.

Ключові слова: планування експерименту, математична модель, активний експеримент, хімічна технологія, технологічний процес, повний факторний експеримент, перевірка адекватності.

Introduction.

The relevance of this article is determined by the growing needs of the chemical industry for specialists with sufficient qualifications to manage modern chemical and technological facilities, consisting of a large number of devices and connections (flows) between them.

Often, only the results of experimental studies carried out at such objects are the information, based on the processing of which, according to the obtained mathematical model of the object, a high-quality control algorithm for this object can be implemented.

At the same time, the construction of a mathematical model that describes the technological process with the required accuracy often involves a huge amount of work at the stage of experiments.

The task of planning experiments is to establish the minimum required number of them and the conditions for their implementation, to choose methods for mathematical processing of the results, and to make decisions. Designing experiments significantly reduces the number of experiments required to obtain a process model [1–5].

Statement of the problem in general and its connection with important scientific or practical problems.

An active experiment involves a purposeful choice of factor values. Compared to a passive experiment, such an experiment turns out to be more efficient and economical, since the amount of experimental work is significantly reduced.

The disadvantage of an active experiment, which implies a violation of the normal course of the technological process, is associated with the possibility of obtaining a defective product and damage to chemical and technological objects.

When planning an experiment, each of the factors can take on a certain number of values or levels. If the number of levels is equal to n , and the number of factors is equal to k , then the full factorial experiment involves N experiments, where $N = n^k$.

The plan of such an experiment (planning matrix) contains a set of all N possible combinations of factors k , varied at n levels [6–9].

The most common is a two-level experiment, when $n = 2$. In this case, the factor z_j takes the values z_j^{\max} and z_j^{\min} corresponding to the upper and lower levels.

The value $\Delta z_j = \frac{z_j^{\max} - z_j^{\min}}{2}$ is the variation interval for the j -th factor relative to the main or zero level z_j^0 , equal to: $z_j^0 = \frac{z_j^{\max} + z_j^{\min}}{2}$.

It is obvious that $z_j^{\min} = z_j^0 - \Delta z_j$ and $z_j^{\max} = z_j^0 + \Delta z_j$. The chosen values z_j^0 and Δz_j determine the area of the factor space under study, in which the experiment is set up.

The value of the interval Δz_j should be large enough so that the effect of varying the factor is not lost against the background of random noise of chemical-technological objects. On the other hand, overestimation of the pull-out interval makes it difficult to adequately describe the object using the regression model.

In k -dimensional factor space, the point with coordinates $(z_1^0, z_2^0, \dots, z_k^0)$ is called the center of the plan. The processing of the results of a full factorial experiment is greatly simplified if we move from factors z_j written in natural scale to dimensionless variables x_j

according to the formula $x_j = \frac{z_j - z_j^0}{\Delta z_j}$.

Then we have: $x_j^{\max} = \frac{z_j^0 + \Delta z_j - z_j^0}{\Delta z_j} = 1$,

$$x_j^{\min} = \frac{z_j^{\min} - z_j^0}{\Delta z_j} = \frac{-\Delta z_j}{\Delta z_j} = -1,$$

$$x_j^0 = \frac{z_j^0 - z_j^0}{\Delta z_j} = 0.$$

In this case, the planning matrix takes a standard form, in which all variables at the upper level correspond to the value +1, and at the lower level – the value –1. Sometimes, when filling out the planning matrix, only the signs of the levels are indicated: plus or minus.

Presentation of the main research material. In higher mathematics classes, it is often necessary to solve

problems of a general nature. But for students of the Educational and Research Institute of Chemical Technologies and Engineering, tasks that are directly related to their profession are of greater interest.

The following problem is analyzed by the authors of this article in practical classes as an illustration of the use of mathematical methods in chemistry.

Let us consider the problem of filling in the experiment planning matrix, based on the results of which the regression dependence of the degree of decomposition of nitric acid polyhalite is constructed.

Polyhalite is a mineral of the sulphate class ($K_2Ca_2Mg(SO_4)_4 \cdot 2H_2O$) – a raw material for the production of mineral fertilizers.

Polyhalite-containing rocks have always been of interest to researchers from the point of view of their processing into potassium-magnesium fertilizers. One of the methods of their processing is the decomposition of polyhalite-containing rocks in nitric acid. Considering the literature data, we can say that the degree of extraction of K_2O and MgO from polyhalite into solution increases with an increase in the temperature of the decomposition process and an increase in the duration of the interaction of the reagents. The problem under consideration will make it possible to verify the correctness of the theoretical conclusions.

The following parameters were chosen as factors: z_1 – process temperature, °C; z_2 – duration of interaction of reagents, min; z_3 is the concentration of nitric acid, mass percent [11–15].

The following parameters are considered as output variables: y_1 – degree of extraction K_2O , mass percent; y_2 is the degree of extraction of MgO , mass percent.

Zero level of the plan (center of the plan) and variation intervals:

$$z_1^0 = 30 \text{ }^\circ\text{C}; \quad \Delta z_1 = 6 \text{ }^\circ\text{C};$$

$$z_2^0 = 14 \text{ min}; \quad \Delta z_2 = 3 \text{ min};$$

$$z_3^0 = 12,5 \text{ } \%; \quad \Delta z_3 = 5 \text{ } \%.$$

The number of experiments (the number of possible combinations of factor levels) N for a complete factorial experiment is 2^k , which in the case of three factors is: $N = 2^3 = 8$. The plan of the experiment when recording factors in natural scale is shown in Table 1.

Table 1. Plan of the experiment when recording factors in natural scale

Number of experience	z_1	z_2	z_3	Number of experience	z_1	z_2	z_3
1	24	11	7,5	5	24	11	17,5
2	36	11	7,5	6	36	11	17,5
3	24	17	7,5	7	24	17	17,5
4	36	17	7,5	8	36	17	17,5

For the full factorial experiment under consideration, the planning matrix, written in dimensionless variables with an additional column of the fictitious factor x_0 equal to one, has the form presented in Table 2.

When compiling the planning matrix, the following rule is used: each subsequent factor (column) changes sign half as often as the previous one. Important concepts in the theory of experiment planning are randomization

and the number of degrees of freedom [17].

Randomization is any procedure that ensures that the order in which an experiment is conducted is random. It allows you to exclude the systematic effects of uncontrollable factors. For example, in case of a significant impact of an unaccounted factor in the second half of the plan, the influence of the x_3 factor in the model will be distorted. With a random order of experiments, this will not happen.

Table 2. Planning matrix for a full factorial experiment 2^3

Number of experience	x_0	x_1	x_2	x_3	Number of experience	x_0	x_1	x_2	x_3
1	+1	-1	-1	-1	5	+1	-1	-1	+1
2	+1	+1	-1	-1	6	+1	+1	-1	+1
3	+1	-1	+1	-1	7	+1	-1	+1	+1
4	+1	+1	+1	-1	8	+1	+1	+1	+1

In relation to the planning of an experiment, the number of degrees of freedom is the difference between the number of experiments N and the number of imposed connections l , i.e., the number of model coefficients calculated from the results of the experiment. For the considered full factorial experiment 2^3 when constructing a linear model $\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3$ the number of degrees of freedom f is: $f = N - l = 8 - 4 = 4 > 0$.

When $f > 0$ the experimental design is called unsaturated. Using the results of an experiment carried out according to such a plan, it is possible to calculate all the coefficients of the model and check its adequacy.

In the case of building a model of the form

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3$$

the number of degrees of freedom f is: $f = 8 - 8 = 0$.

When $f = 0$ the plan becomes saturated. In this case, it is possible to estimate all the parameters of the model, but it is impossible to check the adequacy.

In the case of building a model of the form

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2$$

the number of degrees of freedom $f < 0$, which corresponds to supersaturated plans, in which it is possible to estimate only a part of the model coefficients.

Any coefficient of the model b_j can be calculated

by the formula: $b_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ij}y_i$.

If, for the example under consideration, the following values of the degree of recovery into the liquid phase are obtained from the results of the experiment K_2O_2 , the mass percentage:

$$y = \begin{pmatrix} 93 \\ 65 \\ 78 \\ 94 \\ 80 \\ 63 \\ 70 \\ 81 \end{pmatrix},$$

then the value of the coefficient b_0 is:

$$b_0 = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 y_i = 78,6;$$

then the value of the coefficient b_1 is: $b_1 = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 x_{i1}y_i = \frac{-93 + 65 - 78 + 94 - 80 + 68 - 70 + 81}{8} = -1,62;$

then the value of the coefficient b_2 is: $b_2 = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 x_{i2}y_i = \frac{-93 + 65 + 78 + 94 - 80 - 68 + 70 + 81}{8} = 2,12;$

then the value of the coefficient b_3 is: $b_3 = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 x_{i3}y_i = \frac{-93 - 65 - 78 - 94 + 80 + 68 + 70 + 81}{8} = -3,87.$

Therefore, the linear model has the following form:

$$\hat{y} = 78,6 - 1,62x_1 + 2,12x_2 - 3,87x_3.$$

Since the covariance matrix of the full factorial experiment is diagonal, the resulting coefficients do not correlate with each other. When excluding insignificant coefficients from the model, there is no need to recalculate the rest [10].

The significance of the coefficients of the regression equation is checked by Student's t-test. The coefficient b_j is significant if the following condition is met:

$$t_j = \frac{|b_j|}{S_{b_j}} > f_{1-\alpha, f},$$

where α is the reduced significance level.

Since the diagonal coefficients of the covariance matrix are the same and equal to N , the estimate of the standard deviation S_{b_j} of any of the coefficients is:

$$S_{b_j} = \frac{s}{\sqrt{N}}.$$

To calculate the reproducibility dispersion, experiments are duplicated in the planning matrix or additional n_0 experiments are performed in the center of the plan. We believe that in the example under consideration, four additional experiments ($n_0 = 4$) were performed.

Based on their results ($y_i^0: 69; 71; 73; 71$), the

average value is calculated $\bar{y}^0 = \frac{\sum_{i=1}^n y_i^0}{n_0} = 71,$

as well as the reproducibility variance

$$S^2 = \frac{1}{n_0 - 1} \sum_{i=1}^n (y_i^0 - \bar{y}^0)^2 = 2,67.$$

Therefore, $s = \sqrt{2,67} = 1,63$. Then the estimate of

the standard deviation S_{b_j} is: $S_{b_j} = \frac{s}{\sqrt{N}} = \frac{1,63}{\sqrt{8}} = 0,58$.

Critical value for the criterion of checking the significance of the coefficients:

$$\frac{|b_0|}{S_{b_0}} = \frac{78,6}{0,58} = 135,5 > t_{0,05;3},$$

therefore, the coefficient b_0 is significant; $\frac{|b_1|}{S_{b_1}} = \frac{|-1,62|}{0,58} = 2,79 < t_{0,05;3},$ therefore, the

coefficient b_1 is insignificant; $\frac{|b_2|}{S_{b_2}} = \frac{2,12}{0,58} = 3,65 > t_{0,05;3},$

therefore, the coefficient b_2 is significant;

$$\frac{|b_3|}{S_{b_3}} = \frac{|-3,87|}{0,58} = 6,67 < t_{0,05;3},$$

therefore, the coefficient b_3 is insignificant [16].

After eliminating the insignificant coefficient, the regression equation takes the following form:

$$\hat{y} = 78,6 + 2,12x_2 - 3,87x_3.$$

To assess the adequacy of the model, the value of the residual variance is calculated:

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{N - l} = \frac{\sum_{i=1}^8 (y_i - \hat{y}_i)^2}{8 - 3} = 9,8;$$

where l is the number of significant regression coefficients.

The value of the ratio is:

$$F = \frac{s^2}{S^2} = \frac{9,8}{2,67} = 3,67.$$

The critical value of the Fisher criterion for $\alpha = 0,005; f_1 = 5; f_2 = 3; F_{\alpha, f_1, f_2} = 9$.

Since $F < F_{\alpha, f_1, f_2}$, the resulting model is adequate.

Returning to the natural scale of the factors, we obtain the expression of the regression dependence in the final form:

$$\hat{y} = 78,6 + 2,12 \frac{z_2 - 14}{3} - 3,87 \frac{z_3 - 12,5}{5}$$

or

$$\hat{y} = 78,82 + 0,707z_2 - 0,774z_3.$$

The methodology for calculating the regression dependence, which contains the effects of the interaction of factors, does not differ from the previously considered methodology and does not involve additional experiments. [18].

To calculate the model defined by the equality

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3$$

an extended planning matrix is compiled, containing additional columns for determining the coefficients for paired interactions (Table 3):

Table 3. Expanded planning matrix

Number of experience	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3
1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1
2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1
4	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1
5	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1
6	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1
7	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1

The coefficients, b_{12} , b_{13} and b_{23} are equal,

$$\text{respectively: } b_{12} = \frac{\sum_{i=1}^8 (x_1 x_2)_i y_i}{8} = 8,37,$$

$$b_{13} = \frac{\sum_{i=1}^8 (x_1 x_3)_i y_i}{8} = 1,375,$$

$$b_{23} = \frac{\sum_{i=1}^8 (x_2 x_3)_i y_i}{8} = -1,375.$$

Obviously, of the three coefficients for pair effects, only the coefficient b_{12} is significant. The regression model has the following form:

$$\hat{y} = 78,6 + 2,12x_2 - 3,87x_3 + 8,37x_1x_2.$$

Thus, we have seen that theoretical statements are confirmed by processing the results of a full factorial experiment.

Conclusions and prospects for further development of this direction.

One of the ways to accelerate scientific and technological progress in the chemical industry is the use of mathematical methods to organize experiments on a computer model and at an industrial facility, to process the obtained experimental data and build mathematical models of processes, to search for optimal conditions for conducting a technological process, which will ultimately lead to to increase the technological and economic efficiency of designed and operating chemical-technological facilities.

The use of methods of optimal planning of an experiment makes it possible to reduce to a minimum the number of experiments for constructing adequate models and to achieve a significant reduction in time and material costs for studying the simulated chemical processes. In some cases, the use of regression and correlation analysis methods for studying industrial facilities makes it possible to obtain recommendations for optimizing their operation based on statistical processing of passive experiment data, through observations made at the facility in its normal operation.

This is especially important for the chemical industry, since technological devices and circuits in this industry are complex systems, and the presence of disturbance sources in most cases determines their stochastic nature. An acceptable method for modeling such systems is the construction of empirical dependencies by statistical methods.

An additional advantage of the methods of optimal planning of the experiment is the possibility of identifying and eliminating the mutual influence of the factors under study, highlighting the influence of individual factors on the output characteristic of the system under study, which allows us to formulate practical recommendations for controlling the process

under study. In this article, in relation to chemical technology, the issues of organizing an experiment, mathematical processing of experimental data and mathematical planning of an experiment in the search for optimal conditions for conducting a technological process are described.

Mathematical modeling and optimization of chemical technology objects is of great importance for obtaining higher professional education for students of the Educational and Scientific Institute of Chemical Technology and Engineering. Firstly, this discipline should be classified as a general professional, since its study equips a person with general knowledge and skills that will help to understand the patterns of any phenomenon occurring in the economy, everyday life, society, and nature. Secondly, the discipline is a special discipline, because, studying it, students receive the knowledge and skills necessary for research work in the magistracy and allow them to continue their studies in graduate school [19–24].

References

1. Высшая математика в примерах и задачах : уч. пособ. : Т. 2 / Ю.Л. Геворкян, Л.А. Балака, С.С. Габриелян и др. ; под ред. Ю.Л. Геворкяна. – Х.: Підручник НТУ «ХП», 2011. – 376 с.
2. Подвійний та потрійний інтегралі : навч. посіб. / Першина Ю.І., Прищенко О.П., Черемська Н.В., Черногор Т.Т. – Харків : Видавництво «Друкарня Мадрид», 2022. – 106 с.
3. Диференціальні рівняння та їх застосування : н.-мет. посіб. / Прищенко О.П., Черногор Т.Т. – Х.: НТУ «ХП», 2017. – 88 с.
4. Прищенко О. П., Черногор Т. Т. Аналіз прикладів застосування диференціальних рівнянь в хімічній та харчовій технології // Вісник НТУ «ХП». – Харків : НТУ «ХП», 2018. – № 40 (1316). – с. 39 – 45.
5. Прищенко О.П., Черногор Т.Т., Бухало С.І. Деякі особливості проведення кореляційного аналізу Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXVII міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2019, 15-17 травня 2019 р.: у 4 ч. Ч. II. / за ред. проф. Сокола Є.І. – Харків: НТУ «ХП». – с.320.
6. Прищенко О.П., Черногор Т.Т. Деякі особливості проведення регресійного аналізу Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXVII міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2019, 15-17 травня 2019 р.: у 4 ч. Ч. II. / за ред. проф. Сокола Є.І. – Харків: НТУ «ХП». – с. 319.
7. Скатецкий В.Г. Математические методы в химии : учеб. пособ. для студентов вузов / В.Г. Скатецкий, Д.В. Свиридов, В.И. Яшкин. – Минск : ТетраСистемс, 2006. – 368 с.
8. Prishchenko O. P., Chernogor T. T. Using of methods of cross-correlation and regressive analysis for determination of functional dependence between sizes // Вісник НТУ «ХП» Серія: Інноваційні дослідження у наукових роботах студентів. – Харків : НТУ «ХП», 2019. – №15 (1340). – С. 36 – 41.
9. Бухало С.І., Ігліні С.П. Деякі моделі дослідження структурно-хімічних змін при експлуатації полімерних виробів. *Інтегровані технології та енергозбереження*. Х.: НТУ «ХП», 2016. № 3. – С. 52–57.
10. Бухало С.І., Білоус О.В., Демидов І.М. Розробка комплексного антиоксиданту із екстрактів листя горіху волоського та календули. *Восточно-Европейский*

- журнал передових технологій. 2015. № 1/6(73), – с. 22–26. – Х. : Технол. центр.
11. Prishchenko O.P., Chernogor T.T. Analysis of opportunities of analytical method of optimization in chemical technology // Вісник НТУ «ХПІ» Серія: Інноваційні дослідження у наукових роботах студентів. – Харків : НТУ «ХПІ», 2020. – №5 (1359). – с. 71 – 77.
 12. Прищенко О. П., Черногор Т. Т. Використання тензорів при аналізі особливостей фізичних властивостей твердих тіл // Вісник НТУ «ХПІ» Серія: Інноваційні дослідження у наукових роботах студентів. – Харків : НТУ «ХПІ», 2020. – №6 (1360). – с. 42 – 48.
 13. Prishchenko O.P., Chernogor T.T. Application of elements of studying the function of one variable when solving chemical problems // Вісник НТУ «ХПІ» Серія: Інноваційні дослідження у наукових роботах студентів. – Харків : НТУ «ХПІ», 2021. – №1 (1361). – с. 30 – 35.
 14. Прищенко О. П., Черемська Н. В., Черногор Т. Т. Побудова математичних моделей за допомогою методів кореляційного і регресійного аналізу // Вісник НТУ «ХПІ» Серія: Інноваційні дослідження у наукових роботах студентів. – Харків : НТУ «ХПІ», 2021. – №62 (1362). – с. 29 – 36.
 15. Прищенко О. П., Черемська Н. В. Реконструкція гаусовських випадкових функцій за даними спектру // Вісник НТУ «ХПІ» Серія: Математичне моделювання в техніці та технологіях. – Харків : НТУ «ХПІ», 2021. – № 1-2 (2). – с. 97 – 103.
 16. Prishchenko O. P., Cheremskaya N. V., Chernogor T. T., Bukhhalo S.I. Innovative methods of teaching the discipline higher mathematics to students studying chemical technology and engineering // Вісник НТУ «ХПІ» Серія: Інноваційні дослідження у наукових роботах студентів. – Харків : НТУ «ХПІ», 2022. – №1 (1363). – с. 30 – 37.
 17. Prishchenko O. P., Cheremskaya N. V., Bukhhalo S. I. Examples of information technologies for reconstruction from the data of the spectrum of some classes of random functions // Вісник НТУ «ХПІ» Серія: Інноваційні дослідження у наукових роботах студентів. – Х. : НТУ «ХПІ», 2022. – №1 (1363). – с. 38 – 43.
 18. Prishchenko O. P. Dependence of the maximum rate of nitric oxide oxidation on the concentration of reactants. Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXX міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2022, 19-21 жовтня 2022 р. / за ред. проф. Сокола Є.І. – Харків: НТУ «ХПІ». – с. 389.
 19. Prishchenko O. P., Chernogor T. T. Investigation of the reaction rate constant plot. Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXX міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2022, 19-21 жовтня 2022 р. / за ред. проф. Сокола Є.І. – Х. : НТУ «ХПІ». – с. 390.
 20. Бухало С.І. Комплексні інноваційні системи викладання дисципліни сучасні технології харчування – моделі програмування. Вісник НТУ «ХПІ». 2022. № 2 (1364), с. 65–77.
 21. Бухало С.І., Ігліс С.П., Кравченко В.О., Копейченко Є.А, Назаренко М.В. Приклади та задачі комплексного викладання дисципліни харчова хімія. Вісник НТУ «ХПІ». 2022. № 2 (1364), с. 89–96.
 22. Бухало С.І. Комплексні системи викладання дисципліни основи проектування обладнання хімічних виробництв як співпраця асоціації EFCE та CFE-UA. Вісник НТУ «ХПІ». 2022. № 2 (1364), с. 13–22.
 23. Бухало С.І., Земелько М.Л. Дослідження комплексного впливу складових шоколадної маси на її властивості та конкурентоспроможність для різновидів галузей Вісник НТУ «ХПІ». 2022. № 2 (1364), с. 54–64.
 24. Ольховська В.О., Кравченко О.С., Бухало С.І. Складові алгоритми пошуку раціональних закономірностей роботи обладнання. Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXVIII міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2020, 28-30 жовтня Ч. II./за ред. проф. Сокола Є.І. – Х: НТУ «ХПІ», с. 249.

References (transliterated)

1. Vysshaja matematika v primerah i zadachah : ucheb. posob. : T. 2 / Ju.L. Gevorkjan, L.A. Balaka, S.S. Gabrieljan i dr. ; pod red. Ju.L. Gevorkjana. – Khar'kov : Pidruchnik NTU «KhPI», 2011. – 376 p.
2. Podvlyniy ta potrlinyi Integrali : navch. posib. / Pershina Yu.I., Prishchenko O.P., Cheremskaya N.V., Chernogor T.T. – Kharkiv : Vidavnitstvo «Drukarnya Madrid», 2022. – 106 p.
3. Diferencial'ni rivnyannya ta ih zastosuvannya : n.-met. posib. / Prishchenko O.P., Chernogor T.T. Kh. : NTU «KhPI», 2017. 88 p.
4. Prishchenko O. P., Chernogor T. T. Analiz prikhladiv zastosuvannya diferencial'nih rivnyan' v himichnij ta harchovij tekhnologii // Visnik NTU «KhPI». – Khv : NTU «KhPI», 2018. – № 40 (1316). – pp. 39 – 45.
5. Prishchenko O.P., Chernogor T.T., Bukhhalo S.I. Deyaki osoblivosti provedennya korelyacijnogo analizu Informacijni tekhnologii: nauka, tekhnika, tekhnologiya, osvita, zdorov'ya: тези доповідей XXVII міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2019, 15-17 травня 2019 р.: у 4 ч. CH. II. / за ред. проф. Sokola Є.І. – Kharkiv: NTU «KhPI». – p.320.
6. Prishchenko O.P., Chernogor T.T. Deyaki osoblivosti provedennya regresijnogo analizu Informacijni tekhnologii: nauka, tekhnika, tekhnologiya, osvita, zdorov'ya: тези доповідей XXVII міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2019, 15-17 травня 2019 р.: у 4 ч. CH. II. / за ред. проф. Sokola Є.І. – Kharkiv: NTU «KhPI». – p. 319.
7. Skateckij V.G. Matematicheskie metody v himii : ucheb. posob. dlya studentov vuzov / V.G. Skateckij, D.V. Sviridov, V.I. Yashkin. – Minsk : TetraSistems, 2006. – 368 p.
8. Prishchenko O. P., Chernogor T. T. Using of methods of cross-correlation and regressive analysis for determination of functional dependence between sizes // Visnik NTU «HPI» Seriya: Innovacijni doslidzhennya u naukovih robotah studentiv. – Kharkiv : NTU «KhPI», 2019. – №15 (1340). – pp. 36 – 41.
9. Bukhhalo S.I., Iglis S.P. Deyaki modeli doslidzhennya struktorno-himichnih zmin pri ekspluatacij polimernih virobiv. Integrovani tekhnologii ta energozberezhennya. Kh.: NTU «KhPI», 2016. № 3? – pp. 52–57.
10. Bukhhalo S.I., Bilous O.V., Demidov I.M. Rozrobka kompleksnogo antioksidantu iz ekstraktiv listya gorihu volos'kogo ta kalenduli. Vostochno-Evropejskij zhurnal peredovyh tekhnologij. 2015. № 1/6(73), – pp. 22–26. – H. : Tekhnol. centr.
11. Prishchenko O.P., Chernogor T.T. Analysis of opportunities of analytical method of optimization in chemical technology // Visnik NTU «KhPI» Seriya: Innovacijni doslidzhennya u naukovih robotah studentiv. – Kh : NTU «KhPI», 2020. – №5 (1359)? – pp. 71 – 77.
12. Prishchenko O. P., Chernogor T. T. Viktorstannya tenzoriv pri analizi osoblivostej fizichnih vlastivostej tverdih til // Visnik NTU «HPI» Seriya: Innovacijni doslidzhennya u naukovih robotah studentiv. – Kh/ : NTU «KhPI», 2020. – №6 (1360), – pp. 42 – 48.
13. Prishchenko O.P., Chernogor T.T. Application of elements of studying the function of one variable when solving chemical problems // Visnik NTU «KhPI» Seriya: Innovatsiyni doslidzhennya u naukovih robotah studentiv. – Kharkiv : NTU «KhPI», 2021. – №1 (1361), – pp. 30 – 35.
14. Prishchenko O. P., Cheremskaya N. V., Chernogor T. T. Pobudova matematichnih modeley za dopomogoyu metodiv korelyatsijnogo i regresijnogo analizu // Visnik NTU «KhPI» Seriya: Innovatsiyni doslidzhennya u naukovih

- robotah studentiv. – Kharkiv : NTU «KhPI», 2021. – No. 62 (1362). – pp. 29 – 36.
15. Prishchenko O. P., Cheremskaya N. V. Rekonstruktsiya gausovskikh vipadkovih funktsiy za danimi spektru // Visnik NTU «KhPI» Seriya: Matematichne modelyuvannya v tehnitsi ta tehnologiyah. – Kharkiv : NTU «KhPI», 2021. – No. 1-2 (2), – pp. 97 – 103.
16. Prishchenko O. P., Cheremskaya N. V., Chernogor T. T., Bukhhalo S.I. Innovative methods of teaching the discipline higher mathematics to students studying chemical technology and engineering // Visnik NTU «KhPI» Seriya: Innovatsiyi doslidzhennya u naukovih robotah studentiv. – Kharkiv : NTU «KhPI», 2022. – No. 1(1363), – pp. 30 – 37.
17. Prishchenko O. P., Cheremskaya N. V., Bukhhalo S. I. Examples of information technologies for reconstruction from the data of the spectrum of some classes of random functions // Visnik NTU «KhPI» Seriya: Innovatsiyi doslidzhennya u naukovih robotah studentiv. – Kh. : NTU «KhPI», 2022. – No. 1(1363), – pp. 38 – 43.
18. Prishchenko O. P. Dependence of the maximum rate of nitric oxide oxidation on the concentration of reactants. Informatsiyi tehnologiyi: nauka, tehnika, tehnologiya, osvita, zdorov'ya: tezi dopovidey XXX mlzhnarodnoyi naukovo-praktichnoyi konferentsiyi MicroCAD-2022, 19-21 zhovtnya 2022 r. / za red. prof. Sokola E.I. – Kharkiv: NTU «KhPI», – pp. 389.
19. Prishchenko O. P., Chernogor T. T. Investigation of the reaction rate constant plot. Informatsiyi tehnologiyi: nauka, tehnika, tehnologiya, osvita, zdorov'ya: tezi dopovidey XXX mlzhnarodnoyi naukovo-praktichnoyi konferentsiyi MicroCAD-2022, 19-21 zhovtnya 2022 r. / za red. prof. Sokola E.I. – Kharkiv: NTU «KhPI», – p. 390.
20. Bukhhalo S.I. Kompleksnih innovatsijni sistemi vkladannja disciplini suchasni tehnologii harchuvannja – modeli programuvannja.. Visnik NTU «KhPI». 2022. № 2 (1364), pp. 65–77.
21. Bukhhalo S.I., Iglin S.P., Kravchenko V.O., Kopejchenko S.A, Nazarenko M.V. Prikladi ta zadachi kompleksnogo vkladannja disciplini harchova himija. Visnik NTU «KhPI». 2022. № 2 (1364), pp. 89–96.
22. Bukhhalo S.I. Kompleksni sistemi vkladannja disciplini osnovi proektuvannja obladannja himichnih virobnictv jak spivpracija asociacij EFCE ta CFE-UA. Visnik NTU «KhPI». 2022. № 2 (1364), pp. 13-22.
23. Bukhhalo S.I., Zemel'ko M.L. Doslidzhennja kompleksnogo vplivu skladovih shokoladnoi masi na ii vlastivosti ta konkurentospromozhnist' dlja riznovidiv galuzej. Visnik NTU «KhPI». 2022. № 2(1364), pp. 54–64.
24. Ol'hov'ska V.O., Kravchenko O.S., Bukhhalo S.I. Skladovi algoritmu poshuku racional'nih zakonimirostey roboti obladannja. Informatsijni tehnologii: nauka, tehnika, tehnologija, osvita, zdorov'ja: tezi dopovidey XXVIII mlzhnarodnoi naukovo-praktichnoi konferentsii MicroCAD-2020, 28-30 zhovtnja Ch. II./za red. prof. Sokola E.I. – Kh: NTU «KhPI», p. 249.

Надійшла (received) 03.03.2023

Відомості про авторів / Сведения об авторах / About the Authors

Прищенко Ольга Петрівна (Прищенко Ольга Петровна, Prishchenko Olga Petrivna) – старший викладач кафедри вищої математики, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», м. Харків, Україна;

ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-0530-2131>;

e-mail: priolga2305@gmail.com

Черногор Тетяна Тимофіївна (Черногор Татьяна Тимофеевна, Chernogor Tetyana Timofiyivna) – старший викладач кафедри вищої математики, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», м. Харків, Україна;

ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-7823-7628>;

e-mail: tatyanchernogor54@gmail.com

О. П. ПРИЩЕНКО, Т. Т. ЧЕРНОГОР

ПОСТРОЕНИЕ СТАТИСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛНОГО ФАКТОРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В статье рассматривается построение математической модели процесса, которая создается по результатам полного факторного эксперимента. Зачастую только результаты экспериментальных исследований, проводимых на таких объектах, являются той информацией, на основании обработки которой по полученной математической модели объекта может быть реализован качественный алгоритм управления данным объектом. В то же время построение математической модели, описывающей технологический процесс с необходимой точностью, зачастую сопряжено с огромным объемом работы на стадии проведения экспериментов. Задача планирования экспериментов состоит в установлении минимально необходимого их количества и условий их проведения, в выборе методов математической обработки результатов и в принятии решений. Планирование экспериментов значительно сокращает их количество, необходимое для получения модели процесса. Активный эксперимент предполагает целенаправленный выбор значений факторов. По сравнению с пассивным экспериментом такой эксперимент оказывается более эффективным и экономичным, поскольку значительно сокращается объем экспериментальной работы. В настоящей статье изложены применительно к химической технологии вопросы организации эксперимента, математической обработки экспериментальных данных и математического планирования эксперимента при поиске оптимальных условий проведения технологического процесса. Математическое моделирование и оптимизация объектов химической технологии имеет большое значение для получения высшего профессионального образования для студентов Учебно-научного института химических технологий и инженерии.

Ключевые слова: планирование эксперимента, математическая модель, активный эксперимент, химическая технология, технологический процесс, полный факторный эксперимент, проверка адекватности.