

Optimiranje smjesa primjenom planiranja pokusa

Babić, Anita

Master's thesis / Diplomski rad

2010

*Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture / Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje***

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:235:502932>

Rights / Prava: [In copyright/Zaštićeno autorskim pravom.](#)

*Download date / Datum preuzimanja: **2024-05-21***

Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Mechanical Engineering
and Naval Architecture University of Zagreb](#)



Sveučilište u Zagrebu
Fakultet strojarstva i brodogradnje

DIPLOMSKI RAD

Anita Babić

Zagreb, 2010.

Sveučilište u Zagrebu
Fakultet strojarstva i brodogradnje

DIPLOMSKI RAD

Voditelj rada:
Prof.dr.sc.Nikola Šakić

Anita Babić

Zagreb, 2010.

ZAHVALA

Prof.dr.sc. Nikoli Šakiću zahvaljujem na pomoći i mentorstvu prilikom izrade ovog rada.

Poduzeću Končar Energetski Transformatori d.o.o. zahvaljujem na dokumentaciji za razradu problema siluminskih odljevaka, a posebno se zahvaljujem gospodinu Ivici Zagorcu, B.Sc.(EE) na pomoći pri prikupljanju podataka.

Poduzeću Ljevaonica Duga Resa d.o.o. zahvaljujem na podacima za razradu problema nodularnog lijeva, a posebno se zahvaljujem gospodinu Josipu Martiškoviću.

IZJAVA

Izjavljujem da sam ovaj rad izradila samostalno koristeći stečeno znanje tijekom studija i navedenu literaturu te uz stručnu pomoć i savjete svog mentora Prof.dr.sc. Nikole Šakića.

Anita Babić

SAŽETAK

U radu je obrađeno i detaljno razrađeno planiranje pokusa sa smjesama ili mješavinama.

U teorijskom dijelu rada dan je detaljan prikaz svojstava smjesa i matematičkih modela kojima se smjese mogu opisati. Postoje dva pristupa rješavanju problema planiranja pokusa - matematičko programiranje i eksperimentalni pristup. U teorijskom dijelu rada prvo je dan kratak uvid u problematiku i različite modele matematičkog programiranja, a zatim, budući da se ovaj rad bavi problematikom eksperimentalnog pristupa detaljno je i u koracima razrađen i opisan taj pristup.

U praktičnom dijelu dana su dva primjera iz proizvodne prakse. Prvi primjer predstavlja klasično planiranje pokusa (definiranje problema, odabir elementarne rešetke, definiranje točaka pokusa, praktični dio, analiza rezultata i na kraju optimiranje), dok su u drugom primjeru korišteni povijesni podaci, te je na temelju njih napravljen plan pokusa i izvršena optimizacija.

KLJUČNE RIJEČI

Planiranje pokusa; pokusi sa smjesama; pokusi s mješavinama; smjese; mješavine; optimiranje

OZNAKE

Oznaka	Opis	Jedinica mjere
A	istezanje	[%]
b_0	nulti koeficijent odzivne funkcije	
b_i	koeficijent odzivne funkcije	
b_{ij}	binarni koeficijent odzivne funkcije	
b_{ijk}	ternarni koeficijent odzivne funkcije	
$F(X)$	funkcija cilja	
m	stupanj polinoma	
q	udio sastojaka smjese	
R_m	vlačna čvrstoća	$[N/mm^2]$
$R_{p0,2}$	granica razvlačenja	$[N/mm^2]$
S_r	podskup od r elemenata	
x_i	udio pojedinačnog sastojka	
\hat{y}	procjenjena odzivna funkcija	
\bar{y}	prosječna vrijednost	
y_i	odzivna funkcija čiste smjese	
y_{ij}	odzivna funkcija binarne smjese	
y_{ijk}	binarna funkcija ternarne smjese	
β_0	nulti koeficijent polinoma	
β_i	koeficijent polinoma uz linearni član	
β_{ij}	koeficijent polinoma uz kvadratni član	
β_{ijk}	koeficijent polinoma uz kubni član	
β_{Sr}	parametar modela podskupa od r elemenata	
μ	očekivanje	
η	funkcija polinoma m-tog stupnja	
η_i	odzivna funkcija čiste smjese	
η_{ij}	odzivna funkcija binarne smjese	
η_{ijk}	binarna funkcija ternarne smjese	
σ	standardno odstupanje	

SADRŽAJ

1.	UVOD	1
2.	SMJESE (MJEŠAVINE).....	3
2.1.	ORGINALNI PROBLEM SMJESA	4
2.2.	MODEL ELEMENTARNE REŠETKE	5
2.2.1.	KANONSKI POLINOMI	8
2.2.2.	KOEFIJENTI POLINOMA KAO FUNKCIJE ODZIVA NA TOČKAMA REŠETKE.....	13
2.2.3.	PROCJENA PARAMETARA $\{q, m\}$ POLINOMA.....	16
2.2.4.	Karakteristike procjene odziva	18
2.2.5.	TABLICA ANALIZE VARIJANCE.....	20
2.3.	ELEMENTARNI MODEL S TEŽIŠTEM I PRIDRUŽENI MODEL POLINOMA	22
2.4.	OSNI MODEL.....	26
3.	PRISTUPI OPTIMIRANJU SMJESA	29
3.1.	MATEMATIČKO PROGRAMIRANJE	33
3.1.1.	LINEARNO PROGRAMIRANJE.....	33
3.1.2.	NELINEARNO PROGRAMIRANJE	36
3.1.3.	DINAMIČKO PROGRAMIRANJE.....	39
3.2.	EKSPERIMENTALNO OPTIMIRANJE.....	43
3.2.1.	PLANIRANJE POKUSA SA SMJESAMA	43
4.	PRIMJERI IZ PROIZVODNE PRAKSE.....	46
4.1.	PRIMJER 1 – NODULARNI LIJEV	46
4.1.1.	OPIS PROBLEMA	50
4.1.2.	PROSTOR MOGUĆIH STANJA POKUSA I IZBOR TOČAKA ZA POKUS.....	51
4.1.2.	ANALIZA ODZIVA	53
4.1.3.	OPTIMIZACIJA	68
4.2.	PRIMJER 2 – SILUMINSKI ODLJEVCI	75
4.2.1.	OPIS PROBLEMA	77
4.2.2.	PRISTUP PROBLEMU.....	79
4.2.3.	PREDANALIZA PODATAKA.....	84
4.2.4.	ANALIZA ODZIVA	86

4.2.5. OPTIMIZACIJA.....	89
5. PROCJENA EFEKATA.....	90
6. ZAKLJUČAK	90
7. LITERATURA.....	94
PRILOG A	95
PRILOG B	115
PRILOG C	121
PRILOG D	124
PRILOG E.....	134
PRILOG F.....	140

POPIS SLIKA

Slika 1 Raspored nekih $\{3, m\}$ i $\{4, m\}$ elementarnih rešetki, $m = 2$ i $m = 3$	6
Slika 2 Koordinate trokuta x_1, x_2, x_3	7
Slika 3 Planarna površina iznad trokuta s tri komponente	11
Slika 4 Sinergizam binarne smjese	12
Slika 5 Označavanje točaka kod a) $\{3,2\}$ i b) $\{3,3\}$ elementarne rešetke	13
Slika 6 Model elementarne rešetke s težištem za a) smjesu s tri i b) četiri komponente	22
Slika 7 x_i osi, $i = 1, 2$ i 3	26
Slika 8 Osnji model s tri komponente gdje udaljenost od centra elementarnog prostora do točaka iznosi Δ	27
Slika 9 Načelni proces optimiranja	30
Slika 10 Grafički prikaz vrsta optimiranja	31
Slika 11 Podjela nelinearnog programiranja	37
Slika 12 Prikaz pseudoelementarne rešetke	44
Slika 13 Osnovni oblici $\{3,m\}$ polinoma i pripadajuće elementarne rešetke	45
Slika 14 Svjetska proizvodnja nodularnog ljeva u posljednjih 60 godina	46
Slika 15 Dio proizvodnog programa ljevaonice Duga Resa d.o.o.	50
Slika 16 Prostor mogućih stanja pokusa	51
Slika 17 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za granicu razvlačenja $R_{p0,2}$	55
Slika 18 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za granicu razvlačenja $R_{p0,2}$	55
Slika 19 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za vlačnu čvrstoću R_m	57
Slika 20 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za vlačnu čvrstoću R_m	57
Slika 21 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za istezljivost[A]	59
Slika 22 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za istezljivost[A]	59
Slika 23 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za nodularnost	61
Slika 24 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za nodularnost	61
Slika 25 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za udio ferita	63
Slika 26 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za udio ferita	63
Slika 27 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za udio prelita	65
Slika 28 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za udio prelita	65
Slika 29 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za broj nodula	67
Slika 30 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za broj nodula	67
Slika 31 Rezultat numeričke optimizacije primjera 1a	70
Slika 32 Rezultati grafičke optimizacije primjer 1a	71
Slika 33 Rezultat numeričke optimizacije primjer 1b u 2D prikazu	73
Slika 34 Rezultat numeričke optimizacije primjera 1b u 3D prikazu	73
Slika 35 Rezultati grafičke optimizacije primjera 1b	74
Slika 36 Legure aluminija	75
Slika 37 Eutektoidni dijagram stanja	75

Slika 38 Transformator u ispitnoj stanici.....	77
Slika 39 Box-Wisker dijagram; tvrdoća raspoređena po pozicijama	84
Slika 40 Box-Wisker dijagram; promjena tvrdoće kroz godine.....	85
Slika 41 Dvodimenzionalni prikaz pseudoelementarnog prostora rešetke silumina.....	88
Slika 42 Trodimenzionalni prikaz pseudoelementarnog prostora rešetke silumina.....	88
Slika 43 Graf normalne razdiobe	90
Slika 44 Novo gledanje na kvalitetu	91
Slika 45 Metodologija rješavanja problema	92

POPIS TABLICA

Tablica 1 Kronološki raspored objavljene literature s područja statistike.....	2
Tablica 2 Broj točaka u $\{q,m\}$ elementarnoj rešetci za $3 \leq q \leq 10, 1 \leq m \leq 4$ gdje je broj nivoa za svaki komponentu $m+1$	7
Tablica 3 Broj izraza u kanonskom polinomu.....	11
Tablica 4 Schefféova nomenklatura za odzive za neke tro- i četvero-komponentne smjese.....	14
Tablica 5 Analiza varijance.....	21
Tablica 6 Standardna greška $gr12$ regresijskih koeficijenata procjene elementarnog modela s težištem, $\sigma^2 = 1$	25
Tablica 7 Varijance i kovarijance parametara procjene povezane s jednostavnim osnim modelom, $\Delta = a/q$	28
Tablica 8 Mehanička svojstva nodularnog lijeva (GJS) prema HRN EN 1563:1997	47
Tablica 9 Odabранe točke pokusa	52
Tablica 10 Rezultati mjerena	53
Tablica 11 Kriteriji za optimizaciju primjera 1a	69
Tablica 12 Kriteriji za optimizaciju primjera 1b	72
Tablica 13 Norma DIN 1725.....	78
Tablica 14 Podaci o odljevcima	80
Tablica 15 Kriteriji za optimizaciju siluminских odljevaka.....	89
Tablica A. 1. Ulagani parametri za obradu u Design-Expertu 7.0 – nodularni lijev	96
Tablica A. 2. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Vlačna čvrstoća.....	97
Tablica A. 3. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Granica razvlačenja.....	99
Tablica A. 4. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Istezanje	101
Tablica A. 5. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Nodularnost.....	104
Tablica A. 6. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Udio ferita	106
Tablica A. 7. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Udio perlita	109
Tablica A. 8. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Broj nodula	112
Tablica E. 1. Ulazni parametri za obradu u Design-Expertu 7.0 - silumin	135
Tablica E. 2. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata	136

1. UVOD

Smjesa ili mješavina¹ prema definiciji je heterogena asocijacija tvari u kojoj pojedine tvari zadržavaju svoja svojstva i obično se mogu rastaviti mehaničkim postupcima. Uključuje otopine i spojeve, ali ne uključuje slitine i amalgame [1].

Uporaba smjesa je vrlo raznolika. U svakodnevnom životu sa smjesama se susrećemo pri pripremanju različitih vrsta napitaka, te dok kuhamo. Beton je primjer smjese pjeska, vode i različitih vrsta cementa koji se koristi u građevinskoj industriji za gradnju kuća, zgrada ... U izgradnji putova i prometnica primarnu ulogu ima asfalt, koji je mješavina mineralnih tvari i bitumena kao vezivnog sredstva [2]. Smjese u strojarstvu imaju raširenu primjenu, npr. smjese plinova za zavarivanje, različite vrste ljevova, te plastične mase i polimeri, ulja za podmazivanje itd.

U svakom od gore navedenih primjera, glavni fokus proizvođača ili istraživača odgovornog za miješanje sastojaka su značajke koje taj proizvod mora posjedovati. Npr. tvrdoća ili čvrstoća betona, gdje je tvrdoća funkcija postotnog udjela cementa, pjeska i vode u smjesi. Mjerena značajka završnog proizvoda ovisi o svakom individualnom sastojku uključenom u smjesu.

Sastojci se, također, miješaju u smjesu kako bi se utvrdilo postoje li smjese koje imaju bolja promatrana svojstva od pojedinačnih sastojaka. To znači da će se promjenom udjela pojedinog sastojka mijenjati i vrijednost izabranog svojstva smjese.

Iz perspektive istraživanja, često postoji razlog za proučavanje funkcionalnih veza između svojstva ili praćenog odziva (npr. tvrdoća betona) i kontrolirane varijable (omjer sastojaka cementa, pjeska i vode) kako bi se pokušalo utvrditi da li se neka kombinacija sastojaka u nekom smislu može smatrati najboljom. Najbolja kombinacija sastojaka za beton bi bila kombinacija koja proizvodi apsolutno najtvrdi beton bez povećanja troškova.

Pri pokušaju određivanja najbolje kombinacije sastojaka smjese često se koristi postupak pokušaja i pogreške gdje je isprobano velik broj kombinacija sastojaka. Ta metoda može zahtijevati velike troškove u smislu vremena i novca, stoga su se problemi sa smjesama počeli istraživati i na području statistike.

Statističko istraživanje pokusa sa smjesama, kao što je prikazano brojem članaka koji su se pojavili u statističkoj literaturi, je relativno nova pojava. Gotovo sva teorija i metodologija koja potječe iz statističke zajednice se pojavila tokom posljednjih pedesetak godina. Nekoliko značajnih iznimaka su rasprave o smjesama koje su se pojavile u Quenouilleovoj knjizi 1953 i pionirski članak iz 1958 H. Schefféa. U tablici 1 je prikazan kronološki raspored objavljene literature s područja statistike[3].

¹ Eng. mixture

Tablica 1 Kronološki raspored objavljene literature s područja statistike

1950	1953	1955	1958	1959
	Quenouille	Claringbold*	Scheffé*	Quenouille
1961	1962	1963	1964	1965
John and Gorman Scheffé	Gorman and Hinman* Wagner and Gorman	Kenworthy Scheffé* Wagner and Gorman	Myers Uranisi	Bounds, Kurotori and Cruise <i>Draper and Lawrence</i> *
1966	1967	1968	1969	
Box and Gradiner Cruise <i>Gorman</i> Kurotori* McLean and Anderson*	Diamond Drew	Becker <i>Lambrakis</i> Murty and Das Thompson and Myers*	Becker* <i>Hewlett</i> <i>Lambrakis</i> Watson	
1970	1971	1973	1974	1975
Becker Cornell and Good Nigam	Cornell Cox Li Paku, Manson and Nelson Snee Van Schalkwyk	Cornell* Nigam Saxena and Nigam Snee*	Hare Marquardt and Snee Nigam Snee and Marquardt	Cornell Cornell and Ott Laake Snee
1976	1977	1978	1979	
Snee and Marquardt	Cornell <i>Draper and St.</i> <i>John</i> <i>Galil and Kiefer</i> Hare and Brown Saxena and Nigam	Becker Cornell and Gorman Park	Cornell Cornell and Khuri Hare Snee	

* Označava članak na koji se jako često upućuje
Imena autora označena Italic upućuju da su te godine autori izdali više od jednog članka

Cilj ovog rada je prikazati smjese kao model i na stvarnim primjerima pokazati i objasniti detalje .

2. SMJESE (MJEŠAVINE)

Prema definiciji, smjesu čine jedan ili više sastojaka, a pri tome zbroj njihovih udjela (masenih ili volumnih) iznosi 1:

$$x_i \geq 0; \quad i = 1, 2, 3, \dots, q$$

$$\sum_{i=1}^q x_i = x_1 + x_2 + x_3 + \dots + x_q = 1 \quad (2.1)$$

gdje su

- x_i – udio pojedinačnog sastojka
- q – broj sastojaka smjesa.

Ako smjesu čini samo jedan sastojak, ona se naziva čistom smjesom. Čista smjesa služi kao normativ s kojim se uspoređuju smjesa s više sastojaka.

Udio pojedinog sastojka u smjesi može biti ograničen donjom i/ili gornjom granicom. To se može ovako zapisati:

$$0 \leq a_i \leq x_i \leq b_i \leq 1; \quad 1 \leq i \leq q$$

pri čemu je

- a_i – donja granica visine udjela sastojka x_i
- b_i – gornja granica visine udjela sastojka x_i .

Ako je riječ o smjesi s tri komponente, te ako je npr. $a_1 = 0,2$, tada je $b_2 + b_3 = 1 - 0,2 = 0,8$. Takva smjesa, gdje su udjeli svih sastojaka vezani, naziva se potpunom smjesom[4].

2.1.ORGINALNI PROBLEM SMJESA²

Prikazan će biti najopćenitiji opis problema smjesa. Njegova osnovna karakteristika je da zadovoljava uvjete $x_i \geq 0$ i $x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1,0$. Svaki udio komponente x_i može poprimiti vrijednosti između 0 i 1, te su sve kombinacije miješanja komponenata u smjesi moguće. Fokus će biti na prilagodavanju matematičkih formula modelu odzivne površine za cijeli prostor elementarnih faktora, tako da je empiričko predviđanje odziva za bilo koju smjesu moguće.

Modeliranje podrazumijeva da je model ili jednadžba postavljena tako da predstavlja odzivnu površinu. Tada se odabere model kod kojeg točke izabrane za promatranje pristaju jednadžbi. Konačno, testira se adekvatnost modela. Ovaj zadnji korak služi kako bi se osiguralo da prilagođena jednadžba bude alat za predviđanje s kojim se može raditi bez straha.

Upravo spomenut redoslijed modeliranja je malo izmijenjen. Prvo će biti objašnjen model elementarne rešetke kojeg je predstavio Scheffé u ranim godinama (1958-1965) razdoblja u kojem je tek počelo istraživanje pokusa sa smjesama. Ti modeli su postali temelj teorije za kreiranje planova pokusa³ i koji su i danas još uvijek u upotrebi. Nakon njih bit će predstavljeni povezani modeli polinoma koji odgovaraju prikupljenim podacima u odabranim točkama pokusa[3].

² Eng. the original mixture problem

³ Eng. Design of Experiments (DoE)

2.2. MODEL ELEMENTARNE REŠETKE⁴

Za prilagođavanje jednadžbe polinoma koja prezentira odzivnu površinu preko cijelog elementarnog prostora, prirodni izbor modela bio bi onaj čije točke su jednakomjerno raspoređene preko cijelog elementarnog prostora. Uređen raspored koji se sastoji od ravnomjerno raspoređenih točaka na elementarnom prostoru se zove rešetka.

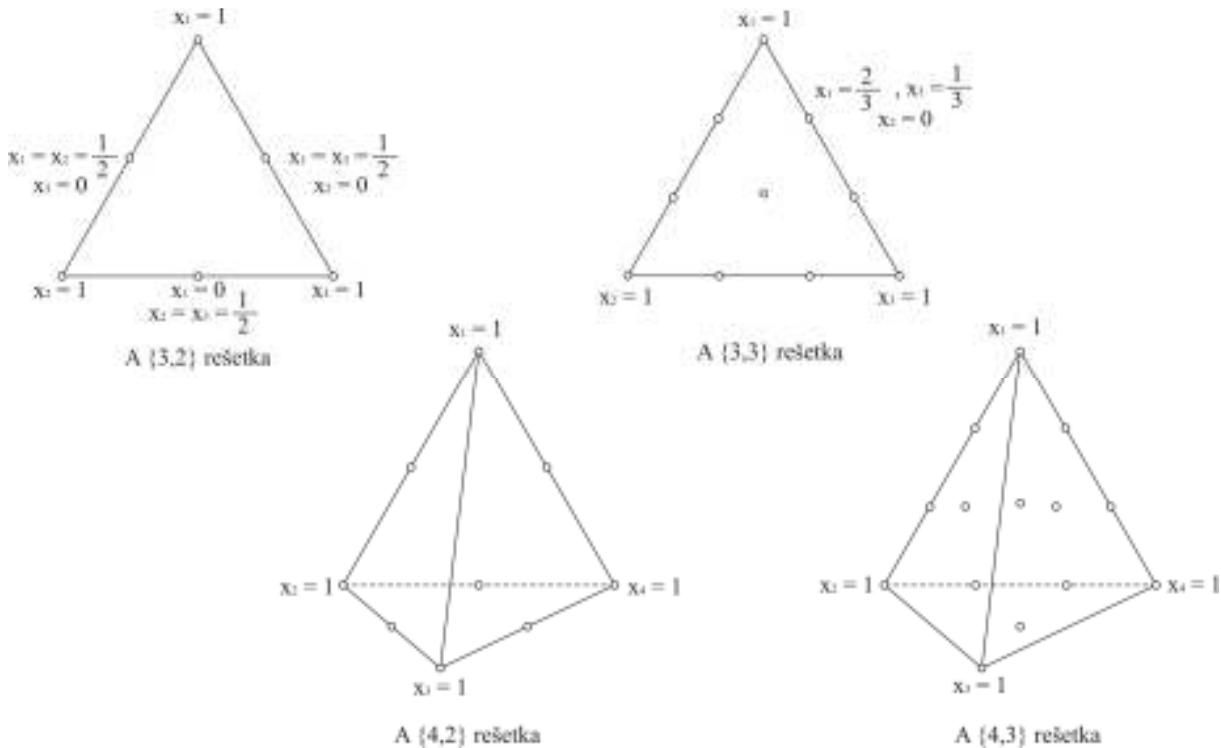
Rešetka može imati određenu korespondenciju s pojedinom jednadžbom polinoma. Na primjer, za podupiranje modela polinoma sa m stupnjeva i q komponenti preko cijelog elementarnog prostora, rešetka, određena sa $\{q, m\}$ modelom elementarne rešetke sastoji se od točaka čije koordinate su definirane slijedećom kombinacijom udjela komponenata; udjeli podrazumijevaju da će svaka komponenta zauzeti $m + 1$ jednakom raspoređenih vrijednosti u intervalu $[0,1]$, što znači:

$$x_i = 0, \frac{1}{m}, \frac{2}{m}, \dots, 1 \quad (2.2)$$

i $\{q, m\}$ elementarna rešetka se sastoji od svih mogućih kombinacija (smjesa) komponenata gdje je korišten udio (2.2) za svaku komponentu. U nastavku će biti prikazane određene kombinacije komponenti koje uključuju $\{q, m\}$ elementarnu rešetku.

Ako se prepostavi da je $q = 3$ komponentni sustav gdje je područje faktora za sve smjese jednakostaničan trokut i da je za svaku komponentu prepostavljeni udjeli $x_i = 0, \frac{1}{2}$ i 1 za $i = 1, 2$ i 3 . Postavljanjem $m = 2$, podrazumijeva se korištenje modela drugog stupnja za prikazivanje odzivne površine preko trokuta. $\{3,2\}$ elementarna rešetka sastojat će se od šest točaka na stranicama trokuta $(x_1, x_2, x_3) = (1,0,0), (0,1,0), (0,0,1), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$. Tri točke, koje su definirane kao $(1,0,0)$ ili $x_1 = 1, x_2 = x_3 = 0$; $(0,1,0)$ ili $x_2 = 1, x_1 = x_3 = 0$; i $(0,0,1)$ ili $x_3 = 1, x_1 = x_2 = 0$, svaka predstavlja čistu smjesu u kojoj individualna komponenta predstavlja smjesu, i te tri točke su vrhovi trokuta. Točke $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$ i $\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ predstavljaju binarne ili mješavine s dvije komponente $x_i = x_j = \frac{1}{2}, x_k = 0, k \neq i, j$ za svaki nenulti udio komponenata su jednake. Smjese s dvije komponente su smještene na polovištu stranica trokuta. $\{3,2\}$ elementarna rešetka je prikazana na slici 1.

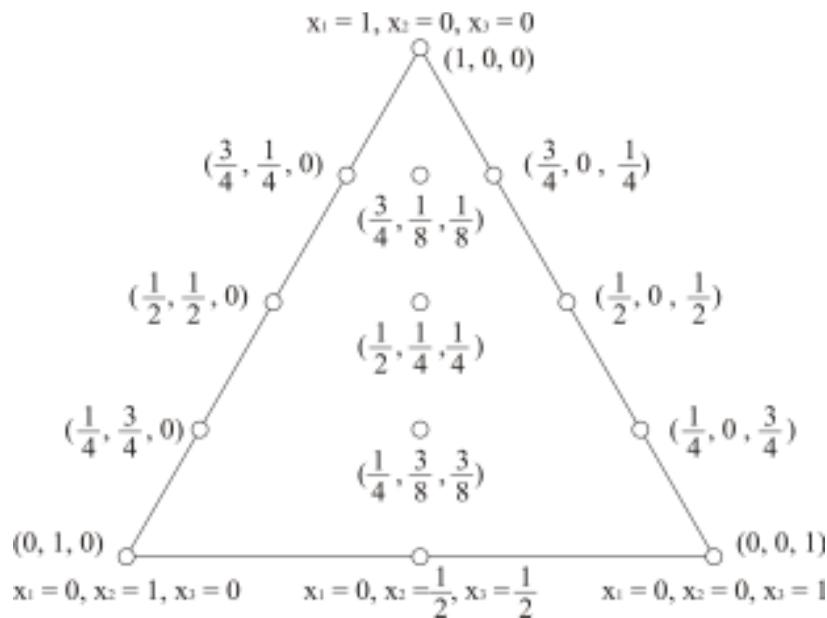
⁴ Eng. the simplex-lattice design



Slika 1 Raspored nekih $\{3, m\}$ i $\{4, m\}$ elementarnih rešetki, $m = 2$ i $m = 3$

U drugom primjeru postavimo da je broj jednako raspoređenih nivoa (ili udjela) jednak četiri, što znači $x_i = 0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 1$. Ako se uzmu u obzir sve moguće smjese od tri komponente sa tim udjelima, tada se $\{3, m = 3\}$ elementarna rešetka sastoji od slijedećih koordinata smjesa: $(x_1, x_2, x_3) = (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1), \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0\right), \left(\frac{2}{3}, 0, \frac{1}{3}\right), \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\right), \left(\frac{1}{3}, 0, \frac{2}{3}\right), \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right), \left(0, \frac{2}{3}, \frac{1}{3}\right), \left(0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}\right)$. Može se uočiti da udio komponenata u svakoj smjesi je razlomak i da suma tih razlomaka iznosi 1. Kada se nacrtaju kao rešetka raspored tih točaka je niz koji je simetričan s obzirom na orientaciju elementarnog prostora (to znači, simetričnost u odnosu na vrhove i stranice elementarnog prostora). Raspored 10 točaka $\{3,3\}$ elementarne rešetke prikazan je na slici 1.

Koordinatni sustav koji se ovdje koristi naziva se elementarni koordinatni sustav. Za tri komponente, na primjer, trokutasti koordinatni sustav je predstavljen s razlomačkim vrijednostima u okruglim zagradama (x_1, x_2, x_3) gdje je svaki $0 \leq x_i \leq 1, i = 1, 2, 3$ i $x_1 + x_2 + x_3 = 1$. Nekoliko točaka sastava su izabrane u trokutastom sustavu prikazanom na slici 2. U slučaju kada ne postoji mogućnost zabune, sastav $(x_1 = a_1, x_2 = a_2, x_3 = a_3)$ se označava kao (a_1, a_2, a_3) .

Slika 2 Koordinate trokuta (x_1, x_2, x_3)

Broj točaka modela u $\{q, m\}$ elementarnoj rešetci je $\binom{q+m-1}{m} = \frac{(q+m-1)!}{m!(q-1)!}$ gdje $m!$ iznosi „ m faktorijela“ $m! = m(m-1)(m-2)\dots(2)(1)$. U $\{3,2\}$ elementarnoj rešetci, na primjer, broj točaka iznosi $\binom{3+2-1}{2} = \frac{4!}{2!2!} = 6$, dok se $\{3,3\}$ elementarna rešetka sastoji od $\binom{5}{2} = 10$ točaka. Znači, u $\{q, m\}$ elementarnoj rešetci točke odgovaraju čistoj ili smjesi s jednom komponentom, binarnoj ili smjesi s dvije komponente, ternarnoj ili smjesi s tri komponente itd. do najviše m komponentne smjese. Na slici 1 su prikazane $\{4,2\}$ i $\{4,3\}$ elementarne rešetke. Tablica 2 prikazuje broj točaka u $\{q, m\}$ elementarnoj rešetci za vrijednosti q i m od $3 \leq q \leq 10, 1 \leq m \leq 4$.

Tablica 2 Broj točaka u $\{q,m\}$ elementarnoj rešetci za $3 \leq q \leq 10, 1 \leq m \leq 4$ gdje je broj nivoa za svaki komponentu $m+1$

Stupanj modela m	$q=$	Broj komponenata								
		3	4	5	6	7	8	9	10	
1		3	4	5	6	7	8	9	10	
2		6	10	15	21	28	36	45	55	
3		10	20	35	56	84	120	165	220	
4		15	35	70	126	210	330	495	715	

2.2.1.KANONSKI POLINOMI⁵

Općeniti oblik regresijske funkcije kojom se mogu opisati sakupljeni podaci u točkama $\{q, m\}$ elementarne rešetke je izведен na slijedeći način. Jednadžba za polinom m -tog stupnja glasi

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i \leq j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i \leq j \leq k}^q \sum_{i \leq j \leq k}^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \dots \quad (2.3)$$

gdje su uključeni izrazi sve do m -tog stupnja. Broj izraza u jednadžbi (2.3) je $\binom{q+m}{m}$, ali zato što izrazi u jednadžbi (2.3) imaju značenje samo za one članove koji zadovoljavaju uvjet $x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1$ znamo da parametri $\beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ijk}, \dots$ povezani s izrazima nisu jedinstveni. Međutim, moguće je napraviti zamjenu

$$x_q = 1 - \sum_{i=1}^{q-1} x_i \quad (2.4)$$

u jednadžbi (2.3), na taj način uklanja se ovisnost između x_i izraza, i to neće utjecati na stupanj polinoma. Efekt zamjene jednadžbe (2.4) u jednadžbi (2.3) je takav da η postaje polinom m -tog stupnja s $q - 1$ komponenata x_1, x_2, \dots, x_{q-1} s $\binom{q+m}{m}$ izraza. Iako je jednadžba nakon supstitucije jednostavnija jer sadrži nekoliko komponenata i nekoliko izraza, efekt komponente q je nepoznat jer ovom zamjenom komponenta q nije uključena u jednadžbu. Budući da se ne žele žrtvovat informacije o komponenti q , jednadžba (2.4) se ne koristi. Umjesto toga koristimo drugi pristup za izvođenje jednadžbe umjesto jednadžbe (2.3) da predstavlja površinu.

Alternativna jednadžba jednadžbi (2.3) za polinom m -tog stupnja i q komponenti, podvrgnutom ograničenjima na x_i -eve u jednadžbi (2.1), je izvedena množenjem nekih izraza u jednadžbi (2.3) s identitetom $(x_1 + x_2 + \dots + x_q) = 1$ i pojednostavljinjem. Rezultirajuća jednadžba se naziva „kanonski“ polinom ili „kanonski oblik polinoma“ ili jednostavno $\{q, m\}$ polinom. $\{q, m\}$ polinom sadrži $\binom{q+m}{m}$ izraza što je jednako broju točaka koje čine pripadajuću $\{q, m\}$ elementarnu rešetku.

Na primjer, za $m = 1$ i iz jednadžbe $\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i$ za polinom prvog stupnja, na temelju čega se množi β_0 izraz s $(x_1 + x_2 + \dots + x_q) = 1$, rezultirajuća jednadžba glasi:

$$\eta = \beta_0 \left(\sum_{i=1}^q x_i \right) + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i = \sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i \quad (2.5)$$

⁵ Eng. the canonical polynomials

gdje je $\beta_i^* = \beta_0 + \beta_i$ za sve $i = 1, 2, \dots, q$. Broj izraza u jednadžbi (2.5) iznosi q , što je ujedno i broj točaka u $\{q, 1\}$ rešetci. Parametri β_i^* , $i = 1, 2, \dots, q$ imaju jednostavno i jasno značenje u izrazima opisujući oblik odzivne površine preko elementarnog prostora.

Općeniti polinom drugog stupnja s q varijabli glasi:

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \beta_{ii} x_i^2 + \sum \sum_{i < j}^q \beta_{ij} x_i x_j \quad (2.6)$$

te ako se upotrijebe identiteti $(x_1 + x_2 + \dots + x_q) = 1$ i

$$x_i^2 = x_i \left(1 - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^q x_j \right) \quad (2.7)$$

tada za $m = 2$

$$\begin{aligned} \eta &= \beta_0 \left(\sum_{i=1}^q x_i \right) + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \beta_{ii} x_i \left(1 - \sum_{j \neq i}^q x_j \right) + \sum \sum_{i < j}^q \beta_{ij} x_i x_j \\ \eta &= \sum_{i=1}^q (\beta_0 + \beta_i + \beta_{ii}) x_i - \sum_{i=1}^q \beta_{ij} x_i \sum_{j \neq i}^q x_j + \sum \sum_{i < j}^q \beta_{ij} x_i x_j \\ \eta &= \sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i + \sum \sum_{i < j}^q \beta_{ij}^* x_i x_j \end{aligned} \quad (2.8)$$

Broj izraza u jednadžbi (2.8) iznosi $q + q \frac{(q-1)}{2} = q \frac{q+1}{2}$.

Usporedba napravljena između jednadžbi (2.6) i (2.8) otkriva da parametri u jednadžbi (2.8) su jednostavno funkcije parametara u jednadžbi (2.6), što znači, $\beta_i^* = \beta_0 + \beta_i + \beta_{ii}$ i $\beta_{ij}^* = \beta_{ij} - \beta_{ii} - \beta_{jj}$, $i, j = 1, 2, \dots, q, i < j$. Nadalje, jednadžba (2.8) može biti zapisana u homogenoj formi

$$\eta = \sum_{i=1}^q \delta_{ii} x_i^2 + \sum \sum_{i < j}^q \delta_{ij} x_i x_j = \sum \sum_{i \leq j}^q \delta_{ij} x_i x_j \quad (2.9)$$

koja je nastala kao rezultat množenja $\sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i$ u jednadžbi (2.8) s identitetom $(x_1 + x_2 + \dots + x_q) = 1$, te potom pojednostavljivanjem izraza.

Dva modela u jednadžbama (2.8) i (2.9) su ekvivalentni u smislu da je jedan proizašao iz drugoga, jednadžba (2.9) iz jednadžbe (2.8), bez mijenjanja stupnja polinoma i reduciranja broja komponenata. Zbog ograničenja $(x_1 + x_2 + \dots + x_q) = 1$ na udjele komponenata, neograničen broj regresijskih funkcija se može dobiti iz jednadžbe (2.6), i te jednadžbe su ekvivalenti jednadžbama (2.8) i (2.9) kada su svi udjeli komponenata uključeni. To je vidljivo iz spoznaje da su za sve funkcije Φ linearne jednadžbe $\beta - \Phi + \sum_{i=1}^q (\beta_i + \Phi)x_i$ ekvivalentne kada je $\sum_{i=1}^q x_i = 1$.

Formula za polinom trećeg stupnja može se izvesti množenjem identiteta $(x_1 + x_2 + \dots + x_q) = 1$ kao i ograničenja u jednadžbi (2.7) s izrazima za općeniti polinom trećeg stupnja u jednadžbi (2.3), te pojednostavljenjem izraza kako je učinjeno i za $\{q, 2\}$ polinom. Potpuni kubni ili $\{q, 3\}$ polinom glasi:

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i + \sum \sum_{i < j}^q \beta_{ij}^* x_i x_j + \sum \sum_{i < j}^q \delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum \sum_{i < j < l}^q \beta_{ijk}^* x_i x_j x_k \quad (2.10)$$

Pojednostavljena formula za specijalni slučaj kubnog polinoma gdje izrazi $\beta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$ nisu uzeti u obzir je specijalni kubni polinom

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i + \sum \sum_{i < j}^q \beta_{ij}^* x_i x_j + \sum \sum_{i < j < k}^q \beta_{ijk}^* x_i x_j x_k \quad (2.11)$$

Ubuduće uklonit će se zvjezdice s β_i^* , β_{ij}^* i β_{ijk}^* i koristiti će se β_i , β_{ij} i β_{ijk} u svim $\{q, m\}$ polinomima. Zvjezdice su bile pridružene parametrima samo kako bi zadržale parametre u osnovnom polinomu jednadžbe (2.3) odvojene od parametara u izvedenim $\{q, m\}$ polinomima. Za tri komponente, modeli iz jednadžbi (2.5), (2.8), (2.10) i (2.11) u buduće se izgledati

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$$

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3$$

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \delta_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + \delta_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \delta_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3)$$

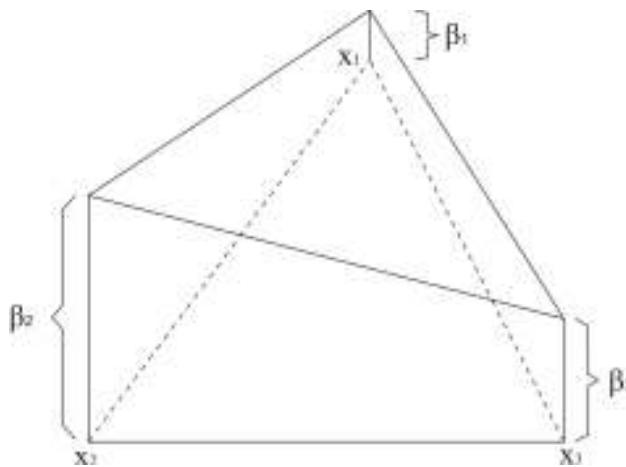
$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3$$

Broj izraza u $\{q, m\}$ je funkcija od m , stupanj jednadžbe, kao i broj komponenata q . Broj izraza za odredene vrijednosti q su prikazani u tablici 3.

Tablica 3 Broj izraza u kanonskom polinomu

Broj komponenata q	Linearni	Kvadratni	Specijalni kubni	Kubni
2	2	3		
3	3	6	7	10
4	4	10	14	20
5	5	15	25	35
6	6	21	41	56
7	7	28	63	84
8	8	36	92	120
.
.
.
q	q	$q(q+1)/2$	$q(q^2+5)/6$	$q(q+1)(q+2)/6$

Izrazi $\beta_i x_i$ i $\beta_{ij} x_i x_j$ u $\{q, 1\}$ i $\{q, 2\}$ jednadžbama polinoma imaju jednostavne interpretacije. Vrh odgovara čistoj komponenti i , na primjer, ako se za bilo koji od dva modela jednadžbe (2.5) ili jednadžbe (2.8), postavi $x_i = 1$ odатle slijedi $x_j = 0$ za sve $j \neq i$, tada je $\eta = \beta_i$. Parametar β_i prema tome predstavlja očekivani odziv čiste komponente i i slikovito, β_i je vrh površine iznad prostora u vrhu, gdje je $x_i = 1$ za $i = 1, 2, \dots, q$. Kada jednadžba (2.5) točno definira odzivnu površinu, što je slučaj kada je miješanje komponenata strogo linearno ili aditivno, tada je površina opisana ravninom preko elementarnog prostora. Primjer za $q = 3$ prikazan je na slici 3.

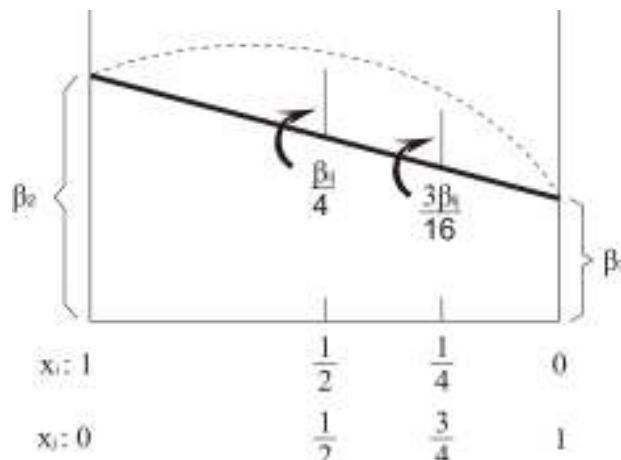
**Slika 3** Planarna površina iznad trokuta s tri komponente

Kada se prepostavi da je miješanje komponenata linearno (slika 3.), odziv za binarnu mješavinu komponenata i i j u udjelima x_i i x_j opisan je jednadžbom (2.5) i glasi $\eta = \beta_i x_i + \beta_j x_j$, budući da su sve ostale komponente x_k jednake nula. Ali da su, s druge strane, točni

odzivi za binarnu kombinaciju komponenata i i j točnije opisani jednadžbom (2.8) koja glasi $\eta = \beta_i x_i + \beta_j x_j + \beta_{ij} x_i x_j$, tada postoji višak. Višak, kojeg predstavlja izraz $\beta_{ij} x_i x_j$, je nastao zbog razlika među modelima u jednadžbi (2.8) i (2.5). Ako s pozitivnim odzivom količina β_{ij} je pozitivna, višak se naziva *sinergizam* binarne mješavine, i β_{ij} je kvadratni ili koeficijent drugog reda binarnog sinergizma. (Slika 4.) Suprotno sinergizmu (znači, kada je β_{ij} negativan) naziva se *antagonizam* binarne mješavine.

Kubna jednadžba (2.10) najrealnije prikazuje površinu, višak ili sinergizam binarne mješavine uključuje izraz $\delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$ gdje δ_{ij} predstavlja kubni koeficijent binarne sinergije. Izraz $\beta_{ijk} x_i x_j x_k$ u jednadžbi (2.10) ternarni sinergizam komponenata i, j i k .

Drugi mogući način da se objasne odvojeni izrazi u modelu prvog i drugog stupnja prikazani jednadžbama (2.5) i (2.8) je razmatranje kako izrazi individualno pridonose opisivanju oblika površine mješavine. Izraz $\beta_i x_i$ pridonosi modelu samo kad vrijednosti $x_i > 0$ i budući da β_i predstavlja vrh površine iznad prostora u vrhu iznad $x_i = 1$, izraz $\beta_i x_i$ pridonosi najviše (tj. vrijednost $\beta_i x_i = \beta_i$ je najveća kada je $\beta_i > 0$) za $x_i = 1$. Izraz $\beta_{ij} x_i x_j$ u jednadžbi (2.8) pridonosi modelu bilo gdje na elementarnom prostoru gdje su oba $x_i > 0$ i $x_j > 0$). Na bridovima koji spajaju vrhove koji odgovaraju komponentama i i j , vrijednost izraza $\beta_{ij} x_i x_j$ je maksimalna kada je $\beta_{ij} > 0$ za $x_i = x_j = \frac{1}{2}$ gdje je to jednako $\beta_{ij} x_i x_j = \frac{\beta_{ij}}{4}$.



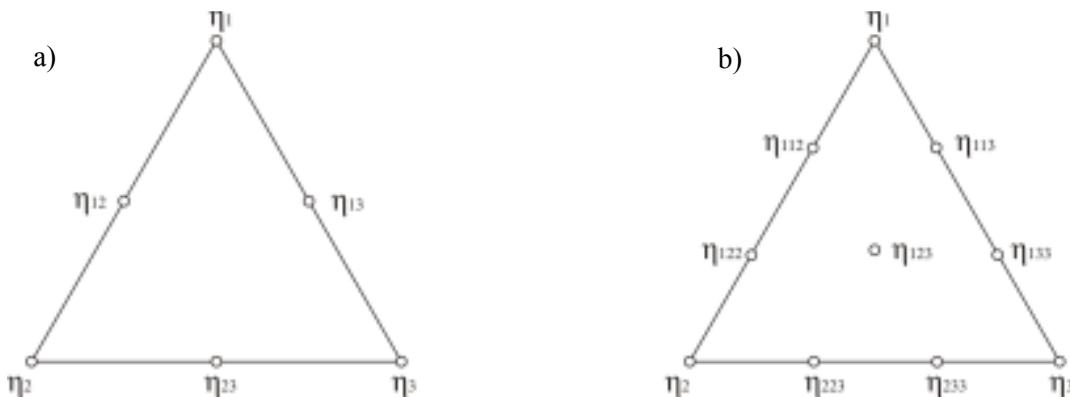
Slika 4 Sinergizam binarne smjese

2.2.2. KOEFICJENTI POLINOMA KAO FUNKCIJE ODZIVA NA TOČKAMA REŠETKE

Ranije u tekstu je spomenuto da $\{q, m\}$ elementarna rešetka ima posebnu podudarnost s jednadžbom $\{q, m\}$ polinoma. Ta podudarnost sastoji se u tome da se parametri u polinomu mogu izraziti kao jednostavne funkcije očekivanog odziva koji se mjeri u točkama $\{q, m\}$ elementarne rešetke. Kako bi se to bolje objasnilo, za početak biti će ponovljena odzivna nomenklatura koju je prvi predložio Scheffé 1958 u svome članku o smjesama.

Neka se odziv čiste komponente i označi s η_i ; odziv binarne smjesa s jednakim udjelima (50%:50%) komponenata i i j označi s η_{ij} i odziv ternerne smjesa s jednakim udjelima komponenata i, j i k s η_{ijk} . Na slici 5 nomenklatura odziva je prikazana u točkama $\{3,2\}$ i $\{3,3\}$ elementarne rešetke. Indekse na odzivima određuju tri karakteristike:

1. Ukupni broj slova (brojeva) indeksa jednak je nazivniku koji opisuje udjele smjesa (npr. dva slova "ij" u b_{ij} upućuje da su udjeli sastojaka $x_i = \frac{1}{2}$ i $x_j = \frac{1}{2}$);
2. Broj različitih slova (brojeva) pokazuje koliko je u određenoj smjesi sastojaka kojih su udjeli veći od nule;
3. Broj pojavljivanja određenog slova (broja) u pojedinom indeksu ukazuje na relativni udio odgovarajućeg sastojka u smjesi.



Slika 5 Označavanje točaka kod a) $\{3,2\}$ i b) $\{3,3\}$ elementarne rešetke

Primjerice, odziv η_{112} ima u indeksu tri broja što znači da su udjeli sastojaka podijeljeni po trećinama. Međutim, riječ je samo o dva različita broja i smjesa je binarna. Ponavljanje broja 1 ukazuje na to da je udio sastojka 1 dvije trećine, a sastojka 2 jedna trećina. Takav je slučaj opisan na slici 2. b). Očekivani odzivi u drugim točkama sastava prikazani su u tablici 4.

Tablica 4 Schefféova nomenklatura za odzive za neke smjese sa tri i četiri komponente

Odziv	Komponente smjese							
	x_1	x_2	x_3	x_1	x_2	x_3	x_4	
η_1	1	0	0	1	0	0	0	
η_2	0	1	0	0	1	0	0	
η_{12}	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0	
η_{23}	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	
η_{123}	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	
η_{113}	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	0	
η_{233}	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	0	
η_{1112}	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$	0	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$	0	0	
η_{1223}	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	0	
η_{1144}				$\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{1}{2}$	
η_{2344}				0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	
η_{1234}				$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	

Jednadžbe za izražavanje parametara u modelima polinoma za izraze η_i , η_{ij} i η_{ijk} su dobivene simultanim rješavanjem $\binom{q+m}{m}$ jednadžbi. Taj broj ne samo da odgovara broju parametara u $\{q, m\}$ jednadžbi polinoma, nego također broju točaka rešetke, te prema tome broju očekivanih odziva η_i , η_{ij} i η_{ijk} mjerениh u točkama u $\{q, m\}$ elementarnoj rešetci. Na primjer, ako je model drugog stupnja iz jednadžbi (2.8) korišten za sustav s tri komponente i dobiveni su izmjereni odzivi u točkama $\{3,2\}$ modela elementarne rešetke, tada za jednadžbu

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 \quad (2.12)$$

ako se uvedu zamjene

$$\eta_i \quad \text{za } x_i = 1, \quad x_j = 0, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad j \neq i$$

$$\eta_{ij} \quad \text{za } x_i = \frac{1}{2}, \quad x_j = \frac{1}{2}, \quad x_k = 0, \quad i < j, \quad k \neq i, j$$

u jednadžbu (2.12), dobiju se rezultati za sljedećih $\binom{3+2-1}{2} = 6$ jednadžbi

$$\eta_1 = \beta_1, \quad \eta_2 = \beta_2, \quad \eta_3 = \beta_3$$

$$\eta_{12} = \beta_1 \left(\frac{1}{2} \right) + \beta_2 \left(\frac{1}{2} \right) + \beta_{12} \left(\frac{1}{4} \right)$$

$$\eta_{12} = \beta_1 \left(\frac{1}{2} \right) + \beta_3 \left(\frac{1}{2} \right) + \beta_{13} \left(\frac{1}{4} \right)$$

$$\eta_{12} = \beta_2 \left(\frac{1}{2} \right) + \beta_3 \left(\frac{1}{2} \right) + \beta_{23} \left(\frac{1}{4} \right)$$

Rješavanjem tih šest jednadžbi simultano, a to je moguće jer je broj jednadžbi jednak broju nepoznаница, dobiju se formule za parametre β_i i β_{ij} , $i, j = 1, 2$ i $3, i < j$ koje glase:

$$\beta_1 = \eta_1, \quad \beta_{12} = 4\eta_{12} - 2\eta_1 - 2\eta_2$$

$$\beta_2 = \eta_2, \quad \beta_{13} = 4\eta_{13} - 2\eta_1 - 2\eta_3$$

$$\beta_3 = \eta_3, \quad \beta_{23} = 4\eta_{23} - 2\eta_2 - 2\eta_3$$

(2.13)

Parametar β_i predstavlja odziv čiste komponente i , a β_{ij} razliku koja uspoređuje odziv u polovištu brida koji povezuje vrhove komponenata i i j s odzivima u vrhovima komponenata i i j . Na taj način u šesteročlanom polinomu jednadžba (2.12), suma $\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$ predstavlja linearno ili aditivno miješanje triju komponenata, dok dodatni izrazi $\beta_{ij} x_i x_j$, $i < j$, predstavljaju devijaciju od površine drugog stupnja rezultirajući neaditivnom miješanju komponenata.

Jednadžbe (2.13) su dobivene koristeći samo tri komponente za prosuđivanje prikladnosti. Jednostavno je prikazati očekivane odzive u točkama $\{3,2\}$ elementarne rešetke i potrebno je samo šest jednadžbi za postavljanje formula za β_i i β_{ij} , $i, j = 1, 2$ i $3, i < j$. Za općeniti model od q komponenata gdje model drugog stupnja iz jednadžbe (2.8) sadrži $q \frac{q+1}{2}$ izraza i očekivani odzivi su mjereni u točkama $\{q, 2\}$ elementarne rešetke modela, formule za određivanje parametara β_i i β_{ij} za izraze η_i i η_{ij} su identične jednadžbama (2.13). Drugim riječima, za općenite q , gdje je, $i, j = 1, 2, \dots, q, i < j$,

$$\beta_i = \eta_i, \quad \beta_{ij} = 4\eta_{ij} - 2\eta_i - 2\eta_j$$

(2.14)

Za slučajeve gdje su stupnjevi veći $m > 2$, formula može biti izvedena na sličan način kao i za model drugog stupnja. Gorman i Hinman (1962) su predstavili formule za parametre kubne i kvartne jednadžbe polinoma.

2.2.3. PROCJENA PARAMETARA $\{q, m\}$ POLINOMA

Parametri u $\{q, m\}$ polinomima su izraženi kao jednostavne funkcije očekivanih odziva u točkama $\{q, m\}$ elementarne rešetke. Prema tome jedina moguća pretpostavka je da će za procjenu parametara u modelima koristeći promatrane vrijednosti odziva u točkama rešetke, izračunate formule za β_i i β_{ij} i procjene β_i i β_{ij} , biti identične jednadžbi (2.14) s promatranim vrijednostima zamijenjenim u jednadžbi (2.14) umjesto η_i i η_{ij} . Da bi se to pokazalo potrebno je uzeti u obzir uklapanje modela drugog stupnja s tri komponente u jednadžbu (2.12) s vrijednostima podataka sakupljenim u točkama $\{3,2\}$ modela elementarne rešetke.

Promatrane vrijednosti odziva u u -tom pokusu, $1 < u < N$, označenim s y_u , su izražene u izrazima za očekivani ili stvarni odziv η_u u obliku $y_u = \eta_u + \epsilon_u$ gdje su ϵ_u za sve $1 < u < N$, identične i nasumično distribuirane pogreške za koje se pretpostavlja da nemaju značenje i varijancu σ^2 . Ako se privremeno izmjeni notacija pisanjem promatranih odziva s istom nomenklaturom koja je korištena za predviđene odzive, to znači da će se promatrane vrijednosti odziva za čiste komponente i (tj. za $x_i = 1, x_j = 0, j \neq i$) označavati s y_i , a promatrane vrijednosti odziva za 50%:50% binarne smjese ($x_i = \frac{1}{2}, x_j = \frac{1}{2}, x_k = 0$, za sve $i < j \neq k$) komponenata i i j s y_{ij} . Zamjenom η_i i η_{ij} s y_i i y_{ij} u jednadžbi (2.14), te označavanjem s b_i i b_{ij} procjene β_i i β_{ij} dobije se

$$\begin{aligned} b_i &= y_i, \quad i = 1, 2, \dots, q \\ b_{ij} &= 4y_{ij} - 2(y_i + y_j), \quad i, j = 1, 2, \dots, q, \quad i < j \end{aligned} \tag{2.15}$$

ili

$$\frac{b_{ij}}{4} = y_{ij} - \frac{y_i + y_j}{2}$$

Ta zadnja razlika govori da količina $\frac{b_{ij}}{4}$ predstavlja količinu devijacije površine, kod smjese $x_i = x_j = \frac{1}{2}$, od ravnine koja povezuje vrhove odgovarajućih komponenata i i j . Nadalje, ako su r_i i r_{ij} promatrane kopije sakupljene za $x_i = 1, x_j = 0, j \neq i$ i za $x_i = \frac{1}{2}, x_j = \frac{1}{2}, x_k = 0, i < j, k \neq i, j$, tada su prosječne vrijednosti \bar{y}_i i \bar{y}_{ij} zamijenjene u jednadžbi (2.15), te formula za procijenjene parametre postaje

$$\begin{aligned} b_i &= \bar{y}_i, \quad i = 1, 2, \dots, q \\ b_{ij} &= 4\bar{y}_{ij} - 2(\bar{y}_i + \bar{y}_j), \quad i, j = 1, 2, \dots, q, \quad i < j \end{aligned} \tag{2.16}$$

Karakteristike procjena ovise o karakteristikama distribucije nasumične greške ϵ_u . Kao što je ranije pretpostavljeno da su greške ϵ_u , $1 < u < N$, identične i nasumično distribuirane pogreške za koje se pretpostavlja da nemaju značenje i varijancu σ^2 . Prema tome, aritmetičke sredine i varijance distribucije procjena b_i i b_{ij} , dane za razmatranje su prikupljene samo u točkama rešetke, glase

$$\begin{aligned} E(b_i) &= E(\bar{y}_i) = \beta_i \\ var(b_i) &= var(\bar{y}_i) = \frac{\sigma^2}{r_i} \\ E(b_{ij}) &= E[4\bar{y}_{ij} - 2(\bar{y}_i + \bar{y}_j)] = \beta_{ij} \\ var(b_{ij}) &= var[4\bar{y}_{ij} - 2(\bar{y}_i + \bar{y}_j)] = \frac{16\sigma^2}{r_{ij}} + \frac{4\sigma^2}{r_i} + \frac{4\sigma^2}{r_j} \end{aligned} \tag{2.17}$$

i

$$\begin{aligned} cov(b_i, b_j) &= E[\bar{y}_i(\bar{y}_j)] - E(\bar{y}_i)E(\bar{y}_j) = 0, \quad i \neq j \\ cov(b_i, b_j) &= E[\bar{y}_i(4\bar{y}_{ij} - 2\bar{y}_i - \bar{y}_j)] - E(\bar{y}_i)E(4\bar{y}_{ij} - 2\bar{y}_i - \bar{y}_j) = -2E(\bar{y}_i^2) + 2(E\bar{y}_i)^2 \\ &= \frac{-2\sigma^2}{r_i} \\ cov(b_i, b_j) &= \frac{4\sigma^2}{r_i}, \quad j \neq k \end{aligned} \tag{2.18}$$

Nadalje, ako se pretpostavi da su pogreške normalno distribuirane, što znači, ako je $\epsilon_u \sim normal(0, \sigma^2)$, i kao je jednak broj ponavljanja $r_i = r_{ij} = r$ sakupljen za svaku od točaka modela, tada $b_i \sim normal(\beta_i, \frac{\sigma^2}{r})$ i $b_{ij} \sim normal(\beta_{ij}, \frac{24\sigma^2}{r})$, gdje „ \sim “ znači „je distribuiran“.

Jednom kada su parametri modela drugog stupnja u jednadžbi (2.8) procijenjeni, procjene b_i i b_{ij} su zamijenjene iz jednadžbi (2.8) za β_i i β_{ij} , te prilagođena jednadžba glasi

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^q b_i x_i + \sum_{i < j}^q b_{ij} x_i x_j \tag{2.19}$$

Procjene vrijednosti odziva za točke $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_q)'$ u elementarnom prostoru su učinjene zamjenom vrijednosti x_i iz jednadžbe (2.19). Procjena η od \mathbf{x} označena je kao $\hat{y}(\mathbf{x})$.

2.2.4. KARAKTERISTIKE PROCJENE ODZIVA

Budući da su procijenjeni b_i i b_{ij} linearne funkcije nasumičnih varijabli (y_i i y_{ij}) i prema tome su i oni sami nasumične varijable, procijenjeni odziv $\hat{y}(\mathbf{x})$ za \mathbf{x} je nasumična varijabla. Kada su procijenjeni b_i i b_{ij} nepristrani, što je slučaj kad je pogodan model istog stupnja za x -eve kao i stvarna površina, tada je očekivanje od $\hat{y}(\mathbf{x})$ jednako $E[\hat{y}(\mathbf{x})] = \eta$.

Formula za varijantu procjene $\hat{y}(\mathbf{x})$ može biti zapisana u izrazima varijance i kovarijance b_i i b_{ij} koji su dani u jednadžbama (2.17) i (2.18). Jednostavnija metoda za nalaženje varijance od $\hat{y}(\mathbf{x})$ je da se zamjene parametri procjene b_i i b_{ij} s njihovim odgovarajućim linearnim kombinacijama prosjeka \bar{y}_i i \bar{y}_{ij} , koji su definirani u jednadžbi (2.16). Varijanca od $\hat{y}(\mathbf{x})$ može biti zapisana kao funkcija varijanci \bar{y}_i i \bar{y}_{ij} .

Zapisana kao funkcija prosjeka \bar{y}_i i \bar{y}_{ij} u točkama rešetke, procjena odziva glasi

$$\begin{aligned}\hat{y}(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^q b_i x_i + \sum \sum_{i < j}^q b_{ij} x_i x_j \\ \hat{y}(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^q \bar{y}_i x_i + \sum \sum_{i < j}^q (4\bar{y}_{ij} - 2\bar{y}_i - \bar{y}_j) x_i x_j \\ \hat{y}(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^q \bar{y}_i x_i - \left[2x_i \left(\sum_{j \neq i}^q x_j \right) \right] + \sum \sum_{i < j}^q 4\bar{y}_{ij} x_i x_j \\ \hat{y}(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^q a_i \bar{y}_i + \sum \sum_{i < j}^q a_{ij} \bar{y}_{ij}\end{aligned}\tag{2.20}$$

gdje je $a_i = x_i(2x_i - 1)$ i $a_{ij} = 4x_i x_j, i, j = 1, 2, \dots, q, i < j$. U koeficijentima a_i i a_{ij} vrijednosti x_i su specificirane vrijednostima u $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_q)'$, te su prema tome određene bez pogreške. Budući da su \bar{y}_i i \bar{y}_{ij} prosjeci od r_i i r_{ij} , tada varijanca od $\hat{y}(\mathbf{x})$ iz jednadžbe (2.20) može biti zapisana u obliku

$$var[\hat{y}(\mathbf{x})] = \sigma^2 \left\{ \sum_{i=1}^q \frac{a_i^2}{r_i} + \sum \sum_{i < j}^q \frac{a_{ij}^2}{r_{ij}} \right\}\tag{2.21}$$

Kada je jednak broj promatranja, r , u svakoj točki rešetke, formula za varijantu procjene odziva u točki \mathbf{x} je pojednostavljena

$$var[\hat{y}(\mathbf{x})] = \frac{\sigma^2}{r} \left\{ \sum_{i=1}^q a_i^2 + \sum_{i < j} \sum_{i < j} a_{ij}^2 \right\}$$

(2.22)

U jednadžbi (2.22) veličina $\frac{\sigma^2}{r}$ je ovisna o preciznosti opažanja u pokusu, dok $\{\sum_{i=1}^q a_i^2 + \sum_{i < j} \sum_{i < j} a_{ij}^2\}$ je ovisna samo o sastavu smjese za koju je napravljena procjena $\hat{y}(\mathbf{x})$. Kada je σ^2 nepoznata, tada je procjena s^2 izračunata iz r_i i r_{ij} . Procjena $var[\hat{y}(\mathbf{x})]$ se dobiva zamjenom s^2 za σ^2 u jednadžbi (2.21) i zapisana je kao $\widehat{var}[\hat{y}(\mathbf{x})]$. Konačno, ako je, za \mathbf{x} , i $(1 - \alpha) \times 100$ postotni interval pouzdanosti za η zahtjevan, tada je interval

$$\Pr[\hat{y}(\mathbf{x}) - \Delta < \eta < \hat{y}(\mathbf{x}) + \Delta] = 1 - \alpha$$

(2.23)

gdje je $\Delta = [t_{f,\alpha/2}] \sqrt{\widehat{var}[\hat{y}(\mathbf{x})]}$, p = broj izraza u modelu, f = broj stupnjeva slobode za procjenu σ^2 iz jednadžbe (2.22), i $t_{f,\alpha/2}$ je tablična t -vrijednost za f stupnjeva slobode za $\alpha/2$ nivo značajnosti.

2.2.5.TABLICA ANALIZE VARIJANCE

Ovdje će biti prikazano kako podijeliti ili napraviti dekompoziciju cjelokupne varijacije (sume kvadrata odstupanja) na dva dijela:

1. varijacija između prosjeka
2. varijacija između ponavljanih uzoraka u sklopu svakog miješanja

Računski, koristi se jednadžba:

$$\text{Suma kvadrata između miješanja} = \sum_{l=1}^N r_l (\bar{y}_l - y)^2 \quad (2.24)$$

gdje je r_l broj ponavljanih pokusa l -tog miješanja. Suma kvadrata u jednadžbi (2.24) ima $N-1$ stupnjeva slobode povezanih s tim. Ako postoji p različitih smjesa izabranih u elementarnoj rešetci, tada $l = 1, 2, \dots, p$ i suma kvadrata između miješanja će imati $p - 1$ stupnjeva slobode.

Budući da $\{q, m\}$ polinom je prilagođen podacima prikupljenim u točkama $\{q, m\}$ modela elementarne rešetke, broj izraza u modelu mora biti jednak broju različitih smjesa definiranih pokusom. Taj broj je $\binom{q+m}{m}$. Na taj je način varijacija u promatranju objašnjena s prilagođavanjem modela i naziva se „suma kvadrata uslijed regresije“ ili „suma kvadrata uslijed prilagodbe modela“ i istovjetna je sumi kvadrata između miješanja u jednadžbi (2.24) izračun sume kvadrata uslijed regresije, označene kao SSR, glasi

$$SSR^6 = \sum_{u=1}^N (\hat{y}_u - y)^2 \quad (2.25)$$

gdje \hat{y}_u je predviđena vrijednost od y_u koristeći prilagođeni model i \bar{y} je cjelokupni prosjek promatranja.

Varijacije između ponavljanih pokusa u sklopu smjesa nisu objašnjene razlikom među smjesama (niti prilagođenim modelom), već se odnosi na varijacije ostataka. Formula za sumu kvadrata ostataka, naziva se SSE, glasi

$$SSE^7 = \sum_{u=1}^N (y_u - \hat{y}_u)^2 \quad (2.26)$$

⁶ Sum of squares due to regression

⁷ Residual sum of squares (Sum of squares due to error)

i SSE ima $N - p$ stupnjeva slobode gdje je p broj različitih smjesa, ili u ovom slučaju broj izraza u modelu.

Koristeći jednadžbe (2.25) i (2.26) tablica analize varijance za pripadajući model, koji se sastoji od p izraza, prikazana je u tablici 5.

Tablica 5 Analiza varijance

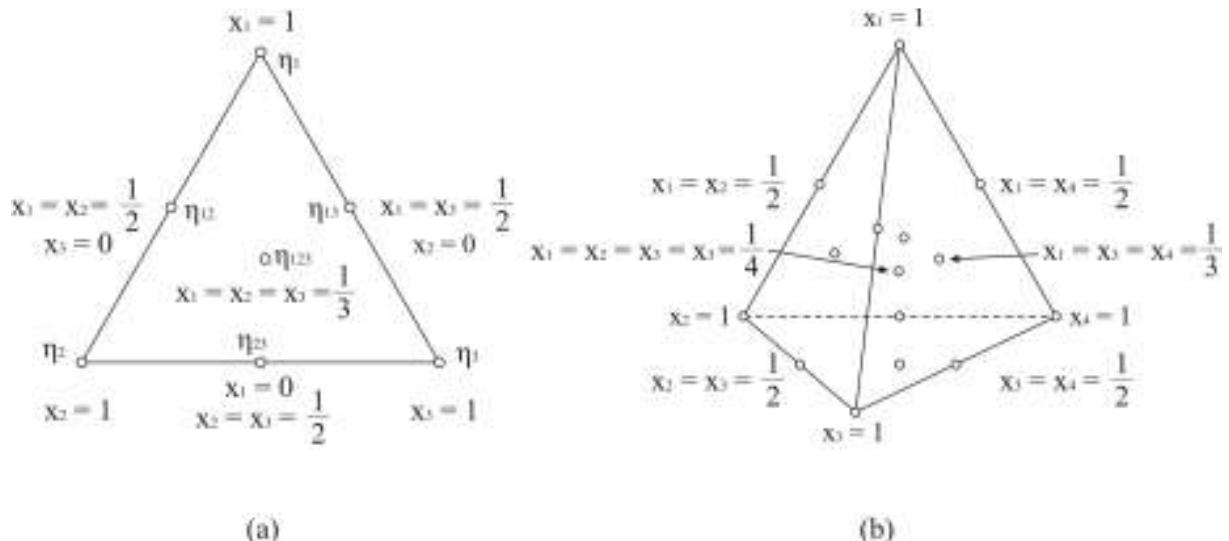
Izvor varijacije	Stupnjevi slobode	Suma kvadrata	Sredina kvadrata
Protumačen modelom	$p-1$	$SSR = \sum_{u=1}^N (\hat{y}_u - y)^2$	$SSR/(p-1)$
Neprotumačena (rezidualna) odstupanja	$N-p$	$SSE = \sum_{u=1}^N (y_u - \hat{y}_u)^2$	$SSE/(N-1)$
Ukupno	$N-1$	$SST = \sum_{u=1}^N (y_u - \bar{y})^2$	

2.3.ELEMENTARNI MODEL S TEŽIŠTEM I PRIDRUŽENI MODEL POLINOMA⁸

U q -komponentnom elementarnom modelu s težištem, broj određenih točaka iznosi $2^q - 1$. Te točke odgovaraju q permutacija od $(1,0,0,0,\dots,0)$ ili q čistih smjesa, $\binom{q}{2}$ permutacija od $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0,\dots,0\right)$ ili sve binarne mješavine, $\binom{q}{3}$ permutacije od $\left(\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3},0,\dots,0\right)$, ..., i tako dalje, do konačne točke težišta $\left(\frac{1}{q},\frac{1}{q},\dots,\frac{1}{q}\right)$ ili q -te mješavine. Drugim riječima, model sadrži sve (neprazne) podskupove q komponenata, ali samo za mješavine u kojima se komponente pojavljuju u jednakim udjelima. Takve smjese se nalaze u središtu ($q - 1$) dimenzionalnog elementarnog prostora i u središtima svih elementarnih prostora nižeg stupnja sadržanih unutar ($q - 1$) dimenzionalnog elementarnog prostora. Na slici 6 prikazani su elementarni modeli s težištem s tri ili četiri komponente.

U točkama elementarnog modela s težištem, prikupljeni su podaci za odziv i polinom je prilagođen tako da ima isti broj izraza (ili procijenjenih parametara) koliko i točaka u pridruženom modelu. Jednadžba polinoma glasi

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \sum_{k=1}^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \dots + \beta_{1,2,\dots,q} x_1 x_2 \dots x_q \quad (2.27)$$



Slika 6 Model elementarne rešetke s težištem za a) smjesu s tri i b) četiri komponente

Kao u slučaju prethodnih modela koji su izraženi u kanonskom obliku u jednadžbama (2.5) i (2.8), parametar β_i u jednadžbi (2.27) predstavlja očekivani odziv čiste komponente i ,

⁸ Eng. simplex-centroid design

te se naziva linearna vrijednost komponente i , a β_{ij} je koeficijent neaditivnog miješanja komponenata i i j . Ostali β_{ijk} -ovi su slično definirani.

$2^q - 1$ parametri u jednadžbi (2.27) polinoma su izraženi kao linearne funkcije očekivanih odziva u točkama elementarnog modela s težištem. Na primjer, ako se zamijene η_i, η_{ij} i η_{ijk} u jednadžbi (2.27) za odzive $x_i = 1, x_j = 0, j \neq i$ i za $x_i = x_j = \frac{1}{2}$ i za $x_i = x_j = x_k = \frac{1}{3}$ za sve i, j i k , tada parametri glase

$$\begin{aligned}\beta_i &= \eta_i, \quad \beta_{ij} = 2\{2^1\eta_{ij} - 1^1(\eta_i - \eta_j)\} \\ \beta_{ijk} &= 3\{3^2\eta_{ijk} - 2^2(\eta_{ij} + \eta_{ik} + \eta_{jk}) + 1^2(\eta_i + \eta_j + \eta_k)\}\end{aligned}\tag{2.28}$$

Općenitije, ako se s Sr označi bilo koji podskup $\{i_1, i_2, \dots, i_r\}$ od r elemenata od $\{1, 2, \dots, q\}$ tada općenita formula za parametre modela glasi

$$\begin{aligned}\beta_{Sr} &= r\{r^{r-1}L_r(Sr) - (r-1)^{r-1}L_{r-1}(Sr) + \dots + (-1)^{r-1}t^{r-1}L_1(Sr)\} \\ \beta_{Sr} &= r\left\{\sum_{t=1}^r (-1)^{r-1}t^{r-1}L_t(Sr)\right\}\end{aligned}\tag{2.29}$$

gdje $L_t(Sr)$ suma odziva za sve $\binom{r}{t}$ t -te smjese s jednakim udjelima sastavljenih od r komponenti od Sr .

Formule za procjenu parametara iz jednadžbe (2.27) su formule iz jednadžbe (2.29) s prosjecima \bar{y}_i, \bar{y}_{ij} i \bar{y}_{ijk} ... zamijenjene s η_i, η_{ij} i η_{ijk} u jednadžbi (2.29). To je prikazano na slici 6 (a) gdje su očekivani odzivi smješteni u točkama elementarnog modela s težištem s tri komponente. Ako se zamijeni η_i s \bar{y}_i , η_{ij} s \bar{y}_{ij} i η_{123} s \bar{y}_{123} , tada je b_{12} procjena β_{12} zapisana postavljajući $Sr = 12$ i $r = 2$, tako da iz jednadžbe (2.29)

$$\begin{aligned}b_{12} &= 2\{(-1)^{2-1}1^{r-1}L_1(12) + (-1)^{2-2}2^{r-1}L_2(12)\} \\ b_{12} &= 2[-(\bar{y}_1 + \bar{y}_2) + \bar{y}_{12}]\end{aligned}$$

ili

$$b_{12} = 4\bar{y}_{12} - 2(\bar{y}_1 + \bar{y}_2)\tag{2.30}$$

budući je $L_1(12) = \bar{y}_1 + \bar{y}_2$ i $L_2(12) = \bar{y}_{12}$. Formula za jednadžbu (2.30) je identična jednadžbi (2.15) ili jednadžbi (2.16), koje su korištene u prethodnim poglavljima za izračunavanje b_{12} u modelu elementarne rešetke. Jednakost formula u jednadžbama (2.30) i (2.15) znači da sa što više razrađenim elementarnim modelom s težištem, opažanja koja su

sakupljena u težištu elementarnog modela s težištem nisu korištena za procjenu binarnog koeficijenta β_{ij} , niti su korištena za procjenu b_i ili b_j .

Značaj varijance i kovarijance parametara procjenjuje se koristeći jednadžbu (2.29), s y_i i y_{ij} zamjenjujući η_i i η_{ij} , su postignute kako slijedi. Potrebno je uzeti u obzir bilo koja dva neprazna skupa Sr i Sr' po $\{1, 2, \dots, q\}$, od r i r' elemenata, i neka je h broj elemenata koji Sr i Sr' imaju zajedničkih. Na primjer, ako je $Sr' = \{1, 2, \dots, q\}$ i $Sr = \{1, 2, \dots, r\}$, tada je $h = 2$. Sada, ako je $h = 0$, to je, kada procjenjujemo β_{Sr} i $\beta_{Sr'}$ iz jednadžbe (2.29), ako ni jedan od promatranih odziva nije korišten za obadva β_{Sr} i $\beta_{Sr'}$, tada su procijenjeni koeficijenti neovisni.

Ako je $h > 0$, i postavi se $r \leq r'$, tada $Sr = \{1, \dots, r\}$ i $Sr' = \{1, \dots, h, r+1, \dots, r+r-h\}$. Promatrani odzivi koji se pojavljuju kod obadvoje b_{Sr} i $b_{Sr'}$ s y_i , y_{ij} i tako dalje. Zajedničko obadvama procjenama b_{Sr} i $b_{Sr'}$, postoje hy_i za svaki $1 \leq i \leq h$; postoje $\binom{h}{2}y_i$ za svaki $1 \leq i < j \leq h$; ...; postoje $\binom{h}{t}$ odziva $y_{j_1 j_2 \dots j_t}$ za svaki $1 \leq j_1 < \dots < j_t \leq h$, te, koeficijenti tih $y_{j_1 j_2 \dots j_t}$ je iz jednadžbe (2.29), $r(-1)^{r-t}t^{r-1}$ za b_{Sr} i $r'(-1)^{r'-t}t^{r'-1}$ za $b_{Sr'}$. Otuda

$$\begin{aligned} cov(b_{Sr}, b_{Sr'}) &= \sum_{t=1}^h \binom{h}{2} r(-1)^{r-t}t^{r-1} r'(-1)^{r'-t}t^{r'-1} \sigma^2 \\ cov(b_{Sr}, b_{Sr'}) &= rr' \{f(r+r', h)\} \sigma^2 \end{aligned}$$

gdje

$$f(s, h) = (-1)^s \sum_{t=1}^h \binom{h}{2} t^{s-2}$$

Ako je $h = 0$, definirano je $f(s, 0) = 0$ i ako je $r = r' = h$, tada b_{Sr} i $b_{Sr'}$ su jednaki, u kojem slučaju

$$\begin{aligned} var(b_{Sr}) &= \tilde{g}(r)\sigma^2 = r^2 f(2r, r)\sigma^2 = r^2 \sum_{t=1}^r \binom{r}{t} t^{2r-2} \sigma^2 \\ &\quad (2.31) \end{aligned}$$

Neki primjeri za veličinu varijance parametara procjene i kovarijance među parovima procjena u $q = 3$ komponentnom slučaju su

$$b_i: \quad i = 1, 2, 3: cov(b_i, b_j) = \sigma^2 \quad i = j, \quad h = 1, \quad r = r' = h$$

$$b_i: \quad i = 1, 2, 3: cov(b_i, b_j) = 0 \quad i \neq j, \quad h = 0, \quad r = 1, \quad r' = 1$$

$$b_{ij}: \quad i < j: cov(b_i, b_{i'j}) = -2\sigma^2 \quad i = i', \quad h = 1, \quad r = 1, \quad r' = 2$$

$$b_{ij}: \quad i < j: cov(b_i, b_{i'j}) = 0 \quad i \neq i', \quad h = 0, \quad r = 1, \quad r' = 2$$

$$cov(b_{ij}, b_{i'k}) = 4\sigma^2 \quad i = i', \quad j < k, \quad h = 1, \quad r = 2, \quad r' = 2$$

$$cov(b_{ij}, b_{i'k}) = 24\sigma^2 \quad i = i', \quad j = k, \quad h = 2, \quad r = r' = h$$

$$cov(b_{ij}, b_{i'k}) = 0 \quad i \neq i', \quad j \neq k, \quad h = 0, \quad r = 2, \quad r' = 2$$

$$b_{123}: \quad cov(b_i, b_{123}) = 3\sigma^2 \quad h = 1, \quad r = 1, \quad r' = 3$$

$$cov(b_{ij}, b_{123}) = -60\sigma^2 \quad h = 2, \quad r = 2, \quad r' = 3$$

$$cov(b_{123}, b_{123}) = 1188\sigma^2 \quad h = 3, \quad r = r' = h$$

(3.31)

U tablici 6 su prikazane vrijednosti $\tilde{g}(r)$ iz jednadžbe (2.31) do $r = 7$. Može se primijetiti kako se brzo povećava varijanca od b_{Sr} s brojem r -ova u indeksu Sr . Međutim, potrebno je zapamtiti da izraz $x_{i_1}x_{i_2} \dots x_{i_r}$ u modelu koji množi b_{Sr} , brzo se smanjuje s povećanjem r jer je svaki $x_i \leq 1, i = 1, 2, \dots, q$. U stvari, maksimalna vrijednost izraza $x_{i_1}x_{i_2} \dots x_{i_r}$ u elementarnom prostoru iznosi r^{-1} . Dakle, maksimalna vrijednost standardne devijacije izraza $b_{Sr} x_{i_1}x_{i_2} \dots x_{i_r}$ povećava se kao $r^{-1}[\tilde{g}(r)]^{1/2}$, što je vidljivo iz tablice 6.

Tablica 6 Standardna greška $[\tilde{g}(r)]^{1/2}$ regresijskih koeficijenata procjene elementarnog modela s težištem, $\sigma^2 = 1$

r	$\tilde{g}(r)$	$[\tilde{g}(r)]^{1/2}$	$r^{-1}[\tilde{g}(r)]^{1/2}$
1	1	1,00	1,00
2	24	4,90	1,23
3	1188	34,47	1,28
4	$1,184 \times 10^5$	344,09	1,34
5	$1,966 \times 10^7$	4434,19	1,42
6	$4,895 \times 10^9$	69967,54	1,50
7	$1,706 \times 10^{12}$	1306062,79	1,59

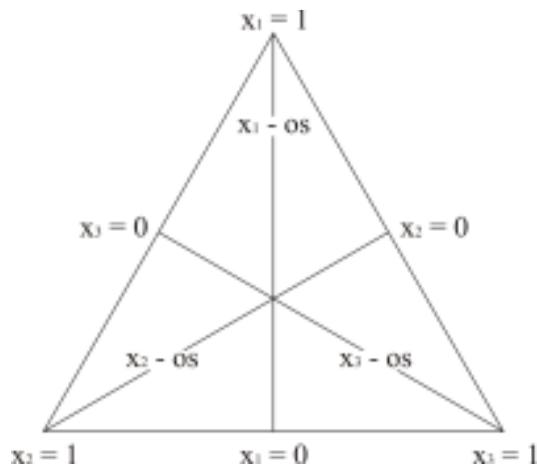
2.4. OSNI MODEL⁹

$\{q, m\}$ model elementarne rešetke i q -komponentni elementarni model s težištem su granični modeli u kojima, s iznimkom cijelokupnog središnjeg, točke tih modela su smještene na granice (vrhove, rubove, prednje strane, itd.) elementarnog prostora. Osni modeli s druge strane, su napravljeni tako da se većinom sastoje od cijele smijese ili q komponentnih mješavina gdje je većina točaka smještena unutar elementarnog prostora. Osni model se preporuča za korištenje kada su efekti komponenata moraju mjeriti i biti prikazani, naročito kada je potrebno postaviti model prvog stupnja. Definicija koja opisuje osni model.

DEFINICIJA

Os komponente i je imaginarna linija koja se proteže od bazne točke $x_i = 0, x_j = \frac{1}{(q-1)}$ za sve $j \neq i$, do vrha gdje je $x_i = 1, x_j = 0$ za sve $j \neq i$.

Bazna točka je središte $(q - 2)$ -dimenzionalne granice (ponekad se naziva $(q - 2)$ -dimenzionalna ravnina) koja se nalazi nasuprot vrhu $x_i = 1, x_j = 0$ za sve $j \neq i$. Duljinu osi predstavlja najkraća udaljenost od nasuprotne $(q - 2)$ -dimenzionalne granice do vrha. Ta udaljenost je definirana kao jedna jedinica vrijednosti x_i -jeva. Slika 7 predstavlja osi za komponente 1, 2 i 3 u trokutu s tri komponente.

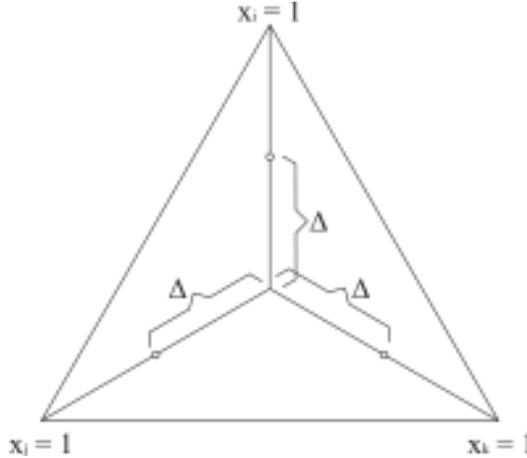


Slika 7 x_i osi, $i = 1, 2$ i 3

Točke osnog modela su pozicionirane samo na osima komponenata. (s tri komponente, oba $\{3,2\}$ model elementarne rešetke i elementarni model s težištem su vanjski ekstremi točaka osnog modela). Najjednostavniji oblik osnog modela je onaj čije točke su smještene ravnostrano od težišta $\left(\frac{1}{q}, \frac{1}{q}, \dots, \frac{1}{q}\right)$ prema svakom od vrhova. Udaljenost od težišta, ako se

⁹ Eng. axial model

mjeri u jedinicama vrijednosti x_i -jeva, se označava s Δ i minimalna vrijednost Δ iznosi $\frac{(q-1)}{q}$. Takav model je prvi predložio Cornell (1975). Model s tri prikazan je na slici 8.



Slika 8 Osni model s tri komponente gdje udaljenost od centra elementarnog prostora do točaka iznosi Δ

Matrični oblik modela prvog stupnja $\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i$ kao $\eta = \mathbf{x}'\boldsymbol{\beta}$ gdje je $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_q)'$. S osnim modelom za oblik prikazan na slici 8 ako je sakupljeno r promatranja u svakoj točci, oblik matrice varijance-kovarijance vektora $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \dots, b_q)'$ procjena parametara modela je

$$\text{var}(\mathbf{b}) = \{d\mathbf{I} + e\mathbf{J}\}\sigma^2 \quad (2.32)$$

gdje je

$$d = \frac{(q-1)^2}{r\Delta^2 q^2}, \quad e = \frac{\Delta^2 q^2 - (q-1)^2}{r\Delta^2 q^3} \quad (2.33)$$

\mathbf{I} je identitet matrice reda q i \mathbf{J} je $q \times q$ jedinična matrica. Dana forma matrice $\text{var}(\mathbf{b})$ iz jednadžbe (2.32), varijanca svakog parametra procjene b_i glasi

$$\text{var}(b_i) = (d + e)\sigma^2 = \left\{ \frac{(q-1)^3 + \Delta^2 q^2}{r\Delta^2 q^3} \right\} \sigma^2 \quad (2.34)$$

i kovarijanca između parova procjena b_i i b_j je $\text{cov}(b_i, b_j) = e\sigma^2$. Sada, sto je veća vrijednost Δ , manja je vrijednost $\text{var}(b_i)$ i $\text{cov}(b_i, b_j)$. U stvari, ako su točke smještene u vrhovima, tada je $\Delta = \frac{(q-1)}{q}$, $\text{cov}(b_i, b_j) = 0$ i

$$var(b_i) = \left\{ \frac{(q-1)^3 + (q-1)^2}{r(q-1)^2 q} \right\} \sigma^2 = \frac{\sigma^2}{r}$$

Ako su točke smještene na pola puta između težišta elementarnog modela i svakog od vrhova tako da $\Delta = \frac{(q-1)}{2q}$, tada $cov(b_i, b_j) = \frac{-3\sigma^2}{rq}$, i

$$var(b_i) = \frac{(4q-3)}{rq} \sigma^2$$

U tablici 7, vrijednosti $\frac{var(b_i)r}{\sigma^2}$ i $\frac{cov(b_i, b_j)r}{\sigma^2}$ su prikazane za rastuće vrijednosti Δ za $q = 3, 4, 5, 6$ i 7 . Inkrementalne vrijednosti $\Delta = \frac{a}{q}$ u rasponu od $a = 1$ do $a = q - 2$. S većim vrijednostima q ili većim brojem komponenti, brže se smanjuju vrijednosti $var(b_i)$ i $cov(b_i, b_j)$ za povećavajuću vrijednost Δ . To znači da kada je odgovarajući model prvog stupnja odabran za osni model, što je veći broj komponenata, to model mora biti više raširen kako bi se povećala preciznost parametara procjene i smanjila korelacija između procjena. Ovdje se preciznost odnosi na recipročnu vrijednost varijance i korelacije između parova procjena je direktno povezana s kovarijancom između parova [3].

Tablica 7 Varijance i kovarijance parametara procjene povezane s jednostavnim osnim modelom, $\Delta = a/q$

Broj komponenata $q=$	3	4	4	5	5	5	6	6	6	6	7	7	7	7	7
Veličina $\Delta=a/q$ gdje je $a=$	1	1	2	1	2	3	1	2	3	4	1	2	3	4	5
$var(b_i)r/\sigma^2$	3	7	$31/16$	13	$17/5$	$73/45$	21	$43/8$	$67/27$	$47/32$	31	$55/7$	$25/7$	$58/28$	$241/175$
$cov(b_i, b_j)r/\sigma^2$	-1	-2	$-5/16$	-3	$-3/5$	$-7/45$	-4	$-7/8$	$-8/27$	$-3/32$	-5	$-8/7$	$-3/7$	$-5/28$	$-11/175$

3. PRISTUPI OPTIMIRANJU SMJESA

Optimizacija je u inženjerskom smislu postupak 'maksimiziranja' ili 'minimiziranja' nekog cilja (ili ciljeva) u okvirima raspoloživih resursa, odnosno uz zadovoljavanje ograničenja koja objektivno postoje.

Proces inženjerskog optimiranja podrazumijeva sustavno traženje optimalnog rješenja zadanog inženjerskog problema s obzirom na definirane kriterije optimalnosti, a u uvjetima zadovoljavanja zadanih ograničenja. Pretpostavka je pri tome, naravno, da problem ima dovoljan 'višak' internih stupnjeva slobode (onih o kojima može odlučiti projektant jer nisu determinirani fizikalnim zakonitostima problema) koji postaju varijablama postupka optimizacije.

Za razliku od klasičnih primjena numeričkih postupaka u analizi, kod optimizacije je riječ o sintezi koja u svakoj iteraciji uključuje nužnost provedbe analize (simulacije odziva) promatranog sustava. Kod numeričke optimizacije, sinteza se naravno ne radi iskušavanjem svih mogućih rješenja niti na bazi iskustva, nego su razvijeni postupci koji nova rješenja generiraju sustavno i učinkovito sa ciljem da se do optimalnog rješenja dođe uz što manji utrošak računalnih resursa. Kako je svaka sinteza vrlo kompleksna i numerički zahtjevna, a razmatrani fizikalni modeli često vrlo složeni, proces optimiranja je numerički vrlo intenzivan.

Globalizacija te posljedični porast kompetitivnosti na sve aktivnosti postavlja vrlo stroge dugoročne i kratkoročne uvjete za opstanak u smislu nužne izvrsnosti proizvoda, usluga i procesa, koja se postiže optimizacijom u najširem značenju tog termina. Iskustvena ili intuitivna optimizacija, te naslanjanje isključivo na postojeće 'najbolje prakse' danas više nije dovoljno, jer ne osigurava dovoljnu 'kompetitivnu prednost', a time ni profitabilnost odnosno opstanak.

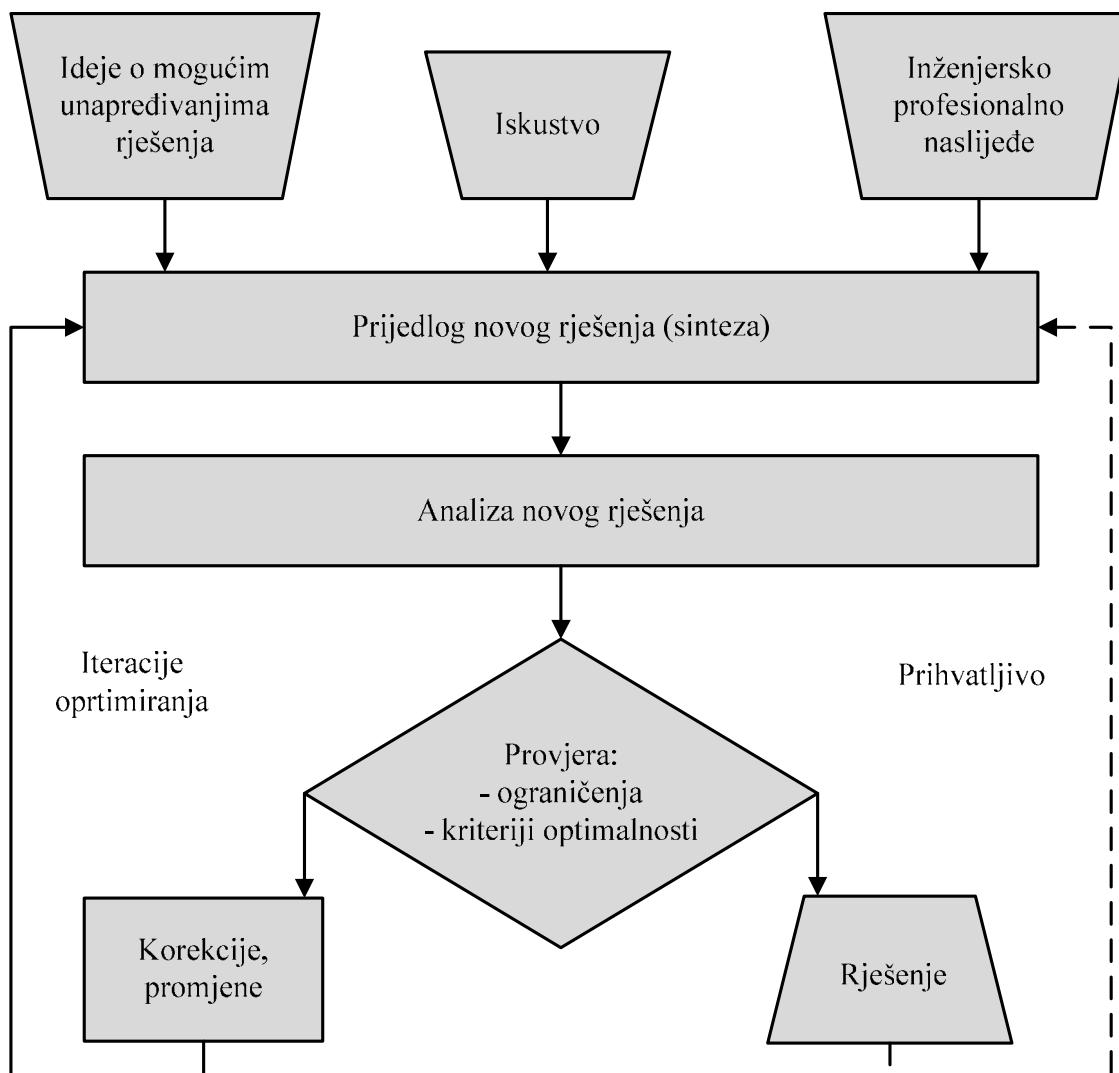
Procesi i postupci optimizacije imaju stoga sve veću važnost i sve širi prostor primjene. Današnja logika kod razvoja proizvoda, usluga i procesa više nije odrediti neko odgovarajuće rješenje koje zadovoljava sve uvjete. U današnje vrijeme potrebno je odrediti rješenje koje zadovoljava sve uvjete te istovremeno minimizira utrošak svih resursa, odnosno maksimira postavljene ciljeve (kriterije izvrsnosti rješenja).

U tom smislu je proces optimizacije znatno širi od skupine metoda ili numeričkih alata. Riječ je u stvari o novom pristupu u inženjerskoj sintezi odnosno razvoju proizvoda ili procesa na bazi koncepta 'optimalnosti'. Optimizacija se stoga istovremeno može shvatiti i kao način postavljanja inženjerskog zadatka, ali i kao specijalizirani alat odnosno način potpore odlučivanju ('decision support') u najširem smislu.

Prikaz klasičnog procesa optimiranja prikazan je na slici 9, pri čemu uvođenje numeričkih postupaka optimizacije znatno ubrzava slijed:

- generiranje i prijedlog rješenja
- analiza rješenja
- provjera kriterija optimalnosti i ograničenja
- korekcije

dok se iskustvo i profesionalno naslijede naravno i dalje koriste za definiranje 'početnih rješenja' [5].

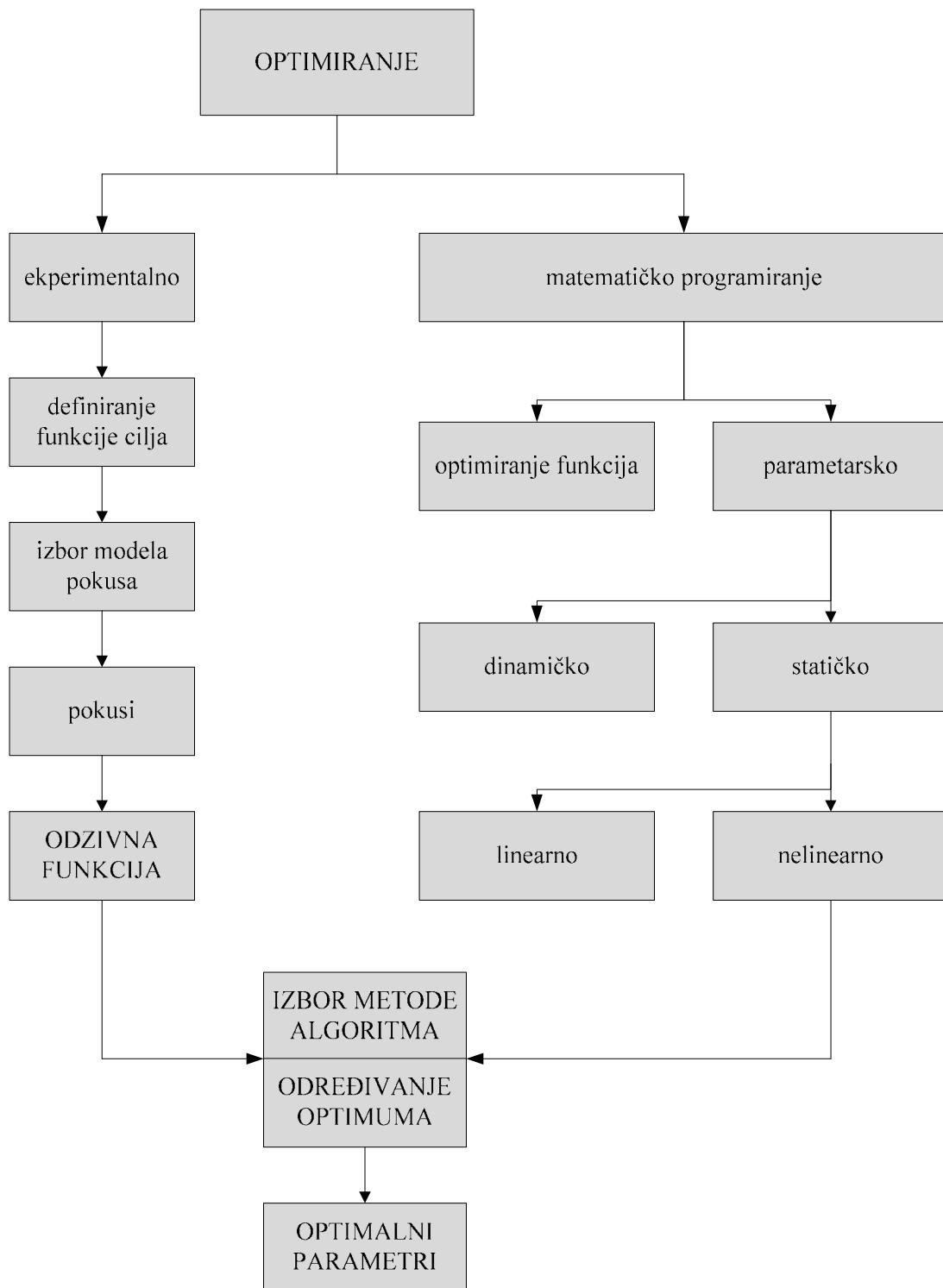


Slika 9 Načelni proces optimiranja

Na slici 10 dana je jedna od mogućnosti raščlanjivanja pojma optimiranja. Prema njoj optimiranje se dijeli na

- 1) Eksperimentalno
- 2) Matematičko programiranje

Ta podjela je zasnovana na činjenici da kod eksperimentalnog optimiranja funkcija cilja nije unaprijed poznata, već se do nje dolazi planiranjem i izvođenjem pokusa. Kod matematičkog programiranja funkcija cilja je unaprijed poznata, te ju je potrebno samo ispravno matematički modelirati koristeći jednu od metoda matematičkog programiranja. U strojarstvu se najčešće koristi linearno, nelinearno i dinamičko programiranje.



Slika 10 Grafički prikaz vrsta optimiranja [6]

Namješavanje smjese goriva je jedan od primjera gdje je funkcija cilja unaprijed poznata, te se optimiranje vrši linearnim ili nelinearnim matematičkim programiranjem.

Pokusi sa smjesama, koji su glavni predmet ovog rada, spadaju u eksperimentalno programiranje jer funkcija cilja nije unaprijed poznata, već ju je potrebno utvrditi planiranjem i provođenjem eksperimenata.

U današnje vrijeme postoji mnogo razvijenih programa za računalno optimiranje kako za obradu eksperimentalno dobivenih podataka, tako i za matematičko programiranje. Tako je za optimiranje matematičkim programiranjem razvijena platforma za MS Excel koja ima unutar sebe implementirane algoritme temeljene na različitim metodama kao Branch & Bound. Za eksperimentalno programiranje jedan od vodećih programskih paketa je Design-Expert. On će biti pobliže objašnjen u poglavlju 4. jer je upravo taj programski paket korišten za planiranje i optimiranje problema.

U nastavku rada biti će dan kratak uvid u problematiku nekoliko osnovnih vrsta matematičkog programiranja, te će detaljnije biti razrađena problematika eksperimentalnog optimiranja.

3.1. MATEMATIČKO PROGRAMIRANJE

3.1.1. LINEARNO PROGRAMIRANJE

Osnovne značajke Linearnog programiranja jesu:

- a) Linearost veza među varijablama – metodama i postupcima Linearnog programiranja moguće je riješiti takve probleme kod kojih se funkcija cilja može izraziti linearom kombinacijom varijabli, a skup ograničenja zadaje se sistemom linearnih jednadžbi i nejednadžbi;
- b) Definiranost cilja – važna značajka ovoga pristupa jest da se pri rješavanju problema Linearnog programiranja trebaju prije toga jasno definirati cilj i kriterij optimalnosti a zatim se mora i matematički definirati;
- c) Postoje više mogućih rješenja – svaki problem koji ima samo jedno rješenje nema smisla rješavati modelima Linearnog programiranja;
- d) D ograničenja – na varijable koje se pojavljuju u modelima postavljaju se ograničenja u obliku limitirajućih faktora kao: materijala, vremena, itd.

Rješavanje problema iz proizvodne prakse primjenom Linearnog programiranja, a i metoda optimiranja općenito, potrebno je voditi po fazama, što omogućava pravodobne korekcije. Faze su rada sljedeće:

- 1) Izbor i pravilno definiranje problema znatno olakšava kasniji rad, omogućuje upoznavanje svih aspekata problema, kao i odgovor na pitanje je li problem po svojim karakteristikama takav da se može rješavati poznatim metodama optimiranja.
- 2) Izbor odgovarajuće metode bit će olakšan ako je problem točno definiran. Katkada se dogodi da su poznate metode i algoritmi neadekvatni, pa se mora posegnuti za razvojem nove ili dopunom postojeće metode.
- 3) Sadašnje stanje utvrđuje se prikupljanjem brojnih podataka o sadašnjemu stanju uočenog problema, nakon čega se pristupa analizi uopćenoga stanja radi utvrđivanja svih utjecajnih čimbenika i ograničenja. Posebno su važne točnost i preciznost podataka. Obrada loših podataka nužno vodi lošem rezultatu.
- 4) Stvaranje modela i postavljanje hipoteze provodi se uobičavanjem problema u obliku matematičkog modela. Rasprava o mogućem odstupanju od linearosti nužna je u ovoj fazi može spriječiti grube pogreške.
- 5) Rješavanje problema uporabom elektroničkog računala jest nužnost, budući da su realni problemi često takvi da sadrže velik broj ograničenja i varijabli. Danas postoje gotovi programski paketi za metode optimiranja.
- 6) Postoptimalna analiza jedan je od završnih koraka u radu, ali za inženjere proizvodnoga smjera zapravo je početak rada na oticanju uočenih nedostataka. Često se, naime, tek rješavanjem nekoga problema primjenom Linearnog programiranja (ili neke druge metode optimiranja) saznačaju uska grla proizvodnog procesa. Prijedlog rješenja sa svim potrebnim uputama može se izraditi tek nakon ove faze.

- 7) Uz realizaciju predloženog rješenja, nužno je redovito pratiti efekte, te ih uspoređivati sa očekivanjima.
- 8) Korekcija i dopuna prijedloga sastavlja se nakon što se predloženo rješenje počne primjenjivati. Korekcije se mogu odnositi na: definiciju problema, model, itd.

Opći model linearнog programiranja

U svojem općem obliku svaki se problem Linearnog programiranja može izraziti na sljedeći način. Potrebno je odrediti vrijednost varijabli x_j , ($j = 1, 2, \dots, n$) za koje će funkcija cilja:

$$F(X) = \sum_{j=1}^n c_j \cdot x_j \quad (3.35)$$

poprimiti ekstremnu vrijednost (maksimum ili minimum), ali tako da budu zadovoljeni postavljeni uvjeti (ograničenja):

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot x_j \leq b_i \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

Pri tome su:

$$x_j \geq 0, \quad (j = 1, 2, \dots, n)$$

c_j - poznati koeficijenti uz varijable x_j u funkciji cilja

a_{ij} - poznati koeficijenti uz varijable x_j u ograničenjima

b_j - poznati koeficijenti ograničenja

Razvijeni standardni oblik problema Linearnog programiranja za slučaj traženja maksimalne vrijednosti funkcije cilja sastoji se u određivanju vrijednosti varijable x_j , ($j = 1, 2, \dots, n$) koje će dati maksimalne vrijednosti funkcije cilja:

$$F(X) = c_1 \cdot x_1 + c_2 \cdot x_2 + \dots + c_n \cdot x_n \rightarrow max. \quad (3.36)$$

pod uvjetom da je $x_j \geq 0, \quad j = 1, 2, \dots, n$

i uz uvjete:

$$a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + \dots + a_{1n} \cdot x_n \leq b_1$$

$$a_{21} \cdot x_1 + a_{22} \cdot x_2 + \dots + a_{2n} \cdot x_n \leq b_2$$

.....

$$a_{m1} \cdot x_1 + a_{m2} \cdot x_2 + \dots + a_{mn} \cdot x_n \leq b_m$$

Matrična interpretacija standardnog modela Linearnog programiranja za slučaj traženja maksimalne vrijednosti funkcije cilja glasi: Potrebno je odrediti nenegativne vrijednosti komponenti vektora $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ koji će dati maksimalnu vrijednost funkcije cilja:

$$F(X) = C' \cdot X \quad (3.37)$$

a da bi pri tome bila zadovoljena ograničenja:

$$\begin{aligned} A \cdot X &\leq B, \\ X &\geq 0. \end{aligned}$$

Pri tome su:

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} & - \text{matrica poznatih koeficijenata reda } (m, n), \\ C' &= [c_1 \ c_2 \ \dots \ c_n] & - \text{vektor-redak, transponat od } C, \text{ koeficijenti funkcije cilja} \\ B &= \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdots \\ b_m \end{bmatrix} & - \text{vektor slobodnih članova koji označuju ograničenja, m – komponenti vektor} \\ X &= \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_n \end{bmatrix} & - \text{Vektor nepoznatih vrijednosti varijable } X, n – \text{komponenti vektor.} \end{aligned}$$

Načini rješavanja Linearnog programiranja

Problemi se linearog programiranja mogu rješavati grafički, metodom elementarnog prostora¹⁰ i analitički. Najznačajniji od ovih postupaka jest metoda elementarnog prostora koja je u biti opći oblik za rješavanje svih problema linearog programiranja. Uočeno je da se neke klase problema linearog programiranja mogu lakše rješavati alternativnim postupcima (kod transportnih problema). Od posebnog je značenja grafički postupak rješavanja problema linearog programiranja jer se takvim postupkom vrlo dobro ocjenjuju sve bitne značajke linearog programiranja. Grafički je postupak primjenjiv na probleme koji sadrže do uključujući tri varijable, nakon čega grafička interpretacija više nije moguća, pa preostaje vektorski prostor (n – dimenzionalni, ako je riječ o problemu sa n varijabli) u okjem se primjenom linearne algebre može zamisliti svaki problem linearog programiranja [6].

¹⁰ Simplex-metoda

3.1.2. NELINEARNO PROGRAMIRANJE

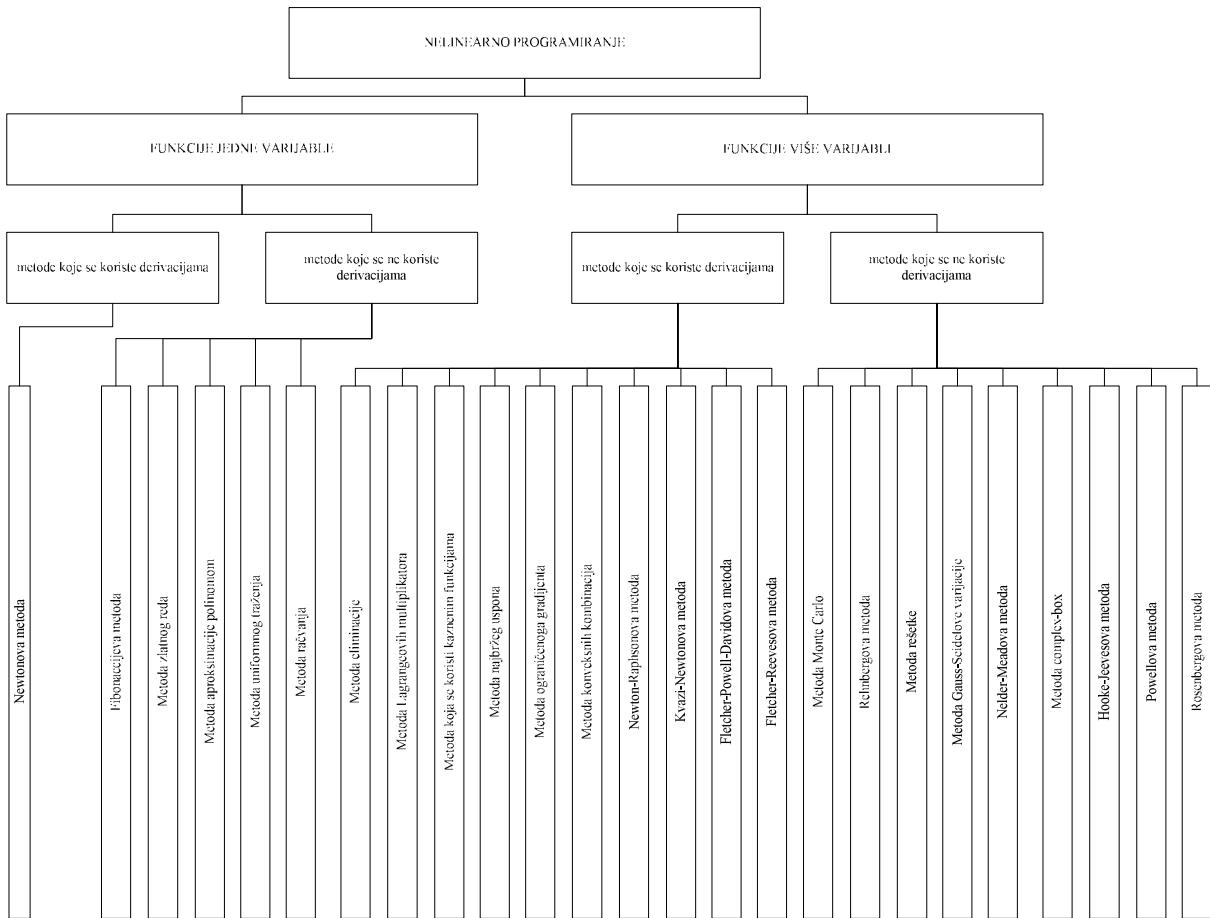
Nelinearno se programiranje bavi optimiziranjem nelinearnih (linearnih) funkcija s linearnim ili nelinearnim ograničenjima.

Razni problemi u tehnici, ekonomiji i na drugim područjima imaju veći broj mogućih rješenja. Svrha je optimiranja pronaći najbolje moguće rješenje za dani problem između većeg broja potencijalnih rješenja sa stajališta ili korisnosti ili izvođenja. Optimiranje može biti potpuno izvedeno određenim strategijama koje se kreću od numeričkih i matematičkih algoritama pa sve do jednostavne aritmetike.

Općenito, metode optimiranja mogu se podijeliti na sljedeći način:

1. *Analitičke metode* – koriste se klasičnim tehnikama diferencijalnog i varijacijskog računa. Te metode traže ekstrem funkcije $f(x)$, nalazeći vrijednost za X tako da derivacija funkcije $f(x)$ bude nula. Za primjenu analitičkih metoda, problem čiji se optimum traži mora biti opisan matematičkim članovima, tako da bi se funkcijama i varijablama moglo pristupati prema poznatim pravilima i zakonima. Za mnoge komplikirane nelinearne probleme pokazalo se da analitičke metode ne zadovoljavaju.
2. *Numeričke metode* – koriste se informacijama iz prethodnog koraka za dobivanje boljih rješenja u sljedećem koraku postupka iteracije. Ove se metode rabe i za rješavanje onih problema u kojima analitičke metode ne pomažu. Pokazalo se također da su numeričke metode lako prilagodljive kod praktičnih problema.
3. *Grafičke metode* – imaju zadaću crtati funkcije jedne ili više varijabli kod kojih se traži minimum ili maksimum. Ekstrem funkcije može se izravno vidjeti iz grafa nacrtane funkcije. Te metode pokazuju svoju moć kod jedne, najviše dviju nezavisnih varijabli.
4. *Eksperimentalne metode* – Ekstrem funkcija može se prije dobiti pri eksperimentalnom radu na nekom problemu negoli uporabom matematičkog opisa procesa. Rezultati jednog eksperimenta rabe se za donošenje odluke gdje treba locirati sljedeći eksperiment kako bi se poboljšali rezultati prethodnog eksperimenta.

Slika 11 prikazuje podjelu nelinearnog programiranja.



Slika 11 Podjela nelinearnog programiranja

Definiranje problema i formiranje matematičkog modela problema nelinearnoga programiranja

Opći oblik matematičkog modela problema nelinearnoga programiranja (NP) može se formulirati na sljedeći način:

Odrediti maksimum ili minimum funkcije cilja:

$$F(x) = F(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_n) \quad (3.38)$$

pod uvjetima definiranim sistemima jednadžbi i (ili) nejednadžbi:

$$g_i(x) = g_i(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_n) \leq 0 \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Funkcije $F(x)$ i $g_i(x)$ mogu imati proizvoljan oblik, dok su uvjeti nenegativnosti varijabli obuhvaćeni u ograničenjima.

U općemu slučaju rješavanje se problema definira kao zadatak pronalaženja vrijednosti n – dimenzionalnog vektora, odnosno točke X u n – dimenzionalnom Euklidovu prostoru.

Cilj je rješavanja problema da se na ovako definiranu skupu mogućih rješenja odredi u prostoru točka X , za koju funkcija cilja poprimi ekstremnu vrijednost. Ova se točka naziva točkom optimuma ili rješenjem problema nelinearnog programiranja, pod uvjetom da ta točka zadovoljava unaprijed definirana ograničenja problema [6].

3.1.3. DINAMIČKO PROGRAMIRANJE

Definiranje problema dinamičkog programiranja

Dinamičko programiranje (DP) je jedna od metoda operacijskih istraživanja. Dinamičko programiranje je skup modela i metoda pomoću kojih se utvrđuje optimalna strategija odlučivanja u slučajevima donošenja međusobno povezanih odluka višefaznih procesa.

Metodama dinamičkog programiranja rješavaju se višefazni procesi, tj. procesi u kojima se donosi niz međusobno ovisnih odluka za pojedine godine određenog razdoblja ili za pojedine aktivnosti zadanog problema.

Dinamičko programiranje poznato je i pod nazivom metoda donošenja višefaznih, odnosno višestupnjevanih odluka.

Pri rješavanju problema dinamičkog programiranja treba se pridržavati načela optimalnosti koje se sastoje od određenih pravila:

- 1) Optimalno upravljanje u cijelom intervalu mora biti optimalno i u pojedinim fazama.
- 2) Optimalna politika ima svojstvo da, bez obzira kakvo je početno stanje i prva odluka, daljnje odluke moraju činiti optimalnu politiku s obzirom na stanje koje rezultira iz prve odluke.

Matematički model problema dinamičkog programiranja

Da bi se postavio matematički model dinamičkog programiranja potrebno je uvesti odgovarajuće oznake:

- $i = 1, \dots, N$ – broj aktivnosti (faza, vremenskih jedinica)
- x = vrijednost varijable, odnosno količina izvora (sredstava) izražena u naturalnim ili vrijednosnim jedinicama; vrijednosti x su nenegativne i cjelobrojne
- $()$ = oznaka za redni broj aktivnosti (faze)
primjerice: $x(i)$ – vrijednost varijable x u i -toj aktivnosti; $i = 1, \dots, N$
- $[]$ = oznaka za funkciju ovisnost između varijabli

primjerice $y [x(i)]$ označava da je y funkcija varijable x koja je raspoređena na i -tu aktivnost; $i = 1, \dots, N$

- $\{ \}$ = oznaka za izraz za koji se traži minimalna ili maksimalna vrijednost

npr.: $\max \{y [x(i)]\}$ označava da je potrebno naći maksimum funkcije y koja je funkcija varijable x raspoređena na i -tu aktivnost; $i = 1, \dots, N$

- $g(i) [x(i)]$ = prihod (ili trošak) i -te aktivnosti koji se postiže ulaganjem količine x u i -tu aktivnost
npr.: $g(3) [2] = 10$ prihod u 3. aktivnosti ostvaren ulaganjem 2 jedinice u 3. aktivnost iznosi 10 novčanih jedinica
- $Q = \text{ukupna količina izvora (sredstava) koja se raspoređuje na ukupno } N \text{ aktivnosti}$

$$Q = x(1) + x(2) + \dots + x(N); \quad x(i) \geq 0; \quad i = 1, \dots, N$$
- $R = \text{ukupan prihod (ili trošak) koji predstavlja sumu prihoda (troškova) iz pojedinih aktivnosti}$

$$R = g(1) [x(1)] + g(2) [x(2)] + \dots + g(N) [x(N)]$$

- $f(N)[Q]$ = maksimalni ukupni prihod (ili minimalni ukupni trošak) iz ukupno N aktivnosti dobiven ulaganjem količine izvora (sredstava) Q

$$f(N)[Q] = \max_{x(i)} \{ R[x(1), x(2), \dots, x(N)] \}$$

npr.: $f(N)[0] = 0$ – maksimalni prihod koji se dobiva raspoređivanjem 0 količina na N aktivnosti je 0.

Na temelju mrežnog dijagrama zaključuje se da će ukupan iznos prihoda (ili troškova) u procesu s N aktivnosti biti:

$$g(N)[x(N)] + f(N-1)[Q - x(N)]$$

Budući da se traži optimalno rješenje, mora biti zadan kriterij optimizacije, zato prethodni izraz treba maksimizirati ili minimizirati ovisno traži li se minimum ili maksimum funkcije kriterija. Dobiva se tzv. funkcionska jednadžba¹¹ koja glasi:

$$f(N)[Q] = \max_{0 \leq x(N) \leq Q} \{ g(N)[x(N)] + f(N-1)[Q - x(N)] \} \quad (3.38)$$

Za $N = 1$ izraz (1) se pojednostavljuje i glasi:

$$f(1)[Q] = g(1)[x(1)]$$

odnosno

$$f(1)[Q] = g(1)[Q].$$

Matematički model dinamičkog programiranja sastoji se (kao i svi modeli u operacijskim istraživanjima) od funkcije kriterija i ograničenja.

¹¹ Dobrenić, S.: Operativno istraživanje, Fakultet organizacije i informatike, Varaždin 1978, str.

Matematički model za problem jednostavne raspodjele

$$MaxZ(\text{Min}Z) = \max(\min_{0 \leq x(N) \leq Q}) \{ g(N)[x(N)] + f(N-1)[Q - x(N)] \} \quad (3.39)$$

uz ograničenja:

$$(1) \quad Q = x(1) + x(2) + \dots + x(N) \quad \text{ili} \quad Q = \sum_{i=1}^N x_i, \quad i = 1, \dots, N$$

$$(2) \quad x(i) \geq 0, \quad i = 1, \dots, N$$

U prvu grupu ograničenja ulaze još jednadžbe i nejednadžbe ovisno o sadržaju zadanog problema. Npr.: ako količina uložena u prvu aktivnost ne može biti veća od 5 onda se to piše u obliku nejednadžbe: $0 \leq x(1) \leq 5$.

Druga grupa ograničenja odnosi se na uvjet nenegativnosti: vrijednosti x ne mogu po svom sadržaju biti negativne vrijednosti.

Ako se radi o tzv. složenom problemu raspodjele, tada

$$Q \neq \sum_{i=1}^N x(i), \quad \text{već} \quad Q = \sum_{i=1}^N a(i)[x(i)]$$

gdje su $a(i)$ normativi utroška izvora za i -tu aktivnost.

Vrijednost $a(i)$ je koeficijent ili količina izvora koja se "potroši" za i -tu aktivnost; primjerice: ako je $a(1) = 2$, to znači da se za I. aktivnost utroše dvije jedinice od ukupne količine izvora Q .

Matematički model za problem složene raspodjele

$$MaxZ(\text{Min}Z) = \max(\min_{0 \leq x(N) \leq \frac{Q}{a(i)}}) \{ g(N)[x(N)] + f(N-1)[Q - a(N)x(N)] \} \quad (3.40)$$

uz ograničenja:

$$(1) \quad Q = a(1)[x(1)] + a(2)[x(2)] + \dots + a(N)[x(N)]$$

$$(2) \quad x(i) \geq 0, \quad i = 1, \dots, N$$

Postupak rješavanja problema dinamičkog programiranja

Problem dinamičkog programiranja rješava se na sljedeći način:

1. definiranje problema, postavljanje matematičkog modela i definiranje funkcije prihoda odnosno troškova,
2. izvođenje funkcijске jednadžbe za funkciju prihoda odnosno troškova. Najprije se izračunavaju odgovarajuće vrijednosti prihoda (troškova) za I. fazu da bi se prešlo na sljedeće faze.
3. korištenje funkcijске jednadžbe pomoću koje se određuje optimalna politika (strategija) za sve faze (uzimajući u obzir rezultate prethodne faze) [7].

3.2. EKSPERIMENTALNO OPTIMIRANJE

3.2.1. PLANIRANJE POKUSA SA SMJESAMA

Kod planiranja pokusa ove vrste, pretpostavka je da promatrano svojstvo smjese ovisi o sastavu, točnije o udjelima pojedinih sastojaka u smjesi, a ne o ukupnoj količini smjese.

Sastojci se miješaju u smjesu kako bi se utvrdilo postoje li smjese koje imaju bolja promatrana svojstva od pojedinačnih sastojaka. To znači da će se promjenom udjela pojedinog sastojka mijenjati i vrijednost izabranog svojstva smjese.

Sa stajališta eksperimentiranja, proučavanje funkcionalne ovisnosti mjereneog svojstva o podesivim varijablama (udjeli sastojaka) posljedica je potrebe da se pronađe takva kombinacija udjela sastojaka pri kakvoj će se postići najpovoljnija, maksimalna ili minimalna vrijednost promatranog svojstva. Poglavlje 2. Smjese (mješavine) služilo je da se upoznaju osnovne karakteristike smjesa.

KORACI PLANIRANJA POKUSA

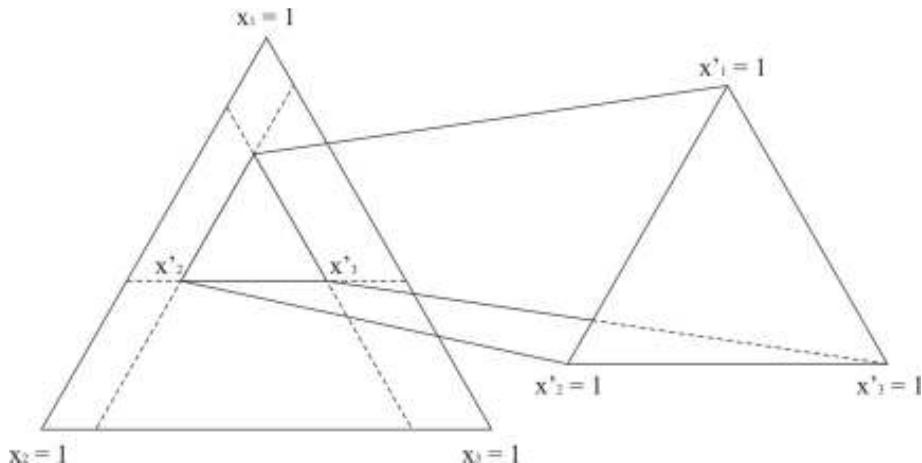
- 1) *Ovisno o broju sastojaka smjese q , određuje se $(q - 1)$ -dimenzionalna elementarna rešetka za plan pokusa.*

Ako se radi o čistoj smjesi elementarna rešetka je točka. Čine li smjesu dva sastojka elementarna rešetka je jednodimenzionska, a predstavlja ju dužina. Ukoliko se smjesa sastoji od tri sastojka elementarna rešetka je dvodimenzionska i predstavljena je trokutom. Smjesa za koju se elementarna rešetka još uvijek može predočiti u prostoru je smjesa s četiri sastojka, a predstavlja je istostraničnom trostranom piramidom. Za smjese s pet ili više sastojaka elementarna rešetka ima više od tri dimenzije i ne može se nacrtati ili ikako prikazati u prostoru [4].

- 2) *Vrlo često u praksi analiziranje cijele elementarne rešetke nema ekonomsku opravdanost ili jednostavno nije moguće analiziranje cijele rešetke, te se zato uvode ograničenja na omjere sastojaka smjese.*

Moguće je ograničiti maksimalni i minimalni udio svakog sastojka u smjesi. Ako se, npr. u $\{3,m\}$ rešetci ograniče minimalni udjeli svakog od 3 sastojka unutar elementarne rešetke, dobit će se manji trokut koji predstavlja područje interesa. Za taj trokut se može pretpostaviti da je puna elementarna rešetka i naziva se pseudoelementarna¹² rešetka. Na slici 12 je prikazana pseudoelementarna rešetka za $\{3,m\}$ elementarnu rešetku u kojoj su ograničeni minimalni udjeli svakog od 3 sastojka unutar elementarne rešetke [4].

¹² Eng. pseudosimplex



Slika 12 Prikaz pseudoelementarne rešetke [3]

Pri prijelazu iz izvorne u pseudoelementarnu rešetku mijenjaju se vrijednosti udjela sastojaka pa je potrebno na osnovi stvarnih komponenata i zadanih ograničenja izračunati preudokomponente. To se izračunava prema izrazu:

$$x'_i = \frac{x_i - a_i}{1 - L_d}$$

pri čemu je:

- a_i – donja granica udjela za komponentu x_i
- L_d – zbroj donjih granica udjela za sve komponente

- 3) *Da bi se odredio broj i položaj točaka u pseudoelementarnoj rešetci potrebno je odrediti model rešetke (Model elementarne rešetke, Elementarni model s težište ili Osni model).*

Kada se odredi model pseudoelementarne rešetke potrebno je odrediti i stupanj polinoma koji najbolje opisuje odzivnu površinu kako bi se dobila odgovarajuće regresijska jednadžba na temelju koje se dobije uvid u cijelu površinu pseudoelementarne rešetke.

Naziv polinoma	polinom	Simpleks rešetka
linearni	$\eta = \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_3x_3$	
kvadratni	$\eta = \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_3x_3 + \beta_{12}x_1x_2 + \beta_{13}x_1x_3 + \beta_{23}x_2x_3$	
posebni kubni	$\eta = \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_3x_3 + \beta_{12}x_1x_2 + \beta_{13}x_1x_3 + \beta_{23}x_2x_3 + \gamma_{12}x_1x_2(x_1 - x_2) + \gamma_{13}x_1x_3(x_1 - x_3) + \gamma_{23}x_2x_3(x_2 - x_3) + \beta_{123}x_1x_2x_3$	
puni kubni	$\eta = \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_3x_3 + \beta_{12}x_1x_2 + \beta_{13}x_1x_3 + \beta_{23}x_2x_3 + \beta_{123}x_1x_2x_3$	

Slika 13 Osnovni oblici {3,m} polinoma i pripadajuće elementarne rešetke [4]

- 4) Nakon što se odrede točke potrebne za ispitivanje vrše se mjerena i unose se dobiveni podaci.

Kada se rade ispitivanja uzoraka uputno je napraviti minimalno tri mjerena za svaku odzivnu veličinu kako bi se izbjegle pogreške pri zaključivanju.

- 5) Analiza podataka.

U ovom koraku testira se značajnost modela i provjeravaju se podaci za izabrane točke modela, tj. gleda se da li postoje točke koje značajno odskaču izvan granica¹³. Ukoliko je model neznačajan i postoje točke koje značajno odskaču izvan granica, tada se prvo provjerava da li je došlo do pogrešnog unosa mjerih veličina. Ukoliko su vrijednosti ispravno unesene, tada je ta mjerena potrebno ponoviti. Ako je i tada model neznačajan potrebno je pokus isplanirati ispočetka. Ukoliko se javi situacija da je model značajan, a postoji jedna ili dvije točke koje i nakon kontrole i ponavljanja mjerena značajno odskaču, tada se one zanemaruju i ide se u daljnju analizu.

- 6) Optimizacija.

Optimizacija se danas vrši uporabom specijaliziranih programskih paketa. U primjerima koji slijede optimizacija će biti napravljena s programskim paketom Design-Expert 7.0, te će sam postupak biti detaljno razrađen.

¹³ Eng. outlier

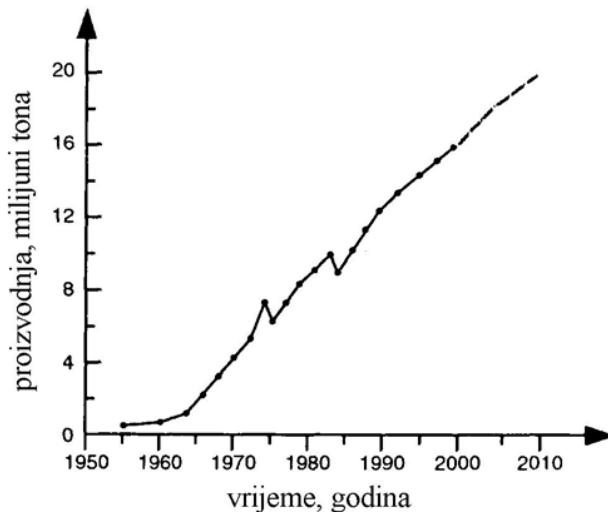
4. PRIMJERI IZ PROIZVODNE PRAKSE

4.1. PRIMJER 1 – NODULARNI LIJEV

Nodularni lijev je vrsta željeznog lijeva čije je osnovno obilježje izlučivanje grafita u nodularnom, odnosno kuglastom (sferičnom) obliku. Nodularni lijev se još naziva i žilavi lijev. Prvi naziv se odnosi na specifični kuglasti oblik u kojem se izlučio grafit, dok se drugi odnosi na svojstva žilavosti.

1939. godine ADEY je primijetio da se u sivom lijevu s oko 1% Si (silicij), kojega se u rastaljenom stanju jako pregrije i naglo ohladi, stvara grafit kuglastog oblika.

Proizvodnja nodularnog lijeva počinje četrdesetih godina prošlog stoljeća i neprekidno raste u svim industrijskim zemljama. Nodularni lijev je postao vrlo popularan jer u lijevanom stanju ima kombinaciju svojstava čeličnog i sivog lijeva, te niske troškove proizvodnje.



Slika 14 Svjetska proizvodnja nodularnog lijeva u posljednjih 60 godina

Proizvodnja nodularnog lijeva u svijetu bilježi iz godine u godinu trend rasta. Tijekom 2006. godine u svijetu je proizvedeno 21,6 mil. t nodularnog lijeva, što je 2 mil. t više nego 2005. godine. Tijekom 2006. godine u Hrvatskoj je proizvedeno 18 243 t odljevaka od nodularnog lijeva, što je 2 000 t više nego 2005. godine. Tijekom 2007. godine u Hrvatskoj je proizvedeno 20 026 t odljevaka od nodularnog lijeva, što znači porast od 9,8% u odnosu na 2006. godinu i porast od 164,1% o odnosu na 1990. godinu.

Istraživanja provedena poslije 1945. godine pokazala su da se kuglasti grafit može postići i legiranjem (cijepljenjem) i to:

- podeutektičkog sivog lijeva s oko 0,5% Mg (magnezij)
- nadeutektičkog sivog lijeva s oko 0,5% Ce (cer)

gdje su Mg i Ce globulatori.

Legiranjem se postižu poboljšana mehanička svojstva:

- povišena vlačna čvrstoća Rm (u odnosu na sivi lijev)
- znatno povišeno lomno istezanje (A, %) (u odnosu na sivi lijev)

Globulatori se u talinu dodjau tik prije lijevanja.

Svojstva nodularnog lijeva su između svojstava čeličnog i sivog lijeva s tim da se nodularni lijev može djelomično čak i toplo oblikovati (valjati, kovati itd.).

Bit je u tome, što je grafit kuglastog oblika, a kugla ima najmanju površinu pri konstantnom volumenu. Zato je smanjenje nosivosti presjeka radi grafita nodularnog lijeva manje nego u sivom lijevu, a nema ni ureznih dijelovanja listića grafita.

Uvjeti za kvalitetni nodularni lijev su:

- odsutnost Ti, Al, Pb, Bi, Sb, Sn, As
- niski %S }
 } visoki udjeli: C, Si i S traže više Mg
- niski %Si }
- niski %Mn → Mn djeluje cementatorski, a ne treba ga jer je i %S nizak
- niski %P → P djeluje loše na žilavost i produljenje nakon kidanja, A

Obradljivost nodularnog lijeva je dobra.

Nodularni lijev prigušuje titraje slabije nego sivi lijev ali bolje nego čelični.

Stezanje pri kristalizaciji nodularnog lijeva je oko 1% (kao za sivi lijev), ali je sklon stvaranju lunkera (radi prisutnosti magnezija).

U tablici 8 prikazana su mehanička svojstva nodularnog lijeva (GJS) prema HRN EN 1563:1997.

Tablica 8 Mehanička svojstva nodularnog lijeva (GJS) prema HRN EN 1563:1997

Oznaka	Broj	Garantirane vrijednosti izlivenih probnih epruveta					Struktura (orientacijski podaci)
		Vlačna čvrstoća, Rm, N/mm ²	Granica razvlačenja, R _{p0,2} , N/mm ²	Produljenje nakon kidanja, A, %	Žilavost, KU J, min	Za tri epruvete prosječno	
HRN EN-GJS-400-15	EN-JS1030	400	250	15	-	-	feritna
HRN EN-GJS-500-7	EN-JS1050	500	320	7	-	-	feritno - perlitna
HRN EN-GJS-600-3	EN-JS1060	600	380	3	-	-	perlitno feritna
HRN EN-GJS-700-2	EN-JS1070	700	440	2	-	-	pretežno perlitna
HRN EN-GJS-800-2	EN-JS1080	800	500	2	-	-	perlitna

Osnovne vrste nodularnog lijeva po strukturi su:

- feritni
- feritno – perlitni
- perlitni
- austenitni

Postoje nodularni lijevovi posebnih kvaliteta:

- feritni nodularni lijev visokog modula elastičnosti
- feritni nodularni lijev otporan pri povišenim temperaturama
- perlitno – sorbitni vatrootporni nodularni lijev
- austenitni vatrootporni nodularni lijev
- austenitni nodularni lijev s niskim koeficijentom toplinskog rastezanja
- austenitni antimagnetni nodularni lijev

Dobra mehanička svojstva nodularnog lijeva postižu se povoljnim kemijskim sastavom, brižljivom kontrolom tehnološkog postupka i dobro odabranom i vođenom toplinskom obradom.

Perlitni nodularni lijev

Pretežno perlitra struktura postiže se sadržajem ugljika i silicija. Ako se zahtjeva potpuno perlitra struktura, (posebno za odljevke vrlo debele stijenke), to se može postići ili toplinskom obradbom ili legiranjem. Mangan je prikladan za stabilizaciju perlita, pa je npr. za potpuno perlitu strukturu potreban sadržaj oko 1,5% Mn. Prevelik sadržaj mangana, međutim, povećava količinu otopljenog vodika u talini, zbog čega se pojavljuje poroznost. Osim toga zbog kristalne segregacije mangana može se pojaviti karbid na granicama zrna. Perlitra struktura može se postići i dodatkom Ni i Sn.

Austenitni nodularni lijev

Ako se legira kromom i niklom može se postići austenitna struktura nodularnog lijeva. Postupak dobivanja austenitnog lijeva bitno se razlikuje od postupka dobivanja nelegiranog. Najveći broj austenitnih ljevova sadrži krom, pa te kvalitete nodularnog lijeva obično sadrže malo karbida. Kako je osnova (metalna) željezna masa austenita, ovi se materijali razmjerno lako strojno obrađuju. Ako je tvrdoča viša od 190 HB preporuča se toplinska obradba: žarenje pri temperaturi 950 – 1000 °C u trajanju 5 sati, hlađenje u peći ili na zraku.

Nodularni lijev feritno – perlitne strukture

Feritno – perlitna struktura postiže se grafitizacijskim žerenjem. Ta vrsta žerenja upotrebljava se prvenstveno radi eliminacije $\text{Fe}_3\text{C}_{\text{slob}}$.

Grafitizacijskim žarenjem poboljšavaju se:

- plastična svojstva materijala
- obradljivost odvajanjem čestica

Feritni nodularni lijev

Feritna struktura postiže se grafitizacijskim žarenjem. Time rastu produljenje nakon kidanja A i žilavost KU, a snizuje se vlačna čvrstoća Rm. Također se poboljšava obradljivost odvajanjem čestica, a snizuje se otpornost na trošenje [8].

4.1.1. OPIS PROBLEMA

Ljevaonica Duga Resa d.o.o. bavi se izradom odljevaka od nodularnog lijeva. Proizvodni program ljevaonice:

- nadzemni hidranti
- podzemni hidranti
- fitinzi za vanjske vodovode
- dekorativni program
- vrtni program

Potrebno je izraditi plan pokusa kojim bi se dobila optimalna smjesa koja bi zadovoljavala zadane uvijete.

Smjesa se sastoji od tri komponente u zadanim udjelima:

- čelik 10% - 80%
- sirovo sivo željezo (sorel) 10% - 60%
- povrat 10% - 50%



T(OP)



TT(KP)



Q(LP)



N(LS)

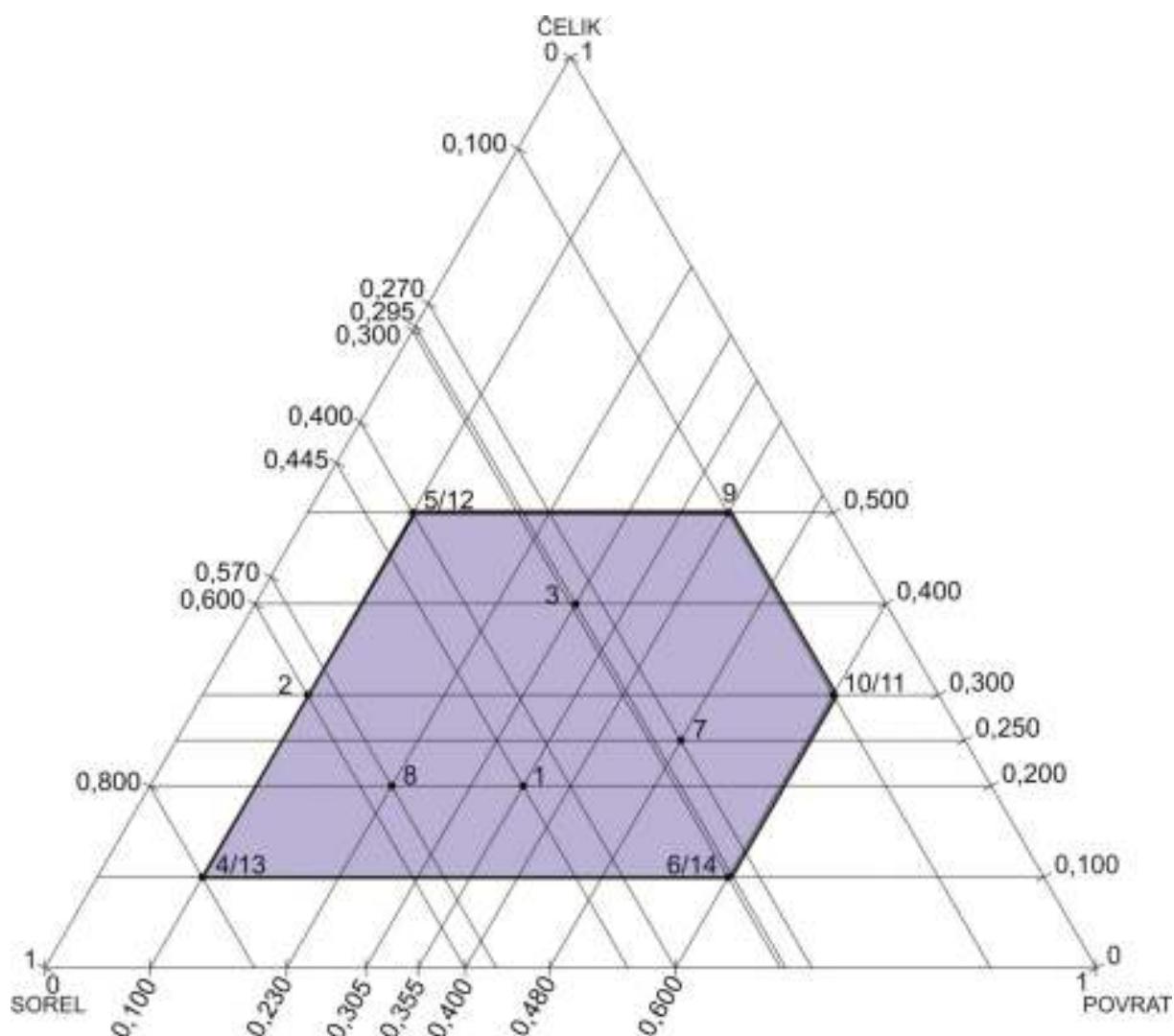
Slika 15 Dio proizvodnog programa ljevaonice Duga Resa d.o.o.

4.1.2. PROSTOR MOGUĆIH STANJA POKUSA I IZBOR TOČAKA ZA POKUS

Budući da se smjesa sastoji od tri komponente, tada će elementarna rešetka biti jednakostrošaničan trokut.

Prostor mogućih stanja pokusa, na slici označen ljubičastom bojom, dobiven je iz uvjeta da komponente smjese moraju biti zastupljene u određenim udjelima:

- čelik 10% - 80%
- sivo sirovo željezo (sorel) 10% - 60%
- povrat 10% - 50%



Slika 16 Prostor mogućih stanja pokusa

Nakon što je određen prostor mogućih stanja pokusa vrši se izbor točaka za pokus. Važno je da se na temelju izabranih točaka može dobro odrediti odzivna ploha prostora mogućih

stanja pokusa. Odabрано је укупно 14 тоčaka – 6 основних тоčака модела, 4 тоčке за procjenu koliko добро model пристaje podacima i 4 тоčke које се понављају, ради одређivanja грешке покуса. Увјек се узимају врхови полинома, а за унутрашње тоčке је важно да су распоређене по цijeloј површини. У таблици 9 приказане су све одобрале тоčке покуса и udjeli pojedinih komponenata.

Tablica 9 Odabrane точке покуса

TALINA	ČELIK	SOREL	POVRAT
1	0,300	0,600	0,100
2	0,570	0,230	0,200
3	0,270	0,480	0,250
4	0,100	0,600	0,300
5	0,400	0,100	0,500
6	0,800	0,100	0,100
7	0,800	0,100	0,100
8	0,400	0,100	0,500
9	0,100	0,400	0,500
10	0,300	0,600	0,100
11	0,445	0,355	0,200
12	0,600	0,100	0,300
13	0,295	0,305	0,400
14	0,100	0,600	0,300

4.1.2. ANALIZA ODZIVA

Za svaku od izabranih točaka ispitivana su mehanička i fizikalna svojstva, te su rezultati prikazane u tablici 10.

Tablica 10 Rezultati mjerjenja

TALINA	Standard Order	ČELIK	SOREL	POVRAT	GRANICA RAZVLAČENJA [Rp0,2] N/mm ²	VLAČNA ČVRSTOĆA [Rm] N/mm ²	ISTEZANJE [A] %	NODULARNOST %	FERIT %	PERLIT %	Broj nodula/mm ²
1	12	0,300	0,600	0,100	313,5	441	26,85	71	98,355	1,645	232
2	10	0,570	0,230	0,200	351	455	12	57	94,9	5,1	163
3	9	0,270	0,480	0,250	356	478	22,7	71	99,05	0,95	230
4	3	0,100	0,600	0,300	304	441,5	22,1	73,5	95,55	4,45	197
5	6	0,400	0,100	0,500	356	463	14,3	59	96,56	3,44	207
6	4	0,800	0,100	0,100	288,5	438	22,25	70	96,955	3,045	199
7	11	0,800	0,100	0,100	331,5	461,5	24,7	72	96,16	3,84	224,5
8	14	0,400	0,100	0,500	382	501	17,9	68	96,79	3,21	198
9	5	0,100	0,400	0,500	412	514	8	56	73,49	26,51	185
10	2	0,300	0,600	0,100	325,5	454,5	23,95	70	93,92	6,08	170
11	1	0,445	0,355	0,200	376	505	7,1	47	62,83	37,17	146
12	7	0,600	0,100	0,300	362	434	8	61	98,56	1,44	262
13	8	0,295	0,305	0,400	389	536	10,6	59	65,31	34,69	74
14	13	0,100	0,600	0,300	320	442,5	23,3	70,5	94,13	5,87	220

Podaci su obrađeni u programskom paketu specijaliziranom za pokuse sa smjesama, DESIGN-EXPERT 7.0

Kompletna statistička obrada i postupak matematičkog modeliranja veličina iz tablice 10 se nalazi u prilogu A u tablicama A.1 do A.8.

GRANICA RAZVLAČENJA

Iz analize različitih vrsta modela proizlazi da je matematički model granice razvlačenja $R_{p0,2}$ kvadratni.

U tablici A.2 u prilogu A u dijelu tablice pod nazivom „Sequential Model Sum of Squares[Type I]“ je za svaki set uvjeta potrebno provjeriti da li vjerojatnost („Prob>F“) postiže vrijednosti manje od 0,05. Kvadratni model zadovoljava uvjet. Ukoliko postoji više setova koji zadovoljavaju uvjet uvijek se odabire polinom višeg stupnja.

U tablici A.2 u prilogu A u dijelu tablice pod nazivom “Lack of Fit Tests” također se provjerava vjerojatnost („Prob>F“). U ovom slučaju je poželjnije da je ta vjerojatnost što veća jer “Lack of Fit Tests” je test kojim se ispituje koliko dobro model pristaje podacima, tj. koliko dobro model aproksimira stvarne podatke.

U tablici A.2 u prilogu A u dijelu tablice pod nazivom “Model Summary Statistics” iščitavaju se vrijednosti za standardnu devijaciju (Std. Dev.) za koju je poželjno da je što manja, R-kvadrat (R-Squared) za koji je poželjno da je što veći i PRESS (The Predicted residual Sum Of Squares) za koji je poželjno da je što manji.

U tablici A.2 u prilogu A u dijelu tablice pod nazivom „Analysis of variance“ se vidi da F vrijednost kategorije Model iznosi 8,68 što implicira da je model značajan. Postoji samo 0,43% vjerojatnosti da je vrijednost kategorije Model ovako visoka zbog slučajnih rasipanja. Kada su vrijednosti „Prob>F“ za određene članove odzivnog polinoma manje od 0,05 onda su ti članovi značajni, a kada su veći od 0,1 članovi nisu značajni. U ovom slučaju značajni članovi su linearne komponente smjese i AB.

Vrijednost „Lack of fit“ kako je već gore navedeno označava mjeru neprilagođivanja modela. U ovom slučaju iznosi 0,73 što implicira da ova kategorija nije značajna. Postoji 61,52% vjerojatnosti da je vrijednost ove kategorije tako niska zbog slučajnih rasipanja. Neznačajnost ove varijable je poželjna.

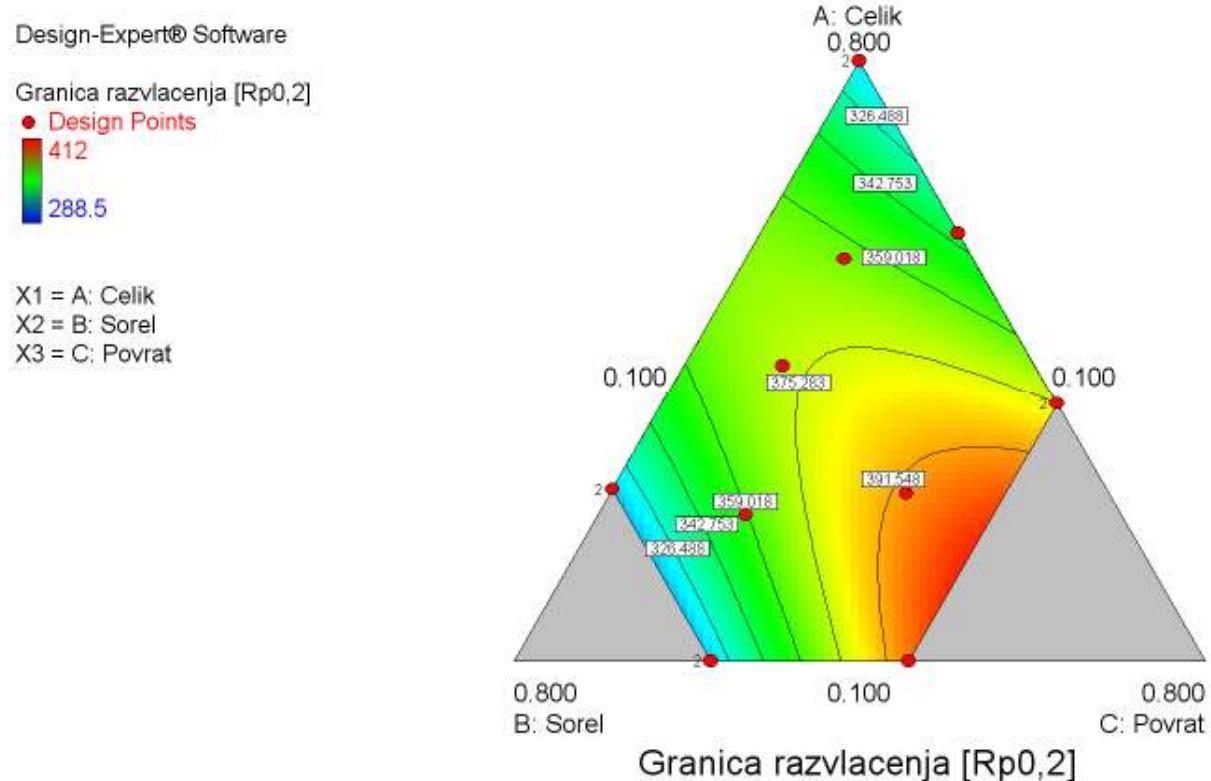
Varijabla „Adeq precision“ predstavlja omjer signala i slučajnih rasipanja. Poželjno je da taj omjer bude veći od 4. U ovom slučaju iznosi 7,424 što indicira da je signal dobar. Vrijednost varijable „Pred R-squared“ koja predstavlja vrijednost predviđenih R-kvadrata iznosi 0,3235 što odstupa bitno od vrijednosti 0,7471 varijable „Adj R-squared“ koja predstavlja vrijednost prilagođenih R-kvadrata. Ovakvo odstupanje je nepoželjno.

Ako postoji „grubo“ odstupanje neke od točaka modela od stvarne izmjerene vrijednosti promatranog svojstva onda se takva točka označuje kao „Outlier“. Postojanje „Outlier“ točaka u tablici tablici A.2 u prilogu A u dijelu tablice pod nazivom „Diagnostic Case Statistic“ promatra se u koloni „Externally Studentized Residual“. Ukoliko postoji „Outlier“ pored vrijednosti se nalazi znak *. U ovom slučaju nema vrijednosti označene s „Outlier“ pa se dolazi do zaključka da je slaganje rezultata pokusa i dobivenih matematičkih modela u svim točkama pokusa dobro.

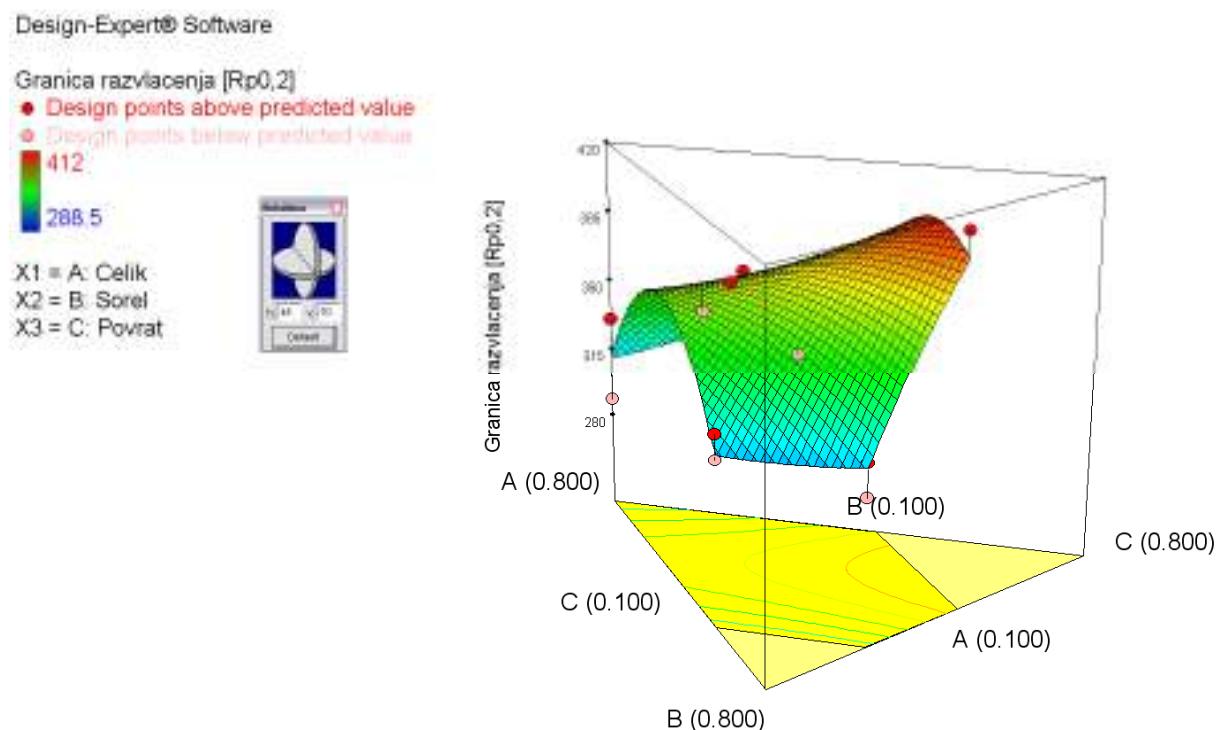
Izraz predstavlja matematički model za granicu razvlačenja $R_{p0,2}$:

$$\begin{aligned}
 \text{Granica razvlačenja [Rp0,2]} = \\
 +248.84889 * \text{Celik} \\
 +23.10962 * \text{Sorel} \\
 +481.22540 * \text{Povrat} \\
 +853.67927 * \text{Celik} * \text{Sorel} \\
 -126.85544 * \text{Celik} * \text{Povrat} \\
 +482.04302 * \text{Sorel} * \text{Povrat}
 \end{aligned}$$

(4.41)



Slika 17 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za granicu razvlačenja $R_{p0,2}$.



Slika 18 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za granicu razvlačenja $R_{p0,2}$.

VLAČNA ČVRSTOĆA

Iz analize različitih vrsta modela proizlazi da je matematički model vlačne čvrstoće R_m kvadratni.

U tablici A.3 u prilogu A u dijelu tablice pod nazivom „Analysis of variance“ se vidi da F vrijednost kategorije Model iznosi 5,69 što implicira da je model značajan. Postoji samo 1,57% vjerojatnosti da je vrijednost kategorije Model ovako visoka zbog slučajnih rasipanja. Značajni članovi su linearne komponente smjese i AB.

Vrijednost „Lack of fit“ iznosi 1,79 što implicira da ova kategorija nije značajna. Postoji 29,38% vjerojatnosti da je vrijednost ove kategorije tako niska zbog slučajnih rasipanja. Neznačajnost ove varijable je poželjna.

Varijabla „Adeq precision“ iznosi 6,920 što indicira da je signal dobar. Vrijednost varijable „Pred R-squared“ iznosi 0,1923 što odstupa bitno od vrijednosti 0,6434 varijable „Adj R-squared“. Ovakvo odstupanje je nepoželjno.

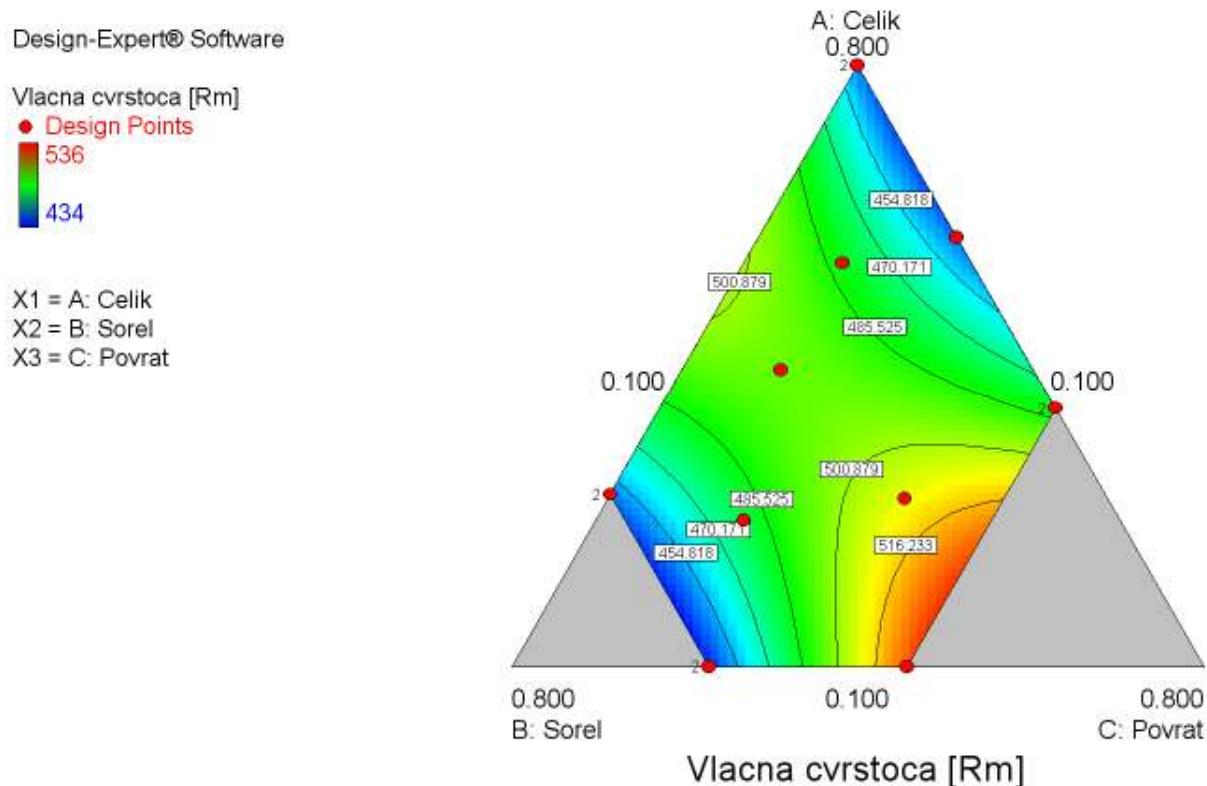
Nema oznaka „Outlier“ stoga je slaganje rezultata pokusa i dobivenih matematičkih modela u svim točkama pokusa dobro.

Izraz predstavlja matematički model za vlačnu čvrstoću R_m :

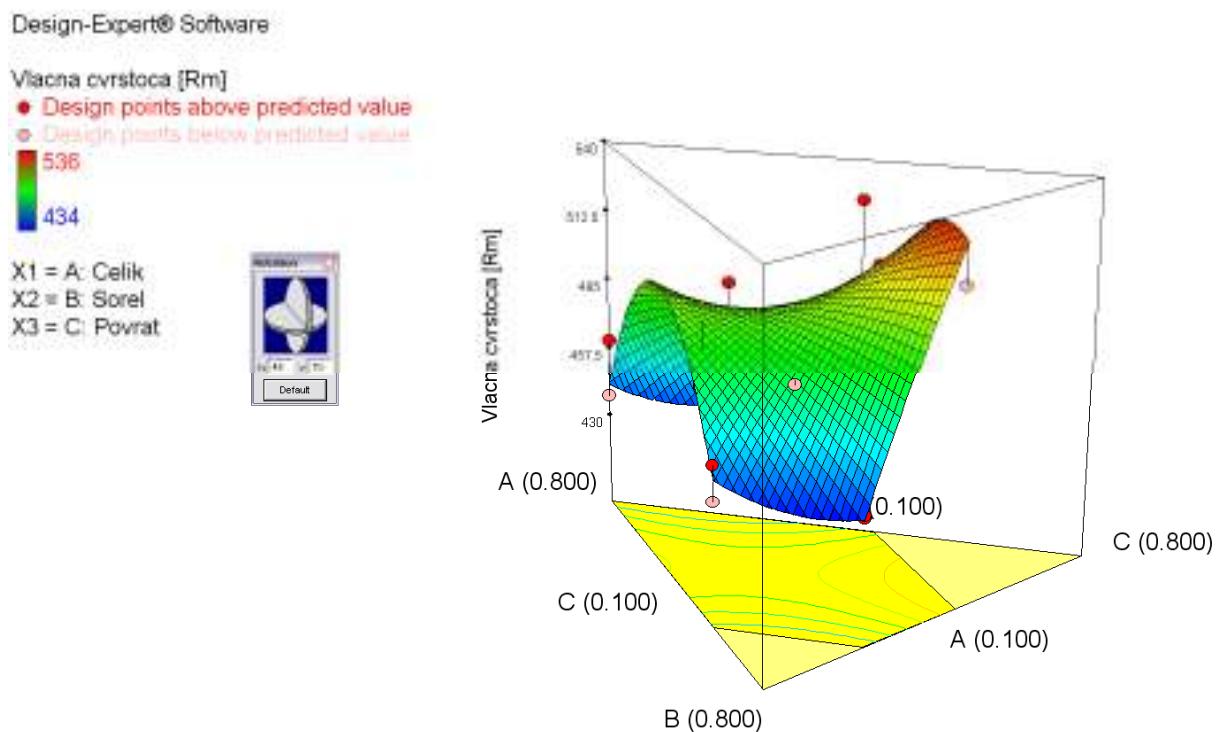
Vlačna čvrstoca [R_m] =

$$\begin{aligned}
 & +403.21133 * \text{Celik} \\
 & +151.73456 * \text{Sorel} \\
 & +697.47720 * \text{Povrat} \\
 & +896.04569 * \text{Celik} * \text{Sorel} \\
 & -485.04843 * \text{Celik} * \text{Povrat} \\
 & +337.10563 * \text{Sorel} * \text{Povrat}
 \end{aligned}$$

(4.42)



Slika 19 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za vlačnu čvrstoću R_m .



Slika 20 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za vlačnu čvrstoću R_m .

ISTEZLJIVOST

Iz analize različitih vrsta modela proizlazi da je matematički model istezljivosti kubni.

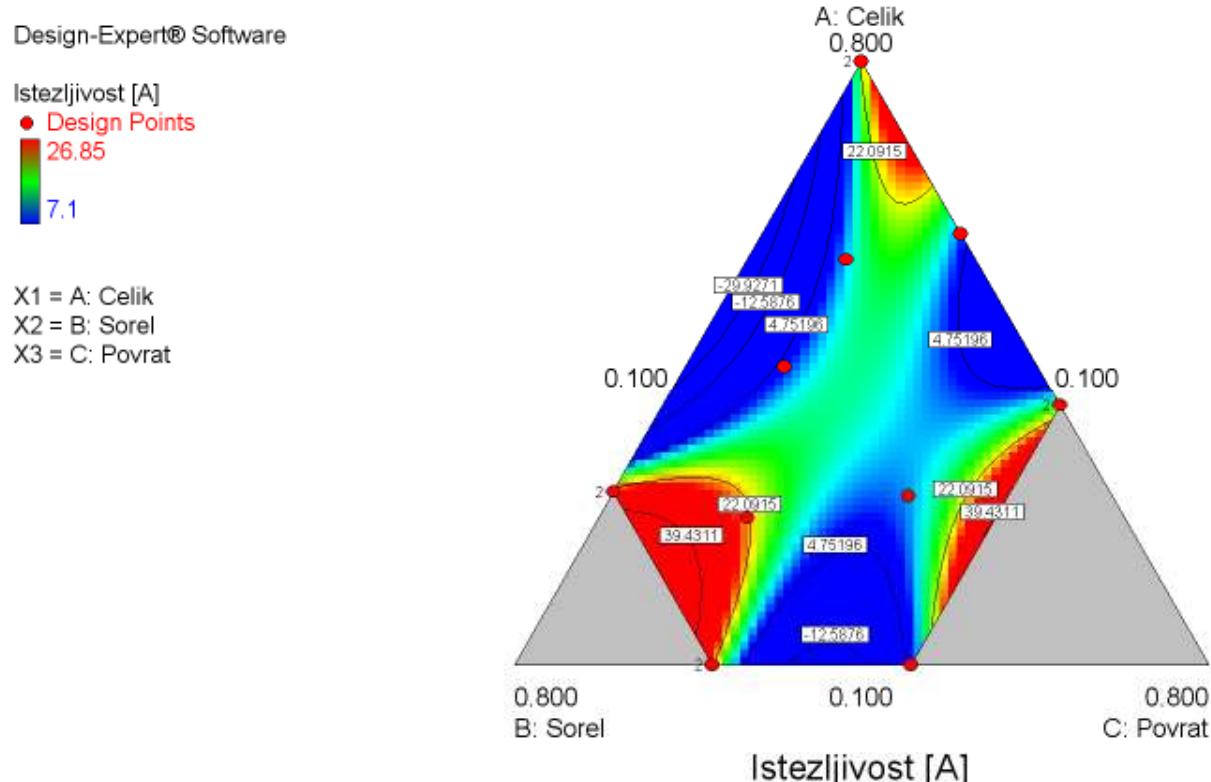
U tablici A.4 u prilogu A u dijelu tablice pod nazivom „Analysis of variance“ se vidi da F vrijednost kategorije Model iznosi 19,98 što implicira da je model značajan. Postoji samo 0,56% vjerojatnosti da je vrijednost kategorije Model ovako visoka zbog slučajnih rasipanja. Značajni članovi su linearne komponente smjese, AB, AC, BC, ABC, AC(A-C) i BC(B-C).

Varijabla „Adeq precision“ iznosi 11,410 što indicira da je signal dobar. Vrijednost varijable „Pred R-squared“ nije dostupna jer je „Leverage“ koji predstavlja snagu kojim točka navlači model na sebe jednak jedan.

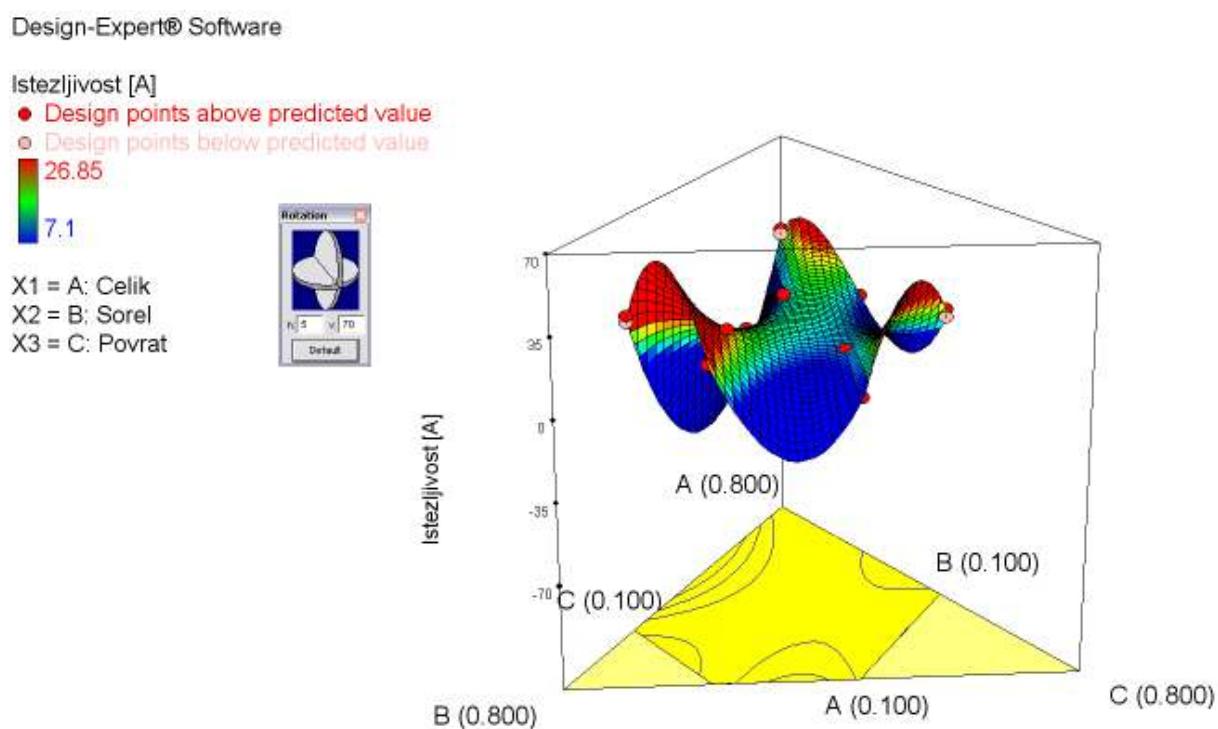
Nema oznaka „Outlier“ stoga je slaganje rezultata pokusa i dobivenih matematičkih modela u svim točkama pokusa dobro. Budući da je „Leverage“ za neke točke, kao što je već prethodno objašnjeno, jednak jedan u tim točkama „Outlier t“ nije definirana vrijednost.

Izraz predstavlja matematički model za Istezljivost [A]:

$$\begin{aligned}
 \text{Istezljivost [A]} = & \\
 +54.92224 * \text{Celik} \\
 +575.89588 * \text{Sorel} \\
 +1971.57242 * \text{Povrat} \\
 -1929.05799 * \text{Celik} * \text{Sorel} \\
 -4195.15515 * \text{Celik} * \text{Povrat} \\
 -5250.47081 * \text{Sorel} * \text{Povrat} \\
 +11007.99825 * \text{Celik} * \text{Sorel} * \text{Povrat} \\
 +253.94767 * \text{Celik} * \text{Sorel} * (\text{Celik-Sorel}) \\
 +2945.48362 * \text{Celik} * \text{Povrat} * (\text{Celik-Povrat}) \\
 +1741.27341 * \text{Sorel} * \text{Povrat} * (\text{Sorel-Povrat})
 \end{aligned} \tag{4.43}$$



Slika 21 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za istezljivost[A]



Slika 22 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za istezljivost[A]

NODULARNOST

Iz analize različitih vrsta modela proizlazi da je matematički model nodularnosti specijalni kubni.

U tablici A.5 u prilogu A u dijelu tablice pod nazivom „Analysis of variance“ se vidi da F vrijednost kategorije Model iznosi 5,06 što implicira da je model značajan. Postoji samo 2,57% vjerojatnosti da je vrijednost kategorije Model ovako visoka zbog slučajnih rasipanja. Značajni članovi su AB iBC.

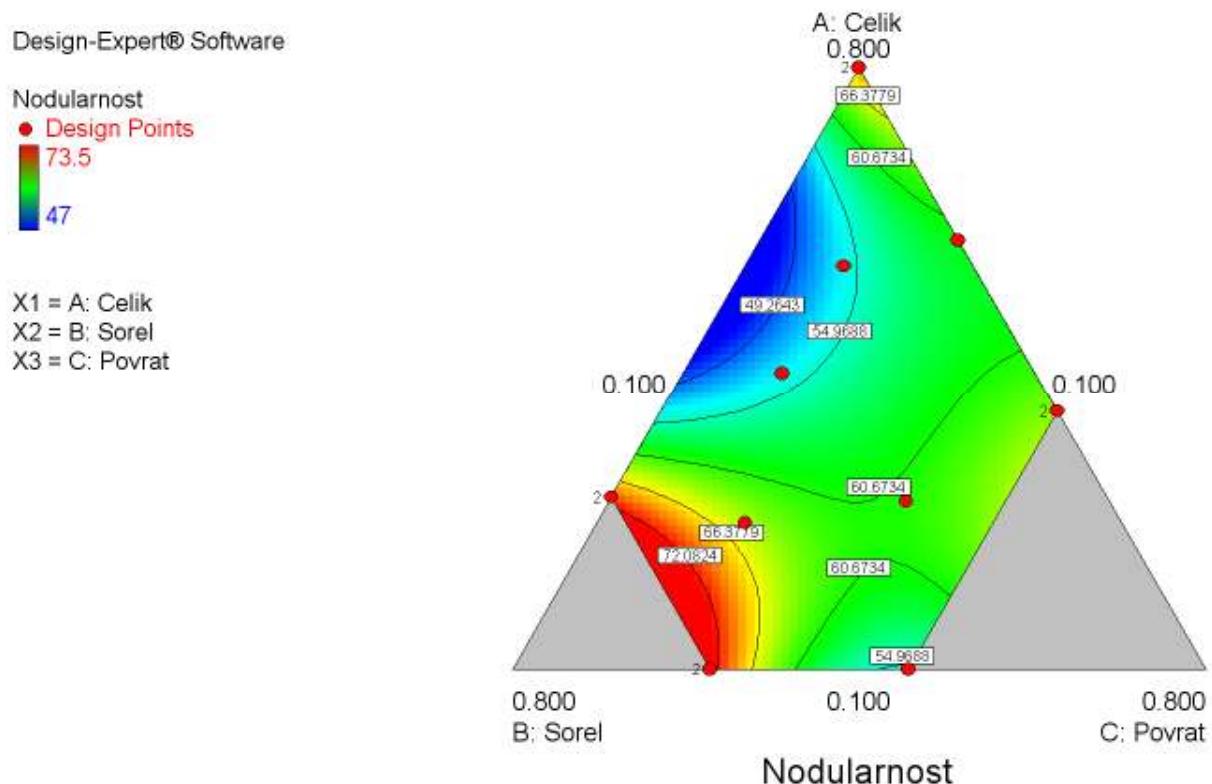
Vrijednost „Lack of fit“ iznosi 3,07 što implicira da ova kategorija nije značajna. Postoji 15,35% vjerojatnosti da je vrijednost ove kategorije tako niska zbog slučajnih rasipanja. Neznačajnost ove varijable je poželjna.

Varijabla „Adeq precision“ iznosi 5,955 što indicira da je signal dobar. Vrijednost varijable „Pred R-squared“ iznosi -0,3111 što odstupa bitno od vrijednosti 0,6522 varijable „Adj R-squared“. Ovakvo odstupanje je nepoželjno.

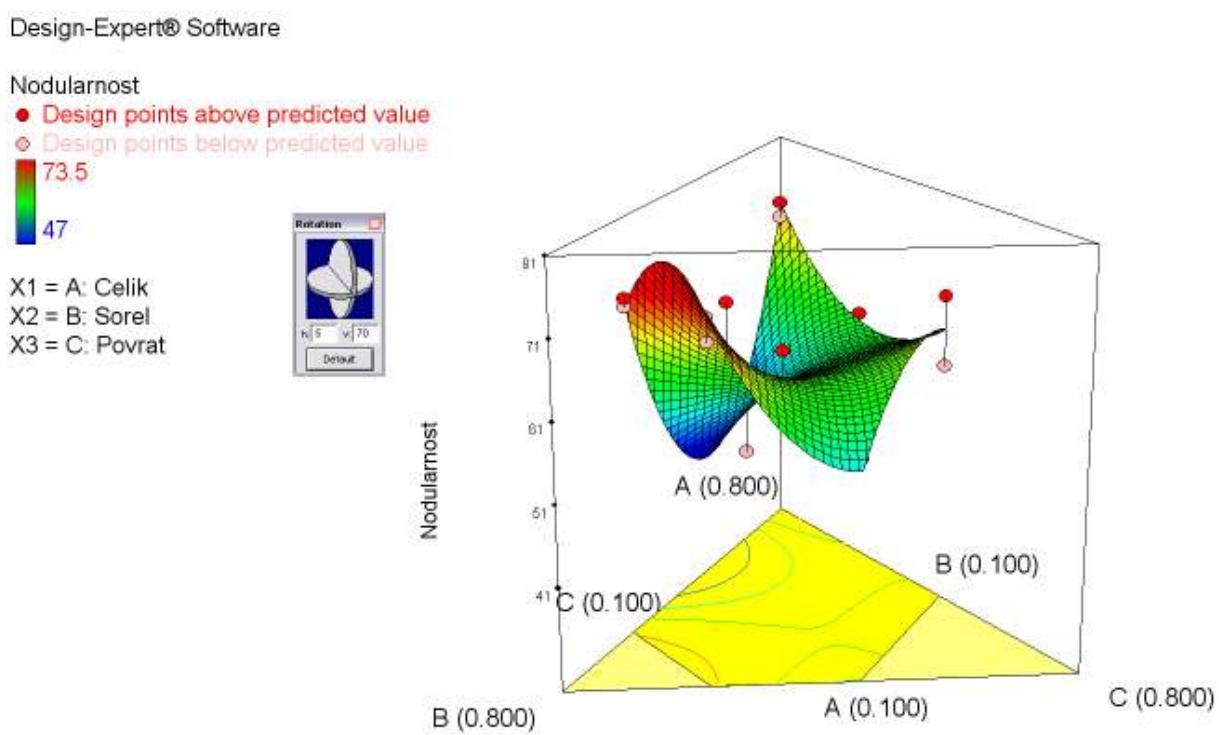
Nema oznaka „Outlier“ stoga je slaganje rezultata pokusa i dobivenih matematičkih modela u svim točkama pokusa dobro.

Izraz predstavlja matematički model za nodularnost:

$$\begin{aligned}
 \text{Nodularnost} = & \\
 +124.42790 & * \text{Celik} \\
 +238.52084 & * \text{Sorel} \\
 +166.61916 & * \text{Povrat} \\
 -592.61951 & * \text{Celik} * \text{Sorel} \\
 -345.80311 & * \text{Celik} * \text{Povrat} \\
 -635.75786 & * \text{Sorel} * \text{Povrat} \\
 +1574.52612 & * \text{Celik} * \text{Sorel} * \text{Povrat}
 \end{aligned} \tag{4.44}$$



Slika 23 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za nodularnost



Slika 24 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za nodularnost

UDIO FERITA

Iz analize različitih vrsta modela proizlazi da je matematički model udjela ferita kubni.

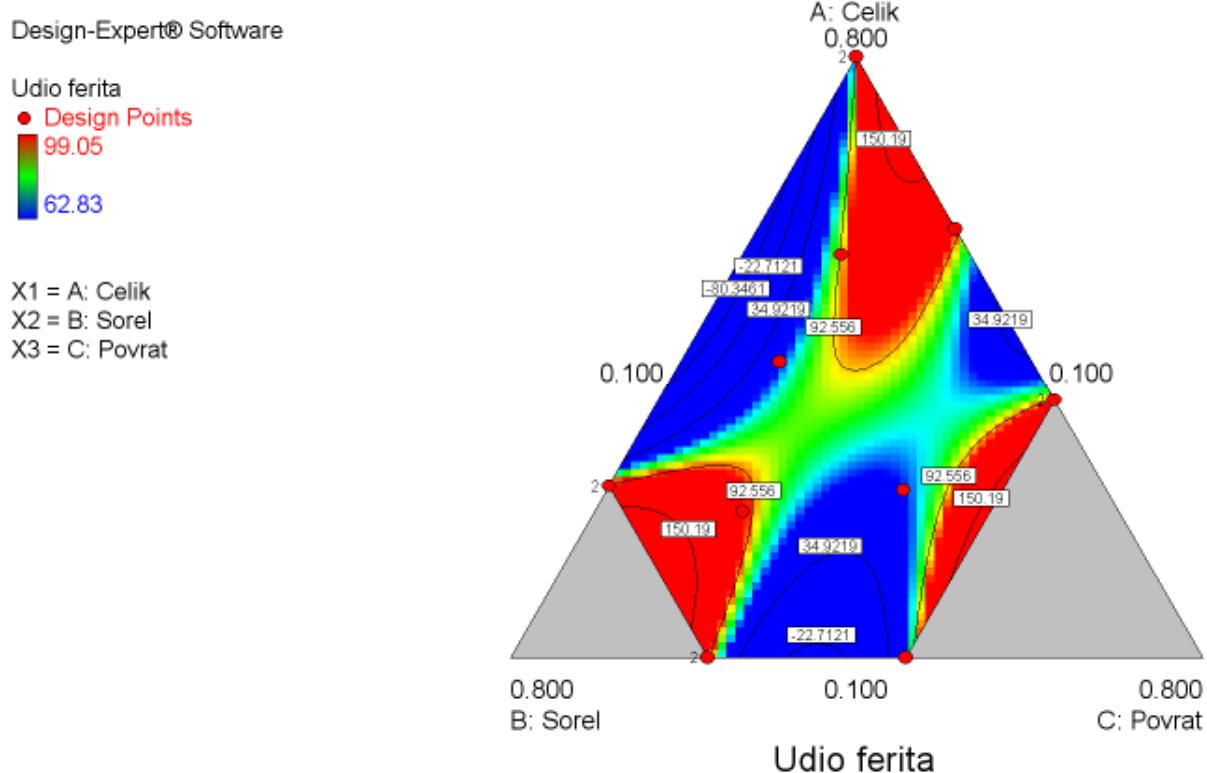
U tablici A.6 u prilogu A u dijelu tablice pod nazivom „Analysis of variance“ se vidi da F vrijednost kategorije Model iznosi 83.30 što implicira da je model značajan. Postoji samo 0,03% vjerojatnosti da je vrijednost kategorije Model ovako visoka zbog slučajnih rasipanja. Značajni su svi članovi.

Varijabla „Adeq precision“ iznosi 25,628 što indicira da je signal dobar. Vrijednost varijable „Pred R-squared“ nije dostupna jer je „Leverage“ koji predstavlja snagu kojim točka navlači model na sebe jednak jedan.

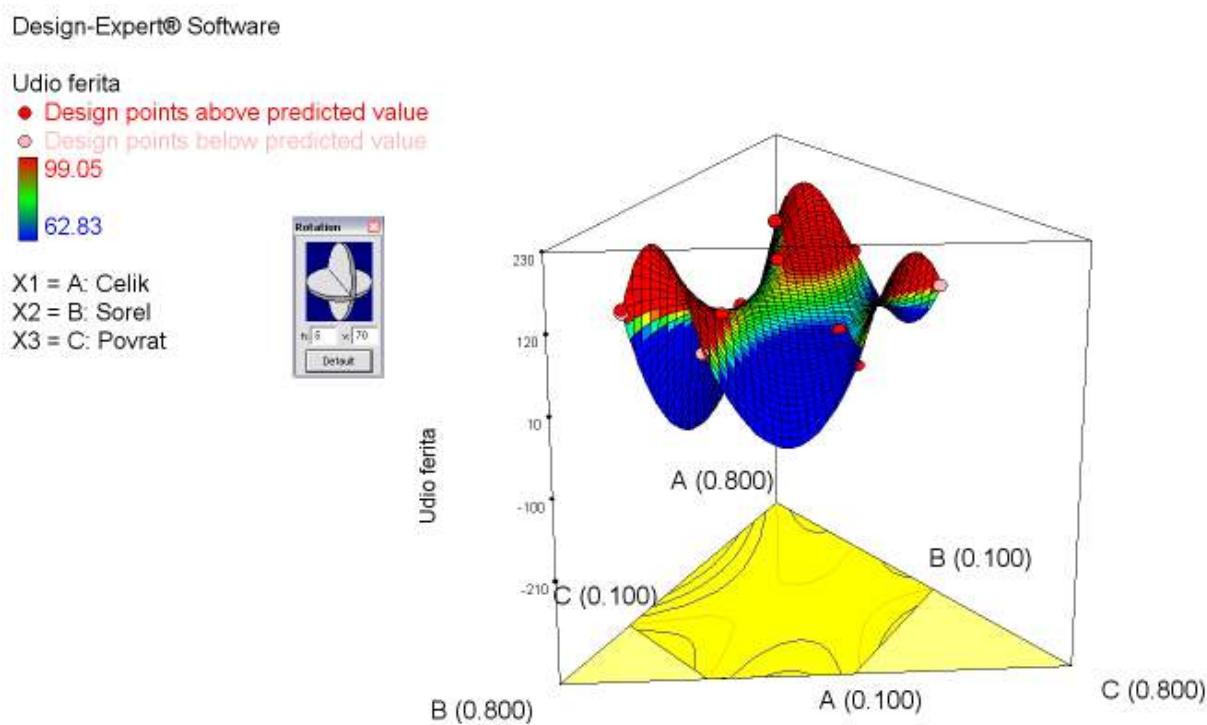
Nema oznaka „Outlier“ stoga je slaganje rezultata pokusa i dobivenih matematičkih modela u svim točkama pokusa dobro. Budući da je „Leverage“ za neke točke, kao što je već prethodno objašnjeno, jednak jedan u tim točkama „Outlier t“ nije definirana vrijednost.

Izraz predstavlja matematički model za udio ferita.

$$\begin{aligned}
 \text{Udio ferita} = & \\
 +46.01376 * \text{Celik} \\
 +1980.05348 * \text{Sorel} \\
 +7307.64021 * \text{Povrat} \\
 -6416.45537 * \text{Celik} * \text{Sorel} \\
 -14981.22276 * \text{Celik} * \text{Povrat} \\
 -18831.98369 * \text{Sorel} * \text{Povrat} \\
 +38579.14113 * \text{Celik} * \text{Sorel} * \text{Povrat} \\
 +1074.28238 * \text{Celik} * \text{Sorel} * (\text{Celik-Sorel}) \\
 +11827.11193 * \text{Celik} * \text{Povrat} * (\text{Celik-Povrat}) \\
 +6349.29895 * \text{Sorel} * \text{Povrat} * (\text{Sorel-Povrat})
 \end{aligned} \tag{4.46}$$



Slika 25 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za udio ferita



Slika 26 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za udio ferita

UDIO PERLITA

Iz analize različitih vrsta modela proizlazi da je matematički model udjela prelita kubni.

U tablici A.7 u prilogu A u dijelu tablice pod nazivom „Analysis of variance“ se vidi da F vrijednost kategorije Model iznosi 83,30 što implicira da je model značajan. Postoji samo 0,03% vjerojatnosti da je vrijednost kategorije Model ovako visoka zbog slučajnih rasipanja. Značajni su svi članovi.

Varijabla „Adeq precision“ iznosi 25,628 što indicira da je signal dobar. Vrijednost variable „Pred R-squared“ nije dostupna jer je „Leverage“ koji predstavlja snagu kojim točka navlači model na sebe jednak jedan.

Nema oznaka „Outlier“ stoga je slaganje rezultata pokusa i dobivenih matematičkih modela u svim točkama pokusa dobro. Budući da je „Leverage“ za neke točke, kao što je već prethodno objašnjeno, jednak jedan u tim točkama „Outlier t“ nije definirana vrijednost.

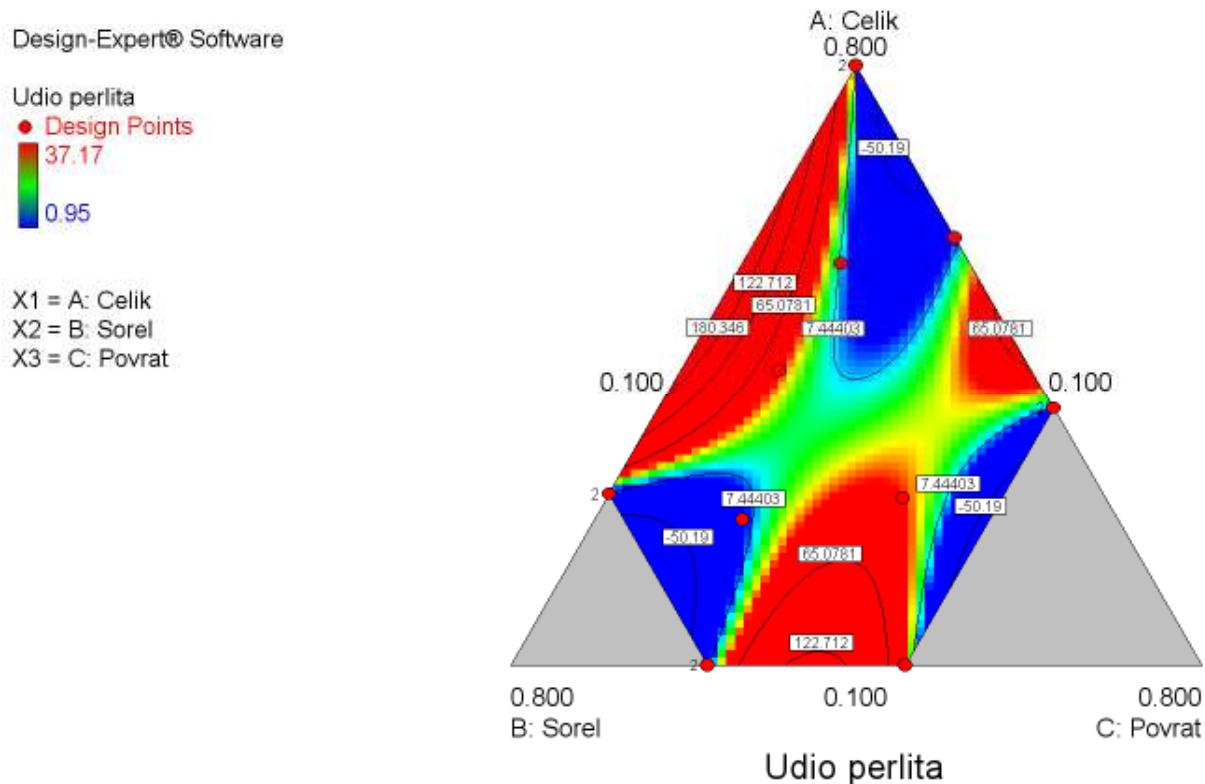
Izraz predstavlja matematički model za udio prelita:

```

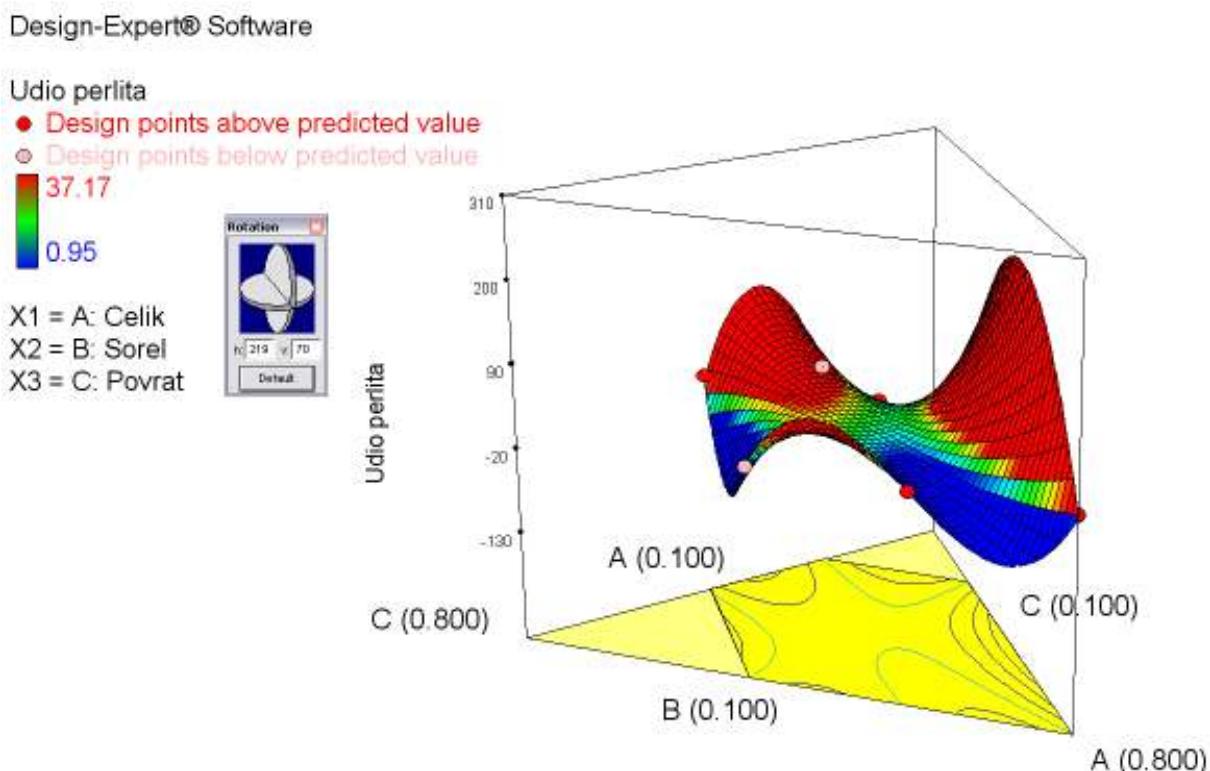
Udio perlita =
+53.98624 * Celik
-1880.05348 * Sorel
-7207.64021 * Povrat
+6416.45537 * Celik * Sorel
+14981.22276 * Celik * Povrat
+18831.98369 * Sorel * Povrat
-38579.14113 * Celik * Sorel * Povrat
-1074.28238 * Celik * Sorel * (Celik-Sorel)
-11827.11193 * Celik * Povrat * (Celik-Povrat)
-6349.29895 * Sorel * Povrat * (Sorel-Povrat)

```

(4.47)



Slika 27 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za udio perlita



Slika 28 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za udio perlita

BROJ NODULA

Iz analize različitih vrsta modela proizlazi da je matematički model broja nodula kubni.

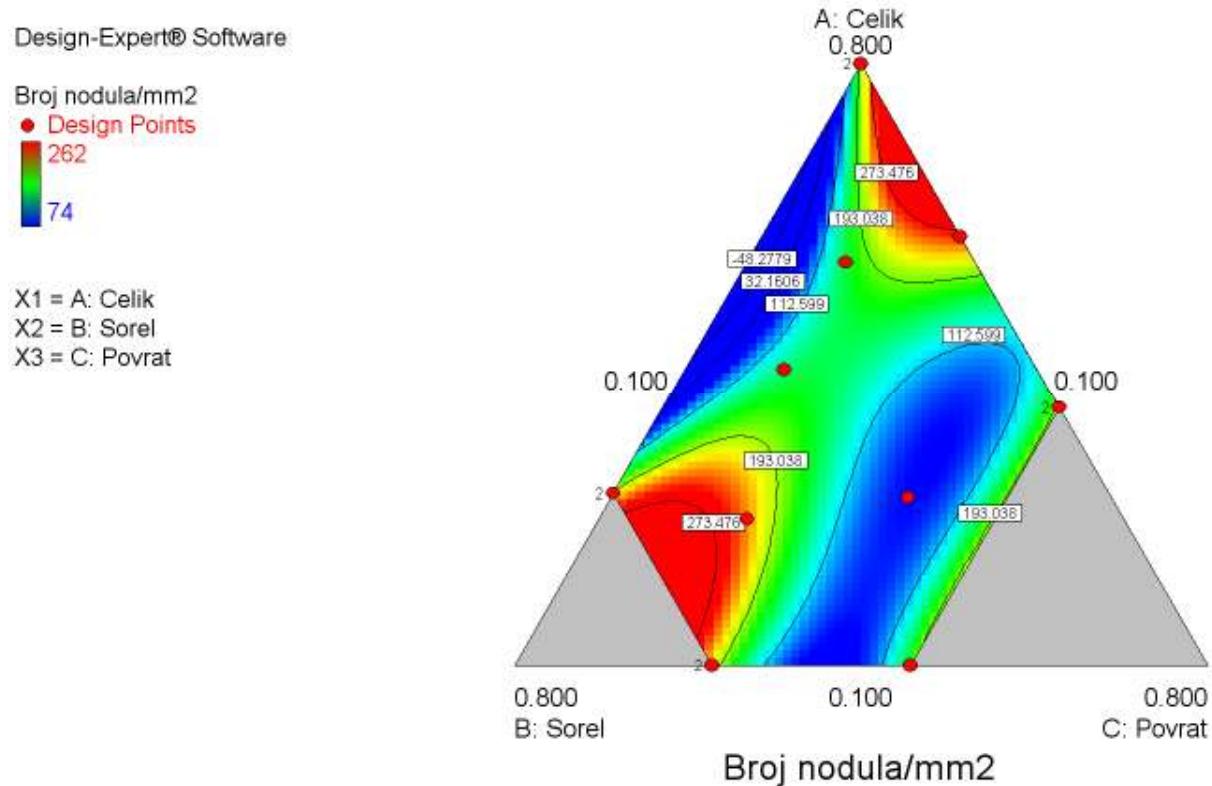
U tablici A.8 u prilogu A u dijelu tablice pod nazivom „Analysis of variance“ se vidi da F vrijednost kategorije Model iznosi 4,35 što implicira da model nije značajan. Postoji samo 8,54% vjerojatnosti da je vrijednost kategorije Model ovako niska zbog slučajnih rasipanja. Niti jedan član nije značajan

Varijabla „Adeq precision“ iznosi 8,803 što indicira da je signal dobar. Vrijednost varijable „Pred R-squared“ nije dostupna jer je „Leverage“ koji predstavlja snagu kojim točka navlači model na sebe jednak jedan.

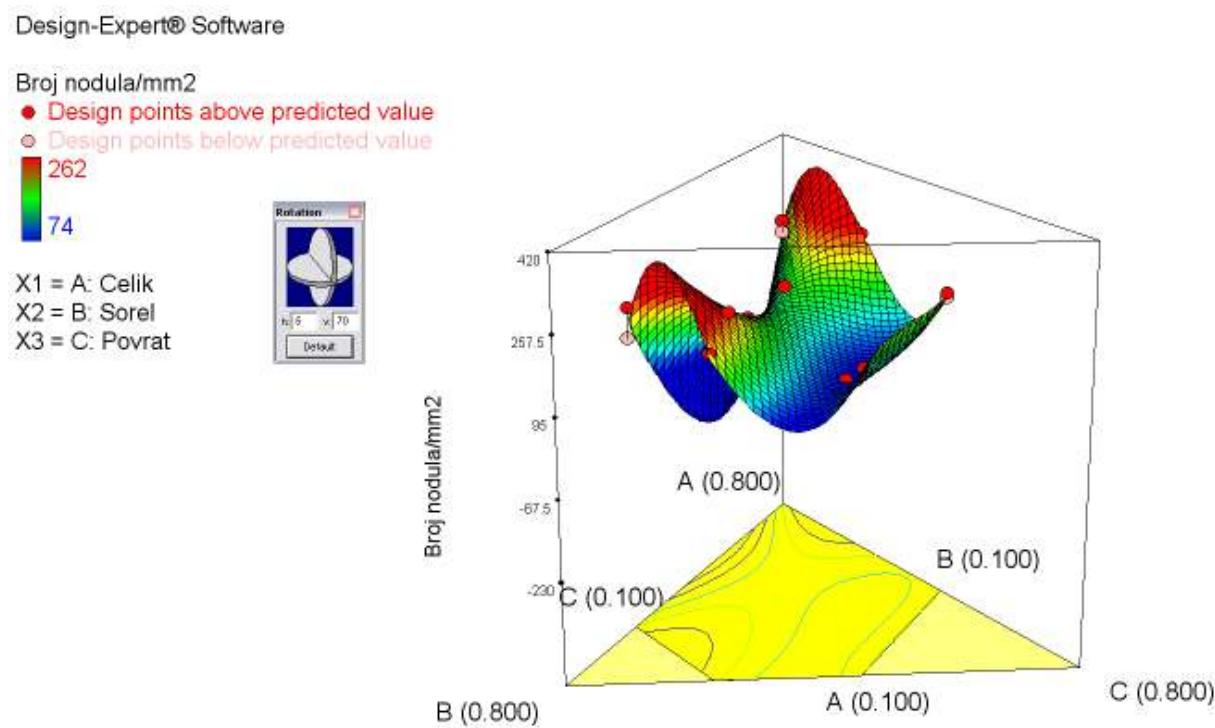
Nema oznaka „Outlier“ stoga je slaganje rezultata pokusa i dobivenih matematičkih modela u svim točkama pokusa dobro. Budući da je „Leverage“ za neke točke, kao što je već prethodno objašnjeno, jednak jedan u tim točkama „Outlier t“ nije definirana vrijednost.

Izraz predstavlja matematički model za broj nodula:

$$\begin{aligned}
 \text{Broj nodula/mm}^2 = & \\
 +134.61111 * \text{Celik} \\
 +691.77860 * \text{Sorel} \\
 +11304.67336 * \text{Povrat} \\
 -4524.35324 * \text{Celik} * \text{Sorel} \\
 -21870.37758 * \text{Celik} * \text{Povrat} \\
 -23563.76258 * \text{Sorel} * \text{Povrat} \\
 +43588.72763 * \text{Celik} * \text{Sorel} * \text{Povrat} \\
 -2889.89603 * \text{Celik} * \text{Sorel} * (\text{Celik}-\text{Sorel}) \\
 +19013.50647 * \text{Celik} * \text{Povrat} * (\text{Celik}-\text{Povrat}) \\
 +14822.34392 * \text{Sorel} * \text{Povrat} * (\text{Sorel}-\text{Povrat})
 \end{aligned} \tag{4.48}$$



Slika 29 Dvodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za broj nodula



Slika 30 Trodimenzionalni grafički prikaz dobivenog matematičkog modela za broj nodula

4.1.3. OPTIMIZACIJA

U poglavlju 4.1.2. Analiza odziva prikazan je niz matematičkih modela i pripadnih grafičkih prikaza za veličine promatrane tijekom ovog istraživanja. Svaki model za sebe daje informaciju kako se neka promatrana veličina mijenja u ovisnosti o promjeni sastava smjese. Uvrštavanjem konkretnih udjela pojedinih sastojaka smjese (uz uvjet da su unutar područja istraživanja) u matematički izraz za pojedini model ili pak očitavanjem s grafičkih prikaza moguće je vrlo točno procijeniti promatranoj veličinu.

Ako se želi istodobno doći do podataka o više promatranih veličina za neki sastav smjese, tada se taj postupak komplicira jer je potrebno analizirati više matematičkih modela ili pripadnih grafičkih prikaza odjednom. Također, vrlo je nepregledno prema pojedinačnim modelima tražiti koji je to sastav smjese (ili više njih) optimalan odnosno takav da se više promatranih veličina nađe unutar željenih vrijednosti.

Programski paket Design-Expert 7.0 omogućava da se numeričkim ili grafičkim načinom dođe do optimalnog sastava smjese za željene vrijednosti ili rasponne vrijednosti veličina koje su matematički modelirane [4].

NUMERIČKA OPTIMIZACIJA

Numeričkom optimizacijom u okviru ovog softvera moguće je:

- za pojedinačni odziv pronaći koji sastav smjese daje minimalne ili maksimalne vrijednosti za promatrano svojstvo;
- za pojedinačni odziv pronaći koji sve sastavi smjesa daju vrijednosti za promatrano svojstvo unutar zadanih granica;
- pronalaziti optimalne smjese kombinacijom dva ili više odziva promatranih veličina.

Za problematiku kojom se ovaj rad bavi najzanimljivija je treća mogućnost. Prvo se odabiru granice unutar kojih se vrijednosti promatranih veličina moraju nalaziti, a zatim se pokrene algoritam za optimiranje. Uspješnost numeričke optimizacije ocjenjuje se kroz „poželjnost“ („Desirability“). „Poželjnost“ je vrijednost koja predstavlja mjeru približavanja idealnom slučaju tj. da za odabrani sastav smjese ili više njih, vrijednosti promatranih veličina padaju unutar odabranih granica. Kod idealnog slučaja „poželjnost“ iznosi 1. Ako odabранe granice za neku od promatranih veličina padnu izvan odziva za tu veličinu, „poželjnost“ iznosi 0. U svim ostalim slučajevima vrijednost „poželjnosti“ je u između 0 i 1. Rezultat numeričke optimizacije je jedan ili više sastava smjesa koji imaju najveću moguću vrijednost „poželjnosti“. „Poželjnost“ je može prikazati i grafički. Ako se spoje točke iste „poželjnosti“ na elementarnom prostoru, pri čemu je vrijednost poželjnosti jedan ili niže prihvatljiva, dobiju se plohe optimalne smjese [9].

GRAFIČKA OPTIMIZACIJA

Grafička optimizacija se temelji na principu preklapanja dvodimenzionalnih odziva promatranih veličina. Na svakom odzivu označena su područja unutar zadanih granica za taj odziv. Preklapanjem dvodimenzionalnih odziva svih promatranih veličina dolazi i do preklapanja područja zadanih granica. Onaj dio područja zadanih granica koji je zajednički za sve odzive je područje optimalnih smjesa.

Grafička optimizacija je brza i jednostavna metoda optimiranja za smjese s tri sastojka. Za smjese s više od tri sastojka optimiranje je moguće, ali postaje zamorno zbog složenog grafičkog prikaza. U Design-Expertu 7.0 smjese s više sastojaka i većim brojem odziva jednostavnije i brže optimiraju se numerički [9].

OPTIMIZACIJA SVOJSTAVA NODULARNOG LIJEVA

U nastavku slijede dva primjera optimizacije smjese nodularnog lijeva.

PRIMJER 1a

Kriteriji za optimizaciju prikazani su u tablici 11.

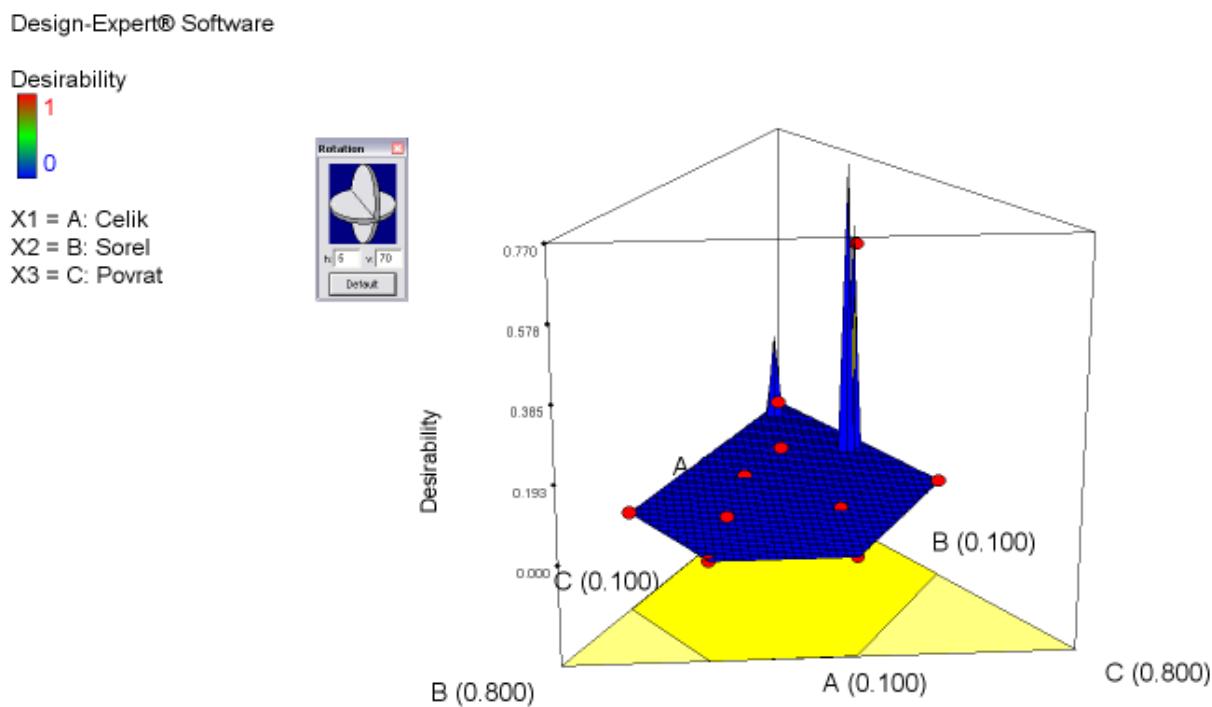
Tablica 11 Kriteriji za optimizaciju primjera 1a

Komponente smjese	Raspon	Objašnjenje	Dodatni uvjet
Udio čelika	0,1 - 0,8	zadani uvjeti na početku	
Udio sorela	0,1 - 0,6	zadani uvjeti na početku	uvjet minimizacije jer je to najskuplja komponenta smjese
Udio povrata	0,1 - 0,5	zadani uvjeti na početku	uvjet maksimizacije jer je to najjeftinija komponenta smjese
Mjereni odziv	Raspon	Objašnjenje	Dodatni uvjet
Granica razvlačenja	288,5 - 412	raspon između minimalne i maksimalne izmjerene vrijednosti	
Vlačna čvrstoća	434 - 460	najpoželjnije bi bilo da je 400, ali budući da je minimalna izmjerena vrijednost 434 proizlazi da taj odziv mora biti minimalno toliki	
Istezljivost	7,1 - 12		optimalna vrijednost iz tog intervala je 10
Nodularnost	47 - 73,5	raspon minimalnih i maksimalnih izmjerenih vrijednosti	
Udio ferita	62,83 - 99,05		
Udio perlita	0,95 - 37,17		
Broj nodula	47 - 262		

NUMERIČKA OPTIMIZACIJA

Nakon uvrštavanja postavljenih zahtjeva u Design-Expert 7.0 i provedene optimizacije računalom, dobiven je ispis rezultata numeričke optimizacije. U tablicama „Constrains“, koje se nalaze u prilogu B, redom su navedeni izvještaji o ograničenjima pojedinih komponenti smjese i postavljenim granicama za promatrane veličine. Slijedi izvještaj o optimizacijom dobivenim rješenjima. Rješenja su dobivena putem niza iteracija. Na kraju izvještaja dani su tzv. „Ramp“ i „Bar Graph“ prikazi rješenja. U „Ramp“ prikazu dani su intervali udjela komponenti smjese i intervali mogućih vrijednosti modela promatranih veličina i prikazanim odabranim ograničenjima, te je označen točan položaj pojedine variabile u smjesi. „Bar Graph“ prikaz je prikaz „poželjnosti“ pojedine komponente i odziva, te ukupne poželjnosti smjese takvog sastava. U ovom slučaju softver je ponudio 3 rješenja. Niti jedno od rješenja nema maksimalnu „poželjnost“, ali se može promijeniti da je razlika između prvog i drugog rješenja vrlo mala, dok treće rješenje ima vrlo nisku „poželjnost“ te najvjerojatnije neće biti prihvaćeno kao optimalno.

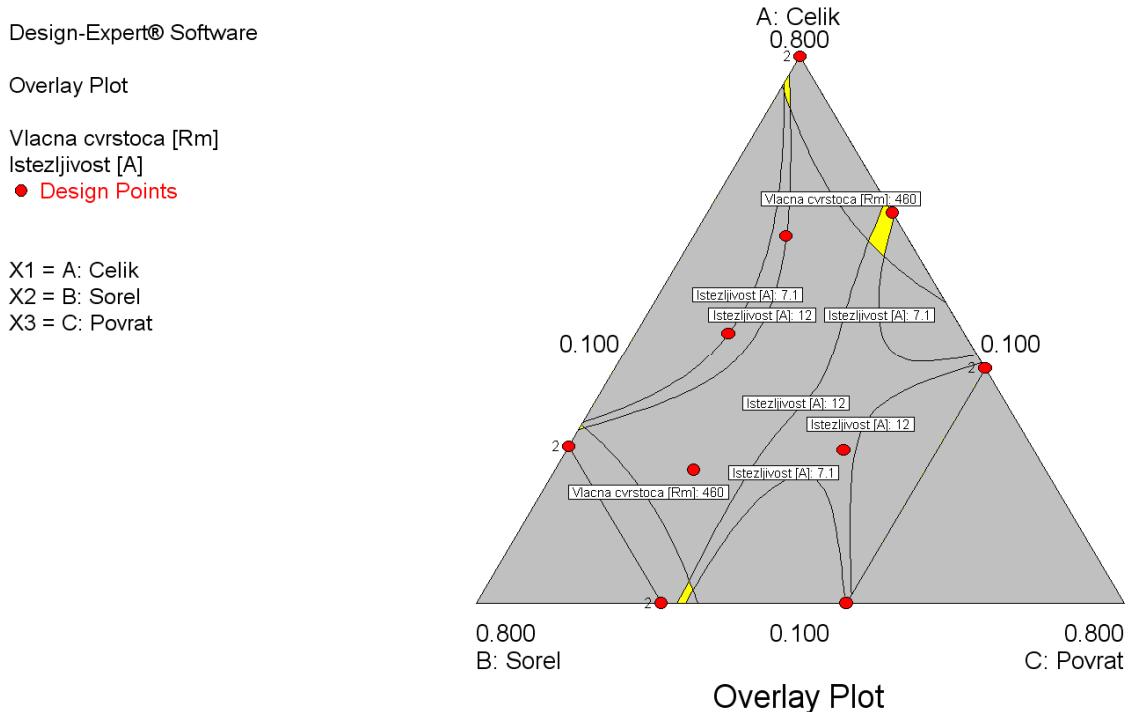
Na slici 31 grafički je prikazana numerička optimizacija. Izbočine na prostoru događaja prikazuju „poželjnost“ veću od 0. Može se primjetiti da ovdje je samo malo područje unutar kojeg su zadovoljeni svi uvjeti za smjesu. Veći vrh predstavlja veću „poželjnost“. S obzirom da ni jedna od smjesa koje su korištene u istraživanju ne pada na tu plohu, potrebno je pripraviti smjesu novog sastava. Za recept se može uzeti bilo koje od ponuđenih rješenja u izvještaju ili neka druga točka koja se nalazi na plohi optimalnih smjesa za koju se sa slike ispod očitaju udjeli sastojaka.



Slika 31 Rezultat numeričke optimizacije primjera 1a

GRAFIČKA OPTIMIZACIJA

Za grafičku optimizaciju su korišteni isti uvjeti kao i za numeričku. Na slici 32 su prikazani rezultati grafičke optimizacije. Žuta područja predstavljaju površinu optimalnih smjesa.



Slika 32 Rezultati grafičke optimizacije primjer 1a

PRIMJER 1b

Kriteriji za optimizaciju prikazani su u tablici 12.

Tablica 12 Kriteriji za optimizaciju primjera 1b

Komponente smjese	Raspon	Objašnjenje	Dodatni uvjet
Udio čelika	0,1 - 0,8	zadani uvjeti na početku	
Udio sorela	0,1 - 0,6	zadani uvjeti na početku	uvjet minimizacije jer je to najskuplja komponenta smjese
Udio povrata	0,1 - 0,5	zadani uvjeti na početku	uvjet maksimizacije jer je to najjeftinija komponenta smjese
Mjereni odziv	Raspon	Objašnjenje	Dodatni uvjet
Granica razvlačenja	288,5 - 412	raspon između minimalne i maksimalne izmjerene vrijednosti	
Vlačna čvrstoća	434 - 536		
Istezljivost	7,1 - 12		optimalna vrijednost iz tog intervala je 10
Nodularnost	47 - 73,5	raspon minimalnih i maksimalnih izmjerenih vrijednosti	
Udio ferita	62,83 - 99,05		
Udio perlita	0,95 - 37,17		
Broj nodula	47 - 262		

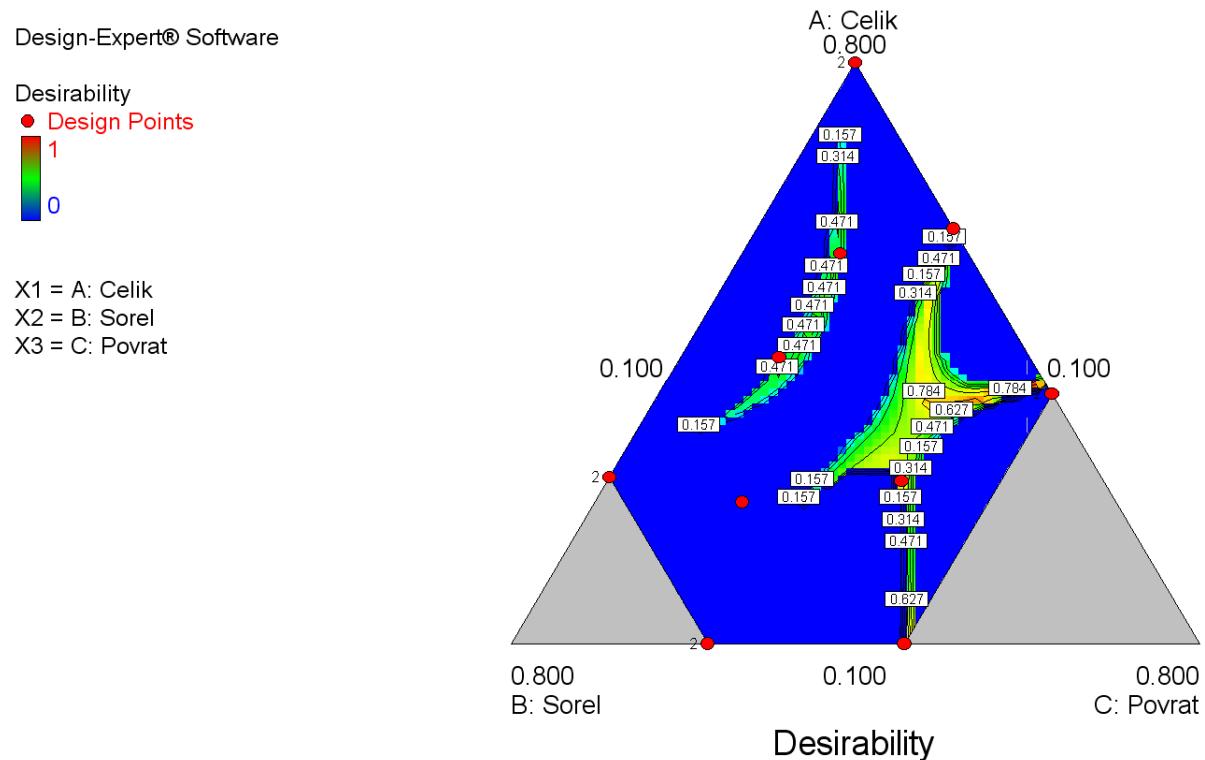
NUMERIČKA OPTIMIZACIJA

U ovom slučaju softver je ponudio 7 rješenja. Niti jedno od rješenja nema maksimalnu „poželjnost“, ali se može primijetiti da prvo rješenje ima gotovo maksimalnu poželjnost.

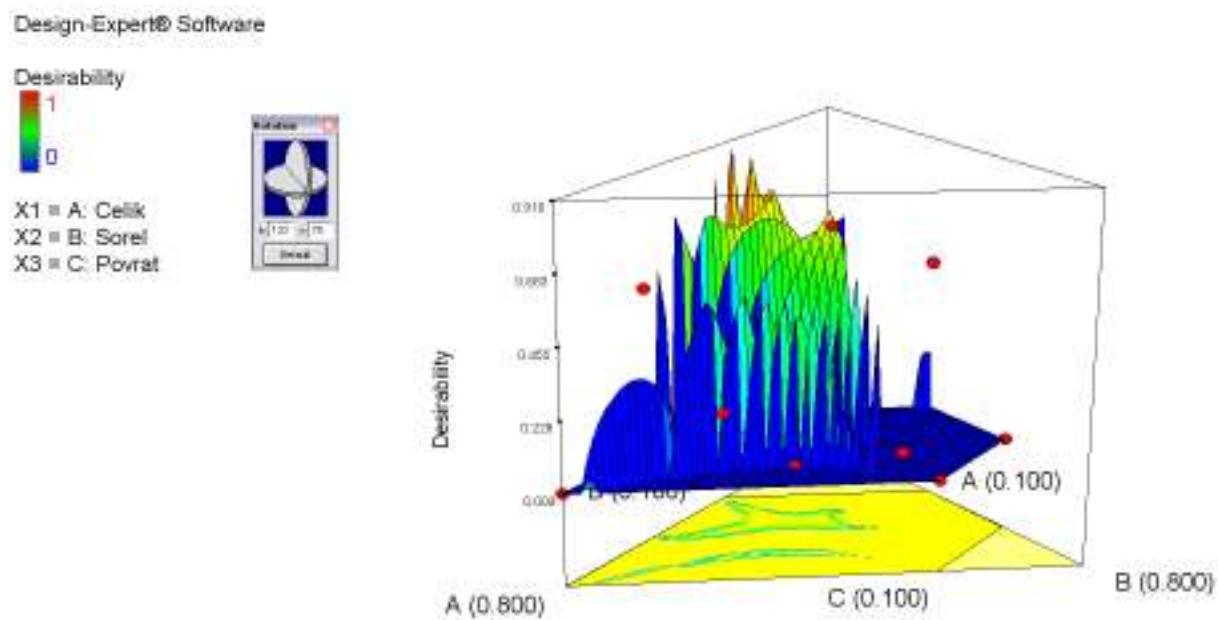
Na slijedećoj slici grafički je prikazana numerička optimizacija. Izbočine na prostoru događaja prikazuju „poželjnost“ veću od 0. Može se primijetiti da je ovdje, za razliku od primjera 1 područje unutar kojeg su zadovoljeni svi uvjeti za smjesu poprilično veliko.

S obzirom da ni jedna od smjesa koje su korištene u istraživanju ne pada na tu plohu, potrebno je pripraviti smjesu novog sastava. Za recept se može uzeti bilo koje od ponuđenih rješenja u izvještaju ili neka druga točka koja se nalazi na plohi optimalnih smjesa za koju se sa slike ispod očitaju udjeli sastojaka.

U prilogu C će biti prikazano detaljno samo prvo rješenje.



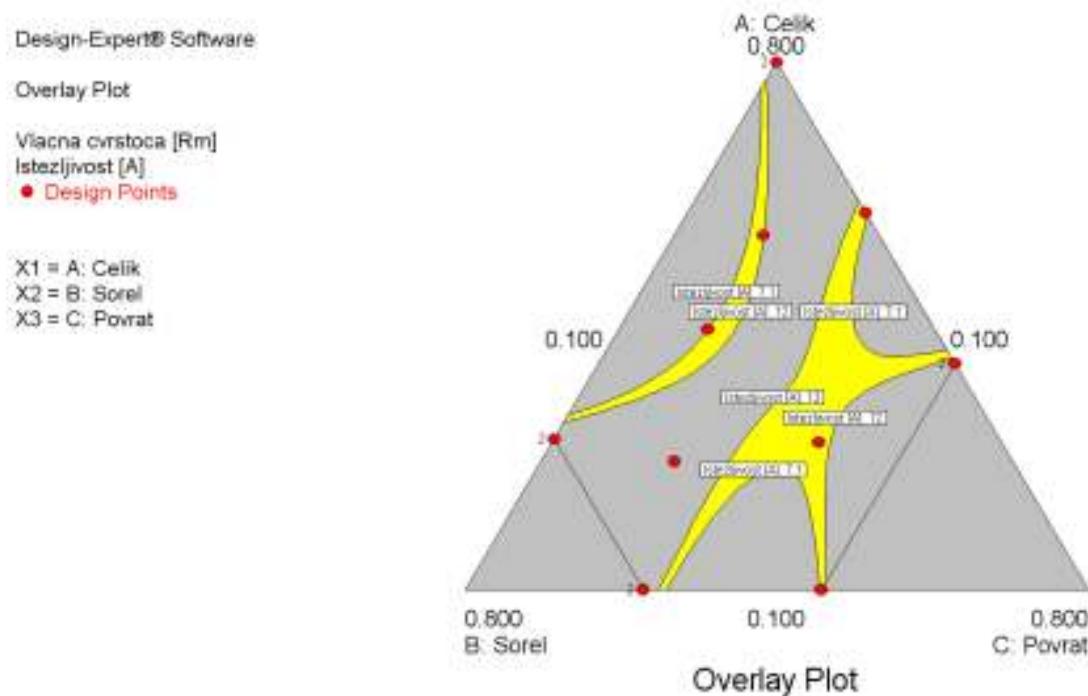
Slika 33 Rezultat numeričke optimizacije primjer 1b u 2D prikazu



Slika 34 Rezultat numeričke optimizacije primjera 1b u 3D prikazu

GRAFIČKA OPTIMIZACIJA

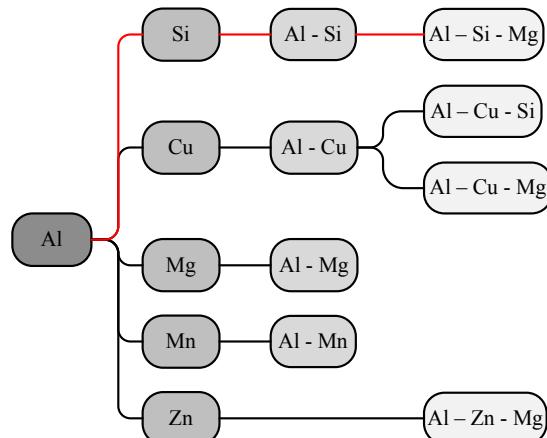
Za grafičku optimizaciju su korišteni isti uvjeti kao i za numeričku. Na slici 35 su prikazani rezultati grafičke optimizacije. Žuta područja predstavljaju površinu optimalnih smjesa.



Slika 35 Rezultati grafičke optimizacije primjera 1b

4.2. PRIMJER 2 – SILUMINSKI ODLJEVCI

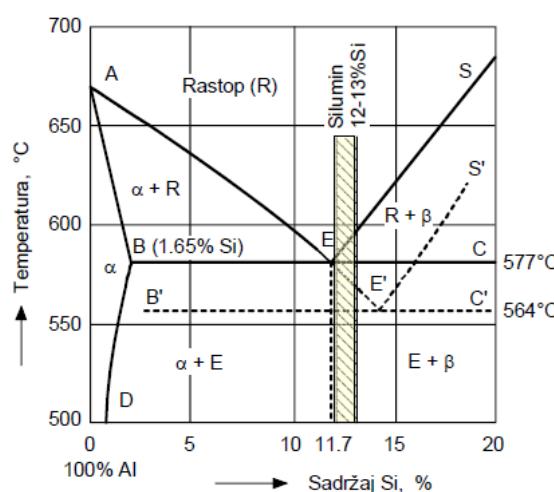
Silumin je jedna od legura aluminija (Al). Nastaje tako da se aluminij legira sa silicijem (Si). Da bi se do bile podvrste silumina s različitim karakteristikama osnovnu Al – Si leguru moguće je legirati s još dodatnim elementima. Sadržaj legirajućih elemenata je takav da legura leži u eutektikumu. U ovom radu analizirat će se AlSi_7Mg siluminski odljevci. Na slici 36 prikazane su moguće vrste aluminijskih legura.



Slika 36 Legure aluminija

Aluminij – Silicij (SILUMINI)

- Dobra livljivost
- Malo skupljanje (0,5%)
- Nije sklona naprslinama
- Dobra korozivna postojanost
- Mala mogućnost poliranja



Slika 37 Eutektoidni dijagram stanja

Aluminij - Silicij – Magnezij

- Dodatak silicija u leguri sastava Al-Mg omogućuje termičko očvršćivanje putem tople obrade i prirodnog starenja
- U mekom stanju se dobro oblikuju
- Legure koje u sebi imaju samo Mg i Si otporne su prema atmosferskoj koroziji

Uz silicij i magnezij da bi se dobila željena svojstva aluminij se još legira s manganom, bakrom, željezom, titanom i cinkom, tako da se proučavana smjesa silumina zapravo sastoji od osam komponenata. Mangan, bakar, željezo, titan i cink pojavljuju se u smjesi u vrlo malim količinama, te se stoga nazivaju elementi u tragovima ili oligo elementi.

MAGNEZIJ (Mg) - povećava jačinu i otpornost na koroziju

MANGAN (Mn) - povećava jačinu, obradljivost deformiranje, rekristalizacijsku temperaturu, otpornost na koroziju i ograničava rast zrna pri rastvornom žarenju

BAKAR (Cu) - ojačava leguru, ali pogoršava obradljivost deformiranjem i otpornost na koroziju

CINK (Zn) – isto kao i bakar; ojačava leguru, ali pogoršava obradljivost deformiranjem i otpornost na koroziju [10]

4.2.1. OPIS PROBLEMA

Poduzeće Končar Energetski transformatori (KPT) pri izradi transformatora koristi dijelovi izrađene od silumina. To su siluminske glave i prirubnice koje se montiraju na provodnike. Prema QA-TDU¹⁴ to su odljevci aluminija ($AlMgSi_7\text{ wa}$) otporni na koroziju i SF6, plinsko nepropusni i uljno nepropusni odljevi.

Da bi poduzeće prihvatiло pošiljku od dobavljača odljevci moraju zadovoljavati normu DIN1725, tj. udjeli komponenata moraju biti u točno propisanim intervalima i tvrdoća mora iznositi između 75 i 110 HB.

Odljevci se još testiraju i na nepropusnost. Ispitivanje nepropusnosti vrši se pod vodom, pri čemu temperature vode i odljevka moraju biti približno jednake temperaturi okoline. Odljev se smatra nepropusnim ako se nakon 15 minuta pod vodom ne pojave nikakvi mjehurići zraka.



Slika 38 Transformator u ispitnoj stanici

¹⁴ QA tehničko dobavni uvjet

Tablica 13 Norma DIN 1725

PRECICAST Aluminum Alloys						
<i>Mechanical properties</i>	DIN 1725	DIN 1725	<i>Chemical Composition</i>	DIN 1725	DIN 1725	
	AlMgSi10 wa 359.0	AlMgSi7 wa 356.0		AlMgSi10 wa 359.0	AlMgSi7 wa 356.0	
Yield strength	Rp _{0,2} N/mm ² kpsi	120-260 18-38	190-240 28-35	Si Mg Mn Cu Fe Ni Ti Zn	9,0 - 11,0 0,2 - 0,5 0,1 - 0,4 < 0,3 < 0,6 < 0,1 < 0,15 < 0,3	6,5 - 7,5 0,25 - 0,45 < 0,1 < 0,05 < 0,18 0,001 - 0,2 < 0,07
Tensile Strength	Rm N/mm ² kpsi	220-320 32-46	230-310 33-45	Balance: per Single Element percentage of Total	< 0,05 < 0,15	< 0,03 < 0,1
Elongation	A5 %	1-3	2-5			
Brinell Hardness	HB 5/250	80-110	75-110			
Youngs Modulus	KN/mm ² Mpsi	70 10	70 10	1 ksi = 6.894.757 Pa = 6,894757 Mpa = 6,894757 N/mm²		
Poison's ratio		0,35	0,35			

4.2.2. PRISTUP PROBLEMU

U primjeru 1 pristup problemu je bio klasičan; na temelju broja komponenata određivala se elementarna rešetka, te se na temelju zadanih ograničenja kreirala pseudoelementarna rešetka u kojoj su se potom odredivale točke pokusa.

U ovom primjeru pristup je malo drugačiji. Budući da poduzeće KPT već godinama kupuje i u izradi transformatora koristi siluminske odljevke dostupni su podaci o mješavini. Sakupljeno je ukupno podataka o 75 odljevaka (37 glava i 38 prirubnica) u razdoblju od 2003. do 2009. godine. Za svaki odljevak navedeni su udjeli pojedinih komponenata i izmjerena je funkcija odziva (tvrdoća), stoga se smjese silumina od kojih su izrađeni odljevci mogu smatrati točkama pokusa. Na taj način se štedi vrijeme koje je potrebno da se odaberu točke za pokus, vrijeme koje je potrebno da se taline izliju i naprave mjerjenja, a ujedno se štedi i novac. Tako korišteni podaci se nazivaju „povijesni podaci“¹⁵.

Budući da se smjesa silumina sastoji od osam komponenata, elementarna rešetka je 7-dimenzionalna, pa ju je stoga nemoguće prikazati u prostoru. Na temelju ograničenja o udjelima komponenata iz norme DIN 1725 određuje se pseudoelementarna rešetka, koju je također nemoguće u prostoru prikazati jer je 7-dimenzionalna.

U tablici 14 su prikazani prikupljeni podaci za odljevke. Budući da je predviđeno da se za svaki odljevak vrši šest mjerena pri ispitivanju tvrdoće, a kao što je vidljivo iz tablice 14, vršeno je većinom po dva ili tri mjerena za daljnju analizu uzeta je srednja vrijednost mjerena tvrdoće za svaki odljevak kao referentna.

¹⁵ Eng. historical data

Tablica 14 Podaci o odljevcima

No.	Šifra	Pozicija	Godina	Ispitivač	Šarža	Silicij Si %	Željezo Fe %	Bakar Cu %	Mangan Mn %	Magnezij Mg %	Cink Zn %	Titan Ti %	Aluminij Al %	Tvrdoća [HB]						Srednja vrijednost	
														Mjerenje							
														1.	2.	3.	4.	5.	6.		
1	103101	1	2003	1	2	6,997	0,082	0,00128	0,013	0,34	0,003	0,122	92,42	107	95	85	91	93		94,2	
2	103102	1	2003	1	2	6,997	0,082	0,00128	0,013	0,34	0,003	0,122	92,42	89	97	97				94,3	
3	103103	1	2003	1	2	6,997	0,082	0,00128	0,013	0,34	0,003	0,122	92,42	93	93	89	89			91,0	
4	103104	1	2003	1	5	7,075	0,082	0,00125	0,0135	0,372	0,0029	0,121	92,31	99	95	102	97	97	89	96,5	
5	103105	1	2003	1	6	7,123	0,09	0,00139	0,014	0,312	0,0046	0,126	92,31	91	91	95	102	89	87	92,5	
6	105206	1	2005	2	20	6,84	0,09	0,009	0,01	0,38	0,003	0,14	92,49	95	87					91,0	
7	105207	1	2005	2	19	6,98	0,1	0,009	0,01	0,42	0,003	0,13	92,328	95	93					94,0	
8	105208	1	2005	2	19	6,98	0,1	0,009	0,01	0,42	0,003	0,13	92,328	91	93					92,0	
9	105209	1	2005	2	23	7,31	0,12	0,01	0,01	0,34	0,005	0,14	92	78	82					80,0	
10	105210	1	2005	2	27	7	0,12	0,01	0,01	0,36	0,004	0,14	92,32	97						97,0	
11	105211	1	2005	2	26	7,17	0,12	0,01	0,008	0,36	0,005	0,14	92,15	102	91					96,5	
12	105212	1	2005	2	24	7,14	0,13	0,01	0,01	0,35	0,005	0,15	92,17	93	89					91,0	
13	105213	1	2005	2	25	6,96	0,12	0,01	0,09	0,37	0,004	0,15	92	93	91					92,0	
14	106214	1	2006	2	32	7,19	0,12	0,02	0,01	0,35	0,0001	0,15	92,13	93						93,0	
15	106215	1	2006	2	33	7,16	0,13	0,02	0,008	0,36	0,002	0,15	92,15	99						99,0	
16	106216	1	2006	2	34	7,12	0,13	0,02	0,008	0,39	0,002	0,12	92,18	91						91,0	
17	106217	1	2006	2	38	6,8	0,12	0,016	0,009	0,35	0,005	0,14	92,54	93	91					92,0	
18	106218	1	2006	2	45	7,07	0,1	0,003	0,01	0,43	0,002	0,14	92,22	93						93,0	
19	106219	1	2006	2	51	7,12	0,12	0,007	0,01	0,41	0,002	0,15	92,1	93						93,0	
20	106220	1	2006	2	48	7,27	0,12	0,004	0,01	0,42	0,002	0,14	92	98						98,0	
21	106221	1	2006	2	49	7,09	0,11	0,006	0,01	0,4	0,002	0,15	92,2	99						99,0	
22	106222	1	2006	2	52	7,02	0,11	0,006	0,009	0,44	0,002	0,15	92,25	93	96					94,5	

PRIMJERI IZ PROIZVODNE PRAKSE

No.	Šifra	Pozicija	Godina	Ispitivač	Šarža	Silicij Si %	Željezo Fe %	Bakar Cu %	Mangan Mn %	Magnezij Mg %	Cink Zn %	Titan Ti %	Aluminij Al %	Tvrdoća [HB]						Srednja vrijednost
														Mjerenje						
														1.	2.	3.	4.	5.	6.	
23	106223	1	2006	2	54	7,24	0,11	0,01	0,01	0,41	0,003	0,13	92,06	93	92					92,5
24	107224	1	2007	2	55	6,95	0,09	0,005	0,004	0,38	0,001	0,15	92,4	91	93					92,0
25	107225	1	2007	2	58	7,2	0,1	0,005	0,005	0,36	0,003	0,14	92,16	91	92					91,5
26	107226	1	2007	2	59	7,03	0,1	0,004	0,003	0,39	0,002	0,14	92,31	95	99					97,0
27	107227	1	2007	2	64	7,27	0,1	0,007	0,004	0,37	0,005	0,12	92,09	99	96					97,5
28	107228	1	2007	2	69	7,1	0,09	0,003	0,001	0,36	0,003	0,13	92,28	93	95					94,0
29	107229	1	2007	2	70	7,08	0,09	0,002	0,001	0,4	0,003	0,16	92,23	92	93					92,5
30	108230	1	2008	2	91	6,88	0,1	0,004	0,01	0,4	0,001	0,12	92,45	96	96	97				96,3
31	108231	1	2008	2	90	7,02	0,12	0,007	0,023	0,42	0,002	0,12	92,28	89	94	95				92,7
32	108232	1	2008	2	88	6,75	0,1	0,001	0,02	0,43	0,002	0,11	92,54	89	90	93				90,7
33	108233	1	2008	2	94	7,25	0,1	0,002	0,002	0,34	0	0,123	92,16	90	91					90,5
34	108234	1	2008	2	96	7,18	0,1	0,002	0,003	0,319	0	0,125	92,25	92	93					92,5
35	108235	1	2008	2	102	7,14	0,11	0,008	0,01	0,36	0,005	0,13	92,2	94	95	92				93,7
36	108236	1	2008	2	103	6,99	0,11	0,008	0,01	0,34	0,004	0,15	92,36	91	92	91				91,3
37	109237	1	2009	2	120	6,89	0,12	0,02	0,005	0,35	0,003	0,14	92,44	89	93					91,0
38	203101	2	2003	1	5	7,0758	0,082	0,00125	0,0135	0,372	0,0029	0,121	92,31	102	102	97	95	97	89	97,0
39	203102	2	2003	1	3	7,129	0,088	0,00134	0,014	0,363	0,003	0,12	92,26	81	89	89	93	85		87,4
40	203103	2	2003	1	1	6,95946	0,08539	0,00136	0,01428	0,30884	0,00341	0,1204	92,492	95	91	87	81	85	89	88,0
41	205204	2	2005	2	20	6,84	0,09	0,009	0,01	0,38	0,003	0,14	92,49	87	95					91,0
42	205205	2	2005	2	19	6,98	0,1	0,009	0,01	0,42	0,003	0,13	92,328	99	99	97				98,3
43	205206	2	2005	2	22	6,81	0,09	0,003	0,01	0,39	0,002	0,13	92,54	97						97,0
44	205207	2	2005	2	21	6,84	0,09	0,004	0,01	0,37	0,002	0,13	92,52	89	89					89,0
45	205208	2	2005	2	23	7,31	0,12	0,01	0,01	0,34	0,005	0,14	92	93	95					94,0
46	205209	2	2005	2	24	7,14	0,13	0,01	0,01	0,35	0,005	0,15	92,17	85						85,0
47	205210	2	2005	2	25	6,96	0,12	0,01	0,09	0,37	0,004	0,15	92	89						89,0

PRIMJERI IZ PROIZVODNE PRAKSE

No.	Šifra	Pozicija	Godina	Ispitivač	Šarža	Silicij Si %	Željezo Fe %	Bakar Cu %	Mangan Mn %	Magnezij Mg %	Cink Zn %	Titan Ti %	Aluminij Al %	Tvrdoća [HB]						Srednja vrijednost
														Mjerenje						
														1.	2.	3.	4.	5.	6.	
48	205211	2	2005	2	26	7,17	0,12	0,01	0,008	0,36	0,005	0,14	92,15	95						95,0
49	205212	2	2005	2	27	7	0,12	0,01	0,01	0,36	0,004	0,14	92,32	95	97					96,0
50	205213	2	2005	2	28	7,11	0,13	0,01	0,01	0,36	0,006	0,14	92	97						97,0
51	206214	2	2006	2	31	7,15	0,13	0,02	0,016	0,4	0,0008	0,13	92,13	104	91					97,5
52	206215	2	2006	2	39	7,02	0,13	0,02	0,007	0,38	0,002	0,14	92,27	91						91,0
53	206216	2	2006	2	35	7	0,13	0,02	0,009	0,38	0,002	0,15	92,28	97	96					96,5
54	206217	2	2006	2	36	6,97	0,13	0,02	0,006	0,37	0,002	0,15	92,32	97						97,0
55	206218	2	2006	2	37	7,04	0,13	0,02	0,006	0,37	0,002	0,14	92,27	99						99,0
56	206219	2	2006	2	44	7,06	0,11	0,004	0,008	0,36	0,002	0,14	92,28	102						102,0
57	206220	2	2006	2	42	7,3	0,15	0,005	0,02	0,35	0,002	0,13	92,01	99						99,0
58	206221	2	2006	2	47	7,14	0,12	0,004	0,01	0,41	0,002	0,14	92,15	93						93,0
59	206222	2	2006	2	50	7,04	0,12	0,005	0,01	0,41	0,002	0,14	92,24	89						89,0
60	206223	2	2006	2	53	7,21	0,11	0,004	0,006	0,38	0,002	0,15	92,11	95	99					97,0
61	207224	2	2007	2	56	7,11	0,09	0,004	0,002	0,4	0,001	0,15	92,22	99						99,0
62	207225	2	2007	2	57	7,19	0,11	0,005	0,008	0,34	0,003	0,14	92,19	94	97					95,5
63	207226	2	2007	2	56	7,11	0,09	0,004	0,0001	0,4	0,001	0,15	92,22	99	102					100,5
64	207227	2	2007	2	60	6,99	0,09	0,003	0,002	0,39	0,002	0,13	92,35	94	96					95,0
65	207228	2	2007	2	65	7,15	0,1	0,006	0,009	0,38	0,004	0,14	92,18	98	93					95,5
66	207229	2	2007	2	66	7,19	0,1	0,006	0,009	0,36	0,005	0,15	92,15	95	97					96,0
67	207230	2	2007	2	68	7,15	0,09	0,003	0,001	0,38	0,004	0,16	92,17	91	93					92,0
68	207231	2	2007	2	67	7,07	0,09	0,004	0,003	0,36	0,004	0,13	92,31	95	97					96,0
69	208232	2	2008	2	93	7,1	0,1	0,003	0,007	0,35	0,0007	0,13	92,28	94	95					94,5
70	208233	2	2008	2	92	7,15	0,1	0,005	0,003	0,34	0	0,13	92,25	93	94					93,5
71	208234	2	2008	2	99	7,11	0,12	0,007	0,01	0,36	0,005	0,12	92,23	90	90	94				91,3
72	208235	2	2008	2	100	7,14	0,12	0,009	0,017	0,36	0,005	0,11	92,21	96	95					95,5

PRIMJERI IZ PROIZVODNE PRAKSE

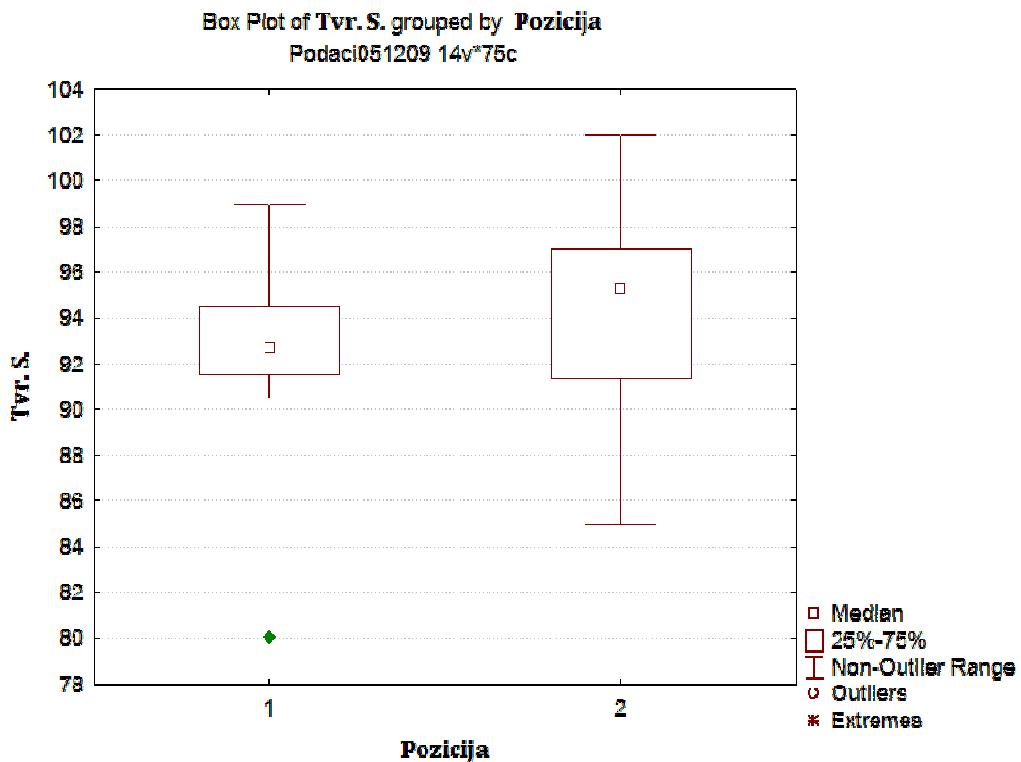
No.	Šifra	Pozicija	Godina	Ispitivač	Šarža	Silicij Si %	Željezo Fe %	Bakar Cu %	Mangan Mn %	Magnezij Mg %	Cink Zn %	Titan Ti %	Aluminij Al %	Tvrdoća [HB]						Srednja vrijednost
														Mjerenje						
1.	2.	3.	4.	5.	6.															
73	208236	2	2008	2	101	7,1	0,11	0,007	0,01	0,37	0,04	0,13	92,24	91	94				92,5	
74	209237	2	2009	2	114	7	0,12	0,02	0,005	0,39	0,002	0,12	92,31	88	92	93			91,0	
75	209238	2	2009	2	119	7,07	0,12	0,02	0,006	0,41	0,001	0,13	92,21	93	94				93,5	

4.2.3. PREDANALIZA PODATAKA

Kako bi se dobio uvid u prikupljene podatke u programskom paketu Statistica 7.0 napravljena je temeljita obrada podataka.

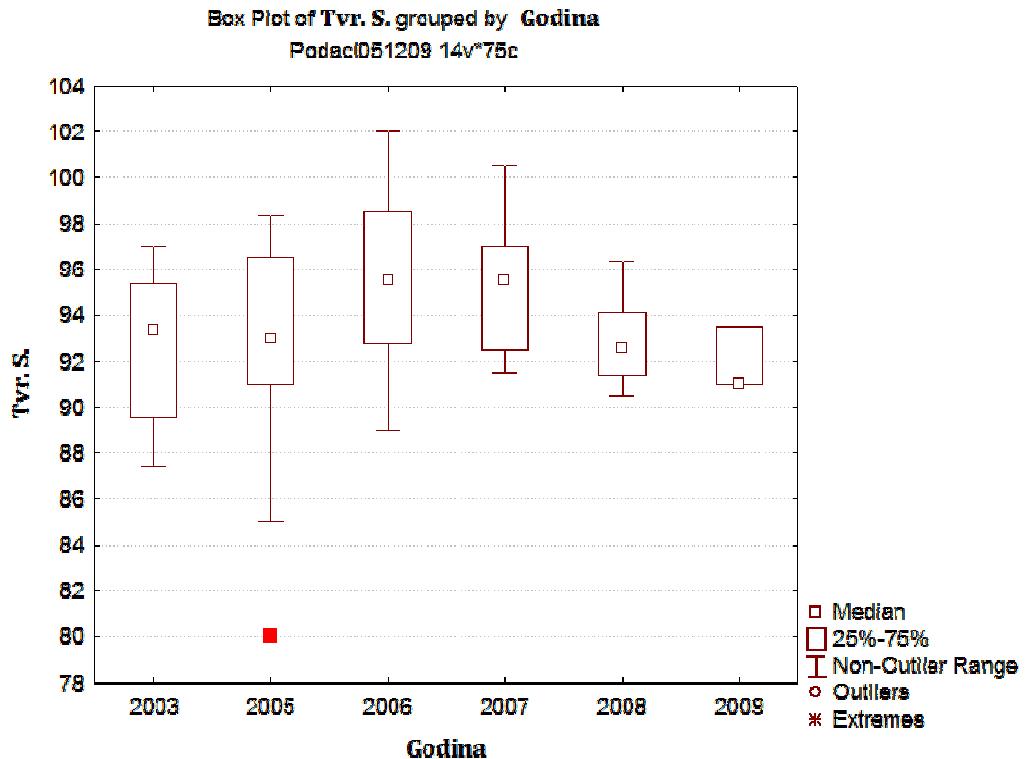
Svaka od komponenata smjese, te odzivna veličina tvrdoča (uzeta je srednja vrijednost) su ispitane da li su distribuirane po normalnoj razdiobi. Testiranje se vršilo χ^2 -testom i Kolmogor-Smirnov testom. Oba testa su potvrdila da su komponente silicij, magnezij, aluminij, te odzivna veličina tvrdoča distribuirane po normalnoj razdiobi. U prilogu D nalazi se kompletna statistička obrada.

Kako bi se dobio uvid u raspoređenost tvrdoče po pozicijama napravljen je Box-Wisker dijagram (slika 39). Iz dijagrama se vidi da tvrdoče mjerene na glavama (pozicija 1) manje rasipaju od tvrdoče mjereneih na prirubnicama (pozicija 2).



Slika 39 Box-Wisker dijagram; tvrdoča raspoređena po pozicijama

Slika 40 prikazuje Box-Wisker dijagram na kojem se vidi kako su se tvrdoče mijenjale kroz godine. 2003. Rasipanja su bila velika, dok su 2009. rasipanja smanjena na mali interval od 91 do 93 HB.



Slika 40 Box-Wisker dijagram; promjena tvrdoče kroz godine

Na obje slike također možemo primijetiti da su se pojavila dva značajna odstupanja. Na slici 39 to odstupanje je označeno zelenim rombom kod pozicije 1, a na slici 40 crveni kvadratom u 2005. godini. Obadva odstupanja su ispitana i zaključeno je da ne utječu značajno na izabrane modele.

4.2.4. ANALIZA ODZIVA

Analiza odziva se vrši na isti način kao i u primjeru 1, te je kompletna statistička obrada podataka i postupak matematičkog modeliranja veličina iz tablice 14 nalazi se u prilogu E u tablici E.1.

Iz analize različitih vrsta modela proizlazi da je matematički model tvrdoće linearan, međutim tijekom daljnje analize utvrđeno je da bolje odgovara kvadratni model koji je modificiran korištenjem Backward metode.

Backward metoda je metoda koja ispituje značajnost članova u regresijskoj jednadžbi, te na temelju njihove značajnosti u jednadžbi ostavlja značajne članove, a izbacuje one neznačajne. Samom korekcijom regresijske jednadžbe mijenja se značajnost modela.

U tablici E.2 u prilogu E u dijelu tablice pod nazivom „Analysis of variance“ se vidi da F vrijednost kategorije Model iznosi 2,13 što implicira da je model značajan. Postoji samo 2,23% vjerojatnosti da je vrijednost kategorije Model ovako visoka zbog slučajnih rasipanja. Kada su vrijednosti „Prob>F“ za određene članove odzivnog polinoma manje od 0,05 onda su ti članovi značajni, a kada su veći od 0,1 članovi nisu značajni. U ovom slučaju značajni članovi su AE, CH, EH i FG.

Vrijednost „Lack of fit“ kako je već prije navedeno označava mjeru neprilagođivanja modela. U ovom slučaju iznosi 1,58 što implicira da ova kategorija nije značajna. Postoji 22,01% vjerojatnosti da je vrijednost ove kategorije tako niska zbog slučajnih rasipanja. Neznačajnost ove varijable je poželjna.

Varijabla „Adeq precision“ predstavlja omjer signala i slučajnih rasipanja. Poželjno je da taj omjer bude veći od 4. U ovom slučaju iznosi 6,457 što indicira da je signal dobar. Vrijednost varijable „Pred R-squared“ koja predstavlja vrijednost predviđenih R-kvadrata iznosi 0,3320 što ne odstupa bitno od vrijednosti 0,1762 varijable „Adj R-squared“ koja predstavlja vrijednost prilagođenih R-kvadrata. Ovakvo odstupanje je poželjno.

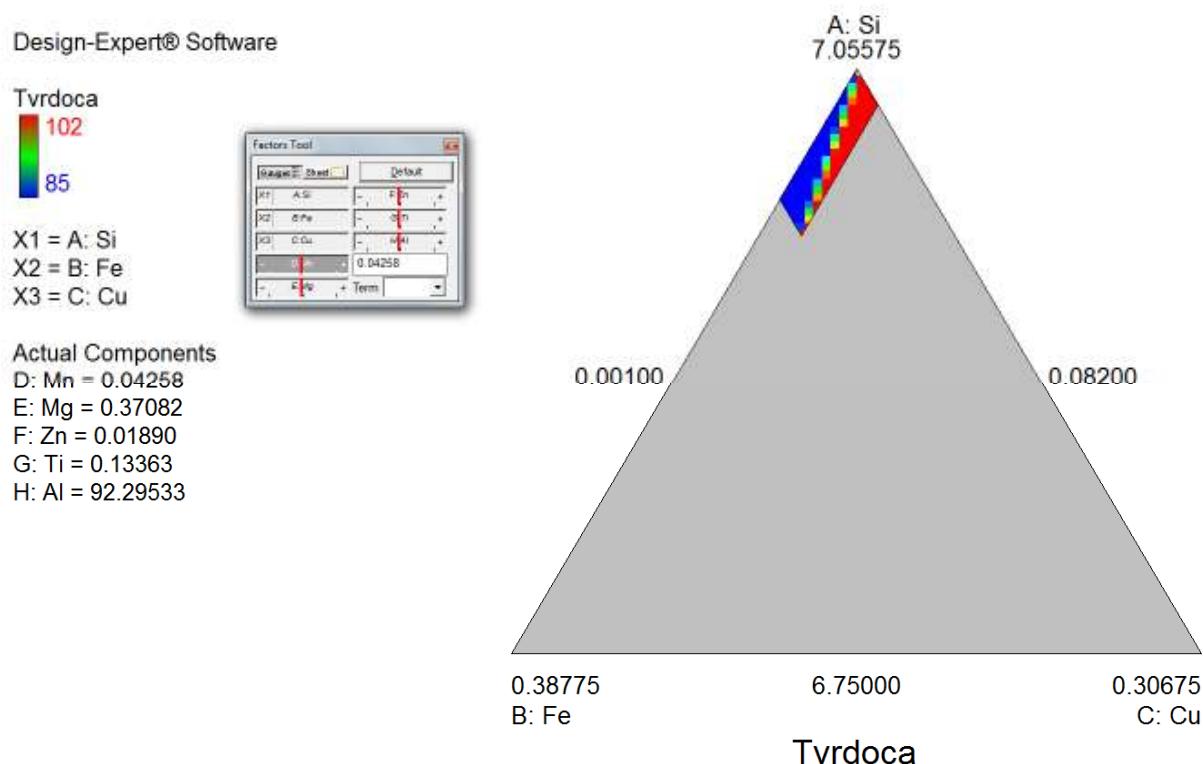
Ako postoji „grubo“ odstupanje neke od točaka modela od stvarne izmjerene vrijednosti promatranog svojstva onda se takva točka označuje kao „Outlier“. Postojanje „Outlier“ točaka u tablici E.2 u prilogu E u dijelu tablice pod nazivom „Diagnostic Case Statistic“ promatra se u koloni „Externally Studentized Residual“. Ukoliko postoji „Outlier“ pored vrijednosti se nalazi znak *. U ovom slučaju nema vrijednosti označene s „Outlier“ pa se dolazi do zaključka da je slaganje rezultata pokusa i dobivenih matematičkih modela u svim točkama pokusa dobro.

Izraz predstavlja matematički model za Tvrdoću:

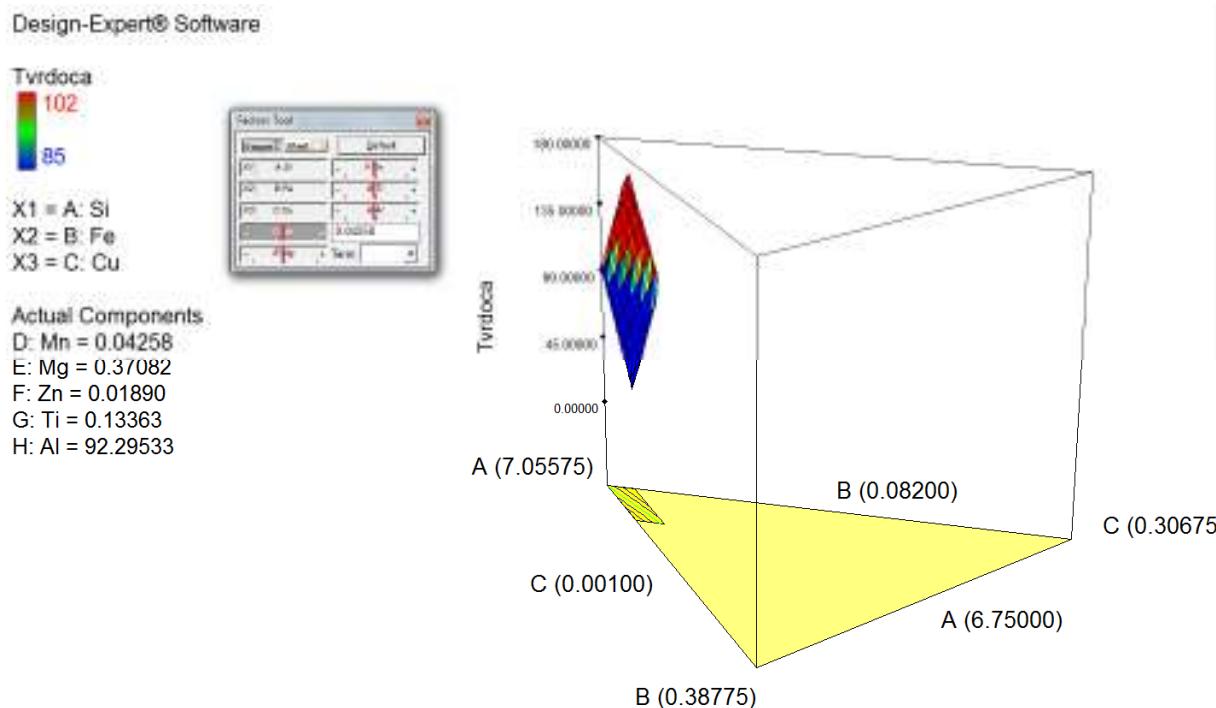
```
Tvrdoca =
-8.54223 * Si
+517.33096 * Fe
+5.81462E+005 * Cu
+248.77097 * Mn
-92031.83488 * Mg
+14279.45728 * Zn
+539.27279 * Ti
-1.05437 * Al
-5181.66444 * Si * Cu
+944.85020 * Si * Mg
-59916.76971 * Fe * Zn
+2.16150E+005 * Cu * Zn
-5907.93628 * Cu * Al
+928.37834 * Mg * Al
-68779.17197 * Zn * Ti
```

(4.49)

U ovom primjeru nemoguće je dati dvodimenzionalne i trodimenzionalne prikaze odzivne površine kao u primjeru 1, jer je ovo smjesa koja se sastoji od 8 komponenata i trebala bi se prikazati u 7-dimenzionalnom prostoru što je nemoguće, ali moguće je napraviti prostorni prikaz na način da se tri komponente smjese postave kao konstantne, a da se četvrta komponenta mijenja. Na slikama 41 i 42 kao konstante su postavljeni silicij, željezo i bakar, a četvrta komponenta je mangan, te je na taj način dan uvid u pseudo elementarni prostor rešetke.



Slika 41 Dvodimenzionalni prikaz pseudoelementarnog prostora rešetke silumina



Slika 42 Trodimenzionalni prikaz pseudoelementarnog prostora rešetke silumina

4.2.5. OPTIMIZACIJA

Kriteriji za optimizaciju prikazani su u tablici 15.

Tablica 15 Kriteriji za optimizaciju siluminskih odljevaka

Komponente smjese	Raspon	Objašnjenje	Dodatni uvjet
Si	6,75-7,31	raspon između minimalne i maksimalne izmjerene vrijednosti (raspon zadovoljava normu DIN 1725)	
Fe	0,082-0,15		
Cu	0,001-0,02		
Mn	0,0001-0,09		
Mg	0,30883-0,44		
Zn	0-0,04		
Ti	0,11-0,16		
Al	92,034-92,587		
Mjereni odziv	Raspon	Objašnjenje	Dodatni uvjet
Tvrdoća	90-95 HB	Iz slike 37 se vidi da se tijekom godina smanjivalo rasipanje tvrdoća te je 2008 i 2009 to rasipanje u intervalu 90-95NB	93HB

NUMERIČKA OPTIMIZACIJA

Numerička optimizacija se i ovdje vrši na isti način kao u primjeru 1. U ovom slučaju softver je ponudio 63 rješenja. Sva rješenja imaju maksimalnu „poželjnost“, što znači da je moguće dobiti optimalnu mješavinu s postavljenim uvjetima u 63 različite kombinacije miješanja komponenata, što omogućuje proizvođaču da prilagodi miješanje sastojaka smjese stanju potrebnih komponenata na skladištu.

U prilogu F će biti prikazano detaljno samo prvo rješenje.

GRAFIČKA OPTIMIZACIJA

U ovom slučaju grafička optimizacija nije moguća. Kao što je već prije navedeno, grafička optimizacija se u programskom paketu Design-Expert može napraviti za smjesu s najviše tri komponente.

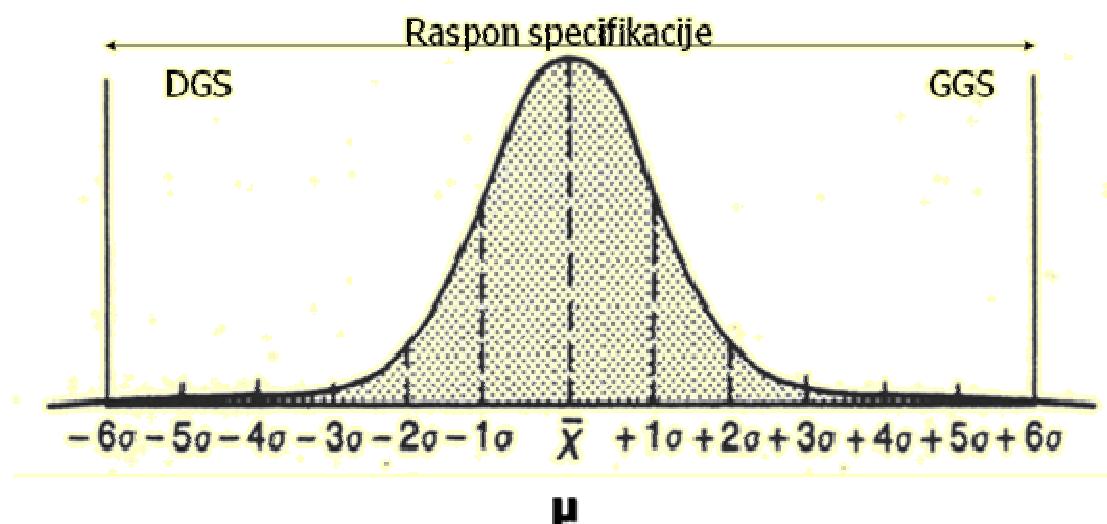
5. PROCJENA EFEKATA

Da bi se efekti mogli ispravno procijeniti prvo je potrebno odabratи jedan od pristupa za mјerenje učinkovitosti poslovnih sustava. Posljednjih petnaest godina pojavljuju se brojnih pristupa i metodologije što vode poboljšanju učinkovitosti poslovnih sustava, među kojima se posebno ističe Šest sigma¹⁶ (program, metodologija, filozofija) pristup.

Osnova Šest Sigma (6σ) pristupa je standarno odstupanje kao temeljni parametar normalne razdiobe:

$$f(x, \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

gdje μ predstavlja očekivanje (u praksi: aritmetička sredina), a σ standardno odstupanje. Slika 43 prikazuje graf normalne razdiobe.



Slika 43 Graf normalne razdiobe [11]

Iz tablice 16 se može vidjeti da Šest Sigma pristup zagovara razinu kvalitete poslovanja na nivou višem od 99%, tj. dopušta se greška od 0,002%. 99% sukladnih proizvoda i usluga znači 20 000 poštanskih pošiljki na sat, 15 min/dan zagađenja pitke vode, 5 000 nekorektno izvedenih medicinskih zahvata na tjedan, 2 nekorektno prizemljena zrakoplova dnevno (u glavnim zračnim lukama), 200 000 pogrešno propisanih lijekova godišnje, bez električne energije odprilike 7 sati mjesecno, itd [11].

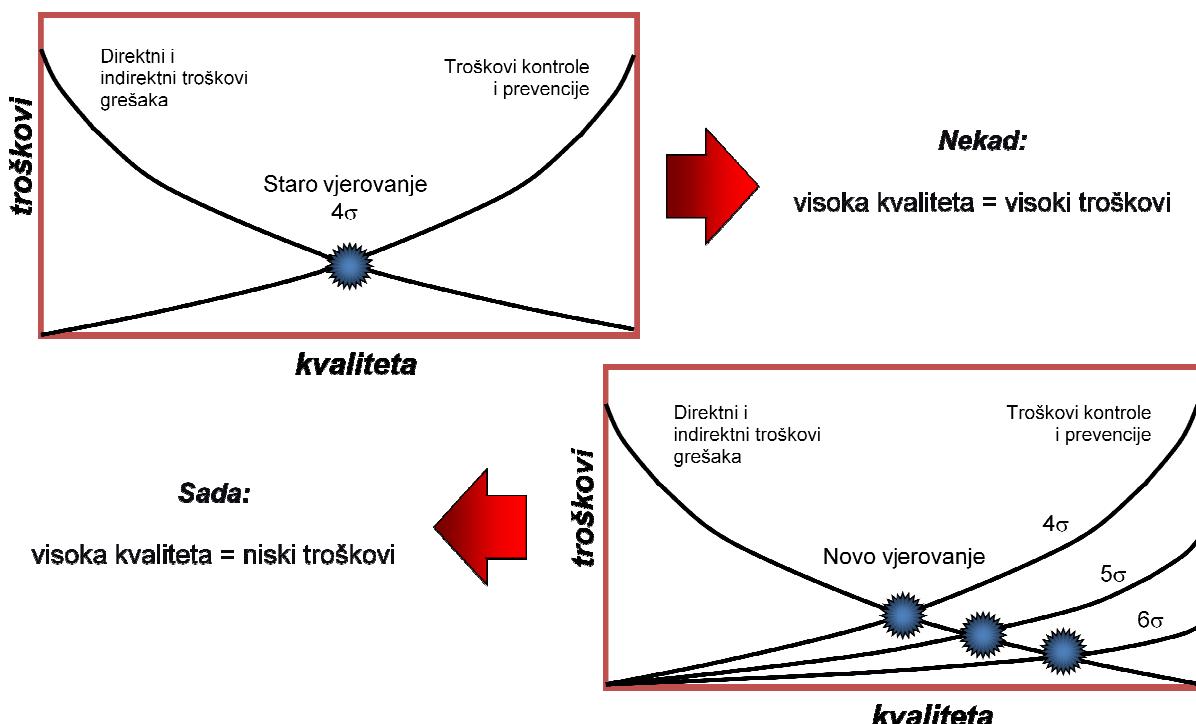
U industriji se danas teži proizvodnji na razini 6σ , dok se u zrakoplovnim lukama i bolnicama sve više pokušava preći na 12σ razinu poslovanja.

¹⁶ Eng. Six Sigma

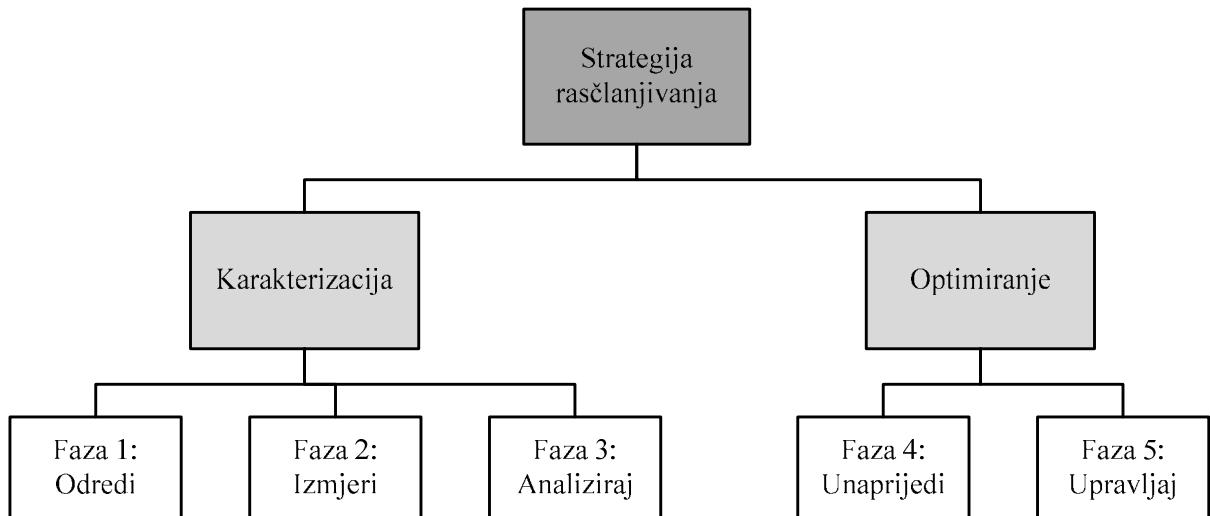
Tablica 16 Granice specifikacije

Granice (raspon) specifikacije	U granicama %
$\pm 1\sigma$	68,27
$\pm 2\sigma$	95,45
$\pm 3\sigma$	99,73
$\pm 4\sigma$	99,9937
$\pm 5\sigma$	99,999943
$\pm 6\sigma$	99,999998

Nekada je visoka kvaliteta značila ujedno i visoki troškovi, dok danas pristupi kao Šest Sigma omogućuju visoku kvalitetu pri niskim troškovima (Slika 44).

**Slika 44** Novo gledanje na kvalitetu [11]

Metodologija rješavanja problema Šest Sigma pristupom prikazana je na slici 45. Prvo je potrebno Odrediti problem, napraviti sav potrebna mjerenja, te ga potom detaljno analizirati. Kada su završene te tri faze kreće se u optimiranje kako bi se popravilo trenutno stanje. Optimiranje se provodi u dvije osnovne faze: Unaprjeđenje i Upravljanje.



Slika 45 Metodologija rješavanja problema [11]

U primjeru 1 nije moguće dati procjenu efekata, jer ne postoji zabilježeno prijašnje stanje. Odljevci od nodularnog lijeva su novi proizvod, te će procjenu efekata biti moguće napraviti najranije za godinu dana. Do tada je uputno pratiti proces, sve bilježiti te raditi pomne analize.

U primjeru 2 rađena je optimizacija na temelju povijesnih podataka dobivenih iz poduzeća koje kupuje već gotove siluminske odljevke, stoga je i ovdje nemoguće procijeniti efekte, jer su svi dobiveni podaci već filtrirani. Ovdje je analiza postojećeg stanja omogućila poduzeću koje naručuje odljevke da dobije uvid u proces. Budući da je rasipanje zahtjeva tvrdoće veliko (75-110 HB), poduzeće sada može ukoliko to bude potrebno zahtijevati točno određenu tvrdoću odljevaka izrađenih iz komponenata u točno određenim udjelima, a da se pritom izgubi minimalno potrebno vremena, što povećava konkurentnost tog poduzeća na tržištu.

6. ZAKLJUČAK

Kao što je u uvodnom dijelu rada spomenuto pri pokušaju određivanja najbolje kombinacije sastojaka smjese često se koristi postupak pokušaja i pogreške gdje je isprobana velik broj kombinacija sastojaka. Ta metoda može zahtijevati velike troškove u smislu vremena i novca.

Kako bi se to izbjeglo razvijene su metode planiranja pokusa. Tim metodama moguće je pratiti tehnološko-tehničke mogućnosti proizvodnje u odnosu na propisane norme kvalitete. Na taj način, kako bi se dobio uvid u prostor elementarnih događaja, potrebno je napraviti relativno mali broj kombinacija sastojaka smjese, a sve ostale kombinacije moguće je simulirati. Tako se uvelike štedi vrijeme i novac, te se povećava konkurentnost na tržištu. Kada se jednom dobiju simulirani podaci, javlja se fleksibilnost proizvodnje jer se na brz način mogu mijenjati udjeli sastojaka kako bi se dobila druga svojstva smjese.

Ovim diplomskim radom željelo se prikazati smjese kao model, te na stvarnim primjerima prikazati i objasniti detalje. U prvom primjeru detaljno je prikazana i razrađena metodologija problema optimiranja smjesa, a u drugom primjeru je prikazano kako je moguće iskoristiti već postojeće podatke kako bi se na taj način dodatno uštedilo vrijeme i novac.

Kako bi se održala konkurentnost i fleksibilnost na tržištu potrebno je bilježiti i analizirati podatke o smjesama i proizvodima, da bi se osiguralo kontinuirano poboljšavanje.

7. LITERATURA

- [1] Kemijski rječnik & glosar
URL: http://www.ktf-split.hr/glossary/hr_o.php?def=smjesa, 2010.
- [2] Wikipedija URL: <http://bs.wikipedia.org/wiki/Asfalt>, 2010.
- [3] J. A. Cornell, Experiments with mixtures, John Wiley & Sons, Inc., USA, 1981.
- [4] V. Panić, Utjecaj plinova pri zavarivanju na svojstva zavara – magistarski rad, Zagreb, 2001.
- [5] D. Vučina, Metode inženjerske numeričke optimizacije, FESB, Split, 2005.
- [6] Inženjerski Priručnik 4, Školska knjiga, Zagreb, 2002.
- [7] Z. Zenzerović, Predavanja, Rijeka, 2009.
- [8] Z. Glavaš, K. Terzić, Metalografska analiza nodularnog lijeva, Sisak, 2008.
- [9] Design-Expert manual, Stat-Ease, 2009.
- [10] D. Adamović, Mašinski materijali – predavanje
- [11] N. Šakić, Six sigma – Program upravljanja poslovanjem i kvalitetom, Zagreb, 2009.

PRILOG A

Tablica A. 1. Ulazni parametri za obradu u Design-Expertu 7.0 – nodularni lijev

Design Summary

Study Type	Mixture	Runs	14								
Initial Design	D-optimal	Point Exchange		Blocks	No Blocks						
Design Model	Quadratic										
Component	Name	Units	Type	Low Actual	High Actual	Low Coded	High Coded	Mean	Std. Dev.		
A	Celik		Mixture	0.100	0.800	0.000	1.000	0.391	0.225		
B	Sorel		Mixture	0.100	0.600	0.000	0.714	0.334	0.206		
C	Povrat		Mixture	0.100	0.500	0.000	0.571	0.275	0.147		
L_Pseudo Coding											
				Total =	1.00						
Response	Name	Units	Obs	Analysis	Minimum	Maximum	Mean	Std. Dev.	Ratio	Trans	Model
Y1	Granica razvlač N/mm ²		14	Polynomial	288.5	412	347.643	34.0978	1.42808	None	No model chose
Y2	Vlačna cvrstota N/mm ²		14	Polynomial	434	536	468.929	31.4437	1.23502	None	Quadratic
Y3	Istezljivost [A] %		14	Polynomial	7.1	26.85	17.4107	6.87686	3.78169	None	Cubic
Y4	Nodularnost		14	Polynomial	47	73.5	64.6429	7.73542	1.56383	None	Special Cubic
Y5	Udio ferita %		14	Polynomial	62.83	99.05	90.1829	12.2696	1.57648	None	Cubic
Y6	Udio perlita %		14	Polynomial	0.95	37.17	9.81714	12.2696	39.1263	None	Cubic
Y7	Broj nodula/mm ²		14	Polynomial	74	262	193.393	44.3252	3.54054	None	Cubic

Tablica A. 2 Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Vlačna čvrstoća**Sequential Model Sum of Squares [Type I]**

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value
Mean vs Total	1.692E+006	1	1.692E+006		
Linear vs Mean	7850.11	2	3925.05	5.12	0.0268
<u>Quadratic vs Linear</u>	<u>5894.30</u>	<u>3</u>	<u>1964.77</u>	<u>6.21</u>	<u>0.0175</u> <u>Suggested</u>
Sp Cubic vs Quadratic	341.08	1	341.08	1.09	0.3313
Cubic vs Sp Cubic	729.23	3	243.08	0.66	0.6160
Residual	1462.50	4	365.62		
Total	1.708E+006	14	1.220E+005		

"*Sequential Model Sum of Squares [Type I]*". Select the highest order polynomial where the additional terms are significant and the model is not aliased.

Lack of Fit Tests

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value
Linear	6964.61	7	994.94	2.72	0.1751
<u>Quadratic</u>	<u>1070.30</u>	<u>4</u>	<u>267.58</u>	<u>0.73</u>	<u>0.6152</u> <u>Suggested</u>
Special Cubic	729.23	3	243.08	0.66	0.6160
Cubic	0.000	0			
Pure Error	1462.50	4	365.63		

"*Lack of Fit Tests*". Want the selected model to have insignificant lack-of-fit.

Model Summary Statistics

Source	Std. Dev.	R-Squared	Adjusted R-Squared	Predicted R-Squared	PRESS
Linear	27.68	0.4823	0.3881	0.1438	13936.16
<u>Quadratic</u>	<u>17.79</u>	<u>0.8444</u>	<u>0.7471</u>	<u>0.3235</u>	<u>11011.87</u> <u>Suggested</u>
Special Cubic	17.69	0.8653	0.7499	-0.0428	16973.51
Cubic	19.12	0.9102	0.7080		+

+ Case(s) with leverage of 1.0000: PRESS statistic not defined

"*Model Summary Statistics*". Focus on the model maximizing the "Adjusted R-Squared" and the "Predicted R-Squared".

ANOVA for Mixture Quadratic Model***** Mixture Component Coding is L_Pseudo. *******Analysis of variance table [Partial sum of squares - Type III]**

Source	Sum of		Mean		F Value	p-value
	Squares	df	Square	Value		
Model	13744.41	5	2748.88	8.68	0.0043	
<i>Linear Mixture</i>	7850.11	2	3925.05	12.40	0.0035	
<i>AB</i>	5875.62	1	5875.62	18.56	0.0026	
<i>AC</i>	56.11	1	56.11	0.18	0.6848	
<i>BC</i>	811.68	1	811.68	2.56	0.1480	
Residual	2532.80	8	316.60			
<i>Lack of Fit</i>	1070.30	4	267.58	0.73	0.6152	
<i>Pure Error</i>	1462.50	4	365.63			
Cor Total	16277.21	13				
Std. Dev.	17.79		R-Squared	0.8444		
Mean	347.64		Adj R-Squared	0.7471		
C.V. %	5.12		Pred R-Squared	0.3235		
PRESS	11011.87		Adeq Precision	7.424		

Diagnostics Case Statistics

Standard	Actual	Predicted			Studentized Residual	Internally Studentized Residual	Externally Studentized Residual	Influence on		
			Order	Value	Value	Residual	Leverage	Fitted Value	Cook's Distance	Run Order
1	376.00	372.98		3.02	0.359	0.212	0.199	0.149	0.004	3
2	325.50	315.42		10.08	0.462	0.772	0.751	0.696	0.086	4
3	304.00	317.30		-13.30	0.446	-1.004	-1.005	-0.901	0.135	11
4	288.50	312.48		-23.98	0.473	-1.856	-2.300	*-2.18	0.514	1
5	412.00	398.95		13.05	0.766	1.515	1.677	*3.03	*1.25	9
6	356.00	375.34		-19.34	0.440	-1.453	-1.584	-1.405	0.277	6
7	362.00	338.84		23.16	0.468	1.784	2.151	*2.02	0.466	5
8	389.00	393.60		-4.60	0.268	-0.302	-0.284	-0.172	0.006	12
9	356.00	358.51		-2.51	0.218	-0.159	-0.149	-0.079	0.001	13
10	351.00	363.03		-12.03	0.280	-0.797	-0.777	-0.484	0.041	8
11	331.50	312.48		19.02	0.473	1.472	1.612	1.526	0.324	7
12	313.50	315.42		-1.92	0.462	-0.147	-0.138	-0.128	0.003	2
13	320.00	317.30		2.70	0.446	0.204	0.191	0.171	0.006	14
14	382.00	375.34		6.66	0.440	0.500	0.475	0.422	0.033	10

* Exceeds limits

Current Transform: None

Box-Cox Power Transformation

Constant	95% CI		Best Lambda	Rec. Transform
	k	Low		
0.000	-3.01	7.80	2.40	None

Tablica A. 3. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Granica razvlačenja**Sequential Model Sum of Squares [Type I]**

Source	Sum of		Mean Square	F Value	p-value	
	Squares	df				
Mean vs Total	3.079E+006	1	3.079E+006			
Linear vs Mean	3902.62	2	1951.31	2.16	0.1618	
Quadratic vs Linear	<u>6901.93</u>	<u>3</u>	<u>2300.64</u>	<u>6.06</u>	<u>0.0186</u>	<u>Suggested</u>
Sp Cubic vs Quadratic	<u>1140.25</u>	<u>1</u>	<u>1140.25</u>	<u>4.21</u>	<u>0.0794</u>	<u>Suggested</u>
Cubic vs Sp Cubic	807.39	3	269.13	0.99	0.4831	
Residual	1089.75	4	272.44			
Total	3.092E+006	14	2.209E+005			

"*Sequential Model Sum of Squares [Type I]*". Select the highest order polynomial where the additional terms are significant and the model is not aliased.

Lack of Fit Tests

Source	Sum of		Mean Square	F Value	p-value	
	Squares	df				
Linear	8849.56	7	1264.22	4.64	0.0784	
Quadratic	<u>1947.63</u>	<u>4</u>	<u>486.91</u>	<u>1.79</u>	<u>0.2938</u>	<u>Suggested</u>
Special Cubic	<u>807.39</u>	<u>3</u>	<u>269.13</u>	<u>0.99</u>	<u>0.4831</u>	<u>Suggested</u>
Cubic	0.000	0				
Pure Error	1089.75	4	272.44			

"*Lack of Fit Tests*". Want the selected model to have insignificant lack-of-fit.

Model Summary Statistics

Source	Std.	Adjusted		Predicted		
	Dev.	R-Squared	R-Squared	R-Squared	PRESS	
Linear	30.06	0.2819	0.1514	-0.0558	14614.48	
Quadratic	<u>19.49</u>	<u>0.7806</u>	<u>0.6434</u>	<u>0.1923</u>	<u>11179.82</u>	<u>Suggested</u>
Special Cubic	<u>16.46</u>	<u>0.8629</u>	<u>0.7455</u>	<u>0.5409</u>	<u>6354.25</u>	<u>Suggested</u>
Cubic	16.51	0.9213	0.7441		+	

+ Case(s) with leverage of 1.0000: PRESS statistic not defined

"*Model Summary Statistics*". Focus on the model maximizing the "Adjusted R-Squared" and the "Predicted R-Squared".

ANOVA for Mixture Quadratic Model

*** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***

Analysis of variance table [Partial sum of squares - Type III]

Source	Sum of		Mean		F	p-value
	Squares	df	Square	Value		
Model	10804.54	5	2160.91	5.69	0.0157	
Linear Mixture	3902.62	2	1951.31	5.14	0.0367	
AB	6473.28	1	6473.28	17.05	0.0033	
AC	820.40	1	820.40	2.16	0.1798	
BC	396.96	1	396.96	1.05	0.3365	
Residual	3037.38	8	379.67			
Lack of Fit	1947.63	4	486.91	1.79	0.2938	
Pure Error	1089.75	4	272.44			
Cor Total	13841.93	13				
Std. Dev.	19.49		R-Squared	0.7806		
Mean	468.93		Adj R-Squared	0.6434		
C.V. %	4.16		Pred R-Squared	0.1923		
PRESS	11179.82		Adeq Precision	6.920		

Diagnostics Case Statistics

Standard	Actual		Predicted		Studentized Residual	Internally Studentized Residual	Externally Studentized Residual	Influence on Fitted Value		Cook's Distance	Run Order
	Order	Value	Value	Residual	Leverage			DFFITS			
1	505.00	495.11	9.89	0.359	0.634	0.609	0.456	0.038		3	
2	454.50	448.71	5.79	0.462	0.405	0.383	0.355	0.023		4	
3	441.50	440.50	1.00	0.446	0.069	0.065	0.058	0.001		11	
4	438.00	443.74	-5.74	0.473	-0.406	-0.383	-0.363	0.025		1	
5	514.00	528.76	-14.76	0.766	-1.565	-1.758	*-3.18	*1.33		9	
6	463.00	480.88	-17.88	0.440	-1.227	-1.274	-1.130	0.197		6	
7	434.00	442.91	-8.91	0.468	-0.627	-0.601	-0.564	0.058		5	
8	536.00	508.73	27.27	0.268	1.636	1.875	1.134	0.163		12	
9	478.00	479.91	-1.91	0.218	-0.111	-0.104	-0.055	0.001		13	
10	455.00	481.91	-26.91	0.280	-1.627	-1.861	-1.159	0.171		8	
11	461.50	443.74	17.76	0.473	1.255	1.310	1.240	0.235		7	
12	441.00	448.71	-7.71	0.462	-0.540	-0.515	-0.477	0.042		2	
13	442.50	440.50	2.00	0.446	0.138	0.129	0.116	0.003		14	
14	501.00	480.88	20.12	0.440	1.380	1.479	1.312	0.250		10	

* Exceeds limits

Current Transform: None

Box-Cox Power Transformation

Constant	95% CI		Best		Rec.
	k	Low	High	Lambda	
0.000				-3.00	None

Tablica A. 4. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Istezanje**Sequential Model Sum of Squares [Type I]**

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value
Mean vs Total	4243.86	1	4243.86		
Linear vs Mean	232.28	2	116.14	2.97	0.0929
Quadratic vs Linear	249.97	3	83.32	3.71	0.0614
<u>Sp Cubic vs Quadratic</u>	<u>104.80</u>	<u>1</u>	<u>104.80</u>	<u>9.78</u>	<u>0.0167</u>
<u>Cubic vs Sp Cubic</u>	<u>60.62</u>	<u>3</u>	<u>20.21</u>	<u>5.61</u>	<u>0.0645</u>
Residual	14.41	4	3.60		
Total	4905.94	14	350.42		

"*Sequential Model Sum of Squares [Type I]*". Select the highest order polynomial where the additional terms are significant and the model is not aliased.

Lack of Fit Tests

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value
Linear	415.39	7	59.34	16.48	0.0084
Quadratic	165.43	4	41.36	11.48	0.0182
<u>Special Cubic</u>	<u>60.62</u>	<u>3</u>	<u>20.21</u>	<u>5.61</u>	<u>0.0645</u>
<u>Cubic</u>	<u>0.000</u>	<u>0</u>			<u>Suggested</u>
Pure Error	14.41	4	3.60		

"*Lack of Fit Tests*". Want the selected model to have insignificant lack-of-fit.

Model Summary Statistics

Source	Std. Dev.	R-Squared	Adjusted R-Squared	Predicted R-Squared	PRESS
Linear	6.25	0.3508	0.2328	-0.0015	663.07
Quadratic	4.74	0.7284	0.5586	-0.1131	736.94
<u>Special Cubic</u>	<u>3.27</u>	<u>0.8867</u>	<u>0.7895</u>	<u>0.5858</u>	<u>274.24</u>
<u>Cubic</u>	<u>1.90</u>	<u>0.9782</u>	<u>0.9293</u>		<u>+</u>

+ Case(s) with leverage of 1.0000: PRESS statistic not defined

"*Model Summary Statistics*". Focus on the model maximizing the "Adjusted R-Squared" and the "Predicted R-Squared".

ANOVA for Mixture Cubic Model

*** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***

Analysis of variance table [Partial sum of squares - Type III]

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value
					Prob > F
Model	647.67	9	71.96	19.98	0.0056
Linear Mixture	232.28	2	116.14	32.25	0.0034
AB	55.16	1	55.16	15.31	0.0173
AC	52.43	1	52.43	14.56	0.0189
BC	53.47	1	53.47	14.85	0.0183
ABC	51.63	1	51.63	14.34	0.0193
AB(A-B)	9.60	1	9.60	2.67	0.1778
AC(A-C)	43.12	1	43.12	11.97	0.0258
BC(B-C)	56.85	1	56.85	15.79	0.0165
Pure Error	14.41	4	3.60		
Cor Total	662.08	13			
Std. Dev.	1.90		R-Squared	0.9782	
Mean	17.41		Adj R-Squared	0.9293	
C.V. %	10.90		Pred R-Squared	N/A	
PRESS	N/A		Adeq Precision	11.410	

Case(s) with leverage of 1.0000: Pred R-Squared and PRESS statistic not defined

Diagnostics Case Statistics

Standard Order	Actual		Predicted		Residual	Leverage	Internally	Externally	Influence on	
	Value	Value	Studentized	Studentized			Fitted Value	Cook's Distance	Run Order	
1	<u>7.10</u>	<u>7.10</u>	<u>0.000</u>	<u>1.00*</u>						<u>3</u>
2	23.95	25.40	-1.45	0.500	-1.081	-1.112	-1.112	0.117		4
3	22.10	22.70	-0.60	0.500	-0.447	-0.397	-0.397	0.020		11
4	22.25	23.47	-1.22	0.500	-0.913	-0.889	-0.889	0.083		1
5	<u>8.00</u>	<u>8.00</u>	<u>0.000</u>	<u>1.00*</u>						<u>9</u>
6	14.30	16.10	-1.80	0.500	-1.341	-1.566	-1.566	0.180		6
7	<u>8.00</u>	<u>8.00</u>	<u>0.000</u>	<u>1.00*</u>						<u>5</u>
8	<u>10.60</u>	<u>10.60</u>	<u>0.000</u>	<u>1.00*</u>						<u>12</u>
9	<u>22.70</u>	<u>22.70</u>	<u>0.000</u>	<u>1.00*</u>						<u>13</u>
10	<u>12.00</u>	<u>12.00</u>	<u>0.000</u>	<u>1.00*</u>						<u>8</u>
11	24.70	23.47	1.23	0.500	0.913	0.889	0.889	0.083		7
12	26.85	25.40	1.45	0.500	1.081	1.112	1.112	0.117		2
13	23.30	22.70	0.60	0.500	0.447	0.397	0.397	0.020		14
14	17.90	16.10	1.80	0.500	1.341	1.566	1.566	0.180		10

Case(s) with leverage of 1.0000: Student Residuals, Cooks Distance & External Stud. Residuals undefined.

* Exceeds limits

Current Transform: None

Box-Cox Power Transformation

Constant k	95% CI	95% CI	Best	Rec.
	Low	High	Lambda	Transform
0.000			-3.00	None

Tablica A. 5. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Nodularnost**Sequential Model Sum of Squares [Type I]**

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value
Mean vs Total	58501.79	1	58501.79		
Linear vs Mean	135.79	2	67.89	1.06	0.3781
<u>Quadratic vs Linear</u>	<u>428.88</u>	<u>3</u>	<u>142.96</u>	<u>4.19</u>	<u>0.0467</u>
<u>Sp Cubic vs Quadratic</u>	<u>116.18</u>	<u>1</u>	<u>116.18</u>	<u>5.18</u>	<u>0.0569</u>
Cubic vs Sp Cubic	109.37	3	36.46	3.07	0.1534
Residual	47.50	4	11.87		
Total	59339.50	14	4238.54		

"*Sequential Model Sum of Squares [Type I]*". Select the highest order polynomial where the additional terms are significant and the model is not aliased.

Lack of Fit Tests

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value
Linear	654.43	7	93.49	7.87	0.0321
<u>Quadratic</u>	<u>225.54</u>	<u>4</u>	<u>56.39</u>	<u>4.75</u>	<u>0.0803</u>
<u>Special Cubic</u>	<u>109.37</u>	<u>3</u>	<u>36.46</u>	<u>3.07</u>	<u>0.1534</u>
Cubic	0.000	0			
Pure Error	47.50	4	11.88		

"*Lack of Fit Tests*". Want the selected model to have insignificant lack-of-fit.

Model Summary Statistics

Source	Std. Dev.	R-Squared	Adjusted R-Squared	Predicted R-Squared	PRESS
Linear	7.99	0.1621	0.0097	-0.2216	1023.37
<u>Quadratic</u>	<u>5.84</u>	<u>0.6741</u>	<u>0.4703</u>	<u>0.0759</u>	<u>774.17</u>
<u>Special Cubic</u>	<u>4.73</u>	<u>0.8127</u>	<u>0.6522</u>	<u>-0.3111</u>	<u>1098.32</u>
Cubic	3.45	0.9433	0.8157		+

+ Case(s) with leverage of 1.0000: PRESS statistic not defined

"*Model Summary Statistics*". Focus on the model maximizing the "Adjusted R-Squared" and the "Predicted R-Squared".

ANOVA for Mixture Special Cubic Model

*** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***

Analysis of variance table [Partial sum of squares - Type III]

Source	Sum of		Mean		F	p-value
	Squares	df	Square	Value		
Model	680.85	6	113.47	5.06	0.0257	
<i>Linear Mixture</i>	135.79	2	67.89	3.03	0.1128	
<i>AB</i>	369.13	1	369.13	16.47	0.0048	
<i>AC</i>	73.68	1	73.68	3.29	0.1127	
<i>BC</i>	225.60	1	225.60	10.07	0.0156	
<i>ABC</i>	116.18	1	116.18	5.18	0.0569	
Residual	156.87	7	22.41			
<i>Lack of Fit</i>	109.37	3	36.46	3.07	0.1534	
<i>Pure Error</i>	47.50	4	11.88			
Cor Total	837.71	13				
Std. Dev.	4.73		R-Squared	0.8127		
Mean	64.64		Adj R-Squared	0.6522		
C.V. %	7.32		Pred R-Squared	-0.3111		
PRESS	1098.32		Adeq Precision	5.955		

Diagnostics Case Statistics

Standard	Actual	Predicted			Internally Studentized	Externally Studentized	Influence on		Cook's	Run
			Value	Value			DFFITS	Distance		
Order	Value	Value	Residual	Leverage	Residual	Residual				
1	47.00	53.58	-6.58	0.387	-1.775	-2.217	-1.760	0.284	3	
2	70.00	70.25	-0.25	0.466	-0.073	-0.068	-0.063	0.001	4	
3	73.50	73.51	-0.015	0.446	-0.004	-0.004	-0.003	0.000	11	
4	70.00	71.22	-1.22	0.497	-0.364	-0.340	-0.338	0.019	1	
5	56.00	54.50	1.50	0.941	1.305	1.389	* 5.56	* 3.91	9	
6	59.00	63.77	-4.77	0.448	-1.357	-1.463	-1.319	0.214	6	
7	61.00	59.96	1.04	0.657	0.375	0.351	0.486	0.039	5	
8	59.00	61.08	-2.08	0.593	-0.689	-0.661	-0.798	0.099	12	
9	71.00	64.32	6.68	0.335	1.731	2.118	1.503	0.216	13	
10	57.00	54.03	2.97	0.372	0.791	0.767	0.591	0.053	8	
11	72.00	71.22	0.78	0.497	0.232	0.216	0.214	0.008	7	
12	71.00	70.25	0.75	0.466	0.216	0.201	0.187	0.006	2	
13	70.50	73.51	-3.01	0.446	-0.856	-0.837	-0.751	0.084	14	
14	68.00	63.77	4.23	0.448	1.203	1.251	1.127	0.168	10	

* Exceeds limits

Current Transform: None

Box-Cox Power Transformation

Constant	95% CI		Best Lambda	Rec. Transform
	k	Low		
0.000			3.00	None

Tablica A. 6. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Udio ferita**Sequential Model Sum of Squares [Type I]**

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value	Prob > F
Mean vs Total	1.139E+005	1	1.139E+005			
Linear vs Mean	167.82	2	83.91	0.48	0.6336	
<u>Quadratic vs Linear</u>	<u>1161.71</u>	<u>3</u>	<u>387.24</u>	<u>3.98</u>	<u>0.0524</u>	<u>Suggested</u>
Sp Cubic vs Quadratic	4.38	1	4.38	0.040	0.8479	
<u>Cubic vs Sp Cubic</u>	<u>762.49</u>	<u>3</u>	<u>254.16</u>	<u>90.89</u>	<u>0.0004</u>	<u>Suggested</u>
Residual	11.19	4	2.80			
Total	1.160E+005	14	8283.49			

"*Sequential Model Sum of Squares [Type I]*". Select the highest order polynomial where the additional terms are significant and the model is not aliased.

Lack of Fit Tests

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value	Prob > F
Linear	1928.58	7	275.51	98.53	0.0003	
<u>Quadratic</u>	<u>766.87</u>	<u>4</u>	<u>191.72</u>	<u>68.56</u>	<u>0.0006</u>	<u>Suggested</u>
Special Cubic	762.49	3	254.16	90.89	0.0004	
<u>Cubic</u>	<u>0.000</u>	<u>0</u>				<u>Suggested</u>
Pure Error	11.19	4	2.80			

"*Lack of Fit Tests*". Want the selected model to have insignificant lack-of-fit.

Model Summary Statistics

Source	Std. Dev.	Adjusted R-Squared	Predicted R-Squared	PRESS
Linear	13.28	0.0796	-0.0877	-0.2798
<u>Quadratic</u>	<u>9.86</u>	<u>0.6308</u>	<u>0.4001</u>	<u>0.1981</u>
Special Cubic	10.51	0.6329	0.3183	-0.6106
<u>Cubic</u>	<u>1.67</u>	<u>0.9947</u>	<u>0.9828</u>	± <u>Suggested</u>

+ Case(s) with leverage of 1.0000: PRESS statistic not defined

"*Model Summary Statistics*". Focus on the model maximizing the "Adjusted R-Squared" and the "Predicted R-Squared".

ANOVA for Mixture Cubic Model

*** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***

Analysis of variance table [Partial sum of squares - Type III]

Source	Sum of		Mean	F	p-value
	Squares	df	Square	Value	Prob > F
Model	2096.40	9	232.93	83.30	0.0003
Linear Mixture	167.82	2	83.91	30.01	0.0039
AB	627.98	1	627.98	224.58	0.0001
AC	678.36	1	678.36	242.59	< 0.0001
BC	682.66	1	682.66	244.13	< 0.0001
ABC	634.19	1	634.19	226.79	0.0001
AB(A-B)	171.89	1	171.89	61.47	0.0014
AC(A-C)	695.23	1	695.23	248.62	< 0.0001
BC(B-C)	755.92	1	755.92	270.33	< 0.0001
Pure Error	11.19	4	2.80		
Cor Total	2107.59	13			
Std. Dev.	1.67		R-Squared	0.9947	
Mean	90.18		Adj R-Squared	0.9828	
C.V. %	1.85		Pred R-Squared	N/A	
PRESS	N/A		Adeq Precision	25.628	

Case(s) with leverage of 1.0000: Pred R-Squared and PRESS statistic not defined

Diagnostics Case Statistics

Standard Order	Actual		Predicted		Residual	Leverage	Internally Studentized	Externally Studentized	Influence on		Run Order
	Value	Value					Residual	Residual	DFFITS	Cook's Distance	
1	62.83	62.83			0.000	1.00 *					3
2	93.92	96.14			-2.22	0.500	-1.875	-4.674	* 4.67	0.352	4
3	95.55	94.84			0.71	0.500	0.600	0.545	0.545	0.036	11
4	96.95	96.56			0.40	0.500	0.336	0.295	0.295	0.011	1
5	73.49	73.49			0.000	1.00 *					9
6	96.56	96.67			-0.11	0.500	-0.097	-0.084	-0.084	0.001	6
7	98.56	98.56			0.000	1.00 *					5
8	65.31	65.31			0.000	1.00 *					12
9	99.05	99.05			0.000	1.00 *					13
10	94.90	94.90			0.000	1.00 *					8
11	96.16	96.56			-0.40	0.500	-0.336	-0.295	-0.295	0.011	7
12	98.36	96.14			2.22	0.500	1.875	4.674	* 4.67	0.352	2
13	94.13	94.84			-0.71	0.500	-0.600	-0.545	-0.545	0.036	14
14	96.79	96.67			0.12	0.500	0.097	0.084	0.084	0.001	10

Case(s) with leverage of 1.0000: Student Residuals, Cooks Distance & External Stud. Residuals undefined.

* Exceeds limits

Current Transform: None

Box-Cox Power Transformation

Constant	95% CI		Best Lambda	Rec. Transform
	k	Low		
0.000			-3.00	None

Tablica A. 7. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Udio perlita**Sequential Model Sum of Squares [Type I]**

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value
Mean vs Total	1349.27	1	1349.27		
Linear vs Mean	167.82	2	83.91	0.48	0.6336
<u>Quadratic vs Linear</u>	<u>1161.71</u>	<u>3</u>	<u>387.24</u>	<u>3.98</u>	<u>0.0524</u> <u>Suggested</u>
Sp Cubic vs Quadratic	4.38	1	4.38	0.040	0.8479
<u>Cubic vs Sp Cubic</u>	<u>762.49</u>	<u>3</u>	<u>254.16</u>	<u>90.89</u>	<u>0.0004</u> <u>Suggested</u>
Residual	11.19	4	2.80		
Total	3456.86	14	246.92		

"*Sequential Model Sum of Squares [Type I]*". Select the highest order polynomial where the additional terms are significant and the model is not aliased.

Lack of Fit Tests

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value
Linear	1928.58	7	275.51	98.53	0.0003
<u>Quadratic</u>	<u>766.87</u>	<u>4</u>	<u>191.72</u>	<u>68.56</u>	<u>0.0006</u> <u>Suggested</u>
Special Cubic	762.49	3	254.16	90.89	0.0004
<u>Cubic</u>	<u>0.000</u>	<u>0</u>			<u>Suggested</u>
Pure Error	11.19	4	2.80		

"*Lack of Fit Tests*". Want the selected model to have insignificant lack-of-fit.

Model Summary Statistics

Source	Std. Dev.	Adjusted R-Squared	Predicted R-Squared	PRESS
Linear	13.28	0.0796	-0.0877	-0.2798
<u>Quadratic</u>	<u>9.86</u>	<u>0.6308</u>	<u>0.4001</u>	<u>1689.97</u> <u>Suggested</u>
Special Cubic	10.51	0.6329	0.3183	-0.6106
<u>Cubic</u>	<u>1.67</u>	<u>0.9947</u>	<u>0.9828</u>	<u>±</u> <u>Suggested</u>

+ Case(s) with leverage of 1.0000: PRESS statistic not defined

"*Model Summary Statistics*". Focus on the model maximizing the "Adjusted R-Squared" and the "Predicted R-Squared".

ANOVA for Mixture Cubic Model

*** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***

Analysis of variance table [Partial sum of squares - Type III]

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value
					Prob > F
Model	2096.40	9	232.93	83.30	0.0003
Linear Mixture	167.82	2	83.91	30.01	0.0039
AB	627.98	1	627.98	224.58	0.0001
AC	678.36	1	678.36	242.59	< 0.0001
BC	682.66	1	682.66	244.13	< 0.0001
ABC	634.19	1	634.19	226.79	0.0001
AB(A-B)	171.89	1	171.89	61.47	0.0014
AC(A-C)	695.23	1	695.23	248.62	< 0.0001
BC(B-C)	755.92	1	755.92	270.33	< 0.0001
Pure Error	11.19	4	2.80		
Cor Total	2107.59	13			
Std. Dev.	1.67		R-Squared	0.9947	
Mean	9.82		Adj R-Squared	0.9828	
C.V. %	17.03		Pred R-Squared	N/A	
PRESS	N/A		Adeq Precision	25.628	

Case(s) with leverage of 1.0000: Pred R-Squared and PRESS statistic not defined

Diagnostics Case Statistics

Standard Order	Actual		Predicted		Residual	Leverage	Internally	Externally	Influence on		Run Order
	Value	Value					Studentized	Studentized	Fitted Value	DFFITS	
1	<u>37.17</u>	<u>37.17</u>			<u>0.000</u>	<u>1.00*</u>					<u>3</u>
2	6.08	3.86			2.22	0.500	1.875	4.674	<u>* 4.67</u>	0.352	<u>4</u>
3	4.45	5.16			-0.71	0.500	-0.600	-0.545	-0.545	0.036	<u>11</u>
4	3.04	3.44			-0.40	0.500	-0.336	-0.295	-0.295	0.011	<u>1</u>
5	<u>26.51</u>	<u>26.51</u>			<u>0.000</u>	<u>1.00*</u>					<u>9</u>
6	3.44	3.33			0.11	0.500	0.097	0.084	0.084	0.001	<u>6</u>
7	<u>1.44</u>	<u>1.44</u>			<u>0.000</u>	<u>1.00*</u>					<u>5</u>
8	<u>34.69</u>	<u>34.69</u>			<u>0.000</u>	<u>1.00*</u>					<u>12</u>
9	<u>0.95</u>	<u>0.95</u>			<u>0.000</u>	<u>1.00*</u>					<u>13</u>
10	<u>5.10</u>	<u>5.10</u>			<u>0.000</u>	<u>1.00*</u>					<u>8</u>
11	3.84	3.44			0.40	0.500	0.336	0.295	0.295	0.011	<u>7</u>
12	1.65	3.86			-2.22	0.500	-1.875	-4.674	<u>* -4.67</u>	0.352	<u>2</u>
13	5.87	5.16			0.71	0.500	0.600	0.545	0.545	0.036	<u>14</u>
14	3.21	3.33			-0.12	0.500	-0.097	-0.084	-0.084	0.001	<u>10</u>

Case(s) with leverage of 1.0000: Student Residuals, Cooks Distance & External Stud. Residuals undefined.

* Exceeds limits

Current Transform: None

Box-Cox Power Transformation

Constant	95% CI		Best		Rec.
	k	Low	High	Lambda	
0.000				3.00	None

Tablica A. 8. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata Broj nodula**Sequential Model Sum of Squares [Type I]**

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value	
						Prob > F
<u>Mean vs Total</u>	<u>5.236E+005</u>	1	<u>5.236E+005</u>			<u>Suggested</u>
Linear vs Mean	895.18	2	447.59	0.19	0.8336	
Quadratic vs Linear	10812.29	3	3604.10	1.83	0.2207	
Sp Cubic vs Quadratic	3342.01	1	3342.01	1.88	0.2129	
<u>Cubic vs Sp Cubic</u>	<u>9904.48</u>	<u>3</u>	<u>3301.49</u>	<u>5.17</u>	<u>0.0731</u>	<u>Suggested</u>
Residual	2552.13	4	638.03			
Total	5.511E+005	14	39365.52			

"*Sequential Model Sum of Squares [Type I]*". Select the highest order polynomial where the additional terms are significant and the model is not aliased.

Lack of Fit Tests

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value	
						Prob > F
Linear	24058.79	7	3436.97	5.39	0.0615	
Quadratic	13246.49	4	3311.62	5.19	0.0699	
Special Cubic	9904.48	3	3301.49	5.17	0.0731	
<u>Cubic</u>	<u>0.000</u>	<u>0</u>				<u>Suggested</u>
Pure Error	2552.13	4	638.03			

"*Lack of Fit Tests*". Want the selected model to have insignificant lack-of-fit.

Model Summary Statistics

Source	Std.	Adjusted	Predicted		
	Dev.	R-Squared	R-Squared	R-Squared	PRESS
Linear	49.19	0.0325	-0.1434	-0.3393	36839.90
Quadratic	44.44	0.4256	0.0667	-1.1900	60238.93
Special Cubic	42.18	0.5471	0.1590	-2.6203	99581.55
<u>Cubic</u>	<u>25.26</u>	<u>0.9072</u>	<u>0.6985</u>		<u>± Suggested</u>

+ Case(s) with leverage of 1.0000: PRESS statistic not defined

ANOVA for Mixture Cubic Model

*** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***

Analysis of variance table [Partial sum of squares - Type III]

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value
					Prob > F
Model	24953.96	9	2772.66	4.35	0.0854
Linear Mixture	895.18	2	447.59	0.70	0.5481
AB	413.03	1	413.03	0.65	0.4662
AC	1496.98	1	1496.98	2.35	0.2003
BC	1128.33	1	1128.33	1.77	0.2543
ABC	809.58	1	809.58	1.27	0.3230
AB(A-B)	1243.85	1	1243.85	1.95	0.2351
AC(A-C)	1796.79	1	1796.79	2.82	0.1686
BC(B-C)	4119.64	1	4119.64	6.46	0.0639
Pure Error	2552.13	4	638.03		
Cor Total	27506.09	13			
Std. Dev.	25.26		R-Squared	0.9072	
Mean	193.39		Adj R-Squared	0.6985	
C.V. %	13.06		Pred R-Squared	N/A	
PRESS	N/A		Adeq Precision	8.806	

Case(s) with leverage of 1.0000: Pred R-Squared and PRESS statistic not defined

Diagnostics Case Statistics

Standard Order	Actual		Predicted		Residual	Leverage	Internally	Externally	Influence on		Run Order
	Value	Value	Value	Value			Studentized	Studentized	Fitted Value	Cook's Distance	
1	146.00	146.00		0.000	1.00*						3
2	170.00	201.00		-31.00	0.500		-1.736	-3.025	* -3.02	0.301	4
3	197.00	208.50		-11.50	0.500		-0.644	-0.589	-0.589	0.041	11
4	199.00	211.75		-12.75	0.500		-0.714	-0.662	-0.662	0.051	1
5	185.00	185.00		0.000	1.00*						9
6	207.00	202.50		4.50	0.500		0.252	0.220	0.220	0.006	6
7	262.00	262.00		0.000	1.00*						5
8	74.00	74.00		0.000	1.00*						12
9	230.00	230.00		0.000	1.00*						13
10	163.00	163.00		0.000	1.00*						8
11	224.50	211.75		12.75	0.500		0.714	0.662	0.662	0.051	7
12	232.00	201.00		31.00	0.500		1.736	3.025	* 3.02	0.301	2
13	220.00	208.50		11.50	0.500		0.644	0.589	0.589	0.041	14
14	198.00	202.50		-4.50	0.500		-0.252	-0.220	-0.220	0.006	10

Case(s) with leverage of 1.0000: Student Residuals, Cooks Distance & External Stud. Residuals undefined.

* Exceeds limits

Current Transform: None

Box-Cox Power Transformation

Constant	95% CI	95% CI	Best	Rec.
k	Low	High	Lambda	Transform
0.000			-3.00	None

PRILOG B

Prvo rješenje

Izvještaji:

Constraints

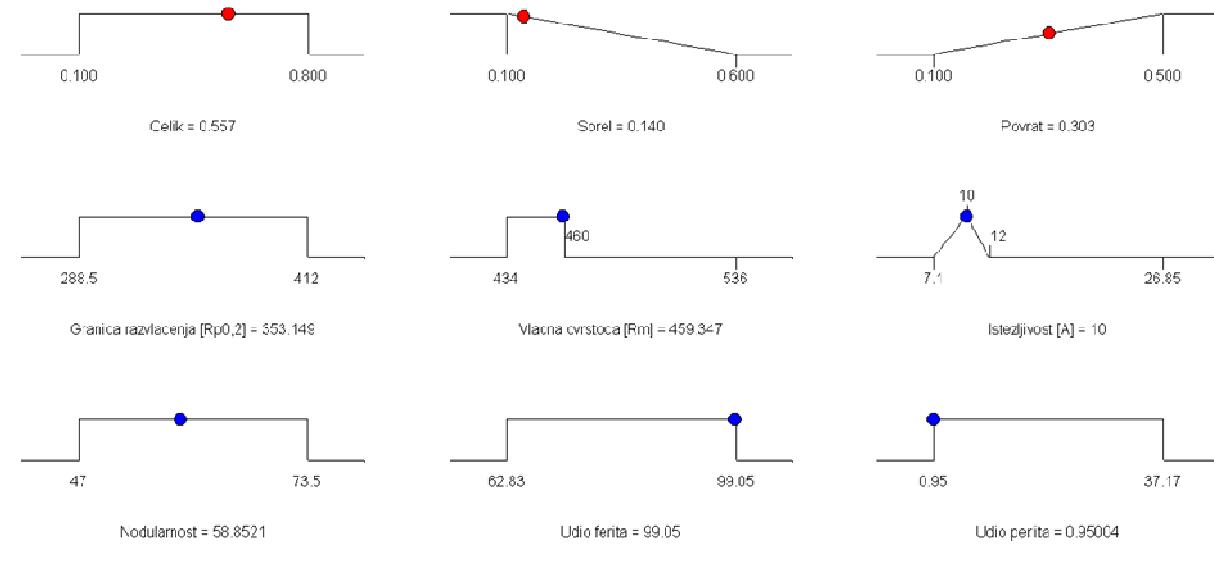
Name	Goal	Lower		Upper		Importance
		Limit	Weight	Limit	Weight	
Celik	is in range	0.1	1	0.8	1	3
Sorel	minimize	0.1	1	0.6	1	3
Povrat	maximize	0.1	1	0.5	1	3
Granica razvlaci	is in range	288.5	1	412	1	3
Vlačna cvrstoca	is in range	434	1	460	1	3
Istežljivost [A]	is target = 10	7.1	1	12	1	3
Nodularnost	is in range	47	1	73.5	1	3
Udio ferita	is in range	62.83	1	99.05	1	3
Udio perlita	is in range	0.95	1	37.17	1	3

Solutions

Number	Celik	Sorel	Povrat	Granica razvlaci	Vlačna cvrstoca	Istežljivost [A]	Nodularnost	Udio ferita	Udio perlita	Desirability	Selected
1	0.557	0.140	0.303	353.149	459.347	10	58.8521	99.05	0.95004	0.776	
2	0.601	0.100	0.299	338.755	442.863	8.1317	59.9713	99.05	0.950008	0.562	
3	0.743	0.142	0.115	330.663	460	10.0001	62.1098	64.5119	35.4881	0.325	

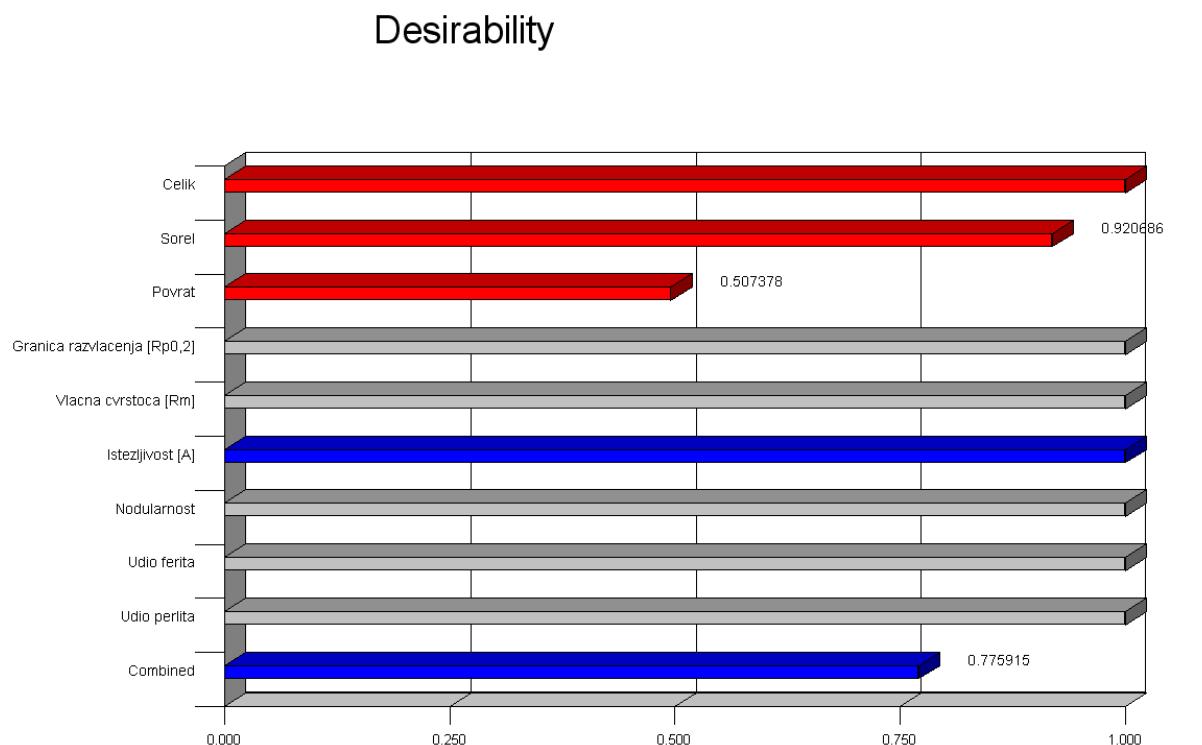
3 Solutions found

„Ramp“ prikaz:



Desirability = 0.776

„Bar Graph“ prikaz:



Drugo rješenje

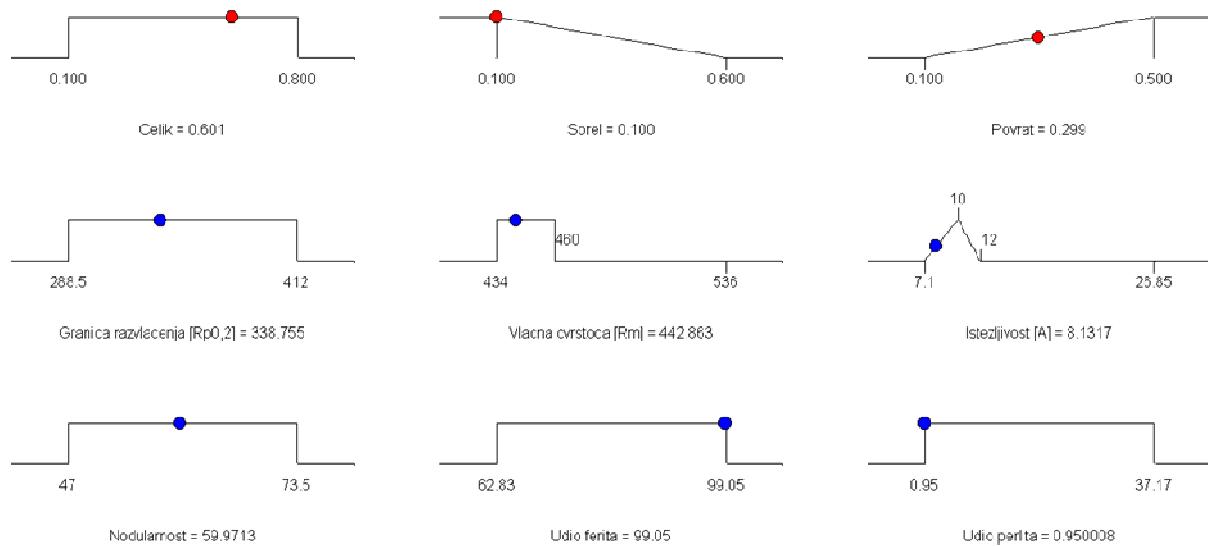
Izvještaji:

Constraints							
Name	Goal	Lower	Upper	Lower	Upper	Importance	Weight
		Limit	Limit	Weight	Weight		
Celik	is in range	0.1	0.8	1	1	3	
Sorel	minimize	0.1	0.6	1	1	3	
Povrat	maximize	0.1	0.5	1	1	3	
Granica razvlaci:	is in range	288.5	412	1	1	3	
Vlacna cvrstoca	is in range	434	460	1	1	3	
Istezljivost [A]	is target = 10	7.1	12	1	1	3	
Nodularnost	is in range	47	73.5	1	1	3	
Udio ferita	is in range	62.83	99.05	1	1	3	
Udio perlita	is in range	0.95	37.17	1	1	3	

Solutions										
Number	Celik	Sorel	Povrat	Granica razvlaci	Vlacna cvrstoca	Istezljivost [A]	Nodularnost	Udio ferita	Udio perlita	Desirability
1	0.557	0.140	0.303	353.149	459.347	10	58.8521	99.05	0.95004	0.776
2	<u>0.601</u>	<u>0.100</u>	<u>0.299</u>	<u>338.755</u>	<u>442.863</u>	<u>8.1317</u>	<u>59.9713</u>	<u>99.05</u>	<u>0.950008</u>	<u>0.562</u>
3	0.743	0.142	0.115	330.663	460	10.0001	62.1098	64.5119	35.4881	0.325

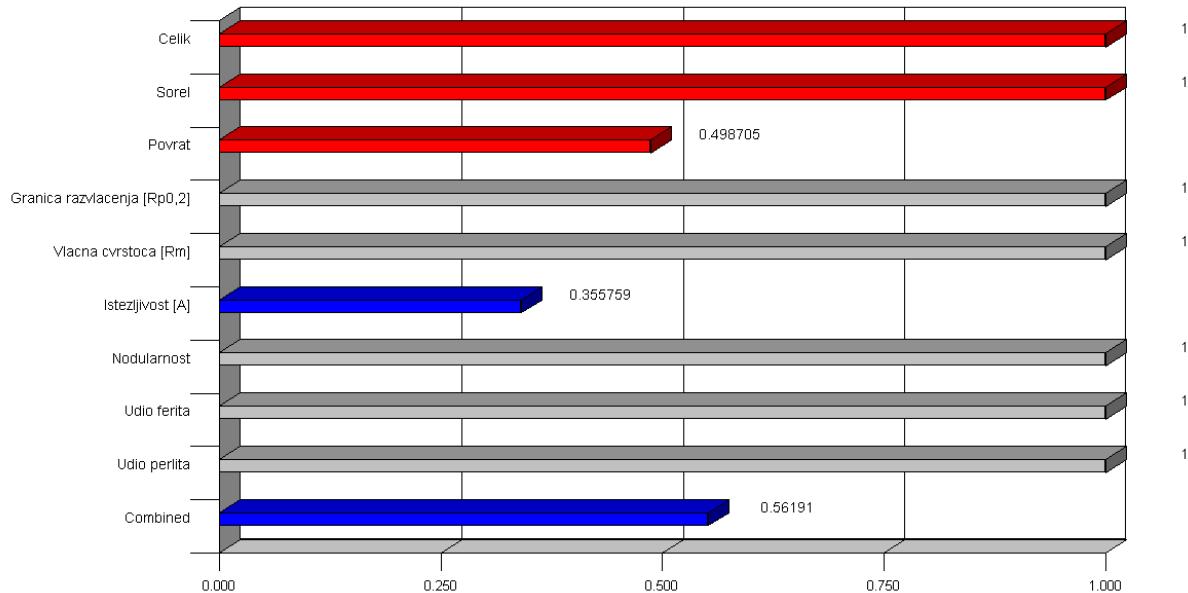
3 Solutions found

„Ramp“ prikaz:



„Bar Graph“ prikaz:

Desirability



Treće rješenje

Izvještaji:

Constraints

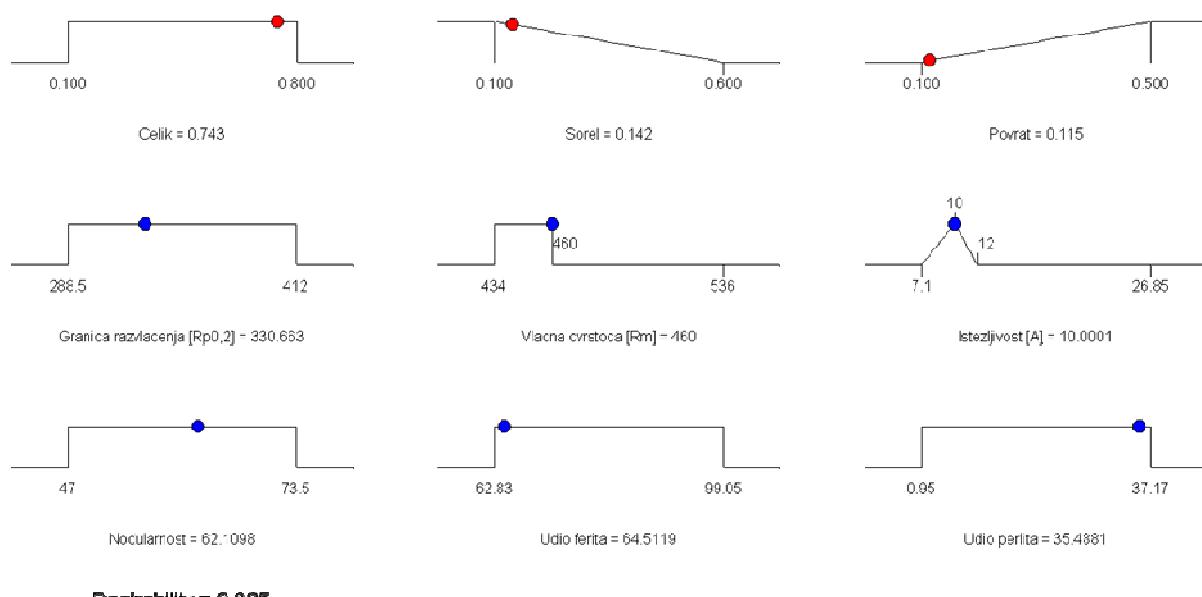
Name	Goal	Lower		Upper		Importance
		Limit	Weight	Limit	Weight	
Celik	is in range	0.1	0.8	1	1	3
Sorel	minimize	0.1	0.6	1	1	3
Povrat	maximize	0.1	0.5	1	1	3
Granica razvlaci	is in range	288.5	412	1	1	3
Vlačna cvrstoca	is in range	434	460	1	1	3
Istežljivost [A]	is target = 10	7.1	12	1	1	3
Nodularnost	is in range	47	73.5	1	1	3
Udio ferita	is in range	62.83	99.05	1	1	3
Udio perlita	is in range	0.95	37.17	1	1	3

Solutions

Number	Celik	Sorel	Povrat	Granica razvlaci	Vlačna cvrstoca	Istežljivost [A]	Nodularnost	Udio ferita	Udio perlita	Desirability
1	0.557	0.140	0.303	353.149	459.347	10	58.8521	99.05	0.95004	0.776
2	0.601	0.100	0.299	338.755	442.863	8.1317	59.9713	99.05	0.950008	0.562
3	<u>0.743</u>	<u>0.142</u>	<u>0.115</u>	<u>330.663</u>	<u>460</u>	<u>10.0001</u>	<u>62.1098</u>	<u>64.5119</u>	<u>35.4881</u>	<u>0.325</u>

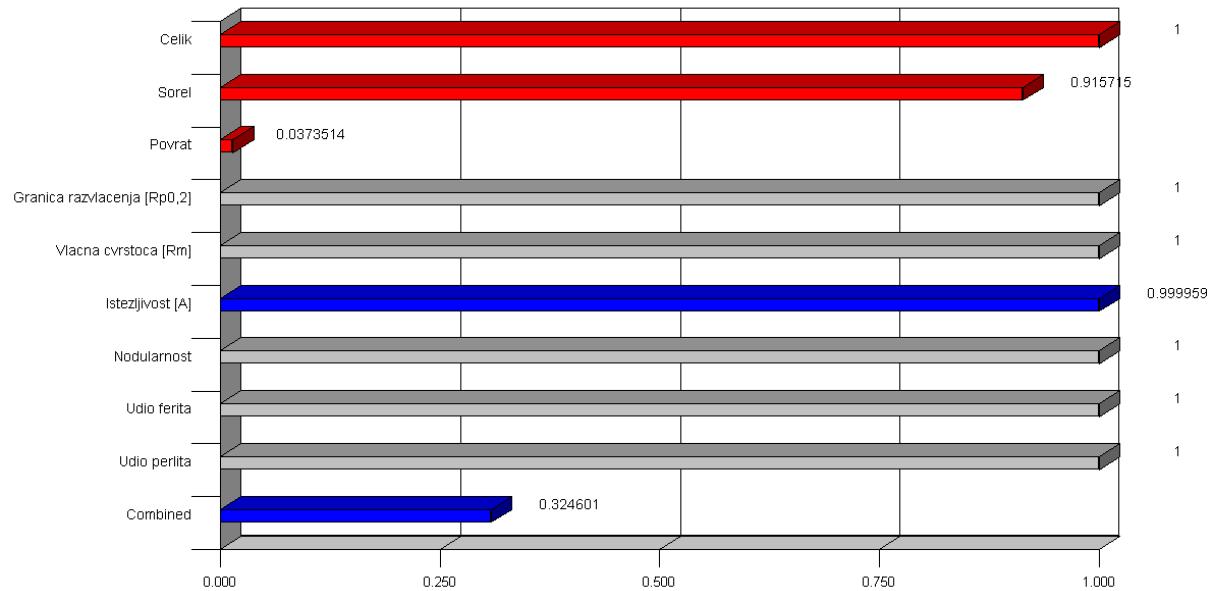
3 Solutions found

„Ramp“ prikaz:

**Desirability = 0.325**

„Bar Graph“ prikaz:

Desirability



PRILOG C

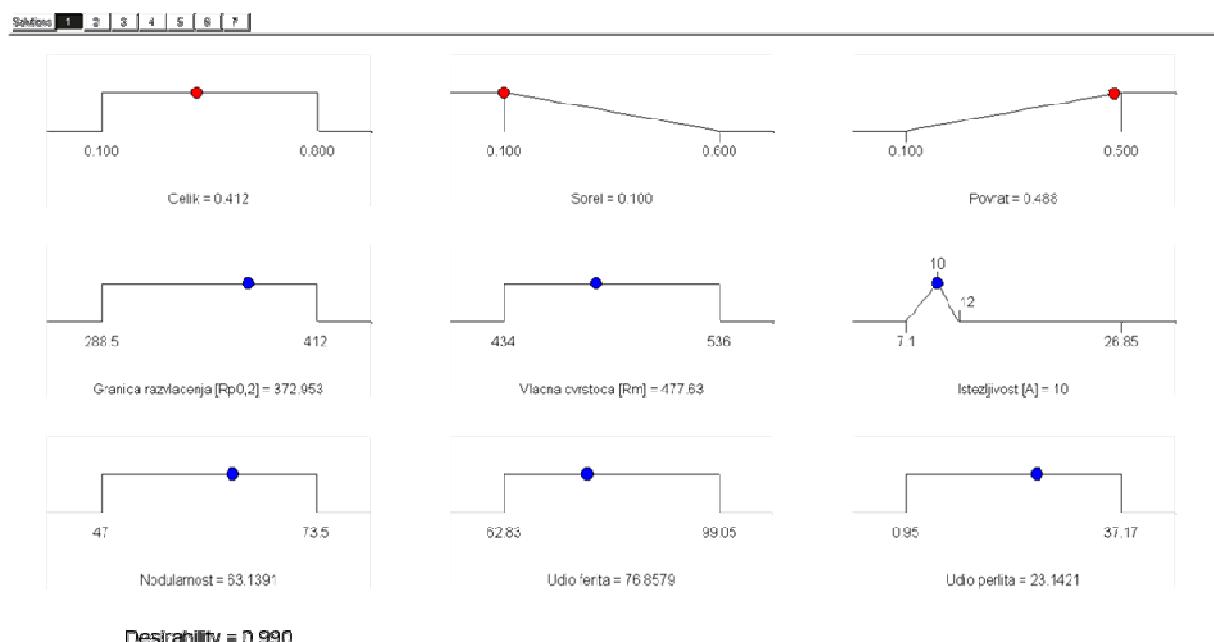
Prvo rješenje

Izvještaji:

Solutions	1	2	3	4	5	6	7				
Constraints											
Name	Goal	Lower Limit	Upper Limit	Lower Weight	Upper Weight	Importance					
Celik	is in range	0.1	0.6	1	1	3					
Sorel	minimize	0.1	0.6	1	1	3					
Povrat	maximize	0.1	0.5	1	1	3					
Granica razvlačenja [Rp0,2]	is in range	288.5	412	1	1	3					
Vlačna crvostoc [Rm]	is in range	434	536	1	1	3					
Istezdjivost [A]	istarget = 10	7.1	12	1	1	3					
Nodularnost	is in range	47	73.5	1	1	3					
Udio terita	is in range	62.83	99.05	1	1	3					
Udio perita	is in range	0.95	37.17	1	1	3					
Solutions											
Number	Celik	Sorel	Povrat	Granica razvlačenja [Rp0,2]	Vlačna crvostoc [Rm]	Istezdjivost [A]	Udio terita	Udio perita	Desirability	Selected	
1	0.412	0.100	0.488	372.953	477.63	10	63.1391	76.8579	23.1421	0.990	Selected
2	0.384	0.209	0.407	385.938	495.213	10	61.1782	73.223	26.777	0.843	
3	0.557	0.140	0.303	353.149	459.347	10	58.8521	99.0497	0.990345	0.776	
4	0.199	0.352	0.449	388.315	519.467	9.9941	60.1566	62.8302	37.1698	0.755	
5	0.292	0.313	0.395	392.912	508.291	10	60.9911	52.83	37.17	0.750	
6	0.521	0.272	0.207	369.99	489.34	10	53.3311	83.5476	16.4524	0.560	
7	0.510	0.281	0.210	371.143	490.49	10	53.3949	82.5082	17.4918	0.560	

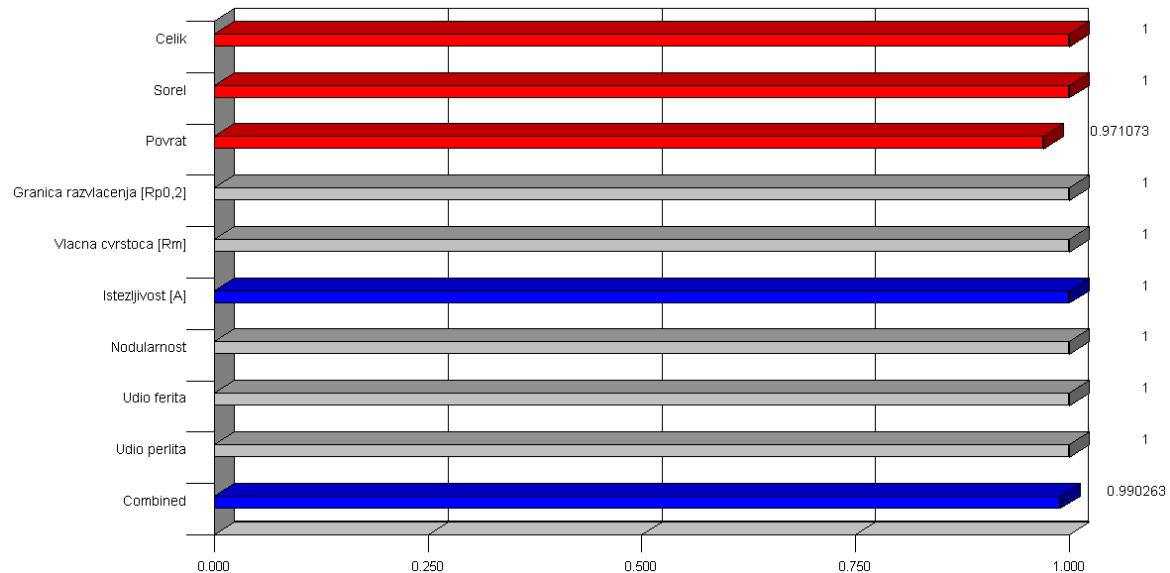
7 Solutions found

„Ramp“ prikaz:

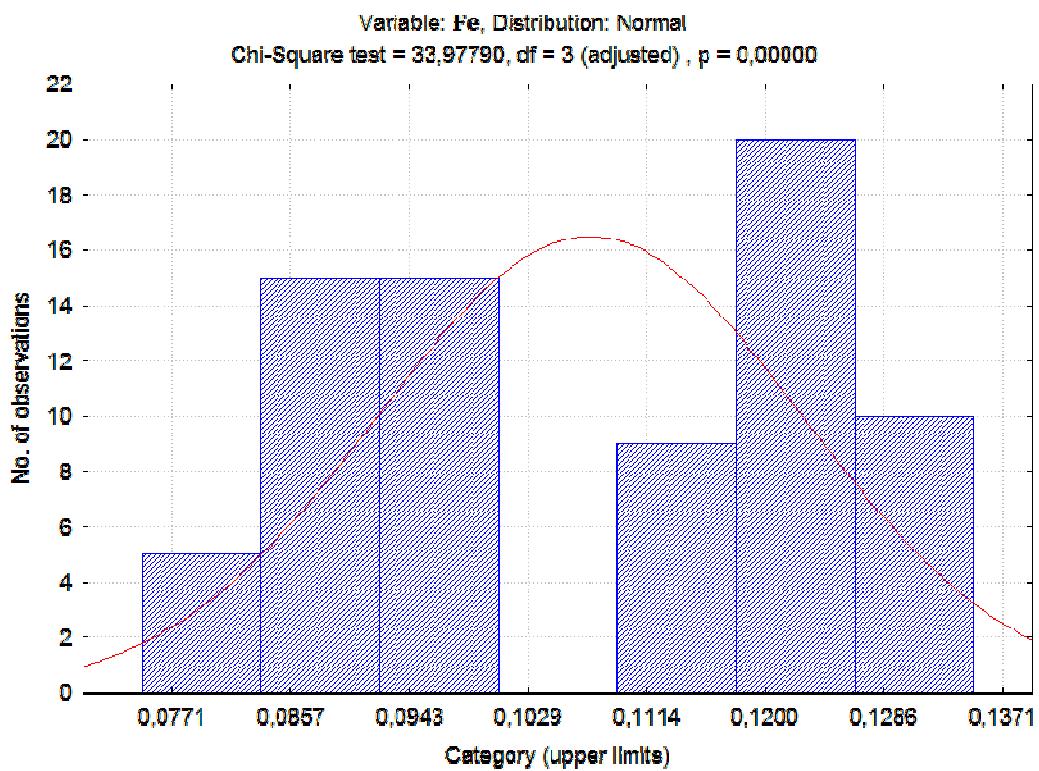
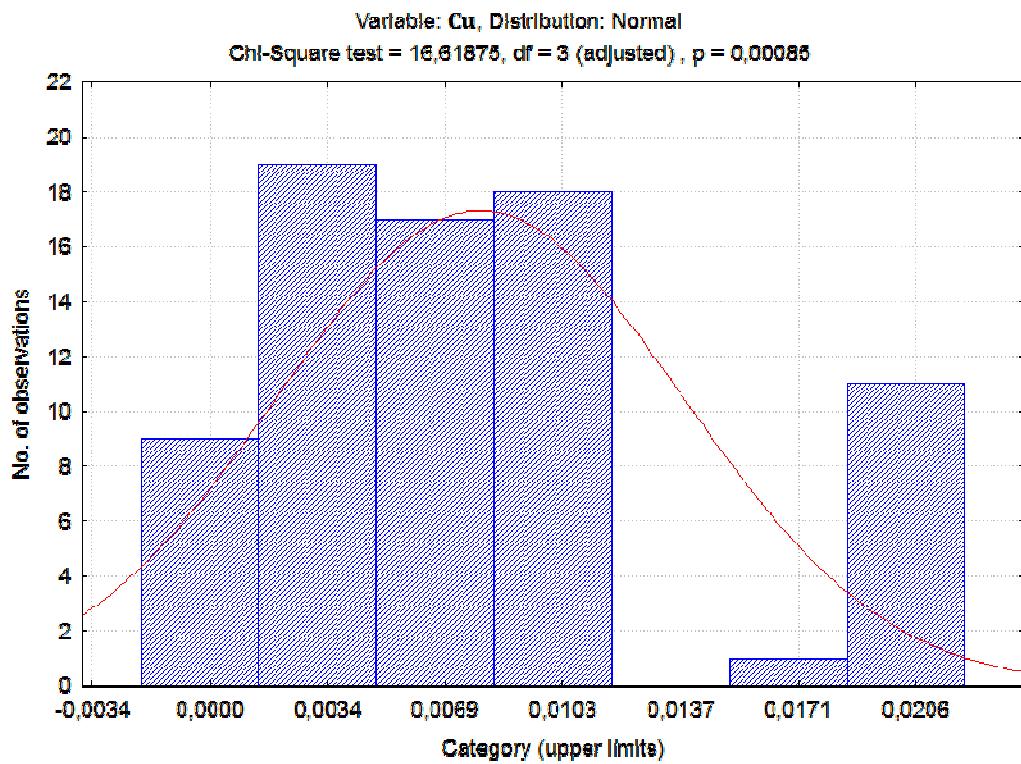


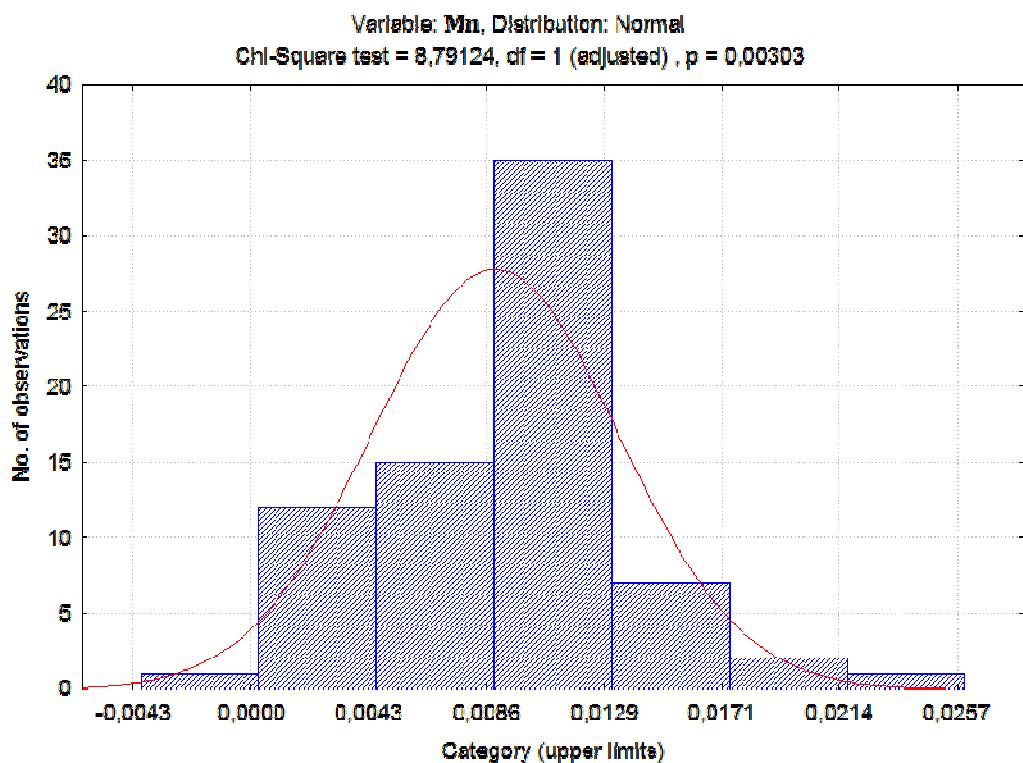
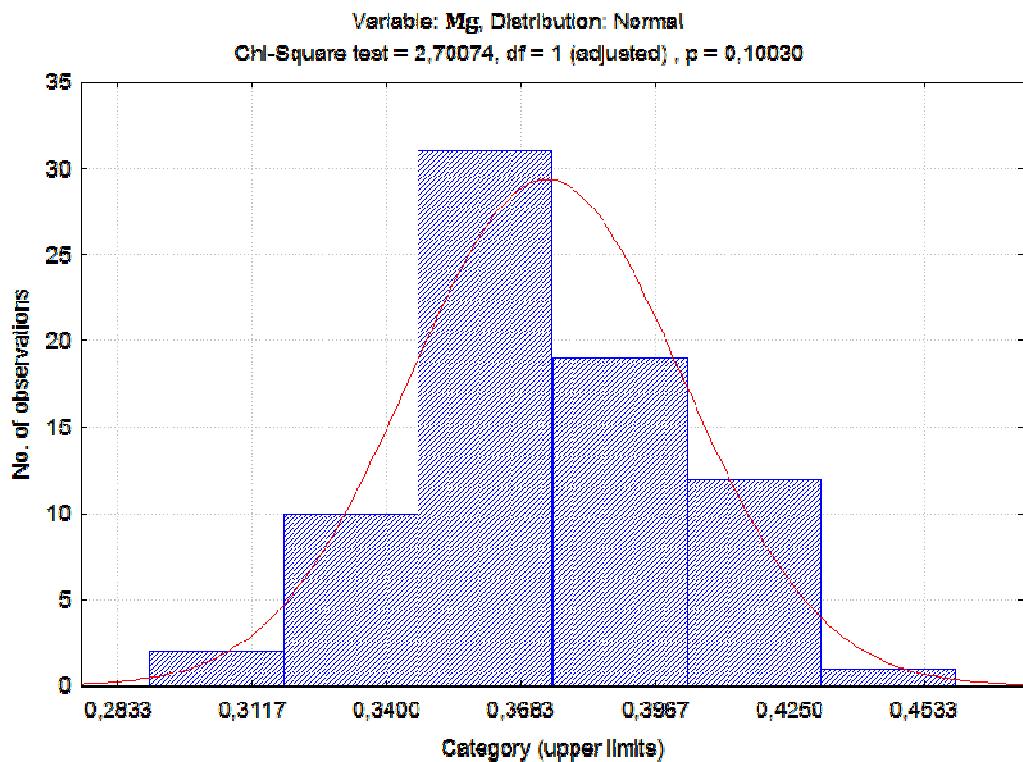
„Bar Graph“ prikaz:

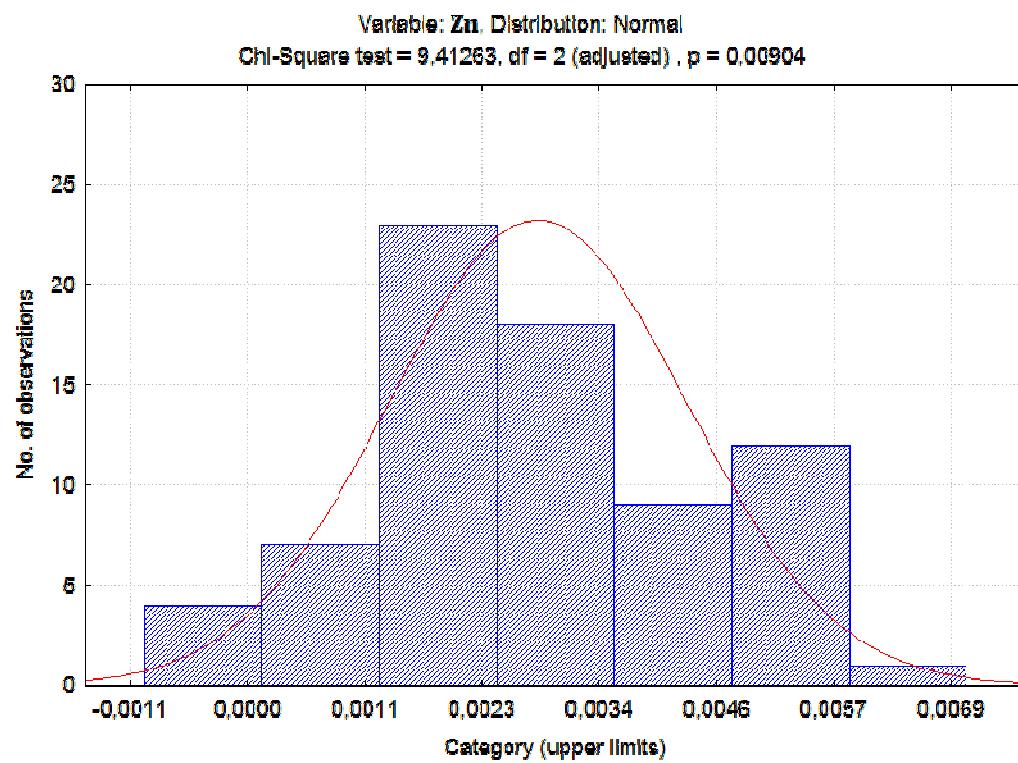
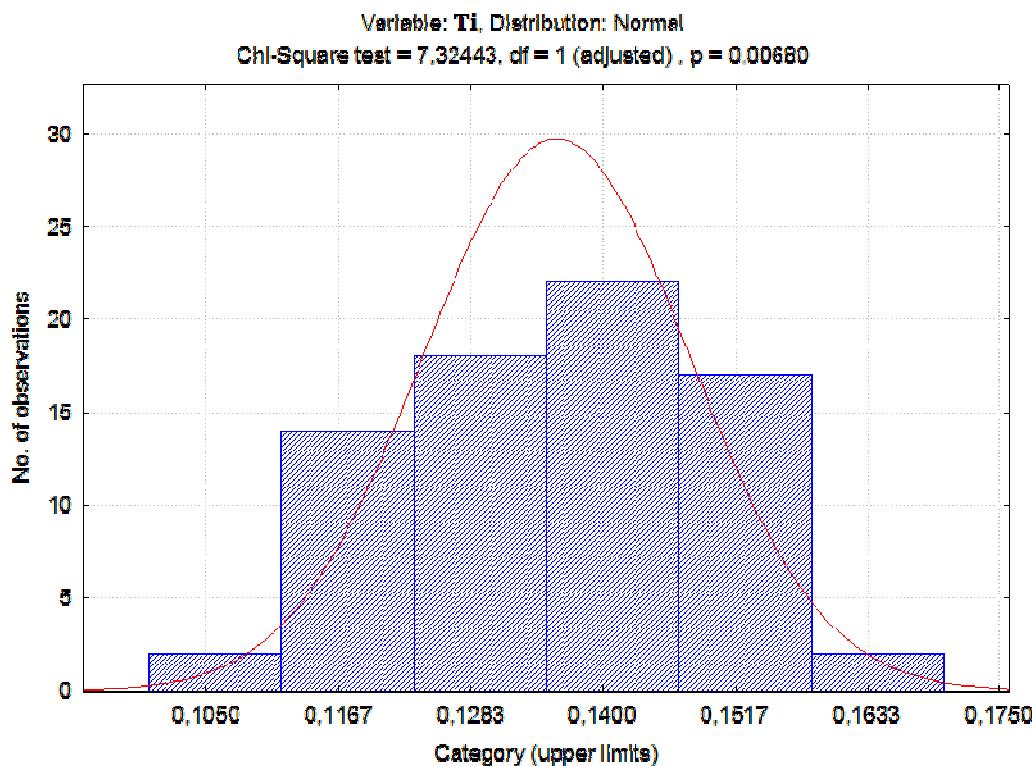
Desirability

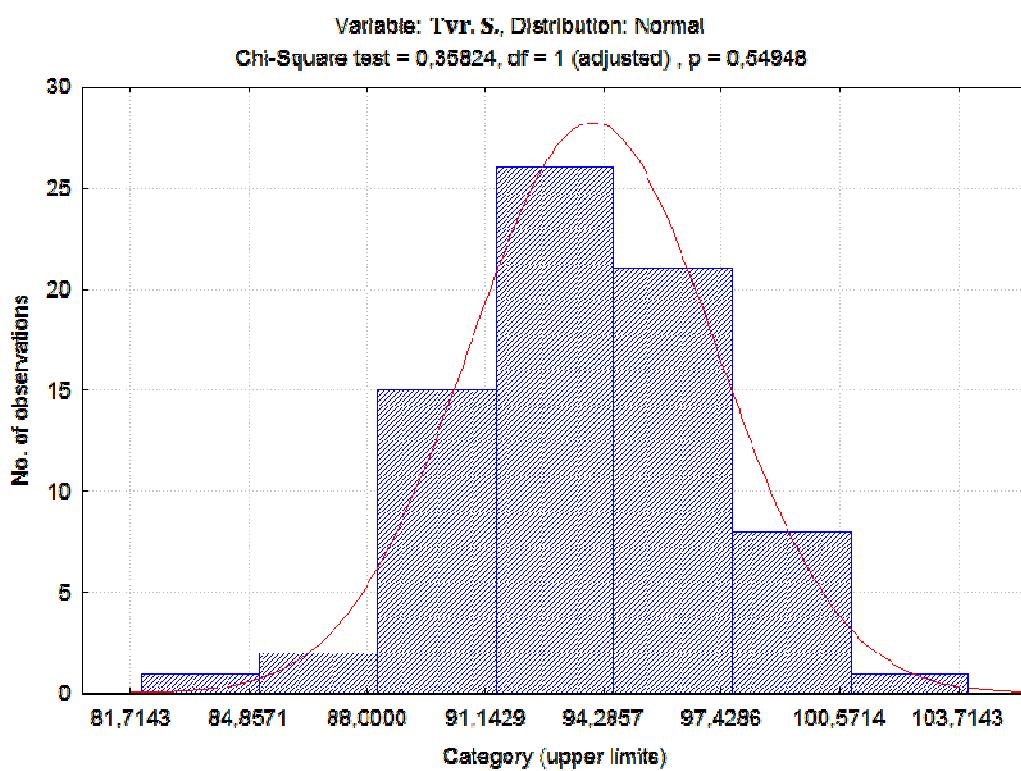
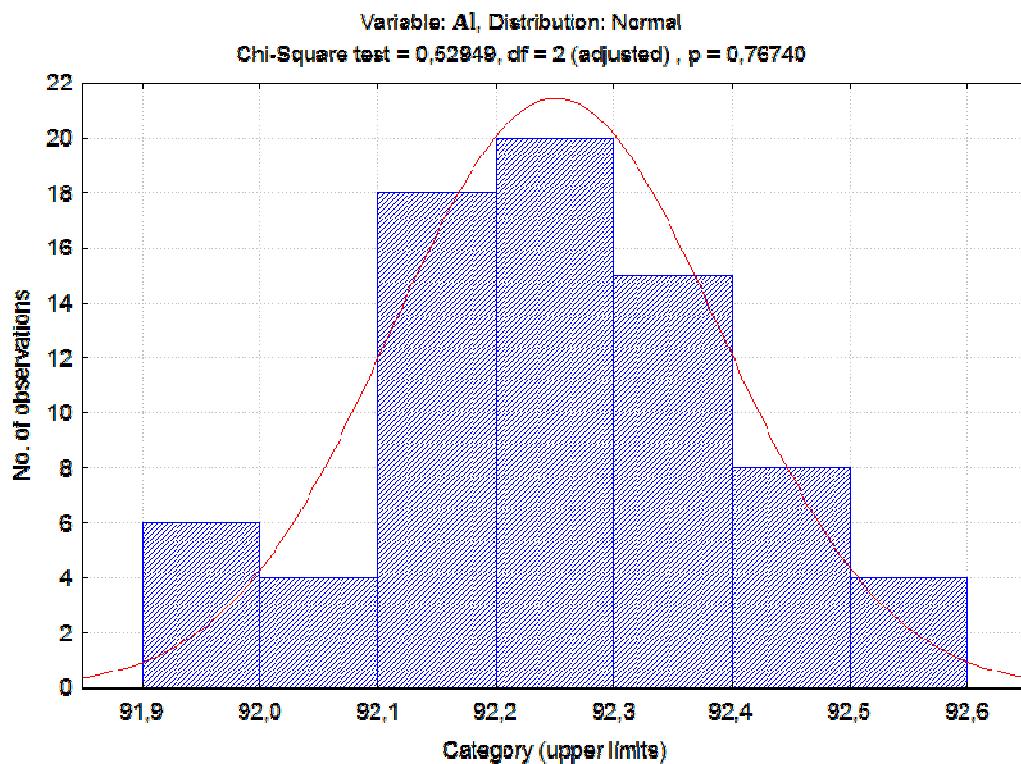


PRILOG D

χ^2 – test

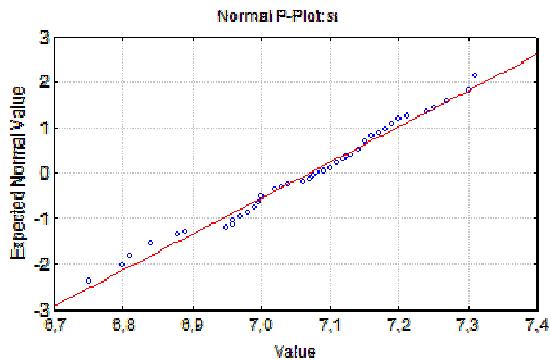
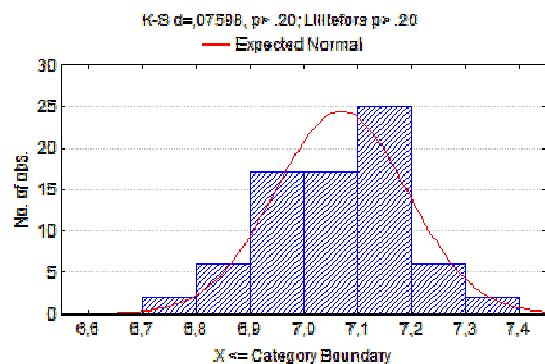




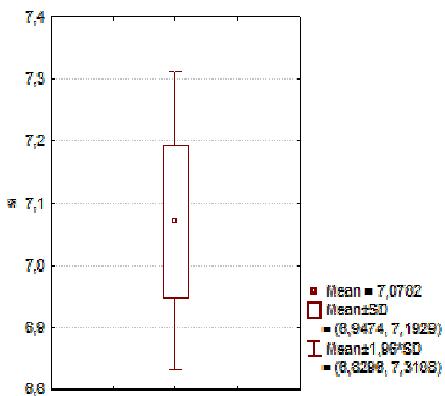


Kolmogor - Smirnov test

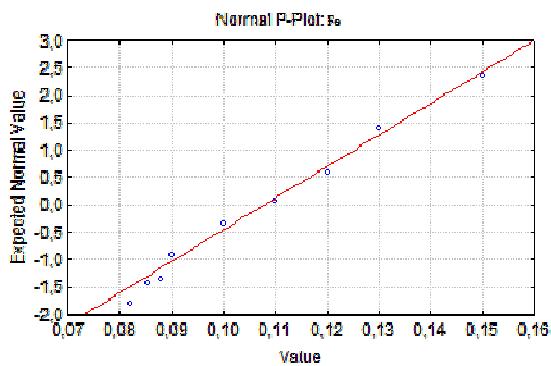
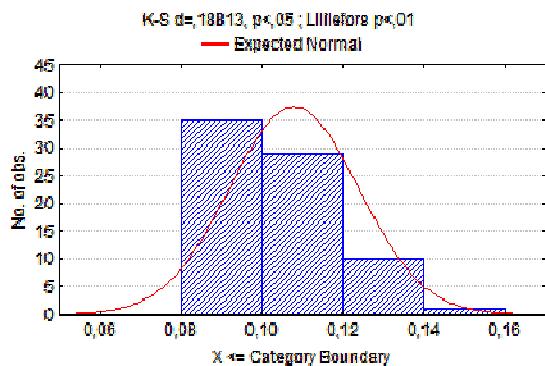
Summary: Si



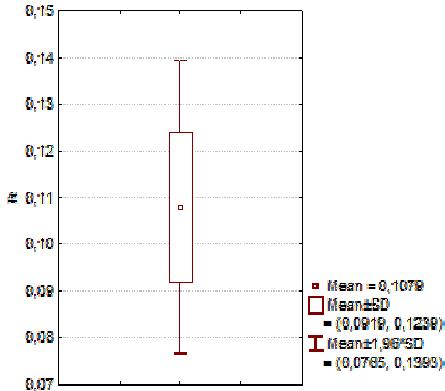
Summary Statistics: Si
Valid N=75
% Valid obs.=100,000000
Mean= 7,070177
Median= 7,080000
Mode= 1,000000
Frequency of Mode= 5,000000
Minimum= 6,750000
Maximum= 7,310000
Range= 0,560000
Variance= 0,016067
Std.Dev.= 0,122747

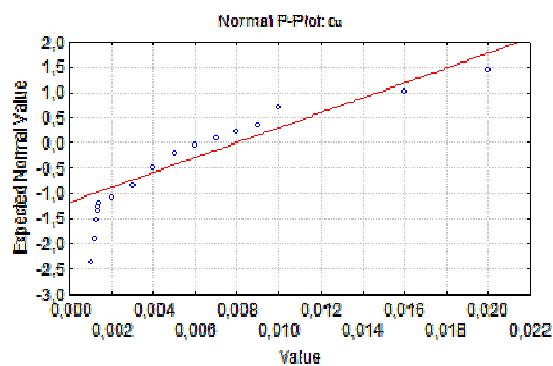
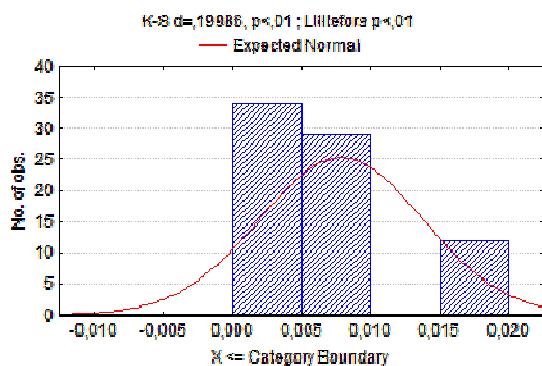


Summary: Fe

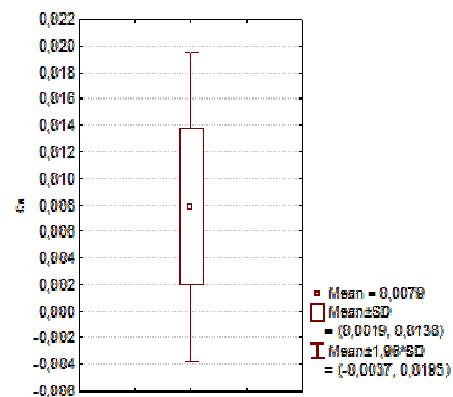
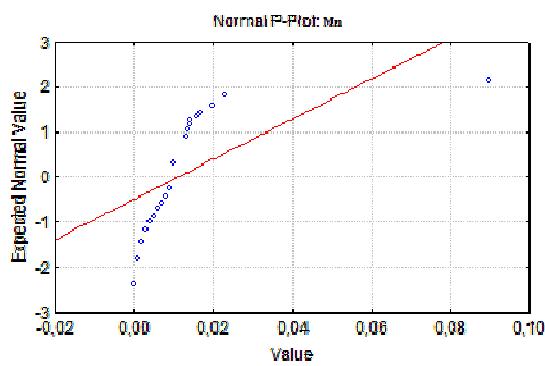
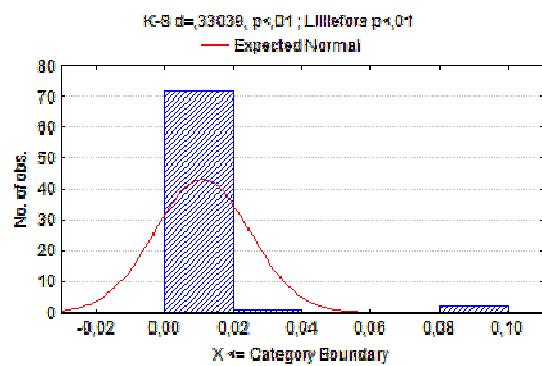


Summary Statistics: Fe
Valid N=75
% Valid obs.=100,000000
Mean= 0,107912
Median= 0,110000
Mode= 1,000000
Frequency of Mode= 20,000000
Minimum= 0,082000
Maximum= 0,150000
Range= 0,068000
Variance= 0,000257
Std.Dev.= 0,016016

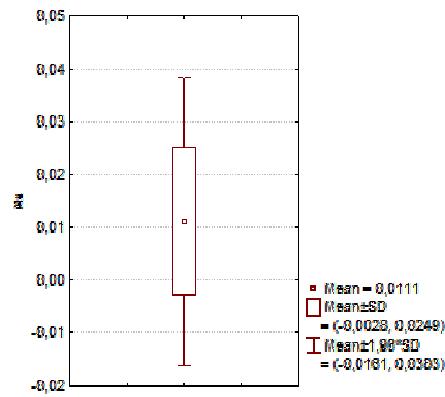


Summary: Cu

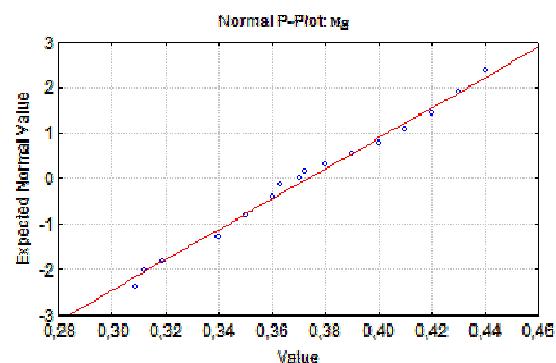
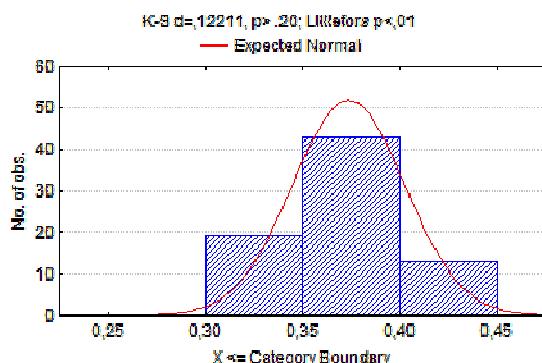
Summary Statistics: Cu
 Valid N=75
 % Valid obs.=100,000000
 Mean= 0,007672
 Median= 0,006000
 Mode= 1,000000
 Frequency of Mode= 12,000000
 Minimum= 0,001000
 Maximum= 0,020000
 Range= 0,019000
 Variance= 0,000035
 Std.Dev.= 0,006929

**Summary: Mn**

Summary Statistics: Mn
 Valid N=75
 % Valid obs.=100,000000
 Mean= 0,011058
 Median= 0,010000
 Mode= 1,000000
 Frequency of Mode= 27,000000
 Minimum= 0,000100
 Maximum= 0,090000
 Range= 0,089900
 Variance= 0,000193
 Std.Dev.= 0,013881

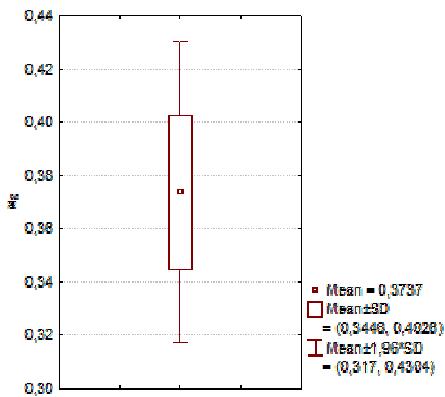


Summary: Mg

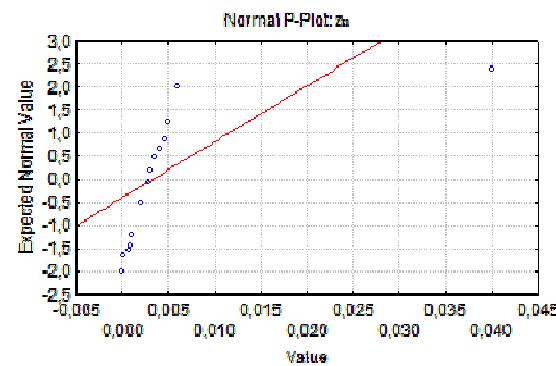
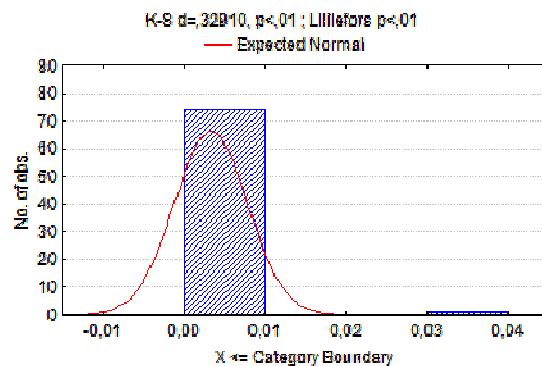


Summary Statistics:Mg

Valid N=75
% Valid obs.=100,000000
Mean= 0,373691
Median= 0,370000
Mode= 1,000000
Frequency of Mode= 14,000000
Minimum= 0,308840
Maximum= 0,440000
Range= 0,131160
Variance= 0,000836
Std.Dev.= 0,028908

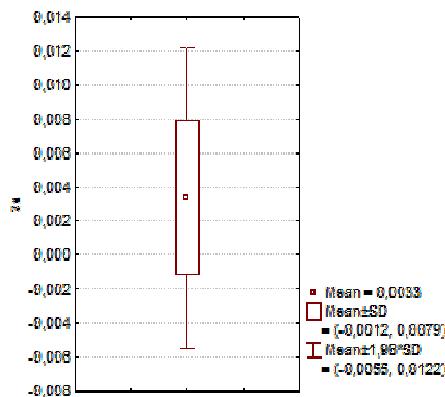


Summary: Zn

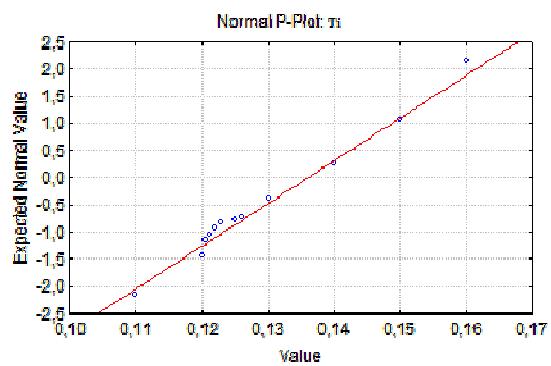
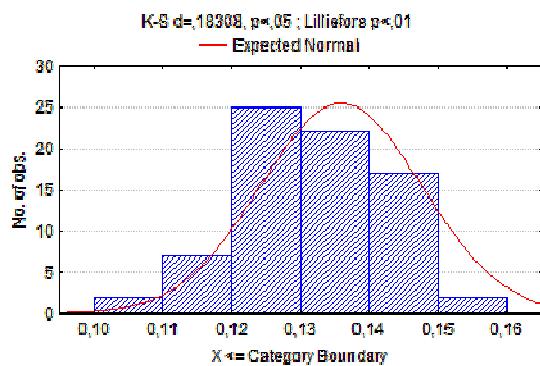


Summary Statistics:Zn

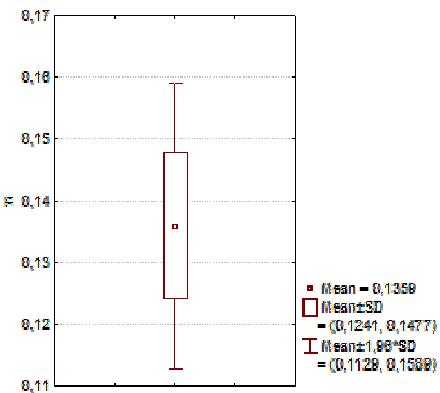
Valid N=75
% Valid obs.=100,000000
Mean= 0,00325
Median= 0,003000
Mode= 1,000000
Frequency of Mode= 23,000000
Minimum= 0,000000
Maximum= 0,040000
Range= 0,040000
Variance= 0,000021
Std.Dev.= 0,004528



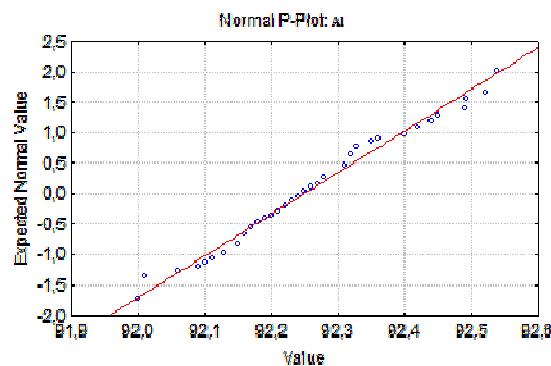
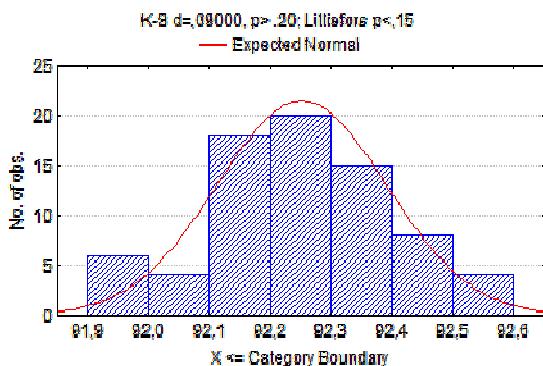
Summary: Ti



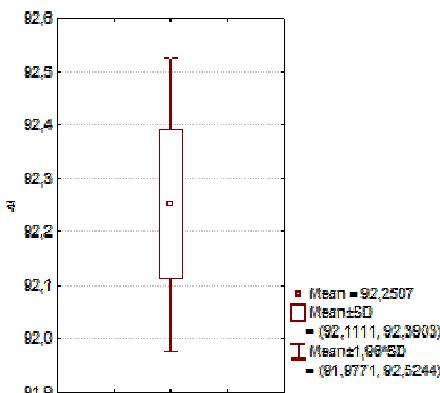
Summary Statistics: Ti
Valid N=75
% Valid obs.=100,000000
Mean= 0,135899
Median= 0,140000
Mode= 1,000000
Frequency of Mode= 22,000000
Minimum= 0,110000
Maximum= 0,160000
Range= 0,050000
Variance= 0,000138
Std.Dev.= 0,011756



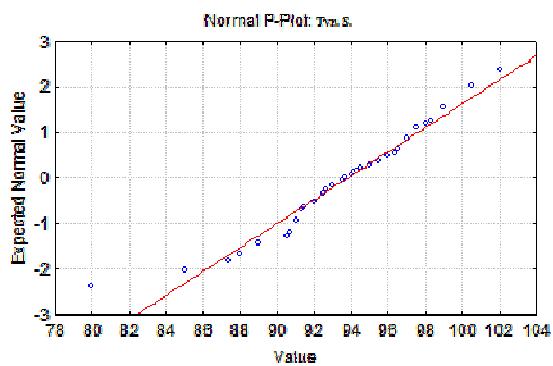
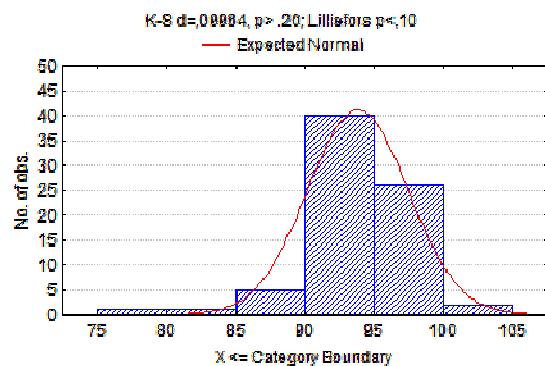
Summary: Al



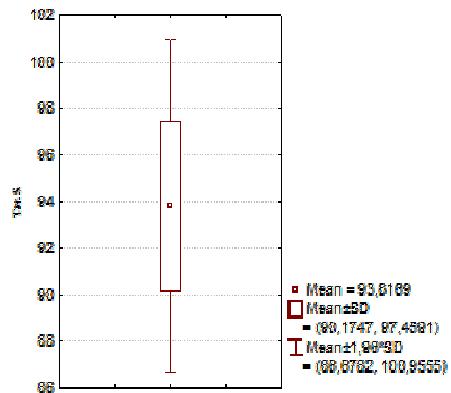
Summary Statistics: Al
Valid N=75
% Valid obs.=100,000000
Mean= 92,250747
Median= 92,250000
Mode= 1,000000
Frequency of Mode= 6,000000
Minimum= 92,000000
Maximum= 92,540000
Range= 0,540000
Variance= 0,019489
Std.Dev.= 0,139802



Summary: Tvr. S.



Summary Statistics:Tvr. S.
Valid N=75
% Valid obs.=100.00000
Mean= 93,816889
Median= 93,666667
Mode= 1,000000
Frequency of Mode= 8,000000
Minimum= 80,000000
Maximum=102,000000
Range= 22,000000
Variance= 13,265417
Std. Dev.= 3,642172



PRILOG E

Tablica E. 1. Ulazni parametri za obradu u Design-Expertu 7.0 - silumin

Design Summary

Study Type Mixture

Runs

75

Initial Design Historical Data

Blocks

No Blocks

Design Model Linear

Component	Name	Units	Type	Low Actual	High Actual	Low Coded	High Coded	Mean	Std. Dev.
A	Si	%	Mixture	6.75000	7.31000	0.000	0.784	7.070	0.122
B	Fe	%	Mixture	0.08200	0.15000	0.000	0.095	0.108	0.016
C	Cu	%	Mixture	0.00100	0.02000	0.000	0.027	0.008	0.006
D	Mn	%	Mixture	0.00010	0.09000	0.000	0.126	0.011	0.014
E	Mg	%	Mixture	0.30883	0.44000	0.000	0.184	0.374	0.029
F	Zn	%	Mixture	0.00000	0.04000	0.000	0.056	0.003	0.004
G	Ti	%	Mixture	0.11000	0.16000	0.000	0.070	0.136	0.012
H	Al	%	Mixture	92.03400	92.58700	0.000	0.774	92.290	0.126

L_Pseudo Coding

Total = 100.00

Response	Name	Units	Obs	Analysis	Minimum	Maximum	Mean	Std. Dev.	Ratio	Trans	Model
Y1	Tvrdoča		75	Polynomial	85.00000	102.00000	93.9502	3.27408	1.2	None	RQuadratic

Tablica E. 2. Statistička obrada i matematičko modeliranje rezultata**Sequential Model Sum of Squares [Type I]**

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value	Prob > F
Mean vs Total	6.620E+005	1	6.620E+005			Suggested
Linear vs Mean	98.38	7	14.05	1.33	0.2481	Suggested
Quadratic vs Lin	279.13	28	9.97	0.91	0.5956	
Sp Cubic vs Qua	366.25	29	12.63	2.10	0.1086	Aliased
Cubic vs Sp Cub	0.000	0				Aliased
Residual	60.21	10	6.02			
Total	6.628E+005	75	8837.36			

"*Sequential Model Sum of Squares [Type I]*": Select the highest order polynomial where the additional terms are significant and the model is not aliased.

Lack of Fit Tests

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F Value	p-value	Prob > F
Linear	645.38	57	11.32	1.88	0.1395	Suggested
Quadratic	366.25	29	12.63	2.10	0.1086	
Special Cubic	0.000	0				Aliased
Cubic	0.000	0				Aliased
Pure Error	60.21	10	6.02			

"*Lack of Fit Tests*": Want the selected model to have insignificant lack-of-fit.

Model Summary Statistics

Source	Std.	Adjusted		Predicted		
	Dev.	R-Squared	R-Squared	R-Squared	PRESS	
Linear	3.25	0.1224	0.0307	-0.1345	912.12	Suggested
Quadratic	3.31	0.4696	-0.0065	-1856.8141	1.494E+006	
Special Cubic	2.45	0.9251	0.4458		+	Aliased
Cubic					+	Aliased

+ Case(s) with leverage of 1.0000: PRESS statistic not defined

"*Model Summary Statistics*": Focus on the model maximizing the "Adjusted R-Squared" and the "Predicted R-Squared".

Response 1 Tvrdoca

ANOVA for Mixture Reduced Quadratic Model

*** Mixture Component Coding is L_Pseudo. ***

Analysis of variance table [Partial sum of squares - Type III]

Source	Sum of Squares	df	Mean	F	p-value
			Square	Value	Prob > F
Model	266.93	14	19.07	2.13	0.0223
<i>Linear Mixture</i>	98.38	7	14.05	1.57	0.1619
AC	31.88	1	31.88	3.56	0.0640
AE	74.42	1	74.42	8.31	0.0055
BF	32.01	1	32.01	3.58	0.0634
CF	31.72	1	31.72	3.54	0.0646
CH	41.35	1	41.35	4.62	0.0356
EH	84.07	1	84.07	9.39	0.0033
FG	84.26	1	84.26	9.41	0.0032
Residual	537.04	60	8.95		
<i>Lack of Fit</i>	476.83	50	9.54	1.58	0.2201
<i>Pure Error</i>	60.21	10	6.02		
Cor Total	803.97	74			
Std. Dev.	2.99		R-Squared	0.3320	
Mean	93.95		Adj R-Squared	0.1762	
C.V. %	3.18		Pred R-Squared	0.0017	
PRESS	802.62		Adeq Precision	6.457	

Diagnostics Case Statistics

Standard Order	Actual		Predicted		Internally		Externally		Influence on	
	Value	Value	Residual	Leverage	Studentized Residual	Studentized Residual	DFFITS	Fitted Value	Cook's Distance	Run Order
1	94.20	92.83	1.37	0.113	0.487	0.484	0.173	0.002		1
2	94.33	92.83	1.51	0.113	0.534	0.531	0.190	0.002		2
3	91.00	92.83	-1.83	0.113	-0.649	-0.646	-0.231	0.004		3
4	96.50	94.70	1.80	0.121	0.642	0.639	0.237	0.004		4
5	92.50	90.26	2.24	0.324	0.909	0.907	0.628	0.026		5
6	91.00	92.63	-1.63	0.121	-0.583	-0.580	-0.215	0.003		6
7	94.00	93.37	0.63	0.096	0.223	0.221	0.072	0.000		7
8	92.00	93.37	-1.37	0.096	-0.480	-0.477	-0.155	0.002		8
9	90.00	93.06	-3.06	0.215	-1.156	-1.159	-0.607	0.024		9
10	97.00	93.39	3.61	0.061	1.246	1.252	0.320	0.007		10
11	96.50	93.76	2.74	0.074	0.953	0.953	0.270	0.005		11
12	91.00	91.77	-0.77	0.196	-0.287	-0.285	-0.140	0.001		12
13	92.00	90.59	1.41	0.48 #	0.650	0.647	0.619	0.026		13
14	93.00	93.92	-0.92	0.60 #	-0.485	-0.482	-0.588	0.023		14
15	99.00	98.02	0.98	0.330	0.400	0.397	0.278	0.005		15
16	91.00	94.49	-3.49	0.197	-1.301	-1.309	-0.648	0.028		16
17	92.00	92.29	-0.29	0.387	-0.125	-0.124	-0.099	0.001		17
18	93.00	93.43	-0.43	0.124	-0.155	-0.153	-0.058	0.000		18
19	93.00	96.28	-3.28	0.118	-1.168	-1.172	-0.428	0.012		19
20	98.00	95.25	2.75	0.293	1.093	1.095	0.704	0.033		20
21	99.00	96.09	2.91	0.065	1.006	1.006	0.265	0.005		21
22	94.50	92.78	1.72	0.319	0.696	0.693	0.474	0.015		22
23	92.50	95.50	-3.00	0.250	-1.160	-1.163	-0.671	0.030		23
24	92.00	96.00	-4.00	0.187	-1.484	-1.500	-0.720	0.034		24
25	91.50	94.57	-3.07	0.059	-1.057	-1.058	-0.265	0.005		25
26	97.00	95.96	1.04	0.050	0.357	0.354	0.082	0.000		26
27	97.50	97.01	0.49	0.227	0.185	0.184	0.100	0.001		27
28	94.00	94.67	-0.67	0.056	-0.231	-0.229	-0.056	0.000		28
29	92.50	95.09	-2.59	0.141	-0.934	-0.933	-0.378	0.010		29
30	96.33	93.14	3.19	0.134	1.148	1.151	0.454	0.014		30
31	92.67	92.19	0.48	0.150	0.173	0.171	0.072	0.000		31
32	90.67	91.83	-1.16	0.51 #	-0.554	-0.551	-0.560	0.021		32
33	90.50	93.67	-3.17	0.259	-1.232	-1.237	-0.731	0.035		33
34	92.50	91.77	0.73	0.298	0.289	0.287	0.187	0.002		34
35	93.67	94.20	-0.53	0.053	-0.184	-0.182	-0.043	0.000		35

36	91.33	91.78	-0.45	0.144	-0.162	-0.161	-0.066	0.000	36
37	91.00	91.17	-0.17	0.332	-0.071	-0.070	-0.049	0.000	37
38	97.00	94.70	2.30	0.121	0.821	0.819	0.304	0.006	38
39	87.40	94.35	-6.95	0.128	-2.487	-2.604	-0.998	0.061	39
40	88.00	89.46	-1.46	0.44 #	-0.653	-0.649	-0.573	0.022	40
41	91.00	92.63	-1.63	0.121	-0.583	-0.580	-0.215	0.003	41
42	98.33	93.37	4.97	0.096	1.746	1.777	0.578	0.022	42
43	97.00	94.29	2.71	0.154	0.986	0.986	0.421	0.012	43
44	89.00	93.37	-4.37	0.127	-1.563	-1.583	-0.603	0.024	44
45	94.00	93.06	0.94	0.215	0.354	0.351	0.184	0.002	45
46	85.00	91.77	-6.77	0.196	-2.523	-2.646	-1.306	0.103	46
47	89.00	90.59	-1.59	0.48 #	-0.737	-0.734	-0.702	0.033	47
48	95.00	93.76	1.24	0.074	0.432	0.429	0.122	0.001	48
49	96.00	93.39	2.61	0.061	0.901	0.900	0.230	0.004	49
50	97.00	91.55	5.45	0.258	2.115	2.181	1.286	0.104	50
51	97.50	94.91	2.59	0.277	1.017	1.017	0.630	0.026	51
52	91.00	95.83	-4.83	0.131	-1.731	-1.761	-0.683	0.030	52
53	96.50	97.28	-0.78	0.269	-0.303	-0.301	-0.183	0.002	53
54	97.00	96.25	0.75	0.210	0.281	0.279	0.144	0.001	54
55	99.00	95.40	3.60	0.091	1.263	1.269	0.402	0.011	55
56	102.00	96.00	6.00	0.079	2.088	2.150	0.630	0.025	56
57	99.00	98.10	0.90	0.49 #	0.420	0.417	0.408	0.011	57
58	93.00	95.73	-2.73	0.121	-0.974	-0.973	-0.361	0.009	58
59	89.00	95.43	-6.43	0.108	-2.276	-2.361	-0.821	0.042	59
60	97.00	97.45	-0.45	0.095	-0.158	-0.156	-0.051	0.000	60
61	99.00	96.99	2.01	0.194	0.748	0.745	0.366	0.009	61
62	95.50	93.56	1.94	0.087	0.679	0.676	0.209	0.003	62
63	100.50	97.18	3.32	0.195	1.238	1.244	0.612	0.025	63
64	95.00	95.24	-0.24	0.082	-0.085	-0.084	-0.025	0.000	64
65	95.50	94.42	1.08	0.067	0.375	0.372	0.100	0.001	65
66	96.00	92.51	3.49	0.202	1.307	1.315	0.662	0.029	66
67	92.00	93.76	-1.76	0.261	-0.685	-0.682	-0.405	0.011	67
68	96.00	94.64	1.36	0.079	0.473	0.470	0.137	0.001	68
69	94.50	94.64	-0.14	0.060	-0.048	-0.047	-0.012	0.000	69
70	93.50	92.24	1.26	0.102	0.445	0.442	0.149	0.002	70
71	91.33	94.00	-2.66	0.188	-0.988	-0.987	-0.475	0.015	71
72	95.50	95.39	0.11	0.288	0.044	0.044	0.028	0.000	72
73	92.50	92.76	-0.26	0.94 #	-0.357	-0.355	-1.442	0.141	73
74	91.00	91.31	-0.31	0.233	-0.118	-0.117	-0.064	0.000	74
75	93.50	92.45	1.05	0.280	0.412	0.409	0.256	0.004	75

Obs with Leverage > 2.00 *(average leverage)

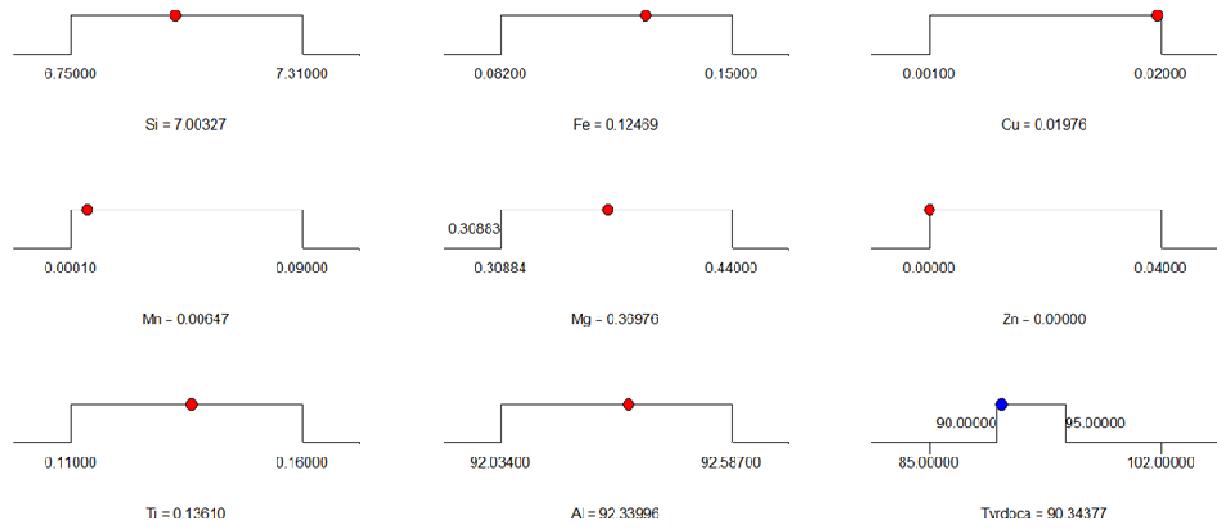
Current	Transform:	None
Box-Cox Power Transformation		
Constant	95% CI	95% CI
k	Low	High
0.000	-3.37	8.53
	Best	Rec.
	Lambda	Transform
	2.58	None

PRILOG F

Prvo riješenje:

Izvještaji:

„Ramp“ prikaz:



„Bar Graph“ prikaz:

Desirability

