

Агаянц И.М.

АЗЫ СТАТИСТИКИ В МИРЕ ХИМИИ



ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

НОТ

Агаянц И.М.

АЗЫ СТАТИСТИКИ
В МИРЕ ХИМИИ:
ОБРАБОТКА
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ
ДАННЫХ

ИЗДАТЕЛЬСТВО



НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ и ТЕХНОЛОГИИ

Санкт-Петербург, 2015

УДК 66-9.001.4/.5:65.012.2

ББК 22.18

A23

Агаянц И.М.

A23 Азы статистики в мире химии: Обработка экспериментальных данных — СПб.: Научные основы и технологии, 2015. — 618 с., ил.

ISBN 978-5-91703-044-9

Книга на примере анализа эластомерных систем и процессов их формирования иллюстрирует возможности использования статистических методов при обработке экспериментальных данных. Представлены общие понятия статистической обработки экспериментальных данных. Рассмотрены некоторые программные продукты, которые можно рекомендовать для их обработки. Систематически анализируются методы обработки данных и планирования эксперимента с использованием современных программных средств. Книга предназначена для специалистов, заинтересованных в использовании статистических методов в научной и производственной деятельности, а также для аспирантов и студентов технических вузов.

УДК 66-9.001.4/.5:65.012.2

ББК 22.18

Печатается по решению редакционного совета Московского государственного университета тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова.

Все права защищены. Никакая часть данной книги не может быть воспроизведена в какой бы то ни было форме без письменного разрешения владельцев авторских прав.

ISBN 978-5-91703-044-9

© Агаянц И.М., 2014

© Изд-во «Научные основы и технологии», 2015

Содержание

- Предисловие 7
- Глава 1. Теория эксперимента и мир резины. 8
- Литература 27
- Глава 2. Описание некоторых программных продуктов, предназначенных для обработки экспериментальных данных 28
 - 2.1. Программы *Table Curve 2D* И *Table Curve 3D* 28
 - 2.1.1. Ввод данных. 28
 - 2.1.2. Характеристика моделей, которые могут быть получены с использованием программы *TABLE CURVE 2D* 33
 - 2.1.3. Характеристика моделей, которые могут быть получены с использованием программы *Table Curve 3D* 37
 - 2.1.4. *Table Curve 2D*. Выбор моделей и их статистический анализ 40
 - 2.1.5. *Table Curve 3D*. Выбор моделей и их статистический анализ. 53
 - 2.2. Математический пакет *MATLAB* 59
 - 2.2.1. Графический интерфейс пользователя 60
 - 2.2.2. Построение графиков функций, зависящих от одной переменной. . 62
 - 2.2.3. Построение графиков функций, зависящих от двух переменных . . 66
 - 2.2.4. Решение многофакторных задач 68
- Литература 72
- Глава 3. Первичная статистическая обработка опытных данных 74
 - 3.1. Ошибка 74
 - 3.2. Вычисление основных статистик 78

3.3. Исключение грубых промахов.	91
3.4. Проверка принадлежности выборки нормальному распределению.	97
3.5. Проверка однородности дисперсий.	102
3.6. Проверка различия средних значений	108
Литература	114
Глава 4. Эмпирические формулы.	117
Литература	155
Глава 5. Выбор параметров оптимизации и факторов	158
5.1. Выделение существенных переменных на основе априорной информации	159
5.2. Экспериментально-статистические методы выделения существенных переменных.	176
5.2.1. Полный факторный эксперимент	177
5.2.2. Дробные реплики	194
5.3. Выбор факторов на основе отсеивающего эксперимента	217
Литература	224
Глава 6. Дисперсионный анализ.	226
6.1. Однофакторный дисперсионный анализ	227
6.2. Двухфакторный дисперсионный анализ	237
6.3. Многофакторный дисперсионный анализ	247
6.4. Планирование эксперимента в условиях временного дрейфа	271
Литература	276
Глава 7. Корреляционный анализ.	279
7.1. Парная корреляция.	280
7.2. Множественная корреляция	299
7.3. Ковариационный анализ	312
Литература	321
Глава 8. Оптимизация	324
8.1. Выбор параметров оптимизации	324

8.2. Поисковые методы экспериментальной оптимизации	334
8.2.1. Одномерный поиск	334
8.2.2. Многомерный поиск	342
8.3. Планирование экстремальных экспериментов в промышленных условиях.	361
8.4. Линейное программирование	368
8.5. Контрольные наблюдения	379
Литература	395
Глава 9. Описание почти стационарной области	398
9.1. Проблема оптимальности планов	399
9.2. Анализ некоторых разновидностей планов второго порядка	406
9.3. Применение современных программных продуктов для анализа почти стационарной области	415
9.4. Построение диаграмм состав–свойство	461
9.5. Анализ стабильности значений зависимой переменной	478
Литература	487
Глава 10. Анализ случайных полей и процессов	490
10.1. Некоторые подходы при проведении морфологических исследований резин	490
10.2. Моделирование процессов теплообмена при изготовлении резиновых изделий с использованием математического аппарата теории случайных процессов	507
Литература	528
Глава 11. Топология и теория графов как инструменты экспериментатора	530
11.1. Классификация двумерных сечений поверхности отклика	530
11.2. Классификация диаграмм состав–свойство	541
11.3. Возможности использования тополого-графовых подходов при интерпретации экспериментальных результатов	550
Литература	580
Заключение.	581

Приложения	587
1. Статистические таблицы	587
2. Основные команды <i>MatLab</i>	602
Элементарные функции.	602
Управление средой, файлами и переменными	603
Операторы и специальные символы	603
Логические функции.	606
Программирование	606
Специальные математические функции.	609
Решение различных математических задач.	609
Графика и визуализация данных	610
Оформление графиков.	611
Словарь терминов	612
Литература	617

Предисловие

Речь в книге пойдет об обработке экспериментальных данных.

В начале шестидесятых годов в нашей стране работы такого характера только начинались. В 1960 г. появилась книга В.В. Налимова «Применение математической статистики при анализе вещества». В 1965 г. вышла книга «Статистические методы планирования экстремальных экспериментов», в 1969 г. — «Новые идеи в планировании эксперимента». Налимов был пионером в применении в прикладных исследованиях статистических методов вообще и планирования эксперимента в частности.

Очень полезными для понимания принципов обработки данных и планирования эксперимента оказались лекции, которые читал в Московском институте тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова Л.П. Рузинов. И сейчас в МИТХТ трудятся прекрасные специалисты в этой области: А.Ю. Закгейм и П.В. Ермуратский.

В резиновой промышленности громадную работу в этом направлении проделали А.Г. Шварц и А.А. Донцов. Но результаты этой работы нельзя оценить однозначно — были и смелые решения, и ошибки.

Появление персонального компьютера во многом изменило организацию экспериментальных исследований и обработку опытных данных. Назрела необходимость объединить имеющийся богатый, но и во многом забытый опыт в области обработки экспериментальных данных и современные возможности информационных технологий.

Настоящая монография и представляет собой такую попытку. Вспомнить и переосмыслить основы обработки данных и планирования эксперимента с учетом специфики объекта исследования — резины и процессов, ее сопровождающих, и на основе этого наметить новые пути и возможности.

Глава 1. Теория эксперимента и мир резины

Что такое эксперимент? Откроем энциклопедический словарь: «Научно поставленный опыт, вообще опыт, проба, испытание». Философская энциклопедия: «Чувственно-предметная деятельность в науке, осуществляемая теоретически познанными средствами». Словарь *Macmillan English*: «1. Научное испытание для выяснения того, что случится с тем-то или кем-то при определенных условиях. 2. Ситуация, когда проверяется новая идея, метод или прием, чтобы выяснить, какой будет результат». Словарь *Webster*: «Испытание, проведенное при определенных условиях, для того, чтобы открыть неизвестный эффект или закон, проиллюстрировать известный закон или выдвинуть и испытать новую гипотезу». Википедия: «Эксперимент в научном методе — метод исследования некоторого явления в управляемых условиях. Отличается от наблюдения активным взаимодействием с изучаемым объектом».

Попробуем сделать какие-то заключения из того, что записано выше. Прежде всего, эксперимент — это некое научное действие. Далее: он активный, а может ли он быть пассивным? Например, мы не можем менять условия реализации технологического процесса, но изучаем этот процесс. В цитированном американском источнике несколько раз упоминается слово «закон», а ведь, кроме законов, есть еще и такое понятие как модель. Или поиск модели — уже не эксперимент? Увы, не все тут так просто, как кажется на первый взгляд.

Вспомним, как работали пионеры резиновой промышленности Чарльз Гудьир (1800–1860) и Томас Хенкок (1785–1865).

Существует распространенное мнение, что Гудьир не был ученым, а открытие вулканизации произошло случайно — оставил на печке каучук с серой, и тот свулканизовался. Но ведь не свулканизовался, а обуглился, и надо было разглядеть в этом обугленном образце тоненькую прослойку эластичной резины. Хенкок мастикатором хотел раздробить каучук на мелкие кусочки, а получил совершенно противоположный результат, но благодаря этому много заработал. Да, у них не было систематичности в исследованиях, и они смешивали каучук с самыми разными веществами в поисках желаемого эффекта. Но «случайные открытия делают только подготовленные умы». И нет сомнений в том, что интереснее бессистемно проводить оригинальные исследования, чем систематически изучать то, что уже сделано другими. И таких «исследований» уйма.

А вот Джордж Онслэгер (1873–1956), открывший органические ускорители, работал уже по строгому плану, перебирая различные органические основания. А ведь прошло уже почти сто лет со времен Гудьира и Хенкока.

Но эти гиганты могли себе позволить изучать только сравнительно простые объекты, да и способы проведения эксперимента были достаточно просты. Изучаемые объекты характеризовались небольшим числом переменных, и это допускало проведение однофакторного эксперимента. Напомним, что факторы — это то, что мы изменяем в процессе эксперимента. Они бывают количественные (время, температура, содержание какого-либо ингредиента) и качественные (тип каучука, марка технического углерода, фамилия оператора). Существовало табу: «Изменяй только один фактор, а все прочие держи постоянными». Никаких взаимодействий факторов, никаких возмущающих явлений. Опыт должен быть «чистым», все посторонние влияния — исключены. Полная воспроизводимость, ясное представление о том, какие именно факторы влияют на объект, причем число этих факторов всегда невелико. К изучаемому объекту подходили как к отдельному изолированному явлению, отвлекаясь от обратных связей и сложных взаимоотношений.

Нам придется опираться на сведения, почерпнутые из таких разделов математики, как теория вероятностей и математическая статистика.

С идеями о случайных явлениях человечество столкнулось еще в глубокой древности [1]. В трудах замечательных мыслителей Эллады — Демокрита, Платона, Аристотеля и др., в произведениях древнеиндийских и китайских авторов можно найти высказывания, касавшиеся случайных явлений. Мысль о возможности характеризовать числом и мерой степень случайности возникла значительно позднее, уже в XVI–XVII вв., и именно тогда начало формироваться понятие вероятности случайного события. Паскаль, а за ним Ферма, геометры XVII столетия, по справедливости считаются основателями науки о вероятностях.

Уже в XVIII столетии выяснилось, что теория вероятностей и растущие сферы ее применения не могут обойтись только понятиями случайного события и его вероятности. Теория ошибок наблюдений (измерений), а также более поздние исследования по теории стрельбы и молекулярной физике показали основополагающее значение понятия случайной величины и ее функции распределения.

Интерес к теории вероятностей возник в нашей стране фактически только в первой половине XIX века, когда по разным поводам к ней обратились такие выдающиеся исследователи, как Н. И. Лобачевский, М. В. Остроградский, В. Я. Буняковский. Из них только Буняковский основную часть своих творческих усилий посвятил задачам теории вероятностей и математической статистики.

В 1858 году ученый совет Михайловского артиллерийского училища (позднее Военно-инженерная академия им. Ф.Э. Дзержинского), в котором в течение ряда лет преподавал М.В. Остроградский, постановил организовать чтение необязательных курсов для развития научной инициативы слушателей и для расширения их кругозора. Уже осенью того же года Остроградский ввел необязательный курс теории вероятностей.

Прежде (а зачастую и сейчас) вопросы организации эксперимента целиком решал экспериментатор. Все, что требовалось от математика, касалось обработки

результатов уже проведенного эксперимента. Постепенно стало ясно, что речь должна идти не просто об обработке данных, а об оптимальных процедурах математико-статистического анализа. Такие процедуры были разработаны усилиями многих математиков [3]. В результате их деятельности возникли метод наименьших квадратов (французский математик Адриен Мари Лежандр (1752–1833); немецкий математик Карл Фридрих Гаусс (1777–1855)), основы регрессионного и корреляционного анализов (английский исследователь Фрэнсис Гальтон (1822–1911); английский математик и философ Карл Пирсон (1857–1936)), концепция малых выборок (английский математик Уильям Силей Госсет (1876–1936)). Экспериментатор теперь смог устанавливать количественные взаимосвязи между переменными взамен качественных рассуждений типа «хорошо – плохо», «больше – меньше», которыми он пользовался ранее.

Но вернемся к тем вопросам, которые были сформулированы после прочтения определений понятия «эксперимент».

Можно утверждать, что возник принципиально новый подход к экспериментированию, при котором в каждом опыте варьируют одновременно все независимые переменные (факторы) по специальному плану. Возникло планирование эксперимента. Комплекс проблем, связанных с методологическими аспектами теории эксперимента получил развитие в работах выдающегося отечественного ученого В.В. Налимова [4–12].

Эксперименты, реализованные таким образом, называют активными, в отличие от обычных, традиционных, пассивных экспериментов, при постановке которых в каждом отдельном опыте варьируется только один фактор.

Активные эксперименты обладают следующими преимуществами.

1. При многофакторном эксперименте соблюдаются определенные предпосылки.

Результаты наблюдений y_1, y_2, \dots, y_n представляют собой независимые, нормально распределенные случайные величины.

Среднее арифметическое \bar{y} вычисляется по формуле

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i / n. \quad (1.1)$$

А выборочная дисперсия S_y^2 (определенная по выборке, т. е. ограниченному количеству повторных наблюдений) рассчитывается по формуле

$$S_y^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 / (n-1). \quad (1.2)$$

Дисперсии равны друг другу (выборочные оценки S_{yi}^2 однородны), или, другими словами, если производить многократные повторные наблюдения над величиной y_i при некотором определенном наборе значений $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip}$, то дисперсия σ_{yi}^2 не будет отличаться от дисперсии σ_{yp}^2 , полученной при повторных наблюдениях для любого другого набора значений независимых переменных $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip}$.

Выражение в знаменателе называется числом степеней свободы. Химики изучают это понятие в курсе физической химии, когда говорят о правиле фаз Гиббса¹.

Независимые переменные (факторы) x_1, x_2, \dots, x_p измеряются с пренебрежимо малой погрешностью по сравнению с погрешностью в определении y (отклика).

Ясно, что эти требования могут быть выполнены только при активном эксперименте, кроме того, активный эксперимент просто лучше организован.

2. Поскольку план экспериментов (т. е. набор уровней варьирования факторов) составляют заранее, перед началом опытов, то ничто не мешает составить этот план так, чтобы максимально упростить последующую обработку экспериментов для построения моделей.

3. Соответствующим выбором плана при активном эксперименте при минимальных затратах (минимальном количестве экспериментов) получается максимум информации об изучаемых явлениях. Планы строят на p -мерных кубах, сферах, симплексах и других фигурах.

4. Кроме формирования функции отклика (построения эмпирической зависимости $y=f(x_1, x_2, \dots, x_n)$) попутно можно решить порой более важные для исследователя задачи — поиск экстремума (максимума или минимума) в p -мерном факторном пространстве и задачу оптимального управления процессами.

5. Методы планирования экспериментов позволяют опытным путем проранжировать факторы по степени их влияния на функцию отклика.

6. Планируемые эксперименты позволяют получить математическое описание таких процессов, которое ранее было затруднительным (например, при изучении диаграмм состав–свойство), и формализовать изучение явлений, зависящих от качественных факторов.

7. Планирование эксперимента позволяет изучать и математически описывать процессы и явления при неполном знании их механизма.

Область применения планируемых экспериментов распространяется на все явления, которые зависят от управляемых факторов, т. е. таких факторов, которые можно изменять и поддерживать на определенных уровнях. Опыт показывает, что в области синтеза резины это не всегда возможно, но стремиться к этому, безусловно, необходимо.

Выше неоднократно использовалось понятие «планирование эксперимента». Дадим определение этого понятия: *планирование эксперимента* — это область математической статистики, ставящая своей целью выбор количества и условий постановки экспериментов, необходимых и достаточных для решения задачи с требуемой точностью, разработку методов и приемов математической обработки результатов эксперимента и принятия на основе этого определенных решений.

¹ Почему $n - 1$, а не n ? В математике число степеней свободы — это число переменных минус число связей между ними; одна степень свободы потрачена на вычисление среднего. Поэтому $n - 1$. А если $n \rightarrow \infty$, то это уже будет не выборка, а генеральная совокупность, и дисперсия σ_y^2 называется генеральной. Очень важно понять, что при увеличении числа повторных наблюдений (вместо 5 лопаток из одной и той же резины разорвали 125) дисперсия S_y^2 (и ошибка, стало быть) стремится не к нулю, а к какому-то меньшему значению σ_y^2 .

Выше мы рассуждали про активный эксперимент, а теперь поговорим о законах и моделях.

Под *моделью* будем понимать некоторую логическую структуру, у которой описан ряд соотношений между ее элементами.

Понятие модели не следует путать с широко известным в науке понятием *закона*. В качестве такового рассмотрим, например, закон Ома для участка цепи. Этот закон ставит во взаимно однозначное соответствие между собой величину приложенного напряжения и возникающей при этом в проводнике силы тока. При данном сопротивлении R единственному значению напряжения U соответствует *единственное* значение силы тока I . Мир законов — это «абсолютная монархия». Если появляется какая-либо гипотеза, ставящая под сомнение данный закон, то эта гипотеза проверяется. Если она подтверждается, то «венчается на царство» вместо существующего закона, а последний «низвергается в бездну забвения». Не может существовать такого понятия, как плохой или хороший закон. Такая постановка вопроса есть абсурд. Сопоставим между собой, например, аналитическое выражение второго закона Ньютона в самой упрощенной форме и аналитическое выражение закона всемирного тяготения:

$$F = m \cdot a;$$

$$F = \frac{G \cdot m_1 \cdot m_2}{R^2}.$$

В качестве основы для определения понятия силы взято первое выражение, поэтому второе имеет размерный множитель G . Если бы исторически ситуация сложилась иначе, мы измеряли бы силу в $\text{кг}^2/\text{м}^2$, а не в $\text{кг} \cdot \text{м}/\text{с}^2$, и первое выражение содержало бы размерный множитель.

Если мыслить в терминах языкознания, то закон следует рассматривать как непротиворечивый силлогизм. Язык законов — это жесткий язык, в котором одному слову соответствует единственное смысловое значение.

Понятие модели принципиально отличается от понятия закона. Если у вас есть некоторое множество значений фактора x (температура, давление, концентрация) и поставленное ему в соответствие некоторое множество значений отклика y (плотность, вязкость, теплопроводность, прочность), то зависимость $y = f(x)$ можно описывать (аппроксимировать) параболой, гиперболой, отрезком синусоиды, даже прямой линией... Все зависит от точности измерений. При построении модели единственному значению фактора x соответствует некоторое *множество* значений отклика y . Мир моделей — это «демократическая республика». Одна модель не может ставить под сомнение другую. Она может быть в каких-то отношениях лучше другой, а в каких-то отношениях хуже, но не отвергает ее. При оценке моделей могут использоваться даже эстетические критерии [9, 14].

Язык моделей — это мягкий язык, в котором одному слову соответствует множество смысловых значений, и встает проблема выбора, которая не всегда просто решается.

Построение моделей особенно эффективно при анализе *диффузных систем*

[8, с. 7–12]. Эти системы (они еще называются плохо организованными системами или системами с плохой структурой) характеризуются следующими свойствами: 1) нет непроницаемых перегородок между различными физико-химическими процессами, которыми сопровождается функционирование таких систем; происходящие процессы нельзя рассматривать изолированно, даже в упрощенном варианте; 2) система характеризуется большим количеством факторов, определяющих ее поведение (высокая размерность задачи); 3) связи между переменными не носят функционального характера (их надо характеризовать не законами, а моделями); 4) для описания диффузных систем используются методы многофакторного эксперимента.

В хорошо организованных системах (которые изучаются в школе и в значительной степени в вузе) ситуация выглядит с точностью до наоборот. В системе можно выделить какой-либо процесс (например, диффузию) и исследовать его классическими методами. Все факторы, за исключением одного, можно стабилизировать и изучать зависимость интересующего свойства только от одного фактора. Связи между переменными характеризуются законами и могут рассматриваться как функциональные.

Для описания плохо организованных систем используется два метода.

Многомерная математическая статистика, предполагающая описание зависимости откликов от большого количества факторов (независимых переменных) при одновременном их варьировании. Основателем современной математической статистики считается английский ученый Рональд Фишер.

Другим методом является фрагментарное описание и логический анализ, основанный на *кибернетическом подходе*, разработанном американским математиком Норбертом Винером.

Одна из основных идей, применяемых в этих подходах, есть широко известная идея «*черного ящика*». Ее нужно понимать несколько иначе, чем это обычно излагается. Ящик называется черным потому, что содержимое его предполагается неизвестным. Но при подаче возмущений на вход мы получаем множество откликов на выходе. Если, реализуя обратную связь, мы пытаемся корректировать входы для получения нужной совокупности выходов, хотим мы того или нет, мы получаем определенное представление о содержимом ящика. Поэтому «*черный ящик*» превращается в «*серый*». Черный же ящик никому не нужен, так как эвристической функции не выполняет.

Остановимся на классификации моделей [8, с. 12–29].

Прежде всего, модели *математические*; они представляют собой мысленные схемы оригиналов, отражающие их существенные стороны. Они носят, как правило; абстрактный характер.

Разновидность таких моделей — это *эскизные* математические модели, заданные дифференциальными уравнениями, используются они для описания отдельных явлений, но не системы в целом. Важным этапом построения эскизных моделей является *проверка их качества*. Эта проверка предполагает следующие процедуры: проверку адекватности модели (т. е. соответствия между экспериментальными и рассчитанными значениями отклика); проверку содержательности модели (понимание того, что дает эта модель в сопоставлении с моделью, постулирующей неизменность отклика);

проверку предсказательной способности в центре плана для оценки нелинейности модели и анализ остатков для оценки временного дрейфа.

Следующая разновидность — это *программные* математические модели, заданные совокупностью программ для ЭВМ и позволяющие опробовать множество вариантов. Так, например, в нашей стране был создан суперкомпьютер терафлопного диапазона МВС-1000М стоимостью всего 10 млн долл. Машина была создана в самые сжатые сроки — с апреля 2000 г. по июль 2001 г. Она включает 768 процессоров типа «Альфа-21264», объединенных высокоскоростной коммуникационной средой. Общий объем оперативной памяти составляет 768 Гбайт, а дисковой — 7680 Гбайт. Удаленный доступ к ресурсам суперЭВМ осуществляется через компьютерную сеть, охватывающую узлы в 50 регионах России и включающую 30 вычислительных центров, суммарная производительность которых составляет 550 млрд операций в секунду. Создание такого комплекса радикальным образом меняет наши возможности во всех областях человеческой деятельности, включая фундаментальные исследования, вопросы современной техники и технологии, экономики, промышленности, образования, управления производством.

Далее, *комбинированные* математические модели, представленные дифференциальными уравнениями, принципиально отличаются от описанных выше. Эскизные и программные математические модели являются эвристическими, они носят познавательный характер, позволяют лучше понять структуру плохо организованных систем. Комбинированные модели строятся исходя из практических нужд, для предсказания поведения системы, оптимального управления на основе всестороннего анализа при громадном количестве факторов. В этом случае проверка адекватности модели вызывает серьезные затруднения, да и практически не проводится. Такая модель может не быть познавательной.

И наконец, *локально-интегральные (полиномиальные)* математические модели, представляющие собой многочлены различных степеней, которые могут строиться для громадного количества факторов и откликов. Несколько подробнее это можно трактовать следующим образом. Вообще говоря, механизм явлений может быть представлен дифференциальными уравнениями, но практически из-за сложности системы этого сделать не удастся. Эту систему дифференциальных уравнений можно решить, но ее решение нам неизвестно. Коэффициенты полинома (коэффициенты регрессии) можно интерпретировать как коэффициенты ряда Тейлора. С познавательных позиций полиномиальная модель не представляет особого интереса. Зная численные значения коэффициентов отрезка ряда Тейлора, нельзя восстановить исходную функцию, аналитическое выражение которой остается неизвестным исследователю, и нельзя восстановить исходные дифференциальные уравнения, которыми описывается механизм процесса. В практическом отношении полиномиальные модели могут оказаться очень полезными, если они используются, например, при разработке оптимальных условий протекания технологических процессов и в планировании эксперимента. Полиномиальная модель очень удобна, так как мы можем улучшать аппроксимацию, повышая порядок полинома, и при этом наша аппроксимирующая функция остается линейной по параметрам, что облегчает все последующие статистические процедуры, а именно,

применение метода наименьших квадратов для оценки параметров, выбор оптимального расположения точек в пространстве независимых переменных и т. д.

Кроме математических моделей следует упомянуть модели *физические* — модели внешнего подобия (*look alike model*). Такой метод моделирования называется масштабным моделированием. При этом важно что-то не потерять при моделировании объекта и не приобрести что-то, анализируемому объекту не свойственное. Примером физического моделирования является, например, исследование процесса смешения в лабораторном смесителе, геометрически подобном промышленному смесителю.

В заключение вспомним *схематические* модели. Эти модели дают схематическое, графическое изображение реального положения вещей. Примером такого подхода является схема технологического процесса, представленная условными фигурами без учета их масштабов.

Мы постарались выяснить, что такое эксперимент. Теперь надо пояснить, что такое *резина*, понять, она — плохо организованная система или хорошо организованная?

Вспомним, что каучук характеризуется высокой *молекулярной массой*. При выводе дифференциальных уравнений, например, гидродинамики или теплопроводности, мы оперируем дифференциальными объемами. Размеры молекул при этом считаются пренебрежимо малыми в сравнении с размерами этих дифференциальных объемов. В случае полимеров такое допущение нуждается в обосновании. Далее *полидисперсность*. В массе полимера, строго говоря, нет двух молекул одинаковой длины. Следовательно, мы имеем дело не с индивидуальным веществом, а со смесью гомологов.

Каучуки чаще всего используются не в чистом виде, а в комбинации с большим количеством низко- и высокомолекулярных продуктов органического и неорганического характера. Такие композиционные материалы являются *многокомпонентными*.

Эти материалы на различных стадиях переработки могут быть *однофазными* и *многофазными*. Например, в смесь могут вводиться жидкие компоненты, какие-то вещества в процессе переработки могут плавиться, могут, наконец, получаться пористые или ячеистые среды.

По аналогичным причинам система может быть *гомогенной* и *гетерогенной*.

При создании деформаций в материале, последний ориентируется в направлении одной или двух осей (одноосная и двуосная ориентация). При этом молекулярные цепи вытягиваются в направлении вытяжки, что сопровождается появлением *анизотропии* свойств. Например, при растяжении образца резины прочность в направлении ориентации выше, чем в перпендикулярном направлении. То же самое будет наблюдаться и в случае такого, например, свойства, как теплопроводность. Из этого следует, что теплопроводность ориентированного материала нельзя характеризовать каким-то одним числом. В этом случае используются тензорные представления (тензор — это обобщение понятия вектора на случай большего количества измерений).

Поведение полимерных композиционных материалов характеризуется громадным количеством *неконтролируемых* переменных.

Перечисленные выше обстоятельства являются причиной *низкой метрологической и гносеологической точности* при анализе поведения полимерных композиционных материалов. Понятие метрологической точности предполагает точность описания

поведения системы, характеризующейся большим количеством факторов, контролируемых и неконтролируемых. Гносеологическая точность характеризует возможность построения моделей, параметры которых можно интерпретировать с физико-химической точки зрения.

Инерционность рассматриваемого объекта. Резиновые смеси имеют низкую теплопроводность и высокую вязкость, что обуславливает существенное запаздывание в реакции системы на управляющие команды.

Противоречание друг другу *требования* к объекту на различных стадиях его переработки. Например, материалы должны быть пластичными на стадии формования и быстро структурироваться при вулканизации. Но такое поведение не может быть организовано по нашему желанию: мы нагреваем материал, чтобы он стал пластичным, а он начинает структурироваться.

Традиционная *приверженность* специалистов *методам* исследования *хорошо организованных систем*. Сформированные рано воззрения очень сильны, и вызвать сомнения в их универсальности практически невозможно.

Из всего перечисленного выше следует вывод: «Самый надежный алгоритм бессилен, если не выполняется условие теоремы существования». Объекты, с которыми имеет дело специалист в области переработки каучуков, представляют собой типичные *плохо организованные системы* с громадным количеством источников изменчивости.

Планирование эксперимента — это определенная *система* постановки эксперимента. Систему отличает оптимальное управление ведением эксперимента с учетом конкретной ситуации в изучаемой системе. Планирование эксперимента — мощный инструмент, стратегия экспериментально-статистического исследования и оптимизации сложных систем, позволяющая сократить объем эксперимента, получить модели в различных областях применения.

Первая публикация по планированию эксперимента появилась более восьмидесяти лет назад. За это время планирование эксперимента превратилось в самостоятельную область математики.

Первоначально основной областью применения планирования эксперимента были агробиологические исследования, связанные с неоднородностью условий их проведения. Затем возникла необходимость исследовать многофакторные задачи.

К 1950-м годам были сформулированы и широко опробованы методы планирования эксперимента, объединенные под общим названием дисперсионного анализа.

Большое влияние на развитие методов планирования эксперимента оказала работа Г. Бокса и Е. Уилсона, в которой была рассмотрена методология исследования многофакторных экстремальных задач, что послужило толчком к интенсивному развитию работ этого направления.

Построение планов второго порядка оказалось сложнее, долгое время не удавалось сформулировать критерии оптимальности плана. Было введено понятие *D*-оптимальности как обобщенного критерия оптимальности плана, однако работы этого направления не получили практического применения из-за большого количества опытов. С помощью ЭВМ были построены квази-*D*-оптимальные планы с малым

числом точек, однако и такой подход не решил задачи теоретического обоснования критерия оптимальности.

Различные методы планирования эксперимента широко используются в практических исследованиях, при решении технологических задач, особенно на лабораторной стадии разработки технологических процессов.

Опыт применения планирования эксперимента в области химико-технологических исследований оказался удачным, и эти методы стали применяться в смежных областях, и в том числе в резиновой промышленности.

Задачи планирования эксперимента в своей широкой постановке с точки зрения чистой математики не представляются корректными, но они существуют, решаются и оказывают большую помощь экспериментаторам.

Планирование эксперимента коренным образом изменило мировоззрение исследователя, изменило и его отношение к стратегии исследования.

Что же получил экспериментатор в результате развития идей планирования эксперимента [6, с. 9–20, 8, с. 29–69]?

Принципиально *иное отношение к ошибке*. В настоящее время особое значение приобрели информационные службы. Тем не менее, иногда выгоднее провести исследование, чем найти о нем ссылку в литературе или каких-либо иных источниках, включая электронные. Усложняются методы исследования, поэтому необходимо, чтобы все исследователи говорили на одном и том же языке. В этом деле важная роль принадлежит именно планированию эксперимента.

Ошибка является одним из основных понятий статистики вообще и планирования эксперимента в частности. Прежде всего, нужно усвоить, что ошибка неизбежна. Ошибка в эксперименте не должна быть минимально возможной, а должна быть разумной. Анализ ошибок таит в себе неисчерпаемые возможности познания. Словом, надо избавиться от представления об ошибке как о чем-то нежелательном, и понять, что ошибка несет в себе такую же информацию, как и сам эксперимент.

Природа статистических выводов. До сих пор распространено неправильное представление о природе статистических выводов. Нельзя предложить совокупность алгоритмов, которые позволили бы вывести новые закономерности на основе новых наблюдений. Исследователь должен выдвинуть несколько поддающихся проверке утверждений (гипотез), а затем выбрать одну из них на основе статистических методов. Многое здесь зависит от плодотворности выдвинутой гипотезы, но даже если статистический анализ покажет, что выдвинутая гипотеза не противоречит результатам наблюдений, из этого не следует, что она, безусловно, верна. На практике всегда можно предложить много других гипотез, столь же хорошо согласующихся с результатами наблюдений. И никогда нельзя быть уверенным, что предложены все возможные гипотезы.

Природа статистических выводов не противоречит общей для всех экспериментальных наук системе построения гипотезы: в экспериментальных науках всегда сначала выдвигается гипотеза, а затем она проверяется экспериментально. Гипотеза не может быть принята безусловно, она всегда остается открытой для дальнейшей проверки — этим определяется прогресс в экспериментальных науках. Наряду с этим

хотя бы один экспериментальный результат, противоречащий гипотезе, служит достаточным основанием для отбрасывания гипотезы. Этот отрицательный результат должен быть установлен вполне надежно. Следует разработать правила, позволяющие отбрасывать или принимать те или иные результаты.

Так, условились, что различие между проверяемой гипотезой и результатом наблюдений статистически значимо, если вероятность его случайного появления меньше некоторого критического значения. Критический уровень значимости (5 или 1%-ный) определяет только систему договоренности, и здесь нет какого-либо другого глубокого смысла.

При выдвижении гипотез вводят статистические понятия ошибок первого и второго рода. Ошибка первого рода заключается в непринятии проверяемой гипотезы, когда она верна; вероятность совершения такой ошибки обозначают α и называют *уровнем значимости*. Ошибка второго рода — принятие проверяемой гипотезы, когда она неверна; вероятность совершения ошибки второго рода обозначают β .

Рандомизация. В любой экспериментальной работе мы имеем дело не только с основными интересующими нас факторами, но и со множеством других. Раньше большие усилия тратили на стабилизацию этих мешающих факторов, а если это было трудно сделать, на них просто не обращали внимания. Теперь эти факторы предлагают превратить в случайные величины путем рандомизации условий проведения эксперимента.

Одна из основных идей математической статистики, таким образом, состоит в том, что надо не преодолевать, а создавать случайную ситуацию, чтобы избавиться от необходимости стабилизировать мешающие факторы. Это принципиально новая идея, радикально меняющая стратегию эксперимента. Те, кто ее поняли, стали более осторожными в своих выводах.

Например, необходимо определить прочность вулканизатов. Для анализа взято пять пластин, каждая из которых отдельно проходила все стадии изготовления (взвешивание ингредиентов и каучуков, смешение, вулканизацию). Из каждой пластины отобрали по пять образцов для испытаний. Если ограничиться анализом пяти образцов из одной пластины, то мы получим среднее значение 17,0 МПа и среднееквадратическое отклонение 0,9 МПа. Если же вести расчеты для пяти образцов, взятых по одному из каждой пластины, получим среднее значение 19,5 МПа и среднееквадратическое отклонение 3,2 МПа. В первой серии среднее значение на 2,5 МПа меньше, чем во второй, а ошибка меньше в 3,5 раза. Можно утверждать, что в эксперименте имела место существенная систематическая ошибка. Во второй серии (несмотря на увеличение среднееквадратического отклонения) среднее значение ближе к истинному. Вывод следующий: надо брать образцы для испытаний из каждой пластины. Но этого никто не делает.

Последовательный эксперимент. Смысл этой процедуры состоит в использовании шаговой стратегии. После каждого шага проводят анализ результатов и на основании этого анализа принимают решение о дальнейшей деятельности. Исследователь отказывается от попытки заранее задать строго фиксированную схему проведения эксперимента — принимаемая им стратегия предусматривает возможность

принятия решения в зависимости от результатов, полученных на отдельных этапах исследования.

Концепция последовательного анализа во многом повлияла на развитие статистических методов исследования. Так, при постановке экстремальных экспериментов, варьируя большое количество переменных, исследователь пытается найти оптимальные условия протекания некоторого технологического процесса шаг за шагом. Строит линейную модель, затем осуществляет движение по градиенту, описание почти стационарной области полиномами разного порядка и т. д. При этом каждый последующий шаг определяется ранее полученными результатами.

Концепция последовательного анализа Вальда оказалась совсем не частной задачей — она создала философию стратегии шагового эксперимента. Здесь дело не только в том, что исследователь в среднем тратит в два раза меньше усилий для решения поставленной задачи. Гораздо большее значение имеет то обстоятельство, что исследователь получил в свои руки четкую модель, позволяющую ему осмысленно принимать решение о том, когда эксперимент должен быть закончен.

Оптимальное использование пространства независимых переменных. При исследовании зависимости какого-либо показателя от ряда факторов (независимых переменных) успешность решения задачи во многом определяется тем, как экспериментальные точки расположены в пространстве независимых переменных (факторном пространстве). Параметры, интересующие исследователя, могут быть найдены с меньшей ошибкой, чем при традиционных методах исследования. В задачах со многими факторами исследователь имеет возможность варьировать все факторы сразу, тогда как при традиционном подходе изучает действие каждого фактора в отдельности. При планировании многофакторных экспериментов ошибка при определении коэффициентов модели существенно уменьшается.

Концепция оптимального использования факторного пространства (пространства независимых переменных) показала громадные преимущества многофакторного эксперимента по сравнению с традиционным, однофакторным экспериментом. Задача построения многофакторных планов превратилась в сложнейшую математическую проблему, хотя здесь все базируется на хорошо известном свойстве многомерного пространства: радиус сферы, описанный вокруг куба, которым задаются границы исследуемого пространства, увеличивается с ростом числа независимых переменных, включаемых в задачу; следовательно, область исследуемого пространства увеличивается, хотя границы варьирования по каждой независимой переменной сохраняются неизменными. Теперь математик — специалист по планированию эксперимента — вмешивается в работу экспериментатора до того, как эксперимент поставлен. Он совместно с экспериментатором составляет план эксперимента, т. е. выбирает оптимальное расположение экспериментальных точек в пространстве независимых переменных. Далее он составляет схему оптимальной процедуры исследования, которая может состоять из нахождения линейного приближения, движения по градиенту линейного приближения, описания поверхности отклика полиномом второго порядка, анализа этого полиномиального описания, выхода из минимакса и т. д. Все эти промежуточные процедуры могут быть организованы так, чтобы они не зависели ни от возможного

неконтролируемого временного дрейфа, ни от неоднородности исходных материалов. Выигрыш в эффективности эксперимента здесь получается в два, пять и большее число раз — чем сложнее задача, чем больше независимых переменных включено в исследование, тем эффективнее становятся методы планирования эксперимента. Но главное, может быть, заключается не в этом, поддающемся количественному учету выигрыше в эффективности, а в том, что исследователь здесь получает логически четкую модель для проведения всей последовательности операций.

Редукция информации. Планирование эксперимента обеспечивает четкую логическую схему всех операций. Исследователь хорошо знает, что, когда и как надо делать, как надо интерпретировать результаты наблюдений. В математической статистике разработаны методы, позволяющие обрабатывать результаты наблюдений наилучшими приемами, которые дают так называемые эффективные оценки. Исследователи получают сопоставимые результаты, и возможна их коллективная работа.

Раньше исследователь пытался дать известное представление о достоверности своих результатов пространственным описанием условий проведения эксперимента. Теперь публикации могут даваться в краткой форме — в виде таблиц, графиков, моделей. С развитием вычислительной техники стало возможным представлять результаты работы несколькими моделями, обсуждая их в дальнейшем с различных позиций.

Концепция редукции (свертки) информации позволила создать теоретические предпосылки для построения стандартных методов обработки результатов наблюдений. Эта концепция стала вполне реалистической после того, как было введено понятие робастности — устойчивости к нарушению исходных предпосылок, всегда сильно идеализированных.

Этическая функция планирования эксперимента. Математическая статистика предлагает исследователю не набор рецептов, а набор идей, которые можно рассматривать как основу для создания математической теории эксперимента. Эти идеи направлены на получение существенно новых результатов из экспериментальных данных. Применение их позволяет резко сократить объем исследований, увеличить четкость суждений исследователя об эксперименте; при этом обостряется интуиция экспериментатора.

Однако математическая статистика не может помочь сформулировать цель исследования, не дает рецепта, как из множества различных статистических методов выбрать наиболее подходящий. Для фантазии, воображения и интуиции всегда остается место.

Исследователь, обладающий воображением и говорящий в науке на языке моделей, может многое. Если он исследует зависимость y от x , и по его представлениям эта зависимость должна быть линейной, если ему очень хочется, чтобы она была линейной, то он сделает все возможное, чтобы она стала линейной. Он исключит из рассмотрения все, что противоречит его гипотезе, найдет аргументы в пользу такого исключения, убедит себя в правоте своего поступка. И он не лгун, он просто увлеченный человек, работающий с ошибкой; и эта ошибка — некий коридор значений — позволяет осуществлять такие «фокусы». Последовательное применение принципов планирования эксперимента все ставит на свои места и освобождает экспериментатора

от мук совести, взваливая весь этот груз на плечи статистики.

Таким образом, планирование эксперимента несет еще и нравственную миссию, при этом вырабатывается критическое отношение к своей работе, научная дисциплина, элегантность в работе, отсутствие категоричности в выводах, более общий взгляд на вещи и еще ряд других полезных качеств.

В этой связи важно представлять, какова роль вычислительной техники в решении затронутых вопросов. Чем больше мы знаем способ решения задачи, тем большую часть работы можно переложить на машины. Цель расчетов состоит не в получении чисел, а в понимании; но для этого надо знать, как производится вычисление. Если исследователь этого не знает, то маловероятно, что он извлечет что-нибудь ценное из вычислений.

Планирование эксперимента и логика вопросов. Если считать, что основная цель планирования эксперимента — построение моделей некоторым наилучшим образом, то, поскольку модель можно рассматривать как вопросно-ответную структуру, задачи планирования эксперимента можно перевести в область логики вопросов. В таком случае вскрывается гносеологическая сущность планирования эксперимента.

Работа исследователя в области технических наук — это диалог с природой. И если физика, химия, биология и другие науки говорят о том, какие вопросы надо задавать природе, то планирование эксперимента ставит себе задачу показать, как надо эти вопросы задавать.

Обращаясь к концепции «черного ящика» как познавательной модели, следует отметить, что вход x — независимая переменная, в новом ракурсе будет представлять собой вопросы, выход — зависимая переменная, отклик — ответ. Вопрос — исходное звено познавательного процесса, умение правильно и эффективно ставить вопросы, т. е. формулировать задачу не менее важно, чем изобретение способов самих ответов. Вопрос имеет смысл лишь как элемент системы вопрос–ответ. Вопрос — это высказывание, требующее ответа, предполагающее ответ. В вопросе всегда отражено не просто неизвестное, а подлежащее выяснению. Вопрос правомочен тогда, когда существует необходимость и возможность получения ответа.

Пусть выдвинута гипотеза о том, что вопросу A соответствует ответ B ($A \rightarrow B$). Эта гипотеза проверяется экспериментально, и обнаруживается, что мы не можем утверждать, что $A \rightarrow B$; но, с другой стороны, не можем утверждать, что вопросу A не соответствует ответ B , потому что такая гипотеза не проверялась.

Экспериментатор, в какой бы области он не работал, должен быть знаком с разными концепциями; он должен быть подготовлен хотя бы настолько, чтобы иметь возможность разговаривать со специалистами — консультантами в области теории эксперимента.

Математическая теория эксперимента базируется в значительной степени на идеях и методах математической статистики. Эта дисциплина, с одной стороны, все же уже математической статистики, в нее не входят такие разделы статистики,

как теория массового обслуживания, не входят и методы, используемые в экономических и демографических исследованиях. С другой стороны, эта дисциплина шире математической статистики — в ней есть свои собственные проблемы, в которых только постановка задачи формулируется в терминах математической статистики, а решение этих задач производится с использованием разнообразных, отнюдь не традиционных статистических методов. Одна из таких проблем — это планирование эксперимента, которое находится, как правило, вне сферы интересов тех, кто воспитан на классических задачах теории вероятностей и математической статистики. Если некоторые задачи планирования эксперимента и формулируются хорошо в привычных терминах математической статистики, то решаются они в простейшем случае методами линейной алгебры, в более сложном случае — с использованием теории множеств, функционального анализа, теории игр; при этом здесь вовсе не используются такие фундаментальные представления математической статистики, как учение о функциях распределения.

Немного о *статистике* [16, 17, с. 11–24].

В науке термин проходит сложный путь эволюции его смыслового содержания, можно наметить три основных этапа. Вначале оно означало учение об экономическом и политическом состоянии государств, основанное на анализе их экономических факторов, которые можно выразить количественно. Возможно, что в этом своем значении оно уже оказалось связанным со словом «staat» (нем. государство). На втором этапе развития под термином «статистика» стали понимать обработку любых количественно представленных данных, где бы они ни были получены — в науке или в другой сфере деятельности людей. И, наконец, в наше время термин «статистика» иногда определяют очень широко — как метанауку. Объектом этой науки оказывается логика и методология других наук, логика принятия решений, в других науках, логика эксперимента. Но столь широкое понимание не является общепринятым.

Существует две диаметрально противоположные точки зрения на статистику. Согласно одной из них публикуемые статистические данные содержат в себе некое смысловое качество и обладают такой степенью непогрешимости, что их можно принимать на веру безоговорочно. Это, конечно, так же абсурдно, как и другое, еще более распространенное мнение о том, что можно сфабриковать статистические данные, которые докажут все что угодно, а потому, следовательно, они в действительности ничего не доказывают.

Обе точки зрения ошибочны потому, что они основаны на незнании или непонимании целей, пределов и требований подлинной статистической теории и практики. Практическая ценность статистики снижается или омрачается тем, что данные часто подаются без какого-либо указания на то, как получены те или иные группы показателей, каковы способы их правильного толкования и обладают ли они вообще какой-либо подлинной ценностью.

Существует довольно четко очерченная линия, отделяющая специалистов в области статистики от дилетантов. Статистику можно сравнить с языком. Лингвисты, бегло говорящие на иностранном языке, могут свободно понять разговор друг

друга. Точно так же ни один статистик не может ввести в заблуждение другого статистика, хотя они могут иметь законные расхождения во мнениях. Люди, не умеющие говорить по-французски, признают отсутствие знаний в этой области; они не знают языка и готовы признать это незнание. Однако, не понимая статистику, они редко с такой же готовностью признают это. Это, возможно, объясняется тем, что публикуемые статистические данные обычно выглядят обманчиво простыми и обезоруживающими.

Статистик не может заглядывать в будущее в большей степени, чем кто-либо другой. Однако прогнозирование количественных характеристик определенных событий в будущем представляется для тех, кто не понимает принципов такого прогнозирования, едва ли не равнозначным ясновидению. В результате они склонны преуменьшать усилия статистика, когда они обвиняют его в неумении сделать нечто такое, на что статистик никогда не претендовал.

Добросовестные статистики не занимаются неоправданными манипуляциями с показателями, чтобы получить те ответы, которые они хотят, а не те подлинные ответы, которые диктуются данными. Однако перед массовым читателем все же стоит проблема, заключающаяся в том, как судить о ценности предлагаемых ему фактов в статистическом выражении. Каким образом может он понять, является ли статистическое выражение добросовестным или его вводят в заблуждение. Очень часто он принимает на веру статистические показатели, а также все, что они, как это представляется, означают, либо же он дает им какое-либо неоправданное толкование, не подкрепленное исходными данными.

Это очень серьезная проблема, которую не всегда можно легко разрешить. Тем не менее, существуют некоторые критерии, которыми можно с успехом пользоваться. Первый и самый важный шаг состоит в том, что нужно относиться к статистическим показателям объективно и никогда не принимать их за чистую монету. Понимание того, что статистика должна подвергаться сомнению, является очевидной предпосылкой к формулированию тех вопросов, которые следует задавать, и выступает, поэтому, само по себе в качестве важнейшего фактора при интерпретации статистических данных.

Если имеется возможность построить математическую модель, которая точно либо приближенно соответствует задаче, то в действие вступают математические методы, применяющиеся независимо от существования самой задачи до тех пор, пока не найдено решение. Площадь круга символически выражается как πr^2 , и это выражение может рассматриваться независимо от того, что означает квадратная величина, т. е. r^2 . С точки зрения статистики трудность состоит в самом построении модели, поскольку существует большое число неизвестных величин, между которыми должна быть установлена какая-то взаимосвязь, а также ряд факторов, о самом существовании которых можно даже не подозревать. Статистические данные показывают реальные вещи, и в силу этого не могут быть оторваны от реальной действительности, но если возникает возможность построить достаточно хорошую модель, то все последующие действия производятся автоматически. После того как данные заложены в вычислительную машину, ответ на какую-либо задачу может быть получен

в результате чисто механических действий, причем машине совершенно не нужны сведения о характере самой задачи.

Элементарные принципы исчисления в статистике не новы. Корни их следует искать у самых истоков математики. Исходным является понятие измерения, и как только человек начал считать свой скот и делать для этого зарубки на деревьях, родилась статистическая наука. Хотя своим происхождением статистика уходит в глубокую древность, развитие ее в значительной мере происходило сравнительно недавно. Как наука она постоянно идет вперед, изыскивая, проверяя и развивая все более новые и точные методы, совершенствуясь внутренне и воспринимая методичку все новых разделов математики. В результате этого развития она достигает в настоящее время такой широты, что появляется необходимость в специализации даже среди статистиков.

Однако статистика не просто наука; интерпретация статистических данных по своему характеру близка к искусству, несмотря на то что в значительной своей части она может производиться сугубо научными методами. Действительная ее ценность кроется, конечно, в *интерпретации* статистических данных. Нет смысла заниматься собиранием данных ради самого их накопления. Сравнение различных количественных показателей, причинный анализ действия различных факторов, выяснение тенденций изменения количественных показателей в различные периоды времени или в изменяющихся условиях, установление на этой основе определенных действий, а затем предсказание возможных результатов определенных фиксированных явлений — в этом и состоит ценность статистики.

При правильном пользовании данными и правильной их интерпретации эти методы дают возможность получать значимые результаты, но лишь при том условии, что в самих данных содержатся основные условия реализации этих результатов. Те, кто стремится к получению значимого результата любой ценой, даже если имеющиеся данные не подтверждают вывода, оказывают статистике такую же плохую услугу, как люди с заранее поставленной целью, сознательно публикующие фальсифицированные и искаженные данные в стремлении ввести в заблуждение неосведомленного читателя.

Существует целая пропасть между статистическим и нестатистическим миром идей, и статистику зачастую очень трудно оперировать своими идеями по другую сторону пропасти. В этом есть доля и его вины, ибо его жаргон, как всякая научная терминология, усугубляет трудности. Парадоксально, что этим недостатком страдают даже самые простые термины, потому что статистика заимствует ряд слов из общего употребления и дает им совершенно другие или ограниченные значения.

Применяемая в современных статистических теориях математика представляет сугубо специальную область. Что касается языка элементарной статистики, то он сравнительно просто осваивается и после овладения им дает ключ к замечательному и увлекательному предмету. Как говорил Ф. Поллок (1901 г.), «новый язык — загадка, пока не покорен, и большая сила позднее...».

Какова стратегия эксперимента?

Приведем только один пример.

Д.К. Монтгомери [18, с. 8–10].

1. *Признание факта существования задачи и ее формулировка.* Это положение может показаться довольно тривиальным, но на практике часто бывает непросто понять, что существует проблема, требующая экспериментальных исследований, и выработать ясную и общепринятую формулировку этой проблемы. Необходимо уточнить все представления о целях эксперимента. Ясная формулировка задачи во многих случаях оказывается существенной для лучшего понимания явлений и решения задачи.

2. *Выбор факторов и уровней.* Экспериментатор должен отобрать независимые переменные, или факторы, которые будут исследоваться в эксперименте. Факторы в эксперименте могут быть количественными или качественными. При исследовании количественных факторов нужно продумать то, как поддерживать желаемые значения этих факторов и как их измерять. Мы должны также выбрать значения, или уровни, факторов, которые будут использованы в эксперименте. Эти уровни могут быть заданы или выбраны случайным образом из множества всех возможных уровней фактора.

3. *Выбор переменной отклика.* При выборе отклика, или зависимой переменной, экспериментатор должен быть уверен в том, что отклик, который предстоит измерять, действительно содержит информацию об исследуемой проблеме. Нужно подумать также и о том, как будет измеряться отклик и какова вероятная точность этих измерений.

4. *Выбор плана эксперимента.* Этот этап является наиболее важным в процессе экспериментирования. Исследователь должен задать величину отличия от истинного отклика, которое он хочет обнаружить, и величину риска, на который он может пойти, с тем чтобы выбрать соответствующий объем выборки. Он должен также определить, в каком порядке будут собираться данные и какой метод рандомизации будет применен. Необходимо всегда согласовывать между собой статистическую точность и стоимость эксперимента. Должна быть предложена математическая модель эксперимента, что позволит провести статистический анализ данных.

5. *Проведение эксперимента.* В ходе эксперимента, т. е. реального процесса сбора данных, исследователь должен внимательно следить за тем, чтобы все проходило в соответствии с планом. Особое внимание нужно обращать на рандомизацию, точность измерений и поддержание как можно большей однородности внешних условий эксперимента.

6. *Анализ данных.* Для анализа данных эксперимента должны применяться статистические методы. При этом важно не забывать и о точности вычислений. Современные средства вычислительной техники во многом облегчили экспериментатору эту задачу, одновременно сократив трудоемкость вычислений. В процессе анализа данных часто оказываются полезными и графические методы.

7. *Выводы и рекомендации.* По завершении анализа данных экспериментатор может сделать выводы относительно своих результатов. Нужно дать физическую интерпретацию статистических выводов и оценить их практическое значение, а затем вынести рекомендации об использовании результатов. Эти рекомендации могут включать и проведение дальнейших экспериментов, поскольку исследование обычно является итеративным процессом, когда отдельный эксперимент, отвечая на некоторые

вопросы, одновременно ставит новые. Представляя свои результаты и выводы, экспериментатор должен стараться использовать как можно меньше специальной статистической терминологии и формулировать свое сообщение по возможности проще. Использование рисунков и графиков — очень эффективный способ представления важных результатов эксперимента.

И еще интересная аналогия [19, с. 17].

Аналогия между вычислительным и лабораторным экспериментами.

Лабораторный эксперимент	Вычислительный эксперимент
Образец	Модель
Прибор	Программа для компьютера
Калибровка	Тестирование программы
Измерение	Расчет
Анализ данных	Анализ данных

Стратегию эксперимента можно сравнить с восхождением на гору.

1. Все расчеты, связанные с обработкой экспериментальных данных, целесообразно производить, как это ни странно, с использованием вычислительной техники (по возможности, современной). Но для этого надо знать, как этой техникой пользоваться, и надо овладеть некоторым количеством программ. Иногда овладеть какой-то программой бывает даже сложнее, чем разложить палатку.

2. Навыки. Существуют элементарные правила обработки экспериментальных данных. Назовем это «Первичной статистической обработкой опытных данных».

3. Нельзя объять необъятное и исследовать все в зависимости от всего. Поэтому нужно выбрать главные (определяющие) отклики и факторы. А, может, какие-то свойства можно экспериментально не определять, а рассчитывать, зная какие-то другие свойства.

4. Можно идти вверх зигзагами, иногда даже возвращаясь назад, а можно двигаться по самой круче. Эта процедура называется оптимизацией. Только это не то, что имеет в виду резинщик, когда определяет продолжительность вулканизации, обеспечивающую оптимальное сочетание свойств. Оптимизация в математике — это поиск области (именно области, а не точки), где отклик имеет экстремальное значение. Здесь же надо затронуть такую процедуру, как промышленный эксперимент.

5. На вершине. Здесь без планирования эксперимента уже никак нельзя обойтись. А сделать это можно самыми различными методами с использованием различных критериев.

6. И наконец, в спокойной обстановке все надо красиво оформить и правильно интерпретировать.

Автору неоднократно приходилось слышать в адрес планирования эксперимента упреки, что такой подход выхолащивает истинное физико-химическое содержание процессов и сводит все к мертвым, ничего не выражающим схемам. Конечно,

уравнения регрессии, к которым мы будем прибегать, содержат параметры, которые физического толкования чаще всего не имеют, но они на это и не претендуют. Нет смысла противопоставлять модели эскизные (несущие в себе физический смысл) и локально-интегральные. И те и другие имеют свою «нишу», и овладение умением построения тех и других моделей – ключ к успеху.

Литература

1. Гнеденко Б.В. Из истории науки о случайном. — М.: Знание. 1981. — 64 с.
2. Реньи А. Письма о вероятности / Пер. с венгер. — М.: Мир. 1970. — 93 с.
3. Адлер Ю.П., Грановский Ю.В., Маркова Е.В. Теория эксперимента: прошлое, настоящее, будущее. — М.: Знание. 1982. — 64 с.
4. Налимов В.В. Применение математической статистики при анализе вещества. — М.: Физматгиз. 1960. — 430 с.
5. Налимов В.В., Чернова Н.А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. — М.: Физматгиз. 1965. — 340 с.
6. Новые идеи в планировании эксперимента. Сб. статей под ред. В.В. Налимова. — М.: Физматгиз. 1969. — 334 с.
7. Налимов В.В., Мульченко З.М. Наукометрия: Изучение развития науки как информационного процесса. — М.: Наука, 1969. — 192 с.
8. Налимов В.В. Теория эксперимента. — М.: Наука. 1971. — 207 с.
9. Налимов В.В. Вероятностная модель языка. — М.: Наука. 1979. — 304 с.
10. Налимов В.В., Голикова Т.И. Логические основания планирования эксперимента. — М.: Металлургия. 1981. — 128 с.
11. Таблицы планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей. Справочное издание под ред. В.В. Налимова. — М.: Металлургия. 1982. — 751 с.
12. Налимов В.В. Канатоходец. — М.: Прогресс. 1994. — 456 с.
13. Джини К. Логика в статистике / Пер. с итал. М.: Статистика. 1973. — 128 с.
14. Головин Б.Н. Язык и статистика. М.: Просвещение. 1971. — 192 с.
15. Сойер У.У. Прелюдия к математике / Пер. с англ. — М.: Просвещение. 1972. — 192 с.
16. Никитина Е.П., Фрейдлина В.Д., Ярхо А.В. Коллекция определений термина «Статистика». — М.: Изд-во МГУ. 1970. — 46 с.
17. Рейхман У.Дж. Применение статистики / Пер. с англ. — М.: Статистика. 1969. — 296 с.
18. Монтгомери Д.К. Планирование эксперимента и анализ данных / Пер с англ. — Л.: Судостроение. 1980. — 384 с.
19. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: В 2-х частях // Пер. с англ. — М.: Мир. 1990. Ч. 1 — 349 с.

Глава 2. Описание некоторых программных продуктов, предназначенных для обработки экспериментальных данных

2.1. Программы *Table Curve 2D* И *Table Curve 3D*

Эти программы предназначены для построения графиков в двумерной и трехмерной системе координат.

2.1.1. Ввод данных

На рис. 2.1 показано меню программы *Table Curve 2D*. Это меню появляется сразу после открытия программы. Ввод данных может осуществляться с помощью клавиатуры или из файла.

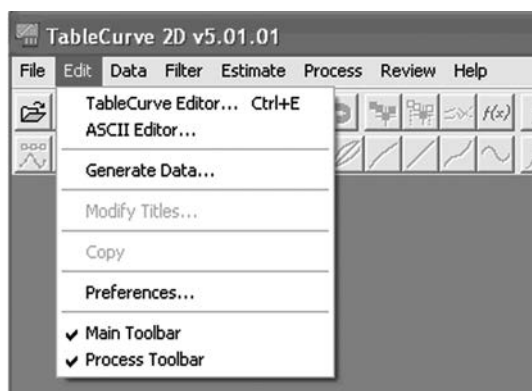
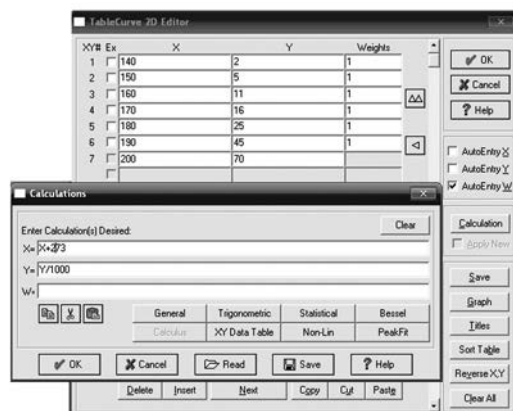


Рис. 2.1. Исходное меню программы *Table Curve 2D*

Рис. 2.2. Окно редактора программы *Table Curve 2D*

При вводе данных с клавиатуры необходимо щелкнуть на строчке *Table Curve Editor* (редактор) или нажать одновременно клавиши *Ctrl+E*.

Окно редактора программы показано на рис. 2.2.

В этом редакторе данные вводятся вручную в два столбца *X* и *Y*. В третьем столбце вводятся веса. Если какая-либо точка зафиксирована дважды, в третьем столбце надо ввести цифру 2. Другой случай корректировки весов состоит в том, что иногда необходимо, чтобы аппроксимирующая кривая обязательно проходила через какую-либо точку (например, начало координат). В этом случае в третьем столбце надо ввести большое число (100, например). Линия обязательно пройдет через эту точку, но в ущерб требованию метода наименьших квадратов, в соответствии с которым производится выбор параметров моделей. По умолчанию веса выбираются равными единице.

На рис. 2.2 показаны данные, характеризующие зависимость константы скорости вулканизации резин на основе каучука СКН-26 от температуры вулканизации.

Если необходимо провести преобразования по осям координат (например, прологарифмировать или перевести температуру в шкалу Кельвина), это делается после нажатия клавиши *Calculation* (см. рис. 2.2). В рассматриваемом случае значения по оси абсцисс переводятся в шкалу абсолютных температур, а значения по оси ординат делятся на 10^3 .

Другой способ ввода данных использует стандартный код для обмена информацией (*ASCII Editor*, рис. 2.1). Через этот редактор можно переносить данные из *Microsoft Word*, *Microsoft Excel* и др.

Для обработки графических изображений для получения двух столбцов чисел *X* и *Y* и их последующего ввода в программу *Table Curve* удобно использовать программу *Grafula*. Надо отметить, что эта программа работает с изображениями, сохраненными в формате *bmp*.

На рис. 2.3 показаны кривые зависимости условной прочности вулканизатов при растяжении от продолжительности вулканизации при различных температурах.

После ввода данных в программе *Table Curve 2D* появится меню и графическое изображение зависимости в виде ломаной линии (рис. 2.5, цифры, разумеется, введены здесь дополнительно).

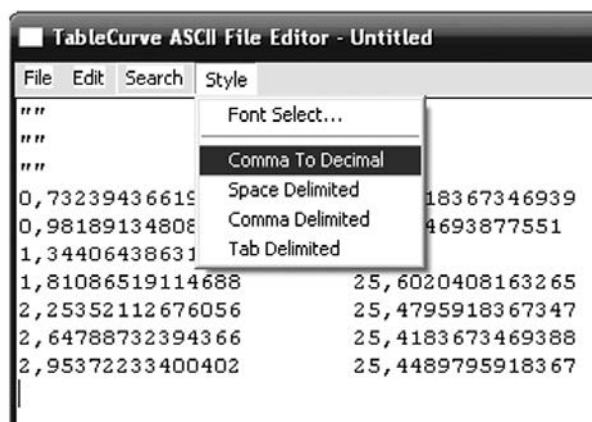


Рис. 2.4. Данные в ASCII Editor

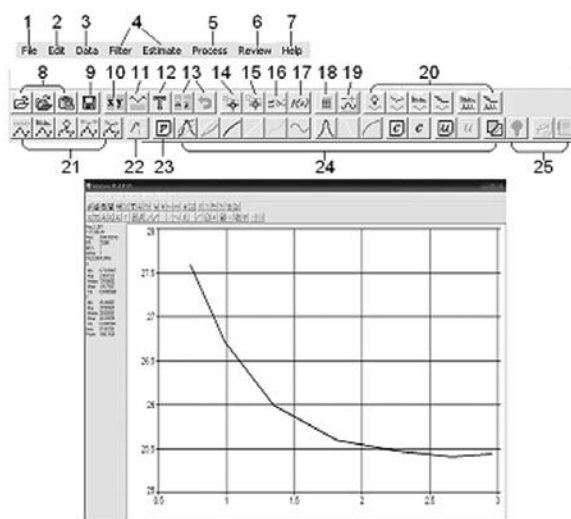


Рис. 2.5. Окно программы *Table Curve 2D* после ввода данных

Что есть что в этом меню?

Начнем с первой строки.

1 — выполнение операций сохранения; 2 — ввод данных (*Table Curve Editor* и *ASCII Editor*); название и надписи по осям; копирование столбцов чисел (*Copy*);

ввод количества значащих цифр в расчетах (*Preferences*); 3 — переход в формат для оформления графика; построение графических изображений (до пяти) произвольных уравнений; разбиение графического окна; вход в окно преобразований осей координат; построение кривых производной или интегральной кривой; статистические данные по x и y (средние значения, отклонения, медианы, экстремальные значения); 4 — операции сглаживания; 5 — построение модели; 6 — клавиши активируются после выбора модели; 7 — помощь (перечень моделей, справочник, связь с сетью).

Перейдем ко второй строке меню.

8 — поиск исходных данных; 9 — сохранение; 10 — вызов значений, введенных в редакторе; 11 — ввод данных; 12 — ввод названия и надписей по осям; 13 — очистка окна ввода данных; 14 — переход в формат для оформления графика; 15 — разбиение графического окна; 16 — переход в формат для оформления графика; 17 — построение графических изображений (до пяти) произвольных уравнений; 18 — вход в окно преобразований осей координат; 19 — построение кривых производной или интегральной кривой; 20 — сглаживание.

Нижняя строка меню.

21 — сплайн-аппроксимация; 22 — моделирование и прогнозирование; 23 — ввод количества значащих цифр в расчетах; 24 — расчет моделей (*Process*); 25 — клавиши активируются после выбора модели.

Соответствующее меню в программе *Table Curve 3D* представлено на рис. 2.6.

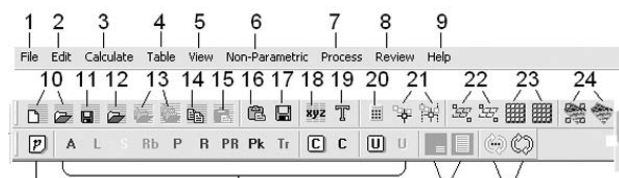


Рис. 2.6. Меню программы *Table Curve 3D* после ввода данных в редакторе

Все построено аналогичным образом.

Верхняя строка меню.

1 — поиск файлов, сохранение; 2 — редактор (*Table Curve Editor* и *ASCII Editor*); 3 — вход в окно преобразований осей координат; 4 — оформление названия и надписей по осям; статистические данные по x , y и z (средние значения, отклонения, медианы, экстремальные значения); сглаживание; 5 — переход в формат для оформления графика; варьирование области изменения переменных; построение графического изображения произвольного уравнения; анимация; 6 — переход в формат для оформления графика; 7 — расчет модели; 8 — ввод количества значащих цифр в расчетах (*Preferences*); 9 — помощь (перечень моделей, справочник, связь с сетью).

Средняя строка меню.

10 — поиск исходных данных; 11 — сохранение; 12 — вызов значений, введенных в редакторе; 13 — клавиши активируются после выбора модели; 14 — создание копии

меню; 15 — вставка копии; 16 — вставка пространственного изображения; 17 — сохранение значений переменных; 18 — вызов окна редактора; 19 — оформление названия и надписей по осям; 20 — вход в окно преобразований осей координат; 21 — переход в формат для оформления графика; 22 — варьирование области изменения переменных; 23 — сглаживание; 24 — переход в формат для оформления графика.

Нижняя строка меню.

25 — ввод количества значащих цифр в расчетах (*Preferences*); 26 — расчет модели; 27 — клавиши активируются после выбора модели; 28 — анимация.

Конечно, осваивать все эти премудрости ввода данных нужно сидя за компьютером.

2.1.2. Характеристика моделей, которые могут быть получены с использованием программы **TABLE CURVE 2D**

Модели, которые могут быть получены с использованием программы *Table Curve 2D*, можно разбить на две большие группы: линейные относительно параметров и нелинейные относительно параметров. Например, модель $y = a + bx^{2.5} + cx^{0.5}\ln x + dx^{0.5}$ — линейная относительно параметров, а модель $y = a + bx^c$ — нелинейная.

Дело в том, что параметры моделей надо находить методом наименьших квадратов. Записывают сумму следующего содержания: $R = \Sigma(y - (a + bx^{2.5} + cx^{0.5}\ln x + dx^{0.5}))^2$. Она называется «функционал» (числовая функция, заданная на векторном пространстве). Далее находят производные R по a , по b , по c и по d . Получается четыре уравнения с четырьмя неизвестными. И такая система решается аналитически. А вот со вторым уравнением этот способ не работает, потому что там коэффициент c стоит наверху, получается система из трех уравнений, но решена она может быть только численно, методом последовательных приближений.

Вот двухпараметрические модели, линейные относительно параметров: $y = a + bx$, $y = a + bx\ln x$, $y = a + bx^{1.5}$, $y = a + bx^2$, $y = a + bx^2\ln x$, $y = a + bx^{2.5}$, $y = a + bx^3$, $y = a + be^x$, $y = a + bx^{0.5}\ln x$, $y = a + b(\ln x)^2$, $y = a + bx/\ln x$, $y = a + bx^{0.5}$, $y = a + b\ln x$, $y = a + b/\ln x$, $y = a + b/x^{0.5}$, $y = a + b\ln x/x$, $y = a + b/x$, $y = a + b/x^{1.5}$, $y = a + b\ln x/x^2$, $y = a + b/x^2$, $y = a + be^{-x}$ (21 штука). Следующая группа (21) моделей такая же, только вместо y стоит $\ln y$. Далее следует подстановка вместо y величины обратной ($1/y$), затем $y^{0.5}$, y^2 . Всего 105 двухпараметрических моделей.

Трехпараметрические модели: $y = a + bx + cx\ln x$, $y = a + bx + cx^{1.5}$, $y = a + bx + cx^2$... далее подстановки. Всего получается 630 моделей. 1330 четырехпараметрических моделей — и это без подстановок, которые, конечно, можно осуществить в редакторе. 1140 моделей по пять параметров. Далее идут полиномы (многочлены) от $y = a + bx$ до $y = a + bx + cx^2 + dx^3 + \dots + ux^{20}$.

В эту же группу входят дробно-рациональные функции, представляющие собой в правой части отношения многочленов различных степеней. И все это также может быть снабжено различными подстановками.

Сюда же относятся полиномы, построенные из тригонометрических функций (полиномы Фурье) и обратных тригонометрических функций (полиномы Чебышева).

Также можно ввести какие-то свои модели (функции пользователя).

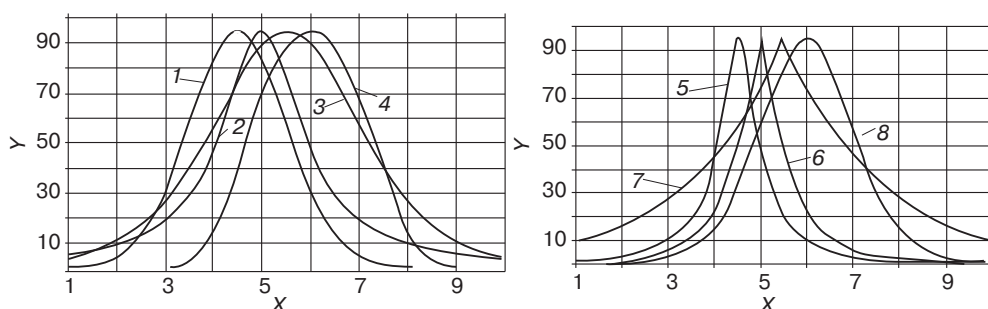


Рис. 2.7. Симметричные унимодальные кривые

Наибольший интерес представляют нелинейные относительно параметров модели. Это объясняется тем обстоятельством, что параметрам этих моделей может быть придан в ряде случаев определенный физико-химический смысл, чего никак нельзя достичь, используя полиномы высоких степеней, хотя они и могут обеспечить высокую точность при аппроксимации.

Сюда относятся симметричные и несимметричные унимодальные (одновершинные) кривые с максимумом. Некоторые примеры таких моделей представлены графически и в виде формул (рис. 2.7 и рис. 2.8).

Во всех рассмотренных случаях параметр « a » модели соответствует значению амплитуды кривой, а параметр « b » — моде, т. е. абсциссе максимума кривой. Параметр « c » не всегда имеет однозначное толкование. Это видно из приведенных ниже расчетов.

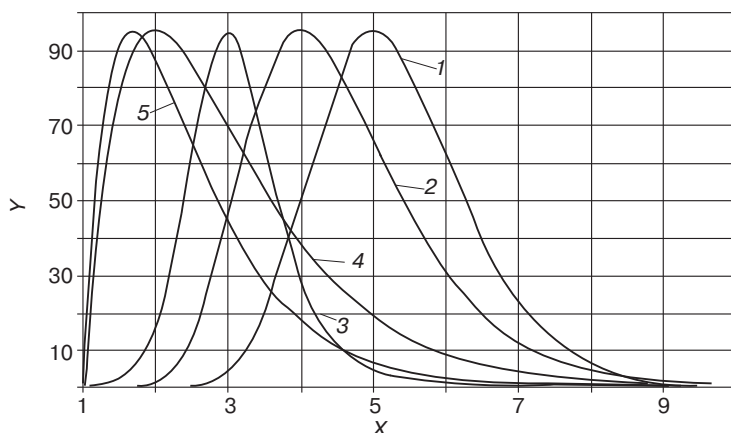


Рис. 2.8. Несимметричные унимодальные кривые

При $x = b \pm c$ в случае кривой Гаусса значение ординаты равно $ax \exp(-0,5)$, т. е. $0,6065a$. Для кривой Лорентца при аналогичных условиях ($x = b \pm c$) значение ординаты составляет половину амплитуды ($0,5a$). Для кривой Лапласа получим при $x = b \pm c$ значение ординаты $ax \exp(-2^{0,5})$, что составляет $0,2431a$. Наконец, для

симметричной кривой Стьюдента при $x = b \pm c$ и в частном случае при $d = 3$ значение ординаты составляет $9/16$ от амплитуды, т. е. $0,5625a$.

Для несимметричного логарифмически нормального распределения при $x = b \times \exp(c)$ значение ординаты равно $a \times \exp(-0,5)$, т. е. $0,6065a$. В случае распределения экстремальных значений при $x = b - c$ значение ординаты составляет $a \times \exp(-\exp(1) + 2) = 0,4876a$. При $x = b + c$ значение ординаты $a \times \exp(-\exp(-1)) = 0,6922a$. Пульсационная кривая при $x = b + c$ показывает следующее значение ординаты: $4 \times a \times \exp(-1)(1 - \exp(-1)) = 0,9302a$. В случае гамма-распределения при $x = b + c$ и $d = 1,5$ получим ординату $a \times \exp(-1)3^{0,5} = 0,6372a$.

Вторая группа нелинейных относительно параметров моделей представляет кривые, которые получаются интегрированием кривых предыдущей группы. Эти кривые также могут быть симметричными, а могут быть и несимметричными. Некоторые из этих моделей представлены на рис. 2.9.

Во всех случаях параметр « a » соответствует значению ординаты, к которой кривая асимптотически стремится. Параметр « b » соответствует медиане, т. е. такому значению абсциссы, при котором ордината равна $a/2$.

Такие модели удобно использовать при анализе кинетических кривых. Например, при изучении кинетических кривых процесса вулканизации принято рассматривать вулканизационные характеристики. Одной из них является абсцисса (время), при которой процесс прошел на 50% ($t_{C(50)}$) — в рассматриваемом случае это параметр « b ».

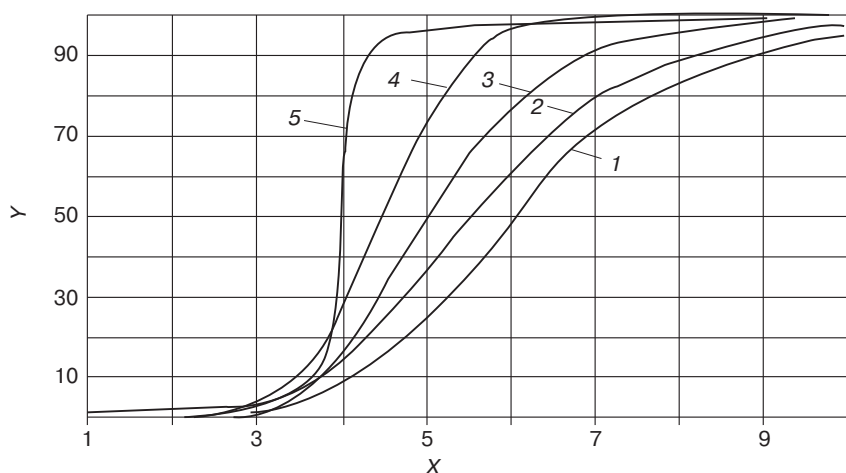


Рис. 2.9. Интегральные (кумулятивные) кривые

Другой важной характеристикой процесса вулканизации является оптимум вулканизации ($t_{C(90)}$), при котором процесс прошел на 90%.

Если использовать, например, логистическую модель, параметр « c » можно так выразить через эти вулканизационные характеристики: $c = \ln 9 / (\ln t_{C(50)} - \ln t_{C(90)})$.

Некоторые формулы могут вызывать к себе резко негативное отношение, например, записанная ниже функция Гаусса.

1	Логистическая функция $y = \frac{a}{1 + (x/b)^c}$	6	Функция Вейбулла $y = a \left[1 - \exp \left(- \left(\frac{x + c(\ln 2)^{1/d} - b}{c} \right)^d \right) \right]$
2	Логарифмически нормальная функция $y = \frac{a}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{-\ln(x/b)}{\sqrt{2}c} \right)$	7	Асимметричный сигмоид $y = a \left[1 + \exp \left(- \frac{x - c \ln(2^{1/d} - 1) - b}{c} \right) \right]^{-d}$
3	Функция экстремальных значений $y = a \exp \left(- \exp \left(- \frac{x + c \ln(\ln 2) - b}{c} \right) \right)$	8	Асимметричный сигмоид $y = a \left[1 - \left(1 + \exp \left(\frac{x + c \ln(2^{1/d} - 1) - b}{c} \right) \right)^{-d} \right]$
4	Функция Гаусса $y = \frac{a}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{x-b}{\sqrt{2}c} \right) \right]$	9	Функция Гаусса $y = \frac{a}{2} + \frac{a}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{x-b}{\sqrt{2}c} \right) - \frac{a}{2} \left[\left(\frac{d}{ d } + \operatorname{erf} \left(\frac{x-b}{\sqrt{2}c} - \frac{c}{\sqrt{2}d} \right) \right) \exp \left(\frac{c^2}{2d^2} + \frac{b-x}{d} \right) \right]$
5	Функция Лоренца $y = \frac{a}{\pi} \left[\arctg \left(\frac{x-b}{c} \right) + \frac{\pi}{2} \right]$	10	Сигмоид $y = \frac{a}{1 + \exp \left(- \frac{x-b}{c} \right)}$

В таблицах, относящихся к рис. 2.7 и 2.9, фигурировали сокращения erf и erfc . Что это такое? В математике функция ошибок (error function) — это неэлементарная функция, возникающая в теории вероятностей, статистике и теории дифференциальных уравнений в частных производных.

Она определяется следующим выражением [1, с. 70–81, 2, с. 944–946, 3, с. 119, 4, с. 119–123]:

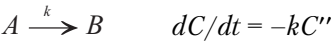
$$\operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt.$$

Дополнительная функция ошибок, обозначаемая $\operatorname{erfc} x$ (иногда применяется обозначение $\operatorname{Erf} x$), определяется через функцию ошибок:

$$\operatorname{erfc} x = 1 - \operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty \exp(-t^2) dt.$$

Особую группу моделей, нелинейных относительно параметров, составляют модели кинетические.

Рассмотрим некоторые из них.
 Необратимые реакции, протекающие по схеме:



Максимальная концентрация: *a*. Константа скорости: *b*. Порядок реакции: *n*.

<i>n</i>	Модель	
	Падение концентрации	Рост концентрации
0,5	$y = a - \sqrt{abx} + \frac{b^2x^2}{4}$	$y = \sqrt{abx} - \frac{b^2x^2}{4}$
1	$y = a \exp(-bx)$	$y = a (1 - \exp(-bx))$
2	$y = \frac{a}{1 + abx}$	$y = a \left(1 - \frac{1}{1 + abx} \right)$
3	$y = \frac{a}{\sqrt{1 + 2a^2bx}}$	$y = a \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + 2a^2bx}} \right)$
<i>c</i>	$y = (a^{1-e} + bcx - bx)^{1/1-e}$	$y = a - (a^{1-e} + bcx - bx)^{1/1-e}$

А это выражения для медиан.

<i>n</i>	0,5	1	2	3	<i>c</i>
<i>Md</i>	$\frac{2b\sqrt{a} - b\sqrt{2a}}{b^2}$	$\ln 2/b$	$1/ab$	$3/2a^2b$	$\frac{(a/2)^{1-c} - a^{1-c}}{bc - b}$

И наконец, самые простые, нелинейные относительно параметров, модели общего характера (степенные и экспоненциальные):

$y = ax^b$	$y = a \exp(-x/b)$	$y = a + bx^c$
$y = a + b \exp(-x/c)$	$y = a \exp(-x/b) + c \exp(-x/d)$	

2.1.3. Характеристика моделей, которые могут быть получены с использованием программы *Table Curve 3D*

Уравнения в программе *Table Curve 3D* записываются в виде $z = f(x,y)$, где *x* и *y* — факторы, *z* — отклик.

Значительное место в каталоге моделей занимают полиномиальные модели, линейные относительно параметров. В общем виде эти модели выглядят следующим образом: $z = a + \sum b_i x^i + \sum c_j y^j$, где $x - x^{\pm 1}; \ln x; y - y^{\pm 1}; \ln y; i, j \in [1;5]$.

Важными являются полиномиальные ряды Тейлора:

$$z = a + bx + cy + dx^2 + ey^2 + fxy + gx^3 + hy^3 + ixy^2 + jx^2y, \text{ где } x - x^{\pm 1}; \ln x; y - y^{\pm 1}; \ln y.$$

Эти уравнения делают возможным моделировать эффекты взаимодействия и охватывают класс уравнений регрессии второго и третьего порядка для двух факторов, чаще всего применяемых при планировании эксперимента для описания почти стационарной области.

Если у нас имеется два фактора — два ускорителя; содержание одного — x , содержание другого — y , и оба ускорителя варьируются на двух уровнях (две дозировки), то в этих условиях мы можем реализовать измерения в четырех точках при минимальном и максимальном содержании каждого из ингредиентов. Тогда получится модель следующего вида: $z = a + bx + cy$. Но можно добавить в эту модель еще один компонент dxy , и тогда коэффициент d в полученном уравнении будет количественно характеризовать совместное влияние двух ускорителей. Каким-либо другим способом выявить совместное действие двух ускорителей невозможно. Это и называется эффектом взаимодействия.

Здесь также фигурируют полиномы, построенные из тригонометрических функций (полиномы Фурье) и обратных тригонометрических функций (полиномы Чебышева).

Дробно-рациональные функции в общем виде можно представить так: $z = (a + \sum b_i x^i + \sum c_j y^j) / (1 + \sum d_k x^k + \sum e_l y^l)$, где $x - x^{\pm 1}; \ln x; y - y^{\pm 1}; \ln y; i, j, k, l \in [1; 3]$.

Ряды Тейлора в случае дробно-рациональных функций содержат, и это чрезвычайно важно, эффекты взаимодействия: $z = (a + cx + ey + gx^2 + iy^2 + kxy) / (1 + bx + dy + fx^2 + hy^2 + jxy)$, где $x - x; \ln x; y - y; \ln y$.

В каталоге дано громадное количество нелинейных относительно параметров моделей, представляющих собой модификации моделей, показанных в предыдущем разделе. Покажем некоторые из них.

Функции Гаусса:

$$z = a \exp(-0,5 * (((x - b)/c)^2 + ((y - d)/e)^2))$$

$$z = a + b \exp(-0,5 * (((x - c)/d)^2 + ((y - e)/f)^2)) \quad z = a / ((1 + ((x - b)/c)^2) * (1 + ((y - d)/e)^2))$$

$$z = a \exp(-0,5 * (((x - b)/c)^2 + ((y - d)/c)^2)) \quad z = a + b / ((1 + ((x - c)/d)^2) * (1 + ((y - e)/f)^2))$$

$$z = a + b \exp(-0,5 * (((x - c)/d)^2 + ((y - e)/d)^2)) \quad z = a / ((1 + ((x - b)/c)^2) * (1 + ((y - d)/c)^2))$$

$$z = a \exp(-0,5 * ((x - b)/c)^2) + \quad z = a + b / ((1 + ((x - c)/d)^2) * (1 + ((y - e)/d)^2))$$

$$+ d \exp(-0,5 * ((y - e)/f)^2) \quad z = a / (1 + ((x - b)/c)^2 + d / (1 + ((y - e)/f)^2))$$

$$z = a + b \exp(-0,5 * ((x - c)/d)^2) + \quad z = a + b / (1 + ((x - c)/d)^2 + e / (1 + ((y - f)/g)^2))$$

$$+ e \exp(-0,5 * ((y - f)/g)^2) \quad z = a + by + c / (1 + ((x - d)/e)^2)$$

$$z = a + by + c \exp(-0,5 * ((x - d)/e)^2) \quad z = a + bx + c / (1 + ((y - d)/e)^2)$$

$$z = a + bx + c \exp(-0,5 * ((y - d)/e)^2) \quad z = a + by + cy^2 + d / (1 + ((x - e)/f)^2)$$

$$z = a + by + cy^2 + d \exp(-0,5 * ((x - e)/f)^2) \quad z = a + bx + cx^2 + d / (1 + ((y - e)/f)^2)$$

$$z = a + bx + cx^2 + d \exp(-0,5 * ((y - e)/f)^2)$$

Функции Лоренца:

Логистические унимодальные функции:

$$\begin{aligned}
 z &= 16a \exp(-((x-b)/c) - ((y-d)/e)) / ((1 + \exp(-((x-b)/c)))^2 (1 + \exp(-((y-d)/e)))^2) \\
 z &= a + 16b \exp(-((x-c)/d) - ((y-e)/f)) / ((1 + \exp(-((x-c)/d)))^2 (1 + \exp(-((y-e)/f)))^2) \\
 z &= 16a \exp(-((x-b)/c) - ((y-d)/c)) / ((1 + \exp(-((x-b)/c)))^2 (1 + \exp(-((y-d)/c)))^2) \\
 z &= a + 16b \exp(-((x-c)/d) - ((y-e)/d)) / ((1 + \exp(-((x-c)/d)))^2 (1 + \exp(-((y-e)/d)))^2) \\
 z &= 4a \exp(-((x-b)/c) / ((1 + \exp(-((x-b)/c)))^2 + \\
 &+ 4d \exp(-((y-e)/f)) / ((1 + \exp(-((y-e)/f)))^2) \\
 z &= a + 4b \exp(-((x-c)/d) / ((1 + \exp(-((x-c)/d)))^2 + \\
 &+ 4e \exp(-((y-f)/g)) / ((1 + \exp(-((y-f)/g)))^2) \\
 z &= a + by + 4c \exp(-((x-d)/e)) ((1 + \exp(-((x-d)/e)))^2) \\
 z &= a + bx + 4c \exp(-((y-d)/e)) ((1 + \exp(-((y-d)/e)))^2) \\
 z &= a + by + cy^2 + 4d \exp(-((x-e)/f)) / ((1 + \exp(-((x-e)/f)))^2) \\
 z &= a + by + cx^2 + 4d \exp(-((y-e)/f)) / ((1 + \exp(-((y-e)/f)))^2)
 \end{aligned}$$

Логарифмически нормальные функции:

Экспоненты:

$$\begin{aligned}
 z &= a \exp(-0,5 * ((\ln(x/b)/c)^2 + (\ln(y/d)/e)^2)) & z &= a \exp(-x/b) * \exp(-y/c) \\
 z &= a + b \exp(-0,5 * ((\ln(x/c)/d)^2 + (\ln(y/e)/f)^2)) & z &= a + b \exp(-x/c) * \exp(-y/d) \\
 z &= a \exp(-0,5 * ((\ln(x/b)/c)^2 + (\ln(y/d)/c)^2)) & z &= a \exp(-x/b) * \exp(-y/b) \\
 z &= a + b \exp(-0,5 * ((\ln(x/c)/d)^2 + (\ln(y/e)/d)^2)) & z &= a + b \exp(-x/c) * \exp(-y/c) \\
 z &= a \exp(-0,5 * (\ln(x/b)/c)^2) + & z &= a \exp(-x/b) + c \exp(-y/d) \\
 &+ d \exp(-0,5 * (\ln(y/e)/f)^2) & z &= a + b \exp(-x/c) + d \exp(-y/e) \\
 z &= a + b \exp(-0,5 * (\ln(x/c)/d)^2) + & z &= a + by + c \exp(-x/d) \\
 &+ e \exp(-0,5 * (\ln(y/f)/g)^2) & z &= a + bx + c \exp(-y/d) \\
 z &= a + by + c \exp(-0,5 * (\ln(x/d)/e)^2) & z &= a + by + cy^2 + d \exp(-x/e) \\
 z &= a + bx + c \exp(-0,5 * (\ln(y/d)/e)^2) & z &= a + bx + cx^2 + d \exp(-y/e)
 \end{aligned}$$

Нелинейные степенные функции:

$$\begin{aligned}
 z &= ax^b * y^c & z &= a + by + cx^d \\
 z &= a + bx^{c*} y^d & z &= a + bx + cy^d \\
 z &= ax^b * y^b & z &= a + by + cy^2 + dx^e \\
 z &= a + bx^{c*} y^c & z &= a + bx + cx^2 + dy^e \\
 z &= ax^b + cy^d & z &= ax^b + cy^d + ex^{b*} y^d \\
 z &= a + bx^c + dy^e & z &= a + bx^c + dy^e + fx^{c*} y^e
 \end{aligned}$$

Функции экстремальных значений:

$$\begin{aligned}
 z &= a \exp(-\exp(-(x-b)/c) - (x-b)/c + 1) * \exp(-\exp(-(y-d)/e) - (y-d)/e + 1) \\
 z &= a + b \exp(-\exp(-(x-c)/d) - (x-c)/d + 1) * \exp(-\exp(-(y-e)/f) - (y-e)/f + 1) \\
 z &= a \exp(-\exp(-(x-b)/c) - (x-b)/c + 1) * \exp(-\exp(-(y-d)/c) - (y-d)/c + 1) \\
 z &= a + b \exp(-\exp(-(x-c)/d) - (x-c)/d + 1) * \exp(-\exp(-(y-e)/d) - (y-e)/d + 1) \\
 z &= a \exp(-\exp(-(x-b)/c) - (x-b)/c + 1) + d \exp(-\exp(-(y-e)/f) - (y-e)/f + 1) \\
 z &= a + b \exp(-\exp(-(x-c)/d) - (x-c)/d + 1) + e \exp(-\exp(-(y-f)/g) - (y-f)/g + 1) \\
 z &= a + by + c \exp(-\exp(-(x-d)/e) - (x-d)/e + 1) \\
 z &= a + bx + c \exp(-\exp(-(y-d)/e) - (y-d)/e + 1) \\
 z &= a + by + cy^2 + d \exp(-\exp(-(x-e)/f) - (x-e)/f + 1) \\
 z &= a + bx + cx^2 + d \exp(-\exp(-(y-e)/f) - (y-e)/f + 1)
 \end{aligned}$$

И это далеко не полный перечень нелинейных моделей.

2.1.4. Table Curve 2D. Выбор моделей и их статистический анализ

На рис. 2.2 даны значения константы скорости вулканизации резиновых смесей на основе каучука СКН-26 в интервале температур 140–200 °С. Для получения модели в программе *Table Curve 2D* переведем значения по абсциссе в шкалу абсолютных температур, а значения по ординате разделим на 1000. Теперь нажимаем клавишу *Process* (меню на рис. 2.5). И далее закладку *Curve-Fit All Equation* (все уравнения).

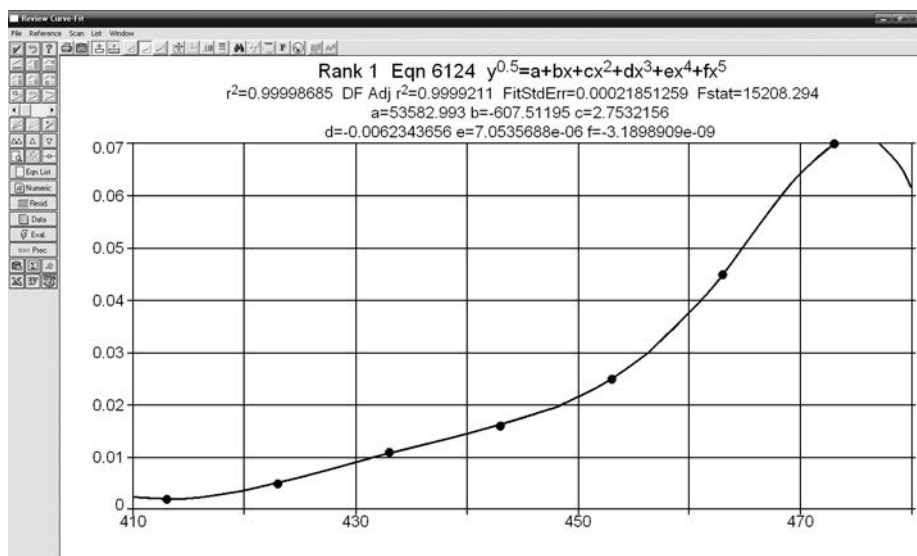


Рис. 2.10. Окно программы *Table Curve 2D* после вычисления параметров моделей

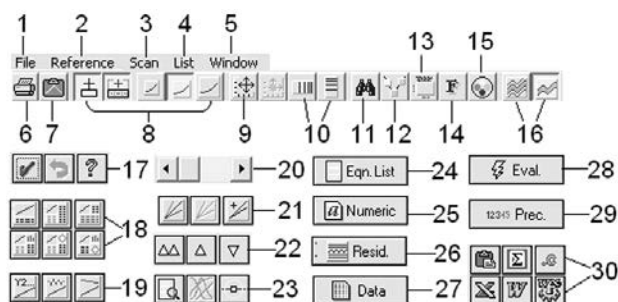


Рис. 2.11. Клавиши программы Table Curve 2D

Программа рассчитывает 2979 уравнений (в рассматриваемом случае) по введенным точкам. Нажимаем клавишу *Graph Start*, и на дисплее появляется картинка, показанная на рис. 2.10.

Рассмотрим основные позиции меню на рис. 2.10.

Эти позиции представлены на рис. 2.11 в несколько искаженном относительно друг друга положении. Это сделано только для обеспечения компактности расположения рассматриваемых позиций.

1 — сохранение, печать и выбор количества значащих цифр; 2 — поиск конкурирующих моделей; 3 — поиск модели по номеру из каталога; 4 — вызов списка моделей, необходимой группы моделей и критерия их ранжирования; 5 — ввод наряду с основным графиком графика невязок (отклонений экспериментальных значений от рассчитанных по уравнению); вывод на экран перечня уравнений в порядке снижения качества по выбранному критерию (*Equation List*); вывод на экран таблиц критериев качества модели, статистического анализа расчета параметров и результатов дисперсионного анализа (*Numeric Summery*); вывод на экран результатов анализа остатков, доверительных интервалов (*Data Summery*); вывод на экран результатов анализа точности предсказания отклика при изменении числа значащих цифр при расчете параметров данной модели (*Precision Summery*); оценка значений функции и аргумента, производных и интегральных величин (*Evaluation*); различные комбинации приведенных данных; 6 — печать; 7 — копирование; 8 — изменение параметров шкал; 9 — варьирование области изменения переменных; 10 — логарифмическое преобразование осей координат; 11 — параметры сетки, оцифровка осей, корректировка надписей; 12 — размер и вид точек; 13 — выполнение надписей; 14 — выбор типа и размера шрифта; 15 — цветовая палитра; 16 — установка доверительных интервалов; 17 — выход из окна и справка; 18 — вывод на экран результатов статистического анализа в различных сочетаниях; 19 — вывод на экран графиков первой и второй производных, интеграла, невязок; 20 — варьирование области изменения по абсциссе; 21 — поиск конкурирующих моделей; 22 — клавиши перемещения по списку уравнений; 23 — вызов уравнения по номеру и исключению грубых промахов; 24 — вывод на экран списка уравнений в порядке снижения качества по выбранному критерию (*Equation List*); 25 — вывод на экран таблиц критериев качества

модели, статистического анализа расчета параметров и результатов дисперсионного анализа (*Numeric Summary*); 26 — вызов графика невязок; 27 — вывод на экран результатов анализа остатков, доверительных интервалов (*Data Summary*); 28 — оценка значений функции и аргумента, производных и интегральных величин (*Evaluation*); 29 — вывод на экран результатов анализа точности предсказания отклика при изменении числа значащих цифр при расчете параметров данной модели (*Precision Summary*); 30 — экспорт результатов.

Наилучшим «с точки зрения» программы является уравнение 6124, представленное на рис. 2.10.

Хотя максимальное отклонение экспериментального значения отклика от рассчитанного по этому уравнению составляет лишь 1,3%, рассматриваемое уравнение не может быть принято по трем причинам. Во-первых, кривая 6124 предполагает наличие максимума в области 475 К. Во-вторых, модель 6124 характеризуется немонотонным изменением производной, в чем легко убедиться, нажав клавишу 19 (см. рис. 2.11); график производной можно видеть в нижней части рис. 2.12. И наконец, в-третьих, уравнение содержит большое количество параметров, которые не могут быть интерпретированы с точки зрения механизма процесса.

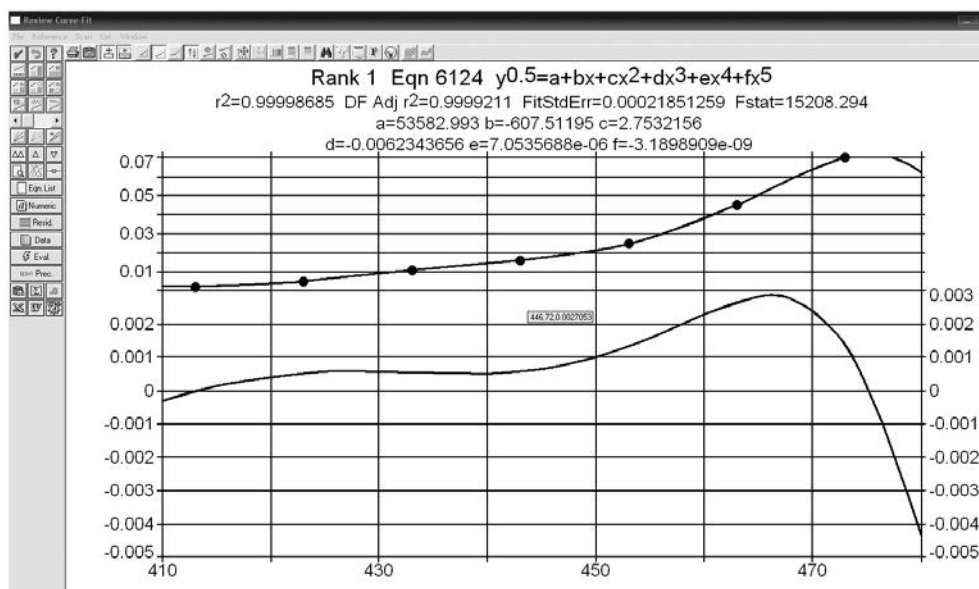


Рис. 2.12. Зависимость константы скорости и скорости ее изменения от температуры

Для выбора модели имеет смысл предположить, что энергия активации процесса не зависит от температуры. Тогда можно воспользоваться уравнением Аррениуса. Не надо находить значение обратных температур и логарифмировать значения констант скоростей. Достаточно в меню *Help* (клавиша 17, рис. 2.11) найти номер

уравнения $\ln y = a + b/x$. Этот номер 38. Вводим этот номер в меню *Scan* (позиция 3 на рис. 2.11, закладка *Search to Specific Equation*). Вот что мы получим окончательно (рис. 2.13).

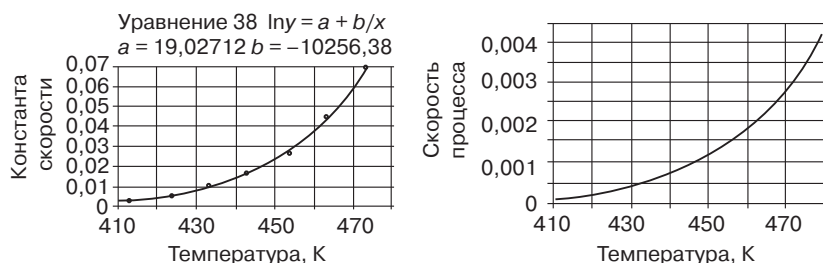


Рис. 2.13. Получение модели в виде уравнения Аррениуса

На рис. 2.14 с показаны значения невязок (различий между экспериментальными и рассчитанными по уравнению значениями отклика, т. е. константы скорости). Этот график дает невязки в абсолютных единицах, но можно его построить и в относительных единицах (в процентах).

Значения константы скорости при заданной температуре и, наоборот, значения температуры, отвечающие заданному значению константы скорости, могут быть найдены путем нажатия клавиши *Eval* (рис. 2.11, 28). Появится такое окно (рис. 2.15).

Здесь 1 — вычисление y при заданном x , и наоборот; 2 — вычисление значений производных и интегралов при заданных x ; 3 — очистка окна; 4 — вызов таблицы $y = f(x)$, и наоборот, $x = f(y)$; 5 — ввод количества значащих цифр при вычислениях; 6 — вычисление доверительных (по заданному проценту) и предсказанных интервалов; 7 — сохранение и экспорт результатов.

На рис. 2.16 показаны кривые зависимости содержания связанной серы от продолжительности вулканизации для резиновых смесей на основе натурального каучука при различном содержании ускорителя (2-меркаптобензтиазол).

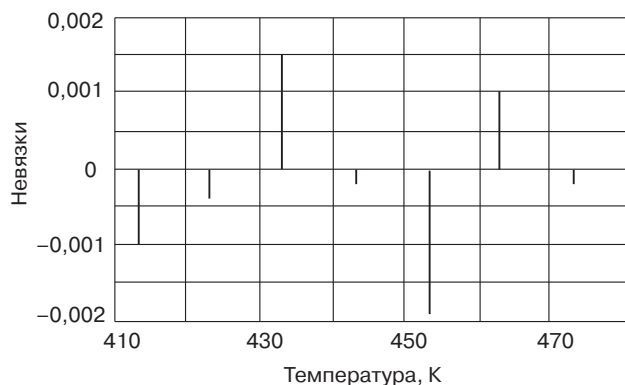
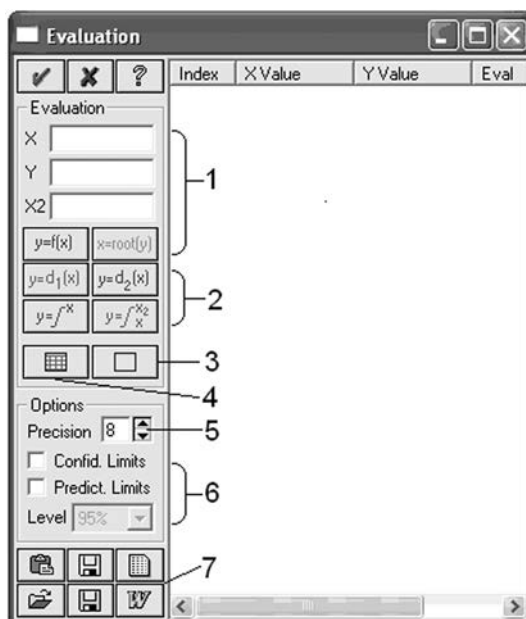
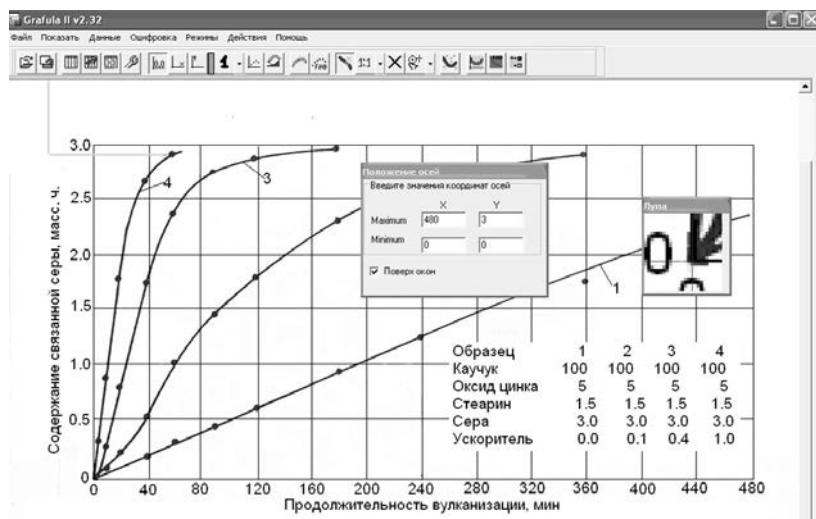


Рис. 2.14. Разница экспериментальных и рассчитанных значений отклика

Рис. 2.15. Окно *Eval TC 2D*Рис. 2.16. Кинетические кривые процесса вулканизации в окне программы *Grafula*

После манипуляций в программе *Grafula* и перевода данных в редактор *ASCII Editor* программы *Table Curve 2D* получим следующую таблицу (рис. 2.17) для кривой 3 (рис. 2.16)

Меняем запятые на точки и там, где координаты (0;0), напомним вес, например, 50: тогда кривая через эту точку обязательно пройдет. Теперь нажимаем клавишу *Process* (меню на рис. 2.5) и далее закладку *Curve-Fit All Equation*.

Программа рассчитывает целый ряд уравнений по введенным точкам. Нажимаем, как уже упоминалось, клавишу *Graph Start*, и на дисплее появляется картинка, показанная на рис. 2.18.

Наилучшим, «по мнению» программы, является уравнение 6403, представленное на рис. 2.18. Хотя максимальная невязка (отклонение экспериментального значения отклика от рассчитанного по этому уравнению) составляет лишь 0,02%, это уравнение, как и в рассмотренном выше случае, не может быть принято по трем причинам. Во-первых, кривая 6403 предполагает наличие пика в области от 7 до 17 минут, во-вторых, модель 6403 содержит $\ln x$, а кривая включает точку при $x = 0$ и, наконец, в-третьих, уравнение содержит большое количество параметров, которые не могут быть интерпретированы с точки зрения механизма процесса.

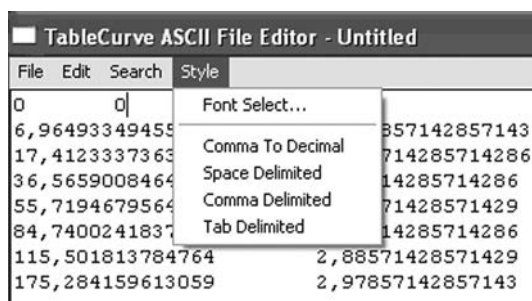


Рис. 2.17. Данные в ASCII Editor

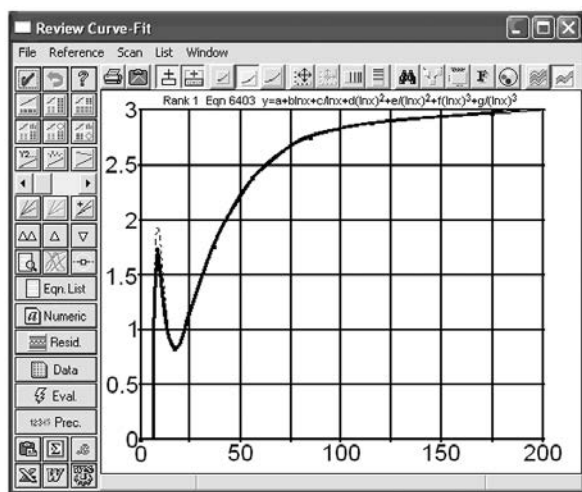


Рис. 2.18. Окно программы *Table Curve 2D* после вычисления параметров моделей

Для выбора кинетических моделей, представленных в разделе 2.1.2, необходимо нажать клавишу *Scan* в меню (рис. 2.10 и 2.11). Далее последовательно в закладке *Search for Specific Equation* набирать номера соответствующих моделей, их можно найти в меню *Help* (рис. 2.5) в закладке *Non-Linear Equation* и далее *Kinetic Functions*. В каталоге приводятся уравнения порядка 0,5 (*Half Order*), первого (*First*), второго (*Second*), третьего (*Third*) и переменного (*Variable*) порядка.

В табл. 2.1 приводятся номера соответствующих уравнений по каталогу программы, максимальные концентрации C_{\max} , константы скорости k , порядки n и ошибки S аппроксимации с использованием соответствующих моделей.

Таблица 2.1. Характеристики кинетических моделей

№	C_{\max}	k	n	S
8116	2,87	0,0339	0,5	0,029
8100	3,13	0,0225	1	0,048
8104	4,08	0,0050	2	0,072
8112	5,19	0,0006	3	0,080
8120	3,01	0,0281	0,726	0,038

Среди представленных моделей следует отдать предпочтение последней, соответствующей дробному значению порядка реакции. Первая модель ($n = 0,5$) хотя и характеризуется меньшей ошибкой, но имеет заниженное значение максимальной концентрации.

На рис. 2.19–2.22 показаны графические возможности программы *Table Curve 2D*. Показана кинетическая кривая (рис. 2.19) зависимости содержания связанной серы (S) от продолжительности вулканизации (t). При этом за основу была взята модель 8120 по каталогу программы *Table Curve 2D*:

$$S = S_{\max} - \left(S_{\max}^{1-n} + knt - kt \right)^{1/(1-n)}, \quad (2.1)$$

где S_{\max} — содержание общей серы (максимальное возможное содержание связанной серы); k — константа скорости; n — порядок реакции.

На этом же графике показаны 95%-ные доверительные интервалы, это значит, что если много-много раз повторять наблюдения, то 95% попадут в обозначенный «коридор».

В начале координат доверительные пределы равны нулю, поскольку в этой точке проставлен вес 50.

Если найти производную $S'(t)$, получим следующее выражение для скорости:

$$S'(t) = k \left(S_{\max}^{1-n} + knt - kt \right)^{n/(1-n)}. \quad (2.2)$$

Кривая скорости (рис. 2.20) может быть получена в программе *Table Curve 2D* нажатием клавиш 19 (рис. 2.11).

На рис. 2.21, с показаны значения невязок (различий между экспериментальными и рассчитанными по уравнению значениями отклика, т. е. связанной серы). Этот график дает невязки в абсолютных единицах (в массовых частях).

Представляет интерес построение зависимости скорости процесса от содержания не вступившей в реакцию серы (рис. 2.22). Чтобы построить такой график, необходимо нажать клавишу *Eval* (28 на рис. 2.11).

В рассматриваемом случае были рассчитаны значения связанной серы в интервале времени $[0;200]$ с шагом 2 и при тех же значениях времени величины первой производной. Два столбца были перенесены в редактор программы *Table Curve 2D*. Столбец x — содержание связанной серы; столбец y — скорость процесса. Далее в редакторе в ячейке *Calculation* вычисляли $x = x_{\max} - x$.

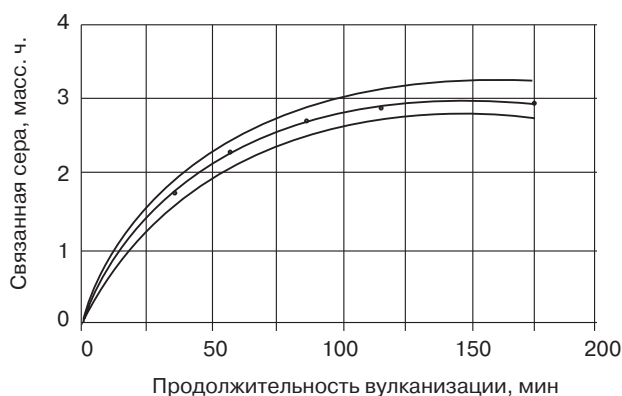


Рис. 2.19. Зависимость содержания связанной серы в вулканизатах от продолжительности вулканизации

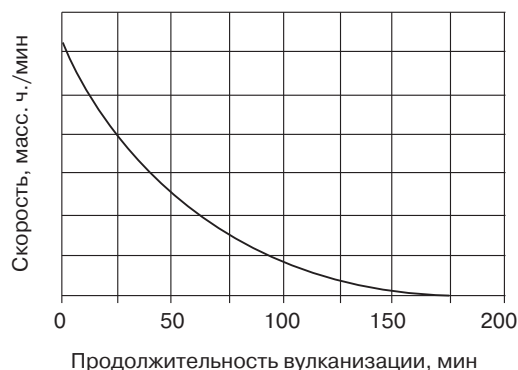


Рис. 2.20. Зависимость скорости связывания серы в вулканизатах от продолжительности вулканизации

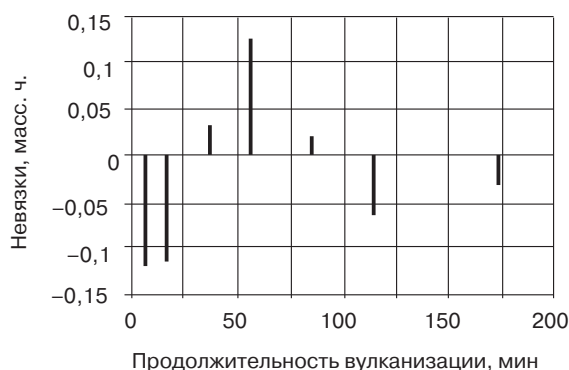


Рис. 2.21. Разница экспериментальных и рассчитанных значений отклика (связанной серы)

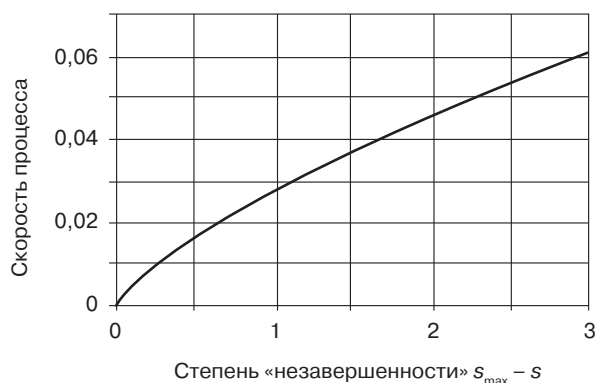


Рис. 2.22. Взаимосвязь скорости процесса вулканизации и содержания «несвязанной» серы

Это выражение представляет собой содержание серы, не вступившей в реакцию.

Зависимость скорости процесса от количества серы, не вступившей в реакцию, описывается степенной моделью следующего вида:

$$dS/dt = k(S_{\max} - S)^n. \quad (2.3)$$

Теперь проанализируем основные результаты статистических расчетов при решении задач построения эмпирических моделей. Для этого возьмем более простой пример, в котором реализуется модель, линейная относительно параметров.

Рассмотрим зависимость условной прочности при растяжении резин на основе комбинации натурального каучука и сополимера бутадиена и нитрила акриловой кислоты (33% нитрила) от соотношения каучуков (рис. 2.23).

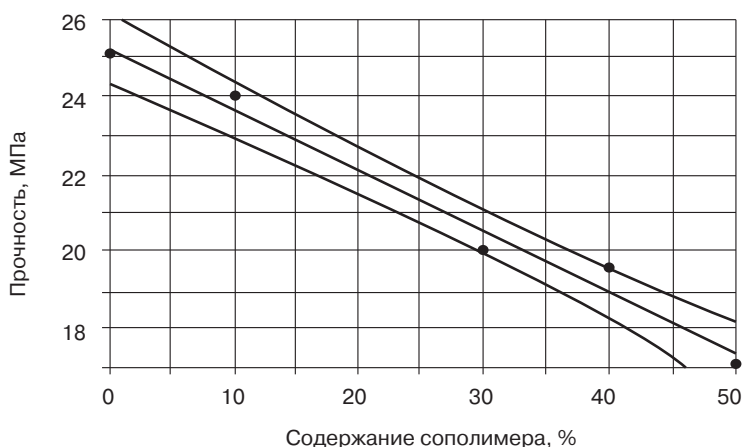


Рис. 2.23. Зависимость прочности резин от состава полимерной матрицы

Проведем с использованием метода наименьших квадратов через эти точки прямую линию. На представленном графике помимо прямой линии показаны две линии, соответствующие 95%-ным доверительным пределам.

Линейная модель имеет следующий вид: $y = 25,21428571 - 0,15657143x$, где y — прочность, x — содержание сополимера.

Такое большое количество значащих цифр для коэффициентов, конечно, не является необходимым в данном случае. Вполне достаточно было бы записать $a = 25,21$; $b = 0,157$.

Сохраним, однако, количество знаков, чтобы продемонстрировать некоторые тонкости расчетов.

Обработка данных осуществлялась с помощью программы *Table Curve 2D*.

Прежде всего запишем в виде таблиц критерии качества полученной модели (табл. 2.2), характеристики параметров модели (табл. 2.3) и результаты дисперсионного анализа (табл. 2.4).

Таблица 2.2. Критерии качества модели

R^2	$R^2_{\text{ск}}$	S	F	S_{max}
0,9826058504	0,9710097507	0,4357259952	225,96237773	0,6485714

R^2 — коэффициент детерминации; $R^2_{\text{ск}}$ — скорректированный коэффициент детерминации; S — стандартная ошибка; F — критерий Фишера; S_{max} — максимальная абсолютная ошибка.

Представляет интерес сопоставить между собой полученные экспериментально и рассчитанные с использованием линейной модели значения отклика (прочности), т. е. найти абсолютную ошибку.

Таблица 2.3. Параметры модели

Параметр	Ошибка	t -критерий	Доверительные пределы	
$a = 25,21428571$	0,315355323	79,95516135	24,33871897	26,08985246
$b = -0,15657143$	0,010415844	-15,0320450	-0,18549045	-0,12765241

Таблица 2.4. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	$SSR = 42,900571$	$m - 1 = 1$	$MSR = 42,900571$	$F = 225,962$
Ошибка	$SSE = 0,75942857$	$n - m = 4$	$MSE = 0,18985714$	
Сумма	$SSM = 43,66$	$n - 1 = 5$		

m — количество коэффициентов модели; n — количество экспериментальных точек.

Кроме того, целесообразно вычислить относительную ошибку предсказания значений отклика и доверительные пределы для прочности в каждой экспериментальной точке (табл. 2.5).

Таблица 2.5. Экспериментальные и рассчитанные значения прочности

x	y	y_p	$\Delta = y - y_p$	$\frac{\Delta}{Y} 100\%$	Доверительные пределы	
0	25,1	25,214286	-0,114286	-0,455322	24,338719	26,089852
10	23,9	23,648571	0,2514286	1,0520024	22,991233	24,305909
20	22,0	22,082857	-0,082857	-0,376623	21,568239	22,597475
30	20,1	20,517143	-0,417143	-2,075338	20,002525	21,031761
40	19,6	18,951429	0,6485714	3,3090379	18,294091	19,608767
50	17,1	17,385714	-0,285714	-1,670844	16,510148	18,261281

Как все это считается?

1. Вычисление параметров модели.

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 10 \\ 1 & 20 \\ 1 & 30 \\ 1 & 40 \\ 1 & 50 \end{pmatrix}; \quad Y = \begin{pmatrix} 25,1 \\ 23,9 \\ 22,0 \\ 20,1 \\ 19,6 \\ 17,1 \end{pmatrix}; \quad Z' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 10 & 20 & 30 & 40 & 50 \end{pmatrix}; \quad Z'Z = \begin{pmatrix} 6 & 150 \\ 150 & 5500 \end{pmatrix};$$

$$(Z'Z)^{-1} = \begin{pmatrix} 0,523809524 & -0,014285714 \\ -0,014285714 & 0,000571429 \end{pmatrix}; \quad Z'Y = \begin{pmatrix} 127,8 \\ 2921 \end{pmatrix}; \quad B = (Z'Z)^{-1}(Z'Y) = \begin{pmatrix} 25,21429 \\ -0,15657 \end{pmatrix};$$

Z — матрица планирования (второй столбец этой матрицы можно назвать планом); Y — вектор-столбец результатов; Z' — транспонированная матрица; $Z' \times Z$ — информационная матрица (чтобы умножить одну матрицу на другую, нужно элементы строки одной матрицы умножить на элементы столбца другой матрицы, полученные произведения сложить и записать в строку); $(Z' \times Z)^{-1}$ — обратная (ковариационная) матрица (произведение обратной матрицы на исходную — есть матрица единичная); B — столбец коэффициентов.

$$Y_p = Z \cdot B = \begin{pmatrix} 25,214286 \\ 23,648571 \\ 22,082857 \\ 20,517143 \\ 18,951429 \\ 17,385714 \end{pmatrix}; \quad \bar{Y} = \sum_{i=1}^n Y_i / n = 21,3000; \quad n = 6.$$

Y_p — столбец рассчитанных по уравнению значений отклика; \bar{Y} — среднее арифметическое (по экспериментальным данным) значение отклика; n — количество экспериментальных точек (число строк в матрице планирования).

2. Вычисление критериев качества модели.

$$SSE = \sum_{i=1}^n (Y_i - Y_{ip})^2 = 0,759429;$$

$$SSM = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 = 43,66; \quad m = 2; \quad f = n - m = 6 - 2 = 4;$$

$$R^2 = 1 - \frac{SSE}{SSM} = 1 - \frac{0,759429}{43,66} = 0,982606;$$

$$R_{\text{ск}}^2 = 1 - \frac{SSE/(f-1)}{SSM/(n-1)} = 1 - \frac{0,759429/3}{43,66/5} = 0,971010;$$

$$MSE = SSE / f = 0,759429 / 4 = 0,189857;$$

$$S = \sqrt{MSE} = \sqrt{0,189857} = 0,435726;$$

$$SSR = SSM - SSE = 43,66 - 0,759429 = 42,900571;$$

$$MSR = SSR / (m - 1) = 42,900571 / 1 = 42,900571;$$

$$F = MSR / MSE = 42,900571 / 0,189857 = 225,9624.$$

SSE — сумма квадратов, связанная с ошибкой; SSM — сумма квадратов относительно среднего (общая сумма квадратов); m — количество параметров модели; f — число степеней свободы; R^2 — коэффициент детерминации; $R^2_{\text{ск}}$ — скорректированный коэффициент детерминации; MSE — средний квадрат ошибки; S — стандартная ошибка; SSR — сумма квадратов, связанная с влиянием фактора; MSR — средний квадрат фактора; F — критерий Фишера.

Задача состоит в том, чтобы вычислить вышеозначенным методом наименьших квадратов коэффициенты линейного уравнения следующего вида: $y = a + bx$. Имеются координаты экспериментальных точек, т. е. содержание сополимера (%) от 0 до 50 с шагом 10%, это второй столбец в матрице Z , он «отвечает» за коэффициент b . А кто «отвечает» за коэффициент a ? Чтобы разобраться в этом, перепишем искомое уравнение в несколько ином виде: $y = ax^0 + bx^1$. От такого изменения формы записи ничего не изменилось, но любое число в нулевой степени есть единица, поэтому в матрице Z появляется единичный столбец, чтобы он «отвечал» за коэффициент a . Так формируется матрица планирования.

Итак, до начала проведения эксперимента у нас была эта матрица планирования (координаты экспериментальных точек). После того как мы эксперимент провели, у нас появился вектор-столбец результатов Y . А теперь надо найти столбец коэффициентов B , состоящий из двух строк, a и b , т. е. решить надо уравнение $Y = ZB$ относительно B . Если бы это были числа, просто разделили бы Y на Z . Но это матрицы, потому сначала умножаем левую и правую части уравнения $Y = ZB$ на транспонированную матрицу Z' . Получим: $Z'Y = (Z'Z)B$. Теперь левую и правую часть умножаем на матрицу, обратную информационной матрице $Z'Z$. После умножения получим: $(Z'Z)^{-1}(Z'Y) = (Z'Z)^{-1}(Z'Z)B$. Но $(Z'Z)^{-1}(Z'Z)$ — единичная матрица E . И окончательно: $B = (Z'Z)^{-1}(Z'Y)$.

3. Расчет доверительных интервалов для коэффициентов модели.

$$(Z'Z)^{-1} = \begin{pmatrix} 0,52380952 & -0,01428571 \\ -0,01428571 & 0,00057143 \end{pmatrix};$$

$$P = \begin{pmatrix} 0,52380952 \\ 0,00057143 \end{pmatrix}; \quad \sqrt{P} = \begin{pmatrix} 0,72374686 \\ 0,02390457 \end{pmatrix};$$

$$S = 0,435726; \quad S_B = S \cdot \sqrt{P} = \begin{pmatrix} 0,31535532 \\ 0,01041584 \end{pmatrix}; \quad B = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 25,214286 \\ -0,156571 \end{pmatrix};$$

$$t_B = \frac{B}{S_B} = \begin{pmatrix} 79,955161 \\ -15,032045 \end{pmatrix}; \quad f = 4; \quad t_{(4; 0,05)} = 2,7764; \quad S_B \cdot t_{(4; 0,05)} = \begin{pmatrix} 0,875567 \\ 0,028919 \end{pmatrix};$$

$$a = 25,214286 \pm 0,875567; \quad b = -0,156571 \pm 0,028919.$$

P — элементы главной диагонали ковариационной матрицы; S_B — ошибки при вычислении параметров модели; t_B — критерии Стьюдента, характеризующие значимость коэффициентов (т. е. степень их влияние на величину отклика); $t_{(4; 0,05)}$ — критерий Стьюдента при числе степеней свободы $f = m - n = 6 - 2 = 4$ и уровне значимости (ошибка первого рода) 0,05 (вероятность 0,95) — табличное значение. $S_B \times t_{(4; 0,05)}$ — доверительные интервалы для коэффициентов модели при выбранной вероятности (95%).

4. Расчет доверительных пределов для значений отклика в экспериментальных точках.

$$t_{(4; 0,05)} \cdot S \cdot \sqrt{l \cdot (Z' \cdot Z)^{-1} \cdot l};$$

$$(1) \quad 2,7764 \cdot 0,435726 \cdot \sqrt{\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0,52380952 & -0,01428571 \\ -0,01428571 & 0,00057143 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}} = 0,8756; \quad 25,2143 \pm 0,8756;$$

$$(2) \quad 2,7764 \cdot 0,435726 \cdot \sqrt{\begin{pmatrix} 1 & 10 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0,52380952 & -0,01428571 \\ -0,01428571 & 0,00057143 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 10 \end{pmatrix}} = 0,6573; \quad 23,6486 \pm 0,6573;$$

$$(3) \quad 2,7764 \cdot 0,435726 \cdot \sqrt{\begin{pmatrix} 1 & 20 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0,52380952 & -0,01428571 \\ -0,01428571 & 0,00057143 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 20 \end{pmatrix}} = 0,5146; \quad 22,0829 \pm 0,5146;$$

$$(4) \quad 2,7764 \cdot 0,435726 \cdot \sqrt{\begin{pmatrix} 1 & 30 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0,52380952 & -0,01428571 \\ -0,01428571 & 0,00057143 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 30 \end{pmatrix}} = 0,5146; \quad 20,5171 \pm 0,5146;$$

$$(5) \quad 2,7764 \cdot 0,435726 \cdot \sqrt{\begin{pmatrix} 1 & 40 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0,52380952 & -0,01428571 \\ -0,01428571 & 0,000571436 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 40 \end{pmatrix}} = 0,6573; \quad 18,9514 \pm 0,6573;$$

$$(6) \quad 2,7764 \cdot 0,435726 \cdot \sqrt{\begin{pmatrix} 1 & 50 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0,52380952 & -0,01428571 \\ -0,01428571 & 0,00057143 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 50 \end{pmatrix}} = 0,8756; \quad 17,3857 \pm 0,8756;$$

l — координаты точки в матрице планирования (строки в матрице).

2.1.5. Table Curve 3D. Выбор моделей и их статистический анализ

В табл. 2.6 представлены значения условного напряжения при удлинении 200% (МПа) для вулканизатов на основе БСК при варьировании продолжительности вулканизации и содержания технического углерода.

После ввода этих данных в редакторе программы и сохранения с расширением *PRN* необходимо нажать клавишу *Process* (меню на рис. 2.6). И далее закладку *Surface-Fit All Equation*.

Таблица 2.6. Значения условного напряжения при удлинении 200%

Дозировка ТУ, масс. ч.	Продолжительность вулканизации, мин				
	15	30	45	60	90
30	0,9	2,2	2,8	3,1	2,2
40	1,5	3,0	3,9	4,1	3,9
50	3,1	5,2	6,1	6,7	6,6
70	9,6	12,7	14,4	15,0	15,6

Программа рассчитывает 508 уравнений по введенным точкам.
После нажатия клавиши *Graph Start* на дисплее появляется пространственное изображение и меню, показанные на рис. 2.24.

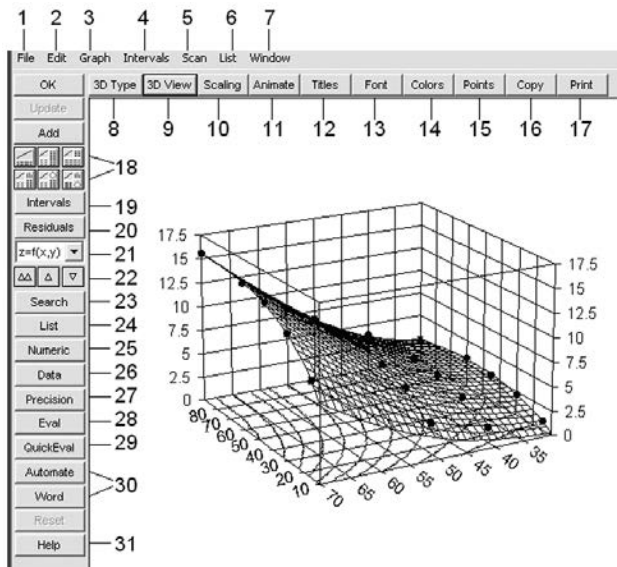


Рис. 2.24. Окно программы *Table Curve 3D* после вычисления параметров моделей

Рассмотрим основные позиции меню.
1 — сохранение, печать и контроль количества знаков по осям координат и в заголовке при выводе статистических результатов; 2 — копирование; 3 — выбор цвета

поверхности; поворот изображения, изменение размеров, параметры сетки, вывод линий равного уровня; изменение шкалы по осям координат; задание формата точек; запись заголовка и надписей по осям; задание шрифта и его размера; выбор цветовой палитры окна; анимация; 4 — задание доверительных и предсказанных интервалов; 5 — вызов уравнения по номеру; 6 — типы моделей и условия их ранжирования; 7 — ввод, наряду с основным графиком, графика невязок (отклонений экспериментальных значений от рассчитанных по уравнению); вывод на экран списка уравнений в порядке снижения качества по выбранному критерию (*Equation List*); вывод на экран таблиц критериев качества модели, статистического анализа расчета параметров и результатов дисперсионного анализа (*Numeric Summary*); вывод на экран результатов анализа остатков, доверительных интервалов (*Data Summary*); вывод на экран результатов анализа точности предсказания отклика при изменении числа значащих цифр при расчете параметров данной модели (*Precision Summary*); оценка значений функции и аргумента, производных и интегральных величин (*Evaluation*); различные комбинации приведенных данных; печать; копирование; 8 — выбор цветовой палитры поверхности; 9 — поворот изображения, изменение размеров, параметры сетки, вывод линий равного уровня; 10 — изменение шкалы по осям координат; 11 — анимация; 12 — запись заголовка и надписей по осям; 13 — задание шрифта и его размера; 14 — выбор цветовой палитры окна; 15 — задание формата точек; 16 — копирование; 17 — печать; 18 — вывод на экран результатов статистического анализа в различных сочетаниях; 19 — установка доверительных интервалов; 20 — вывод на экран графика невязок; 21 — вывод на экран графиков производных; 22 — клавиши перемещения по перечню моделей; поиск модели по номеру из каталога; 23 — вызов уравнения по номеру из каталога; 24 — вывод на экран списка уравнений в порядке снижения качества по выбранному критерию (*Equation List*); 25 — вывод на экран таблиц критериев качества модели, статистического анализа расчета параметров и результатов дисперсионного анализа (*Numeric Summary*); 26 — вывод на экран результатов анализа остатков, доверительных интервалов (*Data Summary*); 27 — вывод на экран результатов анализа точности предсказания отклика при изменении числа значащих цифр при расчете параметров данной модели (*Precision Summary*); 28 — оценка значений функции и аргумента, производных и интегральных величин (*Evaluation*); 29 — получение значений z при заданных x и y , координаты минимального и максимального значений отклика; 30 — экспорт результатов; 31 — помощь.

При поиске моделей по каталогу можно рекомендовать в первую очередь рассматривать модели, представляющие собой отрезки ряда Тейлора. Это полиномы второй и третьей степени; $z = a + bx + cy + dx^2 + ey^2 + fxy$ (номер 301 по каталогу *TC3D*) а также $z = a + bx + cy + dx^2 + ey^2 + fxy + gx^3 + hy^3 + ix^2y + jx^2y$ (номер 310).

Остановимся на модели 301. Соответствующая поверхность отклика и невязки показаны графически на рис. 2.25 и 2.26 соответственно.

Рассмотрим статистические характеристики модели (табл. 2.7–2.9).

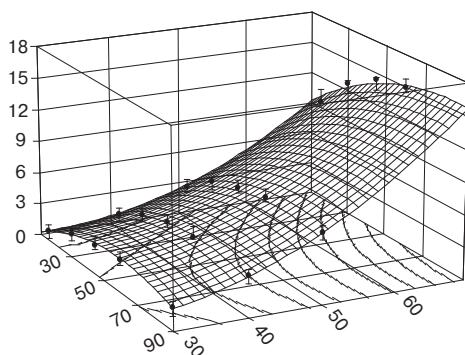


Рис. 2.25. Пространственное изображение

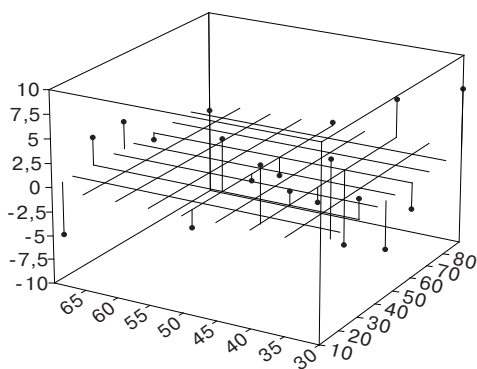


Рис. 2.26. Невязки для значений условного напряжения при удлинении 200%

Таблица 2.7. Критерии качества модели

R^2	$R^2_{\text{ск}}$	S_r	F
0,9978519877	0,9968605974	0,2557664687	1300,7307232

Таблица 2.8. Параметры модели

Параметр	Ошибка	t-критерий	Доверительные пределы	
$a = 4,8416709$	0,8809939	5,49569204	2,9521270	6,7312148
$b = 0,0983115$	0,0124445	7,89999956	0,0716207	0,1250022
$c = -0,369982$	0,0337245	-10,970720	-0,442314	-0,297650
$d = -0,001199$	9,3817e-5	-12,777413	-0,001400	-0,000998
$e = 0,0058045$	0,0003226	17,9929315	0,0051126	0,0064965
$f = 0,0014638$	0,0001498	9,76955407	0,0011425	0,0017852

Таблица 2.9. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	$SSR = 425,45$	$m - 1 = 5$	$MSR = 85,089$	$F = 1300,73$
Ошибка	$SSE = 0,9158$	$n - m = 14$	$MSE = 0,0654$	
Сумма	$SSM = 426,36$	$n - 1 = 19$		

Максимальное отклонение рассчитанных значений отклика от экспериментальных составляет 7,78%, а максимальное абсолютное отклонение 0,53 МПа.

Для рассматриваемого случая это вполне приемлемые величины. Чтобы судить о совпадении экспериментальных и предсказанных по уравнению значений напряжения достаточно рассмотреть график 2.27.

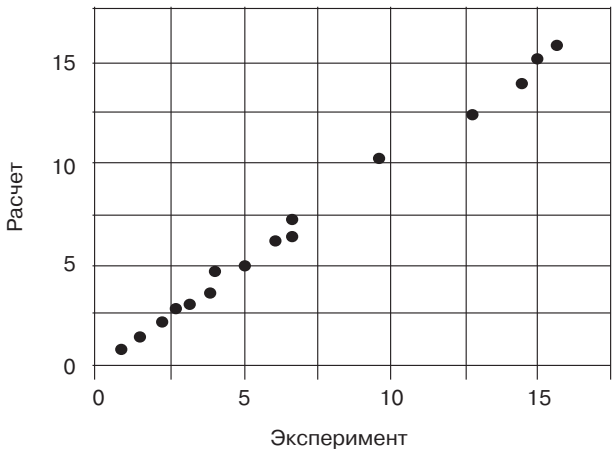


Рис. 2.27. Поле рассеяния

Линейная тенденция не вызывает сомнений.

Коэффициент детерминации характеризует тесноту связи между этими значениями. Из 508 моделей, которые рассчитала программа, модель 301 имеет ранг (место) 59 при ранжировании по коэффициенту детерминации, ранг 51 при ранжировании по скорректированному коэффициенту, ранг 52 при ранжировании по величине стандартной ошибки и ранг 24 при ранжировании по критерию Фишера. Последнее объясняется небольшим количеством параметром этой модели.

На рис. 2.25 внизу (можно их изображать и/или наверху) показаны линии равного уровня, которые представляют собой проекции сечения поверхности горизонтальными плоскостями. Именно эти линии и представляют наибольший интерес, а использовать трехмерное изображение для практических количественных оценок

не представляется возможным. Используя клавишу *3D View* (№ 9 на рис. 2.24), можно развернуть поверхность. Если «смотреть» на поверхность снизу, мы увидим то, что изображено на рис. 2.28. Но, к сожалению, изолинии (линии равного уровня) программа изображает не те, которые хотелось бы пользователю, а по собственному усмотрению. Кроме того, в программе не предусмотрено определение значения отклика, которому соответствует та или иная изолиния. Решить эту проблему можно, используя инструмент оценки значений функции и аргумента, производных и интегральных величин (*Evaluation* — № 28 на рис. 2.24). Но значения отклика от 1,5 до 15,0 с шагом 1,5 приходится проставлять уже вручную (например, используя *Paint*). Как решить эту задачу более эффективно, мы рассмотрим несколько позднее.

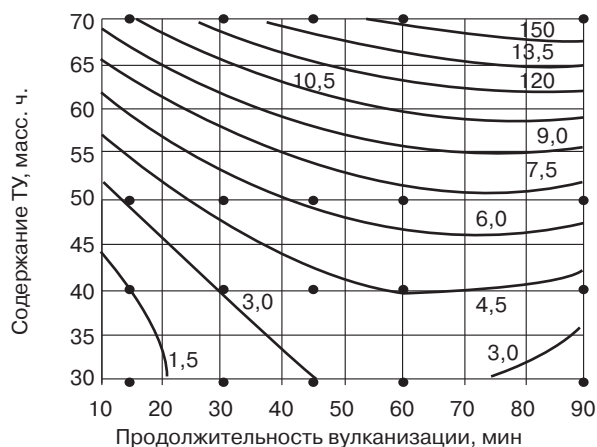


Рис. 2.28. Семейство линий равного уровня

И еще одна проблема. Если вернуться к рис. 2.16 и попробовать построить зависимость содержания связанной серы от продолжительности вулканизации и содержания ускорителя, то обнаружится, что ни одна из моделей не обеспечивает получение удовлетворительного результата. Как же поступить в этом случае? Целесообразно при каждой дозировке ускорителя (а их четыре) получить модель 8120, содержащую три параметра. Эти модели показывают зависимость содержания связанной серы от времени. А затем найти зависимость каждого из этих параметров от содержания ускорителя. Получится обобщенная модель:

$$z = a(y) - (a(y)^{1-c(y)} + b(y)c(y)x - b(y)x)^{1/(1-c(y))}. \quad (2.4)$$

Далее надо нажать клавишу *View* (меню рис. 2.6, позиция 5), далее *Function(X,Y)...* и ввести выражение (2.4). В результате получится пространственное изображение (рис. 2.29). Затем описанным выше способом можно построить семейство изолиний (рис. 2.30).

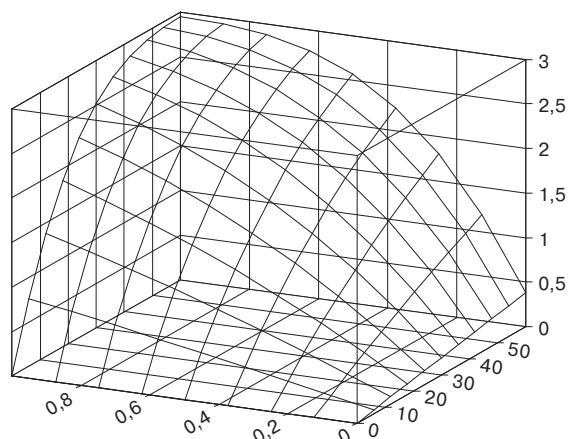


Рис. 2.29. Зависимость содержания связанной серы в вулканизатах от продолжительности вулканизации и содержания 2-меркаптобензтиазола (МБТ)

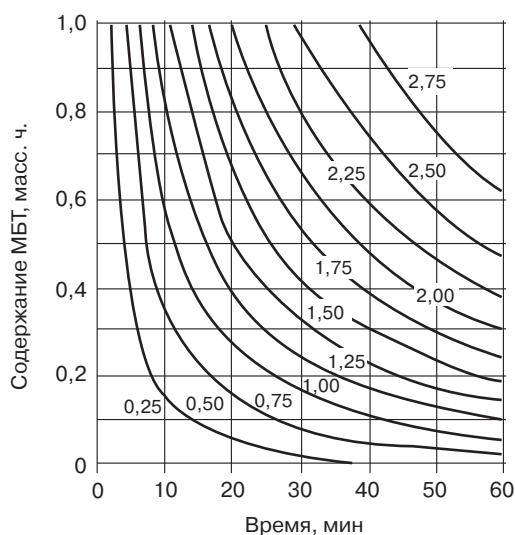


Рис. 2.30. Контурный график

2.2. Математический пакет *MATLAB*

MATLAB (сокращение от *MATrix LABoratory* — МАТричная ЛАБОратория) является интерактивной системой для выполнения инженерных и научных расчетов. Сегодня *MATLAB* используется более чем в 70 ведущих университетах мира [5–35].

В *MATLAB* интегрирован мощный математический аппарат, позволяющий решать сложные задачи без вызова внешних процедур, он, в частности, дает возможность находить решения:

- линейных и нелинейных алгебраических уравнений и систем;
- обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных;
- задач статистической обработки данных;
- задач линейной алгебры;
- задач поиска экстремумов функциональных зависимостей.

MATLAB обладает мощными средствами графического представления информации. Пакет снабжен средствами анимации, что позволяет рассматривать временную эволюцию математических моделей в динамике. Кроме того, в *MATLAB* интегрирован математический аппарат, реализующий символьные вычисления.

2.2.1. Графический интерфейс пользователя

Графический интерфейс пользователя *MATLAB* состоит из 4 независимых окон, имеющих следующие названия: *Workspace*, *Command Window*, *Command History*, *Current Directory* (рис. 2.31).

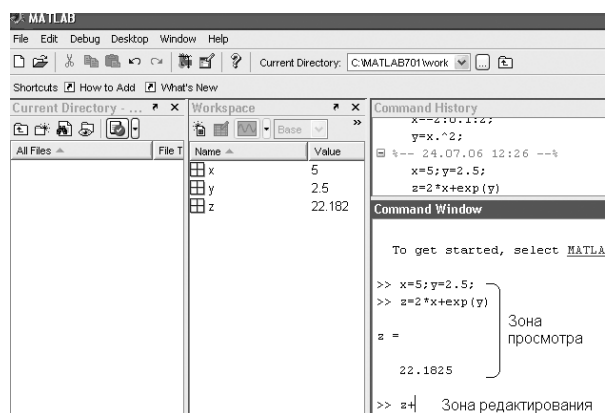


Рис. 2.31. Графический интерфейс пользователя пакета *MATLAB*

Окно *Workspace* используется для отображения состояния зарезервированной области памяти компьютера, в которой хранятся переменные, использованные в данном сеансе.

Окно *Command Window* является основным окном, в которое вводятся исполняемые команды и отображаются результаты вычислений.

Окно *Command History* используется для отображения содержания буфера, в котором хранятся выполненные ранее команды пакета.

В окне *Current Directory* отображается список файлов и вложенных папок активного в данный момент каталога.

Для управления окнами используются стандартные средства операционной системы *Windows*.

Окно *Command Window* состоит из строки меню, панели инструментов; рабочей области и полосы состояния. В рабочей области окна *Command Window* находится строка ввода команд, отмеченная знаком `>>`, в которую можно вводить числа, имена переменных и знаки операций, составляющие в совокупности выражение. Имена переменных должны начинаться с буквы и состоять из букв, цифр и знаков препинания. *MATLAB* распознает в именах переменных до 31 символа и различает регистр символов. Простейшими знаками операций являются всем хорошо известные знаки арифметических операций `«+»` и `«-»`. Знак `=` соответствует операции присваивания. Нажатие клавиши *Enter* является для *MATLAB* заданием выполнить введенную команду и отобразить полученный результат.

После отображения результата вычисления в командном окне создается новая строка ввода команд, отмеченная знаком `>>`.

Для просмотра выполненных команд и результатов вычислений, не уместящихся в командном окне, имеются полосы горизонтальной и вертикальной прокрутки (скроллинга). Также можно осуществлять прокрутку содержимого командного окна *MATLAB* с помощью следующих клавиш клавиатуры: *PageUp*, *PageDown*, *Ctrl + Home* и *Ctrl + End*.

Необходимо отметить, что в *MATLAB* клавиши управления курсором `«↑»` и `«↓»`, осуществляющие в текстовых редакторах перемещение курсора вниз или вверх и вертикальный скроллинг содержимого окна, работают иначе. В *MATLAB* клавиши `«↑»` и `«↓»` используются для возврата в строку ввода ранее выполненных команд, каждая из которых перед ее выполнением запоминается в стеке команд. Стек команд — это область оперативной памяти ПК, отведенная для хранения выполненных в данном сеансе работы команд. При этом просмотр стека осуществляется с его конца, то есть последняя выполненная команда будет отображаться в строке команд первой. При нажатии на клавишу `«↓»` осуществляется прокрутка команд, расположенных в стеке, в обратном направлении.

Командное окно *MATLAB* разделено на две принципиально различных зоны: зону просмотра и зону редактирования (рис. 2.31). Исправление информации в зоне просмотра невозможно, несмотря на то что в любую строку, находящуюся в данной зоне можно поместить курсор. Попытка редактирования текста, размещенного в зоне просмотра, приведет к автоматическому перемещению курсора в строку ввода, расположенную в зоне редактирования. В зоне просмотра, как и в известных текстовых редакторах, можно с помощью мыши выделить любой фрагмент текста, затем скопировать его в буфер обмена операционной системы *Windows*, а затем вставить данный фрагмент в командную строку *MATLAB* или документ, созданный в каком-либо приложении, работающем под управлением операционной системы *Windows*.

Зона редактирования находится в строке командного окна *MATLAB*, отмеченной знаком `>>`. Существует возможность «удлинения» командной строки за счет размещения вводимой команды на нескольких физических строках командного окна. Такая строка называется логической строкой ввода. При вводе команды, размещаемой

в нескольких физических строках, каждая текущая строка завершается тремя точками и нажатием на клавишу *ENTER*.

В этом случае зона редактирования распространяется только на строку, в которой находится курсор. Его перемещение на выбранную строку можно осуществлять, как в любом текстовом редакторе, с помощью мыши, после чего можно использовать клавиши управления курсором «←» и «→». Суммарная длина логической строки ввода не может превышать 256 символов.

Очистка командного окна *MATLAB* осуществляется командой *clc*, которая, однако, оставляет неизменным содержимое буфера команд и рабочего пространства *MATLAB*.

Рассмотрим позиции меню командного окна (рис. 2.32).

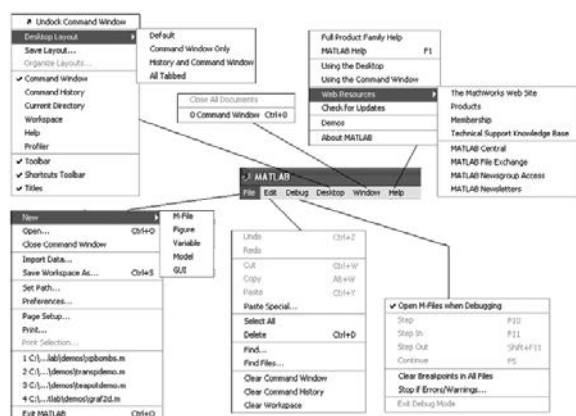


Рис. 2.32. Меню командного окна *MATLAB*. *File* — ввод новых *m*-файлов (программ-модулей, использующих встроенный язык *MATLAB*), новых окон для построения графиков, новых переменных и моделей; открытие программ-модулей (*m*-файлов); импорт и сохранение данных; выбор числового формата; печать; выбор параметров командного окна. *Edit* — редактирование текстов программ, очистка окон. *Debug* — запуск выполнения программ-модулей. *Desktop*, *Window* — управление окнами. *Help* — помощь

2.2.2. Построение графиков функций, зависящих от одной переменной

В табл. 2.2–2.5 и на рис. 2.23 показано построение зависимости прочности вулканизаторов от содержания сополимера. Расчеты произведены в рамках программы *Table Curve 2D*. Те же расчеты и построения можно произвести в пакете *MATLAB*. Для этого, правда, необходимо будет написать соответствующую программу-модуль. Конечно, программы *Table Curve 2D* и *Table Curve 3D* использовать удобнее, поскольку это специализированные программы, ориентированные именно на выполнение такого рода расчетов. Но если задача включает в себя большее чем 2 количество факторов, то эти программы уже не в состоянии будут решить поставленную задачу, а пакет *MATLAB* можно будет использовать.

Чтобы разобраться, как решить такую задачу, остановимся на однофакторном случае.

Возможный текст (листинг) программы в пакете *MATLAB* выглядит следующим образом:

```
X = [0:10:50]'; - СТОЛБЕЦ ЗНАЧЕНИЙ ФАКТОРА;
y = [25.1;23.9;22;20.1;19.6;17.1]; - СТОЛБЕЦ ЗНАЧЕНИЙ ОТКЛИКА;
n = max(size(x)); - КОЛИЧЕСТВО ТОЧЕК;
x0 = ones(n,1); - ЕДИНИЧНЫЙ СТОЛБЕЦ ДЛИНОЙ n;
X=[x0 x]; - МАТРИЦА ПЛАНИРОВАНИЯ;
B=(inv(X'*X))*(X'*y); - ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ;
Y=X*B; - РАССЧИТАННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ОТКЛИКА;
y1=mean(y); - СРЕДНЕЕ ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ОТКЛИКА;
SSE = sum((y-Y).^2); - СУММА КВАДРАТОВ, СВЯЗАННАЯ С ОШИБКОЙ;
SSM = sum((y-y1).^2); - СУММА КВАДРАТОВ ОТНОСИТЕЛЬНО СРЕДНЕГО;
m = min(size(X)); - КОЛИЧЕСТВО ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ;
f = n-m; - ЧИСЛО СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ;
r2=1-SSE/SSM; - КОЭФФИЦИЕНТ ДЕТЕРМИНАЦИИ;
r2s=1-SSE*(n-1)/SSM/(f-1); - СКОРРЕКТИРОВАННЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ;
MSE=SSE/f; - СРЕДНИЙ КВАДРАТ ОШИБКИ;
Sr=sqrt(MSE); - СТАНДАРТНАЯ ОШИБКА;
SSR=SSM-SSE; - СУММА КВАДРАТОВ, СВЯЗАННАЯ С ВЛИЯНИЕМ ФАКТОРА;
MSR=SSR/(m-1); - СРЕДНИЙ КВАДРАТ ФАКТОРА;
F=MSR/MSE; - КРИТЕРИЙ ФИШЕРА.
R=diag(inv(X'*X)); - ЭЛЕМЕНТЫ ГЛАВНОЙ ДИАГОНАЛИ КОВАРИАЦИОННОЙ
МАТРИЦЫ;
SB=Sr*sqrt(R); - ОШИБКИ ПРИ ВЫЧИСЛЕНИИ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ;
tB=B./SB; - КРИТЕРИИ СТЬЮДЕНТА, ХАРАКТЕРИЗУЮЩИЕ ЗНАЧИМОСТЬ КО-
ЭФФИЦИЕНТОВ;
t=2,7764; - КРИТЕРИЙ СТЬЮДЕНТА (ТАБЛИЧНЫЙ)  $t_{(f;0.05)}$ ;
A=SB*t; - ДОВЕРИТЕЛЬНЫЕ ПРЕДЕЛЫ ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ;
B1=diag(t*Sr*sqrt(X*(inv(X'*X))*X')); - ДОВЕРИТЕЛЬНЫЕ ПРЕДЕЛЫ ДЛЯ
ОТКЛИКА.
```

После сохранения этой программы и вызова ее в командное окно пакета *MATLAB* нажимается клавиша *Debug* (рис. 2.32).

Теперь можно осуществить просмотр результатов и сравнить его с табл. 2.2–2.5:

```
>> [r2 r2s Sr F]
ans =
0.9826    0.9710    0.4357   225.9624
>> [B SB tB A]
ans =
25.2143    0.3154   79.9552    0.8767
-0.1566    0.0104  -15.0320    0.0290
```



```
>> [x y Y B1]
```

```
ans =
```

	0	25.1000	25.2143	0.8756
10.0000	23.9000	23.6486	0.6573	
20.0000	22.0000	22.0829	0.5146	
30.0000	20.1000	20.5171	0.5146	
40.0000	19.6000	18.9514	0.6573	
50.0000	17.1000	17.3857	0.8756	

Для построения графика в программе записываются следующие строки:

`xx = [10:50]';` — столбец значений по абсциссе с шагом 1;

`yy = B(1)+B(2)*xx;` — ввод модели (столбца по ординате);

`plot(xx,yy,'-k',x,y,'.k');`grid — построение графика (черная сплошная линия и черные точки) и сетки.

После нажатия клавиши *Enter* появится следующее окно (рис. 2.33).

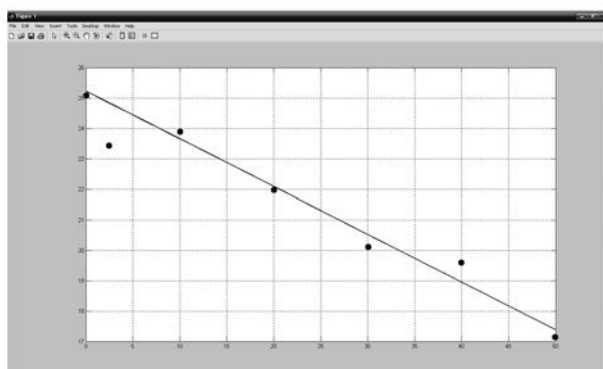


Рис. 2.33. Графическое окно *MATLAB* перед редактированием

Рассмотрим некоторые позиции меню для работы с графиком (рис. 2.34).

File — ввод новых *m*-файлов (программ-модулей, использующих встроенный язык *MATLAB*), новых окон для построения графиков, новых переменных и моделей; открытие программ-модулей (*m*-файлов); импорт и сохранение данных; выбор числового формата; печать; выбор параметров командного окна.

Edit — копирование, выбор цветовой палитры, очистка окон.

View — вывод на экран размерностей всех использованных в программе массивов, возможность разбиения графического окна на несколько частей, корректировка параметров графика.

Insert — редактирование текста: заголовка, надписей по осям, создание легенды, корректировка цветовой палитры, изображение линий, кривых, стрелок, текстовых вставок в заданном месте на графике.

Tools — выбор локальной области графика, изменение начала координат, вращение графика, сжатие и расширение по осям координат, ввод фоновой сетки, просмотр статистических данных по x и y : минимальные и максимальные значения, средние, медианы, размахи, стандартные отклонения (относительно экспериментальных и рассчитанных по уравнению значений).

Desktop — разделение окна на две части с показом содержимого командного окна.

Window — разбивка окна на подобласти (*subplot*), просмотр нескольких графиков, варьирование размера окна. Клавиша, отмеченная *, позволяет «скользить» вдоль линии и фиксировать значения x и y .

Help — помощь.

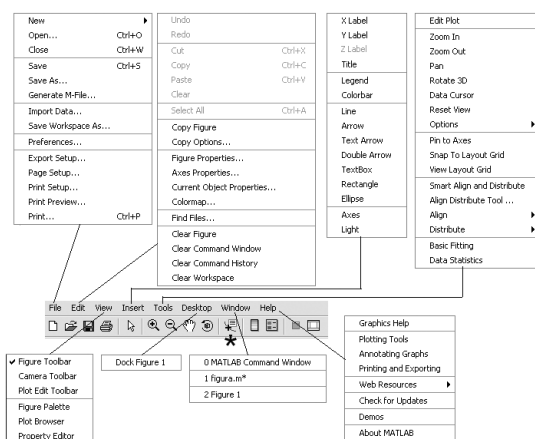


Рис. 2.34. Окно оформления графика в пакете *MATLAB*

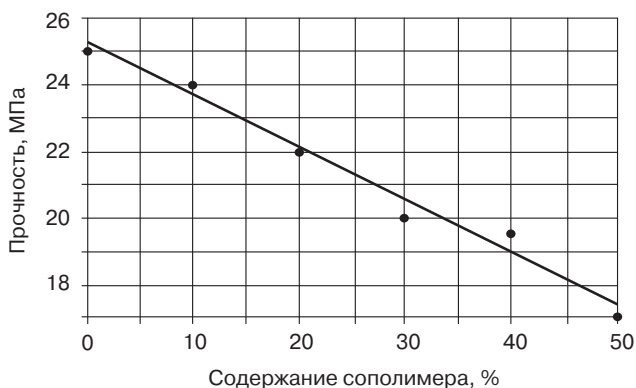


Рис. 2.35. Зависимость прочности резин от состава полимерной матрицы

Последующее оформление графика осуществляется в меню *Insert*. Окончательный вариант показан на рис. 2.35.

2.2.3. Построение графиков функций, зависящих от двух переменных

На рис. 2.36 показаны три реометрические кривые, полученные для вулканизатов на основе натурального каучука при варьировании содержания ускорителя (сантокюра) и на рис. 2.37 — пространственное изображение, сформированное в программе *Table Curve 3D* в меню *View x,y,z Data*.

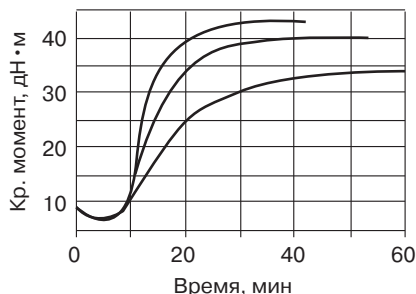


Рис. 2.36. Реограммы

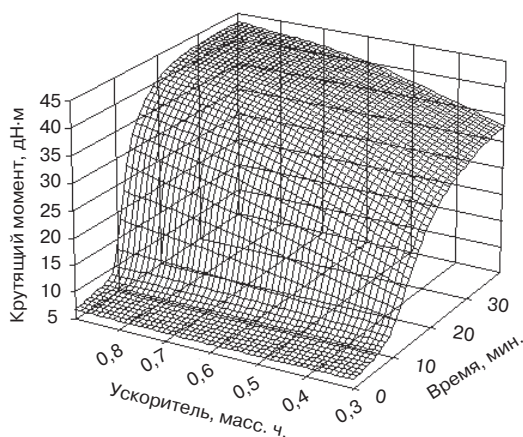


Рис. 2.37. Пространственное изображение исходных данных

Попытки получить модель с параметрами, которые можно интерпретировать с технологической точки зрения, не приносят существенного результата. Поэтому можно рекомендовать следующую процедуру построения модели: 1) в программе *Table Curve 2D* получить нелинейные относительно параметров модели (см. рис. 2.9), описывающие зависимость крутящего момента от времени для трех резиновых смесей; 2) получить в той же программе зависимость параметров этих моделей от содержания ускорителя; 3) сформированную таким образом модель для двух факторов ввести в пакет *MATLAB* и построить семейство изолиний крутящего момента.

Реализуем этот подход. Для некоторого упрощения задачи не будем учитывать точки, связанные с первоначальным падением крутящего момента.

1. Модели, характеризующие зависимость крутящего момента от времени.

Общий вид модели:

$$Z = a + \frac{b}{(x/c)^d}. \quad (2.5)$$

Здесь Z — значение крутящего момента; a — соответствует значению минимального крутящего момента Z_{\min} ; b — приращение крутящего момента $\Delta Z = Z_{\max} - Z_{\min}$; c — соответствует продолжительности процесса, отвечающей 50%-му превращению $t_{c(50)}$, $d = \ln 9 / (\ln t_{c(50)} - \ln t_{c(90)})$. $t_{c(90)}$ — оптимум вулканизации.

Параметры моделей:

Содержание ускорителя, масс. ч.	Параметры			
	a	b	c	d
0,3	6,760604	27,203848	16,150937	−3,481207
0,6	6,757250	33,064417	12,891437	−5,006932
0,9	6,747298	35,643354	11,875440	−6,234093

2. Модели, характеризующие зависимость параметров a , b , c и d от содержания ускорителя (y):

$a = \text{sqrt}(45,714107 - 0,25730389 \times y^3)$; $b = 47,181274 - 10,9408 / \text{sqrt}(y)$;

$c = (3,1605145 + 0,2575358 / y)^2$; $d = 0,28468772 - 6,8587748 \times \text{sqrt}(y)$.

3. Текст (листинг) программы для построения контурного графика.

```
x = [0:40/100:40]'; - СТОЛБЕЦ ЗНАЧЕНИЙ ВРЕМЕНИ ОТ 0 ДО 40 С ША-
ГОМ 40/100;
y=[.3:.6/100:.9]'; - СТОЛБЕЦ ЗНАЧЕНИЙ ДОЗИРОВКИ УСКОРИТЕЛЯ ОТ 0,3
ДО 0,9 С ШАГОМ 0,6/100;
a = sqrt(45,714107-0,25730389*y.^3);
b = 47,181274-10,9408./sqrt(y);
c = (3,1605145+0,2575358./y).^2;
d = 0,28468772-6,8587748*sqrt(y); ВВОД ЗАВИСИМОСТИ ПАРАМЕТРОВ
МОДЕЛИ ОТ СОДЕРЖАНИЯ УСКОРИТЕЛЯ;
n = length(x); - КОЛИЧЕСТВО СТОЛБЦОВ В МАССИВЕ;
m = length(y); - КОЛИЧЕСТВО СТРОК В МАССИВЕ, n ДОЛЖНО БЫТЬ РАВ-
НО m;
E = ones(m,n); - ФОРМИРОВАНИЕ МАССИВА ЕДИНИЦ (МАТРИЦА m×n);
e = ones(m,1); - ФОРМИРОВАНИЕ МАССИВА ЕДИНИЦ (СТОЛБЕЦ m×1);
```

$A = a * e'; B = b * e'; C = c * e'; D = d * e';$ – МАТРИЦЫ КОЭФФИЦИЕНТОВ;
 $X = e * x';$ – МАТРИЦА ФАКТОРА (времени);
 $p = [7 \ 10:5:40 \ 42]';$ – ВЫВОДИМЫЕ НА КОНТУРНЫЙ ГРАФИК ЗНАЧЕНИЯ ОТКЛИКА (КОЛИЧЕСТВО ЭЛЕМЕНТОВ ЭТОГО ВЕКТОРА СООТВЕТСТВУЕТ ЧИСЛУ ИЗОЛИНИЙ);
 $z = A + B ./ (E + (X ./ C).^D);$ – ВВОД МОДЕЛИ В МАТРИЧНОЙ ФОРМЕ;
 $\text{contour}(x, y, z, p, '-k');$ – ПОСТРОЕНИЕ КОНТУРНОГО ГРАФИКА;
 $t = [19:31]';$ – ВВОД ОБЛАСТИ ИЗМЕНЕНИЯ ОПТИМУМА ВУЛКАНИЗАЦИИ;
 $T = 1 ./ (-2.4074 + .1852 * t);$ – ВВОД МОДЕЛИ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ЛИНИИ ЗНАЧЕНИЙ ОПТИМУМА;
 hold on – КОМАНДА ПОСТРОЕНИЯ ВТОРОГО ГРАФИКА В ТЕХ ЖЕ КООРДИНАТАХ;
 $\text{plot}(t, T, '-k');$; $\text{grid};$ – ПОСТРОЕНИЕ ГРАФИКА ОПТИМУМА И СЕТКА.

После редактирования контурный график будет выглядеть следующим образом (рис. 2.38).

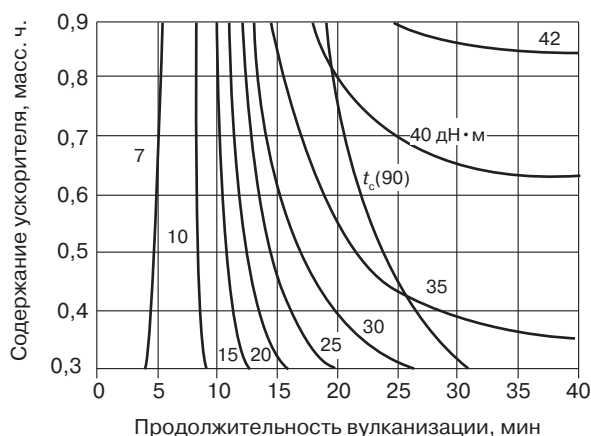


Рис. 2.38. Изолинии крутящего момента

2.2.4. Решение многофакторных задач

Построим модель в виде полинома второго порядка для производительности червячной машины (y) при варьировании четырех факторов: длины профилирующего канала насадки (мм) – x_1 ; диаметра профилирующего канала насадки (мм) – x_2 ; угла входа в профилирующий канал насадки (град) – x_3 ; скорости вращения червяка (об./мин) – x_4 . Исходные данные представлены в табл. 2.10. Здесь y_p – рассчитанное по уравнению значение отклика (см³/с); d – разница между экспериментальными и рассчитанными значениями отклика, отнесенная к экспериментальному (%).

С использованием пакета *MATLAB* была построена квадратичная модель для четырех факторов $y = b_0 + \sum b_i x_i + \sum b_{ii} x_i^2 + \sum b_{ij} x_i x_j$.

Была сформирована матрица планирования размерностью 25×15 (25 — количество точек, 15 — количество коэффициентов модели). Результаты расчетов приведены в табл. 2.11–2.13.

Таблица 2.10. Значения производительности червячной машины ($\text{см}^3/\text{с}$)

x_1	x_2	x_3	x_4	y	y_p	d
81	5,7	52	50	0,196	0,198	–0,83
109	5,7	52	50	0,194	0,200	–2,91
81	9,3	52	50	0,174	0,180	–3,48
109	9,3	52	50	0,167	0,174	–3,94
81	5,7	158	50	0,189	0,180	4,51
109	5,7	158	50	0,181	0,188	–4,14
81	9,3	158	50	0,185	0,182	1,40
109	9,3	158	50	0,171	0,182	–6,39
81	5,7	52	90	0,321	0,324	–0,85
109	5,7	52	90	0,342	0,335	1,98
81	9,3	52	90	0,329	0,312	5,12
109	9,3	52	90	0,293	0,315	–7,57
81	5,7	158	90	0,365	0,349	4,37
109	5,7	158	90	0,359	0,367	–2,11
81	9,3	158	90	0,349	0,357	–2,29
109	9,3	158	90	0,377	0,366	2,91
75	7,5	105	70	0,234	0,254	–8,47
115	7,5	105	70	0,290	0,262	9,79
95	5,0	105	70	0,268	0,274	–2,29
95	10,0	105	70	0,276	0,261	5,32
95	7,5	30	70	0,266	0,253	4,96
95	7,5	180	70	0,272	0,277	–1,70
95	7,5	105	42	0,150	0,133	11,63
95	7,5	105	98	0,343	0,352	–2,59
95	7,5	105	70	0,236	0,253	–7,25

Таблица 2.11. Критерии качества модели

R^2	$R^2_{\text{СК}}$	S_r	F	S_{max}
0,96902	0,91738	0,020043	22,341	0,028377

Таблица 2.12. Параметры модели

Параметр	Ошибка	t-критерий	Доверит. пределы	
$b_0 = 0,3061$	0,41508	0,73745	-0,61953	1,231700
$b_1 = -0,002206$	0,0071825	-0,30714	-0,018223	0,013811
$b_2 = -0,036587$	0,039556	-0,92493	-0,124800	0,051624
$b_3 = -0,001552$	0,0009819	-1,5803	-0,003741	0,000638
$b_4 = 0,0036141$	0,0032293	1,11920	-0,003587	0,010815
$b_{11} = 1,174\text{e-}5$	3,6155e-5	0,32457	-6,889e-5	9,2360e-5
$b_{22} = 0,002253$	0,0021871	1,03010	-0,002624	0,0071304
$b_{33} = 2,065\text{e-}6$	2,5227e-6	0,81847	-3,561e-6	7,6905e-6
$b_{44} = -1,36\text{e-}5$	1,7716e-5	-0,76908	-5,313e-5	2,5881e-5
$b_{12} = -8,43\text{e-}5$	0,0001988	-0,42408	-0,000528	0,0003591
$b_{13} = 2,022\text{e-}6$	6,7531e-6	0,29935	-1,304e-5	1,7081e-5
$b_{14} = 8,482\text{e-}6$	1,7896e-5	0,47397	-3,142e-5	4,8390e-5
$b_{23} = 5,110\text{e-}5$	5,2524e-5	0,9729	-6,603e-5	0,0001682
$b_{24} = 4,167\text{e-}5$	0,0001392	0,29935	-0,000269	0,0003521
$b_{34} = 1,002\text{e-}5$	4,7272e-6	2,1204	-5,180e-7	2,0565e-5

Таблица 2.13. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	$SSR = 0,1257$	$m - 1 = 14$	$MSR = 0,008975$	$F = 22,341$
Ошибка	$SSE = 0,0040$	$n - m = 10$	$MSE = 0,000402$	
Сумма	$SSM = 0,1297$	$n - 1 = 24$		

В связи с приведенными выше расчетами следует сделать одно замечание. Параметры модели отличаются друг от друга на несколько порядков. Это связано с тем, что факторы вводились в расчет в натуральном масштабе (мм, град, об./мин). Если перейти от натурального масштаба к условному (например, значению 81 мм в натуральном масштабе будет соответствовать -1 в условном масштабе, а значению 109 мм в натуральном масштабе $+1$ в условном масштабе), то отпадает необходимость фиксировать столько знаков после запятой.

Экспериментальные и рассчитанные значения отклика сопоставлены в табл. 2.10 и на рис. 2.39.

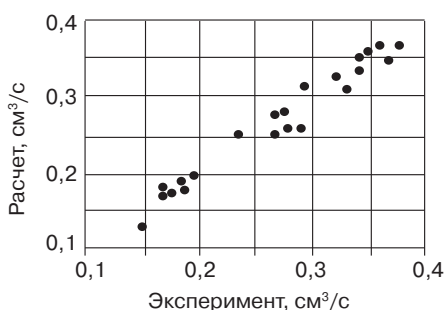


Рис. 2.39. Корреляция экспериментальных и рассчитанных значений производительности червячной машины

Теперь, выбирая постоянным значение какого-либо одного фактора, можно строить зависимость отклика от остальных двух в виде контурного графика.

Например, при построении зависимости производительности червячной машины от длины профилирующего канала насадки (мм) — x_1 и диаметра профилирующего канала насадки (мм); — x_2 программа будет выглядеть следующим образом.

```
V=[0.3061; -0.002206; -0.036587; -0.0015516; 0.0036141; 1.1735e-005; 0.0022531; 2.0648e-006; -1.3625e-005; -8.4325e-005; 2.0216e-006; 8.4821e-006; 5.1101e-005; 4.1667e-005; 1.0024e-005] - (ВВОД СТОЛБЦА ПАРАМЕТРОВ ПОЛИНОМИАЛЬНОЙ МОДЕЛИ).
```

```
X3=105;X4=70; - (ФИКСИРОВАННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ДВУХ ФАКТОРОВ).
```

```
[X1,X2]=meshgrid(80:30/60:110, 5:5/60:10); - (ВВОД ОБЛАСТИ ВА-РЬИРОВАНИЯ ФАКТОРОВ И КОЛИЧЕСТВА ТОЧЕК ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ СГЛАЖЕННО-ГО ИЗОБРАЖЕНИЯ ЛОМАНЫХ).
```

```
U=V(1)+V(2)*X1+V(3)*X2+V(4)*X3+V(5)*X4+V(6)*X1.^2+
```

```
V(7)*X2.^2+V(8)*X3.^2+V(9)*X4.^2+V(10)*X1.*X2+
```

```
V(11)*X1.*X3+V(12)*X1.*X4+V(13)*X2.*X3+V(14)*X2.*X4+
```

```
V(15)*X3.*X4; - (ВВОД УРАВНЕНИЯ:  $V(i)$  - КОЭФФИЦИЕНТ ПОД НОМЕРОМ  $i$ , НАПИСАНИЕ ТОЧКИ «.» ОБЯЗАТЕЛЬНО).
```

```
v=[.255;.26;.27;.28] - (ЗАДАНИЕ СТОЛБЦА ЗНАЧЕНИЙ ОТКЛИКА ДЛЯ ОТОБРАЖЕНИЙ ЛИНИЙ РАВНОГО УРОВНЯ; НОЛЬ ПЕРЕД ДЕСЯТИЧНОЙ ДРОБЬЮ
```


ПИСАТЬ НЕОБЯЗАТЕЛЬНО).

`subplot(321);contour(X1,X2,U,v,'-k');grid` – (КОМАНДА ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ КОНТУРНОГО ГРАФИКА И СЕТКИ В ОКНЕ ДЛЯ ШЕСТИ ГРАФИКОВ В ТРИ СТРОКИ И ДВА СТОЛБЦА).

Возможная серия контурных графиков показана на рис. 2.40.

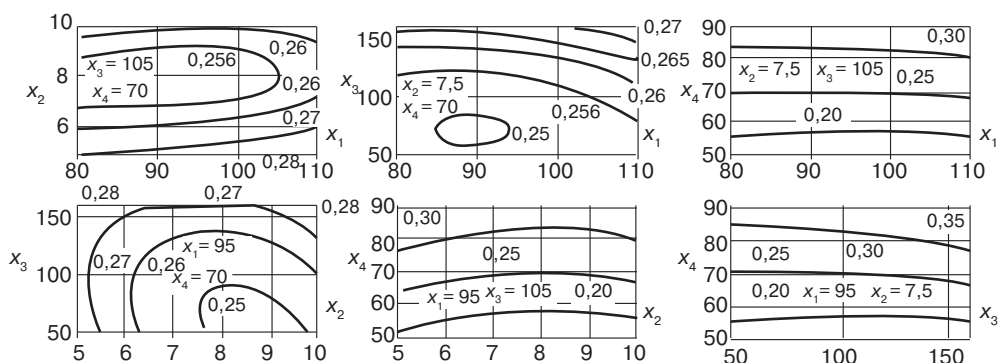


Рис. 2.40. Зависимость производительности червячной машины от конструктивных и технологических параметров

Литература

1. Янке Е., Эмде Ф., Леш Ф. Специальные функции / Пер. с нем. – М.: Наука, 1968. – 344 с.
2. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Наука, 1971. – 1108 с.
3. Двайт Г.Б. Таблицы интегралов / Пер. с англ. – М. Наука, 1973. – 228 с.
4. Справочник по специальным функциям. Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. – Пер с англ. М.: Наука, 1979. – 830 с.
5. Алексеев Е.Р., Чеснокова О.В. MATLAB 7. Самоучитель. – М.: НТ Пресс. 2006. – 464 с.
6. Андриевский Б.Р. Избранные главы теории автоматического управления с примерами на языке MATLAB. – СПб., Наука, 1999. – 467 с.
7. Андриевский Б.Р., Фрадков А.Л. Элементы математического моделирования в программных средах MATLAB 5 и Scilab. – М., Наука, 2001. – 286 с.
8. Ануфриев И. Е. Самоучитель MATLAB 5.3/6.x. – СПб.: БХВ-Петербург. 2004. – 736 с.
9. Глушаков С.В., Жакин И.А., Хачиров Т.С. Математическое моделирование: MathCad 2000, MATLAB 5.3: Учебный курс. – М.: РОДИНА-ФОДИО, 2001. – 524 с.
10. Говорухин В.Н., Цибулин В.Г. Компьютер в математическом исследовании: Maple, MATLAB, LaTeX. – СПб.: Питер, 2001. – 624 с.

11. Гулятьев А.К. Визуальное моделирование в среде MATLAB. – СПб.: Питер, 2000. – 430 с.
12. Дьяконов В.П. MATLAB. Полное руководство. – М.: ДМК-Пресс, 2010. – 632 с.
13. Дьяконов В.П. MATLAB 6/6.1/6.5 + Simulink 4/5 в математике и моделировании. Полное руководство пользователя. – М.: Солон, 2003. – 576 с.
14. Дьяконов В.П. MATLAB 6/6.1/6.5 + Simulink 4/5. Основы применения. Полное руководство пользователя. – М.: Солон, 2002. – 768 с.
15. Дьяконов В.П. MATLAB 6: Учебный курс. – СПб.: Питер, 2001. – 592 с.
16. Дьяконов В.П., Абраменкова И.В., Круглов В.В. MATLAB 5.3.1 с пакетами расширений. – М.: Нолидж, 2001. – 1296 с.
17. Иглин С.П. Теория вероятностей и математическая статистика на базе MATLAB. – Харьков: НТУ «ХПИ», 2006 – 612 с.
18. Иглин С.П. Математические расчеты на базе Matlab. – СПб.: BHV-Санкт-Петербург, 2005 – 640 с.
19. Кетков Ю.Л., Кетков А.Ю., Шульц М.М. MATLAB 6.x: Программирование численных методов. – СПб.: БХВ-Петербург, 2004. – 672 с.
20. Кетков Ю.Л., Кетков А.Ю., Шульц М.М. MATLAB 7: Программирование, численные методы. – СПб.: БХВ-Петербург, 2005. – 737 с.
21. Курбатова Е.А. MATLAB 7. Самоучитель. – М.: Вильямс, 2005 – 256 с.
22. Лазарев Ю.Ф. MATLAB 5.x. – Киев: BHV, 2000. – 384 с.
23. Мартынов Н.Н. Введение в MATLAB 6.x. – М.: КУДИЦ-ОБРАЗ, 2002. – 352 с.
24. Мартынов Н.Н.. Matlab 7. Элементарное введение. – М.: КУДИЦ-ОБРАЗ, 2005. – 416 с.
25. Мартынов Н.Н., Иванов А.П. MATLAB 5.x. Вычисления, визуализация, программирование. – М.: КУДИЦ-ОБРАЗ, 2000. – 332 с.
26. Мартынов Н.Н., Иванов А.П. MATLAB 5.x. Пособие по программированию в системе MATLAB. – М.: Изд. МГУ, 2000. – 336 с.
27. Мэтьюз Дж.Г., Финк К.Д. Численные методы. Использование MATLAB. – Пер. с англ. – М.: Изд. дом «Вильямс», 2001. – 713 с.
28. Поршнев С.В. MATLAB 7, основы работы и программирования. – М.: Бином, 2006. – 320 с.
29. Потемкин В.Г. Система инженерных и научных расчетов MATLAB 5.x: В 2-х кн. – М.: Диалог-МИФИ, 1999. Кн. 1. – 366 с.
30. Потемкин В.Г. Система инженерных и научных расчетов MATLAB 5.x: В 2-х кн. – М.: Диалог-МИФИ, 1999. Кн. 2. – 304 с.
31. Потемкин В.Г. MATLAB 6: Среда проектирования инженерных приложений. – М.: Диалог-МИФИ, 2003. – 448 с.
32. Потемкин В.Г. Введение в MATLAB. – М.: Диалог-МИФИ, 2000. – 350 с.
33. Потемкин В.Г. Вычисления в среде MATLAB. – М.: Диалог-МИФИ, 2004. – 720 с.
34. Семененко Н.Г. Введение в математическое моделирование. Maple, Mathematica, MATLAB. – М.: СОЛОН, 2002. – 112 с.
35. Чен К., Джиблин П., Ирвинг А. MATLAB в математических исследованиях. – Пер. с англ. – М.: Мир, 2001. – 346 с.

Глава 3. Первичная статистическая обработка опытных данных

Математическая статистика занимается как статистическим *описанием* результатов опытов или наблюдений, так и построением и проверкой подходящих математических *моделей*, содержащих понятие вероятности. Ее методы расширяют возможности научного предсказания и рационального принятия решения во многих задачах, где существенные параметры не могут быть известны или контролируемы с достаточной точностью.

Статистическое описание и вероятностные модели применяются к физическим процессам, обладающим тем свойством, что хотя результат отдельного измерения физической величины y не может быть предсказан с достаточной точностью, значение некоторой подходящей функции $z = z(y_1, y_2, \dots, y_n)$ от множества результатов y_1, y_2, \dots, y_n повторных измерений может быть предсказано с существенно лучшей точностью. Такая функция называется *статистикой*, а указанное свойство физического процесса — его статистической устойчивостью. Статистическая устойчивость в каждой конкретной ситуации есть эмпирический физический закон, который может быть проверен только опытом.

Часто точность предсказания некоторой статистики возрастает с возрастанием объема n *выборки* (y_1, y_2, \dots, y_n) (физический закон больших чисел).

Рассмотрим несколько правил обработки экспериментальных данных.

3.1. Ошибка

Анализ ошибок по важности сопоставим с тем набором чисел, который мы получаем в процессе измерений.

Каждая область науки имеет свои собственные специальные инструменты, но все ученые обращаются к статистике, так как они должны считаться с ошибками. Научный эксперимент немыслим без ошибки [1, с. 13–19]. Любой поток фактов, пополняющий наше знание, приносит с собой какую-то ошибку.

Слово «ошибка» не означает простой «просчет». Последствия просчета — это небольшой и сравнительно неинтересный источник ошибки эксперимента.

Действительно, инструменты ломаются; глаза и уши могут обмануть нас; измерения никогда не бывают совершенно точными; иногда даже наши арифметические подсчеты ошибочны. Но ошибка эксперимента есть нечто более существенное, чем неточная рулетка или обман зрения. И так как важнейшее дело статистики помочь проанализировать ошибку эксперимента, нужно попытаться понять, что же такое эта ошибка в действительности.

Экспериментальная ошибка — это неотъемлемая часть всякого подлинно научного опыта. Мы планируем эксперимент для изучения известных влияний, но случайные факторы, которые мы не в состоянии предвидеть или проконтролировать, искажают результаты, добавляя к ним свои собственные эффекты.

Приведем возможную классификацию измерений и погрешностей и ряд определений [2, с. 11–18, 3, с. 154–156, 4, с. 101–116, 5, с. 7–13, 6, с. 145–163, 7, с. 9–15, 8, с. 130–144, 9, с. 343–366, 10, с. 77–89]. При этом будем допускать, что ошибка и погрешность — суть синонимы, хотя это пересекающиеся множества.

Виды измерений можно классифицировать по следующим критериям.

1. По способу получения результата

Прямые (непосредственные) измерения дают непосредственные значения исследуемой величины, которые могут быть отсчитаны прямо по прибору. При *косвенных* измерениях исследуемая величина не может быть получена непосредственно, а вычисляется как функция по результатам измерений других величин.

2. По методу измерений

При *абсолютных* измерениях исследуемая величина фиксируется в аналоговом или дискретном виде, при этом результаты измерений содержат погрешность и имеют размерность исследуемой величины. При *пороговых* (допустимых) измерениях фиксируется только факт нахождения величины в одностороннем или двустороннем допуске (по принципу «да–нет»); в некоторых случаях указывается вероятность нахождения в допуске.

3. По условиям измерений

Равноточные измерения проводятся в одинаковых условиях, определяющих общую точность измерений (тип, класс, экземпляр прибора, число измерений, внешние условия, квалификация оператора и т. д.). При этом в ряду результатов измерений нельзя отдать предпочтение какому-либо одному или нескольким значениям. *Неравноточные* измерения не отвечают указанным выше условиям.

4. По степени достоверности измерений

Избыточные измерения имеют по сравнению с *необходимыми* большее число измерений, либо большую точность, наличие среди измеряемых величин зависимых и т. д., т. е. дают избыточную информацию.

Классификацию видов погрешностей можно представить следующим образом.

1. По форме числового выражения

Абсолютная погрешность — это разность между результатом измерения x искомой величины и ее истинным значением v (или реализацией в данном измерении), выраженная в единицах измерения: $\Delta v = x - v$, где x — результат измерения; v — истинное значение. Абсолютная погрешность является оценкой абсолютной ошибки измерения.

Величина этой погрешности зависит от способа ее вычисления, который определяется распределением случайной величины x . При этом неравенство: $\Delta v > x - v$ должно выполняться с некоторой вероятностью, близкой к 1. Если случайная величина x распределена по нормальному закону, то обычно за абсолютную погрешность принимают ее среднеквадратичное отклонение. Абсолютная погрешность измеряется в тех же единицах измерения, что и сама величина.

Относительной погрешностью называется погрешность, приходящаяся на единицу измеряемой величины. Она обычно выражается в процентах: $\delta = (\Delta v/v)100\%$. Это погрешность измерения, выраженная отношением абсолютной погрешности измерения к действительному или измеренному значению измеряемой величины.

Приведенная погрешность относится не к конкретному значению измеряемой величины, а к ее максимально возможному значению или к максимальному значению шкалы прибора $v_{\text{макс}}$: $\delta_{\text{пр}} = (\Delta v/v_{\text{макс}})100\%$. Приведенная погрешность — погрешность, выраженная отношением абсолютной погрешности средства измерения к условно принятому значению величины, постоянному во всем диапазоне измерений или в части диапазона.

2. По закономерности появления

Случайная погрешность — это погрешность, которая в отдельных измерениях может принимать случайные, заранее конкретно неизвестные значения. Обычно известны только числовые характеристики закона распределения погрешности измерений.

Систематическая погрешность является либо постоянной, либо изменяется по какому-то определенному закону во времени от порядкового номера измерений или от другой какой-либо независимой переменной. Если систематическая погрешность определена, то она учитывается при отсчете каждого результата; в этом случае она называется *поправкой*. Систематические погрешности можно подразделить на: а) *инструментальные (приборные погрешности)* — погрешности, которые определяются погрешностями применяемых средств измерений и вызываются несовершенством принципа действия, неточностью градуировки шкалы, малой наглядностью прибора; б) *методические погрешности* — погрешности, обусловленные несовершенством метода, а также упрощениями, положенными в основу методики; в) *субъективные (операторные) личные погрешности* — погрешности, обусловленные степенью внимательности, сосредоточенности, подготовленности и другими качествами оператора.

Прогрессирующая (дрейфовая) погрешность — непредсказуемая погрешность, медленно меняющаяся во времени. Она представляет собой нестационарный случайный процесс.

Грубая погрешность (промах) вызывается просчетом оператора, неисправностью средств измерения, неучетом резко изменившихся внешних условий и т. д. Грубые погрешности приводят к явному искажению результатов, поэтому при обработке их надо исключать.

3. По возможности (вероятности) реализации

Понятие *предельной погрешности* используется для характеристики погрешностей — случайной, систематической или их сочетания. Предельная погрешность — это

погрешность, которую практически не превосходит (или не превосходит с определенной вероятностью) любая из перечисленных выше погрешностей.

В тех случаях, когда погрешность случайная или состоит из случайной и систематической, указывается уровень вероятности, которому соответствуют предельные значения погрешности (0,9; 0,95; 0,99; 0,997). Для случайной погрешности, распределенной по нормальному закону, вместо вероятности указывается соответствующее число квантиля или «сигм». Например, предельная погрешность на уровне 2σ (вероятность 0,95), 3σ (вероятность 0,997) и др.

Для количественной характеристики случайной погрешности используются следующие показатели.

Доверительный интервал в пределах от минимального до максимального результата измерений, и погрешность как половина разности между максимальным и минимальным результатом измерения (метод Корнфельда): $\Delta x = (x_{\max} - x_{\min})/2$.

Средняя квадратическая (стандартная) погрешность (σ_{Δ}). Оценка ее по результатам n измерений находится по следующей формуле:

$$\sigma_{\Delta} = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \Delta v_i^2},$$

где $\Delta v_i = x_i - v_i$; v_i — реализация измеряемой величины; x_i — реализация результата измерения; Δv_i — абсолютная погрешность в каждом измерении.

Средняя квадратическая погрешность среднего арифметического:

$$\sigma_{\Delta \bar{n}0} = \sigma_{\Delta} / \sqrt{n} = \sqrt{\frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n \Delta v_i^2}.$$

Вероятная погрешность r — такая величина, больше или меньше которой (по абсолютной величине) реализации погрешности равновозможны. В частности, для погрешности, распределенной по нормальному закону, $r_{\Delta} = (2/3)\sigma_{\Delta}$.

Средняя погрешность $|\Delta v| = \left(\sum_{i=1}^n |\Delta v| \right) / n$.

Средняя арифметическая погрешность $\Delta v = \left(\sum_{i=1}^n \Delta v \right) / n$.

Все указанные выше показатели можно выразить и в относительном виде.

Погрешность прямых измерений вычисляется по формуле $\Delta x = ((\sigma_{\Delta} t)^2 + (A)^2)^{1/2}$, где σ_{Δ} — средняя квадратическая погрешность; t — коэффициент Стьюдента; A — число, численно равное половине цены деления измерительного прибора.

Погрешность косвенных воспроизводимых измерений — погрешность вычисляемой (не измеряемой непосредственно) величины. Если $F = F(x_1, x_2, \dots, x_n)$, где x_i — непосредственно измеряемые независимые величины, имеющие погрешность Δx_i , тогда:

$$\Delta F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\Delta x_i \frac{\partial F}{\partial x_i} \right)^2}.$$

Погрешность косвенных невоспроизводимых измерений вычисляется по принципу прямой погрешности, но вместо x_i ставится значение, полученное в процессе расчетов.

Итак, измерить мы можем не то, что есть на самом деле, не сами значения функции цели (отклика), а значения, искаженные случайными ошибками.

Однако, с другой стороны, обнаружение систематической ошибки часто наводит нас на след нового открытия. Знание, каким образом появляются случайные ошибки, помогает нам обнаружить систематические ошибки и, следовательно, исключить их. Также важно и то, что это дает ключ к открытию влияний, о которых мы не подозревали ранее.

Итак, в результате измерений мы всегда получаем нужную величину с некоторой погрешностью. В задачу измерений входит не только нахождение самой величины, но также и оценка допущенной при измерении погрешности.

Не следует увлекаться получением излишней точности, когда она не нужна, но необходимо прилагать максимум усилий и не жалеть времени и труда для получения лишнего десятичного знака, когда это требуется. Надо иметь в виду, что очень часто именно повышение точности измерений позволяет вскрыть новые закономерности, неизвестные ранее [11, с. 5–22].

3.2. Вычисление основных статистик

Рассмотрим вычисление выборочной средней, характеристик разброса и объема выборки.

Обработка результатов практически любого эксперимента начинается с вычисления средних значений. Отбирая среднюю величину из множества данных, мы специально выделяем какую-то конкретную величину, которая обладает способностью представлять все множество, так чтобы его можно было сравнивать с другими подобными множествами. Термин «средняя величина» (*average*), появившийся первоначально в качестве совершенно определенного термина из области страхования, приобрел так много различных значений, что употребление его без пояснений представляется почти бессмысленным.

Существует три основных вида средних величин: собственно среднее (*mean*), мода и медиана, причем первое обычно подразделяется на среднее арифметическое, среднее геометрическое и среднее гармоническое. Специалисты полимерной отрасли любят еще и среднее квадратическое. Все они представляют относительные величины, и поэтому термин «среднее» редко применяется в статистике для обозначения абсолютных величин. При упоминании этих величин надо всегда ссылаться на них в их точном названии.

Перечисленные средние предназначены для решения различных задач, точно так же как для разных видов труда требуются различные инструменты. Средние отличаются от других статистических величин тем, что представляют собой результаты таких расчетов, которые сделаны на основе индивидуальных величин, собранных во множество данных. Что касается медианы и моды, то они представляют конкретные

наблюдаемые величины в пределах множества и не являются результатом математических расчетов.

Среднее арифметическое является самым распространенным показателем для характеристики очень многих явлений. Его легче всего вычислить. Надо лишь сложить все числа и разделить сумму на общее количество чисел. В простейшем случае используется формула:

$$M_a = \Sigma y / m = (y_1 + y_2 + \dots + y_i + \dots + y_m) / m, \quad (3.1)$$

т. е. сумму значений признака делят на число измерений m . В более сложных случаях иногда приходится вычислять так называемое *взвешенное* среднее, когда b значений величины y_1, y_2, \dots, y_b наблюдается, соответственно, m_1, m_2, \dots, m_b раз. В этом случае взвешенное среднее вычисляется по формуле:

$$M_a = \Sigma m_i y_i / \Sigma m_i = (m_1 y_1 + m_2 y_2 + \dots + m_b y_b) / (m_1 + m_2 + \dots + m_b). \quad (3.2)$$

Основным свойством среднего арифметического является то, что сумма отклонений отдельных измерений от среднего значения $\Sigma(y_i - M_a) = (y_1 - M_a) + (y_2 - M_a) + \dots + (y_m - M_a) = 0$ равна нулю.

При измерениях одинаковой точности наиболее вероятным или наилучшим значением измеряемой величины является среднее арифметическое из результатов, полученных при всех измерениях [5, с. 30–33; 11, с. 60–62; 13, с. 7–11; 14, с. 610–612; 15, с. 203–204; 16, с. 309; 17, с. 32–35; 18, с. 121–125; 19, с. 20–23; 20, с. 7–8].

Это положение или так называемый постулат среднего арифметического [21, с. 159–162] применяется при всех вычислениях окончательного результата измерений. Постулат среднего арифметического является прямым следствием теории случайных ошибок.

Среднее арифметическое может быть не просто малозначимым, но и явно вводить в заблуждение. Средние по отдельным наборам данные никогда нельзя усреднять с целью получения нового среднего, применяемого по отношению ко всем данным, взятым вместе, не делая при этом отсылку к самим данным.

Однако среднее арифметическое может в равной мере вводить в заблуждение и в тех случаях, когда арифметические действия производятся правильно. Когда числа в наборе незначительно отличаются от средней величины, последнее является во всех отношениях наилучшим показателем, пригодным для применения. И наоборот, когда числа резко различаются между собой, среднее почти бессмысленно.

Например, получен ряд значений относительного удлинения при разрыве (%): 500; 475; 525; 500; 525; 475; 500. Среднее арифметическое 500% ярко характеризует весь набор. Для другого набора: 500; 475; 475; 800; 500; 475; 500 среднее 532% совершенно скрывает необычно большое число 800.

Средние сами по себе не могут характеризовать аномальные величины; а между тем во многих случаях именно величины, выходящие за обычные пределы, зачастую представляют наибольший интерес. Тем не менее, если среднее в достаточной степени

характерно для набора величин, то всякое неожиданное отклонение от него может быть выделено путем сопоставления каждой реальной величины со средним. Иными словами, среднее представляет основу, при помощи которой можно обнаружить аномальные величины.

Таким образом, лишь измерения тождественных величин могут подвергаться усреднению. Среднее арифметическое не может правильно применяться ко всем наборам данных. Например, им нельзя пользоваться для усреднения темпов роста или скорости.

В прежние времена рекомендовалось [22, с. 11] при вычислении среднего арифметического из всех значений вычитать какое-то число, близкое к среднему (в последнем примере, скажем, 525), полученные разности сложить (будет 50), это число разделить на количество наблюдений (7) и частное прибавить к 525.

Среднее геометрическое наиболее объективно, например, характеризует совокупности данных, являющихся результатами определений активности различных функциональных добавок. Среднее геометрическое применяется для получения средних темпов роста, когда последующее измерение зависит от предыдущих измерений: рост базируется на росте, и, таким образом, темп роста непрерывно увеличивается.

Среднее геометрическое, как и другие средние, является результатом математического действия, но это не одно и то же действие. Среднее геометрическое вычисляется путем перемножения всех чисел данного набора и последующего извлечения из произведения корня m -й степени.

Оно вычисляется в соответствии с соотношением:

$$M_g = (\Pi y_i)^{1/m} = (y_1 \times y_2 \times \dots \times y_i \times \dots \times y_m)^{1/m}. \quad (3.3)$$

При логарифмировании этого выражения обнаруживается, что среднее геометрическое может быть вычислено как среднее арифметическое относительно логарифмов величин:

$$\ln M_g = (\Sigma \ln y_i)/m = (\ln y_1 + \ln y_2 + \dots + \ln y_i + \dots + \ln y_m)/m. \quad (3.4)$$

Среднее арифметическое всегда больше, чем среднее геометрическое. Докажем это для средних из двух чисел [23, с. 394–397]. Пусть имеется два числа x и y . Среднее арифметическое этих чисел $M_a = (x + y)/2$. Среднее геометрическое $M_g = (x \cdot y)^{0.5}$. Необходимо доказать, что $(x + y)/2 > (x \cdot y)^{0.5}$. Или $(x + y)^2/4 > x \cdot y$; $(x + y)^2 > 4xy$; отсюда: $x^2 + 2xy + y^2 > 4xy$. И окончательно: $x^2 - 2xy + y^2 > 0$; т. е. $(x - y)^2 > 0$.

Среднее квадратическое

$$M_s = (\Sigma y_i^2/m)^{1/2} = ((y_1^2 + y_2^2 + \dots + y_i^2 + \dots + y_m^2)/m)^{1/2} \quad (3.5)$$

равно корню квадратному из отношения суммы квадратов отдельных измерений к их числу. В области полимеров так вычисляется среднемассовая молекулярная масса.

Среднее гармоническое вычисляется согласно следующему соотношению:

$$M_{gr} = m(\sum y_i^{-1})^{-1}. \quad (3.6)$$

Средним гармоническим следует всегда пользоваться для получения средних количеств или цен. Среднее гармоническое может применяться по отношению к количествам, не зависящим друг от друга.

Таким образом, мы рассмотрели четыре вида средних, каждое из которых получается в результате простого математического действия.

Всем им свойственна одна особенность, которая, на первый взгляд, кажется их дефектом. Даже в тех случаях, когда все числа множества являются целыми, совершенно в порядке вещей, что какое-либо из средних может часто представлять собой эквивалент, выраженный дробью и не соответствующий ни одной из реальных величин. Этот дефект — скорее видимость, чем реальность. Если переменная непрерывна, дефект не проявляется; но он действительно приводит к совершенно невероятным результатам, если переменная дискретна, когда, например, средняя производительность станка равна 5,34 pokrышки в час.

Два других показателя центральной тенденции, мода и медиана, свободны от таких математических тонкостей, поскольку, как правило, они вообще не вычисляются с помощью математических действий. Хотя и существует ряд исключений из правила, эти показатели обычно представляют собой реальные величины, которые выбираются в качестве представителей своего множества в процессе наблюдения.

Мода представляет собой наиболее часто встречающуюся величину. Важность этого показателя состоит, прежде всего, в том, что он характеризует значение существенной части множества и им можно эффективно пользоваться для интерпретации, когда большинство величин по своему значению довольно близко к моде. Хотя последняя и представляет собой наиболее часто встречающуюся величину, из этого не следует, что она встречается чаще, чем все другие величины данной группы, вместе взятые.

Медиана (или срединное значение) для нечетного числа наблюдений определяется после того, как рассматриваемые величины расставлены в порядке возрастания.

Медиана набора величин представляет собой, как правило, центральную по размерам величину. Так, например, если имеется семь последовательных величин, то медианой будет четвертая из них, так что три величины окажутся меньше ее и три — больше. Естественно, прежде чем набор данных может быть разделен таким образом, важно, чтобы величины были сначала расположены в определенной последовательности: самый высокий — справа, самый низкий — слева. Когда набор состоит из нечетного количества чисел, и все они являются целыми, медиана будет также выражена целым числом. Когда же количество чисел четное, то центральное число в этом смысле отсутствует. Вместо этого существует центральная пара чисел, и медиана рассчитывается как средняя из этих двух чисел.

Следовательно, медиана предназначена не просто для фиксации величины, характеризующей множество, но и для того, чтобы установить границу между высшей

и низшей величинами. Она имеет преимущество перед средней арифметической в тех случаях, когда нельзя точно определить высшую и низшую величины для данного множества.

Таким образом, медиана может быть установлена даже тогда, когда окончания наборов данных «открыты», в то время как вычисление средней арифметической подвержено определенным математическим дефектам. Для того чтобы вычислить среднее арифметическое, необходимо прежде всего сложить индивидуальные величины. Но как сложить x и y , если $x < 3$, а $y > 5$, причем y может иметь любое значение больше 5 (в определенных пределах в соответствии с характером измерений)? Угадать можно лишь путем произвольного решения, которое может лишить смысла величину, полученную в результате вычислений. Некоторые трудности возникают при установлении медианы, когда имеются данные о количестве показателей в пределах группы, но не об их величинах, хотя обычно достаточно определить группу, содержащую медиану.

Итак, при нечетном числе наблюдений значение, находящееся посередине полученного ряда принимается за медиану:

$$Md = y_{(m+1)/2}. \quad (3.7)$$

При четном числе наблюдений посередине оказывается два числа. За медиану принимается среднее арифметическое из этих двух чисел:

$$Md = (y_{m/2} + y_{m/2+1})/2. \quad (3.8)$$

Из вышеизложенного следует, что необходимо очень внимательно относиться к вычислению средней величины из каких-либо данных. Главным образом, следует понять, какое среднее нужно в данном конкретном случае определять.

Медиана в противоположность арифметическому среднему оказывается нечувствительной к крайним (резко выделяющимся) значениям измерений. Поэтому ее можно использовать для характеристики небольшой серии измерений ($n < 10$), при которых появляются такие резко выделяющиеся значения [24, с. 25–29].

Мы рассмотрели сравнительные достоинства и недостатки разных показателей центральной тенденции. Необходимо также принимать во внимание влияние изменяющихся условий на статистические средние. Среднее, рассчитанное для определенного стечения обстоятельств, не обязательно будет применимо к другим обстоятельствам; оно не будет также находиться ни в какой прямой пропорциональной связи с новым средним, если каждая отдельная величина в новом наборе не является прямо пропорциональной, соответствующей величине в старом наборе.

Разные виды показателей центральной тенденции дают различное понятие среднего. Какая из них может наилучшим образом применяться в каждом конкретном случае — собственно среднее, мода или медиана? Как правило, никакая в отдельности, но все вместе. Любой из показателей, взятый изолированно, может дать лишь одно измерение набора данных. Нет всеобщей «наилучшей» формы средней; многое

зависит от вида рассматриваемой переменной, а также от характера величин. Когда распределение нормальное, средняя, мода и медиана совпадают. Однако не все распределения нормальны. Один из этих показателей может быть для какой-либо одной цели более представительным, а для другой — менее, и вскоре становится очевидным, что, поскольку эти показатели обладают, по существу, различной размерностью, их подлинная значимость будет раскрыта лучше, если их применять в тесной связи друг с другом.

Необходимо также иметь некоторое представление о режиме величин данного набора, как в пределах их полного размаха, так и в отношении к центральному показателю. Такое представление может быть получено путем вычисления стандартного отклонения от среднего (среднего квадратического отклонения).

При проведении нескольких параллельных наблюдений в какой-либо точке получается некоторый разброс значений, обусловленный ошибкой опыта (дисперсией воспроизводимости). Знание ошибки воспроизводимости необходимо для анализа экспериментальных данных. При реализации параллельных наблюдений лишь в какой-нибудь одной точке на j -ом уровне фактора *дисперсия воспроизводимости* S_j^2 , характеризующая ошибку опыта, определяется в соответствии с соотношением:

$$S_j^2 = \Sigma(y_{ij} - y_{срj})^2 / (m - 1) = ((y_{1j} - y_{срj})^2 + (y_{2j} - y_{срj})^2 + \dots + (y_{mj} - y_{срj})^2) / (m - 1), \quad (3.9)$$

где $1, 2, \dots, i$ — номер параллельного наблюдения в данной точке; j — номер уровня фактора; $y_{срj}$ — среднее арифметическое; m — количество параллельных наблюдений в данной точке; $m - 1$ — число степеней свободы для ошибки (при $m > 50$ число степеней свободы можно брать равным m). Если y , например, измеряется в МПа (прочность или напряжение), то дисперсия будет измеряться в МПа². Физический смысл величины, измеряемой в таких единицах, вряд ли может быть осмыслен, поэтому вычисляется приемлемая для осмысления характеристика, измеряемая в МПа.

Часто для оценки точности применяемой методики ставят специальную серию опытов, многократно повторяя анализ одной и той же пробы. На проведение большой серии опытов требуется много времени, в течение которого может неконтролируемым образом измениться среднее значение результатов анализа. Значительно проще и удобнее определять ошибку воспроизводимости по текущим измерениям [25, с. 32–35].

Предположим, анализируются n проб (например, n вулканизатов разного состава). При анализе каждой пробы делается различное число параллельных опытов: m_1, m_2, \dots, m_n . Вычислим частные дисперсии $S_1^2, S_2^2, \dots, S_n^2$ для каждой такой выборки в отдельности. Число степеней свободы частных дисперсий, соответственно, равно: $v_1 = m_1 - 1, v_2 = m_2 - 1, \dots, v_n = m_n - 1$. Общая дисперсия воспроизводимости всех опытов будет равна средневзвешенному значению частных дисперсий (в качестве весов берутся степени свободы):

$$\begin{aligned} S_{\text{воспр}}^2 &= (v_1 S_1^2 + v_2 S_2^2 + \dots + v_n S_n^2) / (v_1 + v_2 + \dots + v_n) = \\ &= ((m_1 - 1) S_1^2 + (m_2 - 1) S_2^2 + \dots + (m_n - 1) S_n^2) / (m_1 + m_2 + \dots + m_n - n). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Число степеней свободы общей дисперсии равно общему числу измерений минус число связей, использованных для определения n средних:

$$v_{\text{воспр}} = m_1 + m_2 + \dots + m_n - n = \sum m_i - n. \quad (3.11)$$

Если число параллельных опытов для каждой пробы одинаково: $m_1 = m_2 = \dots = m_n = m$, формулы для расчета дисперсии воспроизводимости упрощаются:

$$S^2_{\text{воспр}} = (m_1 - 1)(S_1^2 + S_2^2 + \dots + S_n^2)/(mn - n) = (m - 1)\sum S_i^2/(n(m - 1)) = \sum S_i^2/n. \quad (3.12)$$

Таким образом, при равном числе параллельных опытов общая дисперсия воспроизводимости равна среднему арифметическому частных дисперсий. Число степеней свободы общей дисперсии при этом равно: $v_{\text{воспр}} = n(m - 1)$.

Среднее квадратическое отклонение S_j представляет собой положительный квадратный корень из дисперсии. Запишем выражение для этой характеристики разброса значений:

$$S_j = (S_j^2)^{1/2} = (\sum (Y_{ij} - Y_{\text{срj}})^2 / (m - 1))^{1/2}. \quad (3.13)$$

Разброс показателей относительно среднего арифметического можно количественно характеризовать отношением квадратического отклонения S_j к среднему арифметическому $Y_{\text{срj}}$:

$$V = S_j / Y_{\text{срj}}. \quad (3.14)$$

Это отношение называется *коэффициентом вариации*. При этом его можно выразить в процентах по отношению к среднему значению, и тогда по его величине можно сопоставлять между собой погрешности определения показателей различной физической природы, чего нельзя сделать с помощью среднего квадратического отклонения, которое представляет собой размерную характеристику.

Следующим критерием разброса параллельных наблюдений относительно среднего является *размах R* , вычисляемый как разница между максимальным и минимальным значением отклика:

$$R = Y_{\text{maxj}} - Y_{\text{minj}}. \quad (3.15)$$

Сведения общего характера и примеры расчета характеристик разброса (дисперсии, среднего квадратического отклонения, размаха, коэффициента вариации) можно найти в следующих источниках [5, с. 35–39; 11, с. 31, 62–64; 14, с. 613; 15, с. 205–216; 16, с. 310; 17, с. 33–35; 18, с. 129–132; 19, с. 20–23; 20, с. 10–12; 22, с. 12–15; 24, с. 29–31; 26, с. 25–26].

Допустим, что имеется m измерений $y_1, y_2, \dots, y_p, \dots, y_m$ и требуется установить *доверительный интервал* для среднего [5, с. 39–42; 14, с. 632–637; 16, с. 324–331; 22, с. 20–21; 25, с. 36–38; 26, с. 14–18; 27, с. 187–190; 28, с. 286–292; 29, с. 650–657]:

$$B = y_{\text{срj}} \pm tS_j / ((m)^{1/2}). \quad (3.16)$$

Значения критерия Стьюдента t можно взять из специальных таблиц (таблица I Приложения) при числе степеней свободы $\nu = m - 1$ и уровне значимости $\alpha = 5\%$ (вероятность 95%). Соотношение (3.16) следует использовать при небольшом числе повторных наблюдений.

При большом числе параллельных наблюдений средняя величина $y_{\text{срj}}$ должна быть приблизительно нормально распределена. Доверительный интервал в этом случае составляет: $y_{\text{ср}} - zS < \mu < y_{\text{ср}} + zS$. Значения z можно выбрать из таблиц процентных величин единиц нормальной кривой. Некоторые из них представлены ниже [табл. 3.1, 19, с. 27–29, 126].

Таблица 3.1. Характеристики нормального распределения

Уровень существенности	0,05	0,0454	0,01	0,0027	0,001
Доверительный интервал	0,95	0,9546	0,99	0,9973	0,999
Значение z	1,96	2,00	2,575	3,00	3,29

Приведем экспрессный метод вычисления среднего квадратического отклонения, основанный на оценке различий между крайними значениями в выборке (на размахе $R = y_{\text{maxj}} - y_{\text{minj}}$). Важным условием применения этого метода является предварительное исключение грубых промахов [13, с. 11–13]. Метод достаточно эффективен применительно к массивам с числом повторных наблюдений $n < 20$.

Весь расчет осуществляется с помощью простой формулы $S = R_m/d_m$, где R_m — размах из m наблюдений, а d_m находится по таблице II Приложения против соответствующего значения m . Заметим, что вычисление S с помощью классического метода дает несколько меньшее значение, т. е. экспрессный метод обеспечивает в данном случае некоторую «перестраховку» в оценке варьирования. Это вообще характерно для большинства случаев применения экспрессного метода.

Опираясь на вычисление размаха варьирования и специальные таблицы, можно также значительно ускорить оценку границ доверительных интервалов средних. Так, верхнюю и нижнюю границы доверительного интервала средней арифметической можно оценить, соответственно, по формулам $y_{\text{ср}} + k_R R_m$ и $y_{\text{ср}} - k_R R_m$. Значения k_R можно найти в таблице III Приложения для уровня достоверности 95 или 99%.

Очевидно, что оценка границ доверительного интервала средней геометрической делается так же, с тем лишь усложнением, что все операции производятся с логарифмами данных.

Чрезвычайно простой метод существует для оценки границ *доверительного интервала* медианы. Для этого, располагая упорядоченной совокупностью данных, достаточно по табл. IV Приложения найти номера точек, которые могут быть приняты как пограничные значения границ доверительного интервала. Необходимо, однако, иметь в виду, что последний метод становится достаточно практичным, как правило, для совокупностей с числом повторных наблюдений, превышающем 15–20. При

меньшем числе наблюдений он приводит к слишком «перестраховочным» значениям границ.

Нижний и верхний *пределы для дисперсии* (при $m < 30$) можно рассчитать по формуле

$$S_{j \text{ экстр}}^2 = mS_j^2/(\chi^2). \quad (3.17)$$

Критерий хи-квадрат (χ^2) выбирается из соответствующих таблиц (табл. V Приложения) при числе степеней свободы $\nu = m - 1$ и уровне значимости $\alpha = 5\%$ для нижнего предела и уровне значимости $\alpha = 95\%$ — для верхнего предела [16, с. 331–333; 22, с. 22–23; 27, с. 190–192].

Остановимся теперь на вопросе выбора *количества повторных измерений* для нахождения средней арифметической с заданной точностью [5, с. 54–57; 11, с. 44–47; 13, с. 27–33; 20, с. 27–28]. Минимальное количество испытаний m (объем выборки) зависит от трех статистических характеристик: коэффициента вариации (V , %), показателя точности (относительная ошибка T , обычно 5%) и показателя достоверности (t – критерия Стьюдента):

$$m = V^2 t^2 / T^2. \quad (3.18)$$

Рекомендуется в первом приближении при определении табличного значения критерия Стьюдента исходить из числа степеней свободы, соответствующего бесчисленному количеству измерений (генеральной совокупности).

Для более точных расчетов используется формула:

$$m = (V^2)(t^2)(1 \pm 1/(2m_1)^{1/2})^2 / (T^2), \quad (3.19)$$

в которой m_1 — количество наблюдений, осуществленных для нахождения среднего и дисперсии.

Критерий Стьюдента выбирается при числе степеней свободы $\nu = m_1 - 1$ и уровне значимости 5% (таблица I Приложения).

Пример. Была произведена серия m параллельных (повторных) наблюдений (выборка) относительного удлинения при разрыве вулканизатов и получены следующие результаты (%):

620; 600; 630; 630; 670.

Необходимо вычислить выборочное среднее \bar{y} , выборочную дисперсию S_y^2 , стандартное отклонение S_y и коэффициент вариации V и оценить, достаточное ли количество параллельных наблюдений было сделано.

Выборочное среднее значение

Теория.

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^m y_i / m = (y_1 + y_2 + \dots + y_i + \dots + y_m) / m.$$

Решение.

$$\bar{y} = (620 + 600 + 630 + 630 + 670) / 5 = 3150 / 5 = 630\%.$$

Выборочная дисперсия и выборочное стандартное (среднеквадратичное) отклонение

Теория.

$$S_Y^2 = \sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2 / (m-1) = ((y_1 - \bar{y})^2 + (y_2 - \bar{y})^2 + \dots + (y_m - \bar{y})^2) / (m-1).$$

$$S_Y = \sqrt{S_Y^2}.$$

Решение.

$$\sqrt{S_Y^2} = ((620 - 630)^2 + (600 - 630)^2 + \dots + (670 - 630)^2) / (5 - 1) = 2600 / 4 = 650.$$

$$S_Y = 650^{1/2} = 25,5\%.$$

Коэффициент вариации

Теория.

$$V = S_Y / \bar{Y} \cdot 100.$$

Решение

$$V = 25,5 \times 100 / 630 = 4,05\%.$$

Доверительные 95%-ные интервалы для генерального среднего μ

Теория.

$$\bar{y} - t \cdot S_Y / \sqrt{m} < \mu < \bar{y} + t \cdot S_Y / \sqrt{m}, \text{ критерий Стьюдента } t \text{ выбирается из табл. I,}$$

помещенной в Приложениях, при числе степеней свободы $\nu = m - 1$ и уровне значимости $\alpha = 5\%$. Уровень значимости — это вероятность совершения ошибки первого рода. Ошибка первого рода α — отказ от истинной статистической гипотезы. Ошибка второго рода β — это принятие ложной статистической гипотезы. Принято считать уровень значимости 0,05, т. е. 5%.

Решение.

$$\nu = 5 - 1 = 4, t_{(4;0,05)} = 2,78, 630 - 2,78 \times 25,5 / 5^{1/2} < \mu < 630 + 2,78 \times 25,5 / 5^{1/2},$$

$$630 - 31,7 < \mu < 630 + 31,7;$$

$$598,3 < \mu < 661,7.$$

Интерпретация.

Если производится большое количество измерений (для генеральной совокупности), 95% из них попадет в указанный выше диапазон.

При проведении большого количества измерений относительного удлинения для данной резины 95% будут лежать в интервале [598; 662].

Нижний и верхний пределы для дисперсии $S_{\text{экстр}}^2$

Теория.

$S_{\text{экстр}}^2 = m S_Y^2 / \chi^2$. Критерий хи-квадрат (χ^2) выбирается при числе степеней свободы $\nu = m - 1$ и уровне значимости $\alpha = 95\%$ — для нижнего предела и уровне значимости $\alpha = 5\%$ — для верхнего предела (таблица V Приложения).

Решение.

$$\nu = 5 - 1 = 4, \chi_1^2 = 9,49, \chi_2^2 = 0,711, S_1^2 = 5 \times 650 / 9,49 = 342, S_2^2 = 5 \times 650 / 0,711 = 4570.$$

Следовательно, $S^2 \in [342; 4570]$.

Необходимое число наблюдений m_0

Теория.

Ориентировочный расчет. $m_0 = V^2 t^2 / T^2$; V — коэффициент вариации, %; t — показатель достоверности (критерий Стьюдента). Выбирается при числе степеней свободы $\nu = \infty$; T — показатель точности (относительная ошибка), %.

Уточненный расчет. $m_0 = V^2 \cdot t^2 / T^2 (1 \pm 1/\sqrt{2m})^2$, t -критерий выбирается при $\nu = m - 1$ и $\alpha = 5\%$ в таблице I Приложения.

Решение.

$V = 4,05\%$, $t_{(\infty; 0,05)} = 1,96$, T принимается 1% или 5% (из практических соображений $T = 5\%$ предпочтительнее), $m_0 = 4,05^2 \times 1,96^2 / 1^2 = 63$, $m_0 = 4,05^2 \times 1,96^2 / 5^2 = 2,57 \approx 3$.

$V = 4,05\%$, $t_{(4; 0,05)} = 2,78$, $m_0 = 4,05^2 \times 2,78^2 (1 \pm 1/((2 \times 5)^{1/2}))^2 / (1^2) = 140 \pm 80$,

$m_0 = 4,05^2 \times 2,78^2 (1 \pm 1/((2 \times 5)^{1/2}))^2 / (5^2) = 6 \pm 3$.

Интерпретация.

Если $m_0 < m$, число повторных наблюдений достаточно. Поскольку $m_0 = 3$ меньше $m = 5$, считаем количество проведенных опытов достаточным.

При вычислениях с использованием пакета *MATLAB* задача решается в следующей последовательности:

1. Формируем вектор-столбец результатов, для чего записываем в окне программы значения показателей в квадратных скобках через «;»

« $Y = [620; 600; 630; 630; 670]$ »;

2. Определяем количество повторных наблюдений.

« $m = \max(\text{size}(Y))$ » $m = 5$

3. Вычисляем среднее арифметическое значение.

« $Y1 = \text{mean}(Y)$ » $Y1 = 630,0000$

4. Вычисляем среднее геометрическое значение.

« $Y2 = (\text{prod}(Y))^{(1/m)}$ » $Y2 = 629,5928$

5. Вычисляем среднее квадратическое значение.

« $Y3 = \text{sqrt}(Y * Y / m)$ » $Y3 = 630,4126$

6. Вычисляем дисперсию.

« $S2 = \text{var}(Y)$ » $S2 = 650,0000$

7. Вычисляем среднее квадратическое отклонение

« $S = \text{sqrt}(S2)$ » $S = 25,4951$

8. Вычисляем коэффициент вариации.

« $V = S * 100 / Y1$ » $V = 4,0468$.

9. Вычисляем доверительные пределы для среднего (t -критерий берем из табл. I Приложения при $\nu = m - 1 = 5 - 1 = 4$).

« $t = 2,78$; $B = t * S / \text{sqrt}(m)$ » $B = 31,6969$.

10. Вычисляем необходимое количество параллельных наблюдений (ориентировочный расчет); t -критерий берем из таблицы I Приложения при $\nu = \infty$, значение T принимается из практических соображений.

« $t = 1,96$; $T = 5$; $M = V^2 * t^2 / T^2$ » $M = 2,5165$

11. Вычисляем необходимое количество параллельных наблюдений (точный расчет); t -критерий берем из таблицы I Приложения при $v = m - 1 = 5 - 1 = 4$.

$$\llcorner t = 2,78; T = 5; M1 = V^2 * t^2 * (1 + 1/\sqrt{2 * m})^2 / T^2 \quad M1 = 8,7709.$$

$$\llcorner t = 2,78; T = 5; M2 = V^2 * t^2 * (1 - 1/\sqrt{2 * m})^2 / T^2 \quad M2 = 2,3670.$$

12. Вычислим доверительные пределы для дисперсии (χ^2 -критерий берем из таблицы V Приложения при $n = m - 1 = 5 - 1 = 4$ и уровнях значимости α 5 и 95%).

$$\llcorner X2 = 9,49; A1 = m * S2 / X1 \quad A1 = 342.$$

$$\llcorner X2 = 0,711; A2 = m * S2 / X2 \quad A2 = 4571.$$

Листинг программы для решения рассмотренных задач с помощью пакета *MATLAB*.

```
echo on
% ВЫЧИСЛЕНИЕ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ, ДИСПЕРСИИ, КОЛИЧЕСТВА ПОВТОРНЫХ
НАБЛЮДЕНИЙ (до 30)
echo off
y = input ('введите столбец повторных наблюдений (в квадратных
скобках через «;»)' );
N = max(size(y)); - КОЛИЧЕСТВО НАБЛЮДЕНИЙ;
y1=mean(y); y2=(prod(y))^(1/N); y3=sqrt((y'*y)/N); y4=median(y)
- СРЕДНИЕ (АРИФМЕТИЧЕСКОЕ, ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ, КВАДРАТИЧЕСКОЕ), МЕ-
ДИАНА;
R=y(max)-y(min) - РАЗМАХ;
SS=var(y); - ДИСПЕРСИЯ;
S=sqrt(SS); - СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ;
V=S/y1*100; - КОЭФФИЦИЕНТ ВАРИАЦИИ;
t = [12.706;4.303;3.182;2.776;2.571;...] - КРИТЕРИЙ СТЬЮДЕНТА (фраг-
мент таблицы);
d = t*(N-1)*S/sqrt(N); A1=y1-d;A2=y1+d; - 95%-е ДОВЕРИТЕЛЬНЫЕ
ПРЕДЕЛЫ;
hi1=[3.84;5.99;7.82;9.49;...] - КРИТЕРИЙ Х-КВАДРАТ ПРИ ВЕРОЯТНО-
СТИ 5% (фрагмент таблицы);
hi2=[0.004;0.103;0.352;0.711;...] - КРИТЕРИЙ Х-КВАДРАТ ПРИ ВЕРО-
ЯТНОСТИ 95% (фрагмент таблицы);
SS1 = N*SS/hi1; SS2=N*SS/hi2; - НИЖНИЙ И ВЕРХНИЙ ПРЕДЕЛЫ ДЛЯ ДИ-
СПЕРСИИ;
m = V*V*1,96*1,96/25; m = ceil(m); - НЕОБХОДИМОЕ КОЛИЧЕСТВО НА-
БЛЮДЕНИЙ (ориентировочный расчет);
m1 = V * V * ( ( t ( N - 1 ) ) ^ 2 ) * ( ( 1 - 1 / s q r t ( 2 * N ) ) ^ 2 ) / 25 ;
m2=V*V*((t(N-1))^2)*((1+1/sqrt(2*N))^2)/25;
mm = ceil([m1;m2]); - НЕОБХОДИМОЕ КОЛИЧЕСТВО НАБЛЮДЕНИЙ (точ-
ный расчет);
[N;y;y1;y2;y3;y4;R;SS;S;V;A1;A2;SS1;SS2;m;m1;m2] - ПРИ НАЖАТИИ
КЛАВИШИ <Enter> НА ДИСПЛЕЕ ПОЯВИТСЯ СТОЛБЕЦ ВСЕХ ВЫЧИСЛЕННЫХ ВЕ-
ЛИЧИН.
```

Последующие разделы этой главы касаются проверки гипотез [16, с. 342–362; 30, с. 218–221; 31, с. 270–420; 32, с. 377–385; 33, с. 41–42; 34, с. 80–82].

Обозначим некоторые понятия [35, с. 235–236].

Статистической называют гипотезу о виде неизвестного распределения или о параметрах известных распределений.

Нулевой (основной) называют выдвинутую гипотезу H_0 .

Конкурирующей (альтернативной) называют гипотезу H_1 , которая противоречит нулевой.

В итоге проверки гипотезы могут быть допущены ошибки двух родов.

Ошибка первого рода состоит в том, что будет отвергнута правильная гипотеза. Вероятность ошибки первого рода называют уровнем значимости и обозначают через α .

Ошибка второго рода состоит в том, что будет принята неправильная гипотеза. Вероятность ошибки второго рода обозначают через β .

Статистическим критерием (или просто *критерием*) называют случайную величину K , которая служит для проверки гипотезы.

Наблюдаемым (эмпирическим) значением $K_{\text{набл}}$ называют то значение критерия, которое вычислено по выборкам.

Критической областью называют совокупность значений критерия, при которых нулевую гипотезу отвергают.

Областью принятия гипотезы (областью допустимых значений) называют совокупность значений критерия, при которых нулевую гипотезу принимают.

Основной принцип проверки статистических гипотез: если наблюдаемое значение критерия принадлежит критической области, то нулевую гипотезу отвергают; если наблюдаемое значение критерия принадлежит области принятия гипотезы, то гипотезу принимают.

Критическими точками (границами) $k_{\text{кр}}$ называют точки, отделяющие критическую область от области принятия гипотезы.

Правосторонней называют критическую область, определяемую неравенством $K > k_{\text{кр}}$, где $k_{\text{кр}}$ — положительное число.

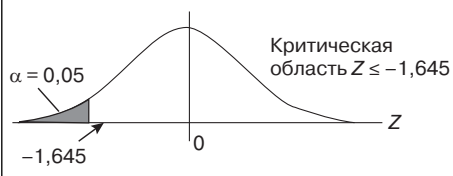
Левосторонней называют критическую область, определяемую неравенством $K < k_{\text{кр}}$, где $k_{\text{кр}}$ — отрицательное число.

Односторонней называют правостороннюю или левостороннюю критическую область.

Двусторонней называют критическую область, определяемую неравенствами $K < k_1$, $K < k_2$, где $k_2 < k_1$. В частности, если критические точки симметричны относительно нуля, то двусторонняя критическая область определяется (в предположении, что $k_{\text{кр}} < 0$) неравенствами: $K < -k_{\text{кр}}$, $K < k_{\text{кр}}$ или равносильным неравенством $|K| < -k_{\text{кр}}$.

Для отыскания критической области задаются уровнем значимости α и ищут критические точки.

Чтобы сделать обзор теории проверки гипотез, необходимо выделить ряд последовательных этапов, которые применимы к большинству типов гипотез и статистик для проверки гипотез [36, с. 28–31]. Для иллюстрации эти этапы будут прослежены на простом примере.

Этапы в задаче проверки гипотез	Примеры
1. Определить гипотезу и ее альтернативу	1. $H_0: \mu = 19,5$ МПа, $H_1: \mu < 19,5$ МПа
2. Установить уровень значимости (ошибку первого рода)	2. $\alpha = 0,05$
3. Выбрать статистику для проверки гипотезы H_0	3. Статистика \bar{y} или нормированное \bar{y} : $Z = (\bar{y} - \mu) / (\sigma / \sqrt{n})$. Пусть $\sigma = 2$ МПа
4. Определить выборочное распределение этой статистики, когда верна гипотеза H_0	4. Статистика \bar{y} имеет нормальное распределение (среднее μ , среднее квадратическое отклонение σ / \sqrt{n}). Или Z имеет распределение $N(0, 1)$
5. Установить критическую область для проверки гипотезы H_0 , при этом гипотеза H_0 будет отвергнута в $100-\alpha$ % выборок, когда она верна	5. 
6. Получить случайную выборку размера n , вычислить по ней статистику и решить, верна ли гипотеза H_0	6. Если $n = 25$ и $\bar{y} = 18,9$ МПа, $Z = (18,9 - 19,5) / (2 / 25^{0,5}) = -1,5$; поскольку $-1,5 > -1,645$, то гипотеза H_0 не отвергается

А теперь рассмотрим на числовых примерах процедуру проверки ряда статистических гипотез.

3.3. Исключение грубых промахов

Здесь предполагается проверка гипотезы об однородности (совместимости) результатов повторных измерений, т. е. гипотезы о том, что все измерения, входящие в данную совокупность, можно рассматривать как значения одной и той же случайной величины, подчиняющейся нормальному распределению.

Одним из важнейших условий правильного применения статистических оценок является отсутствие грубых ошибок при наблюдениях. Поэтому все грубые ошибки должны быть исключены из рассмотрения в самом начале обработки наблюдений. Для этого необходимо тщательно анализировать условия проведения испытаний. Например, если «лопатка» разорвалась в нерабочей зоне, полученный при этом результат следует отбросить, независимо от того, какое значение при этом получилось. К сожалению, не всегда решения даются так легко, зачастую требуют тщательного и глубокого анализа, который выходит за рамки нашего вопроса. В рассматриваемом случае сомнительный результат либо самый большой, либо самый маленький.

Рассматриваемую задачу можно сформулировать иначе. Необходимо проверить гипотезу об однородности (совместимости) результатов измерений, т. е. гипотезу о том, что все измерения, входящие в данную совокупность, можно рассматривать как значения одной и той же случайной величины, подчиняющейся нормальному распределению [4, с. 116–118; 10, с. 146–151; 11, с. 47–54; 37, с. 49–50; 38, с. 81–85].

При малом числе параллельных измерений проверка гипотезы может быть произведена по критерию Романовского [25, с. 32–33]. Результат $(m+1)$ -го внушающего сомнения опыта исключается, и по остальным m результатам вычисляют среднее значение и дисперсию. Сомнительный результат отбрасывается, если

$$|y_{m+1} - y_{cp}| \geq t' \times S_y. \quad (3.20)$$

Здесь y_{m+1} – сомнительный результат; y_{cp} – средневзвешенное значение изучаемой величины; t' – критерий Романовского; S_y – среднее квадратичное отклонение.

Значение критерия Романовского берется из таблиц при числе степеней свободы $v = m$ и уровне значимости (ошибке первого рода) $\alpha = 5\%$. Эти значения даны в таблице VI Приложения.

Если $(m+1)$ -ный результат не будет признан грубым промахом, его следует включить в расчет и пересчитать среднее и дисперсию. Таким образом следует проверить «выступающие» результаты сверху и снизу. Проверку на предмет наличия грубых промахов следует совмещать с вычислением необходимого количества параллельных наблюдений.

Использование второго способа предполагает вычисление среднего значения y_{cp} по всем m определениям какой-либо величины [39, с. 24]. Тогда, вычислив и среднее квадратическое отклонение S_y по всем m точкам, можно определить модифицированное *относительное отклонение* τ' для вызывающего сомнения значения отклика y_m , пользуясь следующим соотношением:

$$\tau' = |y_m - y_{cp}| / (S_y \times ((m-1)/m)^{1/2}). \quad (3.21)$$

Табличное значение τ' выбирается при числе степеней свободы $v = m - 2$. Если рассчитанное значение критерия τ' больше табличного τ'_T , сомнительный результат можно исключить. Табличные значения критерия τ' при уровне значимости $\alpha = 0,05$ представлены в таблице VII Приложения.

Если ни одно из отклонений не превосходит табличное τ' , то для выбранного уровня значимости можно принять гипотезу однородности. В противном случае, в силу свойств этого критерия не имеется достаточных оснований для исключения результатов.

В такой ситуации целесообразно применять $R_{\max(\min)}$ *распределение* [25, с. 56–57; 40, с. 37; 41, с. 49–50]:

$$R_{\max(\min)} = |y_{cp} - y_{\max(\min)}| / (S_y \times ((m-1)/m)^{1/2}). \quad (3.22)$$

Табличное значение R выбирается, как и в предыдущем случае, при числе степеней свободы $\nu = m - 2$ (таблица VIII Приложения). Условие исключения сомнительного значения имеет вид: $R_{\max(\min)} < R$.

При относительно небольшом числе параллельных наблюдений резко выделяющуюся точку можно оценить, располагая опытные данные в порядке убывания или возрастания так, чтобы подозрительный результат y_m оказался последним. Затем вычисляется критерий Q [16, с. 25; 24, с. 147–150; 26, с. 25]:

$$Q = |y_m - y_{m-1}| / |y_m - y_1|. \quad (3.23)$$

В этой формуле y_1 — первый член ряда, а y_{m-1} — предпоследний. Выражение в знаменателе — размах. Сомнительный результат исключается, если величина расчетного критерия Q больше величины табличного Q_T при числе степеней свободы $\nu = m$ (таблица IX Приложения).

В книге [24, с. 149] приводится номограмма, которая воспринимается сейчас как нечто архаичное (год написания 1966), но полезное для восприятия (рис. 3.1).

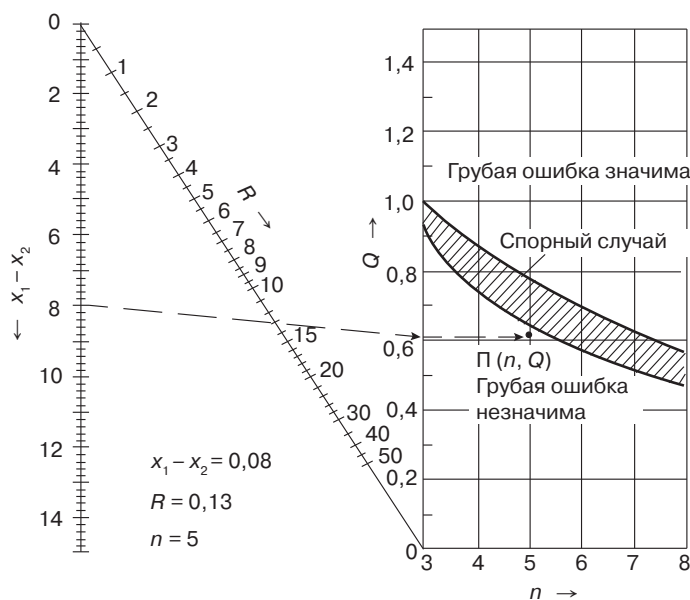


Рис. 3.1. Номограмма для выявления грубых промахов

Автором рассматриваются пять параллельных наблюдений при определении графита в сером чугуна: 2,99; 2,91; 2,90; 2,89 и 2,86. Сомнения вызывает первое значение.

$y_m - y_{m-1} = 2,99 - 2,91 = 0,08$. Размах $R = y_m - y_1 = 2,99 - 2,86 = 0,13$. Согласно (3.23): $Q = (2,99 - 2,91) / (2,99 - 2,86) = 0,62$.

Из табл. IX находят $Q(\alpha = 0,05, n = 5) = 0,642$. Так как $Q < Q(\alpha, n)$, можно считать, что подозрительное значение не оказывается грубой ошибкой.

Пример. Рассмотрим ряд чисел, представляющих собой повторные наблюдения при определении скорости звука y (м/с) в ненаполненных вулканизатах на основе НК: 1530; 1550; 1540; 1550; 1600; 1560; 1550; 1560; 1550; 1560. Среди этих десяти наблюдений сомнение вызывает результат 1600. Необходимо осуществить проверку однородности результатов параллельных опытов.

Проверка по критерию Романовского

Сомнительному результату присваивается индекс y_{m+1} , по остальным m данным вычисляются следующие характеристики.

Выборочное среднее значение

Теория (повторение состоит в близком родстве с учением).

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^m y_i / m = (y_1 + y_2 + \dots + y_i + \dots + y_m) / m.$$

Решение.

$$\bar{y} = (1530 + 1550 + \dots + 1560) / 9 = 13950 / 9 = 1550 \text{ м/с}.$$

Выборочная дисперсия и выборочное стандартное (среднеквадратичное) отклонение

Теория.

$$S_y^2 = \sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2 / (m-1) = ((y_1 - \bar{y})^2 + (y_2 - \bar{y})^2 + \dots + (y_m - \bar{y})^2) / (m-1).$$

$$S_y = \sqrt{S_y^2}.$$

Решение.

$$S_y^2 = ((1530 - 1550)^2 + (1550 - 1550)^2 + \dots + (1560 - 1550)^2) / (9-1) = 800 / 8 = 100.$$

$$S_y = 100^{1/2} = 10,0 \text{ м/с}.$$

Интерпретация.

Сомнительный результат может быть исключен, если $|y_{m+1} - \bar{y}| \geq t' \cdot S_y$, значение критерия Романовского t' берется из таблиц при числе степеней свободы $v = m$ и уровне значимости (ошибке первого рода) $\alpha = 5\%$.

$$v = 9, t'_{(9;0,05)} = 2,431, y_{m+1} - \bar{y} = 1600 - 1550 = 50 < t' \cdot S_y = 2,431 \times 10,0 = 24,31.$$

Таким образом, по критерию Романовского результат 1600 м/с с риском ошибиться, равным 5%, можно исключить.

Проверка по критерию Q

Данные располагают в порядке возрастания или убывания ($y_1, y_2, \dots, y_{m-1}, y_m$) так, чтобы сомнительный результат y_m оказался последним. После этого вычисляется критерий Q .

Теория.

$$\text{Подозрительный результат можно исключить, если } Q = |y_m - y_{m-1}| / |y_m - y_1| > Q.$$

Выражение в знаменателе — размах. $Q_{\text{кр}}$ выбирается при числе степеней свободы $v = m$.

Решение.

$$v = m = 10, Q_{(10;0,05)} = 0,412, |y_m - y_{m-1}| = |1600 - 1560| = 40, |y_m - y_1| = |1600 - 1530| = 70.$$

$Q = 40/70 = 0,57$. $0,57 < 0,412$. Неравенство $Q > Q_{кр}$ подтверждает вывод о возможности исключения величины 1600 м/с как ошибочной.

При вычислениях с использованием пакета *MATLAB* задача решается в следующей последовательности:

Первый способ

1. Формируем вектор-столбец результатов, для чего записываем в окне программы значения показателей в квадратных скобках через «;»:

« $y = [1530;1550;1540;1550;1600;1560;1550;1560;1550;1560];$

2. Определяем количество повторных наблюдений.

« $N = \max(\text{size}(y))$ $N = 10$

3. Производим ранжирование массива.

« $y = \text{sort}(y)$ $y = [1530;1540;1550;1550;1550;1550;1560;1560;1560;1600]$

4. Формирование массива без сомнительного результата.

« $Y = [y(1:N-1); y(n+1:N)]; Y = [1530;1540;1550;1550;1550;1550;1560;1560;1560]$

5. Вычисляем среднее арифметическое значение из массива Y .

« $Y1 = \text{mean}(Y)$ $Y1 = 1550$

6. Вычисляем среднее квадратическое отклонение.

« $S = \text{sqrt}(\text{var}(Y))$ $S = 10$

7. Вычисляем вспомогательную величину A .

« $t1(N-1) = 2,431; A = \text{abs}(y(n) - y1) - (t1(N-1)) * S;$ $A = 25,7000$

Вывод. Поскольку $A < 0$, сомнительный результат может быть исключен.

Второй способ

1. Формируем вектор-столбец результатов, для чего записываем в окне программы значения показателей в квадратных скобках через «;»:

« $y = [1530;1550;1540;1550;1560;1550;1600;1560;1550;1560];$

2. Определяем количество повторных наблюдений.

« $m = \max(\text{size}(y))$ $m = 10$

3. Вычисляем среднее арифметическое значение из массива y .

« $y1 = \text{mean}(y)$ $y1 = 1555$

4. Вычисляем среднее квадратическое отклонение.

« $S = \text{sqrt}(\text{var}(y))$ $S = 18,4089$

5. Вычисляем относительное отклонение.

« $t = (\text{abs}(y(7) - y1))/S/\text{sqrt}((m-1)/m)$ $t = 2,5767$

Вывод. Поскольку $t = 2,5767 > \tau'_T = 2,29$ ($v = m - 2 = 8$) сомнительный результат может быть исключен.

Третий способ

1. Формируем вектор-столбец результатов, для чего записываем в окне программы значения показателей в квадратных скобках через «;»:

« $y = [1530;1550;1540;1550;1560;1550;1600;1560;1550;1560];$

2. Производим ранжирование массива.

« $y = \text{sort}(y)$ $Y = [1530; 1540; 1550; 1550; 1550; 1560; 1560; 1560; 1600]$

3. Определяем количество повторных наблюдений.

« $m = \text{max}(\text{size}(y))$ $m = 10$

4. Вычисляем критерий Q .

« $Q = \text{abs}(y(m) - y(m-1)) / \text{abs}(y(m) - y(1))$ $Q = 0,5714$

Вывод. Поскольку рассчитанное значение критерия $Q = 0,5714$ больше табличного $Q_T = 0,412$ ($v = m = 10$) сомнительный результат может быть исключен.

Листинг программы для решения рассмотренных задач с помощью пакета *MATLAB*.

```
echo on
% ИСКЛЮЧЕНИЕ ГРУБЫХ ПРОМАХОВ
echo off
pause
y = input('ВВЕДИТЕ СТОЛБЕЦ ПОВТОРНЫХ НАБЛЮДЕНИЙ (в квадратных
скобках, через «;»');
N = max(size(y)); - КОЛИЧЕСТВО НАБЛЮДЕНИЙ;
y = sort(y); - РАНЖИРОВАНИЕ;
n = input('ВВЕДИТЕ (без скобок) НОМЕР(!) СОМНИТЕЛЬНОГО РЕЗУЛЬ-
ТАТА');
echo on
% ИСКЛЮЧЕНИЕ ПО КРИТЕРИЮ РОМАНОВСКОГО
echo off
Y = [y(1:n-1); y(n+1:N)]; - ФОРМИРОВАНИЕ СТОЛБЦА РЕЗУЛЬТАТОВ БЕЗ
СОМНИТЕЛЬНОГО;
y1 = mean(Y); - СРЕДНЕЕ АРИФМЕТИЧЕСКОЕ;
SS = ((Y-y1)'*(Y-y1))/(N-2); - ДИСПЕРСИЯ;
S = sqrt(SS); - СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ;
t1=[0;15.561;4.969;3.558;3.041;2.777;...] - КРИТЕРИЙ РОМАНОВСКО-
ГО (фрагмент таблицы);
A = abs(y(n)-y1)-(t1(N-1))*S; - МОДУЛЬ РАЗНОСТИ СОМНИТЕЛЬНОГО
ЗНАЧЕНИЯ И СРЕДНЕГО СРАВНИВАЕТСЯ С ПРОИЗВЕДЕНИЕМ КРИТЕРИЯ РОМА-
НОВСКОГО НА СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ;
if A>= 0
    ('СОМНИТЕЛЬНЫЙ РЕЗУЛЬТАТ ИСКЛЮЧАЕТСЯ')
else
    ('СОМНИТЕЛЬНЫЙ РЕЗУЛЬТАТ НЕ ИСКЛЮЧАЕТСЯ ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ;
pause
echo on
% ИСКЛЮЧЕНИЕ ПО Q-КРИТЕРИЮ
echo off
if y(n) = min(y)
```

```

Q = (abs(y(1)-y(2)))/(abs(y(1)-y(N)));
else if y(n) = max(y)
Q = (abs(y(N)-y(N-1)))/(abs(y(N)-y(1)));
end - ФОРМИРОВАНИЕ Q-КРИТЕРИЯ;
Qt=[0;0;0.941;0.765;...] - Q-КРИТЕРИЙ (фрагмент таблицы);
B = Q-Qt(N); - РАЗНИЦА РАССЧИТАННОГО И ТАБЛИЧНОГО ЗНАЧЕНИЙ;
if B < =0
( 'СОМНИТЕЛЬНЫЙ РЕЗУЛЬТАТ ИСКЛЮЧАЕТСЯ' )
else
( 'СОМНИТЕЛЬНЫЙ РЕЗУЛЬТАТ НЕ ИСКЛЮЧАЕТСЯ ' )
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ.

```

Аналогичным образом можно проверить и другие результаты, но, подчеркнем еще раз, такую процедуру надо сочетать с параллельным определением количества повторных наблюдений.

3.4. Проверка принадлежности выборки нормальному распределению

Нормальную кривую [1, с. 90–96] чаще всего характеризуют как «колоколообразную». Однако это название не помогает нам понять ее сущность.

Кривая нормального распределения вероятностей уклоняется во все возрастающих отношениях согласно следующему правилу: на любом расстоянии от средней относительное снижение в очень коротком отрезке кривой будет точно в n раз больше, чем в подобном же отрезке на $1/n$ расстоянии от средней. Если один из отрезков вдвое дальше от средней, чем другой, то и относительное снижение будет вдвое больше; если в три раза дальше, то это снижение втрое больше, и так далее.

Это утверждение может удивить, потому что те длинные ветви кривой нормального распределения, которые протягиваются в бесконечность, кажутся такими обманчиво плоскими. Но и здесь, в действительности, относительное различие ординат у ветвей для каждой данной разности показателей становится все большим по мере удаления от середины распределения.

Для того чтобы выразить эту форму в виде математической функции, мы должны сначала выбрать подходящую единицу измерения расстояний от средней. Для этой цели мы выберем как стандарт такую единицу, которая вполне естественно обуславливается характером формы кривой. Расстояние от средней до той точки на каждой стороне, где кривая достигает своего наиболее крутого склона, называется *стандартным (или средним квадратическим) отклонением*.

Повторные наблюдения какого-либо показателя представляют собой независимые случайные величины. Если эти величины являются нормально распределенными, то это существенно «поднимает авторитет» метода наименьших квадратов, широко используемого при обработке экспериментальных данных. Если гипотеза

нормальности не проходит, то целый ряд статистических процедур просто *не могут быть осуществлены*.

Для проверки гипотезы нормальности используется целый ряд процедур [7, с. 50–54; 10, с. 158–162; 12, с. 185–193; 24, с. 150–153; 25, с. 67–71; 35, с. 274–293; 42, с. 115–116; 43, с. 66–82; 44, с. 191–198; 45, с. 71–76; 46, с. 199–203].

Поскольку технолог, работающий с резиной, как правило, имеет дело с малыми выборками, приведем методы проверки гипотезы нормальности, соответствующие этому условию [16, с. 20–21; 39, с. 28–32; 47, с. 299; 48, с. 337–338].

Первый способ состоит в вычислении среднего абсолютного отклонения H , вычисляемого как:

$$H = \Sigma |y_i - y_{\text{cp}}| / m, \quad (3.24)$$

где y_{cp} — среднее арифметическое из m повторных наблюдений.

Для выборки, имеющей приближенно нормальное распределение, должно быть справедливо выражение:

$$|H/S - 0,7979| < 0,4/m^{0,5}, \quad (3.25)$$

где S — среднее квадратическое отклонение.

Второй способ основан на вычислении отношения размаха $R = y_{\text{max}} - y_{\text{min}}$ к среднему квадратическому отклонению S . Если R/S меньше нижней границы или больше верхней критической границы, которые приведены в таблице X Приложения, то нормального распределения нет. Критические границы даны для уровня значимости 10% (вероятность 90%).

Третий способ основан на вычислении коэффициента b_m , определяемого следующим соотношением:

$$b_m = a_m(y_m - y_1) + a_{m-1}(y_{m-1} - y_2) + \dots + a_{m-k+1}(y_{m-k+1} - y_k), \quad (3.26)$$

где $a_m, a_{m-1}, \dots, a_{m-k+1}$ — коэффициенты, приводимые в таблице XI Приложения; $k = m/2$, если m — четное число, $k = (m - 1)/2$, если m нечетное.

Далее вычисляется критерий W_m :

$$W_m = b_m^2 / SS_E. \quad (3.27)$$

Здесь $SS_E = \Sigma (y_i - y_{\text{cp}})^2 = (y_1 - y_{\text{cp}})^2 + (y_2 - y_{\text{cp}})^2 + \dots + (y_m - y_{\text{cp}})^2$ — сумма квадратов отклонений экспериментальных значений от среднего арифметического.

Полученное W_m сравнивается с $W_{\text{кр}}$ критическим, равным 0,930 (при $m \leq 10$), 0,950 (при $m \leq 20$) и 0,964 (при $m \leq 30$). Если полученное значение W_m меньше критического, нельзя принять, что выборка взята из нормального распределения.

Принятие гипотезы о принадлежности выборки нормальному распределению является, как уже упоминалось, необходимым условием ряда статистических расчетов.

Пример. Рассмотрим уже бывший в употреблении ряд наблюдений при определении скорости звука y (м/с) за вычетом грубого промаха: 1530; 1550; 1540; 1550; 1560; 1550; 1560; 1550; 1560.

Опытные данные располагаются в порядке возрастания.

Первый способ

Теория.

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^m y_i / m = (y_1 + y_2 + \dots + y_i + \dots + y_m) / m;$$

$$H = \sum |y_i - \bar{y}| / m;$$

$$S^2 = \sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2 / (m-1) = ((y_1 - \bar{y})^2 + (y_2 - \bar{y})^2 + \dots + (y_m - \bar{y})^2) / (m-1);$$

$$S = \sqrt{S^2}; |H/S - 0,7979| < 0,4/m^{0,5}.$$

Решение.

$$y = [1530; 1540; 1550; \dots 1560];$$

$$\bar{y} = (1530 + 1540 + \dots + 1560) / 9 = 13950 / 9 = 1550 \text{ м/с};$$

$$H = (|1530 - 1550| + |1540 - 1550| + \dots + |1560 - 1550|) / 9 = 60 / 9 = 6,6667;$$

$$S^2 = ((1530 - 1550)^2 + (1540 - 1550)^2 + \dots + (1560 - 1550)^2) / (9 - 1) = 100; S = 10 \text{ м/с};$$

$$|H/S - 0,7979| = |6,6667 / 10 - 0,7979| = 0,1312; 0,4/m^{0,5} = 0,4/9^{0,5} = 0,1333.$$

Интерпретация.

Поскольку $|H/S - 0,7979| = 0,1312 < 0,4/m^{0,5} = 0,1333$, гипотеза нормальности принимается.

Второй способ

Теория.

$$R = y_{\max} - y_{\min};$$

$$S^2 = \sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2 / (m-1) = ((y_1 - \bar{y})^2 + (y_2 - \bar{y})^2 + \dots + (y_m - \bar{y})^2) / (m-1);$$

$$S = \sqrt{S^2}; R/S \in [a; b].$$

Решение.

$$y = [1530; 1540; 1550; \dots 1560]; m = 9;$$

$$R = 1560 - 1530 = 30 \text{ м/с};$$

$$\bar{y} = (1530 + 1540 + \dots + 1560) / 9 = 13950 / 9 = 1550 \text{ м/с};$$

$$S^2 = ((1530 - 1550)^2 + (1540 - 1550)^2 + \dots + (1560 - 1550)^2) / (9 - 1) = 100; S = 10 \text{ м/с};$$

$$R/S = 30 / 10 = 3; a = 2,68; b = 3,449.$$

Интерпретация.

Поскольку $a = 2,68 < R/S = 3 < b = 3,449$, гипотеза нормальности принимается.

Третий способ

Теория.

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^m y_i / m = (y_1 + y_2 + \dots + y_i + \dots + y_m) / m.$$

$$SS_E = \sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2 = ((y_1 - \bar{y})^2 + (y_2 - \bar{y})^2 + \dots + (y_m - \bar{y})^2).$$

$$b_m = a_m(y_m - y_1) + a_{m-1}(y_{m-1} - y_2) + a_{m-k+1}(y_{m-k+1} - y_k) = \sum_{i=1}^k a_{m-i+1}(y_{m-i+1} - y_i).$$

$k = m/2$, если m – четное число, $k = (m-1)/2$, если m нечетное; a_{m-i+1} берутся из таблицы.

$$W_m = b_m^2 / SS_E.$$

Решение.

$$y = [1530; 1540; 1550; \dots; 1560];$$

$$\bar{y} = (1530 + 1540 + \dots + 1560) / 9 = 13950 / 9 = 1550 \text{ м/с};$$

$$SS_E = ((1530 - 1550)^2 + (1540 - 1550)^2 + \dots + (1560 - 1550)^2) = 800;$$

Так как $m = 9$ – нечетное число, $k = 8/2 = 4$. $a_9 = 0,5888$; $a_8 = 0,3244$; $a_7 = 0,1976$; $a_6 = 0,0947$;

$$b_m = 0,5888(1560 - 1530) + 0,3244(1560 - 1540) + 0,1976(1560 - 1550) + 0,0947(1550 - 1550) = 26,128.$$

$$W_m = (26,128)^2 / 800 = 0,8533.$$

Интерпретация.

Полученное W_m сравнивается с $W_{кр}$ критическим, равным 0,930 (при $m \leq 10$), 0,950 (при $m \leq 20$) и 0,964 (при $m \leq 30$).

Полученное значение W_m меньше критического 0,930, поэтому гипотеза нормальности не проходит.

При вычислениях с использованием пакета *MATLAB* задача решается в следующей последовательности.

Первый способ

1. Формируем вектор-столбец результатов, для чего записываем в окне программы значения показателей в квадратных скобках через «;»:

$$\ll Y = [1530; 1550; 1540; 1550; 1560; 1550; 1560; 1550; 1560];$$

2. Определяем количество повторных наблюдений.

$$\ll m = \max(\text{size}(Y)) \quad m = 9$$

3. Вычисляем среднее арифметическое значение.

$$\ll Y1 = \text{mean}(Y) \quad Y1 = 1550,0000$$

4. Вычисляем среднее квадратическое отклонение.

$$\ll S = \text{sqrt}(\text{var}(Y)) \quad S = 10$$

5. Вычисляем среднее абсолютное отклонение.

$$\ll H = \text{sum}(\text{abs}(Y - Y1)) / m \quad H = 6,6667$$

6. Находим экспериментальное значение критерия.

$$\ll K = \text{abs}(H / S - 0,7979) \quad K = 0,1312$$

7. Вычисляем критическое значение критерия.

$$\ll K1 = 0,4 / \text{sqrt}(m) \quad K1 = 0,1333$$

Вывод. Поскольку $K = H / S - 0,7979 = 0,1312 < 0,4 / m^{0,5} = 0,1333$, выборка взята из нормального распределения.

Второй способ

1. Формируем вектор-столбец результатов, для чего записываем в окне программы значения показателей в квадратных скобках через «;»:

« $Y = [1530;1550;1540;1550;1560;1550;1560;1550;1560];$

2. Определяем количество повторных наблюдений.

« $m = \max(\text{size}(Y))$ $m = 9$

3. Располагаем результаты в порядке возрастания.

« $YY = (\text{sort}(Y))'$ $YY = 1530 \ 1540 \ 1550 \ 1550 \ 1550 \ 1550 \ 1560 \ 1560 \ 1560$

4. Вычисляем размах.

« $R = YY(m) - YY(1)$ $R = 30$

Или без предварительного ранжирования

« $R = \max(Y) - \min(Y)$ $R = 30$

5. Вычисляем среднее квадратическое отклонение.

« $S = \sqrt{\text{var}(Y)}$ $S = 10$

6. Находим экспериментальное значение критерия.

« $K1 = R/S$ $K1 = 3$

Вывод. Поскольку $K1 = R/S = 3$ входит в интервал критических значений $[2,68; 3,45]$, выборка взята из нормального распределения.

Третий способ

1. Формируем вектор-столбец результатов, для чего записываем в окне программы значения показателей в квадратных скобках через «;»:

« $Y = [1530;1550;1540;1550;1560;1550;1560;1550;1560];$

2. Определяем количество повторных наблюдений.

« $m = \max(\text{size}(Y))$ $m = 9$

3. Располагаем результаты в порядке возрастания.

« $YY = (\text{sort}(Y))'$ $YY = 1530 \ 1540 \ 1550 \ 1550 \ 1550 \ 1550 \ 1560 \ 1560 \ 1560$

4. Вводим матрицу коэффициентов a .

« $a1 = [0,7071 \ 0,6872 \ 0,6646 \ 0,6431 \ 0,6233 \ 0,6052 \ 0,5888];$

« $a2 = [0 \ 0,1677 \ 0,2413 \ 0,2806 \ 0,3031 \ 0,3164 \ 0,3244];$

« $a3 = [0 \ 0 \ 0 \ 0,0875 \ 0,1401 \ 0,1743 \ 0,1976];$

« $a4 = [0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0,0561 \ 0,0947];$

« $a = [a1; a2; a3; a4]$

$a =$

0,7071 0,6872 0,6646 0,6431 0,6233 0,6052 0,5888

0 0,1677 0,2413 0,2806 0,3031 0,3164 0,3244

0 0 0 0,0875 0,1401 0,1743 0,1976

0 0 0 0 0 0,0561 0,0947

5. Вычисляем коэффициент b .

« $b = a(1,m-2) * (YY(m) - YY(1)) + a(2,m-2) * (YY(m-1) - YY(2)) +$
 $+ a(3,m-2) * (YY(m-2) - YY(3)) + a(4,m-2) * (YY(m-3) - YY(4));$

6. Вычисляем сумму квадратов отклонений экспериментальных значений от среднего арифметического.

« $SS = \text{sum}((Y - \text{mean}(Y)).^2)$ $SS = 800$

7. Находим экспериментальное значение критерия.

« $W = b \cdot b / SS$ $W = 0,8533$

Вывод. Поскольку $W_m = 0,8533 < 0,930$, гипотеза нормальности не подтверждается.

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```
echo on
% ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ НОРМАЛЬНОСТИ, N = 6
echo off
y = input('ВВЕДИТЕ СТОЛБЕЦ ПОВТОРНЫХ НАБЛЮДЕНИЙ (в квадратных скобках, через «;»)\n');
N = max(size(y)); - КОЛИЧЕСТВО НАБЛЮДЕНИЙ;
y = sort(y); - РАНЖИРОВАНИЕ;
y1=mean(y);SS=var(y); - СРЕДНЕЕ И ДИСПЕРСИЯ;
a6 = 0,6431;a5 = 0,2806;a4 = 0,0875;
b = a6*(y(6)-y(1))+a5*(y(5)-y(2))+a4*(y(4)-y(3));
W = b*b/SS; - ВЫЧИСЛЕНИЕ КРИТЕРИЯ;
A = W-0,93;
if A <= 0
    ('ВЫБОРКА ВЗЯТА ИЗ НОРМАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ')
else
    ('ГИПОТЕЗА НОРМАЛЬНОСТИ НЕ ПРОХОДИТ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ.
```

Нормальное распределение было впервые получено де Муавром в качестве ограничивающей формы биномиального распределения и было впоследствии повторно открыто Лапласом и Гауссом и стало известно как Гауссов, или нормальный, закон ошибок в связи с распределением случайных ошибок в астрономических и других научных измерениях.

3.5. Проверка однородности дисперсий

Однородность дисперсий (их приблизительное, с учетом погрешности, равенство) является необходимой предпосылкой большого количества статистических расчетов.

Для сравнения двух выборочных дисперсий используют F-критерий. При этом сначала вычисляют дисперсионное отношение

$$F = S_1^2 / S_2^2 \quad (3.28)$$

при условии, что $S_1^2 > S_2^2$.

Из двух дисперсий одна всегда больше другой (если они одинаковые, то и проверять нечего). Берут большую из них и делят на меньшую [7, с. 47–48; 10, с. 131–135;

15, с. 263–266; 17, с. 87–89; 25, с. 46–49; 26, с. 21; 34, с. 94–95; 35, с. 236–240; 37, с. 45–47; 38, с. 73–76; 43, с. 44–50; 49, с. 356–359; 50, с. 30–32]. И это отношение имеет F -распределение Фишера. Хотелось бы подчеркнуть: нельзя говорить, что S_1^2/S_2^2 равно F , именно, *распределено* по F .

Затем по табл. XII Приложения 1 выбирают критическое значение $F_\alpha(v_1, v_2)$, где α — уровень значимости; v_1 и v_2 — числа степеней свободы для числителя и знаменателя, соответственно. Если $F < F_{кр}$, то принимают гипотезу о том, что S_1^2 и S_2^2 есть оценки одной и той же генеральной дисперсии; в противоположном случае нуль-гипотезу отбрасывают.

Проверку однородности нескольких дисперсий осуществляют либо по критерию Кохрена, либо по критерию Бартлетта [7, с. 48–50; 10, с. 135–138; 15, с. 266–267; 17, с. 89–92; 24, с. 138–140; 25, с. 49–51; 26, с. 21–23; 34, с. 95–97; 35, с. 261–268; 37, с. 48; 43, с. 50–52; 51, с. 6–8].

Первый из них используют при равном числе степеней свободы для всех дисперсий (т. е. когда для определения каждой дисперсии было взято одинаковое количество параллельных наблюдений). В этом случае вычисляют отношение максимальной дисперсии к сумме всех дисперсий и сравнивают его с критическим значением (таблица XIII Приложения):

$$G = S_{\max}^2 / \sum_{j=1}^n S_j^2 > G_{\alpha(v, n)}, \quad (3.29)$$

где n — число сравниваемых дисперсий.

Если имеет место неравенство (3.27), то нуль-гипотезу отбрасывают с вероятностью α совершить ошибку первого рода. В этом случае обычно принимают конкурирующую гипотезу, т. е. отсутствие однородности дисперсий.

При неравном числе степеней свободы применяют критерий Бартлетта. Методу проверки гипотезы с использованием этого критерия можно найти еще и в работе В. В. Налимова [52, с. 164–168].

Однородность выборочных дисперсий дает возможность вычислить среднюю взвешенную дисперсию с суммарным числом степеней свободы. Такая дисперсия оказывается более надежной оценкой генеральной дисперсии, чем отдельные выборочные дисперсии.

Вычисление средней взвешенной дисперсии осуществляют по следующей формуле:

$$S_e^2 = \sum_{j=1}^n v_j S_j^2 / \sum_{j=1}^n v_j \quad v_e = \sum_{j=1}^n v_j = \sum_{j=1}^n (m_j - 1), \quad (3.30)$$

где m_j — число параллельных опытов в j -й выборке; n — число выборок.

При равном числе степеней свободы для всех выборочных дисперсий, например, после проверки однородности по критерию Кохрена, можно воспользоваться более простыми формулами.

При решении задачи с использованием критерия Бартлетта находят среднюю взвешенную дисперсию для ряда дисперсий $S_1^2, S_2^2, \dots, S_n^2$ при числе степеней свободы $v_1 = m_1 - 1, v_2 = m_2 - 1, \dots, v_n = m_n - 1$. Затем рассчитывают величины B и C :

$$B = \sum_{j=1}^n v_j \cdot \ln \left(\frac{\sum_{j=1}^n v_j S_j^2}{\sum_{j=1}^n v_j} \right) - \sum_{j=1}^n v_j \cdot \ln S_j^2; \quad (3.31)$$

$$C = 1 + \frac{1}{3(n-1)} \cdot \left(\sum_{j=1}^n \frac{1}{v_j} - \left(\sum_{j=1}^n v_j \right)^{-1} \right). \quad (3.32)$$

Бартлетт показал, что отношение B/C распределено приближенно как χ^2 с $n - 1$ степенями свободы, если все $v_j < 2$. Когда найденная величина B/C превосходит χ^2 при выбранном уровне значимости, мы отбрасываем гипотезу об однородности дисперсий.

Пример. Рассмотрим результаты исследования плотности четырех ($n = 4$) резин. Результаты эксперимента представлены ниже (табл. 3.2).

Количество параллельных наблюдений в каждой точке составляет $m = 5$.

Таблица 3.2. Результаты определения плотности (кг/м³)

Номер повторного наблюдения		Номер смеси $j \rightarrow$			
		1	2	3	4
i ↓	1	960	1060	1024	1105
	2	956	1055	1030	1100
	3	964	1066	1036	1093
	4	955	1057	1027	1097
	5	965	1063	1032	1103

Вычисление средних значений, кг/м³

Теория.

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^m y_i / m = (y_1 + y_2 + \dots + y_i + \dots + y_m) / m.$$

Решение.

$$\bar{y}_1 = (960 + 956 + 964 + 955 + 965) / 5 = 960,0; \quad \bar{y}_2 = 1060,2; \quad \bar{y}_3 = 1029,8; \quad \bar{y}_4 = 1099,6.$$

Вычисление дисперсий

Теория.

$$S_j^2 = \left(\sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2 \right) / (m - 1)$$

Решение.

$$S_1^2 = ((960 - 960)^2 + (956 - 960)^2 + \dots + (965 - 960)^2) / (5 - 1) = 20,5; \quad S_2^2 = 19,7; \quad S_3^2 = 21,2; \quad S_4^2 = 22,8.$$

Сравнение дисперсий по критерию Фишера

Теория.

$F = S_{\max}^2 / S_{\min}^2$. При одинаковом числе степеней свободы для каждой из n дисперсий находят отношение максимальной дисперсии к минимальной. Если эти дисперсии однородны, то будут однородны и все остальные.

Решение.

$$S_1^2/S_2^2 = 20,5/19,7 = 1,04; S_3^2/S_1^2 = 21,2/20,5 = 1,03; S_4^2/S_1^2 = 22,8/20,5 = 1,11;$$

$$S_3^2/S_2^2 = 21,2/19,7 = 1,08; S_4^2/S_2^2 = 22,8/19,7 = 1,16; S_4^2/S_3^2 = 22,8/21,2 = 1,08.$$

Интерпретация.

Полученное значение F-критерия сравнивается с критическим при числе степеней свободы для числителя $m_{\max} - 1$ и для знаменателя $m_{\min} - 1$ при уровне значимости 5% (таблица XII Приложения). Если $F < F_{\text{кр}}$, гипотеза однородности дисперсии может быть принята.

$v_1 = 5 - 1 = 4$; $v_2 = 5 - 1 = 4$; $F_{(4;4;0,05)} = 6,39$. Поскольку рассчитанные значения критерия Фишера во всех случаях меньше табличного, можно сделать вывод об однородности дисперсий.

Напоследок приведем номограмму все из той же книги (24, с. 136). Имеется два набора параллельных наблюдений. Объем выборки в каждом случае составляет 12 значений. Число степеней свободы, стало быть, для каждой выборки составляет 11, что и отражено на рис. 3.2.

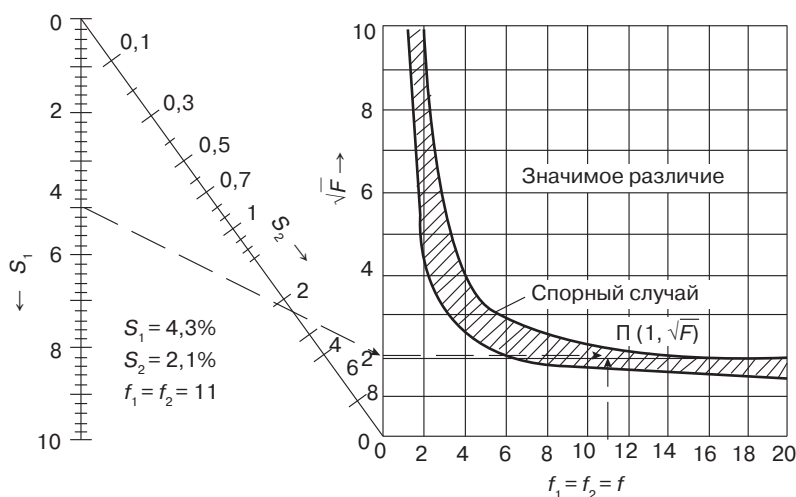


Рис. 3.2. Номограмма для проверки гипотезы

По этим выборкам рассчитаны дисперсии и среднеквадратичные отклонения ($S_1 = 4,3$ и $S_2 = 2,1$, соответственно). Тогда $F = S_1^2/S_2^2$ и, следовательно, $\sqrt{F} = S_1/S_2$.

Соединяем эти две точки (4,3 и 2,1), продолжаем линию до пересечения с осью \sqrt{F} и проводим линию, параллельную оси абсцисс, до точки, соответствующей числу степеней свободы (11). Из рис. 3.2 видно, что мы попали в область сомнений.

Сравнение нескольких дисперсий по критерию χ^2 .

Теория.

Если сравнивается несколько дисперсий для выборок разного объема, то гипотеза равенства дисперсий может осуществляться по критерию Бартлетта. Этот критерий

основан на сравнении средней арифметической и средней геометрической дисперсий. При равенстве дисперсий эти средние были бы равны.

Средняя арифметическая: $S_a^2 = \sum_{j=1}^n v_j S_j^2 / v$; $v = \sum_{j=1}^n v_j$;

Средняя геометрическая: $S_g^2 = (\prod_{j=1}^n S_j^{2v_j})^{1/v}$;

n — количество дисперсий.

Критерий Бартлетта: $B = v \ln(S_a^2 / S_g^2) = v \ln S_a^2 - \sum_{j=1}^n v_j \times \ln S_j^2$.

Отношение B к C имеет распределением χ^2 , где $C = 1 + (\sum_{j=1}^n (1/v_j) - 1/v) / (3(n-1))$.

В частном случае при $v_1 = v_2 = \dots = v_n = v_0$ формулы упрощаются:

$S_a^2 = \sum_{j=1}^n S_j^2 / n$; $B = n v_0 \ln S_a^2 - v_0 \sum_{j=1}^n \ln S_j^2$; $C = 1 + (n+1) / (3n v_0)$

Решение.

Сравниваемые дисперсии: $S_1^2 = 20,5$; $S_2^2 = 19,7$; $S_3^2 = 21,2$; $S_4^2 = 22,8$; $n = 4$;

$m_1 = m_2 = m_3 = m_4 = 5$; $v_1 = v_2 = v_3 = v_4 = 5 - 1 = 4$; $v = 4 + 4 + 4 + 4 = 16$.

Средняя арифметическая: $S_a^2 = (4 \times 20,5 + 4 \times 19,7 + 4 \times 21,2 + 4 \times 22,8) / 16 = (20,5 + 19,7 + 21,2 + 22,8) / 4 = 21,05$;

Средняя геометрическая: $S_g^2 = (20,5^4 \times 19,7^4 \times 21,2^4 \times 22,8^4)^{1/16} = (20,5 \times 19,7 \times 21,2 \times 22,8)^{1/4} = 21,02$;

Критерий Бартлетта: $B = 4 \times (5 - 1) \times (\ln 21,05 - \ln 21,02) = 0,0228$; $C = 1 + (4 + 1) / (3 \times 4 \times 4) = 1,10$;

Отношение B/C : $B/C = 0,0228 / 1,10 = 0,0207$.

Рассматриваемый здесь пример представляет собой частный случай.

Интерпретация.

Полученное значение B/C сравнивается с критическим χ^2 при числе степеней свободы $v = n - 1$ и уровне значимости 95% (табл. V Приложения). Если $B/C < \chi^2_{кр}$, гипотеза однородности принимается.

$v = 4 - 1 = 3$; $\chi^2_{(3; 0,95)} = 7,815$. Поскольку рассчитанные значения $B/C = 0,0207$ меньше табличного значения χ^2 , можно сделать вывод об однородности дисперсий.

Сравнение нескольких дисперсий по критерию Кохрена

Теория.

При $v_1 = v_2 = \dots = v_n = v_0$ можно использовать более точный критерий G : отношение максимальной дисперсии к сумме всех дисперсий $G = S_{\max}^2 / \sum_{j=1}^n S_j^2$ (критерий Кохрена).

Решение.

Ранжирование дисперсий: 19,7; 20,5; 21,2; 22,8.

Отношение максимальной из этих дисперсий к сумме всех дисперсий (рассчитанный критерий Кохрена): $G_p = 22,8 / (19,7 + 20,5 + 21,2 + 22,8) = 0,271$.

Интерпретация.

Если рассчитанное значение G окажется меньше табличного $G < G_{\text{табл}}$ при числе степеней свободы $m - 1$ для числителя и n — для знаменателя (таблица XIII

Приложения), дисперсии считаются однородными. Если дисперсия однородна, вычисляют среднюю, называемую дисперсией воспроизводимости $S^2_{\text{воспр}}$.

$m - 1 = 5 - 1 = 4$; $n = 4$; $G_{(4;4;0.05)} = 0,6287$. Поскольку $G_p < G_r$, может быть принята гипотеза об однородности дисперсий.

В рассматриваемом примере дисперсия воспроизводимости $S^2_{\text{воспр}} = 21,05$.

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```
echo on
% ПРОВЕРКА ОДНОРОДНОСТИ ДИСПЕРСИЙ
echo off
pause
echo on
% Дисперсии и средние значения предварительно рассчитываются
echo off
pause
SS = input('ВВЕДИТЕ СТОЛБЕЦ ДИСПЕРСИЙ (в [], через «;»');
m = input('ВВЕДИТЕ КОЛИЧЕСТВА НАБЛЮДЕНИЙ ДЛЯ КАЖДОЙ ДИСПЕРСИИ
(в [], через «;»');
SS=sort(SS); - РАНЖИРОВАНИЕ ДИСПЕРСИЙ;
n = max(size(SS)); - КОЛИЧЕСТВО ДИСПЕРСИЙ;
m1 = round(mean(m)); - ОКРУГЛЕНИЕ СРЕДНЕГО ДО ЦЕЛОГО;
echo on
% ПРОВЕРКА ОДНОРОДНОСТИ ДИСПЕРСИЙ ПО КРИТЕРИЮ ФИШЕРА
echo off
for I = 1:n,
    for j = 1:n,
        F(I,j)=SS(j)/SS(i);
    end
end - СОСТАВЛЕНИЕ ОТНОШЕНИЙ ДИСПЕРСИЙ В ЦИКЛЕ;
Ft=[ 161    200    216    225    ...    19.44];
Ft=[Ft;10.13 9.55 9.28 9.12 9.01 ... 5.8...];- КРИТЕРИЙ ФИШЕРА (фраг-
мент таблицы);
Ft1=Ft(m1-1,m1-1); - ВЫБОР КРИТЕРИЯ ИЗ ТАБЛИЦЫ;
I=find(F>Ft1); - ПОИСК КРИТЕРИЕВ, ПРЕВЫШАЮЩИХ ТАБЛИЧНЫЙ;
g=I/n;p=ceil(g);q=I-(p-1)*n;r=[p q];e=sum(I);
SSs =(sum(SS.*(m-1)))./sum(m-1); - ДИСПЕРСИЯ ВОСПРОИЗВОДИМОСТИ;
if e==0,
    ('ДИСПЕРСИИ ОДНОРОДНЫ, ВЫЧИСЛЯЕТСЯ ДИСПЕРСИЯ ВОСПРОИЗВОДИМОСТИ')
disp(SSs) - ВЫВОД ЕЕ НА ДИСПЛЕЙ;
else
    ('НЕ ОДНОРОДНЫ ТЕ ПАРЫ ДИСПЕРСИЙ, КОТОРЫЕ СЕЙЧАС ПОЯВЯТСЯ НА
ЭКРАНЕ ')
end
```

```

disp(r) - ВЫВОД НА ДИСПЛЕЙ ПАР НЕОДНОРОДНЫХ ДИСПЕРСИЙ;
echo on
% ПРОВЕРКА ОДНОРОДНОСТИ ДИСПЕРСИЙ ПО КРИТЕРИЮ БАРТЛЕТТА
echo off
pause
B=(sum((m-1)).*(log(SSs))-sum((m-1).*(log(SS))))); - ВЫЧИСЛЕНИЕ
КОЭФФИЦИЕНТА B;
E = m.^0; - ЕДИНИЧНЫЙ СТОЛБЕЦ;
C = 1+((sum(E./(m-1)))-1/(sum(m-1)))/3/(n-1); - РАСЧЕТ КОЭФФИ-
ЦИЕНТА C;
X2=B/C; - ВЫЧИСЛЕНИЕ КРИТЕРИЯ ХИ-КВАДРАТ;
X2t=[3.841;5.991;7.815;9.488;11.070;...]; - КРИТЕРИЙ ХИ-КВАДРАТ
(фрагмент таблицы);
w = X2t(n-1)-X2; - РАЗНИЦА КРИТЕРИЕВ;
if w>=0
    ('ДИСПЕРСИИ ОДНОРОДНЫ')
else
    ('ГИПОТЕЗА ОДНОРОДНОСТИ ДИСПЕРСИЙ ОТВЕРГАЕТСЯ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ;
pause
k = sum(abs(m-mean(m)));
if k==0
    ('ПРОВЕРКА ПО КРИТЕРИЮ КОХРЕНА ВОЗМОЖНА')
else
    ('ПРОВЕРКА ПО КРИТЕРИЮ КОХРЕНА НЕВОЗМОЖНА')
end - ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ КРИТЕРИЯ;
pause
G=(max(SS))/(sum(SS)); - РАСЧЕТ КРИТЕРИЯ КОХРЕНА;
Gt=[0 0...;9985 9750...];
Gt=[Gt;9669 8709 7977...]; - КРИТЕРИЙ КОХРЕНА (фрагмент таблицы);
Gt1=Gt(n,m1-1); Gt1=Gt1/10000; - ВЫБОР КРИТЕРИЯ ИЗ ТАБЛИЦЫ;
if G<=Gt1
    ('ДИСПЕРСИИ ОДНОРОДНЫ ПО КРИТЕРИЮ КОХРЕНА')
else
    ('ГИПОТЕЗА ОДНОРОДНОСТИ ПО КРИТЕРИЮ КОХРЕНА ОТВЕРГАЕТСЯ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ.

```

3.6. Проверка различия средних значений

В случае однородности дисперсий приступают к проверке гипотезы о том, являются ли средние значения оценками одного и того же математического ожидания.

Можно ли утверждать, что 28 больше 25? Да, если это просто числа и ничего более, но если это результаты определения какого-то показателя, то они получены с какой-то

ошибкой. Если эта ошибка столь велика, что «перекрывает» различие между двумя указанными значениями, то окажется, что 28 и 25 не отличаются друг от друга.

Итак, имеется два или несколько средних значений, которые нужно сравнить между собой. Существуют различные подходы, позволяющие решить эту задачу [5, с. 57–69; 7, с. 35–41; 10, с. 138–146; 17, с. 78–85; 18, с. 109–115; 34, с. 88–93; 35, с. 244–250, 255–258; 37, с. 47–48; 38, с. 76–81; 41, с. 194–199; 43, с. 52–63; 50, с. 26–30; 52, с. 159–164; 53, с. 141–147].

Рассмотрим процедуру *сравнения средних двух больших выборок* y_1 и y_2 [19, с. 42–43, 25, с. 51]. Выдвигается гипотеза: $H_0: \mu_1 = \mu_2$, т. е. предполагается, что генеральные средние не отличаются. Для проверки гипотезы необходимо определить: средние значения \bar{y}_1 и \bar{y}_2 ; среднеквадратичные отклонения S_1 и S_2 ; объемы выборок m_1 и m_2 .

Далее вычисляется статистика:

$$z = (\bar{y}_1 - \bar{y}_2) / \sqrt{\frac{S_1^2}{m_1} + \frac{S_2^2}{m_2}}. \quad (3.33)$$

Эта статистика является приблизительно нормально распределенной со средней, равной нулю, и при стандартном отклонении 1 при нулевой гипотезе. Если $|z| < z_{\alpha=0,05}$, принимается гипотеза H_0 . Если $|z| \geq z_{\alpha=0,05}$, то гипотеза H_0 отвергается. Табличные значения статистики z приведены в табл. 3.1.

А теперь о *сравнении средних двух малых выборок* (случай равных дисперсий) [19, с. 43–45; 24, с. 141–146; 25, с. 51–52; 26, с. 23].

Выдвигается та же самая гипотеза $H_0: \mu_1 = \mu_2$, т. е. между двумя средними нет различий. Предварительно проводится проверка однородности дисперсий.

При H_0 статистика

$$t = \frac{(\bar{y}_1 - \bar{y}_2)}{\sqrt{m_1 S_1^2 + m_2 S_2^2}} \sqrt{\frac{m_1 m_2 (m_1 + m_2 - 2)}{m_1 + m_2}} \quad (3.34)$$

распределена согласно распределению Стьюдента при $m_1 + m_2 - 2$ степенях свободы.

Если дисперсии однородны, можно найти среднюю дисперсию воспроизводимости:

$$S_a^2 = ((m_1 - 1)S_1^2 + (m_2 - 1)S_2^2) / (m_1 + m_2 - 2). \quad (3.35)$$

Тогда соотношение (3.34) приобретает вид:

$$t = \frac{(\bar{y}_1 - \bar{y}_2)}{\sqrt{S_a^2}} \sqrt{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}}. \quad (3.36)$$

При уровне значимости $\alpha = 0,05$: если $|t| < t_{0,05}$ (с $m_1 + m_2 - 2$ степенями свободы), принимается H_0 . Если $|t| > t_{0,05}$, то H_0 отвергается.

Следующий вариант: *сравнение средних двух малых выборок* (случай неравных дисперсий) [19, с. 45–48; 25, с. 52–54; 26, с. 23–24; 52, с. 161].

Гипотеза $H_0: \mu_1 = \mu_2$ должна быть проверена в предположении, что генеральные дисперсии не равны: $\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$.

При предположении нормально распределенных переменных и $\mu_1 = \mu_2$ статистика

$$t = \frac{(\bar{y}_1 - \bar{y}_2)}{\sqrt{S_1^2 / m_1 + S_2^2 / m_2}} \quad (3.37)$$

распределена в t -распределении Стьюдента с числом степеней свободы

$$v = \frac{(S_1^2 / m_1 + S_2^2 / m_2)^2}{(S_1^2 / m_1)^2 (S_2^2 / m_2)^2} (m_1 + 1)(m_2 + 1) - 2 \quad (3.38)$$

При уровне значимости $\alpha = 0,05$: если $|t| < t_{0,05}$ (с v степенями свободы), принимается H_0 . Если $|t| > t_{0,05}$, то H_0 отвергается.

И, наконец, *сравнение нескольких средних* [25, с. 54–56; 36, с. 53–56].

При сравнении нескольких средних можно использовать t -критерий, проводя сравнение попарно. Однако для использования при сравнении полной информации обо всех средних такое сравнение проводят при помощи *множественного рангового критерия Дункана*. Пусть по n выборкам разного объема получено n средних значений:

$\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_j, \dots, \bar{y}_n$; $\bar{y}_j = \sum_{i=1}^{m_j} y_{ij}$. Генеральные дисперсии равны между собой, т. е. $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \dots = \sigma_j^2 = \dots = \sigma_n^2$.

При применении критерия Дункана следует: 1) проранжировать n средних значений, расположив их в порядке возрастания; 2) определить ошибку воспроизводимости результатов S_y с соответствующим числом степеней свободы v_y ; 3) определить ошибку для каждого среднего $S_{\bar{y}_j} = \sqrt{S_j^2 / m_j}$; 4) из таблицы значимых рангов Дункана (таблица XIV Приложения) с выбранным уровнем значимости, числом v_y и $p = 2, 3, \dots, n$ выписать $(n - 1)$ значений рангов; 5) умножить эти значения рангов на $S_{\bar{y}_j}$ и таким образом определить $(n - 1)$ наименьших значимых рангов; 6) проверить значимость различия между средними, начиная с крайних в ранжировочном ряду; разность максимального и минимального значений среднего сравнить с наименьшим значимым рангом при $p = n$, затем найти разность максимального среднего и второго среднего в ранжировочном ряду и сравнить ее с наименьшим значимым рангом при $p = n - 1$ и т. д. Это сравнение продолжить для второго по величине среднего, которое сравнивается с наименьшим, и т. д., пока не будут исследованы на значимость различия между всеми $n(n - 1)/2$ парами.

Пример 1. Имеются два массива наблюдений вулканизационной характеристики $t_{c(90)}$. Сами значения не приводятся из-за громоздкости массивов.

Сравнение двух средних

Теория.

Выборочное среднее

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^m y_i / m = (y_1 + y_2 + \dots + y_i + \dots + y_m) / m.$$

Выборочная дисперсия и выборочное стандартное (среднеквадратичное) отклонение

$$S_y^2 = \sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2 / (m - 1) = ((y_1 - \bar{y})^2 + (y_2 - \bar{y})^2 + \dots + (y_m - \bar{y})^2) / (m - 1).$$

$$S_Y = \sqrt{S_Y^2}.$$

Статистика

$$z = (\bar{y}_1 - \bar{y}_2) / \sqrt{\frac{S_1^2}{m_1} + \frac{S_2^2}{m_2}}.$$

Решение

$$\bar{y}_1 = 1,5334 \text{ мин}; \bar{y}_2 = 1,3404 \text{ мин};$$

$$S_1^2 = 4,1950 \cdot 10^{-3}; S_2^2 = 6,2189 \cdot 10^{-3};$$

$$S_1 = 6,4769 \cdot 10^{-2}; S_2 = 7,8860 \cdot 10^{-2};$$

$$m_1 = 479; m_2 = 400;$$

$$z = (1,5334 - 1,3404) / (4,1950 \cdot 10^{-3} / 479 + 6,2189 \cdot 10^{-3} / 400)^{0,5} = 39,15;$$

$$z_{0,05} = 1,96.$$

Интерпретация.

Поскольку рассчитанное значение критерия z больше табличного (уровень значимости 0,05), гипотеза о равенстве средних по большим выборкам отвергается.

Пример 2. Рассмотрим вновь результаты исследования плотности четырех ($n = 4$) резин (табл. 3.3). Ранее было показано, что дисперсии рассматриваемых групп величин однородны.

Таблица 3.3. Результаты определения плотности (кг/м³)

Статистический показатель	Номер смеси $j \rightarrow$			
	1	2	3	4
Среднее значение	960,0	1060,2	1029,8	1099,6
Дисперсия	20,5	19,7	21,2	22,8

Сравнение двух средних

Теория.

Для сравнения двух средних можно использовать критерий Стьюдента:

$$t = |y_{1cp} - y_{2cp}| \times ((m_1 \times m_2) / ((m_1 + m_2) S_a^2))^{0,5}, S_a^2 - \text{средняя из двух дисперсий.}$$

Решение.

$$\text{Средние } 1099,6 \text{ и } 1029,8; m_1 = m_2 = 5; S_a^2 = (21,2 + 22,8) / 2 = 22,0;$$

$$t = (1099,6 - 1029,8) / ((22,0)^{0,5} (1/5 + 1/5)^{0,5}); t = 23,53.$$

Интерпретация.

Если $t < t_{кр.}$, то можно считать, что два средних различаются с учетом ошибки опыта. Критическое значение критерия Стьюдента выбирается из таблицы I Приложения при числе степеней свободы $v = m_1 + m_2 - 2$ и уровне значимости 5%.

$$v = 5 + 5 - 2 = 8; \text{табличное значение критерия Стьюдента } t_{(8,0,05)} = 2,306.$$

Поскольку $t > t_{кр}$, ($23,53 > 2,306$), два средних различаются; можно считать, что $1099,6 > 1029,8$.

Сравнение нескольких средних с использованием критерия Дункана

Теория.

Производится ранжирование средних.

Вычисляется значение дисперсии воспроизводимости с числом степеней свободы $v = n(m - 1)$.

Вычисляется нормированная ошибка среднего $S = (S_a^2/m)^{0,5}$.

Выписываются значения $(n - 1)$ значимых рангов из таблицы Дункана (таблицы XIV Приложения) при числе степеней свободы v , уровне значимости α и $p = 2, 3, \dots, n$.

Наименьшие значимые ранги (НЗР), вычисляются как произведение рангов на нормированную ошибку среднего S .

Решение.

Ранжирование средних: 960,0; 1029,8; 1060,2; 1099,6.

Дисперсия воспроизводимости: $v = 4(5 - 1) = 16$; $S_{воспр}^2 = (20,5 + 19,7 + 21,2 + 22,8)/4 = 21,05$.

Нормированная ошибка среднего: $S = (21,05/5)^{0,5} = 2,05$.

Ранги Дункана: $v = 16$; $\alpha = 0,05$; количество рангов $(n - 1) = 4 - 1 = 3$; ранги: 3,00; 3,15; 3,23.

НЗР: $3,00 \times 2,05 = 6,15$; $3,15 \times 2,05 = 6,46$; $3,23 \times 2,05 = 6,62$.

Интерпретация.

Проверяются разности между средними, начиная с крайних; эта разность сравнивается с НЗР при $p = n$, затем находится разность максимального среднего и первого, которое превосходит минимальное, и сравнивается с НЗР при $p = n - 1$ и т. д. Это сравнение продолжается для второго по величине среднего; оно сравнивается с наименьшим и т. д., пока не будут исследованы все $n(n - 1)/2$ возможные пары. Если разница между двумя средними будет меньше соответствующего НЗР, то можно считать, что эти средние не различаются, и наоборот.

Количество сравниваемых пар средних значений: $4(4 - 1)/2 = 6$.

Сравнение средних значений:

$1099,6 - 960,0 = 139,6 < 6,62$; $1099,6 - 1029,8 = 69,8 < 6,46$; $1099,6 - 1060,2 = 39,4 < 6,15$;
 $1060,2 - 960,0 = 100,2 < 6,46$; $1060,2 - 1029,8 = 30,4 < 6,15$; $1029,8 - 960,0 = 69,8 < 6,15$.

Таким образом, с вероятностью 95% можно утверждать, что все рассматриваемые средние значения различаются. Следовательно: $960,0 < 1029,8 < 1060,2 < 1099,6$.

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```
echo on
% СРАВНЕНИЕ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ
echo off
echo on
```

```

% СРАВНЕНИЕ ДВУХ СРЕДНИХ ПО КРИТЕРИЮ СТЬЮДЕНТА
echo off
pause
y = input('ВВЕДИТЕ ДВА СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЯ (в [], через «;»');
SS = input('ВВЕДИТЕ ДВЕ ДИСПЕРСИИ (в [], через «;»');
m = input('ВВЕДИТЕ КОЛИЧЕСТВА ПОВТОРНЫХ НАБЛЮДЕНИЙ (в [], через «;»');
Sse = (SS(1)*(m(1)-1)+SS(2)*(m(2)-1))/(sum(m)-2); - ВЫЧИСЛЕНИЕ
СРЕДНЕВЗВЕШЕННОЙ ДИСПЕРСИИ;
Se = sqrt(Sse); - СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ;
t = (abs(y(1)-y(2)))*(sqrt(m(1)*m(2)/(m(1)+m(2))))/Se; - РАСЧЕТ-
НОЕ ЗНАЧЕНИЕ КРИТЕРИЯ СТЬЮДЕНТА;
tt = [12.71;4.303;3.183;...]; - КРИТЕРИЙ СТЬЮДЕНТА (фрагмент таблицы);
t1 = tt(sum(m)-2); - ВЫБОР КРИТЕРИЯ ИЗ ТАБЛИЦЫ;
a = t-t1; - РАЗНОСТЬ КРИТЕРИЕВ;
if a >=0
    ('СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ РАЗЛИЧАЮТСЯ')
else
    ('СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ НЕ РАЗЛИЧАЮТСЯ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ.
echo on
% СРАВНЕНИЕ НЕСКОЛЬКИХ СРЕДНИХ ПО КРИТЕРИЮ ДУНКАНА
% ПРЕДОСТЕРЕЖЕНИЕ: СРЕДИ СРАВНИВАЕМЫХ СРЕДНИХ
% НЕ ДОЛЖНО БЫТЬ ОДИНАКОВЫХ !!!
echo off
Y = input('ВВЕДИТЕ СТОЛБЕЦ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ (в [], через «;»');
ss = input('ВВЕДИТЕ СТОЛБЕЦ ДИСПЕРСИЙ (в [], через «;»');
M = input('ВВЕДИТЕ КОЛИЧЕСТВО ПОВТОРНЫХ НАБЛЮДЕНИЙ (одна цифра)');
Y = sort(Y); - РАНЖИРОВАНИЕ СРЕДНИХ;
SS = mean(ss);- ВЫЧИСЛЕНИЕ СРЕДНЕЙ ДИСПЕРСИИ;
N = max(size(Y)); - КОЛИЧЕСТВО СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ;
f = N*(M-1); - ЧИСЛО СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ;
S = sqrt(SS/M);- НОРМИРОВАННАЯ ОШИБКА СРЕДНЕГО;
D = [ 18 18 18 ... 18];
D = [D;6.09 6.09 6.09 6.09...] - ЗНАЧЕНИЯ РАНГОВОГО КРИТЕРИЯ ДУН-
КАНА (фрагмент таблицы);
D1=D'; - ОПЕРАЦИЯ ТРАНСПОНИРОВАНИЯ;
P1=D1(:,f);p=P1(1:N-1);P=p*S; - ВЫЧИСЛЕНИЕ НАИМЕНЬШИХ ЗНАЧИМЫХ
РАНГОВ;
for I=1:N,
    for j=1:N,
        d(I,j)=Y(j)-Y(i);
    end
end - ПЕРЕБОР РАЗНОСТЕЙ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ;

```

```

tt=d';A=tt(:); - ПРЕОБРАЗОВАНИЕ РАЗНОСТЕЙ В СТОЛБЕЦ;
I=find(A>0);AA=A(I); n=N-1;
for I=1:n,
    RR(:,I)=[(zeros(1,I-1))';P(1:(N-I))];
end
B=RR(:);J=find(B>0);BB=B(J); - СТОЛБЕЦ НЗР;
r = [AA BB]; - ДВА СТОЛБЦА: РАЗНОСТЕЙ И РАНГОВ;
disp(Y) - ВЫВОД НА ДИСПЛЕЙ СТОЛБЦА СРЕДНИХ;
echo on
% ПЕРЕД ВАМИ СТОЛБЕЦ ВАШИХ РЕЗУЛЬТАТОВ В ПОРЯДКЕ ВОЗРАСТАНИЯ.
ОБОЗНАЧИМ РЕЗУЛЬТАТЫ: Y1(min), Y2, Y3,...YN(max)
echo off
disp(r) - ВЫВОД НА ДИСПЛЕЙ ДВУХ СТОЛБЦОВ;
echo on
% ТЕПЕРЬ ПЕРЕД ВАМИ ДВА СТОЛБЦА: В ПЕРВОМ - РАЗЛИЧИЯ СРЕДНИХ
В ТАКОМ ПОРЯДКЕ: Y2-Y1, Y3-Y1, ... YN-Y1, Y3-Y2, Y4-Y2,... YN-Y2,
% Y4-Y3, Y5-Y3, ... YN-Y3, ... YN-Y(N-1); ВО ВТОРОМ СТОЛБЦЕ - НА-
ИМЕНЬШИЕ ЗНАЧИМЫЕ РАНГИ, С КОТОРЫМИ ЗНАЧЕНИЯ В ПЕРВОМ СТОЛБЦЕ
НАДО СРАВНИВАТЬ.
ЕСЛИ ВЕЛИЧИНА В 1-ОМ СТОЛБЦЕ < ВЕЛИЧИНЫ ВО 2-ОМ, ЗНАЧИТ РАЗЛИЧИЕ
МЕЖДУ СРЕДНИМИ СУЩЕСТВЕННО, В ПРОТИВНОМ СЛУЧАЕ - СРЕДНИЕ ЗНАЧЕ-
НИЯ СЛЕДУЕТ ПРИЗНАТЬ СОВПАДАЮЩИМИ
echo off

```

Литература

1. Дайменд С. Мир вероятности / Пер с англ. — М.: Статистика, 1970. — 155 с.
2. Зажигаев Л.С., Кишьян А.А., Романиков Ю.И. Методы планирования и обработки результатов физического эксперимента. — М.: Атомиздат, 1978. — 231 с.
3. Сквайрс Дж. Практическая физика / Пер. с англ. — М.: Мир, 1971. — 246 с.
4. Агемян Т.А. Основы теории ошибок для астрономов и физиков. — М.: Наука, 1972. — 170 с.
5. Вознесенский В.Л. Первичная обработка экспериментальных данных. — Л.: Наука, 1969. — 84 с.
6. Первозванский А.А. Поиск. — М.: Наука, 1970. — 263 с.
7. Румшинский Л.З. Математическая обработка результатов эксперимента. — М.: Наука, 1971. — 192 с.
8. Борель Э.М., Дельтейль Р., Юрон Р. Вероятности, ошибки / Пер. с франц. — М.: Статистика, 1972. — 176 с.
9. Гутер Р.С., Овчинский Е.В. Элементы численного анализа и математической обработки результатов опыта. — М.: Наука, 1970. — 432 с.
10. Пустыльник Е.И. Статистические методы анализа и обработки наблюдений. М.: Наука. 1968. — 288 с.

11. Зайдель А.Н. Элементарные оценки ошибок измерений. — Л.: Наука, 1967. — 88 с.
12. Рейхман У.Дж. Применение статистики / Пер. с англ. — М.: Статистика, 1969. — 296 с.
13. Ашмарин И.П., Васильев Н.Н., Амбросов В.А. Быстрые методы статистической обработки и планирование эксперимента. — Л.: Изд. ЛГУ, 1971. — 78 с.
14. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Пер. с англ. М.: Наука, 1974. — 832 с.
15. Смирнов Н.В., Дунин-Барковский И.В. Курс теории вероятностей и математической статистики. — М.: Наука, 1969. — 511 с.
16. Коваленко И.Н., Филиппова А.А. Теория вероятностей и математическая статистика. — М.: Высшая школа, 1973. — 368 с.
17. Кнотек М., Войта Р., Шефц И. Анализ металлургических процессов методами математической статистики / Пер. с чешск. — М.: Металлургия, 1968. — 211 с.
18. Бочаров П.П., Печинкин А.В. Теория вероятностей. — М.: Изд. РУДН, 1994. — 172 с.
19. Бернштейн А. Справочник статистических решений / Пер. с англ. — М.: Статистика, 1968. — 162 с.
20. Гриднев В.В., Золотницкий Н.Д., Короев Ю.И. Математическая обработка результатов экспериментальных исследований. — М.: Изд. МИСИ, 1974. — 44 с.
21. Яковлев К.П. Математическая обработка результатов измерений. — М.: Гостехтеориздат, 1953. — 383 с.
22. Кенуй М.Г. Быстрые статистические вычисления / Пер. с англ. — М.: Статистика, 1979. — 69 с.
23. Курант Р., Роббинс Г. Что такое математика? / Пер. с англ. М.: Просвещение, 1967. — 558 с.
24. Дюерфель К. Статистика в аналитической химии / Пер. с нем. М.: Мир, 1969. — 247 с.
25. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. М.: Высшая школа, 1978. — 319 с.
26. Рузинов Л.П., Слободчикова Р.И. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. — М.: Химия, 1980. — 280 с.
27. Ивашов-Мусатов В.С. Теория вероятностей и математическая статистика. — М.: Наука, 1979. — 256 с.
28. Гурский Е.И. Теория вероятностей с элементами математической статистики. — М.: Высшая школа, 1971. — 328 с.
29. Закс Ш. Теория статистических выводов / Пер. с англ. — М.: Мир, 1975. — 776 с.
30. Кендалл М.Дж., Стьюарт А. Статистические выводы и связи / Пер. с англ. — М.: Наука, 1973. — 900 с.
31. Боровков А.А. Математическая статистика. Оценка параметров, проверка гипотез. — М.: Наука, 1984. — 472 с.
32. Гнеденко Б.В. Курс теории вероятностей. — М.: Наука, 1988. — 447 с.
33. Тутубалин В.Н. Теория вероятностей. — М.: Изд. МГУ, 1972. — 230 с.
34. Петрович М.Л., Давидович М.И. Статистическое оценивание и проверка гипотез на ЭВМ. — М.: Финансы и статистика, 1989. — 192 с.

35. Гмурман В.Е. Руководство к решению задач по теории вероятностей и математической статистике. — М.: Высшая школа, 1975. — 334 с.
36. Хикс Ч. Основные принципы планирования эксперимента / Пер. с англ. — М.: Мир, 1967. — 406 с.
37. Планирование эксперимента в исследованиях технологических процессов. Под ред. Э.К. Лецкого / Пер. с нем. — М.: Мир, 1977. — 552 с.
38. Бельнов В.К. Статистические методы оценки параметров математических моделей химических процессов. — М.: Изд. МГУ, 1991. — 160 с.
39. Львовский В.Н. Статистические методы построения эмпирических формул. М.: Высшая школа. 1982. — 224 с.
40. Грановский Ю.В. Основы планирования экстремального эксперимента при оптимизации многофакторных технологических процессов. — М.: Изд. МИНХ, 1971. — 73 с.
41. Кассандрова О.Н., Лебедев В.В. Обработка результатов наблюдений. — М.: Наука, 1970. — 104 с.
42. Маринеску И., Мойнягу Ч., Никулеску Р., Ранку Н., Урсяну В. Основы математической статистики и ее применение / Пер. с румын. — М.: Статистика, 1970. — 224 с.
43. Головач А.В., Ерина А.М., Трофимов В.П. Критерии математической статистики в экономических исследованиях. — М.: Статистика, 1973. — 136 с.
44. Кендалл М.Дж., Стьюарт А. Теория распределений / Пер. с англ. — М.: Наука, 1966. — 587 с.
45. Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа. — Л.: Изд. ЛГУ, 1977. — 120 с.
46. Румшинский Л.З. Элементы теории вероятностей. — М.: Наука, 1970. — 256 с.
47. Закс Л. Статистическое оценивание / Пер. с нем. М.: Статистика, 1976. — 598 с.
48. Хан Г.И., Шапиро С.С. Статистические модели в инженерных задачах / Пер. с англ. — М.: Мир, 1969. — 395 с.
49. Митрополевский А.К. Техника статистических вычислений. — М.: Наука, 1971. — 576 с.
50. Монтгомери Д.К. Планирование эксперимента и анализ данных / Пер с англ. — Л.: Судостроение, 1980. — 384 с.
51. Саутин С.Н. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. Л.: Химия. 1975. — 48 с.
52. Налимов В.В. Применение математической статистики при анализе вещества. — М.: Физматгиз, 1960. — 430 с.
53. Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами / Пер. с англ. — М.: Мир, 1973. — 957 с.

Глава 4. Эмпирические формулы

Подбор формул по экспериментальным данным называют подбором *эмпирических формул*. На самом деле, конечно, формула тем лучше, чем больше теоретических представлений вложено в нее, чем в меньшей степени она является эмпирической [1, с. 45–56]. В действительности нужно сначала задаться видом формулы, а затем, пользуясь результатами опыта, определять значения различных постоянных величин, входящих в нее.

Перед тем как приступить к подбору формулы, полезно нанести опытные данные на график, после чего на глаз, от руки провести через полученные точки наиболее правдоподобную кривую. При этом сразу выявляются те данные, в которых можно подозревать большие ошибки. Очень важно при проведении кривой, кроме экспериментальных точек, использовать общие соображения о том, как должна вести себя кривая при значениях аргумента, весьма близких к нулю, при больших значениях аргумента, проходит ли кривая через начало координат, пересекает ли координатные оси, касается ли их и т. п.

В большинстве своем кривую рисуют на компьютере, пользуясь какой-нибудь программой, она и подбирает формулу.

Когда кривая проходит строго по точкам, это значит, что ошибка предсказания равна нулю. Строго по точкам проводить можно не кривую, а ломаную; называется это «полигон».

А зачем вообще строят графики? Укажем три причины [2, с. 170–182].

Во-первых, по ним можно определить некоторые величины. Тангенс угла между прямой или касательной к кривой и осью абсцисс характеризует скорость изменения отклика при изменении значения фактора. В точке перегиба, если таковой есть, будет иметь место экстремальное значение скорости. Может быть интересна величина отрезка, отсекаемого на оси ординат, прямой, изображающей зависимость между двумя переменными. Строго говоря, здесь роль графика сравнительно невелика. Ведь при методе наименьших квадратов наклон прямой определяют, конечно, не по графикам, как таковым, а по исходным числовым данным. Непосредственно же по графику определить наклон можно только в том случае, если провести через точки на глаз наилучшую прямую. Это довольно грубый метод. Его не следует сбрасывать со счета, но он пригоден лишь тогда, когда мы проверяем результат, полученный более точным методом, или когда наклон не очень существен для окончательного результата.

Во-вторых, и это, пожалуй, самое важное, графиками пользуются для наглядности. Довольно сложно зафиксировать какие-либо нюансы изменения отклика при варьировании фактора по данным, приведенным в таблицах. Речь, конечно, не идет о совершенно очевидных резких изменениях. Другое дело, когда те же данные представлены графически. Графики позволяют также более наглядно проводить сравнение экспериментальных данных с теоретической кривой. Нанося результаты измерений на график, очень удобно следить за тем, как идет эксперимент.

В-третьих, графиками пользуются в экспериментальной работе, чтобы установить эмпирическое соотношение между двумя величинами. Например, при градуировке термопары по какому-либо образцовому прибору.

На графиках принято по горизонтальной оси откладывать независимую переменную, т. е. величину, значения которой задает сам экспериментатор (фактор), а по вертикальной оси — ту величину, которую он при этом определяет (отклик). Иначе говоря, по горизонтали откладывается *причина*, а по вертикали — *следствие*.

При выборе масштаба нужно исходить из следующих соображений. 1. Экспериментальные точки не должны сливаться друг с другом. При этом довольно трудно извлечь полезную информацию. Поэтому лучше выбрать такой масштаб, чтобы расположить точки с разумным интервалом. Но при этом следует иметь в виду два других правила. 2. Масштаб должен быть простым. Проще всего, если единице измеренной величины (или 10; 100; 0,1 единицы и т. д.) соответствует одно деление. Можно также выбрать такой масштаб, чтобы одному делению соответствовало 2 или 5 единиц. Других масштабов следует избегать просто потому, что иначе при нанесении точек на график придется производить арифметические подсчеты в уме. 3. Иногда приходится выбирать масштаб из теоретических соображений. Так, если нас интересует, в какой мере результаты удовлетворяют соотношению $y = ax$, то на нашем графике зависимости y от x обязательно должно быть начало координат.

Десятичный множитель удобнее отнести к единице измерения. Тогда деления на графике можно помечать цифрами 1, 2, 3, ... или 10, 20, 30, ..., а не 10000, 20000 и т. д. или 0,0001, 0,0002 и т. д.

На осях координат следует указывать название или символ величины (или то и другое). Единицы измерений нужно указывать тем же способом, что и в таблицах, а именно десятичный множитель относить к единице измерения.

На рис. 4.1 показана зависимость индекса набухания вулканизатов от содержания наполнителя. Отвечающие наблюдениям точки сгруппированы случайно около прямой линии, называемой *линией регрессии*.

Регрессионный анализ — это раздел математической статистики, который объединяет практические методы исследования *регрессионной* зависимости между величинами по статистическим данным.

Термин «*регрессия*» впервые был употреблен Ф. Гальтоном при статистическом рассмотрении наследственности у людей; он употреблял слово «регрессия» для обозначения наследственного родства. Из этой работы слово перешло в терминологию статистики.

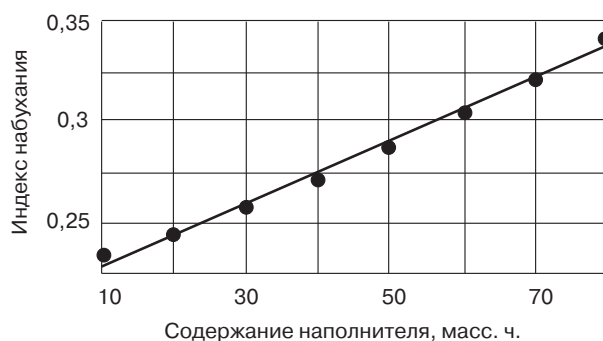


Рис. 4.1. Линия регрессии

Проблемам регрессионного анализа посвящено большое количество работ. Сошлемся на некоторые из них, связанные с линейной регрессией [3, с. 450–472; 4, с. 227–234; 5, с. 29–31; 6, с. 145–151; 7, с. 233–239; 8, с. 86–93; 9, с. 53–94; 10, с. 175–189; 11, с. 6–14; 12, с. 175–206; 13, с. 97–102; 14, с. 282–294; 15, с. 452–466; 16, с. 204–214; 17, с. 254–261; 18, с. 77–81].

Рассмотрим бытовавшие ранее приемы построения эмпирических формул.

В 1933 году была издана книга К. А. Семендяева «Эмпирические формулы» [19], которая почти 30 лет была настольной книгой всякого уважающего себя инженера или ученого. В ней были даны рекомендации по построению эмпирических соотношений по экспериментальным данным. Автор опирался на опубликованные ранее работы: *Running, Empirical formulas, N.Y., 1917*, и *Lipka, Graphical and mechanical computations, N.Y., 1921*, но привнес много нового и оригинального.

Покажем предлагавшуюся методику на примере. В нижеприведенной табл. 4.1 представлены результаты определения теплопроводности (y) асбеста как функции температуры (x). Приведенные в таблице численные значения необходимо было отобразить в виде графика (рис. 4.2), и сопоставить его с эталонными кривыми, приведенными в Приложении к книге.

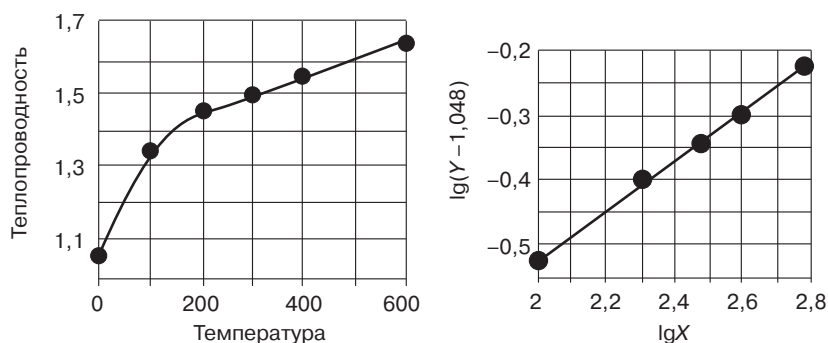


Рис. 4.2. Зависимость теплопроводности от температуры

Эта процедура позволяет заключить, что мы имеем дело со степенной функцией следующего вида: $y = a + b \cdot x^c$. Для нахождения параметров этого соотношения необходимо было сначала из всех значений y вычесть 1,048.

Таблица 4.1. Результаты определения теплопроводности асбеста

x	0	100	200	300	400	600
y	1,048	1,346	1,451	1,499	1,548	1,644

Другими словами, принять, что $a = 1,048$. Тогда $y - a = b \cdot x^c$. Полученное выражение надо прологарифмировать (с натуральными логарифмами предпочитали не работать). Будем иметь: $\lg(y - a) = \lg b + c \cdot \lg x$. Нетрудно видеть, что из расчета выпадает первая точка, потому что там будет логарифм нуля.

Итак, надо найти параметры прямой линии, изображенной на рисунке внизу. В прежние годы использовались различные методы.

1. Метод избранных точек. Автор книги рекомендует взять целлулоид или натянуть нить так, чтобы прямая линия проходила так, чтобы отклонения точек под линией были приблизительно такие же, как и над ней. Берутся две точки, желательно подалеже друг от друга, и выписываются значения $\lg x$ и $\lg y$. Берем первую точку и последнюю. И получаем два уравнения с двумя неизвестными:

$$-0,526 = b + c \times 2,000 \quad b = -1,300$$

$$-0,225 = b + c \times 2,778 \quad c = 0,387$$

«Синтезированное» таким образом уравнение будет иметь следующий вид:

$$\lg(y - 1,048) = -1,300 + 0,387 \times \lg x \text{ или } y = 1,048 + 0,0501 \times x^{0,387}.$$

2. Метод средних. Потребуем, чтобы алгебраическая сумма отклонений вычисленных по формуле значений y от значений, полученных из опыта, равнялась нулю, т. е. $\Sigma(\lg(y - a) - b - c \times \lg x) = 0$. Для нахождения параметров модели a и b из возможных пяти уравнений с двумя неизвестными формируем два уравнения, например, вычленив суммы по двум и трем экспериментальным точкам. Получим два уравнения:

$$-0,920 = 2b + c \times 4,301 \quad b = -1,238$$

$$-0,872 = 3b + c \times 7,857 \quad c = 0,362$$

В этом случае получим:

$$\lg(y - 1,048) = -1,238 + 0,362 \times \lg x \text{ или } y = 1,048 + 0,0576 \times x^{0,362}.$$

3. Метод наименьших квадратов. Этот метод требует, чтобы сумма квадратов отклонений вычисленных значений от экспериментальных была минимальной. В рассматриваемом случае: $\Sigma(\lg(y - a) - b - c \times \lg x)^2 = \min$. Найдя производные этого выражения по a и по b , и приравняв их к нулю, получим два уравнения с двумя неизвестными.

Окончательное выражение имеет вид:

$$\lg(y - 1,048) = -1,275 + 0,377 \times \lg x \text{ или } y = 1,048 + 0,0531 \times x^{0,377}.$$

Суммы квадратов отклонений для трех рассмотренных методов составили, соответственно: $2,93 \cdot 10^{-4}$, $3,39 \cdot 10^{-4}$ и $2,58 \cdot 10^{-4}$. Обсуждать, какой из способов лучше, на верное, в XXI веке не имеет смысла, согласимся с книгой.

В книге рассмотрено 25 формул и показано, как вычислять параметры, фигурирующие в них, с помощью трех вышеописанных методов. Представлены формулы преобразований к линейному виду функций одной переменной (например, степенная функция $y = ax^b$ превращается в линейную после логарифмирования: $\lg y = \lg a + b \lg x$). В Приложении к этой книге даны графические изображения кривых с различными численными значениями параметров.

В 1963 г. появилась книга «Математические методы в химической технике» (следующее издание – 1968 г. [20]). В этой книге (авторы Л. М. Батунер и М. Е. Позин) в разделе, посвященном эмпирическим формулам, имеется параграф «Эмпирическая формула для опытных данных, образующих прямую с выступом».

Экспериментальные данные представлены в табл. 4.2.

Таблица 4.2. Таблица экспериментальных значений

x	0,50	2,00	3,00	4,00	5,00	5,75	6,50	7,50	8,50	9,50	11,0
y	0,30	1,10	1,60	2,30	3,30	3,80	4,00	4,15	4,60	5,10	5,90

Авторы рекомендуют поступить следующим образом: по шести точкам (три первых и три последних) получить уравнение прямой, показанной на рис. 4.3 слева, по полученному уравнению рассчитать значения по оси ординат и вычесть их из исходных значений y .

Тогда получим то, что изображено справа на рис. 4.3.

Полученную зависимость рекомендуется очень утомительно аппроксимировать следующим соотношением в виде суммы двух экспонент:

$$y = a + b \cdot x + \delta \quad \delta = \alpha / (\exp(n \cdot (X - x)) + \exp(n \cdot (x - X)))$$

Современными средствами (например, с использованием программы *Table Curve 2D*) изображенная справа кривая адекватно описывается показанным ниже соотношением устрашающего вида, называемым β -распределением:

$$y = \frac{a \left(\frac{x - b + \frac{c(d-1)}{d+e-2}}{c} \right)^{d-1} \left(\frac{x - b + \frac{c(d-1)}{d+e-2}}{1 - \frac{c(d-1)}{d+e-2}} \right)^{e-1}}{\left(\frac{d-1}{d+e-2} \right)^{d-1} \left(\frac{e-1}{d+e-2} \right)^{e-1}} \quad (4.1)$$

Но, интерпретируя это выражение, следует иметь в виду, что оно специально структурировано таким образом, что параметр a в нем соответствует амплитуде кривой, а параметр b — моде, т. е. абсциссе максимума.

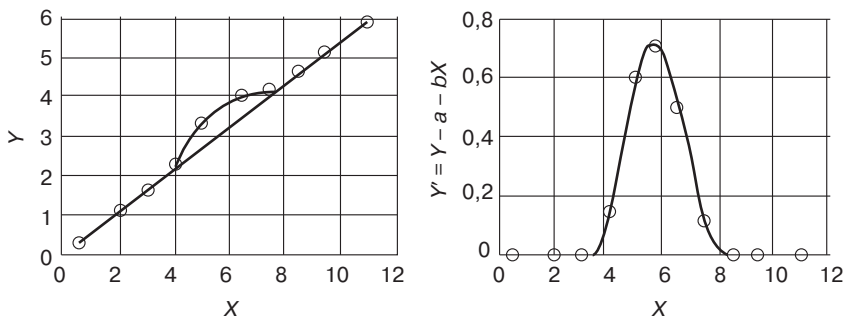


Рис. 4.3. Интерпретация «кривой с выступом»

Кроме того, зная параметры модели, можно рассчитать площадь под кривой, используя следующую формулу:

$$\frac{ac\Gamma(d)\Gamma(e)}{\Gamma(d+e)(d-1)^{(d-1)}(d+e-2)^{-(d+e-2)}(e-1)^{(e-1)}} \quad (4.2)$$

В ней $\Gamma(d)$ и $\Gamma(e)$ — гамма-функции (обобщенное понятие факториала), значения которых приводятся в таблицах.

Такой подход можно использовать, например, при изучении спектров термического анализа.

По интересующему нас вопросу более позднее издание книги (1968 г.) отличается от предыдущего наличием Приложения «Графики формул и приемы их выравнивания», которое без изменений взято из книги К.А. Семендяева.

В книге 2006 г. [21, с. 218–221] приводятся знакомые рисунки и формулы преобразований.

Во второй главе настоящей книги упоминалось о 105 двухпараметрических моделях, которые позволяет получить программа *Table Curve 2D*.

Перечислим их еще раз (табл. 4.3) с указанием номеров в соответствии с каталогом программы *Table Curve 2D*.

Таблица 4.3. Двухпараметрические линейные относительно параметров модели

Уравнение	№	Уравнение	№	Уравнение	№
$y = a + b \cdot x$	1	$y = a + b \cdot x \cdot \ln x$	2	$y = a + b \cdot x^{1.5}$	3
$y = a + b \cdot x^2$	4	$y = a + b \cdot x^2 \cdot \ln x$	5	$y = a + b \cdot x^{2.5}$	6
$y = a + b \cdot x^3$	7	$y = a + b \cdot \exp(x)$	8	$y = a + b \cdot x^{0.5} \cdot \ln x$	9
$y = a + b \cdot (\ln x)^2$	10	$y = a + b \cdot x / \ln x$	11	$y = a + b \cdot x^{0.5}$	12
$y = a + b \cdot \ln x$	13	$y = a + b / \ln x$	14	$y = a + b / x^{0.5}$	15
$y = a + b \cdot \ln x / x$	16	$y = a + b / x$	17	$y = a + b / x^{1.5}$	18
$y = a + b \cdot \ln x / x^2$	19	$y = a + b / x^2$	20	$y = a + b \cdot \exp(-x)$	21

Представьте себе, что в левой части этих соотношений записано не y , а $\ln y$, $1/y$, $y^{0.5}$ или y^2 . Тогда, например, под номером 13 в каталоге будет числиться уравнение $y = a + b \cdot \ln x$, а под номером 34 (13 + 21) вы найдете $\ln y = a + b \cdot \ln x$, номер 55 (13 + 21·2) будет у уравнения $1/y = a + b \cdot \ln x$, номер 76 (13 + 21·3) — у соотношения $y^{0.5} = a + b \cdot \ln x$ и, наконец, под номером 97 (13 + 21·4) будет $y^2 = a + b \cdot \ln x$.

Этот ряд уравнений выбран не случайно. Дело в том, что программа позволяет найти две нелинейные относительно параметров двухпараметрические модели: $y = a \cdot x^b$ (8156) и $y = a \cdot \exp(-x/b)$ (8157). Нетрудно догадаться, что уравнение 8156 при логарифмировании дает уравнение 34 по каталогу, а уравнение 8157 при логарифмировании сводится к уравнению 22. Можно ли утверждать, что мы имеем дело с двумя парами идентичных моделей? Проверим это на числовом примере.

На рис. 4.4 показана кинетика изменения накопления остаточной деформации (работа И.А. Кузнецовой и др., ООО «НИИЭМИ»).

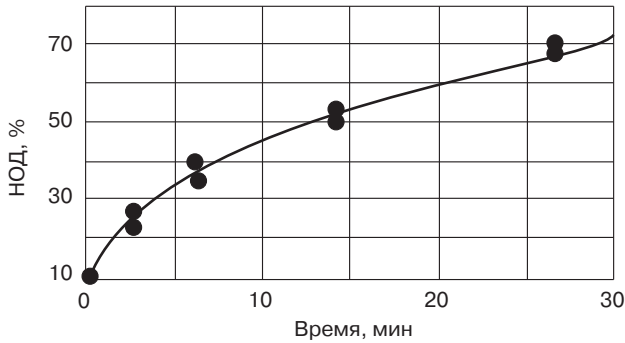


Рис. 4.4. Кинетика изменения накопления остаточной деформации

По экспериментальным данным с помощью программы *Table Curve 2D* был получен ряд моделей (3407 штук). Среди них 101 относятся к разряду простых. Из этого количества, в свою очередь, 97 — двухпараметрические (а всего в каталоге 105 двухпараметрических линейных относительно параметров уравнений). Остальные 4 уравнения нелинейные относительно параметров: $y = a + b \cdot x^c$ (8010), $y = a \cdot x^b$ (8156), $y = a + b \cdot \exp(-x/c)$ (8002) и $y = a \cdot \exp(-x/b)$ (8157). Нас будут интересовать два уравнения: $y = a \cdot x^b$ (8156) и $\ln y = a + b \cdot \ln x$ (34).

В табл. 4.4 представлены критерии качества этих двух моделей, в табл. 4.5 — параметры моделей.

Таблица 4.4. Критерии качества моделей

Уравнение	Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент детерминации	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
8156	0,99451036	0,99268048	1,625215	1268,1291
34	0,99448837	0,99265116	1,628467	1263,0418

Таблица 4.5. Параметры моделей

Уравнение	Параметр	Ошибка	t-критерий	Доверительные пределы	
8156	$a = 16,756896$	0,739904	22,647384	15,007301	18,506492
	$b = 0,434280$	0,015678	27,700111	0,397208	0,471353
34	$a = 2,825087$	0,044330	63,728123	2,720262	2,929911
	$b = 0,432491$	0,015747	27,465521	0,395256	0,469726

Сумма квадратов отклонений рассчитанных значений отклика от экспериментальных составила для модели 8156 — 18,407313, а для модели 34 — 18,563329

Анализ приведенных данных свидетельствует о том, что уравнение $y = a \cdot x^b$ (8156) обеспечивает, в сравнении с уравнением $\ln y = a + b \cdot \ln x$ (34), получение более высоких значений коэффициентов детерминации, критерия Фишера, меньшего уровня среднего квадратичного отклонения и суммы квадратов отклонений рассчитанных значений отклика от экспериментальных. Поскольку коэффициент $a = 2,825087$ в уравнении 34 соответствует логарифму соответствующего коэффициента «a» в уравнении 8156, целесообразно найти величину $\exp(2,825087) = 16,862412$ и сравнить ее с 16,756896. Первое значение на 0,630% больше. А коэффициент «b», наоборот, больше на 0,414% в случае модели 8156. Если нарисовать рядом две кривые $y = 16,756896 \cdot x^{0,434280}$ и $y = 16,862412 \cdot x^{0,432491}$, то они, конечно же, сольются. Поэтому можно использовать различные преобразования x и y , чтобы получить линейные уравнения, но при этом следует помнить, что в этом случае не обеспечивается минимальная сумма квадратов отклонений рассчитанных значений отклика от экспериментальных.

Итак, 107 уравнений с двумя параметрами, но в этих уравнениях можно ввести преобразования и по x , и по y . И тут уже никакого воображения не хватает.

Трехпараметрических моделей в каталоге, как уже упоминалось, 630.

Рассмотрим трехпараметрические модели, фигурирующие в книге К. А. Семендяева (табл. 4.6).

Таблица 4.6. Трехпараметрические модели

Уравнение	№	Уравнение	№	Уравнение	№
$y = a + b \cdot x^c$	8010	$y = a + b \cdot \exp(c \cdot x)$	8002	$y = a + b \cdot x + c \cdot x^2$	1003
$y = (a + c \cdot x) / (1 + b \cdot x)$	7001	$\ln y = a + b \cdot x + c \cdot x^2$	1213	$1/y = a + b \cdot x + c \cdot x^2$	1423
$1/y = a + b \cdot x + c/x$	1436	$y = a + b/x + c/x^2$	1203	$y = a + b \cdot (\ln x)^2 + c \cdot \ln x$	1147
$y^2 = a + b \cdot x + c \cdot x^2$	6131	$y = a + b \cdot x + c \cdot \ln x$	1222	$y = a + b \cdot x + c \cdot \exp(x)$	1007

Использованное в книге К. А. Семендяева, Л. М. Батунера и М. Е. Позина уравнение $y = a \cdot \exp(b \cdot x^c)$ при логарифмировании дает: $\ln y = \ln a + b \cdot x^c$, т. е. уравнение 8010 с преобразованием по y . Напоминаем, после ввода данных (столбцов x и y) нажимается клавиша «Calculation» и далее вводится $y = \ln y$ (причем, в этой записи y = уже пропечатано, надо только добавить $\ln y$). Уравнение $y = a \cdot \exp(b \cdot \exp(c \cdot x))$ можно получить с помощью модели 8002 и описанной выше подстановки по y .

В арсенале программы *Table Curve 2D* есть еще много нелинейных относительно параметров уравнений о трех коэффициентах. Некоторые из них приведены во второй главе.

Из моделей, содержащих больше трех параметров, а их несметное количество, упомянем сумму двух экспонент $y = a \cdot \exp(-x/b) + c \cdot \exp(-x/d)$ (уравнение 8016). А сумму двух степенных функций $y = a \cdot x^b + c \cdot x^d$ можно привести к уравнению 8016 подстановкой $\ln x$ вместо x .

В тексте упоминалось словосочетание «Метод наименьших квадратов». Чуть подробнее об этом, учитывая его чрезвычайную важность [4, с. 234–239; 5, с. 31–35; 9, 9–52; 12, с. 48–52; 13, 102–108; 14, 282–284; 15, 452–455; 18, с. 77–81; 22, с. 358–367; 23, с. 239–254; 24, с. 366–392; 25, с. 160–163; 26, 109–136; 27, с. 70–85; 28, с. 72–77; 29, с. 41–46; 30, с. 56–62; 31, с. 107–117; 32, с. 203–213; 33, с. 7–35; 34, с. 570–574; 35, 146–165; 36, с. 321–323; 37, с. 7–11; 38, с. 14–22; 39, с. 323–256; 40, с. 66–68; 41, с. 301–304; 42, с. 214–233; 43, с. 314–322; 44, с. 397–399; 45, с. 258–268].

В начале XIX столетия Лежандр (1806) и Гаусс (1809) независимо друг от друга нашли метод, с помощью которого можно целесообразно использовать избыточное (добавочное) число измерений для определения необходимых неизвестных по результатам опыта.

Лежандр разработал тот способ комбинации результатов измерений, который, по существу, без каких-либо изменений сохранился до наших дней.

По соображениям Лежандра, из всех принципов, предлагаемых для ограничения крайних ошибок в наиболее узких пределах независимо от их знака, не существует более простого, чем тот, который обращает в минимум сумму квадратов ошибок. При помощи этого правила между ошибками устанавливается как бы некоторое равновесие, не позволяющее крайним из них по величине оказывать преобладающее влияние и вполне пригодное для того, чтобы раскрыть картину состояния всей системы, наиболее близкую к истине.

Параметры выбранной, эмпирической формулы определяются так, чтобы сумма квадратов отклонений от табличных значений функции была наименьшей.

Это условие приближения эмпирической табличной функции является простым соглашением.

Определение параметров эмпирической формулы на основе принципа Лежандра производится следующим образом. Последовательная подстановка всех табличных значений аргумента и функции в выбранную формулу с буквенными параметрами приводит к системе условных уравнений для определения численных значений параметров по наблюдениям. Эти уравнения в общем случае несовместны, причем

несовместность объясняется не только случайными ошибками измерений, но и тем, что выбранная формула есть только приближение к неизвестной точной формуле и что фактически мы пренебрегаем зависимостью функции от других аргументов. По условным уравнениям составляются нормальные уравнения, которые и решают одним из указанных выше способов.

Так как вычисления удобно выполнять в случае линейных условных уравнений, то формулы и следует выбирать так, чтобы они были линейными относительно параметров или надлежащими подстановками легко приводились бы к линейным.

Средние квадратичные ошибки неизвестных здесь правильнее называть *средними квадратичными отклонениями*. Однако эти величины все-таки следует вычислять, так как они дают представление о надежности вычисленных значений параметров, в частности показывают, сколько знаков в параметрах следует сохранить.

Рассмотрим несколько примеров.

Пример 1. Зависимость теплового эффекта вулканизации (q , МДж/м³) от температуры вулканизации (T , °С). Резиновая смесь на основе каучука СКН-26. Экспериментальные данные сведены в табл. 4.7.

Таблица 4.7. Результаты определения теплового эффекта

T , °С	140	150	160	170	180	190	200
q , МДж/м ³	7,6	12,0	14,4	18,8	20,8	25,2	27,6

После ввода данных в редактор программы *Table Curve 2D* и нажатия клавиши «*Process*» появляется зависимость в виде ломаной линии (рис. 4.5) и альтернатива: найти все уравнения (*Curve-Fit All Equations*), найти линейные уравнения (*Curve-Fit Linear Equations*) или простые уравнения (*Curve-Fit Simple Equations*). Проще, наверное, трудно себе представить, поэтому выбираем третий вариант.

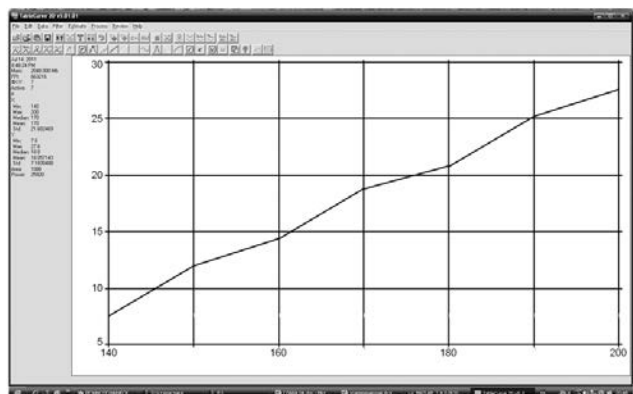


Рис. 4.5. Ломаная линия

Рассчитано 103 уравнения. Основные критерии ранжирования уравнений: коэффициент детерминации (R^2), скорректированный коэффициент детерминации ($R^2_{\text{ск}}$), стандартная ошибка (S , среднее квадратичное отклонение) и критерий Фишера (F). Подробнее об этом во второй главе.

По всем перечисленным критериям тройка лидеров выглядит следующим образом: 1) $y = a + b \cdot x^{0.5}$ (№12 по каталогу программы *Table Curve 2D*); 2) $y = a + b \cdot (\ln x)^2$ (№10); 3) $y = a + b \cdot x^{0.5} \cdot \ln x$ (№9).

А что подсказывает здравый смысл относительно выбора подходящего уравнения? Провести через эти точки прямую линию, хотя уравнение прямой (№ 1) и занимает девятое место в списке.

Вот такую картину мы окончательно получим (рис. 4.6).

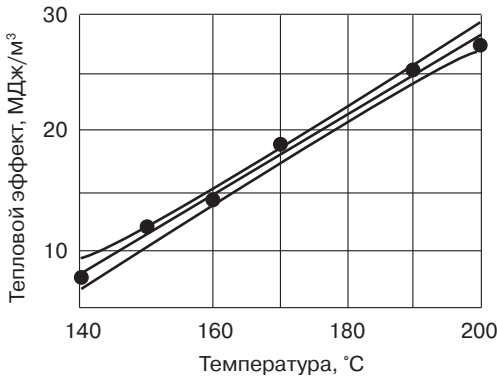


Рис. 4.6. Зависимость теплового эффекта вулканизации от температуры

Напомним, что две линии выше и ниже прямой характеризуют 95 %-ные доверительные пределы. Если много-много раз повторять наблюдения, то 95% попадет в коридор между верхней и нижней линиями.

Теперь нарисуем несколько таблиц. Прежде всего, покажем критерии качества линейной модели $y = a + b \cdot x$ (табл. 4.8).

Таблица 4.8. Критерии качества модели

Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент детерминации	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
0,9935026580	0,9902539870	0,6342599737	764,54545455

В рассматриваемом случае обычно оценивают адекватность модели, которую характеризуют различием между экспериментально полученными значениями отклика и рассчитанными с помощью модели, и содержательность модели, показывающую, что дает данная модель в сравнении с моделью $y = a$ (константа).

Содержательность модели характеризуют отношением суммы квадратов разности между экспериментальными значениями и средним из них и суммы квадратов отклонений экспериментальных значений от рассчитанных. И чем это отношение больше, тем выше содержательность модели. Предсказательная способность оценивается с помощью клавиши *Eval*, где можно задать x , найти y и оценить ошибку предсказания.

Следующая таблица показывает числовые значения коэффициентов, характеризует их значимость (по критерию Стьюдента t) и доверительные интервалы для коэффициентов (табл. 4.9).

Таблица 4.9. Параметры модели

Параметр	Ошибка	t -критерий	95% доверительные пределы	
$a = -38,2857143$	2,051738934	-18,6601295	-43,5598771	-33,0115514
$b = 0,331428571$	0,011986387	27,65041509	0,300616583	0,362240560

Теперь рассмотрим результаты дисперсионного анализа (табл. 4.10).

Таблица 4.10. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	307,56571	1	307,56571	764,545
Ошибка	2,0114286	5	0,40228571	
Сумма	309,57714	6		

Еще одна таблица (4.11) дает нам представление об отклонениях рассчитанных значений y_p от экспериментальных y (невязках) и 95% доверительных пределах для отклика.

Таблица 4.11. Экспериментальные и рассчитанные значения теплового эффекта

x , °C	y , МДж/м ³	y_p , МДж/м ³	$y - y_p$	$y - y_p$, %	Доверительные пределы	
140	7,6	8,1143	-0,5143	-6,7669	7,0033	9,2252
150	12,0	11,4286	0,5714	4,7619	10,5571	12,3001
160	14,4	14,7429	-0,3429	-2,3810	14,0539	15,4318
170	18,8	18,0571	0,7429	3,9514	17,4409	18,6734
180	20,8	21,3714	-0,5714	-2,7473	20,6825	22,0604
190	25,2	24,6857	0,5143	2,0408	23,8142	25,5572
200	27,6	28,0000	-0,4000	-1,4493	26,8891	29,1109

Принятие решений относительно допустимых отклонений рассчитанных значений от экспериментальных зависит, естественно, от сущности, механизма изучаемых явлений, свойств объекта анализа, использованных методик. Для рассматриваемого случая максимальная абсолютная погрешность $0,74 \text{ МДж/м}^3$, максимальная относительная погрешность $6,77\%$ вполне сойдет.

Для наглядного представления о невязках приведем два графика (рис. 4.7) в натуральном и процентном выражении.

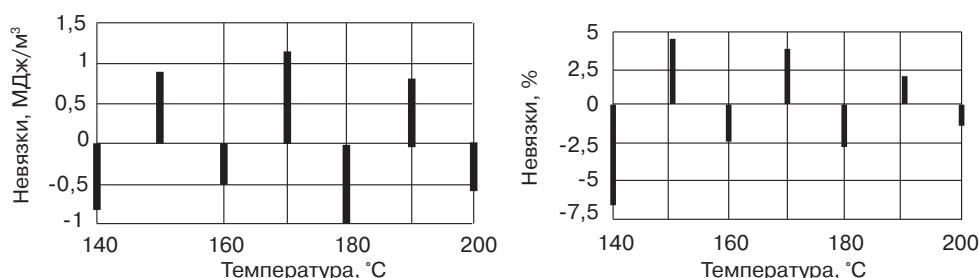


Рис. 4.7. Невязки в определении теплового эффекта вулканизации

Пример 2. Зависимость прочности резин (σ МПа) от продолжительности вулканизации (t , мин). Резиновая смесь на основе каучука SBR 1500. Экспериментальные данные сведены в табл. 4.12.

Таблица 4.12. Результаты определения прочности

t , мин	15	20	30	40	50	60	70	80	90
σ , МПа	12,9 12,7	23,4 23,0	25,8 26,0	25,2 25,0	24,2 24,7	24,7 24,5	24,8 24,7	24,0 24,3	24,2 23,6

После ввода данных в редактор все той же программы *Table Curve 2D* и нажатия клавиши «*Process*» появляется зависимость в виде ломаной линии (рис. 4.8) с максимумом.

Все уравнения надо искать (*Curve-Fit All Equations*).

Рассчитано 3506 уравнений.

Основные критерии ранжирования уравнений прежние: коэффициент детерминации (R^2), скорректированный коэффициент детерминации ($R_{ск}^2$), стандартная ошибка (S , среднее квадратичное отклонение) и критерий Фишера (F). Рассмотрим эти критерии.

Коэффициент детерминации. Первые два места программа решила не назначать. Третье почетное место заняло уравнение № 6061 по каталогу: $y = a + bx + cx^2 + \dots + lx^{11}$.

Но взгляните на график (рис. 4.9). Чем можно объяснить такой волнообразный характер изменения прочности, и изгиб в конце кривой? И темное очертание в начале? Вывод – не годен.

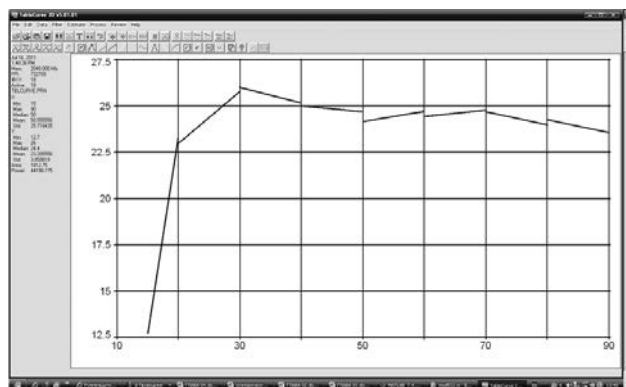


Рис. 4.8. Ломаная линия

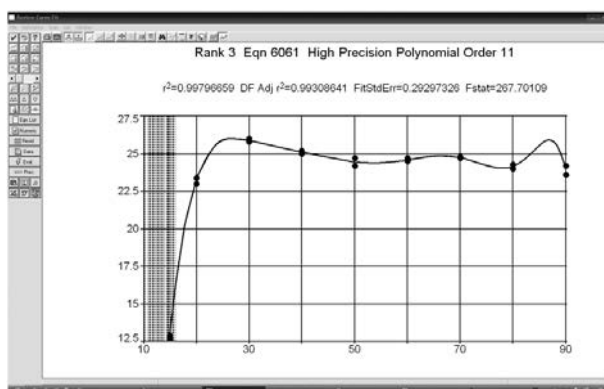


Рис. 4.9. Модель 6061

Скорректированный коэффициент детерминации. На первом месте уравнение 6703: $y = a + bx^{0.5} + cx + dx^{1.5} + ex^2 + fx^{2.5} + gx^3 + hx^{3.5}$. На втором и третьем месте такие же длинные уравнения (6203 и 6305) с восьмью коэффициентами.

Стандартная ошибка. Совершенно такой же ассортимент призеров, что и в предыдущем случае.

Критерий Фишера. На первых местах: 6845, 6808 и 6809. Ряды, построенные из тригонометрических (\cos и \sin) и гиперболических составляющих с количеством параметров 11, 9 и 10, соответственно.

Описывать кривую этими графиками и говорить, что амплитуда волн в пределах ошибки опыта? Можно, если нет времени искать дальше.

Попробуем поступить следующим образом. Прежде всего, надо, наряду с графиком, показанным на рис. 4.9, ввести график производной.

Для этого надо активировать клавишу (рис. 4.10), четвертую сверху в крайнем левом ряду (Y2).



Рис. 4.10. Меню

После этого на дисплее появится график производной (рис. 4.11).

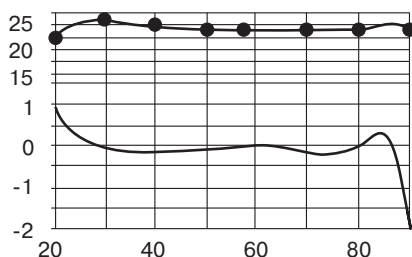


Рис. 4.11. Прочность и скорость ее изменения; модель 2164

При этом, чтобы отчетливо видеть изменения на графике производной, целесообразно (в данном случае) временно убрать нисходящую ветвь кривой, сдвинув начало координат. Начать, например, с 20 мин.

После этого просмотреть перечень моделей, фиксируя сравнительно простые модели при монотонном изменении скорости.

Таким условиям соответствует, например, уравнение 2164 (рис. 4.12).

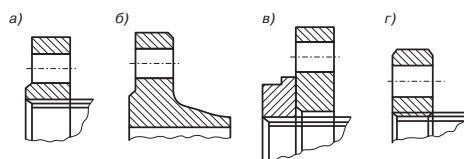


Рис. 4.12. Поиск модели

Оно имеет следующий относительно простой вид: $y = a + bx + c/\ln x + d \ln x/x$. Учтите также различный масштаб производной на графиках 4.11 и 4.12 и тогда вы убедитесь в том, что минимумом на кривой производной можно пренебречь.

Ранг (т. е. место среди 3506 уравнений) этого уравнения 621 по коэффициенту детерминации, ранг 531 по скорректированному коэффициенту детерминации, ранг 539 по стандартной ошибке и ранг 264 по критерию Фишера. Возникает вопрос, а почему по критерию Фишера такая высокая оценка? А потому, что коэффициентов в нем мало по сравнению с перечисленными выше критериями. Это уравнение является лучшим среди всех уравнений, имеющих четыре параметра.

Теперь можно приступить к оформлению окончательного графика и записи разных характеристик модели.

Напомним еще раз, что верхняя и нижняя линии соответствуют 95%-ным доверительным интервалам, а средняя линия соответствует рассчитанным по полученному уравнению значениям отклика (рис. 4.13).

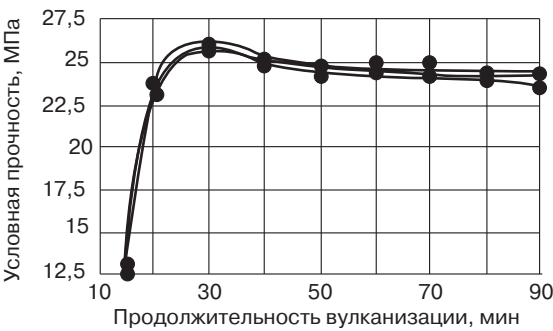


Рис. 4.13. Зависимость условной прочности резин при растяжении от продолжительности вулканизации

Максимальное рассчитанное значение прочности составляет 25,9 МПа. Если из этого значения вычесть 5%, получим 24,6 МПа. Значениям прочности в интервале от 24,6 до 25,9 соответствует интервал продолжительности вулканизации от 22 до 54 минут.

Теперь по традиции нарисуем несколько таблиц. Прежде всего, покажем критерии качества модели $y = a + bx + c/\ln x + d\ln x/x$ (табл. 4.13).

Таблица 4.13. Критерии качества модели

Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент детерминации	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
0,9950419070	0,9935163399	0,2994916475	936,55542785

Конечно, коэффициент детерминации для этой модели несколько меньше, а стандартная ошибка больше, чем в случае уравнения 6061 (0,9979665925 и 0,2929732639, соответственно), но критерий Фишера значительно выше, чем по уравнению 6061 (267,70108856)

Следующая таблица показывает числовые значения коэффициентов, характеризует их значимость и доверительные интервалы для коэффициентов (табл. 4.14).

Таблица 4.14. Параметры модели

Параметр	Ошибка	t -критерий	95% доверительные пределы	
$a = 670,8619258$	25,10935373	26,71761021	617,0077181	724,7161334
$b = -0,36819332$	0,009903273	-37,1789523	-0,38943373	-0,34695291
$c = -3608,68668$	145,9965775	-24,7176114	-3921,81819	-3295,55516
$d = 3766,882767$	159,6091274	23,60067265	3424,555235	4109,210299

Теперь рассмотрим результаты дисперсионного анализа (табл. 4.15).

Таблица 4.15. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	252,01371	3	84,00457	936.555
Ошибка	1,2557335	14	0,089695247	
Сумма	253,26944	17		

Влияние фактора весьма существенно на фоне ошибки.

Следующая таблица (4.16) характеризует отклонения рассчитанных значений y_p от экспериментальных y и 95% доверительные пределы для отклика.

Таблица 4.16. Экспериментальные и рассчитанные значения прочности

x , мин	y , МПа	y_p , МПа	$y - y_p$	$y - y_p$, %	Доверительные пределы	
15	12,9 12,7	12,822069	0,0779312 -0,122069	0,6041175 -0,961172	12,372752	13,271385
20	23,4 23,0	23,117467	0,2825327 -0,117467	1,2074047 -0,510727	22,739319	23,495616
30	25,8 26,0	25,875074	-0,075074 0,1249256	-0,290986 0,4804832	25,597296	26,152853
40	25,2 25,0	25,262666	-0,062666 -0,262666	-0,248675 -1,050665	25,015877	25,509455

Таблица 4.16, окончание

x , мин	y , МПа	y_p , МПа	$y - y_p$	$y - y_p$, %	Доверительные пределы	
50	24,7 24,2	24,714406	-0,014406 -0,514406	-0,058326 -2,125647	24,461351	24,967462
60	24,7 24,5	24,435686	0,2643135 0,0643135	1,0700953 0,2625042	24,209569	24,661804
70	24,8 24,7	24,307528	0,4924723 0,3924723	1,9857755 1,5889568	24,104309	24,510746
80	24,0 24,3	24,218695	-0,218695 0,0813050	-0,911229 0,3345884	23,973476	24,463914
90	23,6 24,2	24,096408	-0,496408 0,1035923	-2,103423 0,4280673	23,741905	24,450911

Из рис. 14.13 и табл. 4.16 явствует, что ряд точек не входит в доверительные интервалы. Однако уровень погрешностей, характеризующих отличия экспериментальных значений отклика от рассчитанных по приведенному уравнению не превышает 0,5 МПа и 2,2%

И наконец, два графика, которые иллюстрируют невязки (рис. 4.14).

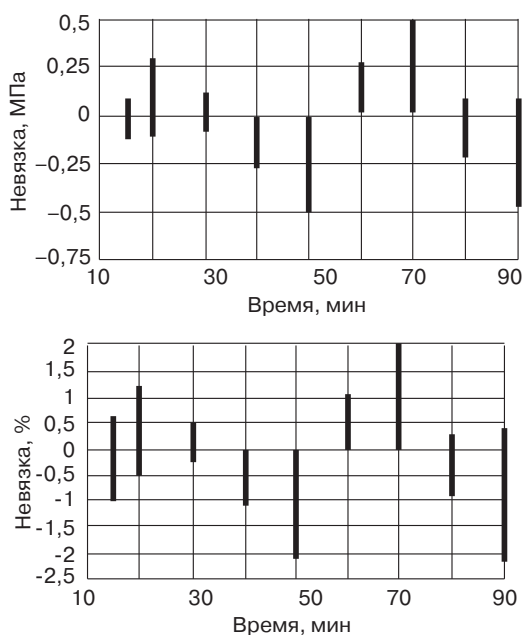


Рис. 4.14. Невязки в определении условной прочности при растяжении

Пример 3. Диаграмма состояния бинарной системы тетраметилтиурамдисульфид – дифенилгуанидин. Данные взяты из работы японского ученого Минатоя и его сотрудников (1932 г.). Экспериментальные результаты сведены в табл. 4.17 (x – содержание ускорителя тетраметилтиурамдисульфид).

Зависимость температуры от состава носит экстремальный характер и характеризуется немонотонным изменением производной.

Таблица 4.17. Результаты исследования диаграммы состояния

x	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,68	0,7	0,8	0,9	1,0
$T, ^\circ\text{C}$	146,6	140,5	134,4	128,6	121,2	111,7	101,3	90,9	92,4	100,4	106,2	109,9

После ввода данных программа рассчитывает 502 уравнения. Но эти модели не дают скачка производной в точке (0,68; 90,9).

Для решения проблемы формируем модель из двух частей. Для этого, прежде всего, из всех значений температуры (T) вычитаем минимальное значение (90,9). Берем точки в интервале по x от 0,0 до 0,68, а находящиеся вне этого интервала обнуляем. Далее находим нелинейную относительно параметров модель 8090 по каталогу программы.

Графическую интерпретацию этой модели и ее аналитическую форму можно видеть на рис. 4.15.

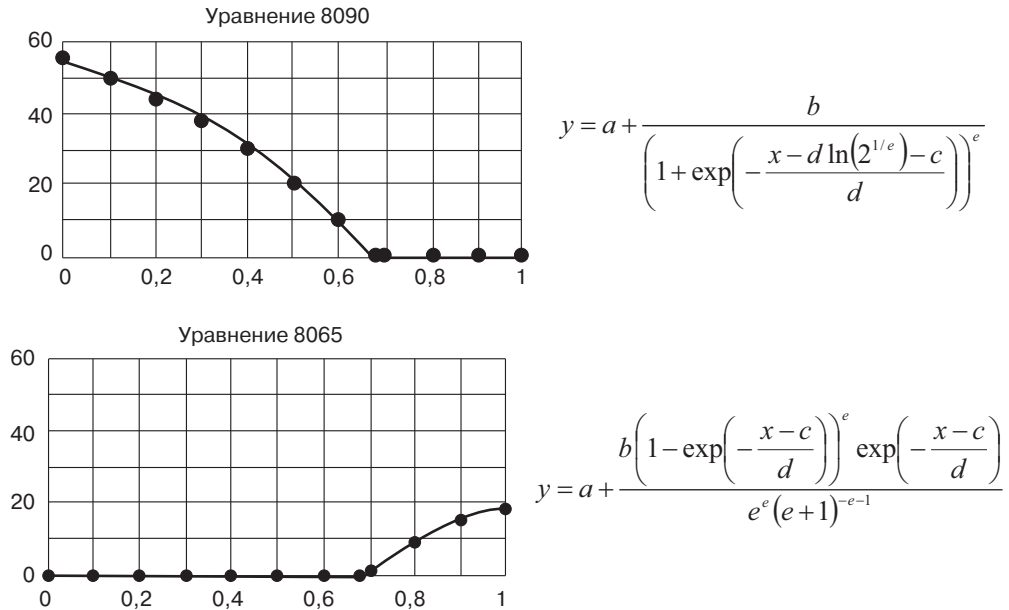


Рис. 4.15. «Конструирование» диаграммы состояния бинарной системы

Укажем параметры модели:

$a = 84,49770463, b = -84,4977065, c = 0,232790929, d = 0,000233507, e = 0,000359867$.

Теперь поступим с точностью до наоборот, т. е. обнулим отклики до экстремальной точки.

В этом случае остановимся на модели 8065.

Вот ее параметры:

$a = -2,1928e-18, b = 21,94723451, c = 0,681017453, d = 0,747186600, e = 1,118725810$.

Теперь надо наложить эти две картинки друг на друга.

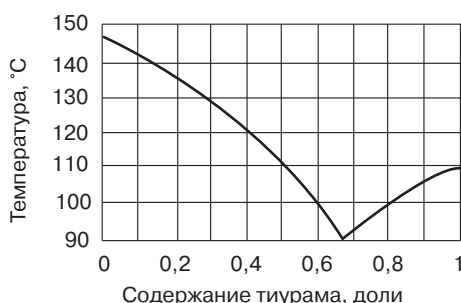
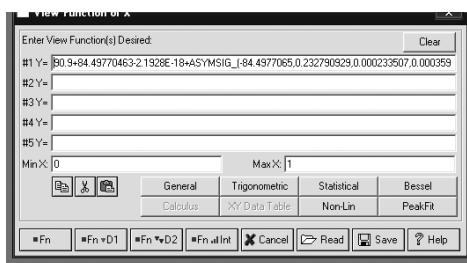


Рис. 4.16. Диаграмма состояния

Для этого в меню программы *Table Curve 2D* нажимается клавиша *Date* и далее *View Function (X)*.

Вписывается (без пробелов!) строка следующего содержания (рис. 4.16):

$Y = 90,9 + 84,49770463 - 2,1928e-18 + ASYMSIG_(-84,4977065,0,232790929,0,000233507,$

$0,000359867) + PULSEPOW_(21,94723451,0,681017453,0,747186600,1,118725810)$

$MinX = 0, MaxX = 1$.

То, что получилось, можно видеть на рис. 4.16 справа.

Пример 4. Зависимость скорости звука (u , м/с) в пенорезине от кратности пены (k). Экспериментальные данные сведены в табл. 4.18.

Таблица 4.18. Результаты определения скорости звука

k	2,5	3,0	3,5	4,0	4,5	5,0	5,5	6,0
u , м/с	158	203	230	251	269	292	303	329

Отклик (скорость звука) монотонно растет. Следовательно, можно искать среди простых моделей. Программа *Table Curve 2D* предлагает на выбор 108 уравнений. Рассмотрим победителей.

По всем критериям: 96 $y^2 = a + b \cdot x^{0,5}$; 93 $y^2 = a + b \cdot x^{0,5} \cdot \ln x$; 94 $y^2 = a + b \cdot (\ln x)^2$. Можно предложить и степенную модель 8010 $y = a + b \cdot x^c$. Ранг у нее 35. Но что

такое кратность пены? Это отношение объема пены к объему исходной латексной смеси. Если кратность пены растёт, то количество воздуха в ней возрастает, и скорость звука в пенорезине должна стремиться к скорости звука в воздухе при возрастании кратности пены. А скорость звука в воздухе в зависимости от условий составляет 330–340 м/с. Как поступить? Добавим еще одну точку при кратности пены, например, 10, и скорость зададим 334 м/с. А чтобы кривая через эту точку прошла, введем вес 100.

Если по-прежнему искать среди простых моделей, мы получим при всех критериях качества следующие: $41 \ln y = a + b/x^2$; $83 y^{0.5} = a + b/x^2$; $103 y^2 = a + b \cdot \ln x/x^2$.

Все эти уравнения характеризуются тем, что при $x \rightarrow \infty$ y стремится туда же, а нам надо, чтобы он (y) не превышал 340 м/с. Поэтому ищем все уравнения. Подошло бы уравнение $7001 y = (a + c \cdot x)/(1 + b \cdot x)$. Здесь при $x \rightarrow \infty y \rightarrow c/b$. Но программа это уравнение почему-то игнорирует. Тогда используем нелинейные по параметрам уравнения. Например, $8013 y = a + b/(1 + (x/c)^d)$.

Полученная нами зависимость представлена на рис. 4.17. Одна точка (при кратности пены, равной 6), «вылетела», что естественно. Иначе нарушилась бы монотонность кривой, которую следует контролировать по графику производной.

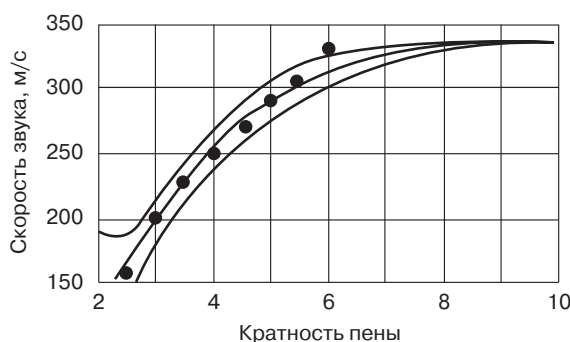


Рис. 4.17. Скорость звука в пенорезине

Доверительный интервал узкий в дополнительно введенной точке потому, что там использовался вес 100, т. е. как будто эта точка 100 раз была повторена с одинаковым результатом. Конечно, такой прием негативно отражается на качестве аппроксимации, потому что введение такого большого веса не обеспечивает должного значения минимума суммы квадратов отклонений рассчитанных значений отклика от экспериментальных.

Перейдем к формированию таблиц. В табл. 4.19 представлены критерии качества модели $y = a + b/(1 + (x/c)^d)$.

Можно констатировать достаточно низкое значение стандартной ошибки (среднего квадратичного отклонения).

Теперь отобразим численные значения коэффициентов, их значимость и доверительные интервалы для коэффициентов (табл. 4.20).

Таблица 4.19. Критерии качества модели

Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент детерминации	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
0,9937176667	0,9874353334	2,6890431394	263,62754673

Таблица 4.20. Параметры модели

Параметр	Ошибка	<i>t</i> -критерий	95% доверительные пределы	
$a = 106,2279914$	51,25675181	2,072468264	-25,5316841	237,9876669
$b = 232,0417365$	54,13506572	4,286348107	92,88311951	371,2003535
$c = 3,408420884$	0,454506239	7,499172926	2,240075398	4,576766370
$d = -3,70839755$	0,935468806	-3,96421294	-6,11309667	-1,30369842

Очень большой интервал значений доверительного интервала для коэффициента a объясняется следующим: параметр a соответствует значению y при $x = 0$; экспериментальные точки расположены «далеко» от начала координат, поэтому здесь широкий доверительный интервал. Начало этого «расширения» можно видеть в левом верхнем углу рис. 4.17. Параметр b соответствует разности максимального и минимального значения скорости звука. Соответственно $a + b = 106,2 + 232,0 = 338,2$ дает нам значение скорости звука, к которому асимптотически стремится y при возрастании x . Но диапазон доверительных пределов чрезвычайно велик. Коэффициент c соответствует кратности пены, при которой скорость звука равна половине суммы минимального и максимального значений скорости звука. И здесь вполне терпимый «коридор» по доверительным пределам.

Далее дисперсионный анализ (табл. 4.21).

Таблица 4.21. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	5718,8352	3	1906,2784	263,628
Ошибка	36,154765	5	7,230953	
Сумма	5754,99	8		

Фишер не самый большой, но бывает хуже.

Следующая таблица (4.22) дает представление о различиях между рассчитанными значениями y_p и экспериментальными y и 95% доверительных пределах для отклика.

Таблица 4.22. Экспериментальные и рассчитанные значения скорости звука

x	y , м/с	y_p	$y - y_p$	$y - y_p$, %	Доверительные пределы	
2,5	158	162,05486	-4,054859	-2,566366	139,18031	184,92941
3,0	203	195,29230	7,7076969	3,7968950	179,90224	210,68237
3,5	230	227,94808	2,0519152	0,8921370	212,50972	243,38645
4,0	251	255,70242	-4,702417	-1,873473	243,31263	268,09221
4,5	269	277,23663	-8,236630	-3,061944	265,83594	288,63733
5,0	292	293,13708	-1,137080	-0,389411	280,97974	305,29442
5,5	303	304,62646	-1,626460	-0,536785	292,21975	317,03317
6,0	329	312,89008	16,109924	4,8966335	301,18405	324,59610
10	334	334,06112	-0,061121	-0,018300	331,66775	336,45449

Максимальная абсолютная погрешность составляет 16,1 м/с, а максимальная относительная погрешность — 4,90% в той же самой точке при кратности 6 единиц. Скорость звука определяется очень точно (до четвертого знака), но резина есть резина, даже если это пенорезина.

И в заключение невязки (рис. 4.18).

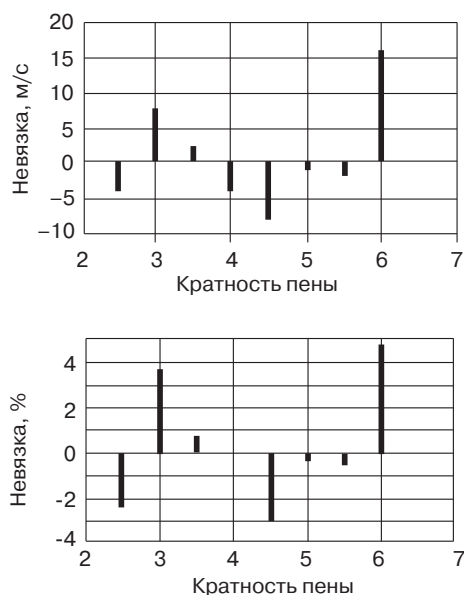


Рис. 4.18. Невязки в определении скорости звука в пенорезине

Пример 5. Аппроксимация термограммы. Берется две пластины, латеральные размеры которых (длина и ширина) гораздо больше (в 5–6 раз) толщины. Это называется бесконечные пластины. Они складываются вместе, а в них монтируются спай дифференциальной термопары (она позволяет измерять небольшие, до долей градуса, разности температур). Один спай размещается на поверхности пластины, а другой — между пластинами посередине. Все это размещается в пресс-форме и погружается в термостат. Таким образом, можно измерять тепловой эффект вулканизации.

Итак, получена зависимость разности температур в образце (ΔT , °C) в процессе вулканизации от времени (t , с). Резиновая смесь на основе СКИ-3. Экспериментальные данные сведены в табл. 4.23.

Таблица 4.23. Результаты определения перепада температур

t, c	0	300	600	900	1200	1500	1800	2100	2400	2700	3000
$\Delta T, K$	0	0	0,1	2,9	12,1	9,7	7,0	5,0	3,5	2,5	1,8

Вот что мы увидим после ввода данных (рис. 4.19).

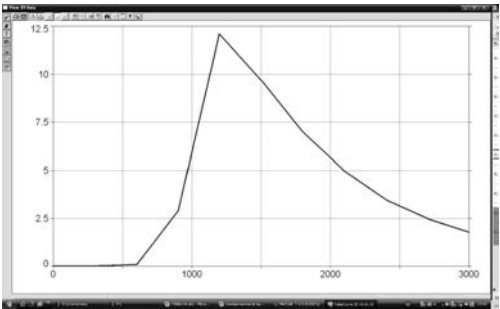


Рис. 4.19. Ломаная линия

Если теперь получить все уравнения (378), то в призерах окажутся такие жуткие соотношения, как $y = (a + c \cdot x^{0.5} + e \cdot x + g \cdot x^{1.5} + i \cdot x^2) / (1 + b \cdot x^{0.5} + d \cdot x + f \cdot x^{1.5} + h \cdot x^2)$. И все в таком духе.

Но можно поступить иначе: вызвать уравнения под маркой *Curve-Fit Peak Functions* (35 уравнений).

Лучшим по всем критериям оказалось уравнение 8063. Вот как оно выглядит:

$$y = a + \frac{b}{e} \left(1 + \exp \left(\frac{x + d \cdot \ln e - c}{d} \right) \right)^{\frac{-e-1}{e}} \cdot \exp \left(\frac{x + d \cdot \ln e - c}{d} \right) \cdot (e + 1)^{\frac{e+1}{e}}.$$

Сама кривая и линии доверительных пределов практически сливаются. Но главное то, что параметры модели можно осмыслить, прочувствовать, чего не сделаешь по формуле, записанной выше и содержащей 8 ничего не значащих с точки зрения физического смысла коэффициентов

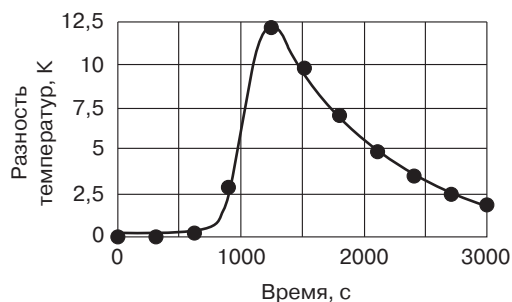


Рис. 4.20. Термограмма

Итак, что такое a ? Это значение y , когда $x = 0$. Хотелось бы, чтобы a было равно нулю. Тогда это будет уравнение 8062. Но программа это уравнение «не видит». Можно было в точке с координатами $(0, 0)$ написать большой вес, но в этом, как оказалось, нет необходимости.

Теперь b . Что такое b ? Это амплитуда термического спектра, т. е. максимальное ΔT . А что такое c ? А это мода термограммы, т. е. абсцисса максимума кривой.

Площадь под кривой S может быть рассчитана по такой формуле: $S = b \cdot d \cdot (e + 1)^{(e+1)/e}$. Эта величина пропорциональна тепловому эффекту процесса вулканизации.

Сведем данные в таблицу. Сначала — критерии качества модели (табл. 4.24).

Таблица 4.24. Критерии качества модели

Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент детерминации	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
0,9999818429	0,9999636858	0,0099412271	82610,902913

Теперь посмотрим на параметры модели (табл. 4.25).

Таблица 4.25. Параметры модели

Параметр	Ошибка	t -критерий	95% доверительные пределы	
$a = -0,00012625$	0,003112515	$-0,04056264$	$-0,00774230$	0,007489798
$b = 12,13549434$	0,027610809	439,5196919	12,06793313	12,20305556
$c = 1221,324691$	2,609321930	468,0620957	1214,939910	1227,709472
$d = 82,08022620$	0,957855530	85,69165560	79,73643815	84,42401425
$e = 10,80410362$	0,173943453	62,11273517	10,37847933	11,22972792

Параметр a практически равен нулю. Обращают на себя внимание большие значения критерия Стьюдента и узкие доверительные интервалы.

А как получилось такое огромное значение критерия Фишера (табл. 4.26)?

Таблица 4.26. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	32,65708	4	8,1642699	82610,9
Ошибка	0,00059296797	6	9,8827995e-05	
Сумма	32,657673	10		

Мизерный вклад ошибки в сумму квадратов.

Теперь сопоставление экспериментальных и расчетных значений отклика (табл. 4.27).

Таблица 4.27. Экспериментальные и рассчитанные значения разности температур

x , с	y , К	y_p	$y - y_p$	$y - y_p$, %	Доверительные пределы	
0	0	-6,41e-05	6,414e-05	—	-0,007680	0,0075516
300	0	0,0022749	-0,002275	—	-0,005348	0,0098976
600	0,1	0,0921709	0,0078291	7,8290569	0,0792003	0,1051416
900	2,9	2,9009477	-0,000948	-0,032680	2,8242417	2,9776537
1200	12,1	12,098129	0,0018712	0,0154647	12,021412	12,174846
1500	9,7	9,7298947	-0,029895	-0,308193	9,6626862	9,7971033
1800	7,0	6,9601599	0,0398401	0,5691447	6,9203171	7,0000026
2100	5,0	4,9628831	0,0371169	0,7423390	4,9259720	4,9997941
2400	3,5	3,5384368	-0,038437	-1,098195	3,4991912	3,5776825
2700	2,5	2,5228192	-0,022819	-0,912768	2,4840463	2,5615921
3000	1,8	1,7986981	0,0013019	0,0723291	1,7629202	1,8344760

Максимальная абсолютная погрешность составляет 0,040 К (7,0 – 6,96 К), а максимальная относительная погрешность – 7,83% (0,1 и 0,092 К, небольшая разница).

И наконец, невязки (рис. 4.21).

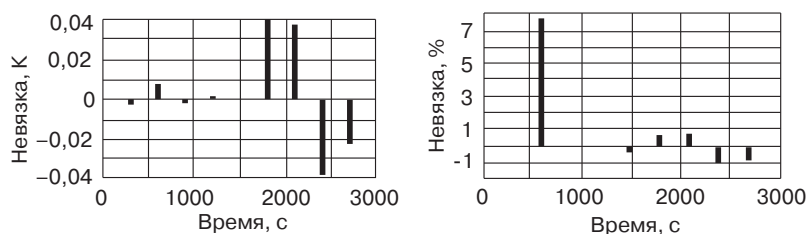


Рис. 4.21. Невязки в определении разности температур

Пример 6. Попробуем нарисовать реограмму (изотерму поперечного сшивания) со стабилизирующим значением крутящего момента [46, с. 506–547].

На рис. 4.22 показана типичная реометрическая кривая, а в верхней части рисунка — уравнение с восемью коэффициентами для описания этой кривой. Точки, по которым производилась аппроксимация, были получены с бумажного носителя с помощью упоминавшейся во второй главе программы *Frafula*. Такая формула не очень полезна, если мы хотим получить модель, несущую в себе какую-то познавательную информацию. Поэтому рассмотрим кривую, начиная с минимума крутящего момента. Ясно, что если бы прогрев происходил мгновенно, кривая не имела бы нисходящей ветви.

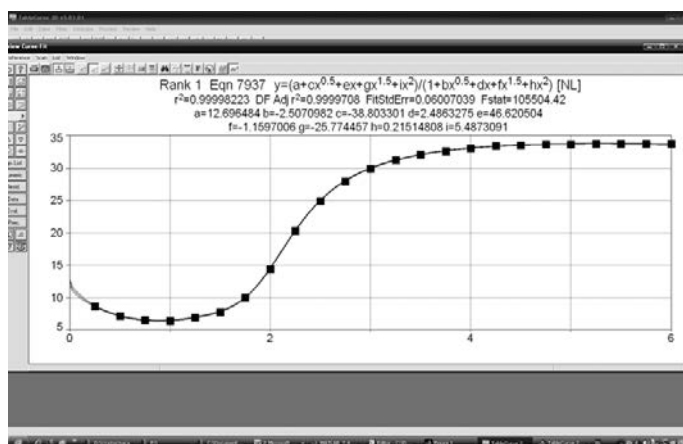


Рис. 4.22. Реограмма

Для описания этой кривой с использованием программы *Table Curve 2D* целесообразно вести поиск в папке *Curve-Fit Transition Functions*.

Программа рассчитывает 15 уравнений.

Определяем первые места.

По коэффициенту детерминации наилучшие модели расположились в такой последовательности: 8092 – 8189 – 8090 – 8082 – 8086 – 8013. Далее, по скорректированному коэффициенту детерминации: 8092 – 8189 – 8082 – 8090 – 8013 – 8086 (есть

некоторая перестановка). По стандартной ошибке: 8092 – 8189 – 8082 – 8090 – 8013 – 8086 (повтор предыдущего варианта). По критерию Фишера: 8092 – 8189 – 8082 – 8013 – 8090 – 8086. Надо отметить, что в первой шестерке неизменно одни и те же уравнения. Среди шести уравнений два (8082 и 8013) имеют четыре параметра, и четыре уравнения (8092, 8189, 8090 и 8086) имеют пять параметров. Эти модели можно назвать интегральными, поскольку они характеризуют степень завершенности процесса вулканизации. Уравнение 8189 мы рассматривать не будем по причине его чрезмерной громоздкости, а главное — из-за затруднений в интерпретации физико-химического характера параметров.

Соответствующие формулы представлены в табл. 4.28. Здесь t — время, $M(t)$ — крутящий момент.

Таблица 4.28. Модели интегральных кинетических кривых

№	Модель
8092	$M(t) = a + b \cdot \left(1 - \left(1 + \exp \left(\frac{t + d \cdot \ln(2^{1/e} - 1) - c}{d} \right) \right)^{-e} \right)$
8082	$M(t) = a + b \cdot \exp \left(- \exp \left(- \frac{t - d \cdot \ln(\ln(2)) - c}{d} \right) \right)$
8090	$M(t) = a + b \cdot \left(1 + \exp \left(- \frac{t - d \cdot \ln(2^{1/e} - 1) - c}{d} \right) \right)^{-e}$
8013	$M(t) = a + \frac{b}{1 + \left(\frac{t}{c} \right)^d}$
8086	$M(t) = a + b \cdot \left(1 - \exp \left(- \frac{t - d \cdot \ln(1 - 2^{-1/e}) - c}{d} \right) \right)^e$

Во всех представленных выше моделях параметр a соответствует минимальному крутящему моменту M_L , параметр b — приращению крутящего момента $M_H - M_L$ и параметр c — вулканизационной характеристике t_{50} .

В табл. 4.29 показаны соотношения, позволяющие выразить параметр d модели через вулканизационные характеристики.

Таблица 4.29. Выражение параметра d моделей через вулканизационные характеристики

№	Выражения для параметра d
8092	$d = \frac{t_{90} - t_{50}}{\ln(10^{1/e} - 1) - \ln(2^{1/e} - 1)} = \frac{t_{50} - t_{10}}{\ln(2^{1/e} - 1) - \ln((10/9)^{1/e} - 1)} =$ $= \frac{t_{90} - t_{10}}{\ln(10^{1/e} - 1) - \ln((10/9)^{1/e} - 1)}$
8082	$d = \frac{t_{90} - t_{50}}{\ln(\ln 2) - \ln(-\ln 0,9)} = \frac{t_{50} - t_{10}}{\ln(-\ln 0,1) - \ln(\ln 2)} = \frac{t_{90} - t_{10}}{\ln(-\ln 0,1) - \ln(-\ln 0,9)}$
8090	$d = \frac{t_{90} - t_{50}}{\ln(2^{1/e} - 1) - \ln((10/9)^{1/e} - 1)} = \frac{t_{50} - t_{10}}{\ln(10^{1/e} - 1) - \ln(2^{1/e} - 1)} =$ $= \frac{t_{90} - t_{10}}{\ln(10^{1/e} - 1) - \ln((10/9)^{1/e} - 1)}$
8013	$d = -\frac{\ln 9}{\ln t_{90} - \ln t_{50}} = -\frac{\ln 9}{\ln t_{50} - \ln t_{10}} = -\frac{2 \cdot \ln 9}{\ln t_{90} - \ln t_{10}}$
8086	$d = \frac{t_{90} - t_{50}}{\ln(1 - 2^{-1/e}) - \ln(1 - 0,9^{1/e})} = \frac{t_{50} - t_{10}}{\ln(1 - 0,1^{1/e}) - \ln(1 - 2^{-1/e})} =$ $= \frac{t_{90} - t_{10}}{\ln(1 - 0,1^{1/e}) - \ln(1 - 0,9^{1/e})}$

При преобразовании моделей для каждой из них получены соотношения между параметрами t_{10} , t_{50} и t_{90} . Эти соотношения приведены в табл. 4.30.

Таблица 4.30. Соотношения между параметрами t_{10} , t_{50} и t_{90}

№	Соотношения
8092	$(\ln(2^{1/e} - 1) - \ln((10/9)^{1/e} - 1)) \cdot t_{90} + (\ln(10^{1/e} - 1) - \ln(2^{1/e} - 1)) \cdot t_{10} =$ $= (\ln(10^{1/e} - 1) - \ln((10/9)^{1/e} - 1)) \cdot t_{50};$ $\frac{t_{90}}{t_{10}} = \frac{t_{50} + (\ln(10^{1/e} - 1) - \ln(2^{1/e} - 1)) \cdot d}{t_{50} - (\ln(2^{1/e} - 1) - \ln((10/9)^{1/e} - 1)) \cdot d};$ $t_{90} - t_{10} = (\ln(10^{1/e} - 1) - \ln((10/9)^{1/e} - 1)) \cdot d$

Таблица 4.30, окончание

№	Соотношения
8082	$(\ln(-\ln 0,1) - \ln(\ln 2)) \cdot t_{90} + (\ln(\ln 2) - \ln(-\ln 0,9)) \cdot t_{10} = (\ln(-\ln 0,1) - \ln(-\ln 0,9)) \cdot t_{50};$ $\frac{t_{90}}{t_{10}} = \frac{t_{50} + (\ln(\ln 2) - \ln(-\ln 0,9)) \cdot d}{t_{50} - (\ln(-\ln 0,1) - \ln(\ln 2)) \cdot d}; \quad t_{90} - t_{10} = (\ln(-\ln 0,1) - \ln(-\ln 0,9)) \cdot d$
8090	$(\ln(10^{1/e} - 1) - \ln(2^{1/e} - 1)) \cdot t_{90} + (\ln(2^{1/e} - 1) - \ln((10/9)^{1/e} - 1)) \cdot t_{10} =$ $= (\ln((10/9)^{1/e} - 1) - \ln(2^{1/e} - 1)) \cdot t_{50};$ $\frac{t_{90}}{t_{10}} = \frac{t_{50} + (\ln(2^{1/e} - 1) - \ln((10/9)^{1/e} - 1)) \cdot d}{t_{50} - (\ln(10^{1/e} - 1) - \ln(2^{1/e} - 1)) \cdot d};$ $t_{90} - t_{10} = (\ln(10^{1/e} - 1) - \ln((10/9)^{1/e} - 1)) \cdot d$
8013	$t_{10} t_{90} = t_{50}^2; t_{90}/t_{10} = 9^{-2/d}; t_{90} - t_{10} = t_{50} (9^{-1/d} - 9^{1/d})$
8086	$(\ln(1 - 0,1^{1/e}) - \ln(1 - 2^{-1/e})) \cdot t_{90} + (\ln(1 - 2^{-1/e}) - \ln(1 - 0,9^{1/e})) \cdot t_{10} =$ $= (\ln(1 - 0,1^{1/e}) - \ln(1 - 0,9^{1/e})) \cdot t_{50};$ $\frac{t_{90}}{t_{10}} = \frac{t_{50} + (\ln(1 - 2^{-1/e}) - \ln(1 - 0,9^{1/e})) \cdot d}{t_{50} - (\ln(1 - 0,1^{1/e}) - \ln(1 - 2^{-1/e})) \cdot d};$ $t_{90} - t_{10} = (\ln(1 - 0,1^{1/e}) - \ln(1 - 0,9^{1/e})) \cdot d$

Вернемся к реограмме, изображенной на рис 4.22. Рассмотрим критерии качества моделей (табл. 4.31).

Таблица 4.31. Критерии качества моделей

№	Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент детерминации	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
8092	0,9999213620	0,9999006678	0,1161045166	63577,507175
8082	0,9996917885	0,9996301462	0,2243172604	22704,678405
8090	0,9996928238	0,9996119879	0,2294704364	16272,301020
8013	0,9996765072	0,9996118087	0,2298108691	21631,815510
8086	0,9996872876	0,9996049949	0,2315290363	15984,134281

Уравнения расположены в порядке возрастания стандартной ошибки. Максимальная абсолютная погрешность определения отклика в ряду 8092 – 8082 – 8090 – 8013 – 8086 составила: 0,300 – 0,493 – 0,480 – 0,516 – 0,433 соответственно.

Теперь сопоставим между собой коэффициенты моделей (табл. 4.32).

Таблица 4.32. Параметры использованных уравнений

Параметр	Уравнение				
	8092	8082	8090	8013	8086
a	6,415923187	6,408169602	6,381362114	6,229658250	6,385816080
	6,522282321	6,594794788	6,584954714	6,425064155	6,589440162
	6,628641455	6,781419974	6,788547313	6,620470061	6,793064243
b	27,11402129	26,82077599	26,81556882	26,99694645	26,80995495
	27,25051715	27,07236662	27,07403768	27,26853975	27,06965990
	27,38701300	27,32395725	27,33250655	27,54013306	27,32936485
c	2,237581198	2,236569296	2,235915447	2,243402958	2,235853536
	2,245573386	2,251129930	2,251622255	2,258458936	2,251634821
	2,253565573	2,265690565	2,267329062	2,273514914	2,267416107

Для более наглядного представления о коэффициентах и их доверительных пределах построены графики (рис. 4.23).

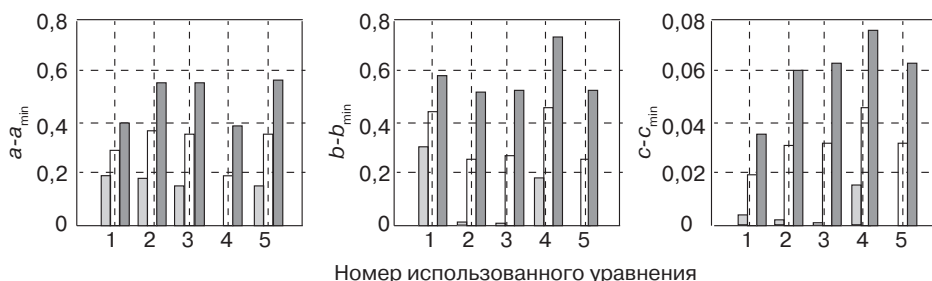


Рис. 4.23. Сопоставление параметров уравнений: 1 — 8092; 2 — 8082; 3 — 8090; 4 — 8013; 5 — 8086; левый столбец — минимальный уровень доверительных пределов, правый столбец — максимальный уровень, средний столбец — рассчитанное значение параметра

На графиках из всех значений коэффициентов вычиталось их минимальное значение. Поэтому в ряде случаев изображено лишь два столбца. Отчетливо видно, что уравнение 8092 обеспечивает максимально стабильные значения параметров.

Пользуясь приведенными выше уравнениями, можно воссоздать дифференциальное уравнение, характеризующее рассматриваемый процесс. В качестве примера рассмотрим уравнение 8013:

$$M = a + \frac{b}{1 + (t/c)^d}. \quad (4.3)$$

Поскольку a — минимальное значение крутящего момента, а b — приращение крутящего момента (разница между максимальным и минимальным крутящими моментами), можно ввести степень вулканизации:

$$\beta = (M - a)/b. \quad (4.4)$$

Тогда:

$$\beta = \frac{1}{1 + (t/c)^d} = \frac{c^d}{c^d + t^d}; \quad (4.5)$$

$$1 - \beta = 1 - \frac{c^d}{c^d + t^d} = \frac{t^d}{c^d + t^d}. \quad (4.6)$$

Берем производную по времени от степени вулканизации:

$$\frac{d\beta}{dt} = -\frac{c^d \cdot d \cdot t^{d-1}}{(c^d + t^d)^2} = -\frac{d}{t} \cdot \frac{c^d}{c^d + t^d} \cdot \frac{t^d}{c^d + t^d} = -\frac{d}{t} \cdot \beta \cdot (1 - \beta). \quad (4.7)$$

Выражаем t через β из уравнения (4.5):

$$\beta = \frac{1}{1 + (t/c)^d}; \quad 1/\beta = 1 + (t/c)^d; \quad \frac{1}{\beta} - 1 = \frac{1 - \beta}{\beta} = \frac{t^d}{c^d}. \quad (4.8)$$

Отсюда:

$$t = c \cdot \beta^{-1/d} \cdot (1 - \beta)^{1/d}; \quad \frac{1}{t} = \frac{1}{c} \cdot \beta^{1/d} \cdot (1 - \beta)^{-1/d}. \quad (4.9)$$

Подставляя полученное выражение в (4.7), получим:

$$\frac{d\beta}{dt} = -\frac{d}{c} \cdot \beta^{1+1/d} \cdot (1 - \beta)^{1-1/d} = -\frac{d}{c} \cdot \beta^{(d+1)/d} \cdot (1 - \beta)^{(d-1)/d} = -\frac{d}{c} \cdot \beta^m \cdot (1 - \beta)^n. \quad (4.10)$$

Так как $d < 0$, $n > 1$ и $m < 1$; $n + m = 2$.

Таким образом, мы «синтезировали» дифференциальное уравнение, характеризующее процесс вулканизации, здесь $k = -d/c$ — константа скорости; $n = (d - 1)/d$ — порядок реакции.

Пример 7. Построение реограммы по вулканизационным характеристикам [46, с. 514–516]. Остановимся на модели 8092 по каталогу программы *Table Curve*.

Заданы следующие значения: $M_{\min} = 7,9 = a$; $\Delta M = 41,3 - 7,9 = 33,4 = b$; $t_s = 8,4$; $t_{50} = 12,8 = c$ и $t_{90} = 22,6$. Для построения реограммы необходимо найти два параметра d и e . Из табл. 4.29 мы можем позаимствовать формулу для вычисления коэффициента d :

$$d = \frac{t_{90} - t_{50}}{\ln(10^{1/e} - 1) - \ln(2^{1/e} - 1)}. \quad (4.11)$$

Параметр d в этой формуле выражен через параметр e . Поэтому надо знать еще одну вулканизационную характеристику, например t_{10} или t_s — время начала вулканизации.

Если известно значение вулканизационной характеристики t_{10} , задача решается следующим образом: все из той же таблицы 4.29 берем две формулы для вычисления d , одну, например, через t_{90} и t_{50} , а другую — через t_{50} и t_{10} .

А теперь вычитаем одну формулу из другой:

$$\frac{t_{90} - t_{50}}{\ln(10^{1/e} - 1) - \ln(2^{1/e} - 1)} - \frac{t_{50} - t_{10}}{\ln(2^{1/e} - 1) - \ln((10/9)^{1/e} - 1)}. \quad (4.12)$$

Нетрудно понять, что это выражение равно нулю.

Теперь обращаемся к программе *Table Curve 2D*. Запускаем программу, появляется меню. Активируем кнопку *Data* (третья слева) и далее *View Function*. После этого вводим (Y = там уже написано) выражение (4.12), заменив t_{90} , t_{50} и t_{10} числами, а вместо e надо написать X . Надо записать значения $\text{Min}X$ и $\text{Max}X$ и нажать кнопку «Fn». Появится зависимость $Y = f(X)$; слева надо нажать кнопку «Eval», написать, где Y «ноль» (цифрой) и, наконец, нажать клавишу $x = \text{root}(y)$ (красную). И появится долгожданный ответ.

Если известно значение вулканизационной характеристики t_s , задача решается следующим образом: берется уравнение 8092 и вместо $M(t)$ подставляется $a + 2$, а вместо t — подставляется t_s :

$$a + 2 = a + b \cdot \left[1 - \left(1 + \exp \left(\frac{t_s + d \cdot \ln(2^{1/e} - 1) - c}{d} \right) \right)^{-e} \right]. \quad (4.13)$$

Из выражения (4.13) надо найти d :

$$d = (t_s - c) / \ln \frac{(b/(b-2))^{1/e} - 1}{2^{1/e} - 1}. \quad (4.14)$$

Теперь найдем разность:

$$\frac{t_{90} - t_{50}}{\ln(10^{1/e} - 1) - \ln(2^{1/e} - 1)} - (t_s - c) / \ln \frac{(b/(b-2))^{1/e} - 1}{2^{1/e} - 1}. \quad (4.15)$$

И это соотношение должно быть равно нулю.

Так можно получить значения коэффициентов d и e . В рассматриваемом нами случае $d = 0,6642$ и $e = 0,1091$.

На рис. 4.24 показана построенная по вычисленным коэффициентам кривая. Параметры модели отражены на рисунке.

При построении модели 8092 непосредственно по экспериментальным данным были получены следующие МНК-оценки коэффициентов:

$a = 8,2951$ (расхождение в 5,0% в сравнении с рассчитанной величиной параметра);

$b = 32,9006$ (расхождение 1,5%);

$c = 12,9369$ (расхождение 1,1%);

$d = 0,6404$ (расхождение 3,6%) и
 $e = 0,1161$ (расхождение 6,4%).

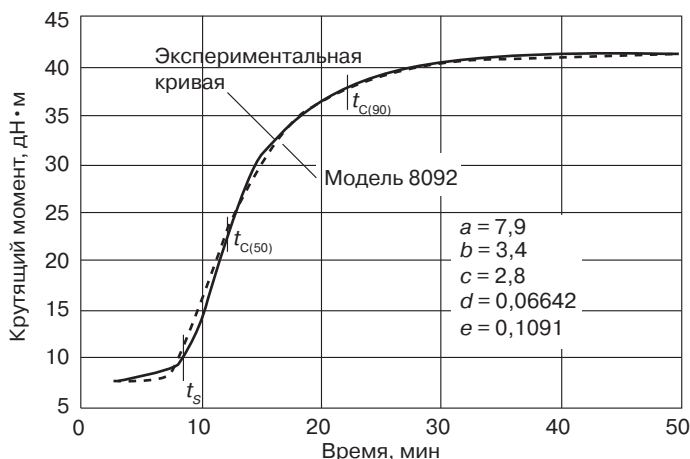


Рис. 4.24. Построение реограммы по вулканизационным характеристикам

С учетом воспроизводимости реограмм указанные расхождения можно считать приемлемыми.

Пример 8. Построение семейства линий на одном графике. Задача весьма злободневная для работающих с резиной.

Программа для построения зависимости комплекса физико-механических характеристик вулканизатов от продолжительности вулканизации. Предварительно зависимости в виде уравнений были получены в программе *Table Curve 2D*. Построение графика осуществляется с помощью программы MatLab.

Текст программы.

```
x=[15;30;45;60;90];          ВВОД ЗНАЧЕНИЙ ВРЕМЕНИ
y1=[1.7;3.4;3.8;4.2;4.0];     ВВОД ЗНАЧЕНИЙ ОТКЛИКОВ
y2=[9.8;20.5;18.9;18.6;18.6];
y3=[935;685;630;605;625];
y4=[39;39;37;37;35];
y5=[47;52;54;54;54];
x0=15:1:90;                   ЗНАЧЕНИЯ ВРЕМЕНИ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ЛИНИЙ
y01=36.16939921+0.0010442*x0.^2-0.00010442*x0.^3-4429.01269./x0.^2; y01=y01/10;
y02=-422.913153+59.54918760*x0-2.13959659*x0.^2+0.036238541*x0.^3-0.00029363*x0.^4+9.19166e-07*x0.^5; y02=y02/10;
y03=614.2274859+1483.250290*exp(-x0/9.799810762);
y04=40.08108108-0.05585586*x0;
y05=(0.018356713+0.661808707./x0.^2).^(-1);
АППРОКСИМИРУЮЩИЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ОТКЛИКОВ
```

```

хр='ВРЕМЯ ВУЛКАНИЗАЦИИ';
ур=['УСЛОВНОЕ НАПРЯЖЕНИЕ ПРИ УДЛИНЕНИИ 300%, МПа'
'УСЛОВНАЯ ПРОЧНОСТЬ ПРИ РАСТЯЖЕНИИ, МПа'
'ОТНОСИТЕЛЬНОЕ УДЛИНЕНИЕ ПРИ РАЗРЫВЕ, %'
'СОПРОТИВЛЕНИЕ РАЗДИРУ, кН/м'
'ТВЕРДОСТЬ ПО ШОРУ А'];
DLimX=min(x)*.05;
%ПЕРВЫЙ ГРАФИК
h(1) = axes('Position',[0.25 0.1 .7 .85]);
plot(x,y1,'kx','MarkerSize',12);
hold on;
plot(x0,y01,'--k','LineWidth',2);
plot(x,y2,'kp','MarkerSize',12);
plot(x0,y02,'--k','LineWidth',2);grid on
set(get(h(1),'XLabel'),'String',хр);
set(get(h(1),'YLabel'),'String',
'УСЛОВНОЕ НАПРЯЖЕНИЕ ПРИ УДЛИНЕНИИ 300%,
УСЛОВНАЯ ПРОЧНОСТЬ ПРИ РАСТЯЖЕНИИ, МПа');
set(h(1),'XLim',[min(x)-DLimX max(x)+DLimX]);
%ВТОРОЙ ГРАФИК
h(2) = axes('Position',[0.25 0.1 .7 .85]);
plot(x,y3,'rs','MarkerSize',12);
hold on;
plot(x0,y03,'--r','LineWidth',2);
set(h(2),'Visible','off');
set(h(2),'XLim',[min(x)-DLimX max(x)+DLimX]);
%ВСПОМОГАТЕЛЬНАЯ ОСЬ ВТОРОГО ГРАФИКА
h(3)=axes('Position',[0.2 0.1 .01 .85],...
'Color', 'none',...
'YLim',get(h(2),'YLim'),...
'YTick',get(h(2),'YTick'),...
'YTickLabel',get(h(2),'YTickLabel'),...
'XTick',[],...
'YColor','red');
set(get(h(3),'YLabel'),'String',
'ОТНОСИТЕЛЬНОЕ УДЛИНЕНИЕ ПРИ РАЗРЫВЕ, %');
%ТРЕТИЙ ГРАФИК
h(4) = axes('Position',[0.25 0.1 .7 .85]);
plot(x,y4,'bo','MarkerSize',12);
hold on;
plot(x0,y04,'--b','LineWidth',2);
set(h(4),'Visible','off');
set(h(4),'XLim',[min(x)-DLimX max(x)+DLimX]);
%ВСПОМОГАТЕЛЬНАЯ ОСЬ ТРЕТЬЕГО ГРАФИКА
h(5)=axes('Position',[0.15 0.1 .01 .85],...

```



```

        'Color', 'none',...
        'YLim',get(h(4),'YLim'),...
        'YTick',get(h(4),'YTick'),...
        'YTickLabel',get(h(4),'YTickLabel'),...
        'XTick',[],...
        'YColor','blue');
set(get(h(5),'YLabel'),'String','СОПРОТИВЛЕНИЕ РАЗДИРУ, кН/м');

%ЧЕТВЕРТЫЙ ГРАФИК
h(6) = axes('Position',[0.25 0.1 .7 .85]);
plot(x,y5,'g^',...
      'MarkerSize',12);
hold on;
plot(x0,y05,'--g',...
      'LineWidth',2);
set(h(6),'Visible','off');
set(h(6),'XLim',[min(x)-DLimX max(x)+DLimX]);
%ВСПОМОГАТЕЛЬНАЯ ОСЬ ЧЕТВЕРТОГО ГРАФИКА
h(7)=axes('Position',[0.10 0.1 .01 .85],...
          'Color', 'none',...
          'YLim',get(h(6),'YLim'),...
          'YTick',get(h(6),'YTick'),...
          'YTickLabel',get(h(6),'YTickLabel'),...
          'XTick',[],...
          'YColor','green');
set(get(h(7),'YLabel'),'String','ТВЕРДОСТЬ ПО ШОРУ А');

```

После вызова программы нажимается клавиша «*Debug*» и далее «*Run*» ... и появляется такое изображение (рис. 4.25).

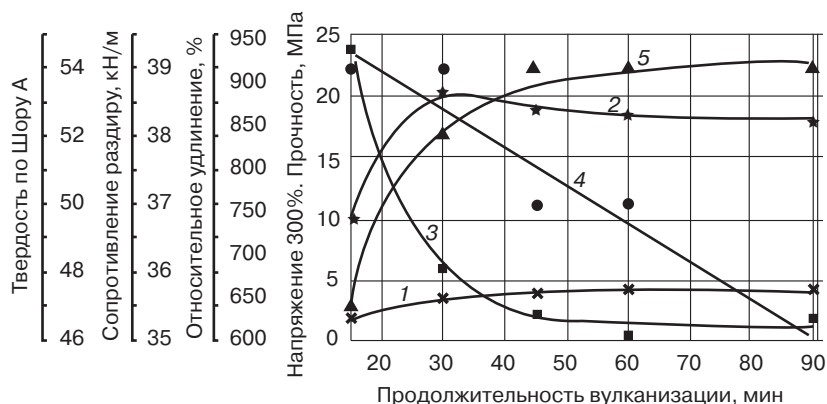


Рис. 4.25. Зависимость физико-механических показателей резин от продолжительности вулканизации

Обратите внимание, что цвет линий на графиках и цвет маркеров совпадают с цветом вертикальных осей и надписей возле них: 1 — условное напряжение при удлинении 300%; 2 — условная прочность при растяжении; 3 — относительное удлинение при разрыве; 4 — сопротивление раздиру; 5 — твердость по Шору А.

Пример 9. Анализ погрешностей при исследовании свойств эластомерных систем.

При исследовании свойств резиновых смесей и вулканизатов достаточно часто возникают экстремальные зависимости, интерпретация которых неоднозначна, в силу наличия погрешностей экспериментальных определений и ошибок при вычислении параметров моделей.

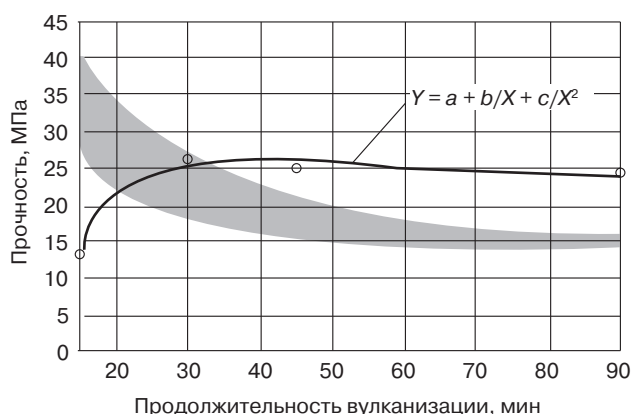


Рис. 4.26. Зависимость прочности вулканизатов от продолжительности вулканизации

Рассмотрим достаточно простой пример изучения зависимости условной прочности при растяжении резин на основе бутадиен-стирольного каучука от продолжительности вулканизации.

Экспериментальные точки и аппроксимирующая кривая показаны на рис 4.26.

Уравнение получено с использованием программы *Table Curve 2D*.

В качестве аппроксимирующей модели было выбрано соотношение, показанное на рис. 4.26.

Критерии качества модели, параметры модели и результаты дисперсионного анализа даны в табл. 4.33, 4.34 и 4.35.

Таблица 4.33. Критерии качества модели

Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент детерминации	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
0,9928	0,9711	0,6492	137,3

Таблица 4.34. Параметры модели

Параметр	Ошибка	<i>t</i> -критерий	95% доверительные пределы	
$a = 20,1402$	1,2675	15,890	14,6865	25,5938
$b = 417,563$	83,903	4,977	56,559	778,567
$c = -7880,71$	1027,68	-7,668	-12302,48	-3458,94

Таблица 4.35. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	$SSR = 115,70$	$m - 1 = 2$	$MSR = 57,85$	$F = 137,3$
Ошибка	$SSE = 0,84$	$n - m = 2$	$MSE = 0,42$	
Сумма	$SSM = 116,54$	$n - 1 = 4$		

Отклонения экспериментальных значений отклика (прочности) от рассчитанных с помощью этой модели не отличаются более чем на 3%. Несложно показать, что абсцисса экстремума (максимума) кривой x_c выражается через параметры следующим образом: $x_c = -2c/b$.

Тогда, варьируя параметры модели в пределах, указанных в табл. 4.34, можно найти координаты (абсциссу и ординату) максимума кривой.

Множество найденных таким образом точек в виде своеобразного «облака» дано на рис. 4.26. Причем на рис. 4.26 область значений по абсциссе составляет (15;90) мин и по ординате — (0;45) МПа.

Координаты экстремума кривой при указанном варьировании параметров составили по абсциссе от 8,9 мин до 433 мин, а по ординате — от 14,8 МПа до 58,4 МПа (между прочим, через 8,9 мин вулканизации).

Цифры, мягко говоря, не реальные.

Следовательно, такая широкая область варьирования параметров в данном случае не приемлема, хотя большинство программных продуктов ориентировано на использование 95%-ных доверительных пределов.

В рассматриваемом случае разумнее варьировать значения параметров в определенных заранее заданных пределах.

Результат такого подхода показан на рис. 4.27.

Количество примеров, которые иллюстрируют особенности построения эмпирических формул, можно было бы многократно увеличить, но уже из приведенного перечня видны богатые возможности программы *Table Curve 2D* при решении такого рода задач.

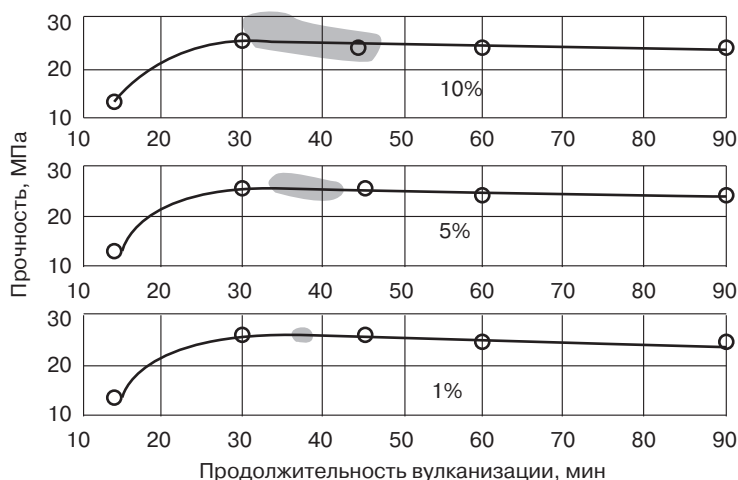


Рис. 4.27. Смещение координат максимума кривой прочности при варьировании параметров модели в пределах 10, 5 и 1%

Литература

1. Зельдович Я.Б., Мышкис А.Д. Элементы прикладной математики. — М.: Наука, 1972. — 592 с.
2. Сквайрс Дж. Практическая физика / Пер. с англ. — М.: Мир, 1971. — 246 с.
3. Хальд А. Математическая статистика с техническими приложениями / Пер. с англ. М.: Изд. И.Л. 1956. — 664 с.
4. Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами / Пер. с англ. М.: Мир, 1973. — 957 с.
5. Рузинов Л.П., Слободчикова Р.И. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. — М.: Химия, 1980. — 280 с.
6. Кнотек М., Войта Р., Шефц И. Анализ металлургических процессов методами математической статистики / Пер. с чешск. — М.: Металлургия, 1968. — 211 с.
7. Пустыльник Е.И. Статистические методы анализа и обработки наблюдений. — М.: Наука, 1968. — 288 с.
8. Пановский Г.А., Брайер Г.В. Статистические методы в метеорологии / Пер. с англ. — Л.: Гидрометеиздат, 1972. — 204 с.
9. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ / Пер. с англ. — М.: Статистика, 1973. — 392 с.
10. Доерфель К. Статистика в аналитической химии / Пер. с нем. М.: Мир, 1969. — 247 с.
11. Грановский Ю.В. Основы планирования экстремального эксперимента при оптимизации многофакторных технологических процессов. — М.: Изд. МИНХ, 1971. — 73 с.

12. Себер Дж. Линейный регрессионный анализ / Пер. с англ. — М.: Мир, 1980. — 456 с.
13. Бельнов В.К. Статистические методы оценки параметров математических моделей химических процессов. — М.: Изд. МГУ, 1991. — 160 с.
14. Монтгомери Д.К. Планирование эксперимента и анализ данных / Пер с англ. — Л.: Судостроение, 1980. — 384 с.
15. Джонсон Н., Лион Ф. Статистика и планирование эксперимента в технике и науке, методы обработки данных / Пер. с англ. — М.: Мир, 1980. — 510 с.
16. Шторм Р. Теория вероятностей. Математическая статистика. Статистический контроль качества / Пер. с нем. М.: Мир, 1970. — 368 с.
17. Де Грот М. Оптимальные статистические решения / Пер. с англ. — М.: Мир, 1974. — 491 с.
18. Льюис К.Д. Методы прогнозирования экономических показателей / Пер. с англ. — М.: Финансы и статистика, 1986. — 134 с.
19. Семендяев К.А. Эмпирические формулы. — М.-Л.: Гостехтеориздат, 1933. — 88 с.
20. Батунер Л.М., Позин М.К. Математические методы в химической технике. — Л.: Химия, 1968. — 824 с.
21. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов. — М.: Академкнига, 2006. — 415 с.
22. Яковлев К.П. Математическая обработка результатов измерений. — М.: Гостехтеориздат, 1953. — 383 с.
23. Щиголев Б.М. Математическая обработка наблюдений. — М.: Наука, 1969. — 544 с.
24. Гутер Р.С., Овчинский Е.В. Элементы численного анализа и математической обработки результатов опыта. — М.: Наука, 1970. — 432 с.
25. Мазмишвили Л.И. Способ наименьших квадратов. — М.: Недра, 1968. — 438 с.
26. Кендалл М.Дж., Стьюарт А. Теория распределений / Пер. с англ. — М.: Наука, 1966. — 587 с.
27. Кассандрова О.Н., Лебедев В.В. Обработка результатов наблюдений. — М.: Наука, 1970. — 104 с.
28. Планирование эксперимента в исследованиях технологических процессов. Под ред. Э.К. Лецкого / Пер. с нем. — М.: Мир, 1977. — 552 с.
29. Львовский В.Н. Статистические методы построения эмпирических формул. — М.: Высшая школа, 1982. — 224 с.
30. Румшинский Л.З. Математическая обработка результатов эксперимента. — М.: Наука, 1971. — 192 с.
31. Чарыков А.К. Математическая обработка результатов химического анализа. — Л.: Изд. ЛГУ, 1977. — 120 с.
32. Румшинский Л.З. Элементы теории вероятностей. — М.: Наука, 1970. — 256 с.
33. Успенский А.Б., Федоров В.В. Вычислительные аспекты метода наименьших квадратов при анализе и планировании регрессионных экспериментов. — М.: Изд. МГУ, 1975. — 168 с.
34. Королюк В.С., Портенко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф. Справочник по теории вероятностей и математической статистике. — М.: Наука, 1985. — 640 с.

35. Борель Э.М., Дельтейль Р., Юрон Р. Вероятности, ошибки / Пер. с франц. — М.: Статистика, 1972. — 176 с.
36. Ланцош К. Практические методы прикладного анализа / Пер. с англ. — М.: Физматгиз, 1961. — 524 с.
37. Сычевская И.Д. Планирование научного эксперимента. — М.: Изд. ЦНИИТЭИ приборостроения, 1976. — 75 с.
38. Хампель Ф., Рончетти Э., Рауссеу П., Штаэль В. Робастность в статистике. Подход на основе функций влияния / Пер. с англ. — М.: Мир, 1989. — 512 с.
39. Хемминг Р.В. Численные методы / Пер. с англ. — М.: Наука, 1968. — 400 с.
40. Зажигаев Л.С., Кишьян А.А., Романиков Ю.И. Методы планирования и обработки результатов физического эксперимента. — М.: Атомиздат, 1978. — 231 с.
41. Гурский Е.И. Теория вероятностей с элементами математической статистики. — М.: Высшая школа, 1971. — 328 с.
42. Первозванский А.А. Поиск. — М.: Наука, 1970. — 263 с.
43. Мэтьюз Дж., Уокер Р. Математические методы физики / Пер. с англ. — М.: Атомиздат, 1972. — 397 с.
44. Курант Р., Роббинс Г. Что такое математика? / Пер. с англ. — М.: Просвещение, 1967. — 558 с.
45. Налимов В.В. Применение математической статистики при анализе вещества. — М.: Физматгиз, 1960. — 430 с.
46. Агаянц И.М. Натуральный каучук, в поисках рецепта. — М.: Петергоф, 2010. — 700 с.

Глава 5. Выбор параметров оптимизации и факторов

Если вам нужно решить какую-то проблему, например, рецептурного характера, есть два пути. Первый — это собрать специалистов, поставить перед ними задачу, и они, возможно, скажут, что надо делать — то есть решать проблему теоретически, не прибегая к эксперименту. Второй путь — сделать сжатый по объему эксперимент и получить, таким образом, минимум факторов (содержание и тип компонентов, технологические факторы и пр.) и откликов (характеристик, свойств). А можно оба подхода объединить, а также обратиться к литературе: ведь кто-то, наверняка, уже делал что-то подобное.

Но сначала несколько замечаний по поводу откликов и факторов [1, с. 30–31].

Отклик (*параметр* оптимизации) — это признак, по которому мы оптимизируем процесс. Очевидно, что его выбор следует из цели исследования. Если, например, проводится исследование по улучшению экономических показателей заводского процесса, то естественно выбрать параметром оптимизации себестоимость или прибыль и т. п. Важно подчеркнуть, что удачный выбор параметра оптимизации во многом определяет успех исследования.

Требования к отклику:

1. Отклик должен быть эффективным с точки зрения достижения цели. Если в качестве параметра оптимизации производственных процессов принимается только производительность, требование эффективности не выполняется, себестоимость продукции может быть высока. Поэтому параметром следует выбрать либо производительность при фиксированной себестоимости, либо себестоимость при фиксированной производительности.

2. Параметр оптимизации должен быть универсальным, т. е. всесторонне отражать свойства процесса. Универсальный характер имеют экономические параметры оптимизации: прибыль, себестоимость и т. д. Они отражают степень использования сырья, качество получаемых изделий, затраты рабочей силы и т. д. Однако экономические параметры оптимизации не всегда возможно применять, например, из-за быстрой смены стоимости продукции, отсутствия цен на промежуточные продукты и т. п.

3. Отклик (параметр оптимизации) должен быть количественным и выражаться одним числом. Если неизвестны количественные способы оценки параметра

оптимизации, то можно воспользоваться ранговым подходом. Идея этого подхода состоит в присваивании параметрам оптимизации оценок по двух-, пятибалльной и т. д. шкалам.

4. Параметр оптимизации должен быть статистически эффективным, т. е. иметь небольшую дисперсию.

5. Желательно, чтобы параметр оптимизации имел физический смысл, был простым и легко вычисляемым.

Экономические параметры оптимизации универсальны, однако их использование обычно вызывает необходимость решать задачи с двумя и более параметрами оптимизации. В этом случае лучше свести несколько параметров к одному. Можно, например, в задаче с двумя параметрами оптимизации рассчитать коэффициент парной корреляции между параметрами и, если коэффициент значим, один из параметров отбрасывается.

Перейдем к рассмотрению входных воздействий на систему — *факторов*. Фактором называется измеряемая переменная величина, принимающая заданные значения. Факторы бывают количественными и качественными. Качественные факторы — это различные вещества, аппараты, способы ведения процесса и т. д. Каждое возможное значение фактора называется уровнем, а совокупность уровней образует область определения фактора.

Требования к факторам:

1. Факторы должны быть управляемыми, т. е. такими, чтобы внутри области определения фактору можно было бы придать любое значение.

2. Факторы должны быть совместимы. Это означает, что любая комбинация уровней внутри областей определения может быть реализована. Факторы несовместимы, если некоторые комбинации уровней приводят к остановке процесса (например, в результате взрыва и т. п.).

3. Точность установления уровней факторов должна быть выше точности фиксирования значений параметра оптимизации.

Выбор факторов — ответственная операция. Особенно важно включить в исследование все влияющие факторы. Случайные изменения неконтролируемых факторов приводят к повышению ошибки опыта и затрудняют поиск оптимума. Существует ряд методов, позволяющих в какой-то мере избежать этой опасности. Один из них — метод априорного ранжирования, к рассмотрению которого мы и приступаем.

5.1. Выделение существенных переменных на основе априорной информации

Необходимо разобраться в азах экспертного оценивания [2, с. 13–40; 3, с. 228–252].

Для реализации процедуры экспертного оценивания необходимо, как это не покажется странным, сформировать группу экспертов. Общим требованием при

формировании группы экспертов является эффективным решение проблемы экспертизы. А *эффективность решения проблемы* определяется характеристиками достоверности экспертизы и затрат на нее.

Достоверность экспертного оценивания может быть определена только на основе практического решения проблемы и анализа ее результатов. Использование экспертов как раз и обусловлено тем, что отсутствуют какие-либо другие способы получения информации. Поэтому оценка достоверности экспертизы может осуществляться, как правило, только по апостериорным (послеопытным) данным. Если экспертиза проводится систематически примерно с одним и тем же составом экспертов, то появляется возможность накопления статистических данных по достоверности работы группы экспертов и получения устойчивой числовой оценки достоверности. Эту оценку можно использовать в качестве априорных данных о достоверности группы экспертов для последующих экспертиз.

Затраты на экспертизу в определенной мере пропорциональны числу экспертов. Повышение достоверности за счет увеличения числа экспертов и туров опроса приводит к увеличению затрат. Отсюда следует проблема процедуры подбора группы экспертов: определение числа экспертов в группе для обеспечения приемлемой достоверности при минимальных затратах на экспертизу или определение числа экспертов для обеспечения максимальной достоверности при ограниченных затратах на экспертизу.

Для описания экспертов, с точки зрения оценки качества решения проблемы, используются следующие характеристики: компетентность; креативность; отношение к экспертизе; конформизм; аналитичность и широта мышления; конструктивность мышления; коллективизм; самокритичность. Перечисленные характеристики, в основном, оцениваются качественно. Для ряда характеристик делаются попытки ввести количественные оценки. Рассмотрим содержание и возможные пути количественного описания характеристик экспертов.

Компетентность — это степень квалификации эксперта в определенной области знаний. Компетентность может быть определена на основе анализа плодотворности деятельности специалиста, уровня и широты знакомства с достижениями мировой науки и техники, понимания проблем и перспектив развития.

Некоторые авторы считают, что компетентность и научный авторитет являются тождественными понятиями. Имеются предложения оценивать компетентность экспертов по ученой степени и занимаемой должности. В зависимости от ученой степени и занимаемой должности эксперту приписывается некоторый вес.

Однако, мягко говоря, не всегда ученая степень определяет компетентность экспертов. Для оценки компетентности ряд авторов предлагают использовать такие показатели, как количество публикаций, количество ссылок на научные труды эксперта и другие показатели. Несомненно, что эти показатели в определенной степени отражают компетентность эксперта. Однако, во-первых, однозначной зависимости между этими показателями и уровнем компетентности не существует и, во-вторых, непосредственное измерение этих показателей представляет собой трудоемкую работу. Кроме того, достаточно публикаций, в которых

по 6–8 авторов, половина из которых никакого отношения к вышеозначенным публикациям не имела.

В практике экспертного оценивания получила распространение оценка компетентности с помощью самооценки эксперта и оценки другими экспертами. Естественность такого подхода обусловлена тем, что измерение столь сложного свойства, как компетентность, может быть реально осуществлено только людьми. На эту тему еще сорок лет назад в нашей стране на государственном уровне была разработана соответствующая методика [4].

Креативность — это способность решать творческие задачи. Кроме суждений, основанных на изучении деятельности эксперта, нет каких-либо предложений по количественной оценке этой характеристики.

Характеристика *отношение к экспертизе* важна с точки зрения принятия решения о привлечении специалиста в качестве эксперта. Негативное или пассивное отношение специалиста к решению конкретной проблемы, большая занятость и другие факторы существенно влияют на выполнение своих функций экспертами.

Конформизм — это подверженность влиянию авторитетов. Это свойство проявляется в виде неустойчивости собственного мнения. Особенно сильно конформизм может иметь место при проведении экспертизы в виде открытых дискуссий. Мнение авторитетов, высказанное на открытой дискуссии, может подавлять мнение лиц, обладающих высокой степенью конформизма.

Аналитичность и широта мышления — важные характеристики эксперта, особенно при решении сложных проблем. Специалист, имеющий глубокие знания, но обладающий «профессиональной слепотой», не может качественно решать проблемы, требующие взгляда, выходящего за рамки сложившихся представлений.

Конструктивность мышления — это прагматический аспект мышления. Эксперт должен давать решения, обладающие свойством практичности. Учет реальных возможностей решения проблемы очень важен при проведении экспертного оценивания.

Свойство коллективизма должно учитываться при проведении открытых дискуссий. Этика поведения человека в коллективе экспертов во многих случаях существенно влияет на создание положительного психологического климата и тем самым на успешность решения проблемы.

Самокритичность эксперта проявляется при самооценке степени своей компетентности, а также при принятии решения по рассматриваемой проблеме.

Перечисленные характеристики эксперта достаточно полно описывают необходимые качества, которые влияют на успешность решения задачи экспертного оценивания.

Характер вопросов, которые должны быть заданы экспертам, будет, конечно, определяться в соответствии с предметом обследования и с тем, какие ответы нужны. Может показаться, что это слишком очевидно и не нуждается в повторении, что перед обследованием нужно иметь абсолютно ясное представление о том, какая информация нужна. Очевидное нельзя излагать слишком часто.

Необходимо проявить особое внимание к формулировке вопросов. Главное, чтобы опрашиваемый ясно понимал вопрос. Поэтому вопросы должны быть краткими,

как можно ближе подводить к сути дела и выражаться самыми простыми словами. Но понять вопрос — это еще не все. Если рассчитывать на успех обследования, все опрашиваемые должны совершенно одинаково понять поставленный вопрос и это понимание должно быть точно таким же, как и у исследователя. Поэтому формулировка вопроса не должна заключать в себе двусмысленностей.

Если вы спрашиваете у эксперта, какой метод обработки данных он рекомендует при исследовании комплекса физико-механических характеристик резин, он в ответ может рекомендовать методы дисперсионного анализа, построить множество моделей второго или третьего порядка, найти взаимосвязи между откликами методами корреляционного анализа, использовать обобщенные переменные, устранить временной дрейф и т. д. Потому что вопрос сформулирован некорректно. Кроме того, как уже упоминалось в первой главе, разные люди в одни и те же слова могут вкладывать разный смысл.

То, что свободно от двусмысленности для достаточно интеллигентного человека, может затруднять другого. Даже простейшие фразы могут быть или неверно поняты, или по-разному истолкованы, и применения неясных прилагательных, таких как *большой*, *маленький*, *дешевый*, *дорогой*, следует избегать, если только они не сопровождаются в какой-то степени указанием объема или цены.

Важность правильной интерпретации видна из того, что если опрашиваемый неправильно понимает вопрос, он ответит на вопрос так, как *он* его понимает; поэтому его ответ может быть только таким, который вводит в заблуждение.

Априорная информация, т. е. сведения об объекте, которыми располагают эксперты, чаще всего носит качественный характер. Поэтому для количественного представления такой информации нужно применять специальные методы. Один из способов измерения качественной информации связан с использованием порядковых шкал.

В результате формализации данных порядковым методом получается упорядоченный ряд, состоящий из рангов. Показателем связи ранжированных рядов может служить *коэффициент ранговой корреляции Спирмена*. Покажем процедуру его вычисления [5, с. 85–87; 6, 256–258,]. Пусть n объектов ранжированы сначала одним экспертом, а затем другим. При этом будет получено два ряда чисел (в простейшем случае от 1 до n). Тогда первые члены этих рядов x_1 и y_1 соответствуют тем оценкам, которые дали два эксперта первому объекту, следующая пара значений x_2 и y_2 относится ко второму объекту и т. д. Если теперь вычислить следующие соотношения:

$$S_x^2 = \frac{\sum (x_i - x_{cp})^2}{n-1}; S_y^2 = \frac{\sum (y_i - y_{cp})^2}{n-1}; \text{ и } cov(x, y) = \frac{\sum (x_i - x_{cp})(y_i - y_{cp})}{n-1}; \quad (5.1)$$

где S_x^2 и S_y^2 — дисперсии; $cov(x, y)$ — ковариация, или смешанный момент второго порядка и x_{cp} и y_{cp} — средние значения, равные $(n+1)/2$, то коэффициент корреляции рангов Спирмена определится согласно выражению

$$\rho = cov(x, y) / ((S_x^2 \times S_y^2)^{0.5}) = 1 - 6(\sum (x_i - y_i)^2) / (n^3 - n). \quad (5.2)$$

Полученное значение коэффициента корреляции сравнивается с табличным P , взятым при числе степеней свободы $\nu = n$ и уровне значимости $\alpha = 5\%$ (таблицы XV Приложения). Согласованность мнений двух экспертов может считаться установленной, если выполняется неравенство $\rho > P$ при выбранном уровне значимости. Коэффициент корреляции рангов Спирмена изменяется от -1 до $+1$.

Равенство $\rho = +1$ достигается, как это явствует из формулы (5.2), при одинаковых ранжировках.

Значение $\rho = -1$ имеет место при противоположных ранжировках. При равенстве коэффициента корреляции нулю ранжировки считаются линейно независимыми.

Пример. Рассмотрим результаты ранжирования десяти видов изделий по десятибалльной шкале двумя экспертами. Два ряда предпочтительности представлены в табл. 5.1.

Таблица 5.1. Результаты ранжирования

Ранги	Номер изделия									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Первого эксперта	4	2	3	1	5	7	6	10	9	8
Второго эксперта	2	4	1	3	8	10	5	7	9	6

Ранжирование с использованием коэффициента корреляции рангов Спирмена

Теория.

Коэффициент корреляции рангов Спирмена ρ определяется формулой

$$\rho = 1 - 6(\sum (x_i - y_i)^2) / (n^3 - n).$$

x_i и y_i — ранги двух экспертов; n — число ранжируемых переменных.

Решение.

$$\sum (x_i - y_i)^2 = (4 - 2)^2 + (2 - 4)^2 + (3 - 1)^2 + (1 - 3)^2 + (5 - 8)^2 + (7 - 10)^2 + (6 - 5)^2 + (10 - 7)^2 + (9 - 9)^2 + (8 - 6)^2 = 48;$$

$$n = 10;$$

$$\rho = 1 - 6 \times 48 / (10^3 - 10) = 0,709.$$

Интерпретация.

Полученное значение ρ сравнивается с табличным P при числе степеней свободы $\nu = n$ и уровне значимости α (таблица XV Приложения). Мнения можно считать согласованными с определенной вероятностью при $\rho > P$.

$$\nu = 10; \alpha = 5\%; P = 0,564.$$

Так как $\rho = 0,709 > P = 0,564$, мнения двух экспертов можно считать согласованными с вероятностью 95%.

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```

echo on
% СОПОСТАВЛЕНИЕ МНЕНИЙ ДВУХ ЭКСПЕРТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОЭФФИ-
ЦИЕНТА КОРРЕЛЯЦИИ РАНГОВ СПИРМЕНА
echo off
A=input('ВВЕДИТЕ РЯД ПРЕДПОЧТИТЕЛЬНОСТИ 1-го ЭКСПЕРТА (в [], че-
рез «;»)\n');
B=input('ВВЕДИТЕ РЯД ПРЕДПОЧТИТЕЛЬНОСТИ 2-го ЭКСПЕРТА (в [], че-
рез «;»)\n');
n=max(size(A)); - КОЛИЧЕСТВО РАНЖИРУЕМЫХ ПЕРЕМЕННЫХ;
d=A-B; - РАЗНОСТЬ РАНГОВ;
S=d'*d; - СУММА КВАДРАТОВ;
Rs=1-6*S/(n^3-n); - РАСЧЕТНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ РАНГОВ СПИР-
МЕНА;
Rt5=[0;0;0;1000;900;829;...]; - ФРАГМЕНТ ТАБЛИЦЫ;
Rt5=Rt5/1000; - КРИТЕРИЙ;
if Rs>=Rt5(n),
    ('РАНЖИРОВАНИЕ КОРРЕЛИРОВАНО, ВЕРОЯТНОСТЬ 95%')
else
    ('РАНЖИРОВАНИЕ НЕ КОРРЕЛИРОВАНО')
end- ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ.

```

Если ранжировки имеют совпадающие ранги (эксперт ранжировал 10 видов изделий и присудил, например, двум изделиям одинаковый ранг), выражение для ρ имеет следующий вид [7, с. 264; 8, с. 114–115]:

$$\rho = \frac{\frac{1}{6}(n^3 - n) - \sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2 - T - U}{\sqrt{\left(\frac{1}{6}(n^3 - n) - 2T\right) \cdot \left(\frac{1}{6}(n^3 - n) - 2U\right)}}, \quad (5.3)$$

где

$$T = \frac{1}{12} \sum_{i=1}^n t_i (t_i^2 - 1); \quad U = \frac{1}{12} \sum_{i=1}^n u_i (u_i^2 - 1),$$

где t_i и u_i – число повторений i -го ранга в ранжировках по x и y соответственно.

Есть еще ранговый критерий Кендалла [5, с. 87–92], но применяется реже.

Коэффициент корреляции рангов Кендалла определяется формулой

$$\tau = \frac{2 \cdot S}{n^2 - n} \quad S = \sum \text{sign} \cdot ((x_i - x_j) \cdot (y_i - y_j)) \quad (5.4)$$

где n – количество ранжируемых переменных; x_i, x_j – ранги первого эксперта; y_i, y_j – ранги второго эксперта; $\text{sign } z$ – функция, равная +1 при $z > 0$, –1 при $z < 0$ и 0 при $z = 0$.

Исходным пунктом расчета коэффициента Кендалла является определение суммы S , состоящей из двух слагаемых: P и Q . Значение этих слагаемых рассматривается на основе последовательности рангов второго эксперта y_i (при условии, что значения рангов первого эксперта x_i расположены в порядке возрастания). Для определения

величины P необходимо установить, сколько чисел, находящихся справа от каждого из элементов последовательности рангов переменной y_i , имеет величину, превышающую значение этого элемента. Суммируя такие численности, получим первое слагаемое суммы S , которое до некоторой степени можно рассматривать как меру соответствия последовательности рангов переменной y_i и последовательности рангов переменной x_i . Второе слагаемое Q характеризует степень несоответствия последовательности рангов переменной y_i и последовательности рангов переменной x_i . Чтобы рассчитать значение Q , определим, сколько чисел, находящихся справа от каждого из членов последовательности рангов переменной y_i , имеет значение меньше, чем этот член. Такие величины берутся как отрицательные и суммируются. Элемент P достигает наибольшего значения, если последовательность рангов переменной y_i совпадает с последовательностью рангов переменной x_i , причем если число наблюдений составляет n , то максимальное значение $P = (n - 1) + (n - 2) + \dots + 3 + 2 + 1 = n(n - 1)/2$. Второе слагаемое Q достигает наибольшего абсолютного значения, если последовательность рангов переменной y_i имеет обратную тенденцию по отношению к последовательности рангов переменной x_i . Это максимальное абсолютное значение Q также равняется $n(n - 1)/2$. Коэффициент корреляции рангов Кендалла получается делением $S = P + Q$ на $n(n - 1)/2$. Если две последовательности совпадают, $Q = 0$, $S = n(n - 1)/2$ и $\tau = 1$. Если эти последовательности совершенно не совпадают, т. е. если последовательность рангов переменной y_i имеет тенденцию, обратную последовательности рангов переменной x_i , то $P = 0$, $Q = -n(n - 1)/2$, и, следовательно, $\tau = -1$. В других случаях $-1 < \tau < +1$. Оценка согласованности мнений двух экспертов при $n \leq 10$ осуществляется следующим образом. В таблице XVI Приложения необходимо найти строку, соответствующую вычисленному значению суммы S , и столбец, отвечающий количеству ранжируемых переменных n . В соответствующем месте таблицы будет указан риск, с которым можно утверждать, что две рассматриваемые ранжировки согласованы.

В случае $n < 10$ принимается, что следующая величина $z = \tau(9n(n - 1))^{0.5} / ((2(2n + 5))^{0.5})$ приблизительно нормально распределена со средней, равной 0, и со стандартным отклонением, равным 1. При уровне значимости $\alpha = 0,05$, если $|z| < 1,96$, можно считать, что мнения экспертов согласованы.

Пример. Рассмотрим вновь результаты ранжирования десяти видов изделий по десятибалльной шкале двумя экспертами. Два ряда предпочтительности представлены в табл. 5.2 так, чтобы ранги первого эксперта располагались по ранжиру, а второго произвольно. Целесообразно провести вычисления по методу Кендалла, не прибегая к компьютерным программам.

Таблица 5.2. Результаты ранжирования

Ранги	Номер изделия									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Первого эксперта	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Второго эксперта	3	4	1	2	8	5	10	6	9	7

Ранжирование с использованием коэффициента корреляции рангов Кендалла
Теория.

Столбцы таблицы результатов ранжирования располагаются в порядке возрастания рангов первого эксперта.

Коэффициент корреляции рангов Кендалла τ определяется формулой $\tau = 2S/(n^2 - n)$, где

$S = \sum_{i,j=1}^n \text{sign}((x_i - x_j)(y_i - y_j))$; x_i, x_j – ранги 1-го и y_i, y_j – ранги 2-го эксперта, $\text{sign}z$ – функция, равная 1 при $z > 0$, -1 при $z < 0$ и 0 при $z = 0$.

Решение.

Ранги второго эксперта расположатся в таком порядке:

3; 4; 1; 2; 8; 5; 10; 6; 9; 7.

В этом ряду справа от числа 3 семь чисел (4, 8, 5, 10, 6, 9 и 7) больше, чем дно, и два числа (1 и 2) меньше (7–2); справа от числа 4 шесть чисел больше, чем дно, и два числа меньше (6–2)...

Продолжая эту процедуру, получим:

$S = (7 - 2) + (6 - 2) + (7 - 0) + (6 - 0) + (2 - 3) + (4 - 0) + (0 - 3) + (2 - 0) + (0 - 1) = 23$;

$\tau = 2 \times 23 / (10^2 - 10) = 0,511$.

Интерпретация

Согласованность мнений экспертов оценивается с помощью табл. XVI Приложения с вероятностью, зависящей от числа переменных n и суммы S .

$n = 10$; $S = 23$. Из табл. XVI: $P = 0,023$. С вероятностью $(1 - 0,023) \times 100 = 97,7\%$, можно утверждать, что мнения двух экспертов согласованы.

Сравнительная оценка коэффициентов ранговой корреляции Спирмена и Кендалла показывает, что вычисление коэффициентов Спирмена производится по более простой формуле. Кроме того, коэффициент Спирмена дает более точный результат, поскольку он является оптимальной по критерию минимума среднего квадрата ошибки оценкой коэффициента корреляции. Отсюда следует, что при практических расчетах корреляционной зависимости ранжировок предпочтительнее использовать коэффициент ранговой корреляции Спирмена.

В ряде случаев мнения экспертов могут быть искажены наличием какой-либо посторонней информации (например, знанием мнения третьего специалиста или наличием каких-то данных, характеризующих объекты ранжирования). В такой ситуации целесообразно вычислить *частный коэффициент корреляции* рангов Кендалла [5, с. 90–92], т. е. коэффициент корреляции между x и y при величине z , считающейся постоянной:

$$\tau_{xy,z} = \frac{\tau_{xy} - \tau_{zt} \cdot \tau_{zx}}{\sqrt{(1 - \tau_{zy}^2) \cdot (1 - \tau_{zx}^2)}}. \quad (5.5)$$

При этом дополнительную информацию необходимо представить в виде последовательности рангов и вычислить по формуле (5.4) коэффициенты корреляции τ_{xy} ,

τ_{zy} и τ_{zx} . Выводы, касающиеся влияния дополнительной информации на уровень корреляции мнений двух экспертов, могут быть сделаны лишь на качественном уровне, так как строгие критерии оценки пока не выработаны.

Пример. Рассмотрим ранжирование факторов, влияющих на продолжительность смещения. Шесть факторов ранжированы двумя экспертами. После ранжирования было обнаружено, что значимость соответствующих коэффициентов, характеризующих влияние шести факторов, была известна экспертам. Данные приведены в табл. 5.3 (ранжирование первого эксперта дано в естественном порядке).

Таблица 5.3. Результаты ранжирования

Ранги	Номер фактора					
Первого эксперта (x)	1	2	3	4	5	6
Второго эксперта (y)	1	2	4	3	5	6
Критерий значимости, отн. ед.	45,2	16,9	3,5	13,3	5,0	1,9

Если исключить влияние знания упомянутых коэффициентов, то каким образом коррелируют оценки двух экспертов?

Перепишем данные, заменив коэффициенты рангами (табл. 5.4):

Таблица 5.4. Результаты ранжирования

Ранги	Номер фактора					
Первого эксперта (x)	1	2	3	4	5	6
Второго эксперта (y)	1	2	4	3	5	6
Время смещения (z)	1	2	5	3	4	6

$$S_{xy} = (5 - 0) + (4 - 0) + (2 - 1) + (2 - 0) + (1 - 0) = 13; \tau_{xy} = 2 \times 13 / (6^2 - 6) = 0,8667;$$

$$S_{xz} = (5 - 0) + (4 - 0) + (1 - 2) + (2 - 0) + (1 - 0) = 11; \tau_{xz} = 2 \times 11 / (6^2 - 6) = 0,7333;$$

$$S_{yz} = (5 - 0) + (4 - 0) + (3 - 0) + (1 - 1) + (1 - 0) = 13; \tau_{yz} = 2 \times 13 / (6^2 - 6) = 0,8667;$$

$$\tau_{xyz} = (0,8667 - 0,8667 \times 0,7333) / ((1 - 0,8667^2) \times (1 - 0,7333^2))^{0.5} = 0,6815.$$

Можно утверждать, что знание z (оценки времени смещения) не столь значимо влияет на согласованность мнений, поскольку τ_{xz} и τ_{yz} не больше τ_{xy} .

Для объективной оценки информации о процессе целесообразно учитывать мнения нескольких экспертов.

Рассмотрим результаты ранжировки n объектов группой из m экспертов, где x_{ij} – ранг, присваиваемый i -ным экспертом j -му объекту. Составим суммы рангов по каждому столбцу, т. е. для каждого фактора: $r_j = \sum x_{ij}$, и вычислим дисперсию

$D = \Sigma(r_i - a)^2 / (m - 1)$. Здесь $a = \Sigma r_j / n$ — среднее значение суммы рангов. *Дисперсионный коэффициент конкордации* определяется как отношение оценки дисперсии к максимальному значению этой дисперсии: $W = D / D_{\max}$. Коэффициент конкордации, характеризующий согласованность мнений экспертов, изменяется от нуля до единицы, поскольку $0 \leq D \leq D_{\max}$. Величины среднего значения суммы рангов и максимальной дисперсии зависят только от числа объектов и количества экспертов: $a = (n + 1) \times m / 2$; $D_{\max} = m^2(n^3 - n) / (12(n - 1))$. Тогда окончательная формула для вычисления коэффициента конкордации имеет вид [1, с. 31–34; 7, с. 266–267; 8, с. 15–20; 9, с. 49–53; 10, с. 39–41; 11, с. 102–106; 12, с. 21–25]:

$$W = \frac{12 \cdot S}{m^2 \cdot (n^3 - n)} \quad S = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m x_{ij} - (n + 1) \cdot m / 2 \right)^2. \quad (5.6)$$

Коэффициент конкордации равен 1, если все ранжировки экспертов одинаковы. Коэффициент конкордации равен нулю, если все ранжировки различны, т. е. совершенно нет совпадения.

Величина

$$X_p^2 = Wm(n - 1) \quad (5.7)$$

имеет распределение χ^2 с $v = n - 1$ степенями свободы. Гипотеза о наличии согласия между исследователями принимается, когда расчетное значение критерия больше табличного при $\alpha = 5\%$ (таблица V Приложения). Получение значимого коэффициента конкордации дает возможность построения средней априорной диаграммы рангов (гистограммы), по оси абсцисс которой отложены факторы, а по оси ординат — соответствующие суммы рангов R_j . Чем больше сумма рангов данного фактора, тем выше его место на диаграмме рангов и тем менее существенен он. С помощью полученной диаграммы ведется оценка значимости факторов. Если распределение факторов по рангам близко к равномерному, то исследователь не в состоянии выбрать наиболее существенные факторы (либо все эти факторы сильно влияют, либо весьма низок уровень априорной информации), и поэтому все факторы должны включаться в физический эксперимент. Если распределение факторов неравномерно и убывание монотонно, различие факторов делается неуверенно, то в этом случае, если есть возможность, лучше включать в эксперимент все факторы. Если распределение неравномерное, убывание быстрое, близкое к экспоненциальному, то возможно априорное отсеивание ряда факторов, отнесенных к шумовому полю.

Пример. Рассмотрим результаты ранжирования четырьмя экспертами семи признаков, характеризующих требования к протекторным резинам.

Перечислим эти требования: 1 — стабильность размеров; 2 — сопротивление истиранию; 3 — сопротивление растрескиванию; 4 — сопротивление проскальзыванию на мокрой дороге; 5 — технологические свойства; 6 — гистерезисные потери; 7 — сопротивление качению.

Результаты ранжирования представлены в табл. 5.5.

Таблица 5.5. Результаты ранжирования

Эксперты		Объекты ранжирования $j \rightarrow$						
		1	2	3	4	5	6	7
$i \downarrow$	первый	3	4	6	1	5	7	2
	второй	4	3	6	1	5	7	2
	третий	5	3	6	1	4	7	2
	четвертый	3	6	4	1	5	7	2
Сумма $\sum_{i=1}^m x_{ij}$		15	16	22	4	19	28	8

Оценка согласованности мнений нескольких экспертов с использованием коэффициента конкордации

Теория.

Оценка согласованности мнений m экспертов относительно n объектов осуществляется с помощью коэффициента конкордации $W = 12S/(m^2(n^3 - n))$;

$$S = \sum_{j=1}^n (\sum_{i=1}^m X_{ij} - (n+1)m/2)^2$$

Величина $\chi_p^2 = Wm(n-1)$ имеет χ^2 распределение с $v = n-1$ степенями свободы.

Решение.

$m = 4$; $n = 7$.

Средний ранг $(n+1)m/2 = (7+1) \times 4/2 = 16$;

$S = (15 - 16)^2 + (16 - 16)^2 + (22 - 16)^2 + (4 - 16)^2 + (19 - 16)^2 + (28 - 16)^2 + (8 - 16)^2 = 398$;

$W = 12 \times 398 / (4^2(7^3 - 7)) = 0,8884$;

$v = 7 - 1 = 6$;

$\chi_p^2 = 0,8884 \times 4 \times (7 - 1) = 21,32$.

Интерпретация.

Гипотеза о согласованности мнений принимается, когда расчетное значение χ^2 больше табличного (таблице V Приложения).

Рассмотрение последней строки таблицы результатов ранжирования позволяет заключить, что суммы рангов для четвертого (сопротивление проскальзыванию на мокрой дороге) и седьмого (сопротивление качению) объектов ранжирования значительно меньше соответствующих значений для остальных пяти (см. гистограмму на рис. 5.1).

$\chi_{(6; 0,95)}^2 = 12,59$. Поскольку $21,32 < 12,59$, с вероятностью 95% можно утверждать, что мнения экспертов согласованы.

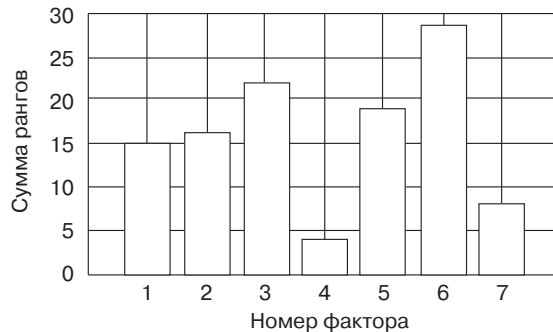


Рис. 5.1. Гистограмма рангов

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```

echo on
% СОПОСТАВЛЕНИЕ МНЕНИЙ НЕСКОЛЬКИХ ЭКСПЕРТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
% КОЭФФИЦИЕНТА КОНКОРДАЦИИ (НАИМЕНОВАНИЕ РАБОТЫ)
echo off
pause
clc (ОЧИСТКА ЭКРАНА)
echo on
% НЕОБХОДИМО СФОРМИРОВАТЬ МАТРИЦУ, СТРОКИ КОТОРОЙ БУДУТ ПРЕД-
СТАВЛЯТЬ
% СОВОЙ РЯДЫ ПРЕДПОЧТИТЕЛЬНОСТИ, А ИХ КОЛИЧЕСТВО
% БУДЕТ СООТВЕТСТВОВАТЬ ЧИСЛУ ЭКСПЕРТОВ
% СХЕМА ТАКОВА: [РАНГИ 1-ГО ЭКСПЕРТА ЧЕРЕЗ ПРОВЕЛЫ; (ТОЧКА С ЗА-
ПЯТОЙ)
% РАНГИ 2-ГО ЭКСПЕРТА; РАНГИ 3-ГО ЭКСПЕРТА;... ; И ПОСЛЕДНЕГО]
echo off
pause
X=input('ВВОД МАТРИЦЫ'); (ВВОД ДАННЫХ)
pause
clc (ОЧИСТКА ЭКРАНА)
u=size(X); (РАЗМЕРНОСТЬ МАТРИЦЫ)
m=u(1); (ЧИСЛО СТРОК, Т.Е. ЭКСПЕРТОВ)
n=u(2); (ЧИСЛО СТОЛБЦОВ, Т.Е. РАНЖИРУЕМЫХ ПЕРЕМЕННЫХ)
a=(n+1)*m/2; (ВЫЧИСЛЕНИЕ СРЕДНЕЙ СУММЫ РАНГОВ)
X1=sum(X); (ВЫЧИСЛЕНИЕ СУММЫ РАНГОВ ДЛЯ КАЖДОЙ РАНЖИРУЕМОЙ ПЕ-
РЕМЕННОЙ)
S=(X1-a)*(X1-a)'; (ВЫЧИСЛЕНИЕ СУММЫ КВАДРАТОВ ОТКЛОНЕНИЙ СУММ
РАНГОВ ОТ СРЕДНЕЙ СУММЫ РАНГОВ)
W=12*S/(m^2)/(n^3-n); (ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА КОНКОРДАЦИИ)
X2=W*m*(n-1); (ВЫЧИСЛЕНИЕ КРИТЕРИЯ ХИ-КВАДРАТ)

```

```
X2t=[3.84;5.99;7.82;...]; (ТАБЛИЧНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ПРИ УРОВНЕ ЗНАЧИМОСТИ 5%)
w=X2-X2t(n-1); (РАЗНИЦА РАСЧЕТНОГО И ТАБЛИЧНОГО КРИТЕРИЯ)
if w>0
('МНЕНИЯ ЭКСПЕРТОВ СОГЛАСОВАНЫ')
else
('МНЕНИЯ ЭКСПЕРТОВ НЕ СОГЛАСОВАНЫ')
end
pause
bar(X1);grid;title('ГИСТОГРАММА РАНГОВ');
xlabel('Номер фактора');ylabel('Сумма рангов'); (ПОСТРОЕНИЕ ГИ-
СТОГРАММЫ РАНГОВ)
pause
```

Если ранжировки содержат совпадающие ранги (эксперт не может решить, какому, например, из двух факторов присвоить меньший ранг (место), а какому больший, и он выбирает для них одинаковые ранги), формула для вычисления коэффициента конкордации (согласия) W принимает следующий вид [7, с. 267; 8, с. 17–18; 11, с. 105–106]:

$$W = \frac{12 \cdot S}{m^2 \cdot (n^3 - n) - m \sum_j T_j}; \quad T = \sum_{t_j} (t_j^3 - t_j), \quad (5.8)$$

где t_j — число повторений каждого ранга в j -ном ряду.
Величина

$$X_p^2 = \frac{12 \cdot S}{m \cdot n \cdot (n+1) - \left(\sum_{j=1}^m T_j \right) / (n-1)} \quad (5.9)$$

имеет распределение X^2 с $v = n - 1$ степенями свободы.

Пример. Рассмотрим результаты ранжирования тремя экспертами десяти признаков.

Результаты ранжирования представлены в табл. 5.6.

Таблица 5.6. Результаты ранжирования

Эксперты		Объекты ранжирования $j \rightarrow$									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$i \downarrow$	первый	1	4,5	2	4,5	3	7,5	6	9	7,5	10
	второй	2,5	1	2,5	4,5	4,5	8	9	6,5	10	6,5
	третий	2	1	4,5	4,5	4,5	4,5	8	8	8	10
Сумма $\sum_{i=1}^m x_{ij}$		5,5	6,5	9	13,5	12	20	23	23,5	25,5	26,5

Оценка согласованности мнений нескольких экспертов с использованием коэффициента конкордации

Теория

Оценка согласованности мнений m экспертов относительно n объектов осуществляется с помощью коэффициента конкордации:

$$W = \frac{12 \cdot S}{m^2 \cdot (n^3 - n) - m \sum_j T_j}; \quad T = \sum_{t_j} (t_j^3 - t_j); \quad S = \sum_{j=1}^n (\sum_{i=1}^m x_{ij} - (n+1) \times m/2)^2.$$

$$\text{Величина } X_p^2 = \frac{12 \cdot S}{m \cdot n \cdot (n+1) - \left(\sum_{j=1}^m T_j \right) / (n-1)} \text{ имеет } \chi^2 \text{ распределение с } v = n - 1$$

степенями свободы.

Решение.

$$m = 3; n = 10.$$

$$\text{Средний ранг } (n+1) \times m/2 = (10+1) \times 3/2 = 16,5;$$

$$S = (5,5 - 16,5)^2 + (6,5 - 16,5)^2 + (9 - 16,5)^2 + (13,5 - 16,5)^2 + (12 - 16,5)^2 + (20 - 16,5)^2 + \\ + (23 - 16,5)^2 + (23,5 - 16,5)^2 + (25,5 - 16,5)^2 + (26,5 - 16,5)^2 = 591;$$

$$T_1 = 2 \cdot (2^3 - 2) = 12; \quad T_2 = 3 \cdot (2^3 - 2) = 18; \quad T_3 = 4^3 - 4 + 3^3 - 3 = 84,$$

$$W = \frac{12 \cdot 591}{3^2 \cdot (10^3 - 10) - 3 \cdot (12 + 18 + 84)} = 0,828;$$

$$v = 10 - 1 = 9;$$

$$X_p^2 = \frac{12 \cdot 591}{3 \cdot 10 \cdot (10+1) - (12 + 18 + 84)/(10-1)} = 22,3.$$

Интерпретация.

Гипотеза о согласованности мнений принимается, когда расчетное значение χ^2 больше табличного (таблица V Приложения).

Рассмотрение последней строки таблицы результатов ранжирования (табл. 5.6) позволяет заключить, что суммы рангов для первых трех признаков существенно меньше соответствующих значений для остальных семи (см. гистограмму на рис. 5.2).

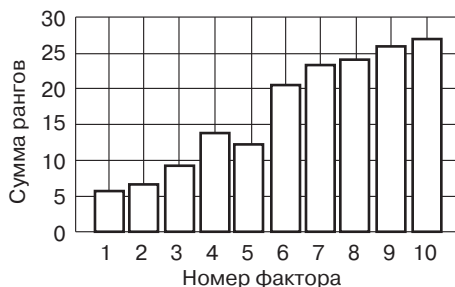


Рис. 5.2. Гистограмма рангов

$\chi^2_{(9; 0,95)} = 16,92$. Поскольку $22,3 < 16,92$, с вероятностью 95% можно утверждать, что мнения экспертов согласованы.

А почему возникают совпадающие ранги? Не удастся решить, какому из двух (или нескольких) признаков присвоить больший ранг, а какому меньший. В предыдущем примере надо было ранжировать 10 признаков. Это сложно. А если количество признаков, которые каждый эксперт должен ранжировать уменьшить, это должно облегчить работу эксперта. Для решения такой задачи используются сбалансированные квадраты Юдена [13, с. 54–58; 14, с. 78; 15, с. 101–105; 16, с. 144–146; 17, с. 113–115] (некоторые разновидности латинских прямоугольников).

Латинским квадратом порядка n называется расположение символов в виде квадратной таблицы с n строками и n столбцами, такое, что каждый символ один раз появляется в каждой строке и один раз — в каждом столбце:

<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	1	2	3	4	α	β	γ	δ
<i>D</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	2	3	4	1	<i>b</i>	<i>a</i>	<i>d</i>	γ
<i>C</i>	<i>D</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	3	4	1	2	γ	δ	α	β
<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>A</i>	4	1	2	3	<i>d</i>	<i>g</i>	<i>b</i>	<i>a</i>

Для выделения существенных переменных используются латинские прямоугольники, которые можно определить как подмножество строк (столбцов) латинского квадрата. Такие прямоугольники называются *квадратами Юдена*.

В качестве примера рассмотрим латинский прямоугольник, получающийся из латинского квадрата порядка 7. Введем обозначения: n — количество ранжируемых переменных или равное ему число экспертов, k — количество факторов, которое ранжирует каждый из экспертов, m — число ранжирований каждого фактора (в прямоугольнике Юдена $k = m$), λ — количество столбцов (экспертов), в которых встречается каждая пара символов. Эти параметры связаны следующим соотношением: $\lambda(n-1) = m(k-1)$. В рассматриваемом прямоугольнике Юдена $n = 7$, $k = m = 3$, $\lambda = 1$. Прямоугольник имеет вид:

<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>G</i>
<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>G</i>	<i>A</i>
<i>D</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>G</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>

В первой строке этой таблицы записаны латинские буквы по порядку от *A* до *G*, строго по алфавиту. Во второй строке начали со второй буквы, а *A* перенесли в конец. А вот почему в третьей строке начали не с *C*? Посмотрите на столбцы, в которых фигурирует буква *A*, с какими буквами она соседствует? В первом столбце — с *B* и *D*, во втором столбце — с *E* и *F*, в третьем столбце — с *G* и *C*. Следовательно, первый

эксперт (а их всего 7) будет ранжировать переменные A, B и D , второй — переменные E, F и A , третий — переменные G, A и C . У переменной A во всех случаях разные соседи. А если бы третья строка прямоугольника начиналась с буквы C , то в первом и во втором столбце фигурировала бы пара $B-C$.

Итак, для объективности анализа надо сделать так, чтобы каждая буква встречалась один раз в столбце, один раз в строке и чтобы сочетание двух букв в столбце наблюдалось один раз.

Сопоставление мнений экспертов осуществляется на основе коэффициента конкордации:

$$W = \frac{12 \cdot S}{\lambda^2 \cdot (n^3 - n)}; \quad S = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m x_{ij} - (m+1) \cdot m / 2 \right)^2. \tag{5.10}$$

Пример. Рассмотрим результаты ранжирования семью экспертами семи признаков, характеризующих требования к протекторным резинам. Результаты ранжирования представлены в табл. 5.7.

Таблица 5.7. Результаты ранжирования

Группы	Эксперты						
	1	2	3	4	5	6	7
	Объекты ранжирования						
1	A	B	C	D	E	F	G
2	B	C	D	E	F	G	A
3	D	E	F	G	A	B	C
	Ранги						
1	2	1	3	1	2	3	1
2	3	3	1	3	3	1	2
3	1	2	2	2	1	2	3
Сумма рангов	Объекты ранжирования						
	A	B	C	D	E	F	G
x_{ij}	5	6	9	3	7	8	4

Оценка согласованности мнений нескольких экспертов с использованием прямоугольника Юдена

Теория.

Принято: n — количество ранжируемых переменных или равное ему число экспертов, k — количество факторов, которое ранжирует каждый из экспертов,

m — число ранжирований каждого фактора (в прямоугольнике Юдена $k = m$), λ — количество столбцов (экспертов), в которых встречается каждая пара символов. $\lambda(n - 1) = m(k - 1)$.

Оценка согласованности мнений n экспертов относительно n объектов осуществляется при помощи коэффициента конкордации.

$$W = 12S/(\lambda^2 \times (n^3 - n)); S = \sum_{j=1}^n (\sum_{i=1}^m x_{ij} - (m + 1) \times m/2)^2.$$

Решение.

$$n = 7; k = 3; m = 3; \lambda = 3(3 - 1)/(7 - 1) = 1.$$

Объекты ранжирования: A, B, C, D, E, F, G .

Вычисление суммы рангов (например, в случае объекта ранжирования A): ранг первого эксперта из первой группы (2) + ранг седьмого эксперта из второй группы (2) + ранг пятого эксперта из третьей группы (1) = 5.

Фактор B : $1 + 3 + 2 = 6$.

Фактор C : $3 + 3 + 3 = 9$.

Фактор D : $1 + 1 + 1 = 3$.

Фактор E : $2 + 3 + 2 = 7$.

Фактор F : $3 + 3 + 2 = 8$.

Фактор G : $1 + 1 + 2 = 4$.

Средний ранг: $(m + 1) \times m/2 = (3 + 1) \times 3/2 = 6$;

$$S = (5 - 6)^2 + (6 - 6)^2 + (9 - 6)^2 + (3 - 6)^2 + (7 - 6)^2 + (8 - 6)^2 + (4 - 6)^2 = 28;$$

$$\text{Коэффициент конкордации } W = 12 \times 28 / (1^2 \times (7^3 - 7)) = 1,000.$$

Интерпретация.

Поскольку коэффициент конкордации равен 1, мнения экспертов полностью согласованы.

Влияние рассмотренных признаков падает в такой последовательности (рис. 5.3): сопротивление проскальзыванию на мокрой дороге — сопротивление качению — стабильность размеров — сопротивление истиранию — технологические свойства — гистерезисные потери — сопротивление растрескиванию.

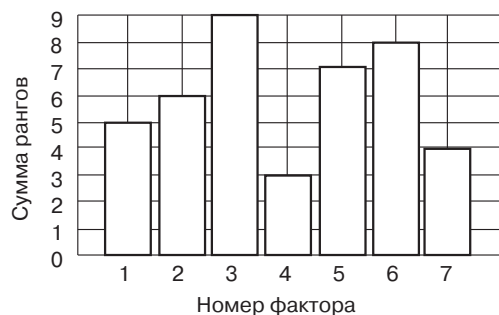


Рис. 5.3. Гистограмма рангов

Текст программы с использованием системы *MATLAB*:

```
echo on
echo on
% СОПОСТАВЛЕНИЕ МНЕНИЙ НЕСКОЛЬКИХ ЭКСПЕРТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕ-
ПОЛНОГО % ЛАТИНСКОГО КВАДРАТА (НАЗВАНИЕ РАБОТЫ)
echo off
pause
clc (ОЧИСТКА ЭКРАНА)
echo on
% НЕОБХОДИМО СФОРМИРОВАТЬ МАТРИЦУ, СТОЛБЦЫ КОТОРОЙ БУДУТ ПРЕД-
СТАВЛЯТЬ % СОБОЙ РЯДЫ ПРЕДПОЧТИТЕЛЬНОСТИ ДЛЯ СЕМИ ОБЪЕКТОВ, РАН-
ЖИРУЕМЫХ СЕМЬЮ % ЭКСПЕРТАМИ
% СХЕМА ТАКОВА: [РАНГИ 1-ГО ЭКСПЕРТА ЧЕРЕЗ ПРОБЕЛЫ; (ТОЧКА С ЗА-
ПЯТОЙ)
% РАНГИ 2-ГО ЭКСПЕРТА; РАНГИ 3-ГО ЭКСПЕРТА; ... ; И ПОСЛЕДНЕГО 7-ГО]
echo off
pause
X=input('ВВОД МАТРИЦЫ'); (ВВОД ДАННЫХ)
pause
X=X'; (ТРАНСПОНИРОВАНИЕ МАТРИЦЫ)
A=X(1,1)+X(2,7)+X(3,5); B=X(1,2)+X(2,1)+X(3,6); C=X(1,3)+X(2,2)
+X(3,7);
D=X(1,4)+X(2,3)+X(3,1); E=X(1,5)+X(2,4)+X(3,2); F=X(1,6)+X(2,5)
+X(3,3);
G=X(1,7)+X(2,6)+X(3,4); (ВЫЧИСЛЕНИЕ СУММ РАНГОВ)
Z=[A B C D E F G]; (ФОРМИРОВАНИЕ СТРОКИ СУММ РАНГОВ)
Z1=Z-6; (СУММЫ РАНГОВ ЗА ВЫЧЕТОМ СРЕДНЕЙ СУММЫ РАНГОВ)
S=Z1*Z1'; (ВЫЧИСЛЕНИЕ СУММЫ КВАДРАТОВ ЭТИХ РАЗНОСТЕЙ)
W=12*S/7/48; (ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА КОНКОРДАЦИИ)
```

5.2. Экспериментально-статистические методы выделения существенных переменных

Из названия этого раздела явствует, что для выделения существенных переменных можно, кроме использования интеллектуально развитых экспертов, применять еще и полученные в результате эксперимента результаты. Но как такой эксперимент организовать? Пусть, например, нас интересует влияние продолжительности вулканизации на прочность вулканизатов, и мы хотим ограничиться двумя опытами. Если мы возьмем и разорвем по пять лопаток, вулканизованных при продолжительности вулканизации 15 мин и 16 мин, скорее всего мы никакой разницы не ощутим. А если мы выберем продолжительность вулканизации 15 мин

и 50 мин, то опять-таки может так получиться, что в результате реверсии показатели будут иметь сопоставимые значения. Тут необходимо так подобрать диапазон изменения фактора, чтобы зависимость отклика от фактора была, по возможности, близка к линейной. И если у нас много факторов, то получается уравнение многомерной плоскости.

Множество планов, посвященных решению таких задач, можно разделить на *три группы*: ненасыщенные (в этом случае количество параметров модели меньше количества экспериментальных точек), насыщенные (количество параметров модели равно количеству экспериментальных точек) и сверхнасыщенные (здесь количество параметров модели больше количества экспериментальных точек). В последнем случае построение модели в традиционном понимании становится проблематичным.

Одно уточнение: под экспериментальной точкой понимается совокупность значений уровней варьирования факторов. Например, получены результаты при продолжительности вулканизации 10 мин и 20 мин и при двух температурах: 130 °С и 150 °С. То есть четыре точки. В каждой точке может быть хоть по 100 параллельных наблюдений — это неважно; точек все равно четыре.

5.2.1. Полный факторный эксперимент

В.В. Налимов отмечал [18, с. 31], что факторный эксперимент — это первое звено в цепи тех идей, последовательное развитие которых привело к разработке статистических методов математического описания сложных химических и металлургических процессов.

Пусть имеются два фактора (независимые переменные) \tilde{x}_1 и \tilde{x}_2 (продолжительность вулканизации и температура, например), и каждый из них мы варьлируем на двух уровнях (минимальном и максимальном). Эти два уровня мы условно обозначаем символами -1 и $+1$. Тогда кодовое обозначение опыта $x_1 = +1, x_2 = +1$ будет означать, что время выбрано 20 мин, а температура 150 °С. При $x_1 = +1, x_2 = -1$ 20 мин и 130 °С; в случае $x_1 = -1, x_2 = +1$ 10 мин и 150 °С и, наконец, $x_1 = -1, x_2 = -1$ соответствует 10 мин и 130 °С.

Для перехода от натурального масштаба переменной \tilde{x} к условному x следует использовать такое соотношение:

$$x = \frac{\tilde{x} - (\tilde{x}_{\max} + \tilde{x}_{\min})/2}{(\tilde{x}_{\max} - \tilde{x}_{\min})/2}. \quad (5.11)$$

В случае температуры, например, это будет выглядеть так:

$$x_2 = \frac{\tilde{x}_2 - (150 + 130)/2}{(150 - 130)/2} = \frac{\tilde{x}_2 - 140}{10}.$$

Легко видеть, что все возможные комбинации для двух факторов, варьируемых на двух уровнях, будут исчерпаны, если мы поставим четыре опыта так, как это показано в табл. 5.8. Такая совокупность точек называется *полным факторным экспериментом* (ПФЭ).

Таблица 5.8. План

x_1	x_2
-1	-1
+1	-1
-1	+1
+1	+1

Строки в этой таблице представляют собой координаты экспериментальных точек, расположенных в углах квадрата (полный факторный эксперимент ПФЭ 2^2 , основание — число уровней факторов, показатель степени — число факторов). Проведя эксперименты в соответствующих точках, мы получим столбец результатов. Для экономии места изобразим его в виде строки (эта операция называется транспонированием): $y_1 y_2 y_3 y_4$. Опять же для экономии места план часто изображают таким образом: (1), a , b , ab . Что это означает? Символ (1) говорит, что факторы находятся на минимальном уровне. Буква a означает, что первый фактор на максимальном уровне, а остальные — на минимальном. Соответственно, b говорит о том, что второй фактор на максимальном уровне, а остальные — на минимальном. В случае ab первый и второй факторы находят на верхнем уровне, а остальные (если они есть) — на нижнем.

По этим четырем точкам можно получить неполное квадратное уравнение регрессии следующего вида:

$$y_p = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2. \quad (5.12)$$

В этом уравнении y_p — рассчитанное значение отклика; b_0 представляет собой своего рода фон, на котором оценивается влияние факторов; b_1 и b_2 — коэффициенты, характеризующие влияние на отклик первого и второго фактора соответственно (чем они больше по абсолютной величине, тем сильнее влияние фактора). А вот коэффициент b_{12} количественно характеризует совместное влияние двух факторов. Этот коэффициент называется эффектом взаимодействия первого порядка или бинарным синергизмом. Только надо говорить не « b двенадцать», а « b один, два».

Для того чтобы коэффициенты рассчитать, необходимо немного «поработать» с матрицей, изображенной в табл. 5.8. Действительно, первый столбец в ней как будто «отвечает» за b_1 , второй столбец — за b_2 , а кто ответит за b_0 и b_{12} ? С b_{12} все просто: перемножить почленно элементы столбца x_1 на элементы столбца x_2 и полученные значения записать в таблице справа.

А чтобы решить проблему с b_0 , поступим так: перепишем уравнение таким образом: $y = b_0 x_1^0 + b_1 x_1^1 + b_2 x_2^1 + b_{12} x_1^1 x_2^1$. Согласитесь, что ничего не изменилось, но стало ясно, что столбец, «отвечающий» за b_0 , должен состоять из единиц и находиться слева. То, что мы получим окончательно, называется матрицей планирования (табл. 5.9).

Таблица 5.9. Матрица планирования

x_0	x_1	x_2	$x_1 \cdot x_2$
+1	-1	-1	+1
+1	+1	-1	-1
+1	-1	+1	-1
+1	+1	+1	+1

В этом случае число опытов будет равно числу оцениваемых параметров, и у нас не останется степеней свободы для проверки адекватности модели, т. е. соответствия между экспериментальными и рассчитанными значениями отклика. Если есть основания полагать, что изучаемый процесс в заданном интервале варьирования переменных может быть описан линейной моделью ($b_{12} = 0$), то можно воспользоваться методом наименьших квадратов для определения трех коэффициентов регрессии b_0 , b_1 и b_2 , и одна степень свободы останется для проверки гипотезы адекватности.

Как уже подробно было описано, коэффициенты регрессии могут быть рассчитаны, исходя из соотношения: $B = (Z'Z)^{-1}(Z'y)$, где B — столбец коэффициентов, Z — матрица планирования, Z' — транспонированная матрица, $Z' \cdot Z$ — информационная матрица, $(Z' \cdot Z)^{-1}$ — ковариационная матрица, y — вектор-столбец результатов (отклика).

В рассматриваемом случае:

$$Z = \begin{vmatrix} +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 & +1 \end{vmatrix} \quad Z' = \begin{vmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 \end{vmatrix} \quad Z'Z = \begin{vmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{vmatrix}$$

Ковариационная матрица будет подобна информационной, только вместо цифры «4» будет $\frac{1}{4} = 0,25$.

Расчетные формулы для коэффициентов имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} b_0 &= (y_1 + y_2 + y_3 + y_4)/4; & b_1 &= (-y_1 + y_2 - y_3 + y_4)/4; \\ b_2 &= (-y_1 - y_2 + y_3 + y_4)/4; & b_{12} &= (y_1 - y_2 - y_3 + y_4)/4. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Полный факторный эксперимент обладает следующими полезными свойствами: 1) все столбцы в матрице планирования (кроме первого) ортогональны, т. е. сумма элементов столбца равна нулю; 2) это относится и к столбцам для эффектов взаимодействия; 3) сумма квадратов элементов каждого столбца равна общему количеству экспериментальных точек.

Из этих обстоятельств вытекают следующие выводы: 1) крайне просто производятся все вычисления; 2) все коэффициенты регрессии определяются независимо друг от друга; 3) все коэффициенты регрессии определяются с одинаковой и минимальной дисперсией; 4) планирование является ротатабельным — информация, содержащаяся в уравнении регрессии, равномерно «размазана» по сфере. О последнем речь пойдет чуть позже.

Организация эксперимента и проведение расчетов реализуются в следующей последовательности.

1. Выбор уровней варьирования факторов. 2. Построение плана эксперимента и матрицы планирования. 3. Проведение экспериментальных измерений. 4. Вычисление коэффициентов линейной модели. 5. Проверка значимости коэффициентов модели. 6. Проверка содержательности модели. 7. Проверка адекватности модели. 8. Проверка предсказательной способности в центре плана. 9. Анализ остатков. 10. Интерпретация (анализ) модели. 11. Принятие решений на основе полученной информации [1, с. 14–22; 7, с. 124–126; 12, с. 34–38; 15, с. 108–114; 16, с. 62–73; 17, с. 168–186; 19, с. 25–28; 20, с. 158–165; 21, с. 37–40; 22, с. 7–10; 23, с. 22–31; 24, с. 53–55; 25, с. 246–256; 26, с. 137–150; 27, с. 10–16; 28, с. 12–16].

Обратимся к примеру, где проанализируем перечисленные выше этапы анализа.

Пример. Рассмотрим результаты определения зависимости плотности (ρ) пористых резин от продолжительности вулканизации ($\tilde{x}_1^{\max} = 22$ мин и $\tilde{x}_1^{\min} = 8$ мин) и удельного давления при прессовании ($\tilde{x}_2^{\max} = 100$ МПа и $\tilde{x}_2^{\min} = 40$ МПа).

Реализован полный факторный эксперимент (ПФЭ) ²². То есть рассматривается два фактора, каждый из которых варьируется на двух уровнях. Результаты измерений иллюстрирует табл. 5.10.

Таблица 5.10. Результаты эксперимента по определению плотности

№ п/п	1	2	3	4
Фактор \tilde{x}_1 , время, мин	8	22	8	22
Фактор \tilde{x}_2 , давление, МПа	40	40	100	100
Плотность ρ , кг/м ³	30	47	34	59

Значения отклика (плотности, кг/м³) в центре плана при $\tilde{x}_1 = 15$ мин и $\tilde{x}_2 = 70$ МПа: 47; 47; 48 и 46 кг/м³ ($m = 4$).

Вычисление параметров моделей

1. $y = b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2$ — модель без эффекта взаимодействия;

2. $y = b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_{12} \cdot x_1 \cdot x_2$ — полная.

Организация эксперимента и проведение расчетов реализуются в следующей последовательности.

Выбор уровней варьирования факторов

Теория.

Преобразование значений уровней варьирования переменных \tilde{x}_1 и \tilde{x}_2 в условный масштаб x_1 и x_2 :

$x_j = (\tilde{x}_j - \tilde{x}_{j0})/A_X$, где $-1 \leq x_j \leq +1$; \tilde{x}_{j0} — натуральное значение основного уровня, A_X — интервал варьирования (в натуральном масштабе); $A_X = (\tilde{x}_{j\max} - \tilde{x}_{j\min})/2$; j — номер фактора.

Решение.

Количество точек плана $N = 4$.

$$\tilde{x}_{10} = (22 + 8)/2 = 15 \text{ мин}; \quad \tilde{x}_{20} = (100 + 40)/2 = 70 \text{ МПа};$$

$$A_{\tilde{x}_1} = (22 - 8)/2 = 7 \text{ мин}; \quad A_{\tilde{x}_2} = (100 - 40)/2 = 30 \text{ МПа};$$

$$x_1 = (\tilde{x}_1 - 15)/7; \quad x_2 = (\tilde{x}_2 - 70)/30;$$

$$\tilde{x}_1 \in [8; 22]; \quad \tilde{x}_2 \in [40; 100]; \quad x_1 \in [-1; +1]; \quad x_2 \in [-1; +1].$$

Построение плана эксперимента и матрицы планирования

План:				Матрицы планирования для моделей:	
№	x_1	x_2	Код	$\begin{pmatrix} +1-1-1 \\ +1+1-1 \\ +1-1+1 \\ +1+1+1 \end{pmatrix} (1)$	$\begin{pmatrix} +1-1-1+1 \\ +1+1-1-1 \\ +1-1+1-1 \\ +1+1+1+1 \end{pmatrix} (2)$
1	-1	-1	(1)		
2	+1	-1	<i>a</i>		
3	-1	+1	<i>b</i>		
4	+1	+1	<i>ab</i>		

Вычисление коэффициентов моделей

Теория.

$$b_0 = (y_1 + y_2 + y_3 + y_4)/N \quad b_1 = (-y_1 + y_2 - y_3 + y_4)/N$$

$$b_2 = (-y_1 - y_2 + y_3 + y_4)/N \quad b_{12} = (y_1 - y_2 - y_3 + y_4)/N.$$

Решение.

$$b_0 = (30 + 47 + 34 + 59)/4 = 42,5; \quad b_1 = (-30 + 47 - 34 + 59)/4 = 10,5;$$

$$b_2 = (-30 - 47 + 34 + 59)/4 = 4,0; \quad b_{12} = (30 - 47 - 34 + 59)/4 = 2,0.$$

Вычисление дисперсии воспроизводимости по m измерениям в центре плана

Теория.

$$S^2_{\text{восп}} = \sum_{i=1}^m (y_{0i} - y_{0\text{cp}})^2 / (m - 1); \quad y_{0\text{cp}} = \sum_{i=1}^m y_{0i} / m.$$

Решение.

$$m = 4;$$

$$y_{0cp} = (47 + 47 + 48 + 46)/4 = 47;$$

$$S^2_{восп} = ((47 - 47)^2 + (47 - 47)^2 + (48 - 47)^2 + (46 - 47)^2)/(4 - 1) = 0,67.$$

Проверка значимости коэффициентов модели

Теория.

Проверка значимости коэффициентов моделей осуществляется по критерию Стьюдента: $t = |b_i|/S_{bi}$; b_i — коэффициент, S_{bi} — корень квадратный из дисперсии определения этого коэффициента; $S^2_{bi} = S^2_{восп}/N$.

Решение.

$$S^2_b = 0,67/4 = 0,167; \quad S_b = 0,167^{0,5} = 0,408;$$

$$t_0 = 42,5/0,408 = 104,10; \quad t_1 = 10,5/0,408 = 25,72;$$

$$t_2 = 4,0/0,408 = 9,80; \quad t_{12} = 2,0/0,408 = 4,90.$$

Интерпретация.

Если рассчитанное значение t -критерия больше табличного (табл. I Приложения) при числе степеней свободы $v = m - 1$ и уровне значимости α , то можно считать значимым этот коэффициент; в противном случае может ставиться вопрос об исключении этого коэффициента из модели.

$$v = 4 - 1 = 3; \quad \alpha = 5\%;$$

$$t_{(3; 0,05)} = 3,182;$$

$$t_0 = 104,10 > t_{кр} = 3,18; \quad t_1 = 25,72 > t_{кр} = 3,18;$$

$$t_2 = 9,80 > t_{кр} = 3,18; \quad t_{12} = 4,90 > t_{кр} = 3,18.$$

Все коэффициенты обеих моделей значимы с вероятностью 95%.

Проверка содержательности модели

Теория.

Проверка содержательности первой модели (для нее количество точек плана N больше количества коэффициентов p) проводится по критерию Фишера: $F = S^2_{R0}/S^2_R$.

$S^2_{R0} = (y_u - y_{иср})^2/(N - 1)$; связана с отклонениями экспериментальных значений от среднего значения.

$S^2_R = (y_u - y_{ирасч})^2/(N - p)$; связана с отклонениями экспериментальных значений от рассчитанных по уравнению.

$$y_{иср} = y_u/N.$$

y_u — экспериментальное значение;

$y_{ирасч}$ — рассчитанное значение;

$y_{иср}$ — среднее из точек плана.

Решение.

Экспериментальные значения: 30; 47; 34; 59.

Рассчитанные значения:

$$42,5 + 10,5 \times (-1) + 4,0 \times (-1) = 28; \quad 42,5 + 10,5 \times (+1) + 4,0 \times (-1) = 49;$$

$$42,5 + 10,5 \times (-1) + 4,0 \times (+1) = 36; \quad 42,5 + 10,5 \times (+1) + 4,0 \times (+1) = 57.$$

Расчет содержательности:

$$y_{иср} = (30 + 47 + 34 + 59)/4 = 42,5;$$

$$S^2_{R0} = ((30 - 42,5)^2 + (47 - 42,5)^2 + (34 - 42,5)^2 + (59 - 42,5)^2)/(4 - 1) = 173,67;$$

$$S^2_R = ((30 - 28)^2 + (47 - 49)^2 + (34 - 36)^2 + (59 - 57)^2)/(4 - 3) = 16;$$

$$F = 173,67/16 = 10,85.$$

Интерпретация.

Содержательность модели можно считать удовлетворительной, если дисперсия относительно среднего S^2_{R0} значительно (не менее чем в 3–5 раз) превосходит величину остаточной дисперсии S^2_R .

В рассматриваемом случае дисперсионное отношение S^2_{R0}/S^2_R составило 10,85, что выше значения, принятого за норму при оценке содержательности модели: $10,85 < 5$.

Проверка адекватности модели

Проверку адекватности модели также можно осуществить по критерию Фишера. Теория.

$$F = S^2_R/S^2_{восп} = ((y_i - y_{ирасч})^2/(N - p))/((y_{0i} - y_{0ср})^2/(m - 1)).$$

Решение.

$$S^2_R = 16; S^2_{восп} = 0,67; N = 4; p = 3; m = 4;$$

$$F = 16/0,67 = 24.$$

Интерпретация.

Рассчитанное значение критерия Фишера следует сравнить с табличным (таблица XII Приложения) при числе степеней свободы $v_1 = N - p$ и $v_2 = m - 1$ ($\alpha = 0,05$).

Условие адекватности $F_{расч} < F_{табл.}$

$$v_1 = 4 - 3 = 1; v_2 = 4 - 1 = 3; \alpha = 5\%;$$

$$F_{(1;3;0,05)} = 10,13; F = 24 > F_{кр} = 10,13$$

Первая из рассмотренных моделей не может считаться адекватной.

Проверка предсказательной способности в центре плана

Теория.

Проверка заключается в сопоставлении на основе t -критерия коэффициента b_0 со средним значением отклика в центре плана: $t = |b_0 - y_{0ср}|/(S^2_{восп}/m)^{0,5}$.

Решение.

$$b_0 = 42,5; y_{0ср} = 47; S^2_{восп} = 0,67; m = 4;$$

$$t = |42,5 - 47|/((0,67/4)^{0,5}) = 11,0.$$

Интерпретация.

Рассчитанное значение критерия сравнивают с табличным (таблица I Приложения) при числе степеней свободы $v = m - 1$. Предсказание в центре плана удовлетворительно при условии $t_{расч} < t_{табл.}$

$$v = 4 - 1 = 3; \alpha = 0,05; t_{(3;0,05)} = 3,182;$$

$$t = 11,0 > t_{кр} = 3,182.$$

Предсказательная способность моделей в центре плана низкая из-за кривизны поверхности.

Рассмотрим решение этой задачи с помощью программы *Table Curve 3D* (без нулевых точек).

Ранг 31, Уравнение 1 $z = a + bx + cy$.

Статистический анализ приведен в табл. 5.11, 5.12, 5.13 и 5.14.

Таблица 5.11. Критерии качества модели

Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент детерминации	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
0,9692898273	Не определен	4,0000	15,78125

Таблица 5.12. Параметры модели

Параметр	Ошибка	Критерий Стьюдента	Доверительные пределы	
$a = 42,5$	2,0000	21,25	17,087590	67,912410
$b = 10,5$	2,0000	5,25	-14,91241	35,912410
$c = 4,0$	2,0000	2,00	-21,41241	29,412410

Таблица 5.13. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	$SSR = 505$	$m - 1 = 2$	$MSR = 252,5$	$F = 15,7812$
Ошибка	$SSE = 16$	$n - m = 1$	$MSE = 16$	
Сумма	$SSM = 521$	$n - 1 = 3$		

Таблица 5.14. Сопоставление эксперимента (z) с расчетом (z_p)

x	y	z	z_p	Невязка	Невязка, %	Доверительные пределы	
-1	-1	30	28	2	6,6666667	-16,01558	72,015584
-1	1	34	36	-2	-5,882353	-8,015584	80,015584
1	-1	47	49	-2	-4,255319	4,9844156	93,015584
1	1	59	57	2	3,3898305	12,984416	101,01558

Листинг программы для решения задачи с помощью пакета MATLAB.

```

echo on
% ПОЛНЫЙ ФАКТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ 2^2
% модель y=b0+b1*x1+b2*x2+b12*x1*x2
%
% ПЛАН
% N п/п x1 x2 Обозн. N п/п x1 x2 Обозн.
% 1 -1 -1 (1) 3 -1 +1 b
% 2 +1 -1 a 4 +1 +1 ab
echo off
y=input('ВВЕДИТЕ ЧЕТЫРЕ ЧИСЛА В СООТВЕТСТВИИ С ПЛАНOM (в [], че-
рез «;»)\');
z=[1 -1 -1 1;1 1 -1 -1;1 -1 1 -1;1 1 1 1]; - МАТРИЦА ПЛАНИРОВАНИЯ;
b=(inv(z'*z))*(z'*y); - РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ;
y0=input('ВВЕДИТЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ В ЦЕНТРЕ ПЛАНА (в [], через «;»)\');
y0l=mean(y0); - СРЕДНЕЕ ЗНАЧЕНИЕ В ЦЕНТРЕ;
n0=max(size(y0)); - ЧИСЛО ТОЧЕК В ЦЕНТРЕ;
SSe=var(y0) - ДИСПЕРСИЯ ВОСПРОИЗВОДИМОСТИ;
SSb=SSe/4; - ДИСПЕРСИЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ;
Sb=sqrt(SSb); - ОШИБКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ;
t0=(abs(b(1)))/Sb;t1=(abs(b(2)))/Sb;
t2=(abs(b(3)))/Sb;t12=(abs(b(4)))/Sb; -
РАССЧИТАННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ КРИТЕРИЯ СТЬЮДЕНТА;
t=[12.71;4.303;3.183;2.776;...]; - ФРАГМЕНТ ТАБЛИЦЫ t-критерия;
echo on
% ПРОВЕРКА ЗНАЧИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ
% НА ЭКРАНЕ ДВА СТОЛБЦА: в 1-ом - ЗНАЧЕНИЯ t-КРИТЕРИЯ ДЛЯ КОЭФ-
ФИЦИЕНТОВ b0, b1, b2 и b12; во 2-ом - ТАБЛИЧНОЕ ЗНАЧЕНИЕ КРИТЕ-
РИЯ СТЬЮДЕНТА
% УСЛОВИЕ ЗНАЧИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА tэксп>tтабл
echo off
tt=t(n0-1); - ВЫБОР КРИТЕРИЯ ИЗ ТАБЛИЦЫ;
T=[t0;t1;t2;t12];TT=(T.^0)*tt;r=[T TT]; disp(r) - ФОРМИРОВАНИЕ
И ВЫВОД НА ДИСПЛЕЙ ДВУХ СТОЛБЦОВ РАССЧИТАННЫХ И ТАБЛИЧНЫХ ЗНА-
ЧЕНИЙ КРИТЕРИЯ;
echo on
% ПРОВЕРКА ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ МОДЕЛИ
% В ЦЕНТРЕ ПЛАНА
echo off
Tp=(abs(b(1)-y0l))/(sqrt(SSe/n0)); - РАСЧЕТ КРИТЕРИЯ ДЛЯ ПРОВЕР-
КИ ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ;
rT=t(n0-1)-Tp; - РАЗНИЦА КРИТЕРИЕВ;
if rT>=0
('ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНАЯ СПОСОБНОСТЬ ВЕЛИКА')
else
('ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНАЯ СПОСОБНОСТЬ НИЗКАЯ ИЗ-ЗА КРИВИЗНЫ ПОВЕРХНОСТИ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ.

```

А теперь обсудим один важный и интересный вопрос. Почему используется полный факторный эксперимент? Почему выбрано именно такое расположение точек, как изображено на рис. 5.4 слева, а не так, как нарисовано, к примеру, справа? Тоже четыре точки, только не по углам, а по сторонам расположены.

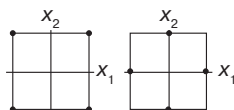


Рис. 5.4. Планы

Чтобы разобраться в этом, изобразим матрицы планирования в обоих случаях применительно к модели без эффекта взаимодействия (рис. 5.5 слева).

Теперь желательно найти транспонированные матрицы для обоих случаев и умножить эти транспонированные матрицы на соответствующие им матрицы планирования. В результате получим информационные матрицы (они показаны на рис. 5.5 справа).

$$\begin{pmatrix} +1 & -1 & 0 \\ +1 & +1 & 0 \\ +1 & 0 & -1 \\ +1 & 0 & +1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} +1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Рис. 5.5. Матрицы планирования и информационные матрицы

Вспомним, как вычислялась дисперсия определения коэффициентов: $S_{bi}^2 = S_{\text{восп}}^2 / N$. В случае ПФЭ 2^2 N было равно 4 (внимание на левую информационную матрицу!). А в альтернативном случае, когда экспериментальные точки расположены на сторонах, $N = 2$. Следовательно, дисперсия определения коэффициентов в два раза больше.

И последнее, почему мы от натурального выражения факторов (масс. ч., МПа, °С...) перешли к условному? Вспомним уравнение (5.12): $y_p = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2$. Пусть y_p – прочность (МПа), x_1 – температура, (°С), x_2 – содержание ускорителя (масс. ч.). Тогда b_1 будет измеряться в МПа/°С, а b_2 будет измеряться в МПа/масс. ч. Понятно, что сравнивать их между собой нельзя. А если все x в кодированном виде, то все b будут иметь одинаковую размерность, и их можно сравнивать.

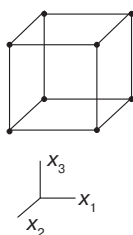
Мы начали с ПФЭ 2^2 , но особого практического интереса это не представляет, поскольку сравниваются только два фактора.

Поэтому перейдем к ПФЭ 2^3 .

Все возможные комбинации для трех факторов, варьируемых на двух уровнях, будут реализованы, если мы поставим восемь (два в кубе) опытов так, как это показано в табл. 5.15 и на рис. 5.6.

Таблица 5.15. Полный факторный эксперимент 2^3

План			Обозначение
x_1	x_2	x_3	
-1	-1	-1	(1)
+1	-1	-1	a
-1	+1	-1	b
+1	+1	-1	ab
-1	-1	+1	c
+1	-1	+1	ac
-1	+1	+1	bc
+1	+1	+1	abc

Рис. 5.6. ПФЭ 2^3

Начало координат находится в центре куба.

Итак, восемь точек в вершинах куба. Строки плана, как и прежде, показывают нам координаты экспериментальных точек.

После проведения эксперимента появится столбец значений отклика от y_1 до y_8 .

Теперь надо определиться с тем, какое уравнение мы выбираем для описания зависимости отклика от трех факторов. Можно взять уравнение сугубо линейное, а можно ввести эффекты взаимодействия:

$$y_p = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3; \quad (5.14)$$

$$y_p = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3. \quad (5.15)$$

Сконструируем матрицы планирования для двух этих случаев:

$$Z_1 = \begin{pmatrix} +1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & +1 \end{pmatrix} \quad Z_2 = \begin{pmatrix} +1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \end{pmatrix}$$

Как и в случае ПФЭ 2^2 , все столбцы соответствующих матриц ортогональны, т. е. сумма элементов по столбцам равна нулю.

Информационные матрицы (а также ковариационные) будут диагональными, т. е. все элементы, кроме элементов главной диагонали (которая из левого верхнего угла в правый нижний) будут равны нулю. А по диагонали будут стоять восьмерки (в информационных матрицах); четыре для $Z_1' \cdot Z_1$; и восемь — для $Z_2' \cdot Z_2$. А в ковариационных матрицах по главным диагоналям разместятся $1/8 = 0,125$. Что из этого следует? Простые формулы для вычисления коэффициентов следуют:

$$\begin{aligned} b_0 &= (y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8)/8; \quad b_1 = (-y_1 + y_2 - y_3 + y_4 - y_5 + y_6 - y_7 + y_8)/8; \\ b_2 &= (-y_1 - y_2 + y_3 + y_4 - y_5 - y_6 + y_7 + y_8)/8; \quad b_3 = (-y_1 - y_2 - y_3 - y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8)/8; \\ b_{12} &= (y_1 - y_2 - y_3 + y_4 + y_5 - y_6 - y_7 + y_8)/8; \quad b_{13} = (y_1 - y_2 + y_3 - y_4 - y_5 + y_6 - y_7 + y_8)/8; \\ b_{23} &= (y_1 + y_2 - y_3 - y_4 - y_5 - y_6 + y_7 + y_8)/8; \quad b_{123} = (-y_1 + y_2 + y_3 - y_4 + y_5 - y_6 - y_7 + y_8)/8. \end{aligned} \quad (5.16)$$

А теперь самое время обратиться к каким-то числам.

Пример. Рассмотрим результаты изучения зависимости тангенса угла диэлектрических потерь ($\text{tg}\delta$) высоконаполненного композиционного материала от температуры прессования ($\tilde{x}_1^{\max} = 170^\circ\text{C}$ и $\tilde{x}_1^{\min} = 130^\circ\text{C}$), времени выдержки материала под давлением ($\tilde{x}_2^{\max} = 5$ мин/мм и $\tilde{x}_2^{\min} = 1$ мин/мм) и частоты ($\tilde{x}_3^{\max} = 90$ кГц и $\tilde{x}_3^{\min} = 70$ кГц). Реализован полный факторный эксперимент (ПФЭ) 2^3 . Экспериментальные данные даны в табл. 5.16.

Значения отклика ($\text{tg}\delta \times 10^4$) в центре плана при $\tilde{x}_{10} = 150^\circ\text{C}$, $\tilde{x}_{20} = 3$ мин/мм и $\tilde{x}_{30} = 80$ кГц: 170; 167 и 173 ($m = 3$).

Вычисление параметров линейных моделей

1. $y = b_0 + b_1 \times x_1 + b_2 \times x_2 + b_3 \times x_3$ — модель без эффектов взаимодействия;
2. $y = b_0 + b_1 \times x_1 + b_2 \times x_2 + b_3 \times x_3 + b_{12} \times x_1 \times x_2 + b_{13} \times x_1 \times x_3 + b_{23} \times x_2 \times x_3$ — модель с эффектами взаимодействия, но без тройного взаимодействия.

Таблица 5.16. Результаты эксперимента по определению $\text{tg}\delta$

№ п/п	1	2	3	4	5	6	7	8
$\tilde{x}_1, ^\circ\text{C}$	130	170	130	170	130	170	130	170
$\tilde{x}_2, \text{мин/мм}$	1	1	5	5	1	1	5	5
$\tilde{x}_3, \text{кГц}$	70	70	70	70	90	90	90	90
$\text{tg}\delta \times 10^4$	151	166	148	172	173	195	149	176

Теория.

Организация эксперимента и проведение расчетов реализуются в следующей последовательности.

Выбор уровней варьирования факторов

Преобразование значений уровней варьирования переменных \tilde{x}_1, \tilde{x}_2 и \tilde{x}_3 в условный масштаб x_1, x_2 и x_3 : $x_j = (\tilde{x}_j - \tilde{x}_{j0})/A_x - 1$; \tilde{x}_{j0} – натуральное значение основного уровня, A_x – интервал варьирования (в натуральном масштабе); $A_x = (\tilde{x}_{j\max} - \tilde{x}_{j\min})/2$; j – номер фактора.

Решение.

Количество точек плана $N = 8$.

$$\tilde{x}_{10} = (170 + 130)/2 = 150 ^\circ\text{C}; \quad \tilde{x}_{20} = (5 + 1)/2 = 3 \text{ мин/мм}; \quad \tilde{x}_{30} = (90 + 70)/2 = 80 \text{ кГц}.$$

$$A_{x1} = (170 - 130)/2 = 20 ^\circ\text{C}; \quad A_{x2} = (5 - 1)/2 = 2 \text{ мин/мм}; \quad A_{x3} = (90 - 70)/2 = 10 \text{ кГц}.$$

$$x_1 = (\tilde{x}_1 - 150)/20; \quad x_2 = (\tilde{x}_2 - 3)/2; \quad x_3 = (\tilde{x}_3 - 80)/10.$$

Построение плана эксперимента и матрицы планирования

План:

№	1	2	3	4	5	6	7	8
x_1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1
x_2	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1
x_3	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	+1

Матрицы планирования (единицы можно не писать, «плюс» означает +1, «минус» означает -1):

Первая модель

$$\begin{pmatrix} + & - & - & - \\ + & + & - & - \\ + & - & + & + \\ + & + & + & + \\ + & - & - & - \\ + & + & - & - \\ + & - & + & + \\ + & + & + & + \end{pmatrix}$$

Вторая модель

$$\begin{pmatrix} + & - & - & - & + & + & + \\ + & + & - & - & - & - & + \\ + & - & + & - & - & + & - \\ + & + & + & - & + & - & - \\ + & - & - & + & + & - & - \\ + & + & - & + & - & + & - \\ + & - & + & + & - & - & + \\ + & + & + & + & + & + & + \end{pmatrix}$$

Вычисление коэффициентов линейных моделей

Теория.

$$b_0 = \Sigma y / N; \quad b_i = \Sigma x_i \times y / N; \quad b_{ij} = \Sigma x_i \times x_j \times y / N.$$

Решение.

$$b_0 = (151 + 166 + 148 + 172 + 173 + 195 + 149 + 176) / 8 = 166,25;$$

$$b_1 = (-151 + 166 - 148 + 172 - 173 + 195 - 149 + 176) / 8 = 11,00;$$

$$b_2 = (-151 - 166 + 148 + 172 - 173 - 195 + 149 + 176) / 8 = -5,00;$$

$$b_3 = (-151 - 166 - 148 - 172 + 173 + 195 + 149 + 176) / 8 = 7,00;$$

$$b_{12} = (151 - 166 - 148 + 172 + 173 - 195 - 149 + 176) / 8 = 1,75;$$

$$b_{13} = (151 - 166 + 148 - 172 - 173 + 195 - 149 + 176) / 8 = 1,25;$$

$$b_{23} = (151 + 166 - 148 - 172 - 173 - 195 + 149 + 176) / 8 = -5,75.$$

Вычисление дисперсии воспроизводимости по m измерениям в центре плана

Теория.

$$S^2_{\text{восп}} = (y_{0i} - y_{0\text{ср}})^2 / (m - 1); \quad y_{0\text{ср}} = y_{0i} / m.$$

Решение.

$$m = 3;$$

$$y_{0\text{ср}} = (170 + 167 + 173) / 3 = 170;$$

$$S^2_{\text{восп}} = ((170 - 170)^2 + (167 - 170)^2 + (173 - 170)^2) / (3 - 1) = 9,00.$$

Проверка значимости коэффициентов модели с целью исключения незначимых

Теория.

Проверка значимости коэффициентов осуществляется по критерию Стьюдента:

$$t = |b_i| / S_{b_i}; \quad S^2_{b_i} = S^2_{\text{восп}} / N.$$

Решение.

$$S^2_b = 9,0 / 8 = 1,125; \quad S_b = 1,125^{0,5} = 1,061;$$

$$t_0 = 166,25 / 1,061 = 156,74;$$

$$t_1 = 11,00 / 1,061 = 10,37; \quad t_2 = 5,00 / 1,061 = 4,71; \quad t_3 = 7,00 / 1,061 = 6,60;$$

$$t_{12} = 1,75 / 1,061 = 1,65; \quad t_{13} = 1,25 / 1,061 = 1,18; \quad t_{23} = 5,75 / 1,061 = 5,42.$$

Интерпретация.

Условие значимости коэффициентов рассматриваемых моделей: $t > t_{кр}$ при числе степеней свободы $\nu = m - 1$ и уровне значимости α .

$$\nu = 3 - 1 = 2; \alpha = 5\%, t_{(2; 0,05)} = 4,303;$$

$$t_{12} = 1,65 < t_{кр} = 4,303;$$

$$t_{13} = 1,18 < t_{кр} = 4,303;$$

Коэффициенты b_{12} и b_{13} могут быть исключены из модели

Экспериментальные и рассчитанные по двум моделям значения отклика ($\text{tg}\delta \times 10^4$):

$y_{\text{эксп}}$	151	166	148	172	173	195	149	176
$y_{\text{рас.1}}$	153,2	175,2	143,2	165,2	167,2	189,2	157,2	179,2
$y_{\text{рас.2}}$	147,5	169,5	149,0	171,0	173,0	195,0	151,5	173,5

Критерии качества моделей

Теория.

Среднее по плану $y_{\text{иср}} = \sum_{u=1}^N y_u / N$.

Дисперсия относительно среднего $S_{R0}^2 = \sum_{u=1}^N (y_u - y_{\text{иср}})^2 / (N - 1)$.

Остаточная дисперсия $S_R^2 = \sum_{u=1}^N (y_u - y_{\text{иср}})^2 / (N - p)$; p — число коэффициентов.

Проверка содержательности моделей проводится по критерию Фишера: $F = S_{R0}^2 / S_R^2$.

Адекватность модели проверяется по критерию Фишера: $F = S_R^2 / S_{\text{восп}}^2$.

Проверка предсказательной способности модели осуществляется по критерию Стьюдента:

$$t = |b_0 - y_{0\text{ср}}| / (S_{\text{восп}}^2 / m)^{0,5}.$$

Решение.

$$y_{\text{иср}} = (151 + 166 + 148 + 172 + 173 + 195 + 149 + 176) / 8 = 166,5;$$

$$S_{R0}^2 = ((151 - 166,5)^2 + (166 - 166,5)^2 + (148 - 166,5)^2 + (172 - 166,5)^2 + (173 - 166,5)^2 + (195 - 166,5)^2 + (149 - 166,5)^2 + (176 - 166,5)^2) / (8 - 1);$$

$$S_{R0}^2 = 266,21;$$

$$S_{R1}^2 = ((151 - 153,2)^2 + (166 - 175,2)^2 + (148 - 143,2)^2 + (172 - 165,2)^2 + (173 - 167,2)^2 + (195 - 189,2)^2 + (149 - 157,2)^2 + (176 - 179,2)^2) / (8 - 4);$$

$$S_{R1}^2 = 75,88;$$

$$S_{R2}^2 = ((151 - 147,5)^2 + (166 - 169,5)^2 + (148 - 149,0)^2 + (172 - 171,0)^2 + (173 - 173,0)^2 + (195 - 195,0)^2 + (149 - 151,5)^2 + (176 - 173,5)^2) / (8 - 5);$$

$$S_{R2}^2 = 13,00.$$

Итоги по *содержательности* моделей:

$$S^2_{R0} = 266,21; \quad S^2_{R1} = 75,88; \quad S^2_{R2} = 13,0;$$

$$F_1 = 266,21/75,88 = 3,5; \quad F_2 = 266,21/13,0 = 20,5.$$

Интерпретация.

Содержательность модели можно считать удовлетворительной, если S^2_{R0} значительно (не менее чем в 3–5 раз) превосходит S^2_R .

Второе уравнение имеет высокий уровень содержательности ($20,5 > 5$), а первое – низкий ($3,5 < 5$).

Итоги по *адекватности* моделей:

$$S^2_{R1} = 75,88; \quad S^2_{R2} = 13,0; \quad S^2_{\text{восп}} = 9,0;$$

$$F_1 = 75,88/9,0 = 8,4; \quad F_2 = 13,00/9,0 = 1,4,$$

Интерпретация.

Числа степеней свободы при выборе критерия Фишера: $v_1 = N - p$ и $v_2 = m - 1$.
Уровень значимости $\alpha = 5\%$. Условие адекватности модели: $F_{\text{расч}} < F_{\text{табл}}$.

Модель 1: $v_1 = 8 - 4 = 4$; $v_2 = 3 - 1 = 2$; модель 2: $v_1 = 8 - 5 = 3$; $v_2 = 3 - 1 = 2$;

$$F_{(4;2;0,05)} = 9,12; \quad F_{(3;2;0,05)} = 9,01; \quad F_1 = 8,4 < 9,12; \quad F_2 = 1,4 < 9,01.$$

Обе модели адекватны.

Итоги по *предсказательной способности* моделей:

$$b_0 = 166,25; \quad y_{\text{оср}} = 170; \quad S^2_{\text{восп}} = 9,0; \quad m = 3;$$

$$t = |166,25 - 170| / ((9,0/3)^{0,5}) = 2,17.$$

Интерпретация.

Предсказание в центре плана удовлетворительно при заданной вероятности.

Условие: $t_{\text{расч}} < t_{\text{табл}}$.

$$v = 3 - 1 = 2; \quad \alpha = 0,05; \quad t_{(2;0,05)} = 4,303;$$

$$t = 2,17 < t_{\text{кр}} = 4,303.$$

Предсказательная способность моделей в центре плана высока.

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```
echo on
% ПОЛНЫЙ ФАКТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ 2^3
% модель (1) y=b0+b1*x1+b2*x2+b3*x3
% модель (2) y=b0+b1*x1+b2*x2+b3*x3+b12*x1*x2+b13*x1*x3+
% +b23*x2*x3+b123*x1*x2*x3
%
% ПЛАН
% N п/п x1 x2 x3 Обозн. N п/п x1 x2 x3 Обозн.
% 1 -1 -1 -1 (1) 5 -1 -1 +1 c
% 2 +1 -1 -1 a 6 +1 -1 +1 ac
% 3 -1 +1 -1 b 7 -1 +1 +1 bc
% 4 +1 +1 -1 ab 8 +1 +1 +1 abc
echo off
pause
```

```

y=input('ВВЕДИТЕ ВОСЕМЬ ЧИСЕЛ В СООТВЕТСТВИИ С ПЛАНOM(в [], че-
рез «;»)\');
x0=y.^0; - ФИКТИВНАЯ ПЕРЕМЕННАЯ;
x1=[-1;1;-1;1;-1;1;-1;1]; - УРОВНИ
x2=[-1;-1;1;1;-1;-1;1;1]; ВАРЬИРОВАНИЯ
x3=[-1;-1;-1;-1;1;1;1;1]; ФАКТОРОВ
z1=[x0 x1 x2 x3]; - МАТРИЦЫ ПЛАНИРОВАНИЯ;
z2=[x0 x1 x2 x3 x1.*x2 x1.*x3 x2.*x3 x1.*x2.*x3];
b1=(inv(z1'*z1))*(z1'*y); - b2=(inv(z2'*z2))*(z2'*y);
ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛЕЙ;
y0=input('ВВЕДИТЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ В ЦЕНТРЕ ПЛАНА (в [], через «;»)\');
y01=mean(y0); - СРЕДНЕЕ ЗНАЧЕНИЕ В ЦЕНТРЕ;
n0=max(size(y0)); - КОЛИЧЕСТВО НУЛЕВЫХ ТОЧЕК;
SSe=var(y0); - ДИСПЕРСИЯ ВОСПРОИЗВОДИМОСТИ;
SSb=SSe/8; - ДИСПЕРСИЯ РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТОВ;
Sb=sqrt(SSb); - ОШИБКА РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТОВ;
t0=(abs(b2(1)))/Sb;t1=(abs(b2(2)))/Sb;
t2=(abs(b2(3)))/Sb;t3=(abs(b2(4)))/Sb;
t12=(abs(b2(5)))/Sb;t13=(abs(b2(6)))/Sb;
t23=(abs(b2(7)))/Sb;t123=(abs(b2(8)))/Sb; - ВЫЧИСЛЕНИЕ КРИТЕРИ-
ЕВ СТЬЮДЕНТА;
t=[12.71;4.303;3.183;...]; - ФРАГМЕНТ ТАБЛИЦЫ;
echo on
% ПРОВЕРКА ЗНАЧИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ
% НА ЭКРАНЕ ДВА СТОЛБЦА: в 1-ом - ЗНАЧЕНИЯ t-КРИТЕРИЯ ДЛЯ b0,
b1, b2, b3, b12, b13, b23 и b123; во 2-ом - ТАБЛИЧНОЕ ЗНАЧЕНИЕ
КРИТЕРИЯ СТЬЮДЕНТА, УСЛОВИЕ ЗНАЧИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА tэксп>tтабл
echo off
tt=t(n0-1);T=[t0;t1;t2;t3;t12;t13;t23;t123];
TT=(T.^0)*tt;r=[T TT];disp(r) - ФОРМИРОВАНИЕ И ВЫВОД НА ДИСПЛЕЙ
ДВУХ СТОЛБЦОВ РАССЧИТАННЫХ И ТАБЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЙ КРИТЕРИЯ;
yp=z1*b1; - РАСЧЕТНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ОТКЛИКА;
SSr=((y-yp)'*(y-yp))/(8-4); - ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ;
y1=mean(y); - СРЕДНЕЕ ИЗ ТОЧЕК ПЛАНА;
SSr0=((y-y1)'*(y-y1))/(8-1); - ДИСПЕРСИЯ ОТНОСИТЕЛЬНО СРЕДНЕГО;
echo on
% ПРОВЕРКА СОДЕРЖАТЕЛЬНОСТИ МОДЕЛИ (1)
echo off
pause
F1=SSr0/SSr; - РАСЧЕТ КРИТЕРИЯ ФИШЕРА;
df=F1-5; - РАЗНИЦА КРИТЕРИЕВ;
if df>=0
    ('СОДЕРЖАТЕЛЬНОСТЬ МОДЕЛИ ВЕЛИКА')
else

```

```

    ('СОДЕРЖАТЕЛЬНОСТЬ МОДЕЛИ НИЗКАЯ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ;
echo on
% ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИ (1)
echo off
F2=SSr/SSe; - РАСЧЕТ КРИТЕРИЯ ФИШЕРА;
Ft=[161 200 216...]; - ФРАГМЕНТ ТАБЛИЦЫ
Ft=[Ft;10.13 9.55 9.28...]; КРИТЕРИЯ;
Fkr=Ft(n0-1,4); - ВЫБОР КРИТЕРИЯ ИЗ ТАБЛИЦЫ;
w=Fkr-F2; - РАЗНОСТЬ КРИТЕРИЕВ;
if w>=0
    (' МОДЕЛЬ АДЕКВАТНА ')
    else
    ('ГИПОТЕЗА АДЕКВАТНОСТИ НЕ ПРОХОДИТ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ;
echo on
% ПРОВЕРКА ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ МОДЕЛЕЙ (1) И (2) В ЦЕН-
ТРЕ ПЛАНА
echo off
Tp=(abs(b1(1)-y01))/(sqrt(SSe/n0)); - РАСЧЕТ КРИТЕРИЯ ДЛЯ ПРО-
ВЕРКИ ГИПОТЕЗЫ;
rT=t(n0-1)-Tp; - РАЗНОСТЬ КРИТЕРИЕВ;
if rT>=0
    ('ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНАЯ СПОСОБНОСТЬ ВЕЛИКА')
    else
    ('ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНАЯ СПОСОБНОСТЬ НИЗКАЯ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ.

```

5.2.2. Дробные реплики

Мы сделали 8 опытов, а рассчитали 4–7 коэффициентов; в последнем случае — два незначимых. Восемь точек и всего четыре коэффициента. А нельзя ли количество точек уменьшить?

Возьмем в качестве примера, ПФЭ 2^3 с восемью точками, и возьмем, тоже в качестве примера, уже упомянутое выше уравнение для трех факторов о четырех коэффициентах: $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3$. Точек $N = 8$, параметров $n = 4$, число степеней свободы $v = N - n = 8 - 4 = 4$. А если количество точек уполовинить, сделать четыре точки, определить 4 коэффициента, а по центральной (сделать эксперимент в центре) точке судить о качестве модели.

Понятно, что исключать эти точки произвольно нельзя. Решению этой задачи служит процедура построения *дробных реплик* [1, с. 22–30; 7, с. 126–140; 12, с. 38–46; 15, с. 307–315; 16, с. 73–82; 17, с. 221–239; 18, с. 44–54; 19, с. 28–38; 20, с. 165–174; 21, с. 40–52, 78–86; 23, с. 190–216; 24, с. 55–62; 27, с. 17–19; 28, с. 17–31; 29, с. 118–139].

Вернитесь к рис. 5.6. Куб нарисован с восьмью вершинами-точками, предлагается четыре убрать. Нельзя убирать все четыре точки на одной грани куба, плохо убрать три точки с одной грани и одну — с противоположной. Надо оставить две точки сверху, две — снизу, две — справа, две — слева, две — спереди, две — сзади. Описанному соответствуют два изображения (рис. 5.7).

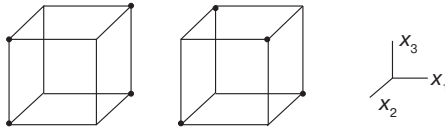


Рис. 5.7. Варианты расположения точек

На рис. 5.8 можно видеть матрицы планирования для двух таких расположений точек.

$$\begin{pmatrix} + & + & - & + \\ + & + & - & - \\ + & - & + & + \\ + & - & + & - \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} + & - & - & + \\ + & + & - & - \\ + & - & + & - \\ + & + & + & + \end{pmatrix}$$

Рис. 5.8. Матрицы планирования

Так вот если теперь найти транспонированные матрицы и умножить на те матрицы, которые нарисованы на рис. 5.8, то получатся матрицы информационные. А дальше надо найти определители этих информационных матриц. И для правого случая он будет 256, а для левого случая — ноль. Следовательно, берем то расположение точек, которое изображено на рис. 5.7 справа.

А теперь давайте внимательно посмотрим на матрицу планирования, которая справа. Ее условное обозначение $c; a; b; abc$. Первый столбец «отвечает» за b_0 , второй — за b_1 , третий — за b_2 и четвертый — за b_3 . Второй и третий столбцы идентичны тому, что мы видели для плана ПФЭ 2^2 , а четвертый столбец получается перемножением второго и третьего.

А можно было взять как раз те точки, которые были исключены, тогда в четвертом столбце были бы единички с обратными знаками.

Еще одно наблюдение: если перемножить элементы каждой строки (второй, третий и четвертый столбцы) матрицы планирования (правой), то во всех случаях получится +1. А что это значит? А значит это, что $x_1 x_2 x_3 = +1$. А если принять противоположный вариант расположения точек, получим $x_1 x_2 x_3 = -1$. В первом случае $x_1 x_2 = x_3$ (см. рис. 5.8), во втором случае $x_1 x_2 = -x_3$ (игнорируем рис. 5.8). Эти соотношения называются *генерирующими соотношениями* (ГС). Остановимся на первом варианте (это не принципиально, но допустим, что его экономичнее практически реализовать).

Таким образом, в эксперименте будет реализовано четыре точки, по которым будут рассчитаны четыре коэффициента модели (5.14) $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3$. А куда делись остальные коэффициенты модели (5.15) b_{12} , b_{13} , b_{23} и b_{123} ? Мы, конечно, можем предполагать, что они несущественны, но где уверенность? На самом деле каждый коэффициент модели (5.14) как бы отвечает за себя и еще за какой-то коэффициент. Имеет место то, что называется системой смешивания. Чтобы ее определить, умножим левую и правую часть ГС $x_1x_2 = x_3$ на x_3 и получим: $x_1x_2x_3 = x_3^2$. Но x_3 равно $+1$ или -1 , а в квадрате всегда $+1$. Следовательно, имеем единичный столбец: $I = x_1x_2x_3$. Это соотношение называется *определяющим контрастом* (ОК).

Чтобы определить систему смешивания (т. е. вникнуть в суть коэффициентов), необходимо ОК умножить поочередно на x_1 , x_2 , x_3 и, наконец, на x^0 . Получим в результате: $x_1 = x_1^2x_2x_3 = x_2x_3$; $x_2 = x_1x_2^2x_3 = x_1x_3$; $x_3 = x_1x_2x_3^2 = x_1x_2$; $+1 = x_1x_2x_3$. Система смешивания записывается следующим образом: $b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}$; $b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13}$; $b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}$; $b_0 \rightarrow \beta_0 + \beta_{123}$. Следовательно, линейные эффекты определяются совместно с бинарными синергизмами, а свободный член — совместно с тройным взаимодействием, значимость которого, как правило, существенно ниже. Почему так получается? А потому, что столбцы x_1 и x_2x_3 идентичны, следовательно, разделить влияние первого фактора и совместное влияние второго и третьего — невозможно. Это издержки того, что вместо ПФЭ 2^3 использовался дробный факторный эксперимент (ДФЭ) 2^{3-1} .

Аналогично решаются задачи и в более сложных случаях.

При реализации дробных реплик 2^{4-1} (ДФЭ) можно использовать два принципиально различных генерирующих соотношения $x_4 = x_1x_2$ и $x_4 = x_1x_2x_3$, обеспечивающих разную систему смешивания.

Планы таких полуреplik в буквенных обозначениях:

1) $d, a, b, abd, cd, ac, bc, abcd$; 2) (1), $ad, bd, ab, cd, ac, bc, abcd$.

Определяющие контрасты: $I = x_1x_2x_4$ и $I = x_1x_2x_3x_4$.

Модель (уравнение регрессии) в отсутствие эффектов взаимодействия имеет вид:

$$y_p = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4. \quad (5.17)$$

Системы смешивания:

в первом случае

$$\begin{array}{llll} b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{24} & b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{14} & b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{1234} & b_4 \rightarrow \beta_4 + \beta_{12} \\ b_{13} \rightarrow \beta_{13} + \beta_{234} & b_{23} \rightarrow \beta_{23} + \beta_{134} & b_{34} \rightarrow \beta_{34} + \beta_{123} & b_0 \rightarrow \beta_0 + \beta_{124} \end{array}$$

во втором случае

$$\begin{array}{llll} b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{234} & b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{134} & b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{124} & b_4 \rightarrow \beta_4 + \beta_{123} \\ b_{12} \rightarrow \beta_{12} + \beta_{34} & b_{13} \rightarrow \beta_{13} + \beta_{24} & b_{14} \rightarrow \beta_{14} + \beta_{23} & b_0 \rightarrow \beta_0 + \beta_{1234} \end{array}$$

В первом случае фактор x_3 и связанные с ним эффекты взаимодействия находят-ся как бы в привилегированном положении. Коэффициент b_3 определяется совместно с β_{1234} , а четверное взаимодействие с достаточной вероятностью может оказаться

незначимым. Все парные взаимодействия b_{13} , b_{23} и b_{34} определяются совместно с тройными взаимодействиями, которые тоже могут оказаться несущественными. А во втором случае приоритет отдан свободному члену b_0 , а все линейные коэффициенты находятся в равном положении (связаны с тройными взаимодействиями). Все парные взаимодействия перепутаны между собой.

Понятное дело, вместо x_3 значимыми могут оказаться и остальные факторы — x_1 , x_2 или x_4 .

Сообразно системе смешивания запишется и модель с эффектами взаимодействия.

Пример. Рассмотрим результаты определения твердости пористых резин по планам с двумя различными генерирующими соотношениями (табл. 5.17 и 5.18).

Таблица 5.17. Уровни варьирования переменных и результаты эксперимента (генерирующее соотношение $x_4 = x_1 x_2$)

№	\tilde{x}_1	\tilde{x}_2	\tilde{x}_3	\tilde{x}_4	x_1	x_2	x_3	x_4	y_s	y_p
1	140	5	0,4	30	-1	-1	-1	+1	49	53,9
2	180	5	0,4	10	+1	-1	-1	-1	63	60,4
3	140	17	0,4	10	-1	+1	-1	-1	65	64,4
4	180	17	0,4	30	+1	+1	-1	+1	69	67,4
5	140	5	1,2	30	-1	-1	+1	+1	66	61,1
6	180	5	1,2	10	+1	-1	+1	-1	65	67,6
7	140	17	1,2	10	-1	+1	+1	-1	71	71,6
8	180	17	1,2	30	+1	+1	+1	+1	73	74,6

Таблица 5.18. Уровни варьирования переменных и результаты эксперимента (генерирующее соотношение $x_4 = x_1 x_2 x_3$)

№	\tilde{x}_1	\tilde{x}_2	\tilde{x}_3	\tilde{x}_4	x_1	x_2	x_3	x_4	y_s	y_p
1	140	5	0,4	10	-1	-1	-1	-1	44	50,2
2	180	5	0,4	30	+1	-1	-1	+1	66	62,2
3	140	17	0,4	30	-1	+1	-1	+1	69	66,8
4	180	17	0,4	10	+1	+1	-1	-1	64	63,8
5	140	5	1,2	30	-1	-1	+1	+1	66	65,8
6	180	5	1,2	10	+1	-1	+1	-1	65	62,8
7	140	17	1,2	10	-1	+1	+1	-1	71	67,2
8	180	17	1,2	30	+1	+1	+1	+1	73	79,2

Область изменения переменных: температура вулканизации ($\tilde{x}_1^{\max}=180^\circ\text{C}$ и $\tilde{x}_1^{\min}=140^\circ\text{C}$), продолжительность процесса ($\tilde{x}_2^{\max}=17$ мин и $\tilde{x}_2^{\min}=5$ мин), содержание ускорителя ($\tilde{x}_3^{\max}=1,2$ масс. ч. и $\tilde{x}_3^{\min}=0,4$ масс. ч.), содержание наполнителя ($\tilde{x}_4^{\max}=30$ масс. ч. и $\tilde{x}_4^{\min}=10$ масс. ч.). Реализован дробный факторный эксперимент (ДФЭ) 2^{4-1} .

Значения отклика (твердости) в центре плана при $\tilde{x}_{10}=160^\circ\text{C}$, $\tilde{x}_{20}=11$ мин, $\tilde{x}_{30}=0,8$ масс.ч. и $\tilde{x}_{40}=20$ масс.ч. ($x_1=0$, $x_2=0$, $x_3=0$ и $x_4=0$ в условном масштабе) составили: 67; 70; 71; 70; 67; 68; 69 и 70 ($m=8$).

При реализации дробных реплик 2^{4-1} (ДФЭ) использованы два генерирующих соотношения (ГС) $x_4 = x_1x_2$ и $x_4 = x_1x_2x_3$, обеспечивающих разную систему смешивания.

Определяющие контрасты ОК: $1 = x_1x_2x_4$ и $1 = x_1x_2x_3x_4$.

Модель (уравнение регрессии) без эффектов взаимодействия:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4.$$

Вычисление параметров линейных моделей

Теория.

Организация эксперимента и проведение расчетов реализуются в следующей последовательности.

Выбор уровней варьирования факторов

Преобразование значений уровней варьирования факторов из натурального масштаба \tilde{x}_1 , \tilde{x}_2 , \tilde{x}_3 и \tilde{x}_4 в условный x_1 , x_2 , x_3 и x_4 :

$$x_j = (\tilde{x}_j - \tilde{x}_{j0})/A_{x_j}, \text{ где } -1 \leq x_j \leq +1;$$

$$A_{x_j} = (\tilde{x}_{j\max} - \tilde{x}_{j\min})/2 - \text{интервал варьирования; } \tilde{x}_{j0} - \text{нулевой уровень; } x_{j0} = 0.$$

Решение.

Количество точек плана $N = 8$.

$$\tilde{x}_{10} = (180 + 140)/2 = 160^\circ\text{C}; A_{x1} = (180 - 140)/2 = 20^\circ\text{C};$$

$$\tilde{x}_{20} = (17 + 5)/2 = 11 \text{ мин}; A_{x2} = (17 - 5)/2 = 6 \text{ мин};$$

$$\tilde{x}_{30} = (1,2 + 0,4)/2 = 0,8 \text{ масс. ч.}; A_{x3} = (1,2 - 0,4)/2 = 0,4 \text{ масс. ч.};$$

$$\tilde{x}_{40} = (30 + 10)/2 = 20 \text{ масс. ч.}; A_{x4} = (30 - 10)/2 = 10 \text{ масс. ч.};$$

Построение матриц планирования

ГС: $x_4 = x_1x_2$ ГС: $x_4 = x_1x_2x_3$

$$\begin{pmatrix} +1 & -1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} +1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \end{pmatrix}$$

Вычисление коэффициентов линейных моделей

Теория.

$$b_0 = \Sigma y/N; b_1 = \Sigma x_1 \times y/N; b_2 = \Sigma x_2 y/N; b_3 = \Sigma x_3 \times y/N; b_4 = \Sigma x_4 \times y/N.$$

Решение.

$$x_4 = x_1 x_2.$$

$$b_0 = (53,9 + 60,4 + 64,4 + 67,4 + 61,1 + 67,6 + 71,6 + 74,6)/8 = 65,12;$$

$$b_1 = (-53,9 + 60,4 - 64,4 + 67,4 - 61,1 + 67,6 - 71,6 + 74,6)/8 = 2,38;$$

$$b_2 = (-53,9 - 60,4 + 64,4 + 67,4 - 61,1 - 67,6 + 71,6 + 74,6)/8 = 4,38;$$

$$b_3 = (-53,9 - 60,4 - 64,4 - 67,4 + 61,1 + 67,6 + 71,6 + 74,6)/8 = 3,62;$$

$$b_4 = (53,9 - 60,4 - 64,4 + 67,4 + 61,1 - 67,6 - 71,6 + 74,6)/8 = -0,88;$$

$$x_4 = x_1 x_2 x_3;$$

$$b_0 = (50,2 + 62,2 + 66,8 + 63,8 + 65,8 + 62,8 + 67,2 + 79,2)/8 = 64,75;$$

$$b_1 = (-50,2 + 62,2 - 66,8 + 63,8 - 65,8 + 62,8 - 67,2 + 79,2)/8 = 2,25;$$

$$b_2 = (-50,2 - 62,2 + 66,8 + 63,8 - 65,8 - 62,8 + 67,2 + 79,2)/8 = 4,50;$$

$$b_3 = (-50,2 - 62,2 - 66,8 - 63,8 + 65,8 + 62,8 + 67,2 + 79,2)/8 = 4,00;$$

$$b_4 = (-50,2 + 62,2 + 66,8 - 63,8 + 65,8 - 62,8 - 67,2 + 79,2)/8 = 3,75.$$

Вычисление дисперсии воспроизводимости по m измерениям в центре плана

Теория.

$$S^2_{\text{восп}} = \sum_{i=1}^m (y_{0i} - y_{0\text{cp}})^2 / (m - 1); y_{0\text{cp}} = \sum_{i=1}^m y_{0i} / m.$$

Решение.

$$m = 8; y_{0\text{cp}} = (67 + 70 + 71 + 70 + 67 + 68 + 69 + 70)/8 = 69,0;$$

$$S^2_{\text{восп}} = ((67 - 69)^2 + (70 - 69)^2 + (71 - 69)^2 + (70 - 69)^2 + (67 - 69)^2 + (68 - 69)^2 + (69 - 69)^2 + (70 - 69)^2) / (8 - 1);$$

$$S^2_{\text{восп}} = 2,29.$$

Проверка значимости коэффициентов моделей

Теория.

Проверка значимости коэффициентов моделей осуществляется по t -критерию:

$$t = |b_i| / S_{bi}, \quad S^2_{bi} = S^2_{\text{восп}} / N.$$

 S^2_{bi} — дисперсия определения коэффициентов модели; S_{bi} — ошибка определения коэффициентов модели.

Решение.

$$S^2_b = 2,29/8 = 0,286;$$

$$S_b = 0,286^{0,5} = 0,535;$$

$$x_4 = x_1 x_2.$$

$$t_0 = 65,12/0,535 = 121,72; t_1 = 2,38/0,535 = 4,45; t_2 = 4,38/0,535 = 8,19;$$

$$t_3 = 3,62/0,535 = 6,77; t_4 = |-0,88|/0,535 = 1,65;$$

$$x_4 = x_1 x_2 x_3;$$

$$t_0 = 64,75/0,535 = 121,03; \quad t_1 = 2,25/0,535 = 4,21; \quad t_2 = 4,50/0,535 = 8,41;$$

$$t_3 = 4,00/0,535 = 7,48; \quad t_4 = 3,75/0,535 = 7,01.$$

Интерпретация.

Если рассчитанное значение t -критерия больше табличного при числе степеней свободы $v = m - 1$ и уровне значимости α , то коэффициент значим; в противном случае может ставиться вопрос об исключении этого коэффициента из модели.

$$v = 8 - 1 = 7; \quad \alpha = 5\%; \quad t_{(7; 0,05)} = 2,365.$$

Все линейные параметры моделей, кроме коэффициента $b_4 = -0,88$, в первой полуреплике значимы с вероятностью 95%. Рассчитанные в соответствии с этими моделями значения отклика y_p даны в табл. 5.17 и 5.18.

Проверка содержательности модели.

Теория.

Проверка содержательности моделей проводится по критерию Фишера (отношение дисперсии относительно среднего S_{R0}^2 к остаточной S_R^2):

$$F = S_{R0}^2 / S_R^2;$$

$$S_{R0}^2 = \sum_{u=1}^N (y_u - y_{\text{уср}})^2 / (N - 1); \quad S_R^2 = \sum_{u=1}^N (y_u - y_{\text{ирасч}})^2 / (N - p);$$

$$y_{\text{уср}} = \sum_{u=1}^N y_u / N.$$

Решение.

Средние значения:

$$y_{\text{уср}} = (53,9 + 60,4 + 64,4 + 67,4 + 61,1 + 67,6 + 71,6 + 74,6) / 8 = 65,1; \text{ полуреплика 1;}$$

$$y_{\text{уср}} = (50,2 + 62,2 + 66,8 + 63,8 + 65,8 + 62,8 + 67,2 + 79,2) / 8 = 64,8; \text{ полуреплика 2.}$$

Дисперсии по среднему:

$$S_{R0}^2 = ((53,9 - 65,1)^2 + (60,4 - 65,1)^2 + (64,4 - 65,1)^2 + (67,4 - 65,1)^2 + (61,1 - 65,1)^2 + (67,6 - 65,1)^2 + (71,6 - 65,1)^2 + (74,6 - 65,1)^2) / (8 - 1) = 53,84; \text{ полуреплика 1;}$$

$$S_{R0}^2 = ((50,2 - 64,8)^2 + (62,2 - 64,8)^2 + (66,8 - 64,8)^2 + (63,8 - 64,8)^2 + (65,8 - 64,8)^2 + (62,8 - 64,8)^2 + (67,2 - 64,8)^2 + (79,2 - 64,8)^2) / (8 - 1) = 79,93; \text{ полуреплика 2.}$$

Остаточные дисперсии:

$$S_R^2 = ((49 - 53,9)^2 + (63 - 60,4)^2 + (65 - 64,4)^2 + (69 - 67,4)^2 + (66 - 61,1)^2 + (65 - 67,6)^2 + (71 - 71,6)^2 + (73 - 74,6)^2) / (8 - 5) = 22,46; \text{ полуреплика 1;}$$

$$S_R^2 = ((44 - 50,2)^2 + (66 - 62,2)^2 + (69 - 66,8)^2 + (64 - 63,8)^2 + (66 - 65,8)^2 + (65 - 62,8)^2 + (71 - 67,2)^2 + (73 - 79,2)^2) / (8 - 5) = 38,51; \text{ полуреплика 2.}$$

Критерии Фишера:

$$F = 53,84 / 22,46 = 2,4; \text{ полуреплика 1;}$$

$$F = 79,93 / 38,51 = 2,1; \text{ полуреплика 2.}$$

Интерпретация.

Содержательность модели можно считать удовлетворительной, если дисперсия относительно среднего S_{R0}^2 значительно (не менее чем в 3–5 раз) превосходит величину остаточной дисперсии S_R^2 .

В рассматриваемом случае дисперсионное отношение S^2_{R0}/S^2_R составило для двух полуреplik 2.4 и 2.1 соответственно, что ниже значения, принятого за норму при оценке содержательности модели.

Проверка адекватности модели

Теория.

Проверку адекватности модели можно осуществить по критерию Фишера как отношение остаточной дисперсии к дисперсии воспроизводимости:

$$F = S^2_R / S^2_{\text{восп}}.$$

Напомним, что запись $F = S^2_R / S^2_{\text{восп}}$ надо воспринимать не как F равно $S^2_R / S^2_{\text{восп}}$, а что отношение $S^2_R / S^2_{\text{восп}}$ распределено по Фишеру.

Решение.

$$S^2_R = 22,46; \text{ полуреплика 1; } S^2_R = 38,51; \text{ полуреплика 2;}$$

$$S^2_{\text{восп}} = 2,29;$$

$$F = 22,46/2,29 = 9,81; \text{ полуреплика 1; } F = 38,51/2,29 = 16,82; \text{ полуреплика 2.}$$

Интерпретация.

Рассчитанное значение критерия Фишера сравнивается с табличным при числе степеней свободы $v_1 = N - p$ и $v_2 = m - 1$ и выбранном уровне значимости α .

$$\text{Условие адекватности: } F_{\text{расч}} < F_{\text{табл}}.$$

$$v_1 = 8 - 5 = 3; \quad v_2 = 8 - 1 = 7; \quad \alpha = 5\%;$$

$$F_{(3;7;0,05)} = 4,35;$$

$$F = 9,81 > F_{\text{кр}} = 4,35; \quad F = 16,82 > F_{\text{кр}} = 4,35.$$

Обе модели не могут рассматриваться как адекватные.

Проверка предсказательной способности в центре плана

Теория.

Эта проверка заключается в сопоставлении на основе критерия Стьюдента коэффициента b_0 со средним значением отклика в центре плана:

$$t = |b_0 - y_{0\text{ср}}| / (S^2_{\text{восп}}/m)^{0,5}.$$

Решение.

$$b_0 = 65,12, \text{ первая полуреплика; } b_0 = 64,75, \text{ вторая полуреплика;}$$

$$y_{0\text{ср}} = 69; \quad S^2_{\text{восп}} = 2,29; \quad m = 8;$$

$$t = |65,12 - 69| / ((2,29/8)^{0,5}) = 7,25;$$

$$t = |64,75 - 69| / ((2,29/8)^{0,5}) = 7,94.$$

Интерпретация.

Рассчитанное значение критерия сравнивают с табличным (таблица I Приложения) при числе степеней свободы $v = m - 1$. Предсказание в центре плана удовлетворительно при $t_{\text{расч}} < t_{\text{табл}}$.

$$v = 8 - 1 = 7; \quad \alpha = 0,05; \quad t_{(7;0,05)} = 2,365;$$

$$t = 7,25 > t_{\text{кр}} = 2,365; \quad t = 7,94 > t_{\text{кр}} = 2,365.$$

Предсказательная способность обеих моделей низкая.

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```

echo on
% ФАКТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ - НАЗВАНИЕ ПРОГРАММЫ
echo off
echo on
%      ПОЛУРЕПЛИКА  $2^{(4-1)}$ , ГЕНЕРИРУЮЩЕЕ СООТНОШЕНИЕ  $x_4=x_1*x_2$ 
%      МОДЕЛЬ       $y=b_0+b_1*x_1+b_2*x_2+b_3*x_3+b_4*x_4$ 
echo off
echo on
%
%
%----- ПЛАН -----
%
% N п/п  x1 x2 x3 x4  Обозн.  N п/п  x1 x2 x3 x4  Обозн.
%      1   -1 -1 -1 +1    d        5   -1 -1 +1 +1    cd
%      2   +1 -1 -1 -1    a        6   +1 -1 +1 -1    ac
%      3   -1 +1 -1 -1    b        7   -1 +1 +1 -1    bc
%      4   +1 +1 -1 +1   abd       8   +1 +1 +1 +1   abcd
%-----
echo off
y=input('ВВЕДИТЕ ВОСЕМЬ ЧИСЕЛ В СООТВЕТСТВИИ С ПЛАНOM(в [], че-
рез «;»)\');
clc
x0=y.^0;  x1=[-1;1;-1;1;-1;1;-1;1]; x2=[-1;-1;1;1;-1;-1;1;1];
x3=[-1;-1;-1;-1;1;1;1;1]; УРОВНИ ФАКТОРОВ;
z=[x0 x1 x2 x3 x1.*x2]; - МАТРИЦА ПЛАНИРОВАНИЯ;
b=(inv(z'*z))*(z'*y); - РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ;
y0=input('ВВЕДИТЕ ЦЕНТРАЛЬНЫЕ ТОЧКИ(в [], через «;»)\');
y01=mean(y0); - СРЕДНЕЕ ЗНАЧЕНИЕ В ЦЕНТРЕ ГИПЕРКУБА;
n0=max(size(y0)); - ЧИСЛО ТОЧЕК В ЦЕНТРЕ;
SSe=((y0-y01)'*(y0-y01))/(n0-1); - ДИСПЕРСИЯ ВОСПРОИЗВОДИМОСТИ;
SSb=SSe/8; Sb=sqrt(SSb); - ДИСПЕРСИЯ И ОШИБКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФ-
ФИЦИЕНТОВ;
t0=(abs(b(1)))/Sb;t1=(abs(b(2)))/Sb;t2=(abs(b(3)))/Sb;
t3=(abs(b(4)))/Sb;t4=(abs(b(5)))/Sb; РАСЧЕТ КРИТЕРИЕВ СТЬЮДЕНТА;
t=[12.71;4.303;3.183;...]; ФРАГМЕНТ ТАБЛИЦЫ КРИТЕРИЕВ СТЬЮДЕНТА;
echo on
%      ПРОВЕРКА ЗНАЧИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ
% НА ЭКРАНЕ ДВА СТОЛБЦА: в 1-ом - ЗНАЧЕНИЯ t-КРИТЕРИЯ ДЛЯ
% КОЭФФИЦИЕНТОВ b0, b1, b2, b3 и b4; во 2-ом - ТАБЛИЧНОЕ ЗНАЧЕНИЕ
% КРИТЕРИЯ СТЬЮДЕНТА
%      УСЛОВИЕ ЗНАЧИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА tэксп>tтабл
echo off
tt=t(n0-1);T=[t0;t1;t2;t3;t4];TT=(T.^0)*tt;r=[T TT];

```

```

disp(r) ВЫВОД НА ЭКРАН ЗНАЧЕНИЙ КРИТЕРИЕВ СТЬЮДЕНТА;
yp=z*b;SSr=((y-yp)*(y-yp))/(8-5);y1=mean(y); РАСЧЕТ
SSr0=((y-y1)*(y-y1))/(8-1); ОСТАТОЧНОЙ ДИСПЕРСИИ
echo on
%                ПРОВЕРКА СОДЕРЖАТЕЛЬНОСТИ МОДЕЛИ
echo off
pause
F1=SSr0/SSr;df=F1-5;
if df>=0
    ('СОДЕРЖАТЕЛЬНОСТЬ МОДЕЛИ ВЕЛИКА')
else
    ('СОДЕРЖАТЕЛЬНОСТЬ МОДЕЛИ НИЗКАЯ')
end
pause
echo on
%                ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИ
echo off
pause
F2=SSr/SSe;
Ft=[161 200 216 225...]; ФРАГМЕНТ ТАБЛИЦЫ КРИТЕРИЕВ ФИШЕРА;
Fkr=Ft(n0-1,3);w=Fkr-F2;
if w>=0
    (' МОДЕЛЬ АДЕКВАТНА ')
else
    ('ГИПОТЕЗА АДЕКВАТНОСТИ НЕ ПРОХОДИТ')
end
echo on
%                ПРОВЕРКА ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ МОДЕЛИ
%                В ЦЕНТРЕ ПЛАНА
echo off
Tp=(abs(b(1)-y01))/(sqrt(SSe/n0)); rT=t(n0-1)-Tp;
if rT>=0
    ('ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНАЯ СПОСОБНОСТЬ ВЕЛИКА')
else
    ('ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНАЯ СПОСОБНОСТЬ НИЗКАЯ ИЗ-ЗА КРИВИЗНЫ ПОВЕР-
    ХНОСТИ')
end
echo on
% РЕЗУЛЬТАТЫ:
% МАТРИЦА ПЛАНИРОВАНИЯ, ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ
%                И РАССЧИТАННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ОТКЛИКА
echo off
p1=[z y yp];disp(p1)
pause

```

```
echo on
% ЭКСПЕРИМЕНТЫ В ЦЕНТРЕ ПЛАНА
echo off
p3=[y0'];disp(p3)
echo on
% ДИСПЕРСИЯ ВОСПРОИЗВОДИМОСТИ
echo off
p2=[SSe];disp(p2)
echo on
% КОЭФФИЦИЕНТЫ МОДЕЛИ
echo off
p7=[b'];disp(p7)
echo on
% ДИСПЕРСИЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ
echo off
p4=[SSb'];disp(p4)
pause
echo on
% РАССЧИТАННЫЕ И ТАБЛИЧНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ t-КРИТЕРИЯ
%      ДЛЯ ПРОВЕРКИ ЗНАЧИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ
echo off
p5=[r];disp(p5)
echo on
% ПРОВЕРКА СОДЕРЖАТЕЛЬНОСТИ МОДЕЛИ:
%   ДИСПЕРСИЯ ОТНОСИТЕЛЬНО СРЕДНЕГО
%   ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ
echo off
p10=[SSr0 SSr];disp(p10)
echo on
%   РАССЧИТАННОЕ ЗНАЧЕНИЕ F-КРИТЕРИЯ
%   КРИТИЧЕСКОЕ ЗНАЧЕНИЕ F-КРИТЕРИЯ
%   РАЗНИЦА МЕЖДУ НИМИ
echo off
p12=[F1 5 df];disp(p12)
pause
echo on
% ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИ:
%   КРИТИЧЕСКОЕ ЗНАЧЕНИЕ F-КРИТЕРИЯ
%   РАССЧИТАННОЕ ЗНАЧЕНИЕ F-КРИТЕРИЯ
%   РАЗНИЦА МЕЖДУ НИМИ
echo off
p11=[Fkr F2 w];disp(p11)
echo on
% ПРОВЕРКА ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ В ЦЕНТРЕ ПЛАНА
```

```
% ТАБЛИЧНОЕ ЗНАЧЕНИЕ t-КРИТЕРИЯ
% РАССЧИТАННОЕ ЗНАЧЕНИЕ t-КРИТЕРИЯ
% РАЗНИЦА МЕЖДУ НИМИ
echo off
p6=[t(n0-1) Tp rT];disp(p6)
echo on
```

Опробованные выше дробные реплики содержали восемь точек, т. е. половину от полного факторного эксперимента 2^4 . А можно, к примеру, использовать четверть от ПФЭ 2^5 . 32 разделить на 4 будет 8 — дробная реплика 2^{5-2} .

Рассмотрим *листинг* программы для расчета дробной реплики 2^{5-2} с помощью все того же пакета *MATLAB*.

```
echo on
% ДРОБНАЯ РЕПЛИКА 2^(5-2)
% модель y=b0+b1*x1+b2*x2+b3*x3+b4*x4+b5*x5
% ПЛАН
% N п/п x1 x2 x3 x4 x5 Обозн.
% 1 -1 -1 -1 +1 +1 de
% 2 +1 -1 -1 -1 -1 a
% 3 -1 +1 -1 -1 +1 be
% 4 +1 +1 -1 +1 -1 abd
% 5 -1 -1 +1 +1 -1 cd
% 6 +1 -1 +1 -1 +1 ace
% 7 -1 +1 +1 -1 -1 bc
% 8 +1 +1 +1 +1 +1 abcde
echo off
echo on
% РАСЧЕТ ПОТРЕБЛЯЕМОЙ МОЩНОСТИ ПРИ ВАЛЬЦЕВАНИИ
% ДАННЫЕ (в натуральном масштабе):
% ПЛОТНОСТЬ (Ro, кг/м^3), СКОРОСТЬ (V, л/с),
% ЗАЗОР (X, м), ПЛАСТИЧНОСТЬ (Пл), ФРИКЦИЯ (f) МОЩНОСТЬ (N, кВт),
% Ro V X Пл f N
% 980 1.8 0.002 0.55 1.25 41.3
% 1040 1.8 0.002 0.45 1.15 51.3
% 980 2.0 0.002 0.45 1.25 52.8
% 1040 2.0 0.002 0.55 1.15 49.5
% 980 1.8 0.006 0.55 1.15 46.9
% 1040 1.8 0.006 0.45 1.25 56.3
% 980 2.0 0.006 0.45 1.15 60.0
% 1040 2.0 0.006 0.55 1.25 54.4
% ЦЕНТРАЛЬНЫЕ ТОЧКИ:
% 1010 1.9 0.0035 0.50 1.20 51.2
% 1010 1.9 0.0035 0.50 1.20 50.5
```

```

% 1010    1.9    0.0035 0.50    1.20    51.9
% ЗАВИСИМОСТЬ МОЩНОСТИ ОТ ПЯТИ ФАКТОРОВ
% ПОЛУЧИМ В ЛОГАРИФИЧЕСКОМ МАСШТАБЕ
echo off
y=[41.3;51.3;52.8;49.5;46.9;56.3;60;54.4];
y=log(y); - ВВОД ЗНАЧЕНИЙ ОТКЛИКА;
x0=y.^0; - ФИКТИВНАЯ ПЕРЕМЕННАЯ;
x1=[-1;1;-1;1;-1;1;-1;1]; - УРОВНИ
x2=[-1;-1;1;1;-1;-1;1;1]; ВАРЬИРОВАНИЯ
x3=[-1;-1;-1;-1;1;1;1;1]; ПЕРЕМЕННЫХ
x4=x1.*x2;x5=x1.*x3; В УСЛОВНОМ МАСШТАБЕ;
Z=[x0 x1 x2 x3 x4 x5]; - МАТРИЦА ПЛАНИРОВАНИЯ;
B=(inv(Z'*Z))*(Z'*y); - РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ;
y0=[51.2;50.5;51.9]; - ВВОД ТОЧЕК
y0=log(y0); В ЦЕНТРЕ ПЛАНА;
y01=mean(y0);- СРЕДНЕЕ В ЦЕНТРЕ;
n0=max(size(y0)); - ЧИСЛО ТОЧЕК В ЦЕНТРЕ;
SSe=var(y0) - ДИСПЕРСИЯ ВОСПРОИЗВОДИМОСТИ;
SSb=SSe/8; - ДИСПЕРСИЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ;
Sb=sqrt(SSb); - ОШИБКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ;
t0=(abs(B(1)))/Sb;t1=(abs(B(2)))/Sb; - РАСЧЕТ
t2=(abs(B(3)))/Sb;t3=(abs(B(4)))/Sb; КРИТЕРИЕВ
t4=(abs(B(5)))/Sb;t5=(abs(B(6)))/Sb; СТЬЮДЕНТА;
t=[12.71;4.303;3.183;...]; - ФРАГМЕНТ ТАБЛИЦЫ КРИТЕРИЯ СТЬЮДЕНТА;
echo on
% ПРОВЕРКА ЗНАЧИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ
% НА ЭКРАНЕ ДВА СТОЛБЦА: в 1-ом - ЗНАЧЕНИЯ t-КРИТЕРИЯ для b1,
b2, b3, b4, b5; во 2-ом - ТАБЛИЧНОЕ ЗНАЧЕНИЕ КРИТЕРИЯ СТЬЮДЕН-
ТА, УСЛОВИЕ ЗНАЧИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА tэксп>tтабл
echo off
tt=t(n0-1); - ВЫБОР КРИТЕРИЯ ИЗ ТАБЛИЦЫ;
T=[t1;t2;t3;t4;t5];TT=(T.^0)*tt;r=[T TT];
disp(r) - ФОРМИРОВАНИЕ И ВЫВОД НА ДИСПЛЕЙ ДВУХ СТОЛБЦОВ РАССЧИ-
ТАННЫХ И ТАБЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЙ КРИТЕРИЯ;
yp=Z*B; - РАСЧЕТНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ОТКЛИКА;
SSr=((y-yp)'*(y-yp))/(8-6); - ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ;
y1=mean(y); - СРЕДНЕЕ ИЗ ТОЧЕК ПЛАНА;
SSr0=((y-y1)'*(y-y1))/(8-1); - ДИСПЕРСИЯ ОТНОСИТЕЛЬНО СРЕДНЕГО;
echo on
% ПРОВЕРКА СОДЕРЖАТЕЛЬНОСТИ МОДЕЛИ
echo off
F1=SSr0/SSr; - РАСЧЕТ КРИТЕРИЯ ФИШЕРА;
df=F1-5; - РАЗНОСТЬ КРИТЕРИЕВ;
if df>=0

```

```

    ('СОДЕРЖАТЕЛЬНОСТЬ МОДЕЛИ ВЕЛИКА')
    else
    ('СОДЕРЖАТЕЛЬНОСТЬ МОДЕЛИ НИЗКАЯ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ;
echo on
% ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИ
echo off
F2=SSr/SSe; - РАСЧЕТ КРИТЕРИЯ ФИШЕРА;
Ft=[161 200 216...]; - ФРАГМЕНТ ТАБЛИЦЫ
Ft=[Ft;10.13 9.55 9.28...]; КРИТЕРИЯ ФИШЕРА;
Fkr=Ft(2,n0-1); - ВЫБОР КРИТЕРИЯ ИЗ ТАБЛИЦЫ;
w=Fkr-F2; - РАЗНОСТЬ КРИТЕРИЕВ;
if w>=0
    (' МОДЕЛЬ АДЕКВАТНА ')
    else
    ('ГИПОТЕЗА АДЕКВАТНОСТИ НЕ ПРОХОДИТ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ;
echo on
% ПРОВЕРКА ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ МОДЕЛИ
% В ЦЕНТРЕ ПЛАНА
echo off
Tp=(abs(B(1)-y01))/(sqrt(SSe/n0)); - РАСЧЕТ КРИТЕРИЯ ДЛЯ ПРОВЕР-
КИ ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ;
rT=t(n0-1)-Tp; - РАЗНОСТЬ КРИТЕРИЕВ;
if rT>=0
    ('ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНАЯ СПОСОБНОСТЬ ВЕЛИКА')
    else
    ('ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНАЯ СПОСОБНОСТЬ НИЗКАЯ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ;
B1=abs(B(2:6));
bar(B1);grid;title('ГИСТОГРАММА КОЭФФИЦИЕНТОВ');
xlabel('НОМЕР ФАКТОРА');
ylabel('МОДУЛЬ КОЭФФИЦИЕНТА');

```

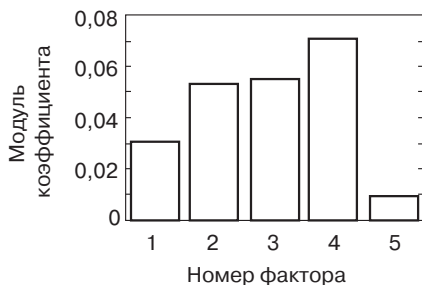


Рис. 5.9. Гистограмма коэффициентов

Результаты реализации программы, взятые с дисплея.

```

% ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ И РАССЧИТАННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ МОЩНОСТИ
41.3      51.3      52.8      49.5      46.9      56.3      60.0      54.4
41.293    51.282    52.809    49.517    46.908    56.32     59.99     54.381
% ЭКСПЕРИМЕНТЫ В ЦЕНТРЕ ПЛАНА
          51.2          50.5          51.9
% КОЭФФИЦИЕНТЫ (b0-b5) 3.9371    0.029623    0.052741    0.055298
-0.070253    -0.0084492
% ДИСПЕРСИЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ 2.3368e-005
% РАССЧИТАННЫЕ И ТАБЛИЧНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ % ПРОВЕРКА СОДЕРЖАТЕЛЬ-
t-КРИТЕРИЯ ДЛЯ ПРОВЕРКИ ЗНАЧИМОСТИ НОСТИ
КОЭФФИЦИЕНТОВ b1-b5      МОДЕЛИ:
          6.128          4.303      % рассчитанное значение
          10.91          4.303      F-критерия
          11.439          4.303      % критическое значение
          14.533          4.303      F-критерия
          1.7478          4.303      % разница между ними
                                44931      5      44926
                                СОДЕРЖАТЕЛЬНОСТЬ МОДЕ-
                                ЛИ ВЕЛИКА

% ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИ :      % ПРОВЕРКА ПРЕДСКАЗА-
% критическое значение F-критерия      ТЕЛЬНОЙ
% рассчитанное значение F-критерия      СПОСОБНОСТИ В ЦЕНТРЕ
% разница между ними      ПЛАНА
          19      0.0015952    18.998      % табличное значение t-
МОДЕЛЬ АДЕКВАТНА      критерия
                                % рассчитанное значение
                                t-критерия
                                % разница между ними
                                4.303    0.17482    .1282
                                ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНАЯ СПОСОБ-
                                НОСТЬ ВЕЛИКА

```

Рассматривая приведенную выше матрицу планирования, можно понять, что использованы следующие генерирующие соотношения: $x_4 = x_1 x_2$ и $x_5 = x_1 x_3$. Умножая левую и правую части первого соотношения на x_4 , а второго — на x_5 , мы получим два определяющих контраста: $I = x_1 x_2 x_4$ и $I = x_1 x_3 x_5$. Для определения системы смешивания необходимо сформировать обобщающий определяющий контраст, включающий в себя указанные два контраста и их произведение: $I = x_1 x_2 x_4 = x_1 x_3 x_5 = x_2 x_3 x_4 x_5$ ($x_1^2 = 1$).

Теперь, перемножая поочередно этот обобщающий ОК на x_0, x_1, x_2, x_3, x_4 и x_5 , получим:

$$x_0 = x_1 x_2 x_4 = x_1 x_3 x_5 = x_2 x_3 x_4 x_5; \quad x_1 = x_2 x_4 = x_3 x_5 = x_1 x_2 x_3 x_4 x_5;$$

$$x_2 = x_1 x_4 = x_1 x_2 x_3 x_5 = x_3 x_4 x_5; \quad x_3 = x_1 x_2 x_3 x_4 = x_1 x_5 = x_2 x_5;$$

$$x_4 = x_1 x_2 = x_1 x_3 x_4 x_5 = x_2 x_3 x_5; \quad x_5 = x_1 x_2 x_4 x_5 = x_1 x_3 = x_2 x_3 x_4.$$

Уравнение о пяти факторах содержит свободный член, 5 линейных эффектов, 10 парных взаимодействий, 10 тройных взаимодействий, 5 четверных и одно пятерное. Всего 32. В соотношениях, характеризующих взаимосвязи между факторами, фигурируют: свободный член, 5 линейных эффектов, 6 парных взаимодействий (первого порядка), 6 тройных взаимодействий (второго порядка), 5 четверных (третьего порядка) и одно пятерное (четвертого порядка). Всего 24. Нет следующих парных взаимодействий: $x_2 x_3$, $x_2 x_5$, $x_3 x_4$ и $x_4 x_5$. Видимо, они связаны между собой и не связаны с линейными эффектами. Для того чтобы обнаружить эти взаимосвязи, умножим обобщающий ОК на произведение $x_2 x_3$. Получим: $x_2 x_3 = x_1 x_3 x_4 = x_1 x_2 x_5 = x_4 x_5$. Осталось умножить обобщающий ОК на произведение $x_2 x_5$. Тогда: $x_2 x_5 = x_1 x_4 x_5 = x_1 x_2 x_3 = x_3 x_4$.

Полученные восемь соотношений дают возможность найти, с какими коэффициентами совместно определяются интересующие нас свободный член, линейные эффекты и всякие разные взаимодействия:

$$b_0 \rightarrow \beta_0 + \beta_{124} + \beta_{135} + \beta_{2345}; \quad b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{24} + \beta_{35} + \beta_{12345};$$

$$b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{14} + \beta_{1235} + \beta_{345}; \quad b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{1234} + \beta_{15} + \beta_{25};$$

$$b_4 \rightarrow \beta_4 + \beta_{12} + \beta_{1345} + \beta_{235}; \quad b_5 \rightarrow \beta_5 + \beta_{1245} + \beta_{13} + \beta_{234};$$

$$b_{23} \rightarrow \beta_{23} + \beta_{134} + \beta_{125} + \beta_{45}; \quad b_{25} \rightarrow \beta_{25} + \beta_{145} + \beta_{123} + \beta_{34}.$$

Естественно, чем больше факторов, тем больше количество взаимодействий.

Следующая таблица (табл. 5.19) дает представление об этом количестве [7, с. 133].

Таблица 5.19. Количество взаимодействий для числа факторов от 2 до 10

Количество			Порядок взаимодействия								
фак- торов	точек плана	линейных эффектов	1	2	3	4	5	6	7	8	9
2	4	2	1								
3	8	3	3	1							
4	16	4	6	4	1						
5	32	5	10	10	5	1					
6	64	6	15	20	15	6	1				
7	128	7	21	35	35	21	7	1			
8	256	8	28	56	70	56	28	8	1		
9	512	9	36	84	126	126	84	36	92	1	
10	1024	10	45	120	210	252	210	120	45	10	1

Эти числа получены с помощью следующего соотношения:

$$C_j^n = \frac{n!}{j!(n-j)!}, \quad (5.18)$$

где n — количество факторов; j — величина на единицу большая, чем порядок взаимодействия. Например, количество парных взаимодействий (порядок равен единице) для ПФЭ 2^5 будет равно $5!/(2!(5-2)!) = 10$.

Рассмотрим еще такую дробную реплику 2^{7-4} .

Это значит семь факторов. Если бы был ПФЭ 2^7 , было бы 128 точек, а так только 8.

Выберем для построения 1/16 реплики такие генерирующие соотношения: $x_4 = x_1x_2$, $x_5 = x_1x_3$, $x_6 = x_2x_3$ и $x_7 = x_1x_2x_3$. Обобщающий определяющий контраст включает контрасты, образованные из этих четырех генерирующих соотношений, а также произведений контрастов по два, по три и по четыре.

Получается вот что:

$$\begin{aligned} I &= x_1x_2x_4 = x_1x_3x_5 = x_2x_3x_6 = x_1x_2x_3x_7 = x_2x_3x_4x_5 = x_1x_3x_4x_6 = x_3x_4x_7 = x_1x_2x_5x_6 = \\ &= x_2x_5x_7 = x_1x_6x_7 = x_4x_5x_6 = x_1x_4x_5x_7 = x_2x_4x_6x_7 = x_3x_5x_6x_7 = x_1x_2x_3x_4x_5x_6x_7. \end{aligned}$$

Теперь надо это дело умножать на $x_0, x_1, x_2, \dots, x_7$. Каждый линейный эффект будет связан еще с 15 коэффициентами. Если пренебречь эффектами взаимодействия, начиная с тройных, то получим следующую картину [17, с. 234–235]:

$$\begin{array}{ll} b_0 \rightarrow \beta_0 \text{ (ниже тройных нет)} & b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{24} + \beta_{35} + \beta_{67} \\ b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{14} + \beta_{36} + \beta_{57} & b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{15} + \beta_{26} + \beta_{47} \\ b_4 \rightarrow \beta_4 + \beta_{12} + \beta_{37} + \beta_{56} & b_5 \rightarrow \beta_5 + \beta_{13} + \beta_{27} + \beta_{46} \\ b_6 \rightarrow \beta_6 + \beta_{23} + \beta_{17} + \beta_{45} & b_7 \rightarrow \beta_7 + \beta_{34} + \beta_{25} + \beta_{16} \end{array}$$

Согласно табл. 5.19 должно быть парных взаимодействий 21, все они здесь присутствуют.

В случае дробной реплики 2^{7-4} может быть получена следующая линейная модель:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_5x_5 + b_6x_6 + b_7x_7. \quad (5.19)$$

Пример. Рассмотрим результаты определения зависимости вязкости резиновой смеси от следующих факторов: \tilde{x}_1 — содержание полиизопрена в системе полиизопрен — полибутадиен; \tilde{x}_2 — содержание вулканизующего агента; \tilde{x}_3 — содержание ускорителя; \tilde{x}_4 — содержание антиозонанта; \tilde{x}_5 — содержание технического углерода ПЗ24; \tilde{x}_6 — содержание технического углерода Т900; \tilde{x}_7 — содержание пластификатора (все в массовых частях). Реализован дробный факторный эксперимент (ДФЭ) 2^{7-4} . Уровни варьирования переменных, план и экспериментальные результаты даны в табл. 5.20 и 5.21.

Таблица 5.20. Уровни варьирования переменных в натуральном и условном масштабе

Уровни фактора	\tilde{x}_1	\tilde{x}_2	\tilde{x}_3	\tilde{x}_4	\tilde{x}_5	\tilde{x}_6	\tilde{x}_7
Нижний (–1)	40	1,5	0,9	0,9	27,5	25	1,8
Верхний (+1)	60	1,7	1,1	1,1	37,5	35	2,2

Таблица 5.21. План и результаты эксперимента

№	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	y_s
1	–1	–1	–1	+1	+1	+1	–1	56,2
2	+1	–1	–1	–1	–1	+1	+1	41,4
3	–1	+1	–1	–1	+1	–1	+1	47,0
4	+1	+1	–1	+1	–1	–1	–1	38,1
5	–1	–1	+1	+1	–1	–1	+1	41,2
6	+1	–1	+1	–1	+1	–1	–1	47,9
7	–1	+1	+1	–1	–1	+1	–1	46,1
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	51,3

Эксперименты в центре плана: 46,0; 45,5.

Используются генерирующие соотношения: $x_4 = x_1x_2$; $x_5 = x_1x_3$; $x_6 = x_2x_3$, а также $x_7 = x_1x_2x_3$.

Вычисление параметров линейной модели

Теория.

$$b_0 = \Sigma y/N \quad b_1 = \Sigma x_1 \times y/N \quad b_2 = \Sigma x_2 \times y/N \quad b_3 = \Sigma x_3 \times y/N$$

$$b_4 = \Sigma x_4 \times y/N \quad b_5 = \Sigma x_5 \times y/N \quad b_6 = \Sigma x_6 \times y/N \quad b_7 = \Sigma x_7 \times y/N$$

Решение.

$$b_0 = (56,2 + 41,4 + 47,0 + 38,1 + 41,2 + 47,9 + 46,1 + 51,3)/8 = 46,1500;$$

$$b_1 = (-56,2 + 41,4 - 47,0 + 38,1 - 41,2 + 47,9 - 46,1 + 51,3)/8 = -1,4750;$$

$$b_2 = (-56,2 - 41,4 + 47,0 + 38,1 - 41,2 - 47,9 + 46,1 + 51,3)/8 = -0,5250;$$

$$b_3 = (-56,2 - 41,4 - 47,0 - 38,1 + 41,2 + 47,9 + 46,1 + 51,3)/8 = 0,4750;$$

$$b_4 = (56,2 - 41,4 - 47,0 + 38,1 + 41,2 - 47,9 - 46,1 + 51,3)/8 = 0,5500;$$

$$b_5 = (56,2 - 41,4 + 47,0 - 38,1 - 41,2 + 47,9 - 46,1 + 51,3)/8 = 4,4500;$$

$$b_6 = (56,2 + 41,4 - 47,0 - 38,1 - 41,2 - 47,9 + 46,1 + 51,3)/8 = 2,6000;$$

$$b_7 = (-56,2 + 41,4 + 47,0 - 38,1 + 41,2 - 47,9 - 46,1 + 51,3)/8 = -0,9250.$$

Вычисление дисперсии воспроизводимости по m измерениям в центре плана

Теория.

$$S^2_{\text{восп}} = \sum_{i=1}^m (y_{0i} - y_{0\text{cp}})^2 / (m - 1); \quad y_{0\text{cp}} = \sum_{i=1}^m y_{0i} / m.$$

Решение.

$$m = 2; \quad y_{0\text{cp}} = (46,0 + 45,5) / 2 = 45,75;$$

$$S^2_{\text{восп}} = ((46,0 - 45,75)^2 + (45,5 - 45,75)^2) / (2 - 1) = 0,125.$$

Проверка значимости коэффициентов моделей

Теория.

Проверка значимости коэффициентов моделей осуществляется по t -критерию:

$$t = |b_i| / S_{bi}, \quad S^2_{bi} = S^2_{\text{восп}} / N.$$

S^2_{bi} — дисперсия определения коэффициентов модели;

S_{bi} — ошибка определения коэффициентов модели.

Решение.

$$S^2_b = 0,125 / 8 = 0,0156;$$

$$S_b = 0,0156^{0,5} = 0,125;$$

$$t_0 = 46,15 / 0,125 = 369,2; \quad t_1 = |-1,475| / 0,125 = 11,8; \quad t_2 = |-0,525| / 0,125 = 4,2; \quad t_3 = 0,475 / 0,125 = 3,8;$$

$$t_4 = 0,55 / 0,125 = 4,4; \quad t_5 = 4,45 / 0,125 = 35,6; \quad t_6 = 2,6 / 0,125 = 20,8; \quad t_7 = |-0,925| / 0,125 = 7,4.$$

Интерпретация.

Если рассчитанное значение t -критерия больше табличного при $\nu = m - 1$ и уровне значимости α , то коэффициент значим; в противном случае может ставиться вопрос об исключении этого коэффициента из модели.

$$\nu = 2 - 1 = 1; \quad \alpha = 5\%; \quad t_{(1, 0,05)} = 12,71.$$

Значимыми можно признать коэффициенты, связанные с влиянием обеих марок технического углерода (рис. 5.10). Для решения вопроса об исключении коэффициентов, характеризующих влияние состава полимерной матрицы и содержания пластификатора, следует увеличить количество наблюдений в центре плана.

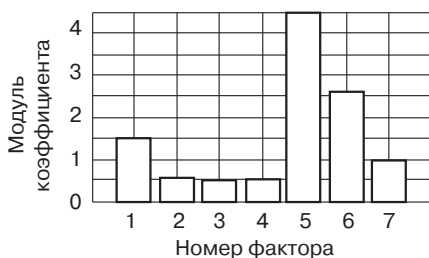


Рис. 5.10. Гистограмма коэффициентов

Проверки *содержательности* и *адекватности* модели не могут быть осуществлены, поскольку план насыщенный (число точек равно числу коэффициентов). Поэтому экспериментальные и рассчитанные по уравнению значения отклика совпадают.

Проверка предсказательной способности в центре плана

Теория.

Речь идет о сопоставлении на основе критерия Стьюдента коэффициента b_0 со средним значением отклика в центре плана:

$$t = |b_0 - y_{\text{оср}}| / (S^2_{\text{восп}} / m)^{0.5}.$$

Решение.

$$b_0 = 46,15; y_{\text{оср}} = 45,75; S^2_{\text{восп}} = 0,125; m = 2;$$

$$t = |46,15 - 45,75| / ((0,125/2)^{0.5}) = 1,60.$$

Интерпретация.

Рассчитанное значение критерия сравнивают с табличным (таблица I Приложения) при числе степеней свободы $v = m - 1$. Предсказание в центре плана удовлетворительно при $t_{\text{расч}} < t_{\text{табл}}$.

$$v = 2 - 1 = 1; \alpha = 0,05; t_{(1; 0,05)} = 12,71;$$

$$t = 1,60 < t_{\text{кр}} = 12,71. \text{ Предсказательная способность модели велика.}$$

Рассмотренные выше дробные реплики называются регулярными. Количество точек в них равно двум в какой-то степени: 4, 8, 16, 32,... Но раз речь зашла о регулярных, значит есть и нерегулярные? Да, есть. Например, есть пять факторов и плюс свободный член — шесть коэффициентов. Есть возможность построить план, содержащий шесть точек (3/4-реплика от 2^3). Такие реплики реализуются в тех случаях, когда, например, ПФЭ требует большого количества точек, а полуреплика недостаточна по объему для определения всех интересующих нас параметров модели.

Пример. Рассмотрим вновь результаты изучения зависимости тангенса угла диэлектрических потерь ($\text{tg}\delta$) композиционного материала от температуры прессования ($\tilde{x}_1^{\text{max}} = 170^\circ\text{C}$ и $\tilde{x}_1^{\text{min}} = 130^\circ\text{C}$), времени выдержки материала под давлением ($\tilde{x}_2^{\text{max}} = 5$ мин/мм и $\tilde{x}_2^{\text{min}} = 1$ мин/мм) и частоты ($\tilde{x}_3^{\text{max}} = 90$ кГц и $\tilde{x}_3^{\text{min}} = 70$ кГц). Здесь использована одна из нерегулярных дробных реплик (табл. 5.22).

Таблица 5.22. Нерегулярная дробная реплика

№	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3
1*	-1	-1	-1	+1	+1
2	+1	-1	-1	-1	-1
3	-1	+1	-1	-1	+1
4	+1	+1	-1	+1	-1
5	-1	-1	+1	+1	-1
6	+1	-1	+1	-1	+1
7	-1	+1	+1	-1	-1
8*	+1	+1	+1	+1	+1

Здесь показан ПФЭ 2^3 , из которого исключаются две точки, отмеченные*, где произведения двух факторов x_1x_2 и x_1x_3 в обоих случаях положительны; предполагается, что эффектом взаимодействия второго и третьего факторов можно пренебречь. Таким образом может быть получена линейная модель и вычислены еще два парных взаимодействия или построена линейная модель для пяти факторов:

$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3;$

$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_5x_5.$

Могут быть исключены точки, в которых произведения двух факторов x_1x_2 и x_1x_3 в обоих случаях отрицательны (номера точек 2 и 7 в табл. 5.22)

Таблица 5.23. Результаты эксперимента по определению $tg\delta$

№ п/п	1	2	3	4	5	6
Фактор \tilde{x}_1 , °C	170	130	170	130	170	130
Фактор \tilde{x}_2 , мин/мм	1	5	5	1	1	5
Фактор \tilde{x}_3 , кГц	70	70	70	90	90	90
Отклик $tg\delta \times 10^4$	166	148	172	173	195	149

Экспериментальные данные можно видеть в табл. 5.23.

Значения отклика ($tg\delta \times 10^4$) в центре плана при $\tilde{x}_{10} = 150$ °C, $\tilde{x}_{20} = 3$ мин/мм и $\tilde{x}_{30} = 80$ кГц: 170; 167 и 173 ($m = 3$).

Построение плана эксперимента и матрица планирования

План: Матрица планирования

№	x_1	x_2	x_3	
1	+1	-1	-1	$\begin{pmatrix} +1 & +1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$
2	-1	+1	-1	
3	+1	+1	-1	
4	-1	-1	+1	
5	+1	-1	+1	
6	-1	+1	+1	

Вычисление коэффициентов модели

Теория.

Модель: $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3.$

Для вычисления коэффициентов необходимо предварительно найти информационную матрицу, представляющую собой произведение транспонированной матрицы

планирования на саму матрицу планирования, а затем найти матрицу, обратную информационной — ковариационную матрицу.

Информационная матрица	Ковариационная матрица
$\begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 & 0 & -2 & -2 \\ 0 & 6 & -2 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 6 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & -2 & 6 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 6 & -2 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & -2 & 6 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 0 & 0 & 1/8 & 1/8 \\ 0 & 1/4 & 1/8 & 1/8 & 0 & 0 \\ 0 & 1/8 & 1/4 & 1/8 & 0 & 0 \\ 0 & 1/8 & 1/8 & 1/4 & 0 & 0 \\ 1/8 & 0 & 0 & 0 & 1/4 & 1/8 \\ 1/8 & 0 & 0 & 0 & 1/8 & 1/4 \end{pmatrix}$

Теперь, пристально глядя на ковариационную матрицу, можно нарисовать формулы для вычисления коэффициентов:

$$b_0 = \Sigma y / 4 + (\Sigma x_1 x_2 y + \Sigma x_1 x_3 y) / 8$$

$$b_1 = \Sigma x_1 y / 4 + (\Sigma x_2 y + \Sigma x_3 y) / 8$$

$$b_2 = \Sigma x_2 y / 4 + (\Sigma x_1 y + \Sigma x_3 y) / 8$$

$$b_3 = \Sigma x_3 y / 4 + (\Sigma x_1 y + \Sigma x_2 y) / 8$$

$$b_{12} = \Sigma x_1 x_2 y / 4 + (\Sigma y + \Sigma x_1 x_3 y) / 8$$

$$b_{13} = \Sigma x_1 x_3 y / 4 + (\Sigma y + \Sigma x_1 x_2 y) / 8$$

Решение.

$$b_0 = (166 + 148 + 172 + 173 + 195 + 149) / 4 + (-166 - 148 + 172 + 173 - 195 - 149) / 8 + (-166 + 148 - 172 - 173 + 195 - 149) / 8 = 172,00;$$

$$b_1 = (166 - 148 + 172 - 173 + 195 - 149) / 4 + (-166 + 148 + 172 - 173 - 195 + 149) / 8 + (-166 - 148 - 172 + 173 + 195 + 149) / 8 = 11,50;$$

$$b_2 = (-166 + 148 + 172 - 173 - 195 + 149) / 4 + (166 - 148 + 172 - 173 + 195 - 149) / 8 + (-166 - 148 - 172 + 173 + 195 + 149) / 8 = -4,50;$$

$$b_3 = (-166 - 148 - 172 + 173 + 195 + 149) / 4 + (166 - 148 + 172 - 173 + 195 - 149) / 8 + (-166 + 148 + 172 - 173 - 195 + 149) / 8 = 7,50;$$

$$b_{12} = (-166 - 148 + 172 + 173 - 195 - 149) / 4 + (166 + 148 + 172 + 173 + 195 + 149) / 8 + (-166 + 148 - 172 - 173 + 195 - 149) / 8 = 7,50;$$

$$b_{13} = (-166 + 148 - 172 - 173 + 195 - 149) / 4 + (166 + 148 + 172 + 173 + 195 + 149) / 8 + (-166 - 148 + 172 + 173 - 195 - 149) / 8 = 7,00.$$

Проверка значимости коэффициентов модели

Теория.

Проверка значимости коэффициентов модели осуществляется по t -критерию:

$$t = |b_i| / S_{bi}; \quad S_{bi}^2 = S_{\text{восп}}^2 / R, \quad S_{\text{восп}}^2 = \sum_{i=1}^m (y_{0i} - y_{0\text{cp}})^2 / (m - 1); \quad y_{0\text{cp}} = \sum_{i=1}^m y_{0i} / m.$$

Здесь: y_{0i} — наблюдения в центре плана; m — количество наблюдений в центре плана; $y_{0\text{cp}}$ — среднее наблюдение в центре плана; $S_{\text{восп}}^2$ — дисперсия воспроизводимости; $1/R$ — диагональный элемент обратной (ковариационной) матрицы; S_{bi}^2 — дисперсия определения коэффициентов; S_{bi} — ошибка определения коэффициентов (корень из дисперсии).

Решение.

$$m = 3; \quad y_{0\text{cp}} = (170 + 167 + 173) / 3 = 170; \quad S_{\text{восп}}^2 = ((170 - 170)^2 + 167 - 170)^2 + + 173 - 170)^2) / (3 - 1) = 9,0;$$

$$R = 1/4; \quad S_b^2 = 9,0/4 = 2,25; \quad S_b = 2,25^{0,5} = 1,50;$$

$$t_0 = 172/1,50 = 114,67;$$

$$t_1 = 11,50/1,50 = 7,67; \quad t_2 = |-4/50|/1/50 = 3,00; \quad t_3 = 5,00;$$

$$t_{12} = 7,50/1,50 = 5,00; \quad t_{13} = 7,00/1,50 = 4,67.$$

Интерпретация.

Условие значимости коэффициентов формулируется неравенством: $t < t_{кр}$ при числе степеней свободы $\nu = m - 1$ и уровне значимости α .

$$\nu = 3 - 1 = 2; \alpha = 5\%; t_{(2; 0,05)} = 4,303.$$

$$|t_2| = 3,00 < t_{кр} = 4,303;$$

Может ставиться вопрос о признании коэффициента b_2 незначимым.

Проверка предсказательной способности в центре плана

Теория.

Проверка осуществляется на основе сопоставлении на основе критерия Стьюдента коэффициента b_0 со средним значением отклика в центре плана:

$$T = |b_0 - y_{0cp}| / (S_{восп}^2 / m)^{0,5}.$$

Решение.

$$b_0 = 172; y_{0cp} = 170; S_{восп}^2 = 9,00; m = 3; t = |172 - 170| / ((9/3)^{0,5}) = 1,15;$$

Интерпретация.

Рассчитанное значение критерия сравнивают с табличным (таблица I Приложения) при числе степеней свободы $\nu = m - 1$. Предсказание в центре плана удовлетворительно при $t_{расч} < t_{табл}$.

$$\nu = 3 - 1 = 2; \alpha = 0,05; t_{(2; 0,05)} = 4,30;$$

$$t = 1,15 < t_{кр} = 4,30.$$

Предсказательная способность модели высока.

Приведем нерегулярную 3/4-реплику ПФЭ 2^4 (табл. 5.24).

Таблица 5.24. План нерегулярной реплики

№	x_1	x_2	x_3	x_4	$x_1 x_2 x_3$	$x_1 x_2 x_4$	№	x_1	x_2	x_3	x_4	$x_1 x_2 x_3$	$x_1 x_2 x_4$
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	9	-1	-1	-1	+1	-1	+1
2	+1	-1	-1	-1	+1	+1*	10	+1	-1	-1	+1	+1	-1
3	-1	+1	-1	-1	+1	+1*	11	-1	+1	-1	+1	+1	-1
4	+1	+1	-1	-1	-1	-1	12	+1	+1	-1	+1	-1	+1
5	-1	-1	+1	-1	+1	-1	13	-1	-1	+1	+1	+1	+1*
6	+1	-1	+1	-1	-1	+1	14	+1	-1	+1	+1	-1	-1
7	-1	+1	+1	-1	-1	+1	15	-1	+1	+1	+1	-1	-1
8	+1	+1	+1	-1	+1	-1	16	+1	+1	+1	+1	+1	+1*

Из шестнадцати точек реализуются двенадцать, исключаются четыре отмеченные точки, в которых оба тройных взаимодействия положительны (а можно исключать отрицательные).

5.3. Выбор факторов на основе отсеивающего эксперимента

Чтобы не пропустить ни одну из потенциально возможных переменных, на первых этапах изучения сложных процессов в программу исследования нужно включать десятки независимых переменных. В дальнейшем обычно большая часть этих переменных отсеивается, так как соответствующие им эффекты оказываются незначимыми. Отсюда необходимость в постановке предварительных — *отсеивающих* — экспериментов.

Применение насыщенных регулярных дробных факторных планов, т. е. полуреplik, четвертьреplik и т. д., оказывается возможным лишь для относительно небольшого числа различных наборов факторов ($N = 4, 8, 16, 32, \dots, 2^n$, n — количество факторов). Использование же ненасыщенных дробных факторных планов, как правило, бывает не очень эффективным, так как $N < p$ (p — число коэффициентов).

Число опытов для отсеивающих экспериментов можно резко снизить, если наложить некоторые существенные дополнительные ограничения при самой постановке задачи.

Ниже мы рассмотрим два метода. Они построены на использовании насыщенных (квадратная матрица планирования) и сверхнасыщенных (число строк в матрице планирования меньше числа столбцов) планов.

Прежде всего, попытаемся рассмотреть планы *Плакетта–Бермана* [7, с. 234–240; 10, с. 42–44; 11, с. 108–109; 18, с. 146–148; 20, с. 230–234; 23, с. 219–220; 24, с. 253–259; 25, с. 348–356]. Эти планы содержат количество экспериментальных точек, кратное четырем. 4, 8 и 16 — неинтересно, поскольку мы это уже имели возможность получить, используя ПФЭ 2^2 , 2^3 и 2^4 .

Комбинации знаков, используемых для построения насыщенных планов Плакетта–Бермана, приведены в табл. 5.25. Факторы варьируются на уровнях +1(+) и –1(–).

Таблица 5.25. К построению планов Плакетта–Бермана

<i>n</i>	<i>N</i>	Комбинации знаков																							
3	4	+	–	+																					
7	8	+	+	+	–	+	–	–																	
11	12	+	+	–	+	+	+	–	–	–	+	–													
15	16	+	+	+	+	–	+	–	+	+	–	–	+	–	–	–									
19	20	+	+	–	–	+	+	+	+	–	+	–	+	–	–	–	–	+	+	–					
23	24	+	+	+	+	+	–	+	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	–	+	–	–	–	–	

n — количество факторов; *N* — число экспериментов.

Полные матрицы планов конструируются следующим образом: исходя из заданной первой строки, вторую и последующие строки получают путем сдвига всех элементов предыдущей строки на одну позицию вправо (или влево) и перестановки последнего (первого) элемента на первую (последнюю) позицию. Этот процесс повторяется $(N - 2)$ раз. Последняя строка плана состоит только из элементов $-1(-)$. Матрица плана имеет N строк и $(N - 1)$ столбцов.

Таблица 5.26. План Плакетта–Бермана для $N = 12$

№	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	x_{11}
1	+	+	–	+	+	+	–	–	–	+	–
2	+	–	+	+	+	–	–	–	+	–	+
3	–	+	+	+	–	–	–	+	–	+	+
4	+	+	+	–	–	–	+	–	+	+	–
5	+	+	–	–	–	+	–	+	+	–	+
6	+	–	–	–	+	–	+	+	–	+	+
7	–	–	–	+	–	+	+	–	+	+	+
8	–	–	+	–	+	+	–	+	+	+	–
9	–	+	–	+	+	–	+	+	+	–	–
10	+	–	+	+	–	+	+	+	–	–	–
11	–	+	+	–	+	+	+	–	–	–	–
12	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–

Чтобы получить план Плакетта–Бермана, выбирается соответствующая первая строка из табл. 5.25 и применяется сформулированное выше правило.

Координаты точек плана Плакетта–Бермана для $N = 12$ приведены в табл. 5.26.

Вслед за реализацией плана эксперимента производится обработка его результатов.

Пример. Исследование влияния рецептурно-технологических факторов на теплопроводность (Вт/(м×К)) резины. В качестве независимых факторов были выбраны следующие: \tilde{x}_1 – содержание технического углерода (0–50 масс. ч.); \tilde{x}_2 – содержание графита (0–50 масс. ч.); \tilde{x}_3 – содержание нитрида бора (0–40 масс. ч.); \tilde{x}_4 – содержание пластификатора (5–10 масс. ч.); \tilde{x}_5 – дозировка технологической добавки (5–10 масс. ч.); \tilde{x}_6 – содержание карбида бора (0–20 масс. ч.); \tilde{x}_7 – содержание алюминия сферического дисперсного (0–30 масс. ч.); \tilde{x}_8 – время термообработки (5–10 мин); \tilde{x}_9 – температура термообработки (180–200 °С); \tilde{x}_{10} – давление при

измерении (нижняя и верхняя границы); \tilde{x}_{11} — содержание белой сажи (0–30 масс. ч.). Числа в скобках указывают нижний и верхний (–1 и +1) уровни варьирования переменных при реализации эксперимента.

Использован насыщенный ортогональный план Плакетта–Бермана.

Матрица планирования 12×12 и экспериментальные данные даны в табл. 5.27.

Таблица 5.27. Матрица планирования и результаты эксперимента

№	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	x_{11}	y
1	+	+	+	–	+	+	+	–	–	–	+	–	0,34
2	+	+	–	+	+	+	–	–	–	+	–	+	0,37
3	+	–	+	+	+	–	–	–	+	–	+	+	0,40
4	+	+	+	+	–	–	–	+	–	+	+	–	0,53
5	+	+	+	–	–	–	+	–	+	+	–	+	0,36
6	+	+	–	–	–	+	–	+	+	–	+	+	0,36
7	+	–	–	–	+	–	+	+	–	+	+	+	0,29
8	+	–	–	+	–	+	+	–	+	+	+	–	0,33
9	+	–	+	–	+	+	–	+	+	+	–	–	0,35
10	+	+	–	+	+	–	+	+	+	–	–	–	0,50
11	+	–	+	+	–	+	+	+	–	–	–	+	0,50
12	+	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	0,19

Вычисление параметров линейной модели

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_5x_5 + b_6x_6 + b_7x_7 + b_8x_8 + b_9x_9 + b_{10}x_{10} + b_{11}x_{11}.$$

Теория.

$$b_j = (\sum_{i=1}^N x_{ij}y_i)/N,$$

где i — номер опыта; j — номер коэффициента и соответствующего столбца в матрице планирования; y_i — результат в i -й точке.

Решение.

$$\begin{aligned} b_0 &= (0,34 + 0,37 + 0,40 + 0,53 + 0,36 + 0,36 + 0,29 + 0,33 + 0,35 + 0,50 + 0,50 + 0,19)/12 = 0,3767; \\ b_1 &= (0,34 + 0,37 - 0,40 + 0,53 + 0,36 + 0,36 - 0,29 - 0,33 - 0,35 + 0,50 - 0,50 - 0,19)/12 = 0,0333; \\ b_2 &= (0,34 - 0,37 + 0,40 + 0,53 + 0,36 - 0,36 - 0,29 - 0,33 + 0,35 - 0,50 + 0,50 - 0,19)/12 = 0,0367; \\ b_3 &= (-0,34 + 0,37 + 0,40 + 0,53 - 0,36 - 0,36 - 0,29 + 0,33 - 0,35 + 0,50 + 0,50 - 0,19)/12 = 0,0617; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_4 &= (0,34 + 0,37 + 0,40 - 0,53 - 0,36 - 0,36 + 0,29 - 0,33 + 0,35 + 0,50 - 0,50 - 0,19)/12 = -0,0017; \\
b_5 &= (0,34 + 0,37 - 0,40 - 0,53 - 0,36 + 0,36 - 0,29 + 0,33 + 0,35 - 0,50 + 0,50 - 0,19)/12 = -0,0017; \\
b_6 &= (0,34 - 0,37 - 0,40 - 0,53 + 0,36 - 0,36 + 0,29 + 0,33 - 0,35 + 0,50 + 0,50 - 0,19)/12 = 0,0100; \\
b_7 &= (-0,34 - 0,37 - 0,40 + 0,53 - 0,36 + 0,36 + 0,29 - 0,33 + 0,35 + 0,50 + 0,50 - 0,19)/12 = 0,0450; \\
b_8 &= (-0,34 - 0,37 + 0,40 - 0,53 + 0,36 + 0,36 - 0,29 + 0,33 + 0,35 + 0,50 - 0,50 - 0,19)/12 = 0,0067; \\
b_9 &= (-0,34 + 0,37 - 0,40 + 0,53 + 0,36 - 0,36 + 0,29 + 0,33 + 0,35 - 0,50 - 0,50 - 0,19)/12 = -0,0050; \\
b_{10} &= (0,34 - 0,37 + 0,40 + 0,53 - 0,36 + 0,36 + 0,29 + 0,33 - 0,35 - 0,50 - 0,50 - 0,19)/12 = -0,0017; \\
b_{11} &= (-0,34 + 0,37 + 0,40 - 0,53 + 0,36 + 0,36 + 0,29 - 0,33 - 0,35 - 0,50 + 0,50 - 0,19)/12 = 0,0033.
\end{aligned}$$

Значения отклика представляют собой средние арифметические из двух параллельных наблюдений ($m = 2$).

Проверка значимости коэффициентов модели

Теория.

Проверка значимости осуществляется по t -критерию: $t = |b_i|/S_{bi}$;

b_i — коэффициент, S_{bi} — ошибка определения этого коэффициента; $S_{bi}^2 = S_{\text{восп}}^2/N$.

Решение.

$$S_{\text{восп}}^2 = 1,21 \times 10^{-4}; S_b^2 = 1,21 \times 10^{-4}/12 = 1,008 \times 10^{-5}; S_b = 0,00318.$$

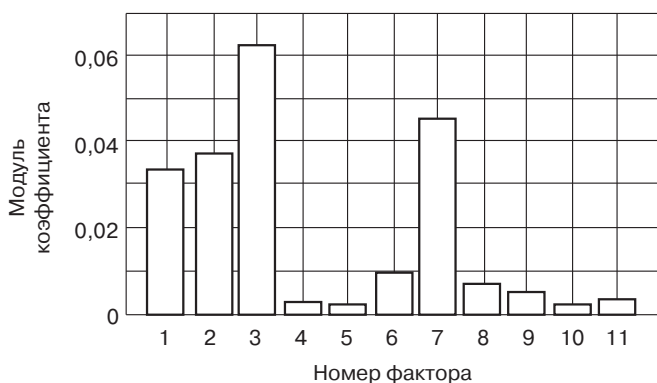


Рис. 5.11. Гистограмма коэффициентов

Интерпретация.

Если рассчитанное значение t -критерия больше табличного (таблица I Приложения) при числе степеней свободы $\nu = N(m - 1)$ и уровне значимости α , то можно считать значимым рассматриваемый коэффициент; в противном случае может ставиться вопрос об исключении этого коэффициента из модели.

$$\nu = 12(2 - 1) = 12; \alpha = 5\%; t_{(12; 0,05)} = 2,179;$$

$$t_0 = 0,3767/0,00318 = 118,46 > t_{\text{кр}};$$

$$t_1 = 0,0333/0,00318 = 10,47 > t_{\text{кр}};$$

$$t_2 = 0,0367/0,00318 = 11,54 > t_{\text{кр}};$$

$$t_3 = 0,0617/0,00318 = 19,40 > t_{кр};$$

$$t_4 = |-0,0017|/0,00318 = 0,53 < t_{кр};$$

$$t_5 = |-0,0017|/0,00318 = 0,53 < t_{кр};$$

$$t_6 = 0,0100/0,00318 = 3,14 > t_{кр};$$

$$t_7 = 0,0450/0,00318 = 14,15 > t_{кр};$$

$$t_8 = 0,0067/0,00318 = 2,11 < t_{кр};$$

$$t_9 = |-0,0050|/0,00318 = 1,57 < t_{кр};$$

$$t_{10} = |-0,0017|/0,00318 = 0,53 < t_{кр};$$

$$t_{11} = 0,0033/0,00318 = 1,04 < t_{кр};$$

Незначимы факторы $x_4, x_5, x_8, x_9, x_{10}$ и x_{11} .

Решение задачи отсеивания несущественных факторов возможно на основе планов *случайного баланса* [7, с. 240–259; 9, с. 64–86; 10, с. 42; 11, с. 109–112; 18, с. 148–166; 20, с. 234–241; 26, с. 163–170; 30, с. 224–241]. Рассмотрим процедуру построения таких планов в несколько упрощенном варианте. Запишем для начала матрицу ПФЭ 2^3 со всеми взаимодействиями.

Пусть теперь первый столбец «отвечает» за фактор x_1 , второй столбец – за фактор x_2 ,...седьмой столбец – за фактор x_7 . Что можно сказать об этой матрице? Она правильная. Первый столбец: минус, плюс, минус, плюс... Второй столбец: два минуса, два плюса... Третий столбец: четыре минуса, четыре плюса.

$$\begin{pmatrix} - & - & - & + & + & + & - \\ + & - & - & - & - & + & + \\ - & + & - & - & + & - & + \\ + & + & - & + & - & - & - \\ - & - & + & + & - & - & + \\ + & - & + & - & + & - & - \\ - & + & + & - & - & + & - \\ + & + & + & + & + & + & + \end{pmatrix}$$

Кстати, если бы мы хотели нарисовать ПФЭ 2^4 , то после третьего столбца написали бы восемь минусов для четвертого фактора, потом повторили бы снизу три столбца для первых трех факторов и справа написали бы восемь плюсов.

Но вернемся к изображенной матрице. Все столбцы в ней ортогональные: сколько плюсов, столько и минусов. Это хорошо, но кроме того все столбцы симметричные. А что нам мешает добавить столбец для восьмого фактора в таком виде (рисуем строку для экономии места): $(- + + + - - - +)$, а теперь девятый столбец с противоположными знаками: $(+ - - - + + + -)$.

И что мы имеем в итоге? Таблицу, в которой будет девять столбцов и восемь строк — свехнасыщенный план. Нас теперь не волнует проблема построения модели, потому что число степеней свободы отрицательное. Нам надо решить, какие из девяти факторов больше влияют, а какие — меньше.

В качестве *примера* рассмотрим уже упоминавшуюся задачу о повышении теплопроводности. Девять факторов: \tilde{x}_1 — содержание технического углерода (0–50 масс. ч.); \tilde{x}_2 — содержание графита (0–50 масс. ч.); \tilde{x}_3 — содержание нитрида бора (0–40 масс. ч.); \tilde{x}_4 — содержание пластификатора (5–10 масс. ч.); \tilde{x}_5 — дозировка технологической добавки (5–10 масс. ч.); \tilde{x}_6 — содержание карбида бора (0–20 масс. ч.); \tilde{x}_7 — содержание алюминия сферического дисперсного (0–30 масс. ч.); \tilde{x}_8 — время термообработки (5–10 мин); \tilde{x}_9 — температура термообработки (180–200 °C). Для оценки теплопроводности используем ранговый принцип: максимальной теплопроводности отвечает ранг 1, минимальной — ранг 8.

План и результаты эксперимента представлены в табл. 5.28.

Таблица 5.28. План и результаты эксперимента

№	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	Ранг
1	—	—	—	+	+	+	—	—	+	8
2	+	—	—	—	—	+	+	+	—	3
3	—	+	—	—	+	—	+	+	—	6
4	+	+	—	+	—	—	—	+	—	7
5	—	—	+	+	—	—	+	—	+	4
6	+	—	+	—	+	—	—	—	+	5
7	—	+	+	—	—	+	—	—	+	2
8	+	+	+	+	+	+	+	+	—	1

Теория.

Для каждого фактора проводится своя ордината. Слева от нее отмечают точками те значения отклика, которые соответствуют положению данного фактора на нижнем уровне (знак «—» в соответствующем столбце матрицы планирования). Справа от этой ординаты отмечают точками значения отклика, полученные при положительных уровнях «+» данного фактора. Вычисляются значения медиан слева Md^- и справа Md^+ для всех факторов и вклады $B = Md^+ - Md^-$, определяется количество выделяющихся точек n и вычисляются произведения $p = Bn$.

Решение.

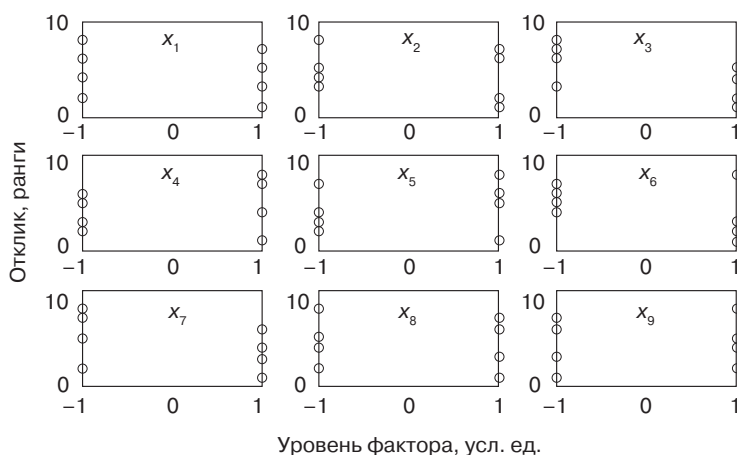


Рис. 5.12. Диаграммы случайного баланса

Расшифровка диаграмм представлена в табл. 5.29.

Таблица 5.29. Анализ диаграмм рассеяния

Факторы	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9
Md^-	5,0	4,5	4,5	4,0	3,5	5,5	6,0	3,0	4,5
Md^+	4,0	4,1	3	5,5	5,5	2,5	3,5	4,5	3,0
B	-1,0	-0,5	-1,5	1,5	2,0	3,0	-2,5	1,5	-1,5
n	2	3	4	—	—	—	3	—	—
$ p $	2,0	1,5	6,0	—	—	—	7,5	—	—

Например, для первого фактора

$$Md^- = (4,0 + 6,0)/2 = 5,0; Md^+ = (3,0 + 5,0)/2 = 4,0; B_1 = 4,0 - 5,0 = -1,0; n = 2; p = |-1,0|2 = 2,0.$$

В случае факторов x_4 , x_5 и x_6 выделяющихся точек не обнаружено. Для факторов x_8 и x_9 тенденция изменения медиан противоположна характеру расположения выделяющихся точек. Например, при анализе влияния фактора x_8 обнаруживается, что медиана растет, а выделяющиеся точки говорят в пользу ее падения. Сомнения вызывает анализ влияния фактора x_6 , где «портит» всю картину расположенная низко точка на верхнем уровне.

Общий вывод может быть сформулирован следующим образом: для модификации теплопроводности можно рекомендовать добавки тонкодисперсного алюминия,

нитрида бора, технического углерода и графита, возможно карбида бора. Для более конкретных выводов выборка явно недостаточна.

Литература

1. Грановский Ю.В. Основы планирования экстремального эксперимента при оптимизации многофакторных технологических процессов. — М.: Изд. МИНХ, 1971. — 73 с.
2. Евланов Л.Г., Кутузов В.А. Экспертные оценки в управлении. — М.: Экономика, 1978. — 134 с.
3. Рейхман У.Дж. Применение статистики / Пер. с англ. — М.: Статистика. 1969. — 296 с.
4. Методика программного прогнозирования развития науки и техники. ГКНТ СМ СССР. Постановление № 462 от 26.11.1971 г.
5. Бернштейн А. Справочник статистических решений / Пер. с англ. — М.: Статистика, 1968. — 162 с.
6. Тернер Д. Вероятность, статистика и исследование операций / Пер. с англ. М.: Статистика. 1976. — 432 с.
7. Планирование эксперимента в исследованиях технологических процессов. Под ред. Э.К. Лецкого / Пер. с нем. — М.: Мир, 1977. — 552 с.
8. Математическое описание и оптимизация многофакторных процессов. — М.: Труды МЭИ, вып. LXVII / Под ред. Г.К. Круга. — 1966. — 211 с.
9. Зедгинидзе И.Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. — М.: Наука, 1976. — 390 с.
10. Назаров В.И., Хоц М.С. Прикладные математические методы в нефтепереработке и нефтехимии. — М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1975. — 111 с.
11. Рузинов Л.П., Слободчикова Р.И. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. — М.: Химия, 1980. — 280 с.
12. Тихомиров В.Б. Математические методы планирования эксперимента при изучении нетканых материалов. — М.: Легкая индустрия, 1968. — 156 с.
13. Маркова Е.В., Лисенков А.Н. Планирование эксперимента в условиях неоднородностей. — М.: Наука, 1973. — 219 с.
14. Маркова Е.В., Лисенков А.Н. Комбинаторные планы в задачах многофакторного эксперимента. — М.: Наука, 1979. — 348 с.
15. Хикс Ч. Основные принципы планирования эксперимента / Пер. с англ. — М.: Мир. 1967. — 406 с.
16. Финни Д. Введение в теорию планирования эксперимента / Пер. с англ. — М.: Наука, 1970. — 288 с.
17. Монтгомери Д.К. Планирование эксперимента и анализ данных / Пер. с англ. — Л.: Судостроение, 1980. — 384 с.
18. Налимов В.В., Чернова Н.А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. — М.: Физматгиз, 1965. — 340 с.

19. Агаянц И.М., Хлебков Г.А., Мешандин А.Г. Основные понятия планирования эксперимента при синтезе связующих. — М.: ЦНИИНТИ, 1981. — 58 с.
20. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. — М.: Высшая школа, 1978. — 319 с.
21. Горюшко В.Е. Планирование эксперимента в бытовой химии. — М.: НИИТЭХИМ, 1974. — 88 с.
22. Гуревич Х.Г., Шварц А.Г. Экспериментально-статистические методы планирования эксперимента и вычислительная техника при разработке рецептуры резиновых смесей. — М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1972. — 59 с.
23. Дэниел К. Применение статистики в промышленном эксперименте / Пер. с англ. — М.: Мир, 1979. — 300 с.
24. Ермаков С.М., Жиглявский А.А. Математическая теория оптимального эксперимента. — М.: Наука, 1987. — 319 с.
25. Математическая теория планирования эксперимента / Под ред. С.М. Ермакова. — М.: Наука, 1983. — 292 с.
26. Налимов В.В. Теория эксперимента. — М.: Наука, 1971. — 207 с.
27. Саутин С.Н. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. — Л.: Химия, 1975. — 48 с.
28. Сычевская И.Д. Планирование научного эксперимента. — М.: Изд. ЦНИИТЭИ приборостроения, 1976. — 75 с.
29. Новые идеи в планировании эксперимента. Сборник статей под ред. В.В. Налимова. — М.: Физматгиз, 1969. — 334 с.
30. Планирование эксперимента и применение вычислительной техники в процессе синтеза резины. Сборник статей под ред. В.Ф. Евстратова и А.Г. Шварца. — М.: Химия, 1970. — 252 с.

Глава 6. Дисперсионный анализ

Целью *дисперсионного анализа* является разложение суммарной дисперсии на две величины: дисперсию, обусловленную техникой эксперимента (внутрилабораторная ошибка воспроизводимости), и дисперсию, вызванную действием изучаемого фактора. В случае многофакторного опыта при помощи дисперсионного анализа определяются дисперсии, обусловленные действием каждого фактора в отдельности и их взаимодействиями, и оценивается статистическая значимость этих величин с учетом ошибки воспроизводимости.

Разработка методов дисперсионного анализа в значительной степени связана с именем английского статистика Р. Фишера. Первые работы в этом направлении были выполнены на Рочемстедской экспериментальной агробиологической станции, основанной в 1920 г. Там впервые был создан специальный статистический отдел как постоянная часть исследовательского штата. Планирование сложных комплексных опытов связано с именем Иэйтса, которым, начиная с 1932 г., была опубликована серия работ в этом направлении [1, с. 197].

На практике встречаются задачи, в которых все исследуемые факторы имеют качественный характер, т. е. они дискретны по своей природе, их уровням не соответствует числовая шкала, и порядок уровней не играет роли. Такими являются, например, определение наиболее перспективных комбинаций уровней факторов на предварительных этапах исследования, отдельные самостоятельные задачи определения оптимальной в известном смысле комбинации уровней факторов, а также задачи построения и изучения математических моделей для систем с качественными факторами.

В этих случаях применение методов дисперсионного анализа особенно эффективно.

Согласно принятой в планировании эксперимента терминологии, совокупность уровней качественных факторов, которыми определяется отдельный опыт, называется способом обработки. Задачи для качественных факторов в большинстве случаев формулируются как задачи сравнения тех или иных способов обработки. Поэтому соответствующие эксперименты часто называют сравнительными экспериментами [2, с. 150].

Дисперсионный анализ обычно подразделяют на одно-, двух- и многофакторный (больше двух). Сообразно этому мы и построим последующее изложение.

Построение планов однофакторного и многофакторного дисперсионного анализа предназначено для оценки влияния факторов на фоне ошибки и для ранжирования факторов в случае многофакторных задач.

6.1. Однофакторный дисперсионный анализ

Итак, однофакторный эксперимент. Единственным фактором могут быть шинные заводы, когда основное внимание исследователя концентрируется на зависимости срока службы шин от фирмы-изготовителя. Единственным фактором может быть также температура, когда экспериментатора интересует производство гуммированных валов. В любом случае, когда изменяется только один фактор, независимо от того, являются его уровни качественными или количественными, фиксированными или случайными, эксперимент называется *однофакторным*; для обозначения эффекта j -го уровня используется символ T_j . Предполагается, что основной фактор можно считать главной причиной изменения изучаемой величины.

Если эксперимент с несколькими уровнями фактора проводится в совершенно случайном порядке таким образом, что любой материал, который нужно обрабатывать, можно приближенно считать однородным, планирование называется *полностью рандомизированным*. В этом случае число наблюдений для каждого испытания или уровня фактора будет определяться из соображений стоимости эксперимента и мощности критерия. Модель эксперимента можно представить как

$$y_{ij} = \mu + \alpha_j + \epsilon_{ij}, \quad (6.1)$$

где y_{ij} обозначает i -е наблюдение на j -м уровне фактора ($i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n$). Например, y_{23} соответствует второму наблюдению на третьем уровне фактора, μ — общий эффект всего эксперимента (фон, средний уровень), α_j — эффект j -го уровня фактора, ϵ_{ij} — случайная ошибка в i -м наблюдении на j -м уровне.

Модель модели — рознь. Когда мы раньше записывали линейную модель $y = a + bx$, мы предполагали, что x — это фактор, который может приобретать различные количественные значения (160, 180, 200 °C), y — отклик, который также может быть выражен количественно, и, наконец, a и b — параметры модели, числа.

В соотношении (6.1) ситуация выглядит совершенно иначе: эта модель показывает, от чего зависит результат y_{ij} ; он зависит от некоего среднего, от влияния фактора и от ошибки. Поэтому все, что входит в соотношение (6.1) — это лишь символы.

Но дисперсионный анализ позволяет оценивать влияние качественных факторов — тип каучука, марка технического углерода, способ обработки материала и пр. Но и влияние количественных факторов можно также изучать.

Для исследования однофакторного полностью рандомизированного эксперимента обычно используется однофакторный дисперсионный анализ, когда гипотеза $H_0: \alpha_j = 0$ (отсутствие влияния фактора) проверяется для всех его уровней j . Если эта гипотеза верна, то никаких эффектов уровней нет, и каждое наблюдение y_{ij} представляется

средним совокупности μ со случайной ошибкой ε_{ij} [1, с. 197–213; 2, с. 150–158; 3, с. 78–86; 4, с. 55–66; 5, с. 312–323; 6, с. 16–28; 7, с. 154–174; 8, с. 250–259; 9, с. 88–92; 10, с. 94–103; 11, с. 116–122; 12, с. 584–592; 13, с. 366–375; 14, с. 36–70; 15, с. 152–159; 16, с. 36–45; 17, с. 210–215; 18, с. 186–196; 19, с. 234–247; 20, с. 294–306; 21, с. 81–97; 22, с. 29–37; 23, с. 350–357; 24, с. 7–17; 25, с. 72–109].

Пример. Исследовано влияние состава четырех различных типов полимерных покрытий на проводимость радиотехнических устройств. Имеется четыре уровня (тип покрытия) и пять наблюдений для каждого уровня. Данные представлены в табл. 6.1 [26, с. 39–66].

Таблица 6.1. Проводимость радиотехнических устройств с различными типами полимерных покрытий

Покрyтия																			
I					II					III					IV				
56	55	62	59	60	64	61	50	55	56	45	46	45	39	43	42	39	45	43	41

Модель однофакторного анализа: $y_{ij} = \mu + \alpha_j + \varepsilon_{ij}$.

Здесь y_{ij} — экспериментальный результат на j -м уровне фактора в i -м повторном последовательном наблюдении; μ — генеральное среднее; α_j — эффект j -го уровня фактора; ε_{ij} — ошибка. Возможность выделения влияния фактора на фоне ошибки основана на том, что сумма значений отклика для каждого уровня фактора зависит от этого уровня и не зависит от ошибки. Это, естественно, относится и к среднему значению отклика на каждом из уровней фактора.

Если бы не было влияния фактора (типа покрытия) и не было ошибки, все двадцать результатов были бы одинаковыми. Ошибка всегда есть, это святое, а вот влияния фактора может и не быть. В рамках однофакторного дисперсионного анализа проверяется гипотеза $H_0: \alpha_j = 0$ (уровень фактора не влияет на изучаемый отклик).

Проверка этой гипотезы включает следующие этапы.

Вычисление генерального среднего из всех значений

Теория.

$$y_{\bar{n}\bar{0}} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m y_{ij} / (m \cdot n).$$

n — число уровней фактора; m — число наблюдений на каждом уровне.

Решение.

$$n = 4; m = 5.$$

$$y_{\text{cp}} = (56 + 55 + 62 + \dots + 43 + 41) / (5 \times 4) \approx 50.$$

Из каждой величины отклика вычитается среднее, и полученные закодированные значения (положительные и отрицательные) вновь формируются в виде таблицы (m строк и n столбцов).

При этом среднее значение следует округлить так, чтобы количество значащих цифр для исходных данных и для среднего совпадало (табл. 6.2).

Таблица 6.2. Кодированные данные для исследования проводимости

Испытания		1	2	3	4
		$j \rightarrow$			
y_{ij}	$\downarrow i$	6	14	-5	-8
		5	11	-4	-11
		12	0	-5	-5
		9	5	-11	-7
		10	6	-7	-9

Вычисление сумм значений отклика по столбцам

Теория.

$$T_{\bullet j} = \sum_{i=1}^m y_{ij},$$

y_{ij} — кодированное значение j -го отклика в i -й строке.

Точка записывается вместо того индекса, по которому осуществляется суммирование.

Суммируются по строке полученные выше итоги:

$$T_{..} = \sum_{j=1}^n T_{\bullet j} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m y_{ij},$$

Решение.

$$T_{\bullet 1} = 6 + 5 + 12 + 9 + 10 = 42;$$

$$T_{\bullet 2} = 14 + 11 + 0 + 5 + 6 = 36;$$

$$T_{\bullet 3} = -5 - 4 - 5 - 11 - 7 = -32;$$

$$T_{\bullet 4} = -8 - 11 - 5 - 7 - 9 = -40.$$

$$T_{..} = 42 + 36 - 32 - 40 = 6.$$

Вычисление средних значений отклика для каждого уровня фактора

Теория.

$$y_{j\text{ср}} = T_{\bullet j} / m_j,$$

m_j — количество повторных наблюдений для каждого из уровней фактора (для каждого типа покрытия).

Решение.

$$m = 5;$$

$$y_{1\text{ср}} = 42/5 = 8,4; \quad y_{2\text{ср}} = 36/5 = 7,2;$$

$$y_{3\text{ср}} = -32/5 = -6,4; \quad y_{4\text{ср}} = -40/5 = -8,0.$$

Вычисление сумм квадратов значений отклика y_{ij} по строкам и столбцам

Теория.

Сумма квадратов значений отклика y_{ij} по столбцам и общая сумма квадратов значений:

$$SS_j = \sum_{i=1}^m y_{ij}^2; \quad SS = \sum_{j=1}^n SS_j = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m y_{ij}^2; \quad SS_{\text{общ}} = SS - T_{..}^2 / (m \times n).$$

Вычитая из этой суммы корректирующий член, получим общую сумму квадратов.

Решение.

$$SS_1 = 6^2 + 5^2 + 12^2 + 9^2 + 10^2 = 386;$$

$$SS_2 = 14^2 + 11^2 + 0^2 + 5^2 + 6^2 = 378;$$

$$SS_3 = (-5)^2 + (-4)^2 + (-5)^2 + (-11)^2 + (-7)^2 = 236;$$

$$SS_4 = (-8)^2 + (-11)^2 + (-5)^2 + (-7)^2 + (-9)^2 = 340;$$

$$SS = 386 + 378 + 236 + 340 = 1340.$$

$$SS_{\text{общ}} = 1340 - 6^2 / (5 \times 4) = 1338,2.$$

Вычисление сумм квадратов, характеризующих влияние фактора и ошибки

Теория.

$$SS_{\text{исп}} = \sum_{j=1}^n T_{.j}^2 / m_j - T_{..}^2 / (m \cdot n); \quad SS_{\text{ош}} = SS_{\text{общ}} - SS_{\text{исп}}.$$

Сумма квадратов для ошибки определяется разностью.

Решение.

$$SS_{\text{исп}} = 42^2/5 + 36^2/5 + (-32)^2/5 + (-40)^2/5 - 6^2/20 = 1135,0;$$

$$SS_{\text{ош}} = 1338,2 - 1135,0 = 203,2.$$

Вычисление средних квадратов (дисперсий)

Теория.

Вычисляются соответствующие числа степеней свободы:

$$v_{\text{общ}} = mn - 1; \quad v_{\text{исп}} = n - 1; \quad v_{\text{ош}} = n(m - 1).$$

Средние квадраты получаются делением сумм квадратов на соответствующее число степеней свободы:

$$MS_{\text{исп}} = SS_{\text{исп}} / v_{\text{исп}}; \quad MS_{\text{ош}} = SS_{\text{ош}} / v_{\text{ош}}.$$

Решение.

$$v_{\text{общ}} = 5 \times 4 - 1 = 19; \quad v_{\text{исп}} = 4 - 1 = 3; \quad v_{\text{ош}} = 4(5 - 1) = 16.$$

$$MS_{\text{исп}} = 1135/3 = 378,3;$$

$$MS_{\text{ош}} = 203,2/16 = 12,7.$$

Интерпретация.

Проверка гипотезы осуществляется по критерию Фишера: $F = MS_{\text{исп}} / MS_{\text{ош}}$.

Гипотеза принимается, если рассчитанное значение критерия меньше табличного при числе степеней свободы: $v_1 = v_{\text{исп}}$ и $v_2 = v_{\text{ош}}$.

$$F = 378,3/12,7 = 29,8.$$

Табличное значение критерия Фишера $F_{(3;16;0,05)} = 3,24 < 29,8$ (таблица XII Приложения). Можно утверждать, что рассматриваемый фактор влияет на изучаемый отклик. В табл. 6.3 приведены итоговые данные.

Таблица 6.3. Результаты однофакторного дисперсионного анализа

Источник изменчивости	Сумма квадратов SS	Число степеней свободы ν	Средний квадрат MS	Критерий Фишера
Тип покрытия	1135,0	3	378,3	29,8
Ошибка	203,2	16	12,7	
Итого	1338,2	19		

Эта же задача может быть решена с использованием одновариантного анализа дисперсии рангов Краскела–Уэллеса [27, с. 73–76].

Для этого представим исходные данные (20 случаев) в виде рангов (минимальному значению проводимости присвоен ранг 1, максимальному — 20). При совпадении значений ранги усреднялись.

В табл. 6.4 данные представлены в натуральном масштабе (слева) и в виде рангов (справа). Максимальное значение проводимости 64 ед., этому значению присваивается ранг 20, следующее значение — 62 (ранг 19), 61 — 18, 60 — 17, 59 — 16, а вот 56 — два результата, поэтому ранг $(15 + 14)/2 = 14,5$ и т. д. Минимальное значение — 39 ед., оно встречается дважды, поэтому $(1 + 2)/2 = 1,5$.

Таблица 6.4. Представление данных по проводимости в натуральном масштабе и в виде рангов

Рецептуры	I		II		III		IV	
Значения проводимости в натуральном масштабе и в виде рангов	56	14,5	64	20	45	8	42	4
	55	12,5	61	18	45	10	39	1,5
	62	19	50	11	45	8	45	8
	59	16	55	12,5	39	1,5	43	5,5
	60	17	56	14,5	43	5,5	41	3
Сумма рангов R_j		79		76		33		22
Число наблюдений m_j		5		5		5		5

Теория.

Гипотеза: тип покрытия не влияет на проводимость.

N — общее число случаев;

R_j — сумма рангов j -го типа покрытия;

n – число типов покрытия;

m_j – число повторных наблюдений для каждого типа покрытия.

Критерий Краскэла–Уэллеса:

$$H = \frac{12}{N(N+1)} \cdot \sum_{j=1}^n \frac{R_j^2}{m_j} - 3(N+1).$$

Величина H распределена как χ^2 с $n - 1$ степенями свободы при $\alpha = 0,05$.

Решение.

$$m_1 = m_2 = m_3 = m_4 = m = 5;$$

$$n = 4;$$

$$N = 5 \times 4 = 20;$$

$$R_1 = 79; R_2 = 76; R_3 = 33; R_4 = 22.$$

$$H = \frac{12}{20(20+1)} \times \left(\frac{79^2}{5} + \frac{76^2}{5} + \frac{33^2}{5} + \frac{22^2}{5} \right) - 3(20+1) = 14,66.$$

$$v = 4 - 1 = 3;$$

$$\chi^2_{(3;0,95)} = 7,815 \text{ (таблица V Приложения).}$$

Интерпретация.

Если $H > \chi^2_{кр}$, можно утверждать, что между выборками есть различия.

Так как $H = 14,66 > \chi^2_{кр} = 7,815$, можно утверждать, что проводимость различна.

Сравнение средних значений с использованием критерия Дункана.

Теория.

Производится ранжирование средних значений. Дисперсия воспроизводимости представлена в табл. 6.3 с числом степеней свободы $v = n(m - 1)$.

Затем вычисляется нормированная ошибка среднего $S = (S^2_{\text{воспр}}/m)^{0,5}$.

Выписываются значения $(n - 1)$ значимых рангов из таблицы Дункана (таблица XIV Приложения) при числе степеней свободы v , уровне значимости α и $p = 2, 3, \dots, n$.

Наименьшие значимые ранги (НЗР), вычисляются как произведение рангов на нормированную ошибку среднего S .

Решение.

Ранжирование средних значений: $-8,0; -6,4; 7,2; 8,4$.

Число степеней свободы: $v = 4(5 - 1) = 16$;

Дисперсия воспроизводимости: $S^2_{\text{воспр}} = 12,7$ (табл. 6.3);

Нормированная ошибка среднего: $S = (12,7/5)^{0,5} = 1,59$;

$v = 16$; $\alpha = 0,05$.

Количество рангов: $(n - 1) = 4 - 1 = 3$;

Ранги: 3,00; 3,15; 3,23.

НЗР: $3,00 \times 1,59 = 4,77$; $3,15 \times 1,59 = 5,01$; $3,23 \times 1,59 = 5,13$.

Интерпретация.

Проверяются разности между средними, начиная с крайних. Если разница между двумя средними меньше соответствующего НЗР, то можно считать, что эти средние не различаются, и наоборот.

Количество сравниваемых пар средних: $4(4-1)/2 = 6$.

$$8,4 - (-8,0) = 16,4 > 5,13;$$

$$8,4 - (-6,4) = 14,8 > 5,01;$$

$$8,4 - 7,2 = 1,2 < 4,77;$$

$$7,2 - (-8,0) = 15,2 > 5,01;$$

$$7,2 - (-6,4) = 13,6 > 4,77;$$

$$-6,4 - (-8,0) = 1,6 < 4,77.$$

Таким образом, с вероятностью 95% можно утверждать, что обнаруживается значимая разность между 1-м и 4-м испытаниями, между 1-м и 3-м, 2-м и 4-м, 2-м и 3-м, а между 1-м и 2-м, 3-м и 4-м значимой разности нет.

На данном примере рассмотрим *общий регрессионный критерий значимости*. Это метод, гораздо более общий, чем метод, изложенный выше. Его можно использовать в любых задачах дисперсионного анализа. Общий регрессионный критерий значимости даст такие же результаты, если его применить к задаче, связанной с определением проводимости. Однако этот метод важен потому, что его легко можно распространить на более сложные задачи.

Рассмотрим модель (6.1) $y_{ij} = \mu + \alpha_j + \varepsilon_{ij}$, пусть m будет оценкой по методу наименьших квадратов для μ , а A_j и e_{ij} — аналогичные оценки для α_j и ε_{ij} соответственно.

Нужно провести следующие операции:

Получить суммы, соответствующие различным испытаниям:

$$T_j = 42; 36; -32; -40.$$

Найти общую сумму всех экспериментальных данных:

$$T_{..} = 6.$$

На основе метода наименьших квадратов $\sum_j \sum_i \varepsilon_{ij}^2 = \sum_j \sum_i (y_{ij} - \mu - \alpha_j)^2$ составить систему нормальных уравнений — по одному для каждой суммы, определенной выше. Неизвестными в этих уравнениях являются оценки параметров.

$$\begin{array}{rcllclcl} 6 & = & 20m & +5A_1 & +5A_2 & +5A_3 & +5A_4 \\ 42 & = & 5m & +5A_1 & & & \\ 36 & = & 5m & & +5A_2 & & \\ -32 & = & 5m & & & +5A_3 & \\ -40 & = & 5m & & & & +5A_4 \end{array}$$

Решить эти уравнения относительно m и A_j .

Поскольку $\sum A_j = 0$, первое уравнение принимает вид $6 = 20m$, и $m = 6/20 = 0,3$.

Из остальных уравнений получаем:

$$A_1 = (42 - 5 \cdot 0,3)/5 = 8,1; \quad A_2 = (36 - 5 \cdot 0,3)/5 = 6,9;$$

$$A_3 = (-32 - 5 \cdot 0,3)/5 = -6,7; \quad A_4 = (-40 - 5 \cdot 0,3)/5 = -8,3;$$

$$\sum_{j=1}^4 A_j = 8,1 + 6,9 - 6,7 - 8,3 = 0.$$

Получить регрессионную сумму квадратов, задаваемую оценками всех параметров. Регрессионную сумму квадратов найдем, умножив каждый член левой части уравнений (суммы) на соответствующую оценку A_j .

$$SS_{\text{регр}}(m, A_j) = 6 \cdot 0,3 + 42 \cdot 8,1 + 36 \cdot 6,9 + (-32) \cdot (-6,7) + (-40) \cdot (-8,3) = 1136,8.$$

Записать новую модель, опуская параметры, которые должны быть равны нулю, если проверяемая гипотеза верна.

$$y_{ij} = \mu + \varepsilon_{ij} \text{ (гипотеза: } \alpha_j = 0 \text{)}.$$

Записать нормальные уравнения, соответствующие новой модели.

$$6 = 20m'.$$

Решить эту систему уравнений и определить регрессионную сумму квадратов, задаваемую оценками оставленных параметров. В отличие от прежних оценок, отметим новые оценки штрихами, например m' :

$$m' = 6/20 = 0,3 \text{ (как и раньше), } SS_{\text{регр}}(m') = 6 \cdot 0,3 = 1,8.$$

Получить сумму квадратов между испытаниями:

$$SS_{\text{исп}} = SS_{\text{регр}}(m, A_j) - SS_{\text{регр}}(m');$$

$$SS_{\text{исп}} = 1136,8 - 1,8 = 1135,0.$$

Получить сумму квадратов, связанную с ошибкой:

$$SS_{\text{ош}} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{m_j} y_{ij}^2 - SS_{\text{регр}}(m, A_j);$$

$$SS_{\text{ош}} = 1340 - 1136,8 = 203,2.$$

Построить F-статистику следующим образом:

$$F = \frac{SS_{\text{исп}} / \times \text{число степеней свободы}}{SS_{\text{ош}} / \times \text{число степеней свободы}};$$

$$F = \frac{1135,0/3}{203,2/16} = \frac{378,3}{12,7} = 29,8 \text{ (как и раньше).}$$

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```
echo on
% ОДНОФАКТОРНЫЙ ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ
% МОДЕЛЬ Y=m+a+e; ГИПОТЕЗА Ho:a=0
echo off
echo on
% ВАМ НЕОБХОДИМО ВВЕСТИ МАТРИЦУ РЕЗУЛЬТАТОВ ПО ТАКОЙ СХЕМЕ:
% в квадратных скобках записать через пробелы повторные наблюдения
% отклика (свойства) на 1-ом уровне фактора, затем вставить «;»,
% потом (опять через пробелы) - на 2-ом уровне и т.д.
echo off
y=input('ВВОДИТЕ');
Y=y'; - ОПЕРАЦИЯ ТРАНСПОНИРОВАНИЯ;
T=sum(Y); - СУММА ПОВТОРНЫХ НАБЛЮДЕНИЙ ДЛЯ КАЖДОГО УРОВНЯ ФАКТОРА;
z=size(Y);n=z(1);k=z(2); - КОЛИЧЕСТВО ПОВТОРНЫХ НАБЛЮДЕНИЙ И ЧИСЛО УРОВНЕЙ ФАКТОРА;
Tl=sum(T); - ОБЩАЯ СУММА НАБЛЮДЕНИЙ;
N=n*k; - ОБЩЕЕ КОЛИЧЕСТВО НАБЛЮДЕНИЙ;
```

```

YY=Y.^2; - РАСЧЕТ КВАДРАТОВ НАБЛЮДЕНИЙ;
S=sum(sum(YY)); - СУММА КВАДРАТОВ НАБЛЮДЕНИЙ;
G=Tl^2/N; - КОРРЕКТИРУЮЩИЙ ЧЛЕН;
SSo=S-G; - ОБЩАЯ СУММА КВАДРАТОВ;
SSy=sum(T.^2)/n-G; - СУММА КВАДРАТОВ ФАКТОРА;
SSr=SSo-SSy; - СУММА КВАДРАТОВ ОШИБКИ;
echo on
% СУММЫ КВАДРАТОВ: испытания, ошибки и общая
echo off
SS=[SSy SSr SSo];disp(SS)
echo on
% ЧИСЛО СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ: испытания, ошибки и общее
echo off
f=[k-1 N-k N-1];disp(f)
echo on
% ЗНАЧЕНИЯ СРЕДНИХ КВАДРАТОВ: испытания и ошибки
echo off
MS=[SSy/(k-1) SSr/(N-k)];disp(MS)
echo on
% КРИТЕРИИ ФИШЕРА: РАССЧИТАННЫЙ И ТАБЛИЧНЫЙ
echo off
F=(SSy/(k-1))/(SSr/(N-k)); - РАСЧЕТ КРИТЕРИЯ;
Ft=[ 161.4 199.5 215.7...]; - КРИТЕРИЙ ФИШЕРА
Ft=[Ft; 18.51 19.00...]; (фрагмент таблицы);
Ft1=Ft(N-k,k-1); - ВЫБОР КРИТЕРИЯ ИЗ ТАБЛИЦЫ;
ff=[F Ft1];disp(ff)
dF=F-Ft1; - РАЗНОСТЬ КРИТЕРИЕВ;
if dF>=0 ('ГИПОТЕЗА ОБ ОТСУТСТВИИ ВЛИЯНИЯ ФАКТОРА НЕ ПРИНИМАЕТСЯ')
else ('ГИПОТЕЗА ОБ ОТСУТСТВИИ ВЛИЯНИЯ ФАКТОРА ПРИНИМАЕТСЯ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ.

```

Если число испытаний на различных уровнях фактора неодинаково, то общую сумму квадратов отклонений вычисляют как и в случае одинакового числа испытаний на всех уровнях [3, с. 84–86; 5, с. 319–321; 10, с. 100–104; 13, с. 370–379; 24, с. 12–13].

Пример. Исследовано влияние состава четырех резин на твердость вулканизатов. Имеется четыре уровня (тип резины) и различное количество наблюдений для каждого уровня. Данные представлены в табл. 6.5.

Таблица 6.5. Твердость вулканизатов различных типов

Типы резин													
I				II				III			IV		
69	69	71	71	70	71	72	73	66	67	68	61	60	62

В рамках однофакторного дисперсионного анализа проверяется гипотеза $H_0: \alpha_j = 0$ (уровень фактора не влияет на изучаемый отклик).

Проверка этой гипотезы включает следующие этапы.

Вычисление генерального среднего из всех значений

Теория.

$$y_{\bar{n}\bar{o}} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m y_{ij} / \sum_{j=1}^n m_j$$

n — число уровней фактора; m_j — число наблюдений на каждом уровне.

Решение.

$$n = 4; m_1 = 4; m_2 = 4; m_3 = 3; m_4 = 3; m = \sum m_j = 4 + 4 + 3 + 3 = 14;$$

$$y_{\text{ср}} = (69 + 69 + 71 + 71 + 70 + 71 + 72 + 73 + 66 + 67 + 68 + 61 + 60 + 62) / (14) = 950 / 14 \approx 68.$$

Из каждой величины отклика вычитается среднее, и полученные закодированные значения (положительные и отрицательные) вновь формируются в виде таблицы (табл. 6.6).

Вычисление общей суммы квадратов и сумм квадратов, характеризующих влияние фактора и ошибки

Теория.

$$\text{Общая сумма квадратов: } SS_{\text{общ}} = SS - T_{..}^2 / m.$$

$$\text{Сумма квадратов, связанная с влиянием фактора: } SS_{\text{исп}} = \sum T_{.j}^2 / m_j - T_{..}^2 / m.$$

$$\text{Сумма квадратов, связанная с ошибкой: } SS_{\text{ош}} = SS_{\text{общ}} - SS_{\text{исп}}.$$

Решение.

$$\text{Общая сумма квадратов: } SS_{\text{общ}} = 228 - (-2)^2 / 14 = 227,71;$$

Сумма квадратов, связанная с влиянием фактора:

$$SS_{\text{исп}} = 64/4 + 196/4 + 9/3 + 441/3 - (-2)^2 / 14 = 214,71;$$

$$SS_{\text{ош}} = 227,71 - 214,71 = 13,00.$$

Таблица 6.6. Кодированные данные для исследования твердости резин

Номер опыта i	Уровни фактора								Итог
	1		2		3		4		
	y_{i1}	y_{i1}^2	y_{i2}	y_{i2}^2	y_{i3}	y_{i3}^2	y_{i4}	y_{i4}^2	
1	1	1	2	4	−2	4	−7	49	
2	1	1	3	9	−1	1	−8	64	
3	3	9	4	16	0	0	−6	36	
4	3	9	5	25	—		—		
$SS_j = \sum y_{ij}^2$		20		54		5		149	$SS = 228$
$T_{.j} = \sum y_{ij}$	8		14		−3		−21		$T_{..} = −2$
$T_{.j}^2$	64		196		9		441		

Вычисление средних квадратов (дисперсий)

Теория.

Средний квадрат, связанный с влиянием фактора:

$$MS_{\text{исп}} = SS_{\text{исп}} / (n - 1);$$

Средний квадрат, связанный с ошибкой:

$$MS_{\text{ош}} = SS_{\text{ош}} / (m - n).$$

Решение.

Средний квадрат, связанный с влиянием фактора:

$$MS_{\text{исп}} = 214,71 / (4 - 1) = 71,57;$$

Средний квадрат, связанный с ошибкой:

$$MS_{\text{ош}} = 13,00 / (14 - 4) = 1,30.$$

Вычисление критерия Фишера

Теория.

$$F = MS_{\text{исп}} / MS_{\text{ош}}.$$

Решение.

$$F = 71,57 / 1,30 = 55,1.$$

Интерпретация.

Учитывая, что число степеней свободы числителя $\nu_1 = (n - 1) = 3$, знаменателя $\nu_2 = (m - n) = 10$ и что уровень значимости $\alpha = 0,05$, по таблице (таблице XII Приложения) находим критическую точку $F_{\text{кр}} = 3,71$. Так как $F_{\text{набл}} > F_{\text{кр}}$, нулевую гипотезу о равенстве средних значений твердости отвергаем.

6.2. Двухфакторный дисперсионный анализ

Задача двухсторонней классификации (кроссклассификации, или двухфакторного дисперсионного анализа) возникает при проведении наблюдений в эксперименте, в котором одновременно действуют два фактора x_1 и x_2 , варьируемые соответственно на n_1 и n_2 уровнях [1, с. 214–221, 227–237; 2, с. 158–169; 3, с. 87–99; 4, с. 83–103; 8, с. 259–266; 9, с. 92–99; 10, с. 104–117; 11, с. 122–130; 13, с. 375–379; 14, с. 121–138; 15, с. 186–190; 17, с. 215–225; 18, с. 196–206; 19, с. 247–255; 20, с. 206–312; 22, с. 38–44; 24, с. 17–31; 25, с. 112–144; 26, с. 68–94; 28, с. 140–164; 29, с. 47–52]. При однократных наблюдениях для каждой комбинации уровней факторов x_1 и x_2 в распоряжении исследователя имеется лишь одно измеренное значение, а их общее число равно $n_1 n_2$.

Пример. Исследовано влияние четырех марок шин (A, B, C и D) и четырех автомобилей (I, II, III и IV) на величину износа протектора в мм после пробега 40 тыс. км. Кодированные значения отклика (после вычитания из всех чисел 13 мм) представлены в табл. 6.7.

Таблица 6.7. Кодированные данные для исследования износа протектора

Автомобиль	Марка шины				T_j
	A	B	C	D	
I	4	1	-1	0	4
II	1	1	-1	-2	-1
III	0	0	-3	-2	-5
IV	0	-5	-4	-4	-13
T_i	5	-3	-9	-8	-15 = $T_{..}$
$\sum_{i=1}^4 y_{ij}^2$	17	27	27	24	$95 = \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^4 y_{ij}^2$

Модель двухфакторного анализа имеет вид:

$$y_{ij} = \mu + \alpha_j + \beta_j + \varepsilon_{ij}. \quad (6.2)$$

Здесь y_{ij} — экспериментальный результат на i -м уровне первого фактора и j -м уровне второго фактора; μ — генеральное среднее; α_i — эффект i -го уровня первого фактора; β_j — эффект j -го уровня второго фактора; ε_{ij} — ошибка.

В рамках двухфакторного дисперсионного анализа проверяется гипотеза $H_0: \alpha_i = 0$ и $\beta_j = 0$ (уровни факторов не влияют на изучаемый отклик).

Проверка этой гипотезы включает в себя следующие этапы.

Вычисление сумм квадратов: общей суммы квадратов, суммы квадратов, характеризующей влияние марки шины, суммы квадратов, характеризующей влияние автомобиля, и суммы квадратов, связанной с ошибкой и нелинейностью влияния факторов (остаточная сумма квадратов):

Теория.

$$\text{Общая сумма квадратов: } SS_{\text{общ}} = \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} y_{ij}^2 - T_{..}^2 / (n_1 \cdot n_2);$$

$$\text{сумма квадратов для марки шины: } SS_{\text{мар}} = \sum_{j=1}^{n_2} T_{.j}^2 / n_1 - T_{..}^2 / (n_1 \cdot n_2);$$

$$\text{сумма квадратов для автомобиля: } SS_{\text{авт}} = \sum_{i=1}^{n_1} T_{i.}^2 / n_2 - T_{..}^2 / (n_1 \cdot n_2);$$

$$\text{остаточная сумма квадратов: } SS_{\text{ост}} = SS_{\text{общ}} - SS_{\text{мар}} - SS_{\text{авт}}.$$

Решение.

$$\text{Общая сумма квадратов: } SS_{\text{общ}} = 95 - (-15)^2/16 = 80,9;$$

$$\text{сумма квадратов для марки шины: } SS_{\text{мар}} = ((5)^2 + (-3)^2 + (-9)^2 + (-8)^2)/4 - (-15)^2/16 = 30,6;$$

сумма квадратов для автомобиля: $SS_{\text{авт}} = ((4)^2 + (-1)^2 + (-5)^2 + (-13)^2)/4 - (-15)^2/16 = 38,6$;

остаточная сумма квадратов: $SS_{\text{ост}} = 80,9 - 30,6 - 38,6 = 11,7$.

Вычисление числа степеней свободы

Теория.

$$v_{\text{общ}} = n_1 \cdot n_2 - 1; v_{\text{мар}} = n_1 - 1; v_{\text{авт}} = n_2 - 1; v_{\text{ост}} = v_{\text{общ}} - v_{\text{мар}} - v_{\text{авт}}.$$

Решение.

$$v_{\text{общ}} = 4 \cdot 4 - 1 = 15; v_{\text{мар}} = 4 - 1 = 3; v_{\text{авт}} = 4 - 1 = 3; v_{\text{ост}} = 15 - 3 - 3 = 9.$$

Вычисление средних квадратов

Теория.

$$MS_{\text{мар}} = SS_{\text{мар}}/v_{\text{мар}};$$

$$MS_{\text{авт}} = SS_{\text{авт}}/v_{\text{авт}};$$

$$MS_{\text{ост}} = SS_{\text{ост}}/v_{\text{ост}}.$$

Решение.

$$MS_{\text{мар}} = 30,6/3 = 10,2;$$

$$MS_{\text{авт}} = 38,6/3 = 12,9;$$

$$MS_{\text{ост}} = 11,7/9 = 1,3.$$

Интерпретация.

Проверка гипотезы осуществляется по критерию Фишера: $F = MS_{\text{исп}}/MS_{\text{ост}}$. Гипотеза принимается, если рассчитанное значение критерия меньше табличного при числе степеней свободы $v_1 = v_{\text{исп}}$ и $v_2 = v_{\text{ост}}$.

$$F_{\text{мар}} = 10,2/1,3 = 7,85; F_{\text{авт}} = 12,9/1,3 = 9,92.$$

Табличное значение критерия $F_{(3;9;0,05)} = 3,86$. Оно меньше 7,85 и 9,92. Рассматриваемые факторы влияют на изучаемый отклик.

Итоговые данные представлены в табл. 6.8.

Таблица 6.8. Результаты двухфакторного дисперсионного анализа

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Марки шин	30,6	3	10,2	7,85
Автомобили	38,6	3	12,9	9,92
Остаток	11,7	9	1,3	
Итого	80,9	15		

Пример. В предыдущем примере одно из значений отсутствует: покрышка вышла из строя ранее назначенного времени. Кодированные значения отклика для этого случая представлены в табл. 6.9, вместо отсутствующего результата проставлен символ y .

Таблица 6.9. Кодированные данные для исследования износа протектора

Автомобиль	Марка шины				$T_{\cdot j}$
	A	B	C	D	
I	4	1	-1	0	4
II	1	1	-1	-2	-1
III	0	0	y	-2	$y - 2$
IV	0	-5	-4	-4	-13
$T_{\cdot i}$	5	-3	$y - 6$	-8	$y - 12 = T_{\cdot}$

Если одно или более наблюдений отсутствует, то обычные операции следует заменить такой, которая минимизирует остаточную сумму квадратов.

Эта процедура включает следующие этапы:

Вычисление остаточной суммы квадратов

Теория.

$$SS_{\text{ост}} = SS_{\text{общ}} - SS_{\text{мар}} - SS_{\text{авт}} = \sum_{j=1}^{n_2} \sum_{i=1}^{n_1} y_{ij}^2 - \sum_{j=1}^{n_2} T_{\cdot j}^2 / n_2 - \sum_{i=1}^{n_1} T_{i \cdot}^2 / n_1 + T_{\cdot \cdot}^2 / (n_1 \cdot n_2).$$

Решение.

$$SS_{\text{ост}} = 4^2 + 1^2 + \dots + y^2 + \dots + (-4)^2 - (5^2 + (-3)^2 + (y - 6)^2 + (-8)^2) / 4 - (4^2 + (-1)^2 + (y - 2)^2 + (-13)^2) / 4 + (y - 12)^2 / 16.$$

Вычисление производной от этой суммы по y и приравнивание ее нулю

Теория.

$$\frac{\partial(SS_{\text{ост}})}{\partial y} = 0.$$

Решение.

$$\partial SS_{\text{ост}} / \partial y = 2y - 2(y - 6) / 4 - 2(y - 2) / 4 + 2(y - 12) / 16 = 0;$$

$$16y - 4y + 24 - 4y + 8 + y - 12 = 0;$$

$$9y = -20;$$

$$y = -2,2.$$

Эта величина подставляется в исходную таблицу и все вычисления повторяются.

Таблица 6.10. Результаты дисперсионного анализа с пропущенным наблюдением

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Марки шин	28,7	3	9,5	6,79
Автомобили	38,3	3	12,7	9,07
Остаток	11,2	8	1,4	
Итого	78,2	14		

Интерпретация.

Проверка гипотезы осуществляется по критерию Фишера: $F = MS_{\text{исп}}/MS_{\text{ост}}$. Гипотеза принимается, если рассчитанное значение критерия меньше табличного при числе степеней свободы $\nu_1 = \nu_{\text{исп}}$ и $\nu_2 = \nu_{\text{ост}}$.

$$F_{\text{мар}} = 9,5/1,4 = 6,79; F_{\text{авт}} = 12,7/1,4 = 9,07.$$

Табличное значение критерия $F_{(3,8,0.05)} = 4,07$. Оно меньше 6,79 и 9,07. Рассматриваемые факторы влияют на изучаемый отклик.

Можно показать, что в общем случае пропущенная величина равна

$$y_{ij} = \frac{n_1 T'_{i\cdot} + n_2 T'_{\cdot j} - T'_{\cdot\cdot}}{(n_1 - 1)(n_2 - 1)},$$

где $T'_{i\cdot}$, $T'_{\cdot j}$ и $T'_{\cdot\cdot}$ – суммы без пропущенной величины y . В нашем примере

$$y_{ij} = y_{33} = (4(-2) + 4(-6) + 4(-12))/(3 \cdot 3) = -2,2 \text{ (как и прежде).}$$

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```
echo on
% ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ
% ДВУХФАКТОРНЫЙ ЭСПЕРИМЕНТ С ПРОПУЩЕННЫМИ ДАННЫМИ
echo off
echo on
% ВАМ НЕОБХОДИМО ВВЕСТИ МАТРИЦУ РЕЗУЛЬТАТОВ ПО ТАКОЙ СХЕМЕ:
%
%      X2\X1 |      A      B      C      D
%      -----|-----
%      I      |
%      II     |      yij
%      III    |
%      IV     |
%
% В квадратных скобках записать через пробелы наблюдения для
% 1-го уровня 2-го фактора (т. е. 1-ю строку), затем вставить
% «;», потом (опять через пробелы) – 2-ю строку и т.д. и не забыть
% в конце поставить скобку]
echo off
y=input('ВВОДИТЕ');
pause
u=size(y);n=u(1);k=u(2);
B=sum(y);A=sum(y'); - СУММЫ ПО СТРОКАМ И СТОЛБЦАМ;
A1=mean(A);B1=mean(B); - СРЕДНИЕ ПО СТРОКАМ И СТОЛБЦАМ;
G=sum(A); - ОБЩАЯ СУММА;
SS1=sum(sum(y.^2)); - СУММА КВАДРАТОВ;
SS2=(sum(A.^2))/n;SS3=(sum(B.^2))/k; - СУММА КВАДРАТОВ ПО СТРО-
КАМ И СТОЛБЦАМ;
SS4=G^2/n/k; - КОРРЕКТИРУЮЩИЙ ЧЛЕН;
SSa=SS2-SS4;SSb=SS3-SS4; - СУММЫ КВАДРАТОВ ФАКТОРОВ;
```

```

SSo=SSl-SS4; - ОБЩАЯ СУММА КВАДРАТОВ;
SSr=SSo-(SSa+SSb); - СУММЫ КВАДРАТОВ ОШИБКИ;
echo on
% ВВЕДЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ
echo off
ppp=y;disp(ppp)
echo on
% СУММЫ КВАДРАТОВ: для 1-го и 2-го факторов, ошибки и общая
echo off
SS=[SSb SSa SSr SSo];disp(SS)
echo on
% ЧИСЛО СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ: испытаний, ошибки и общее
echo off
f=[n-1 k-1 (k-1)*(n-1) k*n-1];disp(f)
echo on
% ЗНАЧЕНИЯ СРЕДНИХ КВАДРАТОВ: для 1-го и 2-го факторов и ошибки
echo off
MS=[SSb/(n-1) SSa/(k-1) SSr/((k-1)/(n-1))];
disp(MS)
echo on
% КРИТЕРИИ ФИШЕРА: РАССЧИТАННЫЕ И ТАБЛИЧНЫЕ (для 1-го и 2-го
факторов)
echo off
F=[(SSb/(n-1))/(SSr/((k-1)/(n-1))) (SSa/(k-1))/(SSr/((k-1)/(n-1)))];
Ft=[161 200 216...]; - ФРАГМЕНТ ТАБЛИЦЫ
Ft=[Ft;6.61 5.79...]; КРИТЕРИЯ;
Ft1=Ft*((k-1)*(n-1),(n-1)); - ВЫБОР КРИТЕРИЕВ
Ft2=Ft*((k-1)*(n-1),(k-1)); ИЗ ТАБЛИЦЫ И
ff=[F Ft1 Ft2];disp(ff) ВЫВОД НА ЭКРАН;
echo on
% ЕСЛИ РАСЧЕТНЫЙ КРИТЕРИЙ ФИШЕРА < ТАБЛИЧНОГО, СЛЕДУЕТ ПОЛАГАТЬ,
ЧТО СООТВЕТСТВУЮЩИЙ ФАКТОР ВЛИЯЕТ НА ИЗУЧАЕМОЕ СВОЙСТВО
echo off
echo on
% А ТЕПЕРЬ УКАЖИТЕ В КВАДРАТНЫХ СКОБКАХ ЧЕРЕЗ «;» НОМЕР СТРОКИ
И НОМЕР СТОЛБЦА В ИСХОДНОЙ ТАБЛИЦЕ, ГДЕ (предположим) ОТСУТСТ-
ВУЕТ РЕЗУЛЬТАТ
echo off
w=input('ИТАК, НОМЕР СТРОКИ И СТОЛБЦА');
y(w(1),w(2))=0;y1=y';
T1=sum(y(:,w(1)));T2=sum(y1(:,w(2)));
T=sum(sum(y)); - ВЫЧИСЛЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТА;
Y=(n*T1+k*T2-T)/(n-1)/(k-1);
echo on

```

```

% ВОТ «ПРОПАВШИЙ» РЕЗУЛЬТАТ
echo off
disp(Y)
echo on
% А ТЕПЕРЬ ВЕСЬ РАСЧЕТ ЗАНОВО
echo off
y(w(1),w(2))=Y;
u=size(y);n=u(1);k=u(2);B=sum(y);A=sum(y');
A1=mean(A);B1=mean(B);G=sum(A);
SS1=sum(sum(y.^2));SS2=(sum(A.^2))/n;SS3=(sum(B.^2))/k;SS4=G^2/
n/k;
SSa=SS2-SS4;SSb=SS3-SS4;SSo=SS1-SS4;SSr=SSo-(SSa+SSb);
echo on
% СУММЫ КВАДРАТОВ: для 1-го и 2-го факторов, ошибки и общая
echo off
SS=[SSb SSa SSr SSo];disp(SS)
echo on
% ЧИСЛО СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ: испытаний, ошибки и общее
echo off
f=[n-1 k-1 (k-1)*(n-1)-1 k*n-2];disp(f)
echo on
% ЗНАЧЕНИЯ СРЕДНИХ КВАДРАТОВ: для 1-го и 2-го факторов и ошибки
echo off
MS=[SSb/(n-1) SSa/(k-1) SSr/((k-1)*(n-1)-1)];
disp(MS)
echo on
% КРИТЕРИИ ФИШЕРА: РАССЧИТАННЫЕ И ТАБЛИЧНЫЕ (для 1-го и 2-го
факторов)
echo off
F=[(SSb/(n-1))/(SSr/((k-1)*(n-1)-1)) (SSa/(k-1))/(SSr/((k-
1)*(n-1)-1))];
Ft1=Ft((k-1)*(n-1)-1,(n-1));Ft2=Ft((k-1)*(n-1)-1,(k-1));ff=[F
Ft1 Ft2];disp(ff)
echo on
% ЕСЛИ РАСЧЕТНЫЙ КРИТЕРИЙ ФИШЕРА < ТАБЛИЧНОГО, СЛЕДУЕТ ПОЛА-
ГАТЬ, ЧТО СООТВЕТСТВУЮЩИЙ ФАКТОР ВЛИЯЕТ НА ИЗУЧАЕМОЕ СВОЙСТВО
echo off

```

В рассмотренных выше примерах на каждом уровне фактора содержалось одно наблюдение. Рассмотрим последовательность анализа в случае наличие повторных наблюдений для двухфакторного эксперимента.

Пример. Исследовано влияние четырех марок технического углерода (фактор № 1) и четырех типов вулканизующих групп (фактор № 2) на условную прочность вулканизатов при растяжении (МПа). Для каждой резины сделано по три повторных наблюдения. Экспериментальные результаты даны в табл. 6.11.

Таблица 6.11. Данные измерения прочности

Фактор № 2	Фактор № 1			
	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>
I	15,3	19,4	18,8	16,4
	15,0	19,0	18,6	16,6
	15,2	19,6	18,3	16,7
II	14,4	18,4	17,7	15,3
	14,0	17,9	17,6	15,6
	14,3	18,5	17,4	15,8
III	16,3	20,4	19,8	17,3
	16,1	20,0	19,5	17,7
	16,5	20,5	19,3	17,7
IV	16,8	21,0	20,3	17,8
	16,6	20,5	20,0	18,3
	17,0	20,9	19,7	18,1

Определим суммы наблюдений в каждой ячейке (табл. 6.12).

Таблица 6.12. Суммы повторных наблюдений для каждого сочетания уровней факторов

Фактор № 2	Фактор № 1				Итоги
	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	
I	45,5	58,0	55,7	49,7	208,9
II	42,7	54,8	52,7	46,7	196,9
III	48,9	60,9	58,6	52,7	221,1
IV	50,4	62,4	60,0	54,2	227,0
Итоги	187,5	236,1	227,0	203,3	853,9

Возведем полученные суммы в квадрат (табл. 6.13).

Таблица 6.13. Квадраты сумм повторных наблюдений

Фактор № 2	Фактор № 1			
	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>
I	2070,25	3364,00	3102,49	2470,09
II	1823,29	3003,04	2777,29	2180,89
III	2391,21	3708,81	3433,96	2777,29
IV	2540,16	3893,76	3600,00	2937,64

Подсчет итогов по столбцам

Теория.

$$T_{i..} = \sum_{j=1}^{n_2} \sum_{r=1}^m y_{ijr}.$$

Решение.

$$T_{1..} = 45,5 + 42,7 + 48,9 + 50,4 = 187,5;$$

$$T_{2..} = 58,0 + 54,8 + 60,9 + 62,4 = 236,1;$$

$$T_{3..} = 55,7 + 52,7 + 58,6 + 60,0 = 227,0;$$

$$T_{4..} = 49,7 + 46,7 + 52,7 + 54,2 = 203,3.$$

Подсчет итогов по строкам

Теория.

$$T_{.j.} = \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{r=1}^m y_{ijr}.$$

Решение.

$$T_{1.} = 45,5 + 58,0 + 55,7 + 49,7 = 208,9;$$

$$T_{2.} = 42,7 + 54,8 + 52,7 + 46,7 = 196,9;$$

$$T_{3.} = 48,9 + 60,9 + 58,6 + 52,7 = 221,1;$$

$$T_{4.} = 50,4 + 62,4 + 60,0 + 54,2 = 227,0,$$

Подсчет общего итога – сумма всех наблюдений

Теория.

$$T_{...} = \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \sum_{r=1}^m y_{ijr} = \sum_{i=1}^{n_1} T_{i..} = \sum_{j=1}^{n_2} T_{.j.}.$$

Решение.

$$T_{...} = 187,5 + 236,1 + 227,0 + 203,3 = 208,9 + 196,9 + 221,1 + 227,0 = 853,9,$$

Вычисление суммы квадратов всех наблюдений

Теория.

$$SS_1 = \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \sum_{r=1}^m y_{ijr}^2.$$

Решение.

$$SS_1 = 15,3^2 + 19,4^2 + 18,8^2 + \dots + 20,9^2 + 19,7^2 + 18,1^2 = 15359,91.$$

Вычисление суммы квадратов итогов по столбцам, деленной на число наблюдений в столбце

Теория.

$$SS_2 = \frac{1}{n_2 \cdot m} \sum_{i=1}^{n_1} T_{i..}^2.$$

Решение.

$$SS_2 = (187,5^2 + 236,1^2 + 227,0^2 + 203,3^2) / (4 \cdot 3) = 15313,28.$$

Вычисление суммы квадратов итогов по строкам, деленной на число наблюдений в строке

Теория.

$$SS_3 = \frac{1}{n_1 \cdot m} \sum_{j=1}^{n_2} T_{.j.}^2.$$

Решение.

$$SS_3 = (208,9^2 + 196,9^2 + 221,1^2 + 227,0^2)/(4 \cdot 3) = 15235,25.$$

Вычисление квадрата общего итога, деленного на число всех наблюдений

Теория.

$$SS_4 = \left(\sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \sum_{r=1}^m y_{ijr} \right)^2 / (n_1 \cdot n_2 \cdot m).$$

Решение.

$$SS_4 = 853,9^2/(4 \cdot 4 \cdot 3) = 729145,21/48 = 15190,53$$

Вычисление сумм квадратов отклонений для факторов № 1 (a) и № 2 (b)

$$SS_a = SS_2 - SS_4 = 15313,28 - 15190,53 = 122,75;$$

$$SS_b = SS_3 - SS_4 = 15235,25 - 15190,53 = 44,72,$$

Вычисление суммы квадратов для дисперсии воспроизводимости

Теория.

$$SS_{\text{ош}} = SS_1 - \left(\sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} y_{ij}^2 \right) / m.$$

Решение.

$$\sum y_{ij}^2 = 45,5^2 + 58,0^2 + 55,7^2 + \dots + 236,1^2 + 227,0^2 + 203,3^2 = 46074,17;$$

$$SS_{\text{ош}} = 15359,91 - 46074,17/3 = 1,85.$$

Вычисление общей суммы квадратов

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_4 = 15359,91 - 15190,53 = 169,38.$$

Определение суммы квадратов отклонений для эффекта взаимодействия

$$SS_{ab} = SS_{\text{общ}} - SS_a - SS_b - SS_{\text{ош}} = 169,38 - 122,75 - 44,72 - 1,85 = 0,06.$$

Вычисление соответствующих дисперсий (средних квадратов)

Теория.

$$MS_a = SS_a/(n_1 - 1); \quad MS_b = SS_b/(n_2 - 1);$$

$$MS_{\text{ош}} = SS_{\text{ош}}/(n_1 n_2 (m - 1)); \quad MS_{ab} = SS_{ab}/((n_1 - 1)(n_2 - 1)).$$

Решение.

$$MS_a = 122,75/(4 - 1) = 40,917;$$

$$MS_b = 44,72/(4 - 1) = 14,907;$$

$$MS_{\text{ош}} = 1,85/(4 \cdot 4 \cdot (3 - 1)) = 0,05781;$$

$$MS_{ab} = 0,06/((4 - 1)(4 - 1)) = 0,00667.$$

Расчет дисперсионных отношений (критериев Фишера)

Теория.

$$F = MS_a/MS_{\text{ош}}; \quad F = MS_b/MS_{\text{ош}}; \quad F = MS_{ab}/MS_{\text{ош}}.$$

Решение.

$$F = 40,917/0,05781 = 707,8; \quad F = 14,907/0,05781 = 257,9;$$

$$F = 0,00667/0,05781 = 0,11.$$

Итоги оформляются в виде таблицы дисперсионного анализа (табл. 6.14).

Таблица 6.14. Результаты дисперсионного анализа

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Наполнитель	122,75	3	40,917	707,8
Вулкан. система	44,72	3	14,907	257,9
Взаимодействие	0,06	9	0,00667	0,11
Ошибка	1,85	32	0,05781	
Итого	169,38	47		

Интерпретация.

Табличное значение критерия Фишера для уровня значимости 0,05 и числа степеней свободы $v_1 = 3$ и $v_2 = 32$ $F_{0,05(3,32)} = 2,9$. Поскольку рассчитанные дисперсионные отношения больше табличного, марка технического углерода и состав вулканизирующей группы влияют на прочность резин, причем первый фактор — в большей степени.

Табличное значение критерия Фишера для уровня значимости 0,05 и числа степеней свободы $v_1 = 9$ и $v_2 = 32$ $F_{0,05(9,32)} = 2,2$. Поскольку $MS_{ab}/MS_{\text{ош}}$ меньше табличного ($0,11 < 2,2$), эффект взаимодействия в выбранных условиях эксперимента следует считать незначимым.

6.3. Многофакторный дисперсионный анализ

Рассмотрим *трехфакторный дисперсионный анализ*.

Модель трехфакторного анализа имеет вид:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_k + \varepsilon_{ijk}. \quad (6.3)$$

Здесь y_{ijk} — экспериментальный результат на i -м уровне первого фактора, j -м уровне второго фактора и k -м уровне третьего фактора; μ — генеральное среднее; α_i — эффект i -го уровня первого фактора; β_j — эффект j -го уровня второго фактора; γ_k — эффект k -го уровня третьего фактора; ε_{ijk} — ошибка. Все это делается в предположении, что соответствующие эффекты взаимодействия $\alpha_i\beta_j$, $\alpha_i\gamma_k$, $\beta_j\gamma_k$ и, тем более, $\alpha_i\beta_j\gamma_k$ равны нулю.

В рамках трехфакторного дисперсионного анализа проверяется гипотеза $H_0: \alpha_i = 0$, $\beta_j = 0$ и $\gamma_k = 0$ (уровни факторов не влияют на изучаемый отклик).

Для проведения дисперсионного анализа в этом случае можно выбрать три фактора (качественные и/или количественные) и реализовать все возможные сочетания

уровней этих факторов, однако такой подход потребовал бы проведения большого количества экспериментальных определений.

Представим себе, что первый фактор варьируется на четырех уровнях (a_1, a_2, a_3 и a_4), второй фактор — на четырех уровнях (b_1, b_2, b_3 и b_4) и третий фактор — на четырех уровнях (A, B, C и D). В трехмерном пространстве получается такой дом в 64 (4^3) квартирах. Четыре этажа, на каждом этаже по 16 квартир. Возникает естественное желание их урезать, но как это сделать, чтобы ни один из факторов не пострадал? Необходимо с каждого этажа взять по четыре квартиры и разместить их на первом этаже так, чтобы они образовали латинский квадрат.

Латинским квадратом $n \times n$ называется квадратная таблица из n элементов (букв или чисел), такая, что каждый из них встречается в точности один раз в каждой строке и в каждом столбце.

Из трех элементов образуется латинский квадрат 3×3 ; из четырех элементов — латинский квадрат 4×4 .

$A B C$	$A B C D$
$B C A$	$B D A C$
$C A B$	$C A D B$
	$D C B A$

Простейший способ построения латинских квадратов состоит в одношаговой циклической перестановке букв, при которой первая буква передвигается последовательно на крайнее положение справа, при одновременном передвижении всех других букв — на одну позицию налево. Разумеется, если строки (и/или столбцы) переставлять местами, то квадрат не перестает быть латинским. Просто изображенные квадраты правильные в том смысле, что в первой строке и в первом столбце буквы расположены в порядке алфавита. Их называют стандартными или каноническими.

Например, имеем вначале последовательность $ABCD$. Одношаговая циклическая перестановка дает $BCDA$, вторая перестановка — $CDAB$ и третья — $DABC$. Если сделать еще одну перестановку, то получим $ABCD$, т. е. первичное положение букв.

В случае эксперимента без повторных опытов вычисления включают следующие этапы [1, с. 253–257; 2, с. 169–177; 3, с. 99–108; 6, с. 28–34; 12, с. 595–597; 14, с. 93; 17, с. 225–226; 18, с. 207–212; 19, с. 256–270; 22, с. 44–52; 24, с. 32–43, 50–55; 25, с. 174–190; 26, с. 97–100; 29, с. 47–52; 30, с. 96–104; 31, с. 281–286; 32, с. 62–68; 33, с. 24–29; 34, с. 15–20; 35, с. 9–28; 36, с. 37–52].

1. Подсчет итогов (сумм) и средних значений по строкам A_i , столбцам B_j и латинским буквам C_k .

2. Вычисление суммы квадратов результатов всех наблюдений: $SS_1 = \sum \sum (Y_{ijk})^2$.

3. Сумма квадратов итогов по строкам, деленная на число элементов в каждой строке: $SS_2 = \sum A_i^2 / n$.

4. Сумма квадратов итогов по столбцам, деленная на число элементов в каждом столбце: $SS_3 = \sum B_j^2 / n$.

5. Сумма квадратов итогов по латинским буквам, деленная на число элементов, соответствующих каждой букве: $SS_4 = \sum C_k^2 / n$.

6. Корректирующий член, равный квадрату общего итога, деленному на общее число ячеек квадрата (на число опытов): $SS_5 = \sum \sum Y_{ijk} / (n^2)$.

7. Сумма квадратов для строки: $SS_a = SS_2 - SS_5$.

8. Сумма квадратов для столбца: $SS_b = SS_3 - SS_5$.

9. Сумма квадратов для латинской буквы: $SS_c = SS_4 - SS_5$.

10. Общая сумма квадратов: $SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_5$.

11. Остаточная сумма квадратов: $SS_{\text{ост}} = SS_{\text{общ}} - (SS_a + SS_b + SS_c)$.

Остаточная сумма квадратов складывается из суммы квадратов, обусловленной ошибкой опыта, и суммы квадратов, связанной со взаимодействиями между факторами, если таковые имеются.

12. Результаты расчета заносятся в таблицу дисперсионного анализа (табл. 6.15).

Таблица 6.15. Дисперсионный анализ латинского квадрата

Источник изменчивости	Сумма квадратов SS	Число степеней свободы ν	Средний квадрат MS	Критерий Фишера F
Строки	$SS_a = SS_2 - SS_5$	$\nu_a = n - 1$	$MS_a = SS_a / \nu_a$	$MS_a / MS_{\text{ост}}$
Столбцы	$SS_b = SS_3 - SS_5$	$\nu_b = n - 1$	$MS_b = SS_b / \nu_b$	$MS_b / MS_{\text{ост}}$
Латинские буквы	$SS_c = SS_4 - SS_5$	$\nu_c = n - 1$	$MS_c = SS_c / \nu_c$	$MS_c / MS_{\text{ост}}$
Остаток (ошибка)	$SS_{\text{ост}} = SS_{\text{общ}} - (SS_a + SS_b + SS_c)$	$\nu_{\text{ост}} = (n - 1) \times (n - 2)$	$MS_{\text{ост}} = SS_{\text{ост}} / \nu_{\text{ост}}$	
Итого	$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_5$	$\nu_{\text{общ}} = n^2 - 1$		

Значимость линейных эффектов проверяется по критерию Фишера как обычно. Если результаты дисперсионного анализа указывают на значимость линейных эффектов, т. е. значимость различия в средних, то возникает вопрос: какие именно средние значения различны? В этом случае следует провести проверку различия средних по ранговому критерию Дункана. Если же проверка по F -критерию не дала положительного результата, то на этом статистический анализ заканчивается.

Пример. Исследовано влияние рецептурных факторов на условную прочность при растяжении термоэластопластов (ТЭП) с целью использования их в технологии литья под давлением.

Задача состояла в получении композиций, обеспечивающих прочность не ниже 11 МПа [35, с. 37–41].

Факторы и уровни их варьирования:

x_1 — тип наполнителя. Уровни фактора x_1 : a_1 — мел, a_2 — каолин, a_3 — белая сажа, a_4 — без наполнителя.

x_2 — тип мягчителя. Уровни фактора x_2 : b_1 — вазелиновое масло, b_2 — нейтральное масло, b_3 — экстракт IV, b_4 — без мягчителя.

x_3 — партия полимера. Уровни фактора x_3 : A, B, C и D .

Модель трехфакторного анализа имеет вид: $y_{ijk} = \mu + \alpha_j + \beta_j + \gamma_k + \varepsilon_{ijk}$ в предположении, что соответствующие эффекты взаимодействия $\alpha_i\beta_j, \alpha_i\gamma_k, \beta_j\gamma_k$ и $\alpha_i\beta_j\gamma_k$ равны нулю.

Сокращение объема эксперимента обеспечивается применением латинского квадрата.

План (латинский квадрат) и результаты эксперимента показаны в табл. 6.16.

Таблица 6.16. План и результаты эксперимента при изучении свойств ТЭП

$x_2 \setminus x_1$	a_1	a_2	a_3	a_4	A_i	$A_{\text{ср}}$	A_i^2
b_1	8,1 ^A	5,5 ^B	5,1 ^C	21,1 ^D	39,8	9,95	1584,04
b_2	6,1 ^B	5,5 ^C	6,2 ^D	31,5 ^A	49,3	12,33	2430,49
b_3	5,5 ^C	5,6 ^D	11,8 ^A	28,3 ^B	51,2	12,80	2621,44
b_4	20,4 ^D	22,1 ^A	24,4 ^B	29,3 ^C	96,2	24,05	9254,44
B_j	40,1	38,7	47,5	110,2	$G = 236,5$		
$B_{\text{ср}}$	10,03	9,68	11,88	27,55			
B_j^2	1608,01	1497,69	2256,25	1214,04			

	A	B	C	D
C_k	73,5	64,3	45,4	53,3
$C_{\text{ср}}$	18,38	16,08	11,35	13,33
C_k^2	5402,25	413449	206116	284089

Проверка гипотез о влиянии факторов включает следующие этапы.

Подсчет итогов (сумм) и средних значений по строкам, столбцам и латинским буквам

Теория.

A_i — суммы по строке, B_j — суммы по столбцу, C_k — суммы по латинской букве; $i, j, k = 1, 2, \dots, n$; $A_{\text{ср}} = A_i/n$; $B_{\text{ср}} = B_j/n$; $C_{\text{ср}} = C_k/n$.

Решение.

$A_1 = 8,1 + 5,5 + 5,1 + 21,1 = 39,8$, $A_{1\text{ср}} = 39,8/4 = 9,95$ — 1-я строка;

$B_2 = 5,5 + 5,5 + 5,6 + 22,1 = 38,7$, $B_{2\text{ср}} = 38,7/4 = 9,68$ — 2-й столбец;

$C_4 = 21,1 + 6,2 + 5,6 + 20,4 = 53,3$, $C_{4\text{ср}} = 53,3/4 = 13,33$ — четвертая буква D и т. д.

Вычисление суммы квадратов результатов всех наблюдений

Теория.

$$SS_1 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_{ijk}^2.$$

Решение.

$$SS_1 = 8,1^2 + 5,5^2 + 5,1^2 + 21,1^2 + \dots + 24,4^2 + 29,3^2 = 5025,39.$$

Сумма квадратов итогов по строкам, деленная на число элементов в каждой строке

Теория.

$$SS_2 = \sum_{i=1}^n A_i^2 / n.$$

Решение.

$$SS_2 = (39,8^2 + 49,3^2 + 51,2^2 + 96,2^2) / 4 = 3972,60.$$

Сумма квадратов итогов по столбцам, деленная на число элементов в каждом столбце

Теория.

$$SS_3 = \sum_{j=1}^n B_j^2 / n.$$

Решение.

$$SS_3 = (40,1^2 + 38,7^2 + 47,5^2 + 110,2^2) / 4 = 4376,50.$$

Сумма квадратов итогов по латинским буквам, деленная на число элементов, соответствующих каждой букве

Теория.

$$SS_4 = \sum_{k=1}^n C_k^2 / n.$$

Решение.

$$SS_4 = (73,5^2 + 64,3^2 + 45,4^2 + 53,3^2) / 4 = 3609,70.$$

Корректирующий член, равный квадрату общего итога, деленному на общее число ячеек квадрата (на число опытов)

Теория.

$$SS_5 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_{ijk} / n^2 = G^2 / N.$$

Решение.

$$SS_5 = 236,5^2 / 16 = 3495,77.$$

Сумма квадратов для строки

Теория.

$$SS_a = SS_2 - SS_5.$$

Решение.

$$SS_a = 3972,60 - 3495,77 = 476,83.$$

Сумма квадратов для столбца

Теория.

$$SS_b = SS_3 - SS_5.$$

Решение.

$$SS_b = 4376,50 - 3495,77 = 880,73.$$

Сумма квадратов для латинской буквы

Теория.

$$SS_c = SS_4 - SS_5.$$

Решение.

$$SS_c = 3609,70 - 3495,77 = 113,93.$$

Общая сумма квадратов

Теория.

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_5.$$

Решение.

$$SS_{\text{общ}} = 5025,39 - 3495,77 = 1529,62.$$

Остаточная сумма квадратов

Теория.

$$SS_{\text{ост}} = SS_{\text{общ}} - (SS_a + SS_b + SS_c).$$

Решение.

$$SS_{\text{ост}} = 1529,62 - (476,83 + 880,73 + 113,93) = 58,13.$$

Результаты расчета заносятся в таблицу дисперсионного анализа (табл. 6.17).

Таблица 6.17. Дисперсионный анализ латинского квадрата 4×4

Источник изменчивости	Сумма квадратов SS	Число степеней свободы n	Средний квадрат MS	Критерий Фишера F
Строки, x_2	476,83	3	158,94	16,40
Столбцы, x_1	880,73	3	293,58	30,30
Лат. буквы, x_3	113,93	3	37,98	3,92
Остаток (ошибка)	58,13	6	9,69	
Итого	1529,62	15		

Интерпретация.

Проверка гипотез осуществляется по критерию Фишера: $F = MS_{\text{исп}} / MS_{\text{ост}}$. Гипотеза принимается, если рассчитанное значение критерия меньше табличного при числе степеней свободы $v_1 = v_{\text{исп}}$ и $v_2 = v_{\text{ост}}$. Табличное значение критерия $F_{(3;6;0,05)} = 4,76$. Оно меньше 30,30 и 16,40, но больше 3,92. Партия полимера не влияет на прочность ТЭП.

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```

echo on
% ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ
% ЛАТИНСКИЙ КВАДРАТ, модель  $Y=m+a+b+c+e$ ;
% гипотеза  $H_0: a=0, b=0, c=0$ 
% БЕЗ ПОВТОРНЫХ ОПЫТОВ
%
%      X2\X1 |   a1   a2   a3   a4
%      b1    |   A    B    C    D
%      b2    |   B    C    D    A
%      b3    |   C    D    A    B
%      b4    |   D    A    B    C
%
% ВАМ НЕОБХОДИМО ВВЕСТИ МАТРИЦУ РЕЗУЛЬТАТОВ ПО ТАКОЙ СХЕМЕ:
%      В квадратных скобках записать через пробелы наблюдения для
%      1-го уровня 2-го фактора (т. е. 1-ю строку), затем вставить
%      «;», потом (опять через пробелы) - 2-ю строку и т.д. и не забыть
%      в конце поставить скобку ]
echo off
y=input('ВВОДИТЕ');
B=sum(y);A=sum(y');
w=y';w1=w(:,1);w2=w(:,2);w3=w(:,3);w4=w(:,4);
W1=w1;W2=[w2(4);w2(1:3)];W3=[w3(3:4);w3(1:2)];
W4=[w4(2:4);w4(1)]; - ФОРМИРОВАНИЕ СТОЛБЦОВ ДЛЯ РАСЧЕТОВ ПО ЛА-
ТИНСКИМ БУКВАМ;
W=[W1 W2 W3 W4]; C=sum(W');
A1=mean(A);B1=mean(B);C1=mean(C); - СРЕДНИЕ;
A2=A.^2;B2=B.^2;C2=C.^2; - КВАДРАТЫ;
G=sum(A); - СУММА ВСЕХ ЗНАЧЕНИЙ;
SS1=sum(sum(y.^2));SS2=(sum(A.^2))/4; - СУММЫ
SS3=(sum(B.^2))/4;SS4=(sum(C.^2))/4; КВАДРАТОВ;
SS5=G^2/16; - КОРРЕКТИРУЮЩИЙ ЧЛЕН;
SSa=SS2-SS5;SSb=SS3-SS5;SSc=SS4-SS5; - СУММЫ КВАДРАТОВ ФАКТОРОВ;
SSo=SS1-SS5; - ОБЩАЯ СУММА КВАДРАТОВ;
SSr=SSo-(SSa+SSb+SSc); - СУММА КВАДРАТОВ ОСТАТКА;
echo on
% ВВЕДЕННЫЕ ДАННЫЕ
echo off
ppp=y;disp(ppp)
echo on
% СУММЫ КВАДРАТОВ: для 1-го, 2-го и 3-го факторов, ошибки и общая
echo off
SS=[SSb SSa SSc SSr SSo];disp(SS)
echo on
% ЧИСЛО СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ: испытаний, ошибки и общее

```

```

echo off
f=[3 3 3 6 15];disp(f)
echo on
% ЗНАЧЕНИЯ СРЕДНИХ КВАДРАТОВ: для 1-го, 2-го и 3-го факторов и ошибки
echo off
MS=[SSb/3 SSa/3 SSc/3 SSr/6];disp(MS)
pause
echo on
% КРИТЕРИИ ФИШЕРА: РАССЧИТАННЫЕ (для трех факторов) И ТАБЛИЧНЫЙ
echo off
F=[(SSb/3)/(SSr/6) (SSa/3)/(SSr/6) (SSc/3)/(SSr/6)]; - расчет
критерия
Ft=[161 200 216...]; - КРИТЕРИЙ ФИШЕРА
Ft=[Ft;10.13 9.55...]; (ФРАГМЕНТ ТАБЛИЦЫ);
Ft1=Ft(6,3); - ВЫБОР КРИТЕРИЯ ИЗ ТАБЛИЦЫ;
ff=[F Ft1];disp(ff)
echo on
% ЕСЛИ РАСЧЕТНЫЙ КРИТЕРИЙ ФИШЕРА < ТАБЛИЧНОГО, СЛЕДУЕТ ПОЛА-
ГАТЬ, ЧТО СООТВЕТСТВУЮЩИЙ ФАКТОР ВЛИЯЕТ НА ИЗУЧАЕМОЕ СВОЙСТВО
echo off

```

Вернемся теперь к задаче, посвященной износу протектора [26, с. 97–100]. Опыт показывает, что износ шин на задних колесах отличается от износа шин передних колес, и даже для разных сторон одного и того же автомобиля величина износа может быть различна. В рассмотренном выше рандомизированном блочном плане распределение четырех шин между четырьмя колесами каждого автомобиля проводилось случайно без учета положения колеса. Влияние положения колеса на износ шин можно было бы исключить, если через каждые 10 000 км менять колеса местами, т. е. сделать так, чтобы шина каждой марки была на каждом колесе по 10 000 км. Однако если этот вариант неосуществим, положение колеса может наложить еще одно ограничение на рандомизацию — при этом шины каждой марки придется испытывать не только один раз на каждом автомобиле, но также только в одном из четырех возможных положений: на левом переднем колесе, на левом заднем, правом переднем и правом заднем.

Положение колеса	Автомобиль			
	I	II	III	IV
1	C	D	A	B
2	B	C	D	A
3	A	B	C	D
4	D	A	B	C

План, в котором каждый вариант испытаний появляется один и только один раз в строке (положение) и один и только один раз в каждом столбце (автомобиль), называется латинским квадратом. Пример такого квадрата 4×4 может быть таким, как он представлен здесь.

Если данные табл. 6.7 расположить в виде латинского квадрата, то получится табл. 6.18, где буквы по-прежнему представляют марки шин.

Таблица 6.18. Латинский квадрат для наблюдений по износу шин

Положение колеса	Автомобиль				$T_{..k}$
	I	II	III	IV	
1	$C = -1$	$D = -2$	$A = 0$	$B = -5$	-8
2	$B = 1$	$C = -1$	$D = -2$	$A = 0$	-2
3	$A = 4$	$B = 1$	$C = -3$	$D = -4$	-2
4	$D = 0$	$A = 1$	$B = 0$	$C = -4$	-3
$T_{i..}$	4	-1	-5	-13	$T_{...} = -15$

Суммы для разных марок равны

	A	B	C	D
$T_{..j} =$	5	-3	-9	-8

Сумма квадратов для положения колеса:

$$SS_{\text{пол}} = ((-8)^2 + (-2)^2 + (-2)^2 + (-3)^2)/4 - (-15)^2/16 = 6,2.$$

Сумма квадратов для ошибки:

$$SS_{\text{ош}} = SS_{\text{общ}} - SS_{\text{исп}} - SS_{\text{авт}} - SS_{\text{пол}} = 80,9 - 30,6 - 38,6 - 6,2 = 5,5.$$

Результаты дисперсионного анализа для этих данных даны в табл. 6.19.

Таблица 6.19. Результаты дисперсионного анализа латинского квадрата

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Марки шин	30,6	3	10,2	11,3
Автомобили	38,6	3	12,9	14,3
Положение	6,2	3	2,1	2,3
Остаток	5,5	6	0,9	
Итого	80,9	15		

Табличное значение критерия Фишера при числе степеней свободы $\nu_1 = 3$, $\nu_2 = 6$ и уровне значимости $\alpha = 0,05$ $F = 4,76$. Поскольку $2,3 < 4,76$, можно утверждать, что положение колеса не влияет на износ, «тонет» в ошибке это влияние.

Рассмотрим $n \times n$ латинский квадрат, в каждой ячейке которого имеется m наблюдений [35, с. 28–29, 41–46]. Допустим, что двухфакторные и трехфакторные взаимодействия несущественны по сравнению с главными эффектами. Тогда модель эксперимента можно представить в виде:

$$y_{ijkm} = \mu + \alpha_j + \beta_j + \gamma_k + res + \varepsilon_{m(ijk)}, \quad (6.4)$$

где все обозначения (кроме res) те же, что и в модели схемы 6,3, res (от английского *residual* — остаток) — это член, включающий все источники дисперсии, которые не предсказаны линейной моделью.

Исходя из приведенной выше модели, при статистическом анализе оценивается влияние следующих источников дисперсии: строки (число степеней свободы $n - 1$), столбцы ($n - 1$), латинские буквы ($n - 1$), остаток $((n - 1)(n - 2))$, внутри ячейки $(n^2(m - 1))$. Число степеней свободы для итога $n^2m - 1$.

Если в действительности взаимодействия незначимы, то остаточная дисперсия существенно не отличается от дисперсии, обусловленной экспериментальной ошибкой. Это проверяется по F -критерию: $F = MS_{ост}/MS_{ош}$. $MS_{ост}$ — средний квадрат для остатка, $MS_{ош}$ — средний квадрат для ошибки.

По величине F -критерия можно судить, соответствуют ли экспериментальные данные выбранной модели. Если линейная модель пригодна, значимость главных эффектов легко может быть проверена. Если же имеют место взаимодействия, проверка значимости главных эффектов становится невозможной. Однако во многих случаях можно высказать предположение, что значимы не все взаимодействия, а только некоторые из них.

Пример. Изучалась эффективность применения трех видов антипиренов (фактор B) в трех категориях изделий (фактор C). Изделия использовались в трех автохозяйствах (фактор A). Из каждого автохозяйства было взято для анализа по 12 изделий: по четыре для каждой категории C_1 , C_2 и C_3 . Общее число изделий составляло 36, число изделий каждой категории 12, число повторных наблюдений горючести (в условных единицах) $m = 4$. При планировании эксперимента использован 3×3 латинский квадрат, представленный в табл. 6.20; справа даны значения отклика.

Таблица 6.20. Латинский квадрат с повторными опытами

План					Экспериментальные данные		
	b_1	b_2	b_3		b_1	b_2	b_3
a_1	C_2	C_3	C_1	a_1	2, 4, 3, 1	8, 9, 10, 10	2, 2, 4, 5
a_2	C_3	C_1	C_2	a_2	5, 7, 10, 6	0, 2, 2, 4	0, 0, 1, 3
a_3	C_1	C_2	C_3	a_3	0, 1, 1, 3	0, 1, 1, 4	2, 1, 1, 4

Строки квадрата b_1 , b_2 и b_3 указывают автохозяйства, столбцы a_1 , a_2 и a_3 — виды антипиренов, элементы латинского квадрата C_1 , C_2 и C_3 — категории изделий. Например, опыт №1 обозначает, что четыре изделия категории C_2 из автохозяйства a_1 содержали антипирен b_1 . Эффективность действия антипиренов условно оценивалась по десятибалльной системе.

Результаты, полученные при использовании пакета *MATLAB*.

% Суммы квадратов для следующих источников изменчивости: 1-й фактор (строка), 2-й (столбец) и 3-й (латинская буква) остаток (нелинейность), ошибка и общая
70,0556 29,5556 140,3889 23,3889 62,2500 325,6389

% Число степеней свободы: испытаний, остатка, ошибки и общее

2 2 2 2 27 35

% Значения средних квадратов: для факторов (трех), остатка и ошибки

35,0278 14,7778 70,1944 11,6944 2,3056

% Критерии Фишера: рассчитанные (для трех факторов и остатка) и табличный

15,1928 6,4096 30,4458 5,0723 3,3500

% Если расчетный критерий Фишера больше табличного, следует полагать,

% что соответствующий фактор влияет на изучаемое свойство

Табличное значение критерия $F_{(2;27;0.05)} = 3,35$. Оно меньше всех рассчитанных значений критерия, в том числе и тех, которые характеризуют взаимодействие между факторами.

Можно допустить, что фактор A (автохозяйство) не дает взаимодействий с другими факторами. Тогда взаимодействия AC и AB незначимы. Эффект B смешан с эффектом AC и эффект C — с AB . Следовательно, два главных эффекта (B и C) оцениваются самостоятельно, так как смешанные с ними эффекты взаимодействия можно считать незначимыми на основе логических заключений. Значимым остается эффект взаимодействия BC — между видом антипирена и категорией изделия. С ним смешан эффект фактора A .

Если этот фактор является случайным, то у экспериментатора к нему нет особого интереса.

Листинг программы для дисперсионного анализа латинского квадрата 3×3 с повторными наблюдениями.

```
echo on\
%                               ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ
%   ЛАТИНСКИЙ КВАДРАТ, модель Y=m+a+b+c+e; Но: a=0, b=0, c=0
%                               С ПОВТОРНЫМИ ОПЫТАМИ
echo off
pause
clc
echo on
%   ВАМ НЕОБХОДИМО ВВЕСТИ МАТРИЦУ РЕЗУЛЬТАТОВ ПО ТАКОЙ СХЕМЕ:
%   -----
```

```

%           X2\X1 |    a1    a3    a2           В каждой из 9-ти
%           -----|----- ячейек этой таблицы
%           b2     |    C     B     A           сделано несколько
%           b1     |    B     A     C           повторных опытов.
%           b3     |    A     C     B
%           -----|-----
%           в квадратных скобках через «;» необходимо записать повторные
%           наблюдения для 1-ой ячейки, нажать «enter», ввести данные для
%           2-ой
%           ячейки в той же строке, потом для 3-ей, далее перейти ко 2-ой
%           строке
%                                           и т.д., вплоть до 9-ой ячейки
echo off
pause
clc
y1=input('ВВОДИТЕ ПОВТОРНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ ДЛЯ ПЕРВОЙ ЯЧЕЙКИ');
clc
y2=input('ВВОДИТЕ ПОВТОРНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ ДЛЯ ВТОРОЙ ЯЧЕЙКИ');
clc
y3=input('ВВОДИТЕ ПОВТОРНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ ДЛЯ ТРЕТЬЕЙ ЯЧЕЙКИ');
clc
y4=input('ВВОДИТЕ ПОВТОРНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ ДЛЯ ЧЕТВЕРТОЙ ЯЧЕЙКИ');
clc
y5=input('ВВОДИТЕ ПОВТОРНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ ДЛЯ ПЯТОЙ ЯЧЕЙКИ');
clc
y6=input('ВВОДИТЕ ПОВТОРНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ ДЛЯ ШЕСТОЙ ЯЧЕЙКИ');
clc
y7=input('ВВОДИТЕ ПОВТОРНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ ДЛЯ СЕДЬМОЙ ЯЧЕЙКИ');
clc
y8=input('ВВОДИТЕ ПОВТОРНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ ДЛЯ ВОСЬМОЙ ЯЧЕЙКИ');
clc
y9=input('ВВОДИТЕ ПОВТОРНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ ДЛЯ ДЕВЯТОЙ ЯЧЕЙКИ');
clc
Y1=sum(y1);Y2=sum(y2);Y3=sum(y3);Y4=sum(y4);Y5=sum(y5);
Y6=sum(y6);Y7=sum(y7);Y8=sum(y8);Y9=sum(y9);
Y=[Y1 Y2 Y3;Y4 Y5 Y6;Y7 Y8 Y9]; СУММЫ ПО ЯЧЕЙКАМ
B=sum(Y);A=sum(Y'); m=max(size(y1)); СУММЫ ПО СТРОКАМ И СТОЛБЦАМ
w=Y';w1=w(:,1);w2=w(:,2);w3=w(:,3);
W1=[w1(3);w1(2);w1(1)];W2=[w2(2);w2(1);w2(3)];W3=[w3(1);w3(3);
w3(2)];
W=[W1 W2 W3]; C=sum(W');
%A1=mean(A);B1=mean(B);C1=mean(C);A2=A.^2;B2=B.^2;C2=C.^2;
G=sum(A); ВЫЧИСЛЕНИЕ СРЕДНИХ И КОРРЕКТИРУЮЩЕГО ЧЛЕНА
SS1=G^2/m/9;

```

```

SS2=sum(sum(y1.^2)+sum(y2.^2)+sum(y3.^2)+sum(y4.^2)+sum(y5.^2)+
sum(y6.^2)+sum(y7.^2)+sum(y8.^2)+sum(y9.^2));
SS3=(sum(A.^2))/m/3; ВЫЧИСЛЕНИЕ СУММ КВАДРАТОВ
SS4=(sum(B.^2))/m/3;
SS5=(sum(C.^2))/m/3;
SS6=(sum(sum(Y.^2)))/m;
SSa=SS3-SS1;SSb=SS4-SS1;SSc=SS5-SS1;SSi=SS6-SS1;SSj=SS2-SS6;
%SSr=SSi-SSa-SSb-SSc;
SSr=SS6-SS3-SS4-SS5+2*SS1; SSo=SSa+SSb+SSc+SSr+SSj;
echo on
%
%           ЛАТИНСКИЙ КВАДРАТ
%
%           -----
%           X2\X1 |      b1      b3      b2
%           -----|-----
%           a2      |      C      B      A
%           a1      |      B      A      C
%           a3      |      A      C      B
%           -----
%
echo off
pause
echo on
% ВВЕДЕННЫЕ ДАННЫЕ
echo off
ppp=[y1 y2 y3 y4 y5 y6 y7 y8 y9];disp(ppp)
pause
echo on
%           СУММЫ КВАДРАТОВ ДЛЯ СЛЕДУЮЩИХ ИСТОЧНИКОВ ДИСПЕРСИИ:
%           1-ый фактор (строка), 2-ой (столбец) и 3-ий (лат.буква)
%           остаток (нелинейность), ошибка и общая
echo off
SS=[SSa SSb SSc SSr SSj SSo];disp(SS)
pause
echo on
%           ЧИСЛО СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ: испытаний, остатка, ошибки и общее
echo off
f=[2 2 2 2 9*(m-1) 9*m-1];disp(f)
pause
echo on
% ЗНАЧЕНИЯ СРЕДНИХ КВАДРАТОВ: для факторов (трех), остатка и ошибки
echo off
MS=[SSa/2 SSb/2 SSc/2 SSr/2 SSj/(9*(m-1))];disp(MS)
pause
echo on

```

```
% КРИТЕРИИ ФИШЕРА: РАССЧИТАННЫЕ (для трех факторов и остатка)
И ТАБЛИЧНЫЙ
echo off
F=[(SSa/2)/(SSj/(9*(m-1))) (SSb/2)/(SSj/(9*(m-1))) (SSc/2)/(SSj/(9*(m-1))) (SSr/2)/(SSj/(9*(m-1)))];
Ft=[161 200 216 225 230...] ФРАГМЕНТ ТАБЛИЦЫ F-КРИТЕРИЯ
Ft1=Ft(9*(m-1),2);ff=[F Ft1];disp(ff) ВЫБОР КРИТЕРИЯ ИЗ ТАБЛИЦЫ
echo on
%     ЕСЛИ РАСЧЕТНЫЙ КРИТЕРИЙ ФИШЕРА < ТАБЛИЧНОГО, СЛЕДУЕТ ПОЛА-
ГАТЬ,
%           ЧТО СООТВЕТСТВУЮЩИЙ ФАКТОР ВЛИЯЕТ НА ИЗУЧАЕМОЕ СВОЙСТВО
echo off
```

Обратимся теперь к *гипер-греко-латинским квадратам*.

Два латинских квадрата называются ортогональными, если при наложении одного квадрата на другой каждая пара одинаковых букв (чисел) встречается один и только один раз. Комбинация двух ортогональных квадратов носит название латинского квадрата второго порядка. Если элементы первого квадрата обозначить латинскими буквами, а второго — греческими, то такой квадрат называется греко-латинским. При этом каждая греческая буква встречается один раз в строке, один раз в столбце и один раз в сочетании с каждой латинской буквой.

Продemonстрируем построение греко-латинского квадрата на примере 3×3 квадрата:

	I			II		Совместно			
A	B	C		α	β	γ	$A\alpha$	$B\beta$	$C\gamma$
B	C	A		γ	α	β	$B\gamma$	$C\alpha$	$A\beta$
C	A	B		β	γ	α	$C\beta$	$A\gamma$	$B\alpha$

При планировании эксперимента строки и столбцы квадрата употребляются для обозначения уровней двух факторов, а два вида источников неоднородностей (качественных факторов) образуют греко-латинский квадрат. Так, например, в 5×5 греко-латинском квадрате два фактора (A и B) варьируются на пяти уровнях каждый, пять источников неоднородности первого вида (фактор C) образуют 5×5 латинский квадрат и пять источников неоднородности второго вида (фактор D — греческая буква) образуют 5×5 греческий квадрат. Расположение элементов квадратов оптимально в том смысле, что каждая латинская буква встречается один и только один раз в каждом столбце и в каждой строке. Каждая греческая буква появляется один и только один раз в каждой строке и в каждом столбце, и каждая латинская буква встречается один и только один раз с каждой греческой буквой.

Три ортогональных квадрата, наложенные друг на друга, образуют гипер-греко-латинский квадрат и представляют собой разновидность пятифакторного планирования (n ортогональных квадратов образуют латинский квадрат n -го порядка).

Статистический анализ проводится аналогично схеме для латинских квадратов [3, с. 108–114; 6, с. 28–34; 14, с. 93–96; 22, с. 52–62; 26, с. 100–101; 31, с. 287–297; 33, с. 29–36, 39–41; 34, с. 24–29; 35, с. 47–69; 37, с. 63–76]. Дополнительно рассчитываются итоги по греческим буквам (в случае греко-латинского квадрата) и сумма квадратов итогов по греческим буквам.

При планировании по греко-латинскому квадрату изучается влияние четырех источников дисперсии: фактора A — строки, фактора B — столбцы, фактора C — латинской буквы, фактора D — греческой буквы.

В случае эксперимента без повторных опытов результаты эксперимента представляются в виде линейной модели:

$$y_{ijkl} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_k + \delta_l + \varepsilon_{ijkl} \quad (6.5)$$

Здесь y_{ijkl} — экспериментальный результат на i -м уровне первого фактора, j -м уровне второго фактора, k -м уровне третьего фактора и l -м уровне четвертого фактора; μ — генеральное среднее; α_i — эффект i -го уровня первого фактора; β_j — эффект j -го уровня второго фактора; γ_k — эффект k -го уровня третьего фактора; δ_l — эффект l -го уровня четвертого фактора; ε_{ijkl} — ошибка. Все это делается в предположении, что соответствующие эффекты взаимодействия равны нулю.

В рамках четырехфакторного дисперсионного анализа проверяется гипотеза H_0 : $\alpha_i = 0$, $\beta_j = 0$, $\gamma_k = 0$ и $\delta_l = 0$ (уровни факторов не влияют на изучаемый отклик).

Исходя из приведенной выше модели, при статистическом анализе оценивается влияние следующих источников дисперсии: строки (число степеней свободы $n - 1$), столбцы ($n - 1$), латинские буквы ($n - 1$), греческие буквы ($n - 1$), остаток ($(n - 1)(n - 3)$). Число степеней свободы для итога $n^2 - 1$.

Такая схема статистического анализа пригодна в том и только в том случае, если у экспериментатора имеются веские основания полагать, что все взаимодействия незначимы. В противном случае целесообразнее обратиться к схеме с повторными опытами, так как там имеется возможность проверить гипотезу о незначимости эффектов взаимодействий. К этой схеме приходится обращаться, если $n = 3$, потому что число степеней свободы для остатка равно 0.

Пусть в каждой ячейке квадрата имеется m наблюдений. Результаты эксперимента представляются в виде следующей модели:

$$y_{ijklm} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_k + \delta_l + res + \varepsilon_{m(ijkl)}. \quad (6.6)$$

Исходя из этой модели, при статистическом анализе оценивается влияние следующих источников дисперсии: строки (число степеней свободы $n - 1$), столбцы ($n - 1$), латинские буквы ($n - 1$), греческие буквы ($n - 1$), остаток ($(n - 1)(n - 3)$), ошибка внутри ячейки ($n^2(m - 1)$). Число степеней свободы для итога $mn^2 - 1$.

Для 3×3 греко-латинского квадрата число степеней свободы для остатка равно 0. Для всех греко-латинских квадратов с $n > 3$ ($n \neq 6$) число степеней свободы для остатка больше нуля и равно $(n-1)(n-3)$.

Проверка гипотезы о незначимости эффектов взаимодействий осуществляется при помощи F -критерия.

При планировании по [гипер]-греко-латинскому квадрату изучается влияние пяти источников дисперсии. Пятым источником является фактор E , уровни которого обычно обозначаются числами.

При статистическом анализе [гипер]-греко-латинского квадрата (без повторных опытов) оценивается влияние следующих источников дисперсии: строки (число степеней свободы $n-1$), столбцы ($n-1$), латинские буквы ($n-1$), греческие буквы ($n-1$), числа ($n-1$), остаток $((n-1)(n-4))$. Число степеней свободы для итога n^2-1 .

Модель имеет вид:

$$y_{ijklp} = \mu + \alpha_j + \beta_j + \gamma_k + \delta_l + \zeta_p + \varepsilon_{ijklp}. \quad (6.7)$$

При статистическом анализе [гипер]-греко-латинского квадрата (при наличии повторных опытов) оценивается влияние следующих источников дисперсии: строки (число степеней свободы $n-1$), столбцы ($n-1$), латинские буквы ($n-1$), греческие буквы ($n-1$), числа ($n-1$), остаток $((n-1)(n-4))$, ошибка внутри ячеек $(n^2(m-1))$. Число степеней свободы для итога mn^2-1 .

Модель имеет вид:

$$y_{ijklpm} = \mu + \alpha_j + \beta_j + \gamma_k + \delta_l + \zeta_p + res + \varepsilon_{m(ijklp)}. \quad (6.8)$$

Может рассматриваться влияние и большего количества факторов: ведь есть еще римские цифры, строчные латинские и прописные греческие... Поясним это на примерах.

Пример. Исследовано влияние рецептурных факторов на относительное удлинение при разрыве композиций на основе поливинилхлорида (ПВХ).

Факторы и уровни их варьирования:

x_1 — партия полимера. Уровни фактора x_1 : a_1, a_2, a_3, a_4 .

x_2 — содержание пластификатора. Уровни фактора x_2 , масс.ч.: $b_1 - 20, b_2 - 30, b_3 - 40, b_4 - 50$.

x_3 — тип стабилизатора. Уровни фактора x_3 : A — эпоксидированное соевое масло, B — стеарат кальция, C — стеарат бария и D — стеарат кадмия.

x_4 — тип динамометра. Уровни фактора x_4 : α, β, γ и δ .

План и результаты эксперимента показаны в табл. 6.21.

Подсчитываются итоги и средние значения по строкам, столбцам, латинским и греческим буквам.

Таблица 6.21. План и результаты эксперимента при изучении свойств ПВХ

$x_2 \setminus x_1$	a_1	a_2	a_3	a_4	A_i	$A_{\text{ср}}$	A_i^2
b_1	$A\gamma$ (8,2)	$B\delta$ (10,2)	$C\alpha$ (8,3)	$D\beta$ (5,9)	32,6	8,2	1063
b_2	$C\delta$ (15,1)	$D\gamma$ (25,8)	$A\beta$ (22,3)	$B\alpha$ (21,2)	84,4	21,1	7123
b_3	$B\beta$ (48,9)	$A\alpha$ (25,7)	$D\delta$ (49,6)	$C\gamma$ (35,2)	160,4	39,9	25408
b_4	$D\alpha$ (74,1)	$C\beta$ (69,5)	$B\gamma$ (80,9)	$A\delta$ (57,1)	281,6	70,4	79299
B_j	146,3	131,2	161,1	120,4	$G = 558,0$		
$B_{\text{ср}}$	36,6	32,8	40,3	29,9			
B_j^2	21404	17213	25953	14256			

	A	B	C	D		α	β	γ	δ
C_k	113,3	161,2	128,1	155,4	D_1	129,3	146,6	150,1	132,0
$C_{\text{ср}}$	28,3	40,3	32,0	38,9	$D_{\text{ср}}$	32,3	36,7	37,8	33,0
C_k^2	12837	25985	16410	24149	D_l^2	16718	21492	22530	17424

Проверка гипотез о влиянии факторов включает следующие этапы.

Вычисление суммы квадратов результатов всех наблюдений

Теория.

$$SS_1 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (y_{ijkl})^2.$$

Решение.

$$SS_1 = 8,2^2 + 10,2^2 + 8,3^2 + \dots + 80,9^2 + 57,1^2 = 28992,54.$$

Сумма квадратов итогов по строкам, деленная на число элементов в каждой строке

Теория.

$$SS_2 = \sum_{i=1}^n A_i^2 / n.$$

Решение.

$$SS_2 = (1063 + 7123 + 25408 + 79299) / 4 = 28223,25.$$

Сумма квадратов итогов по столбцам, деленная на число элементов в каждом столбце

Теория.

$$SS_3 = \sum_{j=1}^n B_j^2 / n.$$

Решение.

$$SS_3 = (21404 + 17213 + 25953 + 14256)/4 = 19706,50.$$

Сумма квадратов итогов по латинским буквам, деленная на число элементов, соответствующих каждой букве

Теория.

$$SS_4 = \sum_{k=1}^n C_k^2 / n.$$

Решение.

$$SS_4 = (12837 + 25985 + 16410 + 24149)/4 = 19845,25.$$

Сумма квадратов итогов по греческим буквам, деленная на число элементов, соответствующих каждой букве

Теория.

$$SS_5 = \sum_{l=1}^n D_l^2 / n.$$

Решение.

$$SS_5 = (16718 + 21492 + 22530 + 17424)/4 = 19541,00.$$

Корректирующий член, равный квадрату общего итога, деленному на общее число ячеек квадрата (на число опытов)

Теория.

$$SS_6 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_{ijkl} / n^2.$$

Решение.

$$SS_6 = 558,0^2/16 = 19460,25.$$

Сумма квадратов для строки

$$SS_a = SS_2 - SS_6; \quad SS_a = 28223,25 - 19460,25 = 8763,00.$$

Сумма квадратов для столбца

$$SS_b = SS_3 - SS_6; \quad SS_b = 19706,50 - 19460,25 = 246,25.$$

Сумма квадратов для латинской буквы

$$SS_c = SS_4 - SS_6; \quad SS_c = 19845,25 - 19460,25 = 385,00.$$

Сумма квадратов для греческой буквы

$$SS_d = SS_5 - SS_6; \quad SS_d = 19541,00 - 19460,25 = 80,75.$$

Общая сумма квадратов

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_6; \quad SS_{\text{общ}} = 28992,54 - 19460,25 = 9532,27.$$

Остаточная сумма квадратов

$$SS_{\text{ост}} = SS_{\text{общ}} - (SS_a + SS_b + SS_c + SS_d);$$

$$SS_{\text{ост}} = 9532,27 - (8763,00 + 246,25 + 385,00 + 80,75) = 57,27.$$

Результаты дисперсионного анализа представлены в табл. 6.22.

Таблица 6.22. Дисперсионный анализ греко-латинского квадрата 4×4

Источник изменчивости	Сумма квадратов SS	Число степеней свободы ν	Средний квадрат MS	Критерий Фишера F
Строки, x_2	8763,00	3	2921,0	152,9
Столбцы, x_1	246,25	3	82,1	4,3
Лат. буквы, x_3	385,00	3	128,3	6,7
Греч. буквы, x_4	80,75	3	26,9	1,4
Ошибка	57,27	3	19,1	
Итого	9532,27	15		

Интерпретация.

Проверка гипотез осуществляется по F -критерию: $F = MS_{\text{исп}}/MS_{\text{ост}}$.

Табличное значение критерия $F_{(3,3;0,05)} = 9,28$ и $F_{(3,3;0,1)} = 5,39$.

Можно утверждать, что относительное удлинение композиций на основе ПВХ зависит от содержания пластификатора и при $\alpha = 10\%$ — от типа пластификатора. Результаты не зависят от партии полимера и динамометра, на котором производился измерение.

Пример. Исследовалось влияние на остаточное удлинение вулканизатов, величина которого не должна быть более 6%, шести факторов, каждый из которых имел пять уровней [36, с. 63–69]. Эксперимент проводился с повторными наблюдениями, $m = 3$.

x_1 — соотношение оксида цинка и стеариновой кислоты, масс. ч. Уровни: $a_1 - 5,00:1,00$; $a_2 - 5,00:1,67$; $a_3 - 5,00:2,14$; $a_4 - 5,00:2,50$; $a_5 - 5,00:2,78$.

x_2 — продолжительность вулканизации, мин. Уровни: $b_1 - 5$; $b_2 - 10$; $b_3 - 15$; $b_4 - 20$; $b_5 - 25$.

x_3 — марка наполнителя. Уровни: a ; b ; c ; d ; e .

x_4 — тип каучука, масс. ч. Уровни: $A - \text{СКН-40/СКН-18} = 50/50$; $B - \text{СКН-40/СКН-18} = 30/70$; $C - \text{СКН-40/СКН-26} = 50/50$; $D - \text{СКН-26/СКН-18} = 50/50$; $E - \text{СКН-40} - 100$.

x_5 — соотношение дозировок пары дибутилфталат/дибутилсебагинат. Уровни: $\alpha - 7:1$; $\beta - 3:1$; $\gamma - 5:3$; $\delta - 4:1$; $\epsilon - 1:1$.

x_6 — соотношение ускорителей, масс.ч, Уровни: 1 — каптакс (2,0); 2 — альтакс (1,3) + тиурам (0,4); 3 — альтакс (2,6) + тиурам (0,2); 4 — сантокур (1,3) + тиурам (0,4); 5 — сантокур (2,6) + тиурам (0,2).

Реализован 5×5 латинский квадрат четвертого порядка. Число точек плана равно 25, что в 625 раз меньше полной классификации дисперсионного анализа.

Эту задачу следует рассматривать как типичную задачу выделения существенных переменных.

План гипер-греко-латинского квадрата 5×5 при разработке рецептуры резиновой смеси дан в табл. 6.23 и результаты эксперимента в табл. 6.24 и 6.25.

Таблица 6.23. Гипер-греко-латинский квадрат 5×5

$x_1 \backslash x_2$	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5
a_1	$A\alpha a1$	$B\beta b2$	$C\gamma c3$	$D\delta d4$	$E\epsilon e5$
a_2	$B\gamma d5$	$C\delta e1$	$D\epsilon a2$	$E\alpha b3$	$A\beta c4$
a_3	$C\epsilon b4$	$D\alpha c5$	$E\beta d1$	$A\gamma e2$	$B\delta a3$
a_4	$D\beta e3$	$E\gamma a4$	$A\delta b5$	$B\epsilon c1$	$C\alpha d2$
a_5	$E\delta c2$	$A\epsilon d3$	$B\alpha e4$	$C\beta a5$	$D\gamma b1$

Таблица 6.24. Экспериментальные данные

$x_1 \backslash x_2$	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5
a_1	23, 35, 48	8, 8, 8	36, 32, 36	8, 4, 8	24, 31, 28
a_2	12, 12, 13	17, 17, 13	8, 5, 4	7, 8, 7	8, 12, 12
a_3	4, 4, 4	12, 12, 8	25, 26, 24	4, 4, 4	4, 4, 4
a_4	4, 4, 4	4, 4, 4	4, 4, 4	15, 16, 16	13, 16, 15
a_5	4, 4, 4	8, 8, 4	4, 4, 4	8, 8, 8	4, 4, 4

Таблица 6.25. Суммы по ячейкам

$x_1 \backslash x_2$	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5	Итоги A_i
a_1	106	24	104	20	83	$A_1 = 337$
a_2	37	47	17	22	32	$A_2 = 155$
a_3	12	32	75	12	12	$A_3 = 143$
a_4	12	12	12	47	44	$A_4 = 127$
a_5	12	20	12	24	12	$A_5 = 80$
Итоги B_j	$B_1 = 179$	$B_2 = 135$	$B_3 = 220$	$B_4 = 125$	$B_5 = 183$	Итого $G = 842$

Итоги по малым латинским буквам					Итоги по большим латинским буквам				
a	b	c	d	e	A	B	C	D	E
$C_1 = 171$	$C_2 = 82$	$C_3 = 227$	$C_4 = 196$	$C_5 = 166$	$D_1 = 182$	$D_2 = 132$	$D_3 = 231$	$D_4 = 93$	$D_5 = 204$
Итоги по греческим буквам					Итоги по цифрам				
α	β	γ	δ	ϵ	1	2	3	4	5
$E_1 = 216$	$E_2 = 167$	$E_3 = 177$	$E_4 = 103$	$E_5 = 179$	$K_1 = 287$	$K_2 = 109$	$K_3 = 170$	$K_4 = 88$	$K_5 = 188$

Статистический анализ проводится в следующей последовательности: в табл. 6.25 в каждой ячейке квадрата даны суммы трех наблюдений, а также итоги по строкам A_i , итоги по столбцам B_j , итоги по латинской букве малой C_k , итоги по латинской букве большой D_e , итоги по греческой букве E_p и итоги по цифрам K_q .

Так итог A_2 получен в результате следующей процедуры: $37 + 47 + 17 + 22 + 32 = 155$, итог B_1 равняется: $106 + 37 + 12 + 12 + 12 = 179$, итог C_1 : $106 + 17 + 12 + 12 + 24 = 171$ (по малой латинской букве a) и т. д.

Далее рассчитываются следующие вспомогательные величины.

Вычисление суммы квадратов результатов всех наблюдений

Теория.

$$SS_1 = \sum_{i=1}^N y^2.$$

Решение.

$$SS_1 = 23^2 + 38^2 + 48^2 + 8^2 + \dots + 4^2 + 4^2 = 16538.$$

Сумма квадратов итогов по строкам, деленная на число элементов в каждой строке

Теория.

$$SS_2 = \sum_{i=1}^n A_i^2 / mn.$$

Решение.

$$SS_2 = (337^2 + 155^2 + 143^2 + 127^2 + 80^2) / (3 \cdot 5) = 12038,11.$$

Сумма квадратов итогов по столбцам, деленная на число элементов в каждом столбце

Теория.

$$SS_3 = \sum_{j=1}^n B_j^2 / mn.$$

Решение.

$$SS_3 = (179^2 + 135^2 + 220^2 + 125^2 + 183^2) / (3 \cdot 5) = 9852,00.$$

Сумма квадратов итогов по малым латинским буквам, деленная на число элементов, соответствующих каждой букве

Теория.

$$SS_4 = \sum_{k=1}^n C_k^2 / mn.$$

Решение.

$$SS_4 = (171^2 + 82^2 + 227^2 + 196^2 + 166^2) / (3 \cdot 5) = 10231,07.$$

Сумма квадратов итогов по большим латинским буквам, деленная на число элементов, соответствующих каждой букве

Теория.

$$SS_5 = \sum_{l=1}^n D_l^2 / mn.$$

Решение.

$$SS_5 = (182^2 + 132^2 + 231^2 + 93^2 + 204^2)/(3 \cdot 5) = 10278,27.$$

Сумма квадратов итогов по греческим буквам, деленная на число элементов, соответствующих каждой букве

Теория.

$$SS_6 = \sum_{p=1}^n E_p^2 / mn.$$

Решение.

$$SS_6 = (216^2 + 167^2 + 177^2 + 103^2 + 179^2)/(3 \cdot 5) = 9901,60.$$

Сумма квадратов итогов по цифрам, деленная на число элементов, соответствующих каждой цифре

Теория.

$$SS_7 = \sum_{q=1}^n K_q^2 / mn.$$

Решение.

$$SS_7 = (287^2 + 109^2 + 170^2 + 88^2 + 188^2)/(3 \cdot 5) = 11082,53.$$

Сумма квадратов сумм по ячейкам, деленных на число наблюдений в ячейке

Теория.

$$SS_8 = \sum (ABCDEK)^2 / m.$$

Решение.

$$SS_8 = (106^2 + 24^2 + 104^2 + 20^2 + 83^2 + \dots + 12^2 + 24^2 + 12^2)/3 = 16119,33.$$

Корректирующий член, равный квадрату общего итога, деленному на общее число ячеек квадрата (на число опытов)

Теория.

$$SS_9 = G^2 / mn^2.$$

Решение.

$$SS_9 = 842^2 / (3 \cdot 5^2) = 9452,85.$$

Сумма квадратов для фактора x_1

$$SS_a = SS_2 - SS_9; \quad SS_a = 12038,11 - 9452,85 = 2585,26.$$

Сумма квадратов для фактора x_2

$$SS_b = SS_3 - SS_9; \quad SS_b = 9852,00 - 9452,85 = 399,15.$$

Сумма квадратов для фактора x_3

$$SS_c = SS_4 - SS_9; \quad SS_c = 10231,07 - 9452,85 = 778,22.$$

Сумма квадратов для фактора x_4

$$SS_d = SS_5 - SS_9; \quad SS_d = 10278,27 - 9452,85 = 825,42.$$

Сумма квадратов для фактора x_5

$$SS_e = SS_6 - SS_9; \quad SS_e = 9901,60 - 9452,85 = 448,75.$$

Сумма квадратов для фактора x_6

$$SS_k = SS_7 - SS_9; \quad SS_k = 11082,53 - 9452,85 = 1629,68.$$

Общая сумма квадратов

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_9; \quad SS_{\text{общ}} = 16538 - 9452,85 = 7085,15.$$

Остаточная сумма квадратов

$$SS_{\text{ост}} = SS_8 - (SS_2 + SS_3 + SS_4 + SS_5 + SS_6 + SS_7) + 5SS_9;$$

$$SS_{\text{ост}} = 16119,33 - (12038,11 + 9852,00 + 10231,07 + 10278,27 + 9901,60 + 11082,53) + 5 \cdot 9452,85 = 0.$$

Дисперсия между n^2 ячейками квадрата

$$SS_{\text{между ячейками}} = SS_8 - SS_9; \quad SS_{\text{между ячейками}} = 16119,33 - 9452,85 = 6666,48.$$

Сумма квадратов внутри ячейки квадрата

$$SS_{\text{внутри ячейки}} = SS_1 - SS_8; \quad SS_{\text{внутри ячейки}} = 16538 - 16119,33 = 418,67.$$

Результаты дисперсионного анализа представлены в табл. 6.26.

Интерпретация.

При проверке гипотезы о значимости всех линейных эффектов используется критерий Фишера, который рассчитывается как отношение средних квадратов к среднему квадрату внутри ячейки (ошибке воспроизводимости).

Таблица 6.26. Дисперсионный анализ латинского квадрата 5×5 четвертого порядка.

Источник изменчивости	Сумма квадратов SS	Число степеней свободы ν	Средний квадрат MS	Критерий Фишера F
Строки	2585,26	4	646,32	77,22
Столбцы	399,15	4	99,79	11,92
Малые лат. буквы, $a-e$	778,22	4	194,56	23,24
Большие лат. буквы, $A-E$	825,42	4	206,36	24,65
Малые греч. буквы, $\alpha-\epsilon$	448,75	4	112,19	13,40
Цифры, 1–5	1629,68	4	407,42	48,68
Остаток	—	—	—	—
Внутри ячейки	418,67	$25(3 - 1) = 50$	8,37	
Итого	7085,15			

Для 5% уровня значимости при степенях свободы $\nu_1 = 4$ и $\nu_2 = 50$ критическое значение F -критерия равно 2.57.

Таким образом, оказалось, что на остаточное удлинение существенно влияют все исследуемые факторы. Наибольшее влияние оказывает первый фактор x_1 . Если

посмотреть табл. 6.24, где приведены количественные значения остаточного удлинения, то обращает на себя внимание то обстоятельство, что в первых строках плана, которым соответствуют уровни первого фактора a_1 и a_2 , нет опыта за исключением опыта №8, где среднее значение удлинения равно 5,7, в котором бы остаточное удлинение не превышало 6%. Поэтому почти все комбинации (девять из десяти), в которых содержится a_1 и a_2 , приходится отсеивать как неперспективные. Из последующих пятнадцати комбинаций десять дают хорошие результаты (остаточное удлинение равно 4). Какой из них отдать предпочтение, зависит от технологических соображений. Так, например, технолога могут интересовать комбинации, дающие хороший результат при минимальном времени вулканизации. Тогда наилучшими будут опыты №2, №16 и №21. Или та комбинация, которая содержит каптакс в качестве ускорителя. Тогда наилучшим будет опыт №25.

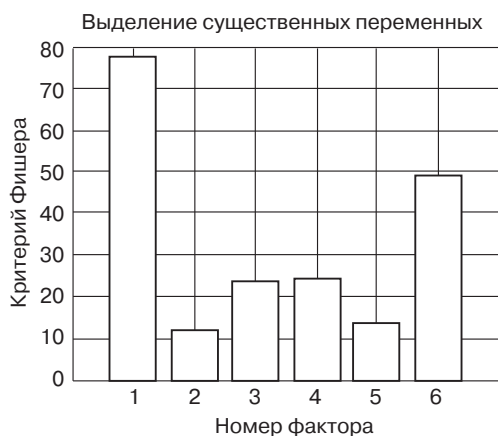


Рис. 6.1. Результаты анализа

Приведем здесь решение задачи с использованием пакета *MATLAB*.

% РЕШЕНИЕ

% СУММЫ КВАДРАТОВ ДЛЯ СЛЕДУЮЩИХ ИСТОЧНИКОВ ДИСПЕРСИИ:

% 1-ЫЙ ФАКТОР (СТРОКА),

% 2-ОЙ (СТОЛБЕЦ),

% 3-ИЙ (МАЛЫЕ ЛАТ. БУКВЫ)

% 4-ЫЙ (БОЛЬШ. ЛАТ. БУКВЫ),

% 5-ЫЙ (РИМ. ЦИФРЫ),

% 6-ОЙ (АРАБ. ЦИФРЫ),

% ОСТАТОК (НЕЛИНЕЙНОСТЬ),

% ОШИБКА

% ОБЩАЯ

2585.3 399.1 778.2 825.4 448.7 1629.7 0.0 418.7 7085.1

% ЧИСЛО СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ: ИСПЫТАНИЙ, ОСТАТКА, ОШИБКИ И ОБЩЕЕ

4 4 4 4 4 4 0 50 74
 % ЗНАЧЕНИЯ СРЕДНИХ КВАДРАТОВ: ДЛЯ ФАКТОРОВ И ОШИБКИ
 646.3200 99.7867 194.5533 206.3533 112.1867 407.4200
 8.3733
 % КРИТЕРИИ ФИШЕРА: РАССЧИТАННЫЕ (ДЛЯ ФАКТОРОВ) И ТАБЛИЧНЫЙ
 77.1879 11.9172 23.2349 24.6441 13.3981 48.6568
 2.5700
 % ЕСЛИ РАСЧЕТНЫЙ КРИТЕРИЙ ФИШЕРА < ТАБЛИЧНОГО, СЛЕДУЕТ ПОЛАГАТЬ,
 % ЧТО СООТВЕТСТВУЮЩИЙ ФАКТОР ВЛИЯЕТ НА ИЗУЧАЕМОЕ СВОЙСТВО

Дальше идут латинские кубы и параллелепипеды (рис. 6.2), сбалансированные и частично сбалансированные неполноблочные планы, сложные несимметричные планы, различные комбинаторные схемы. Этим проблемам посвящена серия работ Е. В. Марковой и А. Н. Лисенкова [33, 34, 35].

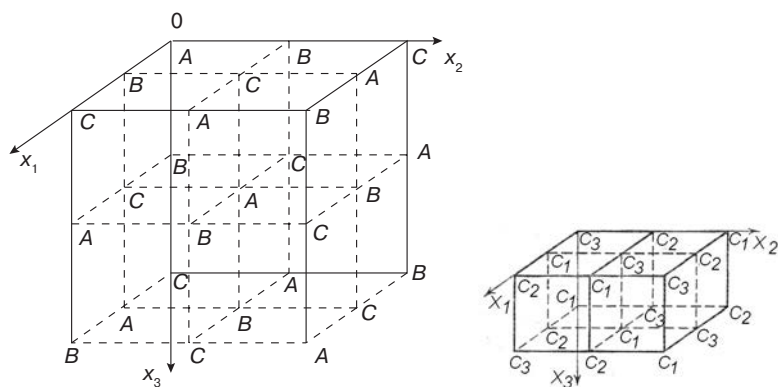


Рис. 6.2. Латинский куб первого порядка и латинский параллелепипед

В 1982 г. были опубликованы таблицы планов эксперимента (под редакцией В. В. Налимова), в которых представлена сводка неполноблочных планов и соответствующие матрицы [38, с. 169–298].

6.4. Планирование эксперимента в условиях временного дрейфа

При постановке большой серии опытов, требующих длительного времени, всегда приходится опасаться нежелательных изменений исходных свойств полимеров и ингредиентов различного назначения, некоторых характеристик оборудования и т. п.

В литературе описаны различные способы устранения этого явления, имеющего наименование *временной дрейф* [17, с. 278–315; 34, с. 124–174; 35, с. 123–137; 39, с. 19–21; 40, с. 13–14; 41, с. 276–285; 42, с. 101–122; 43, с. 96–98].

Влияние временного дрейфа на параметры математического описания процесса можно практически устранить, разбивая серию опытов на отдельные блоки так, чтобы эффект от временного дрейфа оказался смешанным с произведениями факторов, для которых коэффициенты регрессии достаточно малы.

Допустим, необходимо устранить влияние временного дрейфа на параметры уравнения регрессии, получаемого в результате полного трехфакторного эксперимента. С этой целью разобьем эксперимент на два блока и введем новую независимую переменную x_d , характеризующую дрейф. Положим $x_d = x_1 x_2 x_3$.

В один из блоков отберем опыты, для которых $x_d = +1$, а в другой блок — для которых $x_d = -1$.

Формально это планирование, приведенное в табл. 6.27, можно рассматривать как эксперимент типа 2^{4-1} с генерирующим соотношением $x_d = x_1 x_2 x_3$.

Таблица 6.27. Планирование в условиях временного дрейфа

Номер блока	x_1	x_2	x_3	$x_d = x_1 x_2 x_3$	Отклик
1	-1	-1	+1	+1	$y_1 + \beta_d$
	+1	-1	-1	+1	$y_2 + \beta_d$
	-1	+1	-1	+1	$y_3 + \beta_d$
	+1	+1	+1	+1	$y_4 + \beta_d$
2	-1	-1	-1	-1	$y_5 - \beta_d$
	+1	-1	+1	-1	$y_6 - \beta_d$
	-1	+1	+1	-1	$y_7 - \beta_d$
	+1	+1	-1	-1	$y_8 - \beta_d$

Исходя из матрицы планирования, будем считать, что в первом блоке все результаты опытов вследствие временного дрейфа завышены на β_d , а во втором блоке — занижены на ту же величину.

Если уравнение регрессии ищется в виде

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{23} x_2 x_3 + b_{123} x_1 x_2 x_3, \quad (6.9)$$

то коэффициенты регрессии будут являться следующими оценками:

$$\begin{aligned} b_0 &\rightarrow \beta_0; & b_1 &\rightarrow \beta_1; & b_2 &\rightarrow \beta_2; & b_3 &\rightarrow \beta_3; \\ b_{12} &\rightarrow \beta_{12}; & b_{13} &\rightarrow \beta_{13}; & b_{23} &\rightarrow \beta_{23}; & b_{123} &\rightarrow \beta_{123} + \beta_d. \end{aligned}$$

Рассчитаем, например, коэффициенты b_1 и b_{123} :

$$b_1 = (-y_1 + \beta_d) + (y_2 + \beta_d) - (y_3 + \beta_d) + (y_4 + \beta_d) - (y_5 - \beta_d) + (y_6 - \beta_d) - (y_7 - \beta_d) + (y_8 - \beta_d) / 8 = (-y_1 + y_2 - y_3 + y_4 - y_5 + y_6 - y_7 + y_8) / 8;$$

$$b_{123} = ((y_1 + \beta_d) + (y_2 + \beta_d) + (y_3 + \beta_d) + (y_4 + \beta_d) - (y_5 - \beta_d) - (y_6 - \beta_d) - (y_7 - \beta_d) - (y_8 - \beta_d))/8 = (y_1 + y_2 + y_3 + y_4 - y_5 - y_6 - y_7 - y_8)/8 + \beta_d.$$

Следовательно, все коэффициенты регрессии, кроме b_{123} , не содержат погрешностей, обусловленных временным дрейфом.

Анализ временного дрейфа может быть осуществлен также с помощью *магических квадратов*.

Магический квадрат представляет собой квадратную таблицу из целых чисел, в которой суммы чисел вдоль любой строки, любого столбца и любой из двух главных диагоналей равны одному и тому же числу.

Магический квадрат имеет древнекитайское происхождение. Согласно легенде, во времена императора Ю (ок. 2200 до н. э.) из вод Хуанхэ (Желтой реки) всплыла священная черепаха, на панцире которой были начертаны таинственные иероглифы (рис. 6.3, а), и эти знаки известны под названием Ло-Шу и равносильны магическому квадрату, изображенному на рис. 6.3, б.

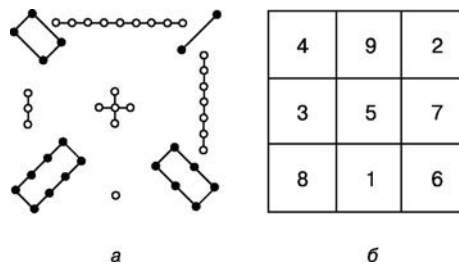


Рис. 6.3. Магический квадрат

В XI в. о магических квадратах узнали в Индии, а затем в Японии, где в XVI в. магическим квадратам была посвящена обширная литература.

7	12	1	14
2	13	8	11
16	3	10	5
9	6	15	4

Рис. 6.4. Квадрат Кхаджурахо

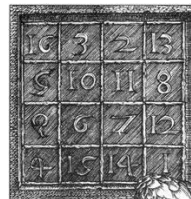


Рис. 6.5. Квадрат Дюрера

Самый ранний уникальный магический квадрат обнаружен в надписи XI в. в индийском городе Кхаджурахо (рис. 6.4). Это первый магический квадрат, относящийся к разновидности так называемых «дьявольских квадратов».

Европейцев с магическими квадратами познакомил в XV в. византийский писатель Э. Мосхопулос. Первым квадратом, придуманным европейцем, считается квадрат Альбрехта Дюрера (рис. 6.5), изображенный на его знаменитой гравюре «Меланхолия». Дата создания гравюры (1514) указана числами, стоящими в двух центральных клетках нижней строки. Магическим квадратам приписывали различные мистические свойства. В XVI в. Корнелий Генрих Агриппа построил квадраты 3-го, 4-го, 5-го, 6-го, 7-го, 8-го и 9-го порядков, которые были связаны с астрологией семи планет. Бытовало поверье, что выгравированный на серебре магический квадрат защищает от чумы. Даже сегодня среди атрибутов европейских прорицателей можно увидеть магические квадраты.

Сумма чисел в каждой строке, столбце и на диагоналях, называется магической константой, *M*. Магическая константа нормального волшебного квадрата зависит только от его порядка *n* и определяется формулой $M(n) = n(n^2 + 1)/2$.

Некоторые значения магических констант приведены в табл. 6.28.

Таблица 6.28. Значения магических констант

<i>n</i>	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
<i>M(n)</i>	15	34	65	111	175	260	369	505	671	870	1105

Пусть нужно поставить *N* независимых опытов. Числа от 1 до *N* — это некоторые параметры времени, такие как часы или дни. Высказывается предположение, что при постановке *N* опытов имеет место временной дрейф экспериментальных данных. Характер дрейфа линейный.

Рассмотрим план, представляющий собой совмещение магического квадрата с полным факторным экспериментом 2⁴. План показан в расположенной ниже табл. 6.29.

Таблица 6.29. Факторный эксперимент 2⁴, совмещенный с 4×4 магическим квадратом

		<i>x</i> ₁ (+1)		<i>x</i> ₁ (−1)	
		<i>x</i> ₂ (+1)	<i>x</i> ₂ (−1)	<i>x</i> ₂ (+1)	<i>x</i> ₂ (−1)
<i>x</i> ₃ (+1)	<i>x</i> ₄ (+1)	16	2	3	13
	<i>x</i> ₄ (−1)	5	11	10	8
<i>x</i> ₃ (−1)	<i>x</i> ₄ (+1)	9	7	6	12
	<i>x</i> ₄ (−1)	4	14	15	1

Здесь x_1, x_2, x_3 и x_4 представляют собой факторы, каждый из которых варьируется на двух уровнях (-1) и $(+1)$. При реализации этого плана нужно поставить 16 опытов. Допустим, что ежедневно ставим один опыт, тогда все опыты будут поставлены за 16 дней. В течение этого времени имеет место линейный дрейф. Для защиты от этого дрейфа наложим ПФЭ 2^4 на 4×4 магический симметричный квадрат, элементами которого являются номера шестнадцати опытов. Такой план приемлем, если взаимодействия x_1x_4 и x_2x_3 незначимы.

Пример. Рассмотрим результаты определения зависимости твердости резин от температуры вулканизации ($\tilde{x}_1^{\max} = 180^\circ\text{C}$ и $\tilde{x}_1^{\min} = 140^\circ\text{C}$), продолжительности процесса ($\tilde{x}_2^{\max} = 17$ мин и $\tilde{x}_2^{\min} = 5$ мин), дозировки ускорителя ($\tilde{x}_3^{\max} = 1,2$ масс. ч. и $\tilde{x}_3^{\min} = 0,4$ масс. ч.) и наполнителя ($\tilde{x}_4^{\max} = 30$ масс. ч. и $\tilde{x}_4^{\min} = 10$ масс. ч.). Реализован полный факторный эксперимент 2^4 .

План и результаты эксперимента представлены в табл. 6.30.

Таблица 6.30. Уровни варьирования переменных и результаты определения твердости

		$x_1(+1)$				$x_1(-1)$			
		$x_2(+1)$		$x_2(-1)$		$x_2(+1)$		$x_2(-1)$	
$x_3(+1)$	$x_4(+1)$	16	72,0	2	70,0	3	73,8	13	59,8
	$x_4(-1)$	5	69,8	11	57,8	10	62,7	8	54,7
$x_3(-1)$	$x_4(+1)$	9	67,5	7	59,3	6	64,4	12	52,2
	$x_4(-1)$	4	62,4	14	48,3	15	52,2	1	50,2

```

« x1=[-1;1;-1;1;-1;1;-1;1;-1;1;-1;1;-1;1];
« x2=[-1;-1;1;1;-1;-1;1;1;-1;-1;1;1;-1;-1;1;1]; (Столбцы значений
« x3=[-1;-1;-1;-1;1;1;1;1;-1;-1;-1;-1;-1;1;1;1]; факторов
« x4=[-1;-1;-1;-1;-1;-1;-1;-1;-1;1;1;1;1;1;1;1]; в кодированном
виде)
« y=[50.2;48.3;52.2;62.4;54.7;57.8;62.7;69.8;52.2;59.3;64.4;
67.5;59.8;70;73.8;72]; (отклик)
« X=[x1.^0 x1 x2 x3 x4]; (матрица планирования)
« b=(inv(X'*X))*(X'*y) вычисление коэффициентов модели)
b=61.0687 2.3187 4.5312 4.0062 3.8063 (коэффициенты b0,b1,b2,b3,b4)
« Y=X*b; (рассчитанные по уравнению значения отклика)
« max(abs(y-Y)) (модуль максимального отклонения расчетного
ans = 3.7938 и экспериментального значения отклика)
« [(y-Y)./y*100] ans = 7.5573 (оно же в %)
« (64.7-61.1)/15*2 ans=0.4800 (расчет дрейфа от измерения до из-
мерения)

```

В последней формуле сопоставлены значения отклика до дрейфа и после него. Если бы не было дрейфа, значение отклика в нулевой точке было бы 64,7 единиц, а в результате дрейфа (пребывание в агрессивной среде) понизилось на 3,6 единиц.

При рассмотрении магических квадратов у читателя, видимо, образовались какие-то ассоциации с широко распространенной сейчас игрой sudoku. Действительно, прообразом sudoku можно считать магический квадрат 3×3 .

История sudoku как игры восходит к имени знаменитого швейцарского математика, механика и физика Леонарда Эйлера (1707–1783). В бумагах его архива, датированных 17 октября 1776 года, содержатся записи о том, как образовать магический квадрат с определенным числом ячеек, особенно 9, 16, 25 и 36. В другом документе, озаглавленном «Научное исследование новых разновидностей магического квадрата» Эйлер помещал в клетки латинские буквы (латинский квадрат), позже он заполнил клетки греческими буквами и называл квадрат греко-латинским. Исследуя различные варианты магического квадрата, Эйлер обратил внимание на проблему комбинации символов таким образом, чтобы не один из них не повторялся ни в одной строке и ни в одном столбце.

В современном виде головоломки sudoku впервые были опубликованы в 1979 году в журнале *Word Games magazine*. Автором головоломки был Гарвард Гарис. Он использовал принцип латинского квадрата Эйлера, применил его в матрице размерностью 9×9 и добавил дополнительные ограничения, цифры не должны повторяться и во внутренних квадратах 3×3 .

Таким, образом, идея sudoku пришла не из Японии, как думают многие, однако название игры действительно японское. В Японии эта головоломка была опубликована компанией *Nicoly Inc.*, крупным издателем сборников различных головоломок, в газете *Monthly Nicolist* в апреле 1984 года под заголовком «Число может использоваться только один раз». Название головоломке дал руководитель *Nicoli* — *Kaji Maki*. В названии *Sudocu Su* обозначает число, а *doku* — единственное. 12 ноября 2004 года газета *The Times* впервые на своих страницах опубликовала головоломку sudoku. Эта публикация стала сенсацией, головоломка быстро распространилась по всей Британии, Австралии, Новой Зеландии; приобрела популярность и в США и докатилась до нас.

Литература

1. Налимов В.В. Применение математической статистики при анализе вещества. — М.: Физматгиз, 1960. — 430 с.
2. Зедгинидзе И.Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. — М.: Наука, 1976. — 390 с.
3. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. — М.: Высшая школа, 1978. — 319 с.
4. Ветров А.А., Ломовацкий Г.И. Дисперсионный анализ в экономике. М.: Статистика, 1975. — 120 с.

5. Гмурман В.Е. Руководство к решению задач по теории вероятностей и математической статистике. — М.: Высшая школа, 1975. — 334 с.
6. Горюшко В.Е. Планирование эксперимента в бытовой химии. — М.: НИИТЭХИМ, 1974. — 88 с.
7. Доерфель К. Статистика в аналитической химии / Пер. с нем. — М.: Мир, 1969. — 247 с.
8. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ / Пер. с англ. — М.: Статистика, 1973. — 392 с.
9. Зажигаев Л.С., Кишьян А.А., Романиков Ю.И. Методы планирования и обработки результатов физического эксперимента. — М.: Атомиздат, 1978. — 231 с.
10. Кнотек М., Войта Р., Шефц И. Анализ металлургических процессов методами математической статистики / Пер. с чешск. — М.: Металлургия, 1968. — 211 с.
11. Компьютерная биометрика / Под ред. В.Н. Носова. — М.: Изд. МГУ, 1990. — 232 с.
12. Крамер Г. Математические методы статистики / Пер. с англ. — М.: Мир, 1975. — 648 с.
13. Митрополевский А.К. Техника статистических вычислений. — М.: Наука, 1971. — 576 с.
14. Монтгомери Д.К. Планирование эксперимента и анализ данных / Пер. с англ. — Л.: Судостроение, 1980. — 384 с.
15. Мэйндоналд Дж. Вычислительные алгоритмы в прикладной статистике / Пер. с англ. — М.: Финансы и статистика, 1988. — 350 с.
16. Налимов В.В., Голикова Т.И. Логические основания планирования эксперимента. — М.: изд. МГУ, 1971. — 72 с.
17. Планирование эксперимента в исследованиях технологических процессов. Под ред. Э.К. Лецкого / Пер. с нем. — М.: Мир, 1977. — 552 с.
18. Пустыльник Е.И. Статистические методы анализа и обработки наблюдений. — М.: Наука, 1968. — 288 с.
19. Себер Дж. Линейный регрессионный анализ / Пер. с англ. — М.: Мир, 1980. — 456 с.
20. Смирнов Н.В., Дунин-Барковский И.В. Курс теории вероятностей и математической статистики. — М.: Наука, 1969. — 511 с.
21. Сырцова Е.Д. Математические методы в планировании и управлении строительным производством. — М.: Высшая школа, 1972. — 335 с.
22. Финни Д. Введение в теорию планирования эксперимента / Пер. с англ. — М.: Наука, 1970. — 288 с.
23. Хальд А. Математическая статистика с техническими приложениями / Пер. с англ. — М.: Изд. И.Л., 1956. — 664 с.
24. Хьютсон А. Дисперсионный анализ / Пер. с англ. — М.: Статистика, 1971. — 88 с.
25. Шеффе Г. Дисперсионный анализ / Пер. с англ. — М.: Наука, 1980. — 512 с.
26. Хикс Ч. Основные принципы планирования эксперимента / Пер. с англ. — М.: Мир, 1967. — 406 с.
27. Бернштейн А. Справочник статистических решений / Пер. с англ. — М.: Статистика, 1968. — 162 с.

28. Дэниел К. Применение статистики в промышленном эксперименте / Пер. с англ. — М.: Мир, 1979. — 300 с.
29. Назаров В.И., Хоц М.С. Прикладные математические методы в нефтепереработке и нефтехимии. — М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1975. — 111 с.
30. Дружинин Н.К. Выборочное наблюдение и эксперимент. — М.: Статистика, 1977. — 176 с.
31. Дюге Д. Теоретическая и прикладная статистика / Пер. с франц. — М.: Наука, 1972. — 383 с.
32. Ермаков С.М., Жиглявский А.А. Математическая теория оптимального эксперимента. — М.: Наука, 1987. — 319 с.
33. Маркова Е.В., Лисенков А.Н. Комбинаторные планы в задачах многофакторного эксперимента. — М.: Наука, 1979. — 348 с.
34. Маркова Е.В., Лисенков А.Н. Планирование эксперимента в условиях неоднородностей. — М.: Наука, 1973. — 219 с.
35. Маркова Е.В. Руководство по применению латинских планов при планировании эксперимента с качественными факторами. — Челябинск: Изд. УралНИИстройпроект, 1971. — 156 с.
36. Протодяконов М.М., Тедер Р.И. Методика рационального планирования экспериментов. — М.: Наука, 1970. — 74 с.
37. Дэвид Г. Метод парных сравнений / Пер. с англ. М.: Статистика, 1978. — 144 с.
38. Таблицы планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей. Справочное издание под ред. В.В. Налимова. — М.: Металлургия, 1982. — 751 с.
39. Саутин С.Н. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. — Л.: Химия, 1975. — 48 с.
40. Информационные материалы. — Сборник статей под ред. С.И. Самойленко. 8 (45). — М.: АН СССР, НТС по комплексной проблеме «Кибернетика», 1970. — 132 с.
41. Налимов В.В., Чернова Н.А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. — М.: Физматгиз, 1965. — 340 с.
42. Математическое описание и оптимизация многофакторных процессов. — М.: Труды МЭИ, вып. LXVII. Под ред. Г.К. Круга. 1966. — 211 с.
43. Тихомиров В.Б. Математические методы планирования эксперимента при изучении нетканых материалов. — М.: Легкая индустрия, 1968. — 156 с.

Глава 7. Корреляционный анализ

Функциональная зависимость между двумя переменными величинами x и y характеризуется тем, что каждому значению одной из них соответствует вполне определенное значение другой.

Например, между радиусом круга R и его площадью S существует функциональная зависимость. Она выражается формулой $S = \pi R^2$, которая позволяет, зная радиус, найти соответствующую ему единственную площадь круга.

Функциональные связи между переменными изучаются в математическом анализе. Законы определенного соответствия, представляющие сущность функциональной зависимости, характерны для количественных соотношений в области точных наук.

В химической технологии и, в частности, в технологии переработки эластомеров, чаще встречаются такие связи между переменными величинами (мы будем пока предполагать, что их две), когда численному значению одной из них не соответствует определенное значение другой.

Связи такого типа называются статистическими.

Таким образом, *зависимость между двумя переменными величинами называется статистической, если каждому значению одной из них соответствует множество значений другой, но число этих значений не является постоянным, а сами значения не отражают определенной закономерности.*

Достаточно часто приходится иметь дело со сложными задачами, при решении которых нельзя заранее быть уверенным в том, что между изучаемыми переменными существует та или иная математическая связь. Часто также важно бывает установить, существует ли зависимость между некоторыми трудно поддающимися определению показателями качества продукции и другими показателями, легко поддающимися оценке. Решение всех подобных задач производится обычно с помощью *корреляционного анализа*, основанного на определении и оценке коэффициента корреляции.

Математический метод изучения различных явлений и процессов состоит зачастую в изучении их с помощью функций, выражающих связь между теми или иными величинами x и y , характеризующими эти явления.

В случае точной функциональной зависимости между x и y каждому значению x соответствует строго определенное значение y . Но нередко бывает, что в силу случайных обстоятельств связь между x и y расплывчатая, и одному и тому же значению x

соответствует целая статистическая совокупность значений y . Тогда мы имеем систему двух случайных величин x и y , иначе называемую двумерной случайной величиной. Связь между этими величинами называется статистической, или корреляционной, зависимостью.

Важно подчеркнуть, что методами корреляционного анализа может изучаться, например, *зависимость* прочности корда (отклик) от влажности воздуха (фактор). Но может изучаться *взаимосвязь* прочности (отклик) и твердости (отклик) вулканизатов.

7.1. Парная корреляция

Изучение корреляционных (статистических) зависимостей составляет предмет теории корреляции, в которой, прежде всего, ставятся и разрешаются две основные задачи:

1. О форме корреляционной связи между x и y в виде некоторой функциональной зависимости, которая хотя бы приближенно изображала бы расплывчатую корреляционную зависимость.

2. Об оценке тесноты корреляционной связи между x и y , т. е. степени близости корреляционной зависимости к функциональной.

Рассмотрим двумерные наблюдения, т. е. такие наблюдения, которые дают значения двух случайных величин x и y . Допустим, что для обоих признаков x и y выполняется гипотеза нормальности — в этом случае говорят, что имеет место двумерное нормальное распределение.

Нам нужно проверить гипотезу о наличии стохастической линейной связи между двумя случайными переменными x и y .

Используем такую статистическую характеристику — ковариацию или второй смешанный центральный момент (иначе — корреляционный момент) величин x и y :

$$\text{cov}(xy) = \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{m - 1}, \quad (7.1)$$

где m — количество точек.

Теперь можно сопоставить между собой три статистические характеристики, полученные для двух случайных величин:

$$\begin{aligned} S_x^2 &= \frac{\sum (x - \bar{x})(x - \bar{x})}{m - 1}; \\ \text{cov}(xy) &= \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{m - 1}; \\ S_y^2 &= \frac{\sum (y - \bar{y})(y - \bar{y})}{m - 1}. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Коэффициент корреляции следующим образом определяется с помощью этих трех величин:

$$r_{xy} = \frac{\text{cov}(xy)}{S_x S_y} = \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x - \bar{x})^2 \sum (y - \bar{y})^2}}. \quad (7.3)$$

Такой коэффициент корреляции называется выборочным, потому что он определяется по выборке — ограниченному объему экспериментальных данных.

Справедливы следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \sum (x - \bar{x})^2 &= \sum x^2 - (\sum x)^2 / m; \\ \sum (x - \bar{x})(y - \bar{y}) &= \sum xy - (\sum x)(\sum y) / m; \\ \sum (y - \bar{y})^2 &= \sum y^2 - (\sum y)^2 / m. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Особенность корреляционного анализа состоит в том, что одновременно в координатах $x - y$ строится модель $y = a + bx$ и модель $x = a' + b'y$.

Посмотрим, как соотносятся между собой коэффициент корреляции и коэффициент регрессии y по x :

$$b = \frac{m \sum xy - \sum x \sum y}{m \sum x^2 - (\sum x)^2} = \frac{\sum xy - m \bar{x} \cdot \bar{y}}{\sum (x - \bar{x})^2} = \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sum (x - \bar{x})^2} = \frac{\text{cov}(xy)}{S_x^2} = r_{xy} \frac{S_y}{S_x}. \quad (7.5)$$

Следовательно, уравнение регрессии y по x можно записать таким образом:

$$y - \bar{y} = r_{xy} \frac{S_y}{S_x} (x - \bar{x}). \quad (7.6)$$

Аналогичным образом можно написать также уравнение регрессии x по y :

$$x - \bar{x} = r_{xy} \frac{S_x}{S_y} (y - \bar{y}). \quad (7.7)$$

Эта линия регрессии характеризуется тем, что дает минимум суммы квадратов отклонений (невязок), измеряемых для каждой точки, параллельно оси x . Она позволяет получить наилучшую оценку для x по заданному значению y .

Таким образом, мы получаем два уравнения регрессии (7.6) и (7.7), которые отвечают двум различным математическим формулировкам задачи: в первом случае минимальное значение имеет сумма квадратов отклонений, взятых параллельно оси ординат, во втором случае — сумма квадратов отклонений, взятых параллельно оси абсцисс. Выбор того или иного из этих двух уравнений для описания наблюдаемой статистической связи является, конечно, совершенно произвольным. Он определяется тем, какую из двух величин, x или y , считаем заданной. Например, если мы, как уже упоминалось, изучаем зависимость прочности корда от влажности воздуха, то естественно, что физический смысл может иметь только одно уравнение регрессии, которое выражает зависимость величины изучаемого параметра от влажности, рассматриваемой в данном случае в качестве заданной величины. Если же изучается зависимость между двумя показателями вулканизата, то оба уравнения регрессии

имеют физический смысл. Здесь для дальнейшего практического применения выбирается то уравнение, в котором независимой переменной является наиболее точно определяемая величина.

При подсчете коэффициентов регрессии можно воспользоваться следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} b &= r_{xy} \frac{S_Y}{S_X} = r_{xy} \sqrt{\frac{\sum (y - \bar{y})^2}{m-1} \frac{m-1}{\sum (x - \bar{x})^2}} = r_{xy} \sqrt{\frac{\sum (y - \bar{y})^2}{\sum (x - \bar{x})^2}}; \\ b' &= r_{xy} \frac{S_X}{S_Y} = r_{xy} \sqrt{\frac{\sum (x - \bar{x})^2}{m-1} \frac{m-1}{\sum (y - \bar{y})^2}} = r_{xy} \sqrt{\frac{\sum (x - \bar{x})^2}{\sum (y - \bar{y})^2}}; \\ a &= \bar{y} - b\bar{x}; \\ a' &= \bar{x} - b'\bar{y}. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Из (7.6) и (7.7) следует, что коэффициент корреляции можно рассматривать как среднее геометрическое из угловых коэффициентов двух линий регрессии:

$$|r_{xy}| = \sqrt{bb'}. \quad (7.9)$$

Таким образом, корреляционный анализ является дальнейшим обобщением регрессионного анализа.

На рис. 7.1 показаны две линии регрессии, полученные методом наименьших квадратов, для случая, когда r_{xy} находится между 0 и 1. Эти линии соответствуют уравнениям (7.6) и (7.7). Прямые пересекаются в точке, где переменные x и y имеют средние значения. Для этих прямых, очевидно, можно написать:

$$\operatorname{tg} \alpha = b; \operatorname{tg} \beta = b'. \quad (7.10)$$

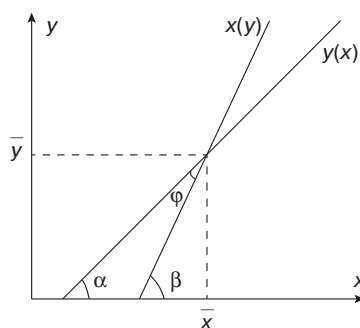


Рис. 7.1. Линии регрессии

Так как $\beta = \alpha + \varphi$, то тангенс угла между линиями регрессии будет равен:

$$\operatorname{tg} \varphi = \operatorname{tg}(\beta - \alpha) = \frac{\operatorname{tg} \beta - \operatorname{tg} \alpha}{1 + \operatorname{tg} \beta \cdot \operatorname{tg} \alpha} = \frac{1 - r_{xy}^2}{r_{xy}} \frac{S_X \cdot S_Y}{S_X^2 + S_Y^2}. \quad (7.11)$$

При $r_{xy} = 1$, $\operatorname{tg} \varphi = 0$, следовательно, в этом частном случае обе линии регрессии совпадают. Каждая из переменных становится линейной функцией другой переменной. При $r_{xy} = 0$ мы получаем две взаимно перпендикулярные прямые, параллельные координатным осям и проходящие через точку с координатами (\bar{x}, \bar{y}) . В этом случае очевидно, что между переменными не может существовать линейной статистической связи.

При значениях r_{xy} , изменяющихся от 0 до 1, угол между линиями регрессии изменяется от 90° до 0° . Таким образом, абсолютная величина коэффициента корреляции служит мерой угла между двумя линиями регрессии, а следовательно, и мерой жесткости линейной связи между переменными.

Из (7.5) следует, что знак коэффициента корреляции всегда совпадает со знаком углового коэффициента. Поэтому если коэффициент корреляции имеет положительный знак, то это значит, что x и y одновременно возрастают или одновременно убывают. Если коэффициент корреляции имеет отрицательный знак, то это значит, что одна из переменных увеличивается, когда другая уменьшается.

Одна из задач корреляционного анализа заключается в оценке реальности корреляционной связи. Если для обоих признаков x и y справедлива гипотеза нормальности, и коэффициент корреляции для генеральной совокупности равен нулю, то случайная величина $r = r_{xy} \cdot (m - 1)^{0.5}$, где r_{xy} — выборочный коэффициент корреляции, а m — число пар наблюдений x и y , имеет r -распределение с числом степеней свободы $v = m - 2$. В табл. XVII Приложения табулированы значения r_{xy} для различного числа степеней свободы при уровне значимости 0,05.

Мы будем считать, что наблюдаемое значение r_{xy} значимо отличается от нуля, если оно превосходит табличное значение для выбранного нами уровня значимости при числе степеней свободы $v = m - 2$.

Еще один способ статистической оценки значимости коэффициента корреляции предполагает вычисление средней *квадратичной ошибки* S_r коэффициента корреляции:

$$S_r = \frac{1 - r^2}{m^{1/2}}. \quad (7.12)$$

Величина коэффициента корреляции сопоставляется с его средней квадратической ошибкой. В результате определяется соотношение:

$$t = r/S_r. \quad (7.13)$$

Принято считать, что если $t > 2$, то это свидетельствует о надежности полученного коэффициента корреляции. Вероятность такого утверждения составляет 0,95.

При интерпретации коэффициентов корреляции надо быть крайне осторожным. Если величины x и y независимы, то безусловно, $r_{xy} = 0$. Но когда $r_{xy} = 0$, это значит только, что между x и y не может существовать линейной корреляционной связи, но криволинейная связь может существовать. В этом случае значение коэффициента корреляции может служить только мерой точности линейного по x приближения величины y .

Корреляционную зависимость не следует путать с причинной зависимостью. В экспериментальной работе часто приходится наблюдать корреляционную связь между переменными, обусловленную некоторыми другими факторами, которые не фиксируются в данном наблюдении.

Множество точек, построенных в системе координат $x - y$, образует диаграмму рассеяния. Эти точки формируют так называемый контурный эллипс, который превращается в окружность, если $r_{xy} = 0$, и в прямую линию — если $r_{xy} = \pm 1$.

Площадь контурного эллипса пропорциональна величине эллиптической дисперсии:

$$Q_{xy} = S_x S_y \sqrt{1 - r_{xy}^2}. \quad (7.14)$$

Таким образом, мы имеем три критерия тесноты связи: коэффициент корреляции, тангенс угла между линиями регрессии и эллиптическую дисперсию [1, с. 126–138; 2, с. 676–688; 3, с. 77–79; 4, с. 194–210; 5, с. 223–229; 6, с. 126–135; 7, с. 472–482; 8, с. 209–212; 9, с. 500–505; 10, с. 279–301; 11, с. 423–444; 12, с. 118–135; 13, с. 287–298; 14, с. 101–110; 15, с. 59–81, 94–106; 16, с. 46–54; 17, с. 144–161; 18, с. 359–366; 19, с. 298–314; 20, с. 93–99; 21, с. 213–239; 22, с. 106–122; 23, с. 6–31; 24, с. 314–364; 25, с. 114–148; 26, с. 243–256, 259–266; 27, с. 313–330; 28, с. 506–532].

На рис. 7.2 показаны диаграммы рассеяния для комплекса физико-механических показателей вулканизатов.

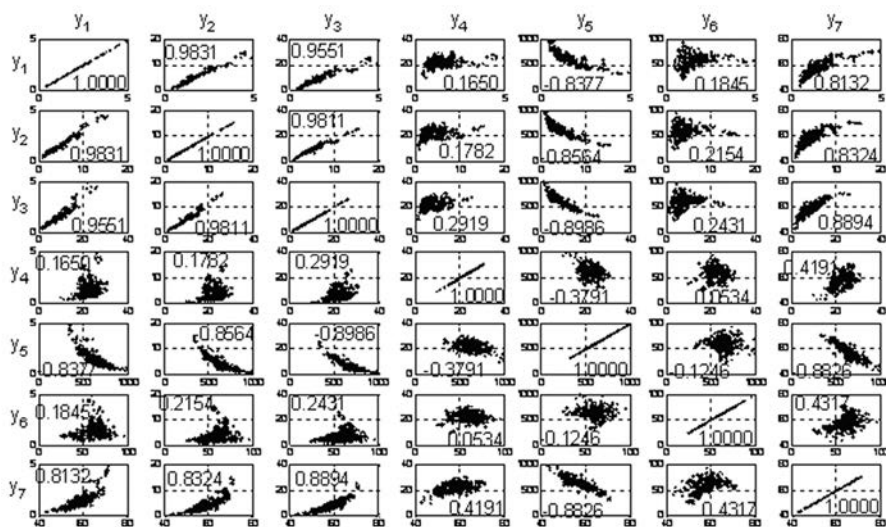


Рис. 7.2. Диаграммы рассеяния физико-механических показателей: y_1 — условное напряжение при удлинении 100%, МПа; y_2 — условное напряжение при удлинении 200%, МПа; y_3 — условное напряжение при удлинении 300%, МПа; y_4 — условная прочность при растяжении, МПа; y_5 — относительное удлинение при разрыве, %; y_6 — сопротивление раздиру, кН/м; y_7 — твердость по Shore A

Рассмотрены вулканизаты на основе бутадиен-стирольного каучука *SBR* 1500. Варьировалась продолжительность вулканизации (15–90 мин), температура вулканизации 150 °С. В рецептурах использовались различные марки технического углерода (*ISAF*, *LHI*, *HAF*, *CR*, *FEF*, *GPF*, *SRF* (50–70 масс. ч. на 100 масс. ч. каучука), масло Дютрех 55 (0–10 масс. ч. на 100 масс. ч. каучука).

Общее количество экспериментальных точек 358.

На графиках представлены соответствующие коэффициенты парной корреляции.

Наибольший уровень тесноты связи имеет место между напряжениями при удлинении 100, 200 и 300% ($r_{xy} = 0,955–0,983$). Напряжения характеризуются достаточно высоким уровнем корреляции с твердостью вулканизатов ($r_{xy} = 0,813–0,889$) и относительным удлинением (r_{xy} от $-0,838$ до $-0,899$). Уровень тесноты связи напряжений с сопротивлением раздиру и прочностью оценивается коэффициентом корреляции не больше 0,3. Это больше табличного значения, но прогностического значения не имеет.

Прочность резин дает чрезвычайно низкие характеристики тесноты связи: максимальное значение — корреляция с твердостью ($r_{xy} = 0,419$); рекордно низкое значение ($r_{xy} = 0,053$) имеет место в случае корреляции прочности с сопротивлением раздиру.

Надо указать на высокий уровень связи между относительным удлинением и твердостью ($r_{xy} = -0,883$).

Если рассчитать средние значения коэффициента корреляции (по модулю) для каждого показателя, получим следующие значения (рис. 7.3).

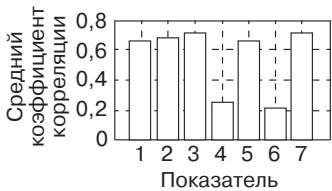


Рис. 7.3. Средние значения r_{xy}

Явственно виден низкий уровень корреляций с остальными показателями для условной прочности при растяжении и для сопротивления раздиру.

Пример. Получены значения условного напряжения при удлинении 200% (M_{200} , МПа) и твердости по Шору А (H) для 20 вулканизатов различного состава (табл. 7.1). Необходимо исследовать наличие линейной связи между этими двумя откликами.

Таблица 7.1. Свойства вулканизатов различного состава

Напряжение								Твердость							
1,2	2,1	2,6	2,5	2,7	2,0	3,0	4,0	48	52	53	54	54	54	57	58
3,9	4,0	2,9	5,5	6,2	6,5	6,5	9,1	58	59	58	60	62	63	63	67
		13,1	14,8	14,9	15,4					70	70	70	70		

Вычисления производятся в следующей последовательности.

Вычисляются средние значения для каждого отклика

Теория.

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^m y_i / m.$$

Решение.

$$\bar{M}_{200} = (1,2 + 2,1 + 2,6 + 2,5 + 2,7 + 2,0 + 3,0 + 4,0 + 3,9 + 4,0 + 2,9 + 5,5 + 6,2 + 6,5 + 6,5 + 9,1 + 13,1 + 14,8 + 14,9 + 15,4) / 20 = 6,145;$$

$$\bar{H} = (48 + 52 + 53 + 54 + 54 + 54 + 57 + 58 + 58 + 59 + 58 + 60 + 62 + 63 + 63 + 67 + 70 + 70 + 70 + 70) / 20 = 60,0$$

Определение сумм квадратов и произведений отклонений

Теория.

$$SS_x = \Sigma(x - x_{cp})^2;$$

$$SS_y = \Sigma(y - y_{cp})^2;$$

$$SS_{xy} = \Sigma(x - x_{cp})(y - y_{cp}).$$

Решение.

$$SS_M = (1,2 - 6,145)^2 + (2,1 - 6,145)^2 + (2,6 - 6,145)^2 + \dots + (14,9 - 6,145)^2 + (15,4 - 6,145)^2 = 425,37;$$

$$SS_H = (48 - 60)^2 + (52 - 60)^2 + (53 - 60)^2 + (70 - 60)^2 + (70 - 60)^2 = 858,00;$$

$$SS_{MH} = (1,2 - 6,145) \cdot (48 - 60) + (2,1 - 6,145) \cdot (52 - 60) + \dots + (15,4 - 6,145) \cdot (70 - 60) = 569,90.$$

Вычисление коэффициента парной корреляции

Теория.

$$r_{xy} = \frac{(\Sigma(x - x_{cp}) \cdot (y - y_{cp}))^2}{\Sigma(x - x_{cp})^2 \cdot \Sigma(y - y_{cp})^2}.$$

Решение.

$$r_{MH} = 569,90 / (425,37 \cdot 858,00)^{0,5} = 0,9433.$$

Анализ зависимости твердости от напряжения (А) и напряжения от твердости (Б), критерии качества модели, параметры и дисперсионный анализ (табл. 7.2, 7.3 и 7.4), получены с помощью *Table Curve* (количество точек $N = 20$; число коэффициентов $p = 2$).

Таблица 7.2. Критерии качества моделей

	Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
А	0,8899	0,8770	2,291	145,5
Б	0,8899	0,8770	1,613	145,5

Таблица 7.3. Параметры моделей

Параметр	Ошибка	t-критерий	Доверительные пределы	
$a = 51,7671$	0,85338	60,6612	49,9742	53,5600
$b = 1,3398$	0,11107	12,0621	1,1064	1,5731
$a' = -33,7081$	3,3236	-10,1420	-40,6908	-26,7255
$b' = 0,6642$	0,05507	12,0621	0,5485	0,7799

Таблица 7.4. Дисперсионный анализ

	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
А	Фактор	763,539	1	763,539	145,5
	Ошибка	94,461	18	5,2479	
	Сумма	858,00	19		
Б	Фактор	378,538	1	378,538	145,5
	Ошибка	46,831	18	2,6017	
	Сумма	425,37	19		

Параметры линейных моделей $y = a + b \cdot x$ и $x = a' + b' \cdot y$ (рис. 7.4)

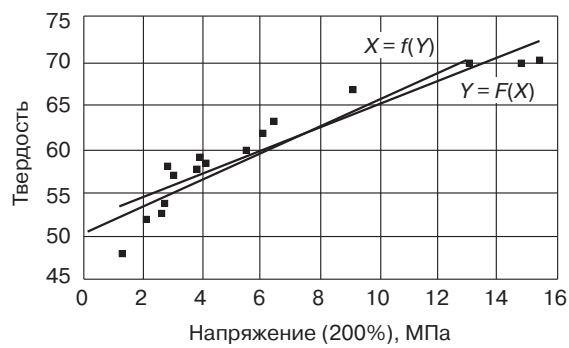


Рис. 7.4. Линии регрессии

Теория.

$$b = r_{xy} \times (\Sigma(y - y_{cp})^2 / \Sigma(x - x_{cp})^2)^{1/2};$$
$$b' = r_{xy} \times (\Sigma(x - x_{cp})^2 / \Sigma(y - y_{cp})^2)^{1/2};$$
$$a = y_{cp} - b x_{cp};$$

$$a' = x_{\text{ср}} - b'y_{\text{ср}}.$$

Решение.

$$b = 0,9433 \times (858,00 / 425,37)^{0,5} = 1,3398;$$

$$b' = 0,9433 \times (425,37 / 858,00)^{0,5} = 0,6642;$$

$$a = 60,0 - 1,3398 \times 6,145 = 51,7671;$$

$$a' = 6,145 - 0,6642 \times 60,0 = -33,7081,$$

Вычисление тангенса угла между линиями регрессии

Теория.

$$\text{tg}\alpha = b;$$

$$\text{tg}\beta = 1/b';$$

$$\text{tg}\varphi = \text{tg}(\beta - \alpha) = (\text{tg}\beta - \text{tg}\alpha) / (1 + \text{tg}\beta \times \text{tg}\alpha).$$

Решение.

$$\text{tg}\alpha = 1,3398;$$

$$\text{tg}\beta = 1/0,6642 = 1,5056;$$

$$\alpha = 0,9296; \beta = 0,9845; (\text{радиан});$$

$$\text{tg}\varphi = \text{tg}(0,9845 - 0,9296) = 0,0550;$$

$$\text{tg}\varphi = (1,5056 - 1,3398) / (1 + 1,5056 \times 1,3398) = 0,0550.$$

Интерпретация.

Наблюдаемое значение r_{xy} значимо отличается от нуля, если оно превосходит табличное при числе степеней свободы $v = m - 2$, где m — количество пар наблюдаемых величин (таблица XVII Приложения).

$$v = 20 - 2 = 18;$$

$$r_{(18;0,05)} = 0,444.$$

Поскольку $r_{mn} = 0,9433 > r_m$, можно утверждать, что наблюдаемое значение коэффициента корреляции значимо отличается от нуля.

Другой способ оценки тесноты связи основан на расчете отношения r_{xy} к средней квадратичной ошибке $S_r = (1 - r^2)/(m)^{1/2}$. Наличие парной корреляции принимается с вероятностью 95%, если $t = r/S_r > 2$.

$$S_r = (1 - 0,9433^2)/((20)^{0,5}) = 0,0246;$$

$$t = 0,9433/0,0246 = 38,35.$$

Полученная величина значительно превышает критическое значение ($38,35 < 2$), что свидетельствует о положительной парной корреляции.

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```
echo on
% КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ АНАЛИЗ
% ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ
echo off
x=input('ВВЕДИТЕ СТОЛБЕЦ ЗНАЧЕНИЙ 1-ой ПЕРЕМЕННОЙ «x» (в»[ ]»,
```

```

через»;»));
y=input('ВВЕДИТЕ СТОЛБЕЦ ЗНАЧЕНИЙ 2-ой ПЕРЕМЕННОЙ «у» (в>[]»,
через»;»));
x1=mean(x);y1=mean(y); - СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ;
x2=sum((x-x1).^2); - СУММЫ КВАДРАТОВ
y2=sum((y-y1).^2); ОТКЛОНЕНИЙ ОТ СРЕДНЕГО
z2=sum((x-x1).*(y-y1)); - СМЕШАННЫЙ МОМЕНТ;
echo on
% КОЭФФИЦИЕНТ ПАРНОЙ КОРРЕЛЯЦИИ
echo off
R=z2/((x2*y2)^.5);disp(R)- ВЫЧИСЛЕНИЕ И ВЫВОД НА ДИСПЛЕЙ КОЭФ-
ФИЦИЕНТА ПАРНОЙ КОРРЕЛЯЦИИ;
e=size(x)'; - РАЗМЕРНОСТЬ МАССИВА X;
f=e(1)-2; - ЧИСЛО СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ;
rt=[.997;.95;.878;.811;.754;...]; - КРИТИЧЕСКИЕ ЗНАЧЕНИЯ КОЭФФИ-
ЦИЕНТА КОРРЕЛЯЦИИ (фрагмент таблицы);
Rt=rt(f); - ВЫБОР КРИТЕРИЯ ИЗ ТАБЛИЦЫ;
dR=R-Rt; - РАЗНОСТЬ КРИТЕРИЕВ;
if dR>=0 ('МЕЖДУ ПЕРЕМЕННЫМИ СУЩЕСТВУЕТ ЛИНЕЙНАЯ КОРРЕЛЯЦИОН-
НАЯ СВЯЗЬ')
    else ('МЕЖДУ ПЕРЕМЕННЫМИ ОТСУТСТВУЕТ ЛИНЕЙНАЯ КОРРЕЛЯЦИОННАЯ
СВЯЗЬ')
end - ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ;
echo on
% КОЭФФИЦИЕНТЫ РЕГРЕССИИ УРАВНЕНИЙ  $y=a+b*x$  И  $x=a_1+b_1*y$  В ТАКОМ
ПОРЯДКЕ: [a, a1, b, b1]
echo off
b=z2/x2;b1=z2/y2;a=y1-b*x1;a1=x1-b1*y1;
c=[a a1 b b1]; disp(c) - РАСЧЕТ И ВЫВОД НА ЭКРАН ЗНАЧЕНИЙ КОЭФ-
ФИЦИЕНТОВ;
y3=a+b.*x; x3=a1+b1.*y; d=[y3 x3];
- РАССЧИТАННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ПЕРЕМЕННЫХ;
d1=atan(b);d2=atan(1/b1);tg=tan(d1-d2); - ВЫЧИСЛЕНИЕ ТАНГЕНСА
УГЛА МЕЖДУ ЛИНИЯМИ РЕГРЕССИИ;
echo on
% ТАНГЕНС УГЛА МЕЖДУ ЛИНИЯМИ РЕГРЕССИИ
echo off
disp(tg) - ЗНАЧЕНИЕ ТАНГЕНСА УГЛА;
pause
plot(x,y3,'-r',x3,y,'-g',x,y,'ok');grid;
title('Линии регрессии')
xlabel('X')
ylabel('Y');
gtext('Y=f(X)');
gtext('X=f(Y)') - ГРАФИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ТЕСНОТЫ СВЯЗИ.

```

Из рис. 7.4 отчетливо видно, что прямолинейные зависимости $y = a + bx$ и $x = a' + b'y$ представляют собой далеко не лучший вариант адекватного описания соотношения двух массивов чисел, фигурирующих в табл. 7.1.

Рассмотрим другие модели и назовем их «модели-оборотни», в том смысле что, как было для уравнения прямой: $y = a + bx \rightarrow x = (y - a)/b \rightarrow x = -a/b + 1/b \cdot y \rightarrow x = a' + b'y$ (из одного уравнения прямой линии получается такое же уравнение прямой линии, только x и y поменялись местами; $a' = -a/b$; $b' = 1/b$).

Большинство моделей «оборотнями», конечно, не являются.

Рассмотрим степенные модели: $y = ax^b$ и $x = a'y^{b'}$.

Здесь $y = ax^b \rightarrow x = (y/a)^{1/b} \rightarrow a^{-1/b}y^{1/b} \rightarrow x = a'y^{b'}$ ($a' = a^{-1/b}$; $b' = 1/b$).

Таблица 7.5. Критерии качества моделей

	Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
А	0,9759	0,9731	1,072	728,5
Б	0,9819	0,9798	0,653	978,2

Таблица 7.6. Параметры моделей

Параметр	Ошибка	t -критерий	Доверительные пределы	
$a = 47,6108$	0,47633	99,9532	46,6100	48,6115
$b = 0,1457$	0,00538	27,0744	0,1344	0,1570
$a' = 9,0653e-13$	1,11967e-12	0,8096	-1,4458e-12	3,2589e-12
$b' = 7,1534$	0,29313	24,4035	6,5375	7,7692

Таблица 7.7. Дисперсионный анализ

	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
А	Фактор	837,311	1	837,311	728,5
	Ошибка	20,689	18	1,1494	
	Сумма	858,00	19		
Б	Фактор	417,684	1	417,684	978,2
	Ошибка	7,686	18	0,427	
	Сумма	425,37	19		

Уровень качества модели $x = f(y)$ (Б) существенно выше (табл. 7.5), чем уровень качества модели $y = f_1(x)$ (А), ранг вышеозначенной модели (Б) – 13 (среди простых моделей по каталогу программы *Table Curve 2D*), тогда как ранг модели (А) равен 3. Почему так? Да потому, что в случае $x = f(y)$ превалируют модели логарифмического вида, но не «оборотни».

Теперь обратимся к модели $\ln y = a + b \ln x$ и $\ln x = a' + b' \ln y$.

Тогда $\ln y = a + b \ln x \rightarrow \ln x = (\ln y - a)/b \rightarrow \ln x = -a/b + \ln y/b \rightarrow \ln x = a' + b' \ln y$ ($a' = -a/b$; $b' = 1/b$).

Статистические данные представлены в табл. 7.8, 7.9, 7.10.

Таблица 7.8. Критерии качества моделей

	Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
А	0,9759	0,9730	1,073	727,8
Б	0,9816	0,9794	0,660	957,7

Таблица 7.9. Параметры моделей

Параметр	Ошибка	t-критерий	Доверительные пределы	
$a = 3,8641$	0,01005	384,6654	3,8430	3,8852
$b = 0,1454$	0,00541	26,8809	0,1340	0,1567
$a' = -27,2977$	1,1946	-22,8500	-29,8076	-24,7879
$b' = 7,0533$	0,2835	24,8756	6,4576	7,6490

Таблица 7.10. Дисперсионный анализ

	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
А	Фактор	837,293	1	837,293	727,8
	Ошибка	20,707	18	1,1504	
	Сумма	858,00	19		
Б	Фактор	417,523	1	417,523	957,7
	Ошибка	7,847	18	0,4360	
	Сумма	425,37	19		

Уровень качества модели $x = f(y)$ (Б) опять выше (табл. 7.8), чем уровень качества модели $y = f_1(x)$ (А), ранг модели (Б) – 14, ранг модели (А) – 4.

Теперь рассмотрим модели $y^{0,5} = a + bx^{0,5}$ и $x^{0,5} = a' + b'y^{0,5}$.

В этом случае: $y^{0,5} = a + bx^{0,5} \rightarrow x^{0,5} = (y^{0,5} - a)/b \rightarrow -a/b + y^{0,5}/b \rightarrow a' + b'y^{0,5}$ (опять $a' = -a/b$; $b' = 1/b$). Статистические данные можно видеть в табл. 7.11, 7.12, 7.13.

Таблица 7.11. Критерии качества моделей

	Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
А	0,9446	0,9381	1,625	307,0
Б	0,9602	0,9555	0,970	434,3

Таблица 7.12. Параметры моделей

Параметр	Ошибка	t-критерий	Доверительные пределы	
$a = 6,6690$	0,13526	49,3034	6,3848	6,9532
$b = 0,4606$	0,05257	8,7608	0,3501	0,5710
$a' = 15,1873$	1,8265	–8,3150	–19,0246	–11,3500
$b' = 2,2609$	0,2272	9,9517	1,7836	2,7382

Таблица 7.13. Дисперсионный анализ

	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
А	Фактор	810,474	1	810,474	307,0
	Ошибка	47,526	18	2,6403	
	Сумма	858,00	19		
Б	Фактор	408,441	1	408,441	434,3
	Ошибка	16,929	18	0,9405	
	Сумма	425,37	19		

Уровень качества модели $x = f(y)$ (Б) лишь несколько выше (табл. 7.11), чем уровень качества модели $y = f_1(x)$ (А), ранг модели (Б) – 48, ранг модели (А) – 14.

Теперь обратимся к моделям следующего вида $y^{-1} = a + b/x$ и $x^{-1} = a' + b'/y$.

Здесь $y^{-1} = a + b/x \rightarrow 1/x = (y^{-1} - a)/b \rightarrow x^{-1} = -a/b + y^{-1}/b \rightarrow a' + b'/y$ ($a' = -a/b$; $b' = 1/b$).

Статистические данные отображены в табл. 7.14, 7.15, 7.16.

Таблица 7.14. Критерии качества моделей

	Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
А	0,9128	0,9025	2,039	188,3
Б	0,9763	0,9735	0,749	741,0

Таблица 7.15. Параметры моделей

Параметр	Ошибка	<i>t</i> -критерий	Доверительные пределы	
$a = 0,013958$	0,0002008	69,5198	0,013536	0,014380
$b = 0,010543$	0,0007859	13,4164	0,008892	0,012194
$a' = -0,7797$	0,060850	-12,8132	-0,9075	-0,6518
$b' = 59,3359$	4,2303	14,0264	50,4484	68,2235

Таблица 7.16. Дисперсионный анализ

	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
А	Фактор	783,153	1	783,153	188,3
	Ошибка	74,847	18	4,1582	
	Сумма	858,00	19		
Б	Фактор	415,282	1	415,282	741,0
	Ошибка	10,088	18	0,5604	
	Сумма	425,37	19		

Уровень качества модели $x = f(y)$ (Б) несоизмеримо выше (табл. 7.14), чем уровень качества модели $y = f_1(x)$ (А), хотя ранг модели (Б) — 24, тогда как ранг модели (А) — 23.

Для порядка укажем ранги моделей прямых линий: 29 (А) и 68 (Б).

Во всех рассмотренных пяти случаях $b' = 1/b$, везде, кроме степенной модели, $a' = -a/b$.

Представляет интерес сопоставить между собой две модели: $y = ax^b$ и $\ln y = a + b \ln x$. Прологарифмируем первую из них и введем индексы, чтобы различать модели:

$\ln y = \ln a_1 + b_1 \ln x$ и $\ln y = a_2 + b_2 \ln x$. Если мы теперь потребуем, чтобы значения отклика (y) были одинаковыми и приравняем эти два выражения, то получим: $\ln a_1 = a_2$ и $b_1 = b_2$. Обратимся к рассмотренному выше примеру (табл. 7.6 и 7.9): $a_1 = 47,6108$; $\ln a_1 = 3,8631$; $a_2 = 3,8641$; $b_1 = 0,1457$; $b_2 = 0,1454$. Такие совпадения обусловлены высоким уровнем адекватности моделей.

С другой стороны, для прямых линий (табл. 7.3):

$$a = 51,7671; b = 1,3398; a' = -33,7081; b' = 0,6642.$$

$$\text{Расчет } a' = -a/b = -51,7671/1,3398 = -38,6379; b' = 1/b = 1/1,3398 = 0,7464.$$

Не лучший результат, но и не на порядок разница.

В случае криволинейной корреляции целесообразно вычислить корреляционное отношение. Достаточно грубо это можно сделать следующим образом [4, с. 205–207; 5, с. 230–235].

1. Выписываем значения x и y в порядке возрастания, например, величины y :

$$y = [48 \ 52 \ 53 \ 54 \ 54 \ 54 \ 57 \ 58 \ 58 \ 58 \ 59 \ 60 \ 62 \ 63 \ 63 \ 67 \ 70 \ 70 \ 70 \ 70];$$

$$x = [1,2 \ 2,1 \ 2,6 \ 2,7 \ 2,0 \ 2,5 \ 3,0 \ 4,0 \ 3,9 \ 2,9 \ 4,0 \ 5,5 \ 6,2 \ 6,5 \ 6,5 \ 9,1 \ 14,9 \ 15,4 \ 13,1 \ 14,8].$$

2. Разбиваем 20 значений x и 20 значений y на три группы, руководствуясь близкими значениями отклика y :

$$\text{По } y: [48 \ 52 \ 53 \ 54 \ 54 \ 54]; [57 \ 58 \ 58 \ 58 \ 59 \ 60 \ 62 \ 63 \ 63]; [67 \ 70 \ 70 \ 70 \ 70];$$

$$\text{по } x: [1,2 \ 2,1 \ 2,6 \ 2,7 \ 2,0 \ 2,5]; [3,0 \ 4,0 \ 3,9 \ 2,9 \ 4,0 \ 5,5 \ 6,2 \ 6,5 \ 6,5]; [9,1 \ 14,9 \ 15,4 \ 13,1 \ 14,8].$$

3. Для каждой из трех групп по x рассчитываем средние значения:

$$\bar{x}_1 = (1,2 + 2,1 + 2,6 + 2,7 + 2,0 + 2,5)/6 = 2,183;$$

$$\bar{x}_2 = (3,0 + 4,0 + 3,9 + 2,9 + 4,0 + 5,5 + 6,2 + 6,5 + 6,5)/9 = 4,722;$$

$$\bar{x}_3 = (9,1 + 14,9 + 15,4 + 13,1 + 14,8)/5 = 13,460.$$

3. Для каждой из трех групп по x рассчитываем так называемые внутренние суммы квадратов:

$$SS_1 = ((1,2 - 2,183)^2 + (2,1 - 2,183)^2 + (2,6 - 2,183)^2 + (2,7 - 2,183)^2 + (2,0 - 2,183)^2 + (2,5 - 2,183)^2)/6 = 0,2581;$$

$$SS_2 = ((3,0 - 4,722)^2 + (4,0 - 4,722)^2 + (3,9 - 4,722)^2 + (2,9 - 4,722)^2 + (4,0 - 4,722)^2 + (5,5 - 4,722)^2 + (6,2 - 4,722)^2 + (6,5 - 4,722)^2 + (6,5 - 4,722)^2)/9 = 1,9017;$$

$$SS_3 = ((9,1 - 13,460)^2 + (14,9 - 13,460)^2 + (15,4 - 13,460)^2 + (13,1 - 13,460)^2 + (14,8 - 13,460)^2)/5 = 5,3544.$$

4. Вычисляем средневзвешенную внутреннюю сумму квадратов:

$$\overline{SS}_1 = (6 \cdot 0,2581 + 9 \cdot 1,9017 + 5 \cdot 5,3544)/20 = 2,272.$$

5. Вычисляем средневзвешенное среднее значение x :

$$\bar{x} = (6 \cdot 2,183 + 9 \cdot 4,722 + 5 \cdot 13,460)/20 = 6,145.$$

6. Вычисляем средневзвешенную внешнюю сумму квадратов:

$$\overline{SS}_2 = (6 \cdot (2,183 - 6,145)^2 + 9 \cdot (4,722 - 6,145)^2 + 5 \cdot (13,460 - 6,145)^2)/20 = 18,998.$$

7. Расчет корреляционного отношения:

$$\eta_{xy}^2 = \overline{SS}_2 / (\overline{SS}_1 + \overline{SS}_2) = 18,998 / (18,998 + 2,272) = 0,893; \eta_{xy} = 0,893^{0,5} = 0,945.$$

Поскольку 0,945 близко к 1, корреляционная связь между условным напряжением 200% и твердостью вулканизатов близка к функциональной.

Заметим, что корреляционное отношение можно рассчитывать в случае криволинейной корреляции, тогда как коэффициент корреляции — только для линейной корреляции.

Возвращаясь к значениям коэффициентов корреляции, показанным на рис. 7.2, приведем интересную графическую интерпретацию корреляционных зависимостей [6, с. 141; 11, с. 437–439; 13, с. 296–297]. Пусть расстояние между точками A и B (гипотенуза) равно единице. Из точки A опускаем перпендикуляры и формируем прямоугольные треугольники. При этом косинус угла при вершине B соответствует коэффициенту корреляции.

В прямоугольном треугольнике косинус каждого острого угла представляет собой отношение прилежащего катета к гипотенузе. Если две линии пересекаются, проекция единицы длины одной линии на другую равна косинусу. Представим себе каждую шкалу измерений как прямую линию с положительным и отрицательным направлением и с нулевой точкой, которая совпадает с нулевой точкой всех других шкал. На рис. 7.5 изображены линиями шесть признаков, причем отрицательное направление показано только для одного из них. Прерывистые линии — это перпендикуляры, которые представляют собой проекции AB на другие шкалы. Рис. 7.5 иллюстрирует уровень корреляции условного напряжения при удлинении 100% (M_{100}) с другими показателями. Оно (M_{100}) имеет тесную положительную корреляцию с M_{200} ($r = 0,9831$) и с M_{300} ($r = 0,9551$), достаточно высокий уровень положительной корреляции с твердостью ($r = 0,8132$) и отрицательной корреляции с относительным удлинением при разрыве ($r = -0,8377$). M_{100} характеризуется слабо выраженной положительной корреляцией с условной прочностью при растяжении ($r = 0,1650$). Согласно этому методу, значение r имеет своим пределом $+1$, к которому оно приближается, когда две линии точно совпадают и согласовываются в направлении. Если они совпадают, но имеют противоположное направление, то $r = -1$. Когда линии составляют прямой угол, то $r = 0$.

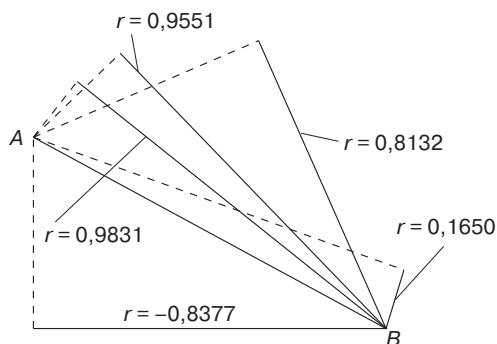


Рис. 7.5. Представление о корреляциях с помощью модели косинуса

О возможных опасностях при интерпретации результатов корреляционного анализа говорят представленные на рис. 7.6 линии регрессии, характеризующие

корреляцию между скоростью ультразвука и теплопроводностью в резинах на основе бутадиен-стирольного каучука при варьировании содержания оксида цинка и технического углерода.

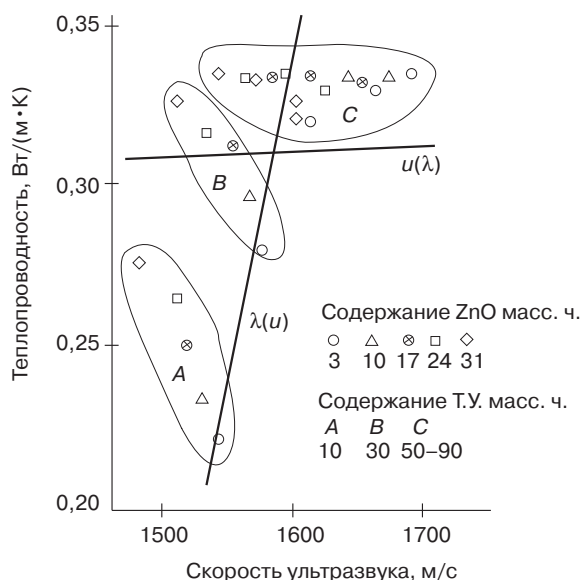


Рис. 7.6. Взаимосвязь скорости звука и теплопроводности

При малых дозировках технического углерода имеет место отрицательная корреляция между скоростью звука и теплопроводностью, что, видимо, обусловлено дисперсией ультразвука и переменной величиной длины свободного пробега фонона — ультразвукового кванта. При постоянном содержании технического углерода в системе увеличение содержания оксида цинка ведет к росту теплопроводности, но одновременно и к увеличению центров рассеяния фононов.

При больших дозировках технического углерода после завершения формирования каналов проводимости теплопроводность практически не зависит от скорости звука. Если же рассчитывать коэффициент корреляции по всем трем группам точек, то обнаруживается в целом слабая положительная корреляция между двумя исследованными показателями.

Есть, казалось бы, классическое уравнение Дебая–Киттеля:

$$\lambda = AuC\rho l, \quad (7.15)$$

где λ — теплопроводность; A — константа (например, $1/3$); u — скорость звука; C — теплоемкость; ρ — плотность; l — длина свободного пробега фонона. Налицо, вроде бы причинно обусловленная зависимость: чем больше u , тем больше λ (при прочих равных условиях), и наоборот.

А как эту корреляцию «раскачивать»?

Приведем такой пример: исследован комплекс характеристик ненаполненных резиновых смесей и резин на основе каучука СКИ-3. Количественный состав коэффициентов парной корреляции показан в табл. 7.17.

Исследованы корреляционные связи между четырьмя группами характеристик и внутри каждой из групп. В таблице выше главной диагонали показано количество значимых корреляций в ненаполненных системах, а ниже главной диагонали — количество незначимых корреляционных связей.

Таблица 7.17. Количественный состав коэффициентов парной корреляции для ненаполненных систем

Отклики	y_1	y_2	y_3	y_4
Физико-механические характеристики y_1	9	19	38	48
Структурные параметры y_2	18	9	12	37
Акустические параметры y_3	8	12	0	21
Вулканизационные характеристики y_4	19	19	13	5

Количество значимых парных корреляционных связей (239) составляет 68% от общего числа исследованных соотношений, тогда как количество незначимых связей (112) лишь 32%. В какой-то степени этот результат не является неожиданным, поскольку ненаполненные системы характеризуются сравнительно малым числом источников изменчивости.

Количественный состав корреляционных соотношений в наполненных системах дан в табл. 7.18.

Таблица 7.18. Количественный состав коэффициентов парной корреляции для наполненных систем на основе каучука СКМС-30РП

Отклики	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5
Физико-механические характеристики y_1	3	7	0	16	8
Структурные параметры y_2	5	—	—	1	0
Акустические параметры y_3	4	3	0	6	8
Теплофизические свойства y_4	2	2	0	0	1
Кинетические параметры y_5	21	6	14	7	9

Количество значимых парных корреляций (77) практически равно числу незначимых корреляций (76). Снижение общего уровня линейных корреляций связано с увеличением количества источников неоднородности в системах в результате введения наполнителей.

Для сравнения полученных результатов изучения корреляций для наполненных и ненаполненных систем была построена табл. 7.19, в которой ниже главной диагонали даны значения коэффициентов парной корреляции для ненаполненных систем, а выше главной диагонали — для наполненных систем.

Объектами изучения явились следующие отклики: y_1 — условное напряжение при удлинении 300%; y_2 — условная прочность при удлинении; y_3 — относительное удлинение при разрыве; y_4 — твердость; y_5 — коэффициент поглощения ультразвука; y_6 — эффективный модуль упругости; y_7 — эффективная вязкость; y_8 — тепловой эффект вулканизации; y_9 — константа скорости вулканизации; y_{10} — коэффициент асимметрии термического спектра вулканизации.

Коэффициент корреляции между коэффициентами корреляции составляет 0,40, что выше табличного значения $r_{(43, 0.05)} = 0,29$.

Таблица 7.19. Сравнение коэффициентов парной корреляции наполненных и ненаполненных систем

	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7	y_8	y_9	y_{10}
y_1	—	0,53	−0,79	0,81	0,88	0,86	0,91	0,54	−0,96	0,31
y_2	0,75	—	−0,64	0,85	0,75	0,77	0,75	0,63	−0,57	0,01
y_3	−0,62	−0,62	—	−0,94	−0,74	−0,93	0,90	0,13	0,13	0,26
y_4	0,79	0,91	−0,85	—	0,91	0,98	0,95	0,24	−0,81	−0,10
y_5	0,85	0,94	0,72	0,94	—	0,94	0,97	0,41	−0,85	0,07
y_6	0,77	0,75	−0,95	0,93	0,85	—	0,98	0,23	−0,85	−0,09
y_7	0,97	0,88	−0,79	0,95	0,97	0,92	—	0,74	−0,87	0,01
y_8	0,79	0,57	−0,83	0,81	0,51	0,87	0,87	—	0,55	0,61
y_9	0,74	0,90	−0,51	0,85	0,75	−0,12	0,80	0,51	—	−0,39
y_{10}	0,76	0,69	−0,08	0,24	0,70	0,45	0,67	0,39	0,68	—

Из этого следует, что при переходе к наполненным системам сохраняются общие тенденции изменения характеристик. Однако общее количество линейных связей в ненаполненных системах составило 34 из 45, а в наполненных — лишь 25 из 45. Это объясняется увеличением числа источников неоднородностей в наполненных системах, что ведет к снижению тесноты связи между свойствами.

Этот факт подтверждается также сравнением средних значений коэффициентов корреляции (по модулю): 0,73 — для наполненных против 0,63 — для ненаполненных систем.

В заключение приведем поля рассеяния и линии регрессии (рис. 7.7), полученные при изучении вулканизационных характеристик шинных резин (879 точек).

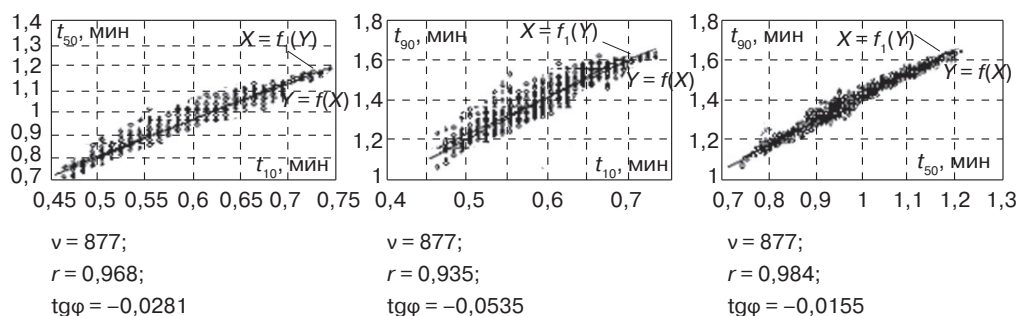


Рис. 7.7. Соотношение между вулканизационными характеристиками

Эти соотношения имеют чрезвычайно большое значение, поскольку определение вулканизационных характеристик лежит в основе экспресс-контроля технологических процессов смешения и вулканизации.

Следует подчеркнуть, что максимальная теснота связи наблюдается между характеристиками t_{50} и t_{90} не случайно, поэтому рекомендуется определять кинетические константы и использовать дифференциальное уравнение $d\beta/dt = k(1 - \beta)^n$ (β — степень вулканизации; k — константа скорости; n — порядок реакции) именно в этом диапазоне. Для всей кинетической кривой это уравнение не справедливо.

Приведем уравнения линий регрессии:

$$\begin{aligned} t_{50} &= 0,0464 + 1,5769 \cdot t_{10}; & t_{10} &= 0,9153 + 0,5954 \cdot t_{50}; \\ t_{90} &= 0,3182 + 1,8720 \cdot t_{10}; & t_{10} &= -0,0733 + 0,4673 \cdot t_{90}; \\ t_{90} &= 0,2398 + 1,2106 \cdot t_{50}; & t_{50} &= -0,1609 + 0,8003 \cdot t_{90}. \end{aligned}$$

7.2. Множественная корреляция

Переменная, по которой производится предсказание другой переменной, носит название предиктора (от англ. *predict* — предсказывать). В рассмотренных выше случаях использовался лишь один предиктор: в соотношении $t_{50} = 0,0464 + 1,5769 \cdot t_{10}$ предиктором является t_{10} , а в соотношении $t_{10} = 0,9153 + 0,5954 \cdot t_{50} - t_{50}$. Необходимо рассмотреть случай, когда таких предикторов несколько. Этот вариант статистической процедуры носит название *множественной корреляции*.

Уровень такого предсказания оценивается коэффициентом множественной корреляции [1, с. 146–150; 2, с. 688–705; 3, с. 79–84; 11, с. 445–447; 12, с. 135–145; 13, с. 298–316; 14, с. 110–113; 15, с. 184–201; 16, с. 64–72; 17, с. 178–198; 20, с. 113–118; 22, с. 124–125; 25, с. 149–158].

Мы определяем r_{ij} как коэффициент корреляции между x_i и x_j . Величина R (например, в случае трех предикторов) определится как детерминант:

$$R = \begin{vmatrix} r_{11} & r_{21} & r_{31} & r_{41} \\ r_{12} & r_{22} & r_{32} & r_{42} \\ r_{13} & r_{23} & r_{33} & r_{43} \\ r_{14} & r_{24} & r_{34} & r_{44} \end{vmatrix} \quad (7.16)$$

Теория детерминантов определяет минор R_{ij} как детерминант низшего порядка, который остается, когда i -я колонка и j -я строка вычеркиваются. Обозначая x_1 как зависимую переменную (x_2, x_3 и x_4 будут предикторами, с помощью которых мы будем прогнозировать x_1), коэффициент множественной корреляции определится следующим образом:

$$R_{1 \cdot 23 \dots k} = \sqrt{1 - \frac{R}{r_{11} R_{11}}}. \quad (7.17)$$

Запишем окончательный результат для R_{11} : $R_{11} = r_{22}r_{33}r_{44} + r_{32}r_{43}r_{24} + r_{42}r_{23}r_{34} - r_{42}r_{33}r_{24} - r_{22}r_{43}r_{34} - r_{32}r_{23}r_{44}$.

Детерминант четвертого порядка может быть выражен так:

$$R = r_{11}R_{11} - r_{12}R_{12} + r_{13}R_{13} - r_{14}R_{14}.$$

Теперь мы можем вычислить $R_{1 \cdot 23 \dots k}$. Целью этого расчета является определение того, насколько дополнительная информация x_3, x_4, \dots, x_k увеличивает нашу способность предсказывать x_1 по x_2 . *Важно подчеркнуть, что $R_{1 \cdot 23 \dots k}$ всегда больше r_{12} .*

Пример. Получены значения условной прочности при растяжении (σ , МПа), твердости (H) и плотности (ρ , г/см³) для 15 вулканизатов различного состава (табл. 7.20). Необходимо исследовать наличие линейной связи между тремя откликами с использованием методов множественной корреляции.

Таблица 7.20. Свойства вулканизатов различного состава

Прочность					Твердость					Плотность				
2,1	2,4	2,9	3,4	3,5	36	44	47	44	50	0,25	0,34	0,34	0,34	0,42
4,3	3,9	4,6	5,1	4,5	52	50	53	58	53	0,43	0,42	0,47	0,52	0,46
5,3	5,8	4,2	5,2	5,8	58	62	56	61	64	0,53	0,58	0,49	0,57	0,63

Вычисления производятся в следующей последовательности
Формируется матрица A коэффициентов парной корреляции
 Теория.

$$A = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{21} & r_{31} \\ r_{12} & r_{22} & r_{32} \\ r_{13} & r_{23} & r_{33} \end{pmatrix} \quad r_{ii} = r_{jj} = 1; r_{ij} = r_{ji}.$$

Решение.

	2,1	2,4	2,9	3,4	3,5	4,3	3,9	4,6	5,1	4,5	5,3	5,8	4,2	5,2	5,8
Z =	36	44	47	44	50	52	50	53	58	53	58	62	56	61	64
	0,25	0,34	0,34	0,34	0,42	0,43	0,42	0,47	0,52	0,46	0,53	0,58	0,49	0,57	0,63

Расчет в программе *MATLAB*:

```
>> q = corrcoef(z')
```

q =

1,0000	0,9563	0,9639		1,0000	0,9563	0,9639
0,9563	1,0000	0,9906	A =	0,9563	1,0000	0,9906
0,9639	0,9906	1,0000		0,9639	0,9906	1,0000

Интерпретация.

Наблюдаемое значение r_{xy} значительно отличается от нуля, если оно превосходит табличное значение при числе степеней свободы $v = m - 2$.

$v = 15 - 2 = 13$; $r_{(13; 0,05)} = 0,514$.

Коэффициенты парной корреляции во всех случаях превосходят табличное значение.

Вычисляются коэффициенты множественной корреляции для двух предикторов (по двум откликам предсказывается значение третьего).

Теория.

$$R_{1.23}^2 = 1 - \frac{\begin{vmatrix} r_{11} & r_{21} & r_{31} \\ r_{12} & r_{22} & r_{32} \\ r_{13} & r_{23} & r_{33} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} r_{22} & r_{32} \\ r_{23} & r_{33} \end{vmatrix}} \quad R_{2.13}^2 = 1 - \frac{\begin{vmatrix} r_{11} & r_{21} & r_{31} \\ r_{12} & r_{22} & r_{32} \\ r_{13} & r_{23} & r_{33} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} r_{11} & r_{31} \\ r_{13} & r_{33} \end{vmatrix}} \quad R_{3.12}^2 = 1 - \frac{\begin{vmatrix} r_{11} & r_{21} & r_{31} \\ r_{12} & r_{22} & r_{32} \\ r_{13} & r_{23} & r_{33} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} r_{11} & r_{21} \\ r_{12} & r_{22} \end{vmatrix}}$$

Решение.

Расчет в программе *MATLAB*:

```
>> q1=det(q)    q1 =    0.001324
>> q2=det([1 .9906;.9906 1])    q2 =    0.018712
>> q3=det([1 .9639;.9639 1])    q3 =    0.070897
>> q4=det([1 .9563;.9563 1])    q4 =    0.085490
>> q123=sqrt(1-q1/q2)    q123 =    0.9640
>> q213=sqrt(1-q1/q3)    q213 =    0.9906
>> q312=sqrt(1-q1/q4)    q312 =    0.9922
```

Вычисляется средняя квадратичная ошибка определения коэффициента множественной корреляции

Теория.

$S_R = (1 - R^2)/(m - p)^{1/2}$, где m — количество наблюдений, p — количество параметров уравнения корреляции ($p = 3$ для двух предикторов).

Решение.

$$S_R = (1 - 0,9640^2)/(15 - 3)^{1/2} = 0,0204 (\sigma);$$

$$S_R = (1 - 0,9906^2)/(15 - 3)^{1/2} = 0,0054 (H);$$

$$S_R = (1 - 0,9922^2)/(15 - 3)^{1/2} = 0,0045 (\rho).$$

Интерпретация.

Если R/S_R превышает 2, то с вероятностью 0,95 и выше можно утверждать значимость величины полученного расчетным путем коэффициента корреляции.

$$R/S_R = 0,9640/0,0204 = 47,25 (\sigma);$$

$$R/S_R = 0,9906/0,0054 = 183,4 (H);$$

$$R/S_R = 0,9922/0,0045 = 220,5 (\rho).$$

Все коэффициенты множественной корреляции значимы.

Вычисляются коэффициенты линейных моделей для предсказания отклика

Теория.

Используя программу *Table Curve 3D*, находим линейные модели для описания каждого из трех откликов как функции двух остальных.

Решение.

Уравнения регрессии:

$$\rho = -0,2010 + 0,0175\sigma + 0,01104H; H = 19,8988 + 0,1344\sigma + 70,8469\rho;$$

$$\sigma = -0,8501 + 0,01171H + 9,7968\rho.$$

Статистические критерии полученных уравнений

	Для ρ	Для H	Для σ
Коэффициент детерминации	0,9846	0,9814	0,9292
Скорректированный коэффициент	0,9803	0,9763	0,9099
Стандартная ошибка	0,01415	1,1331	0,3345
Критерий Фишера	382,5	316,4	78,7

Таким образом, прогнозирование значений твердости по двум предикторам (плотности и прочности) и плотности по двум предикторам (твердости и прочности) следует считать удовлетворительным, тогда как прогнозирование значений прочности с использованием в качестве предикторов плотности и твердости несколько менее корректно.

В табл. 7.21 представлены экспериментальные значения трех откликов (прочности σ , плотности ρ и твердости H). Даны рассчитанные значения твердости H_1 с одним предиктором (ρ) и H_2 с двумя предикторами (σ и ρ). И, наконец, вычислены суммы квадратов невязок (ΔH_1 и ΔH_2), представляющих собой разницу между экспериментальными и рассчитанными значениями твердости.

Таблица 7.21. Соотношение экспериментальных и рассчитанных значений твердости

s	2,1	2,4	2,9	3,4	3,5	4,3	3,9	4,6	5,1	4,5	5,3	5,8	4,2	5,2	5,8
r	0,25	0,34	0,34	0,34	0,42	0,43	0,42	0,47	0,52	0,46	0,53	0,58	0,49	0,57	0,63
H	36	44	47	44	50	52	50	53	58	53	58	62	56	61	64
H_1	37,9	44,4	44,4	44,4	50,2	50,9	50,2	53,8	57,4	53,1	58,1	61,7	55,2	61,0	65,4
ΔH_1	-1,9	-0,4	2,6	-0,4	-0,2	1,1	-0,2	-0,8	0,6	-0,1	-0,1	0,3	0,8	0,0	-1,4
H_2	37,9	44,3	44,4	44,4	50,1	50,9	50,2	53,8	57,4	53,1	58,2	61,8	55,2	61,0	65,3
ΔH_2	-1,9	-0,3	2,6	-0,4	-0,1	1,1	-0,2	-0,8	0,6	-0,1	-0,2	0,2	0,8	0,0	-1,3

$$SS_1 = \Delta H_1^2 = 15,67; SS_2 = \Delta H_2^2 = 15,41.$$

Разница, конечно, совсем небольшая, но имеет принципиальное значение. Чем больше предикторов, тем точнее прогноз, даже если эти предикторы, вроде бы, бесконечно далеки по своему физическому смыслу от прогнозируемого показателя.

На рис. 7.8 показана разница невязок (т. е., как уже отмечалось, отклонений экспериментальных и рассчитанных значений твердости) для случая одного предиктора и двух предикторов. Точки, лежащие выше оси абсцисс, свидетельствуют об улучшении прогноза при введении второго предиктора; точки, лежащие ниже оси абсцисс, говорят об ухудшении прогноза.



Рис. 7.8. Изменение прогноза

Рассмотрим, как это было в случае парных корреляций, «модели-оборотни». Примем (не принципиально), x_1 — прочность, x_2 — плотность, y — твердость.

$y = f(x_1, x_2)$ — модель А, $x_1 = f(y, x_2)$ — модель Б, $x_2 = f(y, x_1)$ — модель В.

Начнем с моделей, описываемых прямыми линиями (табл. 7.22).

Таблица 7.22. Сопоставление экспериментальных и рассчитанных значений откликов (модели $H = a + b\sigma + c\rho$; $\sigma = a' + b'H + c'\rho$, $\rho = a'' + b''H + c''\sigma$)

H_s	36	44	47	44	50	50	56	52	53	53	58	61	58	64	62
H_p	37,9	44,3	44,4	44,4	50,1	50,2	55,2	50,9	53,1	53,8	57,4	61,0	58,2	65,3	61,8
ΔH	-1,9	-0,3	2,6	-0,4	-0,1	-0,2	0,8	1,1	-0,1	-0,8	0,6	0,0	-0,2	-1,3	0,2
$\Delta, \%$	-5,3	-0,7	5,6	-1,0	-0,2	-0,4	1,5	2,0	-0,2	-1,5	1,0	0,0	-0,3	-2,0	0,4
σ_s	2,1	3,4	2,4	2,9	3,9	3,5	4,3	4,6	4,5	4,2	5,3	5,1	5,2	5,8	5,8
σ_p	2,0	3,0	3,0	3,0	3,9	3,9	4,0	4,4	4,3	4,6	5,0	4,9	5,4	5,6	6,1
$\Delta\sigma$	0,1	0,4	-0,6	-0,1	0,0	-0,4	0,3	0,2	0,2	-0,4	0,3	0,2	-0,2	0,2	-0,3
$\Delta, \%$	3,8	11,9	-24,8	-4,5	1,3	-10,0	7,6	4,9	4,9	-9,7	5,3	3,5	-4,8	4,2	-4,7
ρ_s	0,25	0,34	0,34	0,34	0,42	0,42	0,49	0,43	0,46	0,47	0,52	0,57	0,53	0,63	0,58
ρ_p	0,23	0,33	0,37	0,34	0,41	0,42	0,49	0,45	0,46	0,46	0,53	0,56	0,53	0,61	0,59
$\Delta\rho$	0,02	0,01	-0,03	0,00	0,01	0,00	0,00	-0,02	0,00	0,01	-0,01	0,01	0,00	0,02	-0,01
Δ	6,7	3,9	-8,5	-1,3	1,8	0,1	-0,2	-4,3	-0,7	1,1	-1,7	1,1	-0,4	3,6	-0,9

Суммы квадратов отклонений экспериментальных значений от расчетных:

$$SS_H = \Sigma \Delta H^2 = 15,41; \quad SS_\sigma = \Sigma \Delta \sigma^2 = 1,343; \quad SS_\rho = \Sigma \Delta \rho^2 = 0,002401.$$

Максимальные отклонения (%) по твердости — 5,3, 5,6; по прочности — 10,0, 11,9, 24,8; по плотности — 6,7, 8,5.

Линейные модели, представленные логарифмами откликов (табл. 7.23).

Таблица 7.23. Сопоставление экспериментальных и рассчитанных значений откликов (модели $\ln H = a + b \ln \sigma + c \ln \rho$; $\ln \sigma = a' + b' \ln H + c' \ln \rho$, $\ln \rho = a'' + b'' \ln H + c'' \ln \sigma$)

H_s	36	44	47	44	50	50	56	52	53	53	58	61	58	64	62
H_p	36,7	44,4	44,4	44,3	50,5	50,5	55,5	51,2	53,4	54,1	57,5	60,9	58,2	64,7	61,5
ΔH	-0,7	-0,4	2,6	-0,3	-0,5	-0,5	0,5	0,8	-0,4	-1,1	0,5	0,1	-0,2	-0,7	0,5
$\Delta, \%$	-2,1	-0,9	5,6	-0,8	-1,0	-1,0	0,9	1,5	-0,7	-2,0	0,8	0,2	-0,4	-1,2	0,8
σ_s	2,1	3,4	2,4	2,9	3,9	3,5	4,3	4,6	4,5	4,2	5,3	5,1	5,2	5,8	5,8
σ_p	2,1	3,0	3,0	2,9	3,8	3,8	3,9	4,4	4,2	4,6	5,0	4,9	5,5	5,9	6,2
$\Delta\sigma$	0,1	0,4	-0,6	-0,1	0,0	-0,4	0,3	0,2	0,2	-0,4	0,3	0,2	-0,2	0,2	-0,3
$\Delta, \%$	2,0	12,8	-23,5	-1,6	2,2	-8,9	9,0	5,2	5,6	-8,9	5,2	3,8	-5,3	3,6	-6,5
ρ_s	0,25	0,34	0,34	0,34	0,42	0,42	0,49	0,43	0,46	0,47	0,52	0,57	0,53	0,63	0,58
ρ_p	0,25	0,33	0,37	0,34	0,41	0,42	0,49	0,44	0,46	0,46	0,53	0,57	0,53	0,61	0,59
$\Delta\rho$	0,00	0,01	-0,03	0,00	0,01	0,00	0,00	-0,01	0,00	0,01	-0,01	0,00	0,00	0,02	-0,01
Δ	1,8	3,5	-8,2	-1,0	2,4	1,0	0,0	-3,3	0,3	2,1	-1,3	0,7	0,1	2,8	-1,2

Суммы квадратов отклонений экспериментальных значений от расчетных:

$$SS_H = \Sigma \Delta H^2 = 11,49; SS_\sigma = \Sigma \Delta \sigma^2 = 1,403; SS_\rho = \Sigma \Delta \rho^2 = 0,001785.$$

Максимальные отклонения (%) по твердости — 5,6; по прочности — 12,8, 23,5; по плотности — 8,2.

Сравнивая результаты аппроксимации корреляции моделями в логарифмах с моделями прямых линий регрессии, можно заключить, что при переходе к логарифмическому масштабу уровень тесноты связи возрастает для твердости и плотности и несколько падает — для прочности.

Линейные модели, представленные откликами в степени 0,5 (табл. 7.24).

Таблица 7.24. Сопоставление экспериментальных и рассчитанных значений откликов (модели $H^{0,5} = a + b\sigma^{0,5} + c\rho^{0,5}$; $\sigma^{0,5} = a' + b'H^{0,5} + c'\rho^{0,5}$, $\rho^{0,5} = a'' + b''H^{0,5} + c''\sigma^{0,5}$)

H_s	36	44	47	44	50	50	56	52	53	53	58	61	58	64	62
H_p	37,3	44,3	44,3	44,4	50,3	50,3	55,4	51,1	53,2	53,9	57,5	61,0	58,2	65,1	61,7
ΔH	-1,3	-0,3	2,7	-0,4	-0,3	-0,3	0,6	0,9	-0,2	-0,9	0,5	0,0	-0,2	-1,0	0,3
$\Delta, \%$	-3,5	-0,8	5,6	-0,8	-0,6	-0,6	1,1	1,8	-0,4	-1,8	0,9	0,0	-0,3	-1,7	0,5
σ_s	2,1	3,4	2,4	2,9	3,9	3,5	4,3	4,6	4,5	4,2	5,3	5,1	5,2	5,8	5,8
σ_p	2,0	3,0	3,0	3,0	3,8	3,8	3,9	4,4	4,3	4,6	5,0	4,9	5,5	5,6	6,1
$\Delta \sigma$	0,1	0,4	-0,6	-0,1	0,1	-0,3	0,4	0,2	0,2	-0,4	0,3	0,2	-0,3	0,2	-0,3
$\Delta, \%$	2,5	12,3	-24,2	-2,9	1,8	-9,5	8,4	5,0	5,3	-9,2	5,2	3,6	-5,0	3,9	-5,6
ρ_s	0,25	0,34	0,34	0,34	0,42	0,42	0,49	0,43	0,46	0,47	0,52	0,57	0,53	0,63	0,58
ρ_p	0,24	0,33	0,37	0,34	0,41	0,42	0,49	0,45	0,46	0,46	0,53	0,56	0,53	0,61	0,59
$\Delta \rho$	0,01	0,01	-0,03	0,00	0,01	0,00	0,00	-0,02	0,00	0,01	-0,01	0,01	0,00	0,02	-0,01
Δ	3,8	3,6	-8,4	-1,2	2,0	0,5	-0,1	-3,9	-0,2	1,6	-1,5	1,0	-0,2	3,3	-0,9

Суммы квадратов отклонений экспериментальных значений от расчетных:

$$SS_H = \Sigma \Delta H^2 = 12,89; SS_\sigma = \Sigma \Delta \sigma^2 = 1,363; SS_\rho = \Sigma \Delta \rho^2 = 0,002036.$$

Максимальные отклонения (%) по твердости — 5,6; по прочности — 12,3, 24,2; по плотности — 8,4.

При сравнении результатов представления корреляции выбранными моделями с моделями прямых линий регрессии можно заключить, что уровень тесноты связи возрастает для твердости и плотности и несколько падает — для прочности. А при сравнении с логарифмической аппроксимацией, наоборот, уровень тесноты связи падает для твердости и плотности и чуть-чуть возрастает — для прочности.

Последнее представление в виде обратных величин (табл. 7.25).

Таблица 7.25. Сопоставление экспериментальных и рассчитанных значений откликов (модели $H^{-1} = a + b\sigma^{-1} + c\rho^{-1}$; $\sigma^{-1} = a' + b'H^{-1} + c'\rho^{-1}$, $\rho^{-1} = a'' + b''H^{-1} + c''\sigma^{-1}$)

H_a	36	44	47	44	50	50	56	52	53	53	58	61	58	64	62
H_p	36,1	44,6	44,6	44,5	50,9	50,9	55,7	51,6	53,7	54,3	57,5	60,5	58,1	63,7	61,0
ΔH	-0,1	-0,6	2,4	-0,5	-0,9	-0,9	0,3	0,4	-0,7	-1,3	0,5	0,5	-0,1	0,3	1,0
Δ , %	-0,2	-1,3	5,2	-1,2	-1,8	-1,7	0,6	0,8	-1,3	-2,5	0,8	0,9	-0,2	0,5	1,6
σ_a	2,1	3,4	2,4	2,9	3,9	3,5	4,3	4,6	4,5	4,2	5,3	5,1	5,2	5,8	5,8
σ_p	2,1	2,9	2,9	2,9	3,8	3,8	3,9	4,3	4,2	4,5	5,0	4,9	5,5	5,6	6,3
$\Delta\sigma$	0,0	0,5	-0,5	0,0	0,1	-0,3	0,4	0,3	0,3	-0,3	0,3	0,2	-0,3	0,2	-0,5
Δ , %	1,7	13,8	-22,2	0,6	3,3	-7,7	10,0	5,9	6,4	-8,3	5,1	3,9	-6,1	2,7	-8,7
ρ_a	0,25	0,34	0,34	0,34	0,42	0,42	0,49	0,43	0,46	0,47	0,52	0,57	0,53	0,63	0,58
ρ_p	0,25	0,33	0,37	0,34	0,41	0,41	0,49	0,44	0,45	0,46	0,53	0,57	0,53	0,63	0,59
$\Delta\rho$	0,00	0,01	-0,03	0,00	0,01	0,01	0,00	-0,01	0,01	0,01	-0,01	0,00	0,00	0,00	-0,01
Δ	-0,5	3,8	-7,5	-0,3	3,2	2,0	0,2	-2,3	1,3	3,2	-1,4	-0,3	0,2	0,6	-2,4

Суммы квадратов отклонений экспериментальных значений от расчетных:

$$SS_H = \Sigma \Delta H^2 = 12,28; SS_\sigma = \Sigma \Delta \sigma^2 = 1,551; SS_\rho = \Sigma \Delta \rho^2 = 0,001676.$$

Максимальные отклонения (%) по твердости — 5,2; по прочности — 10,0, 13,8, 22,2; по плотности — 7,5. Последняя аппроксимация обеспечивает максимальную тесноту связи для значений плотности.

Таким образом, для анализа твердости наилучшие возможности обеспечивает логарифмическое преобразование, в случае плотности максимальную тесноту связи дает представление откликов в виде обратных величин. Предсказание прочности никакими (из рассмотренных) преобразованиями улучшить не удалось.

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```
echo on
% КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ АНАЛИЗ МНОЖЕСТВЕННАЯ КОРРЕЛЯЦИЯ
echo off
echo on
% ВАМ НЕОБХОДИМО ВВЕСТИ МАТРИЦУ РЕЗУЛЬТАТОВ ПО ТАКОЙ СХЕМЕ:
% в квадратных скобках записать через пробелы значения 1-го от-
% клика (свойства), затем вставить «;», потом (опять через пробелы) - 2-го
% и т.д. и не забыть в конце поставить скобку ]
echo off
```

```
x=input('ВВОДИТЕ');
x=x'; - операция транспонирования;
echo on
% МАТРИЦА КОЭФФИЦИЕНТОВ ПАРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ
echo off
r=corrcoef(x); - РАСЧЕТ И ВЫВОД НА ДИСПЛЕЙ
disp(r) КОЭФФИЦИЕНТОВ ПАРНОЙ КОРРЕЛЯЦИИ;
e=size(x)';n=e(1); - КОЛИЧЕСТВО ЗНАЧЕНИЙ ДЛЯ КАЖДОГО СВОЙСТВА;
k=e(2); - КОЛИЧЕСТВО СВОЙСТВ;
t=inv(r)*det(r);d=diag(t);
f=n-2; - ЧИСЛО СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ;
rt=[.997;.95;.878;...]; - КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ
rt=[rt;.312;.308;.304;...]; (фрагмент таблицы);
echo on
% ТАБЛИЧНОЕ ЗНАЧЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ПАРНОЙ КОРРЕЛЯЦИИ
echo off
Rt=rt(f); - ВЫБОР КРИТЕРИЯ ИЗ ТАБЛИЦЫ
disp(Rt) И ВЫЗОВ НА ЭКРАН;
echo on
% КОЭФФИЦИЕНТЫ МНОЖЕСТВЕННОЙ КОРРЕЛЯЦИИ
echo off
r1=[sqrt(1-det(r)./d)]; - РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ
disp(r1) МНОЖЕСТВЕННОЙ КОРРЕЛЯЦИИ;
pause
for j=1:k,
    z=x;
    for i=1:n,
        z(i,j)=1;
    end
    b(:,j)=inv(z'*z)*(z'*x(:,j));
end - РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ РЕГРЕССИИ
echo on
% КОЭФФИЦИЕНТЫ УРАВНЕНИЙ МНОЖЕСТВЕННОЙ РЕГРЕССИИ
%1-я строка: y1= a1 + a2*y2 + a3*y3 + a4*y4 + ...
%2-я строка: y2= b1*y1 + b2 + b3*y3 + b4*y4 + ...
%3-я строка: y3= c1*y1 + c2*y2 + c3 + c4*y4 + ...
и т.д.
echo off
b; disp(b)
pause
for j=1:k,
    z=x;
    for i=1:n,
        z(i,j)=1;
    end
```

```

y(:,j)=z*b(:,j); - РАССЧИТАННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ;
end
echo on
% ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ОТКЛИКА
echo off
x; disp(x)
pause
echo on
% РАССЧИТАННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ОТКЛИКА
echo off
y; disp(y)
pause
echo on
%СУММА КВАДРАТОВ ОТКЛОНЕНИЙ РАСЧЕТНЫХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ
echo off
l=x-y;s2=diag(1'*1);
pp=s2';disp(pp)

```

Рис. 7.9 характеризует взаимосвязь вулканизационных характеристик шинных резин (температура вулканизации 200 °С). Сверху показана плоскость в координатах $t_{90} = f(t_{10}, t_{50})$, а снизу — невязки для значений вулканизационной характеристики t_{90} .

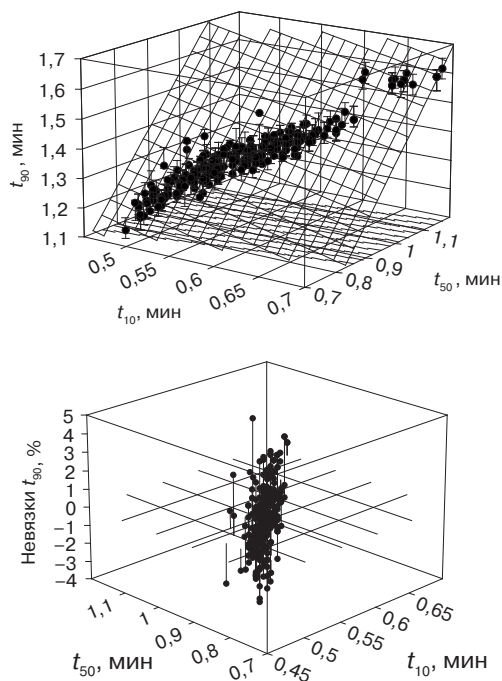


Рис. 7.9. Корреляция вулканизационных характеристик

Статистическая обработка показана в табл. 7.26, 7.27 и 7.28.

Таблица 7.26. Критерии качества модели $t_{90} = a + bt_{10} + ct_{50}$

Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
0,9654	0,9650	0,01783	3513,16

Таблица 7.27. Параметры модели

Параметр	Ошибка	t-критерий	95% доверительные пределы	
$a = 0,259153$	0,0131274	19,7413	0,233299	0,285006
$b = -0,673293$	0,0933539	-7,2123	-0,857146	-0,489440
$c = 1,588216$	0,0574553	27,6426	1,475061	1,701369

Таблица 7.28. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	2,233846	2	1,116923	3513,16
Остаток	0,080117	252	0,00031792529	
Сумма	2,3139631	254		
Нелинейность	0,032673	96	0,00034034	1,11906
Ошибка	0,047444	156	0,00030413	

На рис. 7.10 показана плоскость в координатах $t_{50} = f(t_{10}, t_{90})$ и различия между экспериментальными и рассчитанными значениями вулканизационной характеристики t_{50} .

Статистическая обработка дана в табл. 7.29, 7.30 и 7.31.

Таблица 7.29. Критерии качества модели $t_{50} = a + bt_{10} + ct_{90}$

Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
0,9848	0,9846	0,00974	8179,93

Таблица 7.30. Параметры модели

Параметр	Ошибка	t-критерий	95% доверительные пределы	
$a = -0,112267$	0,0089896	-12,4886	-0,129971	-0,094563
$b = 0,709234$	0,0337394	21,0210	0,642787	0,775681
$c = 0,473485$	0,0171288	27,6426	0,439751	0,507219

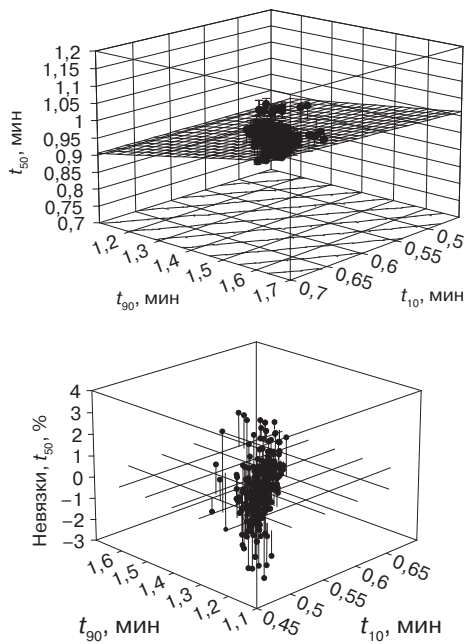


Рис. 7.10. Корреляция вулканизационных характеристик

Таблица 7.31. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	1,550607	2	0,775303	8179,93
Остаток	0,023885	252	9,478117e-05	
Сумма	1,574492	254		
Нелинейность	0,015287	135	0,00011324	1,54093
Ошибка	0,008598	117	7,348596e-05	

Рис. 7.11 отображает плоскость в координатах $t_{10} = f(t_{50}, t_{90})$ и невязки для t_{10} .

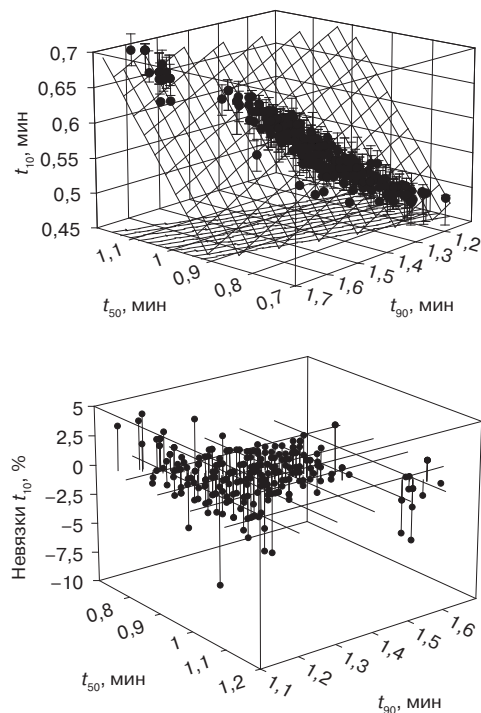


Рис. 7.11. Корреляция вулканизационных характеристик

Статистическая обработка дана в табл. 7.32, 7.33 и 7.34.

Таблица 7.32. Критерии качества модели $t_{50} = a + bt_{10} + ct_{90}$

Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
0,9493	0,9487	0,01095	2359,10

Таблица 7.33. Параметры модели

Параметр	Ошибка	t -критерий	95% доверительные пределы	
$a = 0,073280$	0,0120134	6,0999	0,049621	0,096940
$b = 0,897905$	0,0427148	21,0210	0,813782	0,982028
$c = -0,254122$	0,0352347	-7,2123	-0,323514	-0,184730

Таблица 7.34. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	0,566160	2	0,283080	2359,1
Остаток	0,030239	252	0,00011999	
Сумма	0,596399	254		
Нелинейность	0,021641	135	0,00016030	2,1814
Ошибка	0,008598	117	7,348596e-05	

Уровень коэффициентов парных корреляций для исследуемых откликов следующий (табл. 7.35).

Таблица 7.35. Коэффициенты парных корреляций между вулканизационными характеристиками

Характеристика	t_{10}	t_{50}	t_{90}
t_{10}	1,0000	0,9690	0,9353
t_{50}	0,9690	1,0000	0,9843
t_{90}	0,9353	0,9843	1,0000

Анализируя полученные результаты, можно утверждать, что наиболее достоверно прогнозируется вулканизационная характеристика t_{50} , существенно ниже предсказательная способность для t_{90} и особенно для t_{10} .

7.3. Ковариационный анализ

Иногда случается, что в ходе проведения аккуратно спланированного эксперимента встречается некоторая неконтролируемая переменная, меняющаяся при повторении эксперимента. Измеряя отдельные результаты опытов, мы должны измерять и величину этой навязанной нам переменной во время каждого повторения. Таким образом, данные, которые надо обработать, состоят из пар наблюдений. Перед проведением обычного дисперсионного анализа нужно устранить влияние второй переменной методом, аналогичным регрессионному анализу. Метод обращения с этими парами наблюдений называется *ковариационным анализом*.

Ковариационный анализ можно характеризовать как метод проверки однородности в задачах, включающих две или более коррелированных переменных. Алгебраические выкладки оказываются здесь в точности такими же, как в дисперсионном анализе. По существу, мы будем разлагать сумму произведений отклонений переменных от их средних на компоненты, связанные с разными факторами.

Ковариационный анализ — один из методов, используемых в ряде случаев для повышения точности эксперимента. Представим себе, что в эксперименте с переменной отклика y существует еще одна переменная, например x и y линейно связано с x . Кроме того, x не может контролироваться экспериментатором, но может наблюдаться вместе с y . Такая переменная x называется ковариатой, или сопутствующей переменной. При ковариационном анализе наблюдаемая переменная «исправляется» на линейный эффект сопутствующей переменной. Если такое исправление не производить, то сопутствующая переменная могла бы завязать средний квадрат ошибки и затруднить обнаружение истинных различий отклика, обусловленных обработками. Таким образом, ковариационный анализ представляет собой метод внесения поправки на эффекты неконтролируемой мешающей переменной и сочетает в себе дисперсионный и регрессионный анализы [29, с. 341–350; 30, с. 272–282; 31, с. 63–69; 32, с. 226–252; 33, с. 341–352].

Основная процедура ковариационного анализа будет рассматриваться на примере плана однофакторного эксперимента с одной сопутствующей переменной. В предположении, что между откликом и сопутствующей переменной существует линейная связь, соответствующая статистическая модель имеет вид:

$$y_{ij} = \mu + \tau_i + \beta(x_{ij} - \bar{x}_{..}) + \varepsilon_{ij} \\ i = 1, 2, \dots, a; \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (7.18)$$

Здесь y_{ij} — j -е наблюдение переменной отклика при i -й обработке (уровне единственного фактора); x_{ij} — измерение ковариаты или сопутствующей переменной, соответствующее y_{ij} (т. е. ij -й опыт); $\bar{x}_{..}$ — среднее арифметическое значений x_{ij} ; μ — генеральное среднее (математическое ожидание общего среднего); τ_i — эффект i -й обработки; β — коэффициент линейной регрессии, указывающий на зависимость y_{ij} от x_{ij} ; ε_{ij} — случайная ошибка.

Мы предполагаем, что ошибки являются нормально распределенными случайными величинами, угловой коэффициент $\beta \neq 0$, и истинная связь между y_{ij} и x_{ij} линейна, коэффициенты регрессии для всех обработок одинаковы, эффекты обработок при сложении дают ноль ($\sum_{i=1}^a \tau_i = 0$) и обработки не влияют на сопутствующую переменную.

Непосредственно из выражения (7.18) видно, что модель ковариационного анализа сочетает в себе линейные модели, используемые в дисперсионном и регрессионном анализах, а именно, в нее входят эффекты обработок τ_i , как в однофакторном дисперсионном анализе, и коэффициент регрессии β , как в регрессионном анализе. Сопутствующая переменная в выражении (7.18) взята в виде $(x_{ij} - \bar{x}_{..})$, а не x_{ij} с тем, чтобы параметр μ сохранил смысл математического ожидания общего среднего. Эту модель можно было бы записать и как

$$y_{ij} = \mu' + \tau_i + \beta x_{ij} + \varepsilon_{ij}; \\ i = 1, 2, \dots, a; \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (7.19)$$

где μ' — постоянная, отличающаяся от математического ожидания общего среднего, равного для этой модели $\mu' + \beta \bar{x}_{..}$.

При обсуждении ковариационного анализа нам будут удобны следующие обозначения:

$$S_{yy} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_{..})^2 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n y_{ij}^2 - y_{..}^2 / (an); \quad (7.20)$$

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_{..})^2 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n x_{ij}^2 - x_{..}^2 / (an); \quad (7.21)$$

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_{..})(y_{ij} - \bar{y}_{..}) = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n x_{ij} y_{ij} - x_{..} y_{..} / (an); \quad (7.22)$$

$$T_{yy} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{i.} - \bar{y}_{..})^2 = \left(\sum_{i=1}^a y_{i.}^2 \right) / n - y_{..}^2 / (an); \quad (7.23)$$

$$T_{xx} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{i.} - \bar{x}_{..})^2 = \left(\sum_{i=1}^a x_{i.}^2 \right) / n - x_{..}^2 / (an); \quad (7.24)$$

$$T_{xy} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{i.} - \bar{x}_{..})(y_{i.} - \bar{y}_{..}) = \left(\sum_{i=1}^a x_{i.} y_{i.} \right) / n - x_{..} y_{..} / (an); \quad (7.25)$$

$$E_{yy} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{ij} - y_{i.})^2 = SS_{yy} - T_{yy}; \quad (7.26)$$

$$E_{xx} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - x_{i.})^2 = SS_{xx} - T_{xx}; \quad (7.27)$$

$$E_{xy} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - x_{i.})(y_{ij} - y_{i.}) = SS_{xy} - T_{xy}. \quad (7.28)$$

В общем случае $S = T + E$, где символ S использован для обозначения общих сумм квадратов и смешанных произведений отклонений от общего среднего, а символы T и E — для сумм квадратов и смешанных произведений для обработок и ошибки соответственно. Суммы квадратов для x и y должны быть неотрицательны; суммы смешанных произведений xy могут иметь любой знак.

При ковариационном анализе в переменную отклика вносится исправление на эффект сопутствующей переменной. Так, оценки по методу наименьших квадратов μ , τ_i и β в уравнении (7.18) имеют вид: $\hat{\mu} = \bar{y}_{..}$, $\hat{\tau}_i = \bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..} - \hat{\beta}(\bar{x}_{i.} - \bar{x}_{..})$ и $\hat{\beta} = E_{xy} / E_{xx}$.

Сумма квадратов ошибки при такой модели имеет вид:

$$SS_{\text{ом}} = E_{yy} - (E_{xy})^2 / E_{xx} \quad (7.29)$$

и обладает $a(n-1) - 1$ степенью свободы. Дисперсия (средний квадрат) ошибки эксперимента оценивается выражением $MS_{\text{ом}} = SS_{\text{ом}} / (a(n-1) - 1)$.

Предположим теперь, что эффект обработок отсутствует. Тогда модель (7.18) переходит в

$$y_{ij} = \mu + \beta(x_{ij} - \bar{x}_{..}) + \varepsilon_{ij} \quad (7.30)$$

а МНК-оценки μ и β преобразуются в $\hat{\mu} = \bar{y}_{..}$ и $\hat{\beta} = S_{xy}/S_{xx}$. Сумма квадратов ошибки в такой упрощенной модели

$$SS'_{\text{ош}} = S_{yy} - (S_{xy})^2/S_{xx} \quad (7.31)$$

обладает $an - 2$ степенями свободы. В этом выражении вычитаемое $(S_{xy})^2/S_{xx}$ представляет собой величину, на которую уменьшается сумма квадратов y за счет линейной регрессии y по x .

Заметим, что $SS'_{\text{ош}}$ меньше $SS'_{\text{ош}}$, поскольку модель (7.18) содержит дополнительные параметры τ_i , и разность $SS'_{\text{ош}} - SS_{\text{ош}}$ равна величине уменьшения суммы квадратов за счет τ_i . И поэтому разность между $SS'_{\text{ош}}$ и $SS_{\text{ош}}$, т. е. $SS'_{\text{ош}} - SS_{\text{ош}}$, дает сумму квадратов с $a - 1$ степенью свободы для проверки гипотезы об отсутствии эффекта обработок.

Для проверки гипотезы $H_0: \tau_i = 0$ вычисляется значение статистики

$$F_0 = ((SS'_{\text{ош}} - SS_{\text{ош}})/(a - 1))/(SS_{\text{ош}}/(a(n - 1) - 1)), \quad (7.32)$$

которая подчиняется распределению Фишера с $a - 1$ и $a(n - 1) - 1$ степенями свободы. Мы отклоняем $H_0: \tau_i = 0$, если $F_0 > F_{(\alpha, a-1; a(n-1)-1)}$.

В табл. 7.36 представлен ковариационный анализ в виде «исправленного» дисперсионного анализа.

Таблица 7.36. Ковариационный анализ в виде «исправленного» дисперсионного анализа

Источник изменчивости	Сумма квадратов SS	Степень свободы	Средний квадрат MS	Критерий Фишера
Регрессия	$(S_{xy})^2/S_{xx}$	1		
Обработки	$SS'_{\text{ош}} - SS_{\text{ош}} = S_{yy} - (S_{xy})^2/S_{xx} - (E_{yy} - (E_{xy})^2/E_{xx})$	$a - 1$	$(SS'_{\text{ош}} - SS_{\text{ош}})/(a - 1)$	$MS_{\text{обр}}/MS_{\text{ош}}$
Ошибка	$SS_{\text{ош}} = E_{yy} - (E_{xy})^2/E_{xx}$	$a(n - 1) - 1$	$SS_{\text{ош}}/(a(n - 1) - 1)$	
Сумма	S_{yy}	$an - 1$		

Общая изменчивость измеряется величиной S_{yy} с $an - 1$ степенями свободы. Источнику «регрессия» соответствует сумма квадратов $(S_{xy})^2/S_{xx}$ с одной степенью свободы. При отсутствии сопутствующей переменной было бы $S_{xy} = S_{xx} = E_{xy} = E_{xx} = 0$, и тогда сумма квадратов ошибки равнялась бы просто E_{yy} , а сумма квадратов для обработок была бы $S_{yy} - E_{yy} = T_{yy}$. Но сопутствующая переменная присутствует, и мы должны поэтому «исправлять» S_{yy} и E_{yy} на регрессию y по x . Исправленная сумма квадратов ошибки обладает $a(n - 1) - 1$ степенью свободы, а не $a(n - 1)$, поскольку

при подборе модели введен дополнительный параметр (угловой коэффициент β).
Результаты обычно сводятся в таблицу ковариационного анализа (табл. 7.37).

Таблица 7.37. Ковариационный анализ для однофакторного эксперимента с ковариатой

Источник изменчивости	v	Суммы			Исправленные на регрессию		
		x	xy	y	y	v	MS
Обработки	$a - 1$	T_{xx}	T_{xy}	T_{yy}			
Ошибка	$a(n - 1)$	E_{xx}	E_{xy}	E_{yy}	$SS_{\text{ош}} = E_{yy} - E_{xy}^2/E_{xx}$	$a(n - 1) - 1$	$SS_{\text{ош}}/v_{\text{ош}}$
Сумма	$an - 1$	S_{xx}	S_{xy}	S_{yy}	$SS'_{\text{ош}} = SS_{yy} - S_{xy}^2/S_{xx}$	$an - 2$	
«Исправленные» обработки					$SS'_{\text{ош}} - SS_{\text{ош}}$	$a - 1$	$(SS'_{\text{ош}} - SS_{\text{ош}})/(a - 1)$

Такая схема используется потому, что с ее помощью удобно представлять все необходимые суммы квадратов и смешанных произведений, а также суммы квадратов для проверки гипотез относительно эффекта обработок. Помимо проверки гипотезы об отсутствии различий между эффектами обработок при интерпретации данных, часто оказывается полезным приводить и исправленные средние по обработкам; эти величины находятся в соответствии с выражением

$$\text{исправленное } y_{i\cdot} = \bar{y}_{i\cdot} - \hat{\beta}(\bar{x}_{i\cdot} - \bar{x}_{\cdot\cdot}), i = 1, 2, \dots, a, \quad (7.33)$$

где $\hat{\beta} = E_{xy}/E_{xx}$.

Это среднее по обработке является МНК-оценкой величины $\mu + \tau_i$, $i = 1, 2, \dots, a$ в модели (7.18). Стандартная ошибка любого исправленного среднего по обработке имеет вид

$$S_{\text{ош } \bar{y}_i} = \left(MS_{\text{ош}} \left(1/n + (\bar{x}_{i\cdot} - \bar{x}_{\cdot\cdot})^2 \right) \right)^{1/2}. \quad (7.34)$$

В модели (7.18) коэффициент регрессии β считался отличным от нуля. Мы можем проверить гипотезу $H_0: \beta = 0$, используя статистику

$$F_0 = ((E_{xy}^2)/E_{xx})/MS_{\text{ош}}, \quad (7.35)$$

которая подчиняется F -распределению с 1 и $a(n - 1) - 1$ степенями свободы. Таким образом, мы отклоняем $H_0: \beta = 0$, если $F_0 > F_{(\alpha; 1; a(n-1)-1)}$.

Пример [33, с. 346–350]. На трех различных машинах изготавливается моноволокно. Необходимо установить, существуют ли различия в прочности волокна, изготовленного на трех машинах. Прочность волокна связана, однако, с его диаметром, причем более толстое волокно прочнее, чем тонкое. С каждой машины берется случайная

выборка из пяти образцов волокна.

Разрывная прочность волокна y и соответствующий диаметр x для каждого образца приведены в табл. 7.38.

Таблица 7.38. Данные по прочности волокна

Машина 1						Машина 2						Машина 3					
y			x			y			x			y			x		
36	41	39	20	25	24	40	48	39	22	28	22	35	37	42	21	23	26
42	49		25	32		45	44		30	28		34	32		21		15
207			126			216			130			180			106		

В последней строке таблицы даны суммы по соответствующим ячейкам.

Рассчитанный коэффициент парной корреляции между прочностью y и диаметром волокна x составил 0,939 против $r_{(0,05; 13)} = 0,514$. Если справедлива линейная зависимость прочности волокна от его диаметра, модель имеет вид:

$$y_{ij} = \mu + \tau_i + \beta(x_{ij} - \bar{x}_{..}) + \varepsilon_{ij}, i = 1, 2, 3; j = 1, 2, 3, 4, 5; a = 3; n = 5.$$

В этой записи y_{ij} — j -е наблюдение переменной отклика при i -й обработке (уровне единственного фактора); x_{ij} — измерение ковариаты или сопутствующей переменной, соответствующее y_{ij} (т. е. ij -й опыт); $\bar{x}_{..}$ — среднее арифметическое значений x_{ij} ; μ — генеральное среднее (математическое ожидание общего среднего); τ_i — эффект i -й обработки; β — коэффициент линейной регрессии, указывающий на зависимость y_{ij} от x_{ij} ; ε_{ij} — случайная ошибка.

Вычисления производятся в следующей последовательности:

Теория.

$$S_{yy} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_{..})^2 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n y_{ij}^2 - y_{..}^2 / (an).$$

Решение.

$$y_{..} = 207 + 216 + 180 = 603;$$

$$S_{yy} = 36^2 + 41^2 + 39^2 + \dots + 34^2 + 32^2 - 603^2 / (3 \times 5) = 346,40.$$

Теория.

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_{..})^2 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n x_{ij}^2 - x_{..}^2 / (an).$$

Решение.

$$x_{..} = 126 + 130 + 106 = 362;$$

$$S_{xx} = 20^2 + 25^2 + 24^2 + \dots + 21^2 + 15^2 - 362^2 / (3 \times 5) = 261,73.$$

Теория.

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_{..})(y_{ij} - \bar{y}_{..}) = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n x_{ij} y_{ij} - x_{..} y_{..} / (an).$$

Решение.

$$S_{xy} = 20 \times 36 + 25 \times 41 + 24 \times 39 + \dots + 21 \times 34 + 15 \times 32 - 362 \times 603 / (3 \times 5) = 282,60.$$

Теория.

$$T_{yy} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{i\cdot} - \bar{y}_{..})^2 = \left(\sum_{i=1}^a y_{i\cdot}^2 \right) / n - y_{..}^2 / (an).$$

Решение.

$$T_{yy} = (207^2 + 216^2 + 180^2) / 5 - 603^2 / (3 \times 5) = 140,40.$$

Теория.

$$T_{xx} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{i\cdot} - \bar{x}_{..})^2 = \left(\sum_{i=1}^a x_{i\cdot}^2 \right) / n - x_{..}^2 / (an).$$

Решение.

$$T_{xx} = (126^2 + 130^2 + 106^2) / 5 - 362^2 / (3 \times 5) = 66,13.$$

Теория.

$$T_{xy} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{i\cdot} - \bar{x}_{..})(y_{i\cdot} - \bar{y}_{..}) = \left(\sum_{i=1}^a x_{i\cdot} y_{i\cdot} \right) / n - x_{..} y_{..} / (an).$$

Решение.

$$T_{xy} = (126 \times 207 + 130 \times 216 + 106 \times 180) / 5 - 362 \times 603 / (3 \times 5) = 96,00.$$

Теория.

$$E_{yy} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{ij} - y_{i\cdot})^2 = SS_{yy} - T_{yy}.$$

Решение.

$$E_{yy} = 346,40 - 140,40 = 206,00.$$

Теория.

$$E_{xx} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - x_{i\cdot})^2 = SS_{xx} - T_{xx}.$$

Решение.

$$E_{xx} = 261,73 - 66,13 = 195,60.$$

Теория.

$$E_{xy} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (x_{ij} - x_{i\cdot})(y_{ij} - y_{i\cdot}) = SS_{xy} - T_{xy}.$$

Решение.

$$E_{xy} = 282,60 - 96,00 = 186,60.$$

Теория.

$$SS'_{\text{ош}} = S_{YY} - (S_{XY})^2 / S_{XX};$$

$$v = an - 2.$$

Решение.

$$SS'_{\text{ош}} = 346,40 - (282,60)^2 / 261,73 = 41,27;$$

$$v = 3 \times 5 - 2 = 13.$$

Теория.

$$SS_{\text{ош}} = E_{yy} - (E_{xy})^2 / E_{xx};$$

$$v = a(n - 1) - 1.$$

Решение.

$$SS_{\text{ош}} = 206,00 - (186,60)^2 / 195,60 = 27,99;$$

$$v = 3(5 - 1) - 1 = 11.$$

Сумма квадратов, используемая для проверки $H_0: \tau_i = 0$.

$$SS'_{\text{ош}} - SS_{\text{ош}} = 41,27 - 2,99 = 13,28 \text{ обладает } a - 1 = 3 - 1 = 2 \text{ степенями свободы.}$$

Результаты вычислений сведены в табл. 7.39.

Таблица 7.39. Ковариационный анализ для однофакторного эксперимента с ковариатой

Источник изменчивости	Степень свободы v	Суммы		
		x	xy	y
Обработки	$a - 1$	T_{xx}	T_{xy}	T_{yy}
Ошибка	$a(n - 1)$	E_{xx}	E_{xy}	E_{yy}
Сумма	$an - 1$	S_{xx}	S_{xy}	S_{yy}
Станки	2	66,13	96,00	140,40
Ошибка	12	195,60	186,60	206,00
Сумма	14	261,73	282,60	346,40

Источник изменчивости	Исправленные		
	y	v	MS
«Исправленные» обработки	$SS'_{\text{ош}} - SS_{\text{ош}}$	$a - 1$	$(SS'_{\text{ош}} - SS_{\text{ош}}) / (a - 1)$
Ошибка	$SS_{\text{ош}}$	$a(n - 1) - 1$	$SS_{\text{ош}} / v_{\text{ош}}$
Сумма	$SS'_{\text{ош}}$	$an - 2$	
«Исправленные» станки	13,28	2	6,64
Ошибка	27,99	11	2,54
Сумма	41,27	13	

Интерпретация.

Для проверки гипотезы $H_0: \tau_i = 0$, найдем значение статистики

$F_0 = (SS'_{\text{ош}} - SS_{\text{ош}}) / (a - 1) / (SS_{\text{ош}} / (a(n - 1) - 1))$, с $a - 1$ и $a(n - 1) - 1$ степенями свободы.

Мы отклоняем $H_0: \tau_i = 0$, если $F_0 > F_{(\alpha; a-1; a(n-1)-1)}$.

$F_0 = (13,28/2)/(27,99/11) = 6,64/2,54 = 2,61$. Табличное значение критерия Фишера при $v_1 = 2$ и $v_2 = 11$ при $\alpha = 5\%$ составляет: $F_{(2;11;0,05)} = 3,98$. $F_0 < F_{(2;11;0,05)}$. Нет данных в пользу того, что волокна, изготовленные на трех машинах, различаются по разрывной прочности.

Коэффициент регрессии $\beta = E_{xy}/E_{xx}$.

$$\beta = 186,60/195,60 = 0,95.$$

Для проверки гипотезы $H_0: \beta = 0$, используем статистику $F_0 = ((E_{xy}^2)/E_{xx})/MS_{\text{ош}}$, с 1 и $a(n-1) - 1$ степенями свободы. Отклоняем $H_0: \beta = 0$, если $F_0 > F_{(\alpha; 1; a(n-1)-1)}$. В этом случае оправдывается расчет описанным методом.

$F_0 = ((186,60)^2/195,60)/2,54 = 70,08$ и $F_{(1;11;0,05)} = 4,84$, то мы отклоняем гипотезу $H_0: \beta = 0$. Линейная зависимость между прочностью и диаметром существует, и внесение исправления при помощи ковариационного анализа было необходимо.

Исправленные средние по обработкам находятся в соответствии с выражением: исправленное $y_{i\cdot} = \bar{y}_{i\cdot} - \hat{\beta}(\bar{x}_{i\cdot} - \bar{x}_{\cdot\cdot})$, $i=1, 2, \dots, a$.

$$\bar{y}_{1\cdot} = 207/5 = 41,40; \quad \bar{y}_{2\cdot} = 216/5 = 43,20; \quad \bar{y}_{3\cdot} = 180/5 = 36,00;$$

$$\bar{x}_{1\cdot} = 126/5 = 25,20; \quad \bar{x}_{2\cdot} = 130/5 = 26,00; \quad \bar{x}_{3\cdot} = 106/5 = 21,20;$$

$$\bar{x}_{\cdot\cdot} = (126 + 130 + 106)/(5 \times 3) = 24,13.$$

Стандартная ошибка любого исправленного среднего по обработке имеет вид:

$$S_{\text{испр } y_i \cdot \text{cp}} = (MS_{\text{ош}} (1/n + (X_i - X_{\cdot\cdot \text{cp}})^2/E_{xx}))^{1/2};$$

$$\text{исправленное } y_{1\cdot} = 41,40 - 0,95(25,20 - 24,13) = 40,38;$$

$$\text{исправленное } y_{2\cdot} = 43,20 - 0,95(26,00 - 24,13) = 41,42;$$

$$\text{исправленное } y_{3\cdot} = 36,00 - 0,95(21,20 - 24,13) = 38,78.$$

Принимая эти данные, мы должны были бы заключить, что машины обладают значимыми различиями в прочности изготавливаемого на них волокна ($4,09 > 3,89$). Однако после исключения линейного эффекта диаметра оказывается, что машины не различаются по прочности изготавливаемого волокна.

Сравнивая исправленные средние по обработкам с неисправленными $y_{i\cdot}$, замечаем, что исправленные средние значительно ближе друг к другу, что еще раз свидетельствует о необходимости проведения ковариационного анализа.

Одним из основных допущений в ковариационном анализе является то, что обработки не оказывают влияния на ковариату x , так как этот метод исключает эффект вариаций величины $x_{\cdot\cdot}$. Однако если изменчивость $x_{\cdot\cdot}$ частично обусловлена обработками, то ковариационный анализ исключает и часть эффекта обработок. Таким образом, мы должны быть достаточно уверены в том, что обработки не влияют на значение x_{ij} . В одних экспериментах это может быть очевидно из самой природы сопутствующей переменной, в других — может вызвать определенные сомнения. В данном примере могут быть различия в диаметре волокон x_{ij} , изготавливаемых на каждой из трех машин. В таких случаях при определении справедливости данного допущения может оказаться полезным дисперсионный анализ величин x_{ij} . Для данной задачи эта

процедура дает (табл. 7.39) $F_0 = (66,13/2)/(195,60/12) = 33,07/16,30 = 2,03$, что меньше $F_{0,05;2;12} = 3,89$. Следовательно, нет оснований считать, что машины дают волокно различного диаметра.

Таблица 7.40. Результаты дисперсионного анализа как данных однофакторного эксперимента без учета влияния диаметра волокна

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Степени свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Машины	140,40	2	70,20	4.09
Ошибка	206,00	12	17,17	
Сумма	346,40	14	$F_{(2;12;0,05)} = 3,89$	

Интересно посмотреть, каковы были бы результаты этого эксперимента без проведения ковариационного анализа, т. е. если бы данные по прочности y анализировались как данные однофакторного эксперимента. Дисперсионный анализ данных в этом предположении приведен в табл. 7.40. Поскольку $F_{0,05;2;12} = 3,89$, то мы пришли бы к выводу, что машины обладают значимыми различиями в прочности изготавливаемого на них волокна, и обычным образом попытались бы уравнивать показатели машин по прочности.

Однако после исключения линейного эффекта диаметра оказывается, что машины не различаются по прочности изготавливаемого волокна. Может быть полезно уменьшить изменчивость диаметра в пределах одной машины.

В книге «Линейный регрессионный анализ» (Дж. Себер) 1977 г., переведенной в 1980 г., есть глава про ковариационный анализ: «Вообще говоря, мы используем термин дисперсионный анализ, когда все факторы трактуются как качественные, и говорим о регрессионном анализе, если все факторы трактуются как количественные. Если же мы имеем смешанную модель, в которой одни факторы являются количественными, а другие — качественными, то мы используем термин ковариационный анализ». И ссылка на классика дисперсионного анализа Г. Шеффе, у которого написано примерно так же [32, с. 227]. Ничто не мешает нам использовать в дисперсионном анализе количественные факторы, не обращая внимания на то, что они количественные. А в ковариационном анализе мы это учитываем.

Литература

1. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. — М.: Высшая школа, 1978. — 319 с.
2. Батунер Л.М., Позин М.К. Математические методы в химической технике. — Л.: Химия, 1968. — 824 с.

3. Бернштейн А. Справочник статистических решений / Пер. с англ. — М.: Статистика, 1968. — 162 с.
4. Виноградов Ю.С. Сборник задач по применению математической статистики и теории вероятностей в текстильной и швейной промышленности. — М.: Легкая индустрия, 1968. — 266 с.
5. Гмурман В.Е. Руководство к решению задач по теории вероятностей и математической статистике. — М.: Высшая школа, 1975. — 334 с.
6. Дайменд С. Мир вероятности / Пер с англ. — М.: Статистика, 1970. — 155 с.
7. Джонсон Н., Лион Ф. Статистика и планирование эксперимента в технике и науке, методы обработки данных / Пер. с англ. — М.: Мир, 1980. — 510 с.
8. Дюерфель К. Статистика в аналитической химии / Пер. с нем. — М.: Мир, 1969. — 247 с.
9. Зельдович Я.Б., Мышкис А.Д. Элементы прикладной математики. — М.: Наука, 1972. — 592 с.
10. Карасев А.И. Теория вероятностей и математическая статистика. — М.: Статистика, 1970. — 344 с.
11. Кендалл М.Дж., Стьюарт А. Статистические выводы и связи / Пер. с англ. — М.: Наука, 1973. — 900 с.
12. Кнотек М., Войта Р., Шефц И. Анализ металлургических процессов методами математической статистики / Пер. с чешск. — М.: Металлургия, 1968. — 211 с.
13. Коваленко И.Н., Филиппова А.А. Теория вероятностей и математическая статистика. — М.: Высшая школа, 1973. — 368 с.
14. Компьютерная биометрика / Под ред. В.Н. Носова. — М.: Изд. МГУ, 1990. — 232 с.
15. Лукомский Я.И. Теория корреляции и ее применение к анализу производства. — М.: Госстатиздат, 1958. — 388 с.
16. Львовский В.Н. Статистические методы построения эмпирических формул. — М.: Высшая школа, 1982. — 224 с.
17. Маринеску И., Мойнягу Ч., Никулеску Р., Ранку Н., Урсяну В. Основы математической статистики и ее применение / Пер. с румын. — М.: Статистика, 1970. — 224 с.
18. Митрополевский А.К. Техника статистических вычислений. М.: Наука, 1971. — 576 с.
19. Налимов В.В. Применение математической статистики при анализе вещества. — М.: Физматгиз, 1960. — 430 с.
20. Пановский Г.А., Брайер Г.В. Статистические методы в метеорологии. — Л.: Гидрометеоздат, 1972. — 204 с.
21. Пустыльник Е.И. Статистические методы анализа и обработки наблюдений. — М.: Наука, 1968. — 288 с.
22. Румшинский Л.З. Математическая обработка результатов эксперимента. — М.: Наука, 1971. — 192 с.
23. Сиськов В.И. Корреляционный анализ в экономических исследованиях. — М.: Статистика, 1975. — 168 с.
24. Смирнов Н.В., Дунин-Барковский И.В. Курс теории вероятностей и математической статистики. — М.: Наука, 1969. — 511 с.

25. Сырцова Е.Д. Математические методы в планировании и управлении строительным производством. — М.: Высшая школа, 1972. — 335 с.
26. Тернер Д. Вероятность, статистика и исследование операций / Пер. с англ. — М.: Статистика, 1976. — 432 с.
27. Щиголев Б.М. Математическая обработка наблюдений. — М.: Наука, 1969. — 544 с.
28. Хальд А. Математическая статистика с техническими приложениями / Пер. с англ. — М.: Изд. И.Л., 1956. — 664 с.
29. Монтгомери Д.К. Планирование эксперимента и анализ данных / Пер с англ. — Л.: Судостроение, 1980. — 384 с.
30. Себер Дж. Линейный регрессионный анализ / Пер. с англ. — М.: Мир, 1980. — 456 с.
31. Хьютсон А. Дисперсионный анализ / Пер. с англ. — М.: Статистика, 1971. — 88 с.
32. Шеффе Г. Дисперсионный анализ / Пер. с англ. — М.: Наука, 1980. — 512 с.
33. Монтгомери Д.К. Планирование эксперимента и анализ данных / Пер с англ. — Л.: Судостроение, 1980. — 384 с.

Глава 8. Оптимизация

«*Оптимизация* — нахождение наибольшего или наименьшего значения какой-либо функции или выбор наилучшего (оптимального) варианта из множества возможных» (Словарь иностранных слов, 1980 г.). Там же: «*Оптимум* — совокупность наиболее благоприятных условий».

Словарь иностранных слов и выражений (2002 г.). «*Оптимальный* [фр. *optimal* < лат. *optimus* наилучший] — наилучший, наиболее соответствующий определенным условиям и задачам». «*Оптимизация* : 1) процесс выбора наилучшего варианта из возможных; 2) процесс приведения системы в наилучшее (оптимальное) состояние». «*Оптимум* [< лат. *optimum* наилучшее] — совокупность наиболее благоприятных условий, наилучший вариант решения задачи или путь достижения цели при данных условиях и ресурсах».

Оптимизация в том разделе математической статистики, к которому относится теория эксперимента, мыслится как экспериментальный поиск координат экстремальной точки. Но поскольку эксперимент всегда сопряжен с ошибкой, речь идет о поиске области, где находится экстремум.

Так что, к сожалению, поиск оптимума применительно к резине — маловероятен.

8.1. Выбор параметров оптимизации

Экономические и технические причины обычно заставляют стремиться к тому, чтобы процессы, установки, аппараты и прочие устройства работали при оптимальных условиях, а производимая продукция обладала оптимальными свойствами. Это означает, например, что для резиносмесителя следует устанавливать такие значения температуры охлаждающей воды, давления верхнего затвора, скорости вращения роторов, режима смещения и пр., при которых будет обеспечено получение резиновой смеси высокого качества при максимальной производительности. Подобно этому можно потребовать, чтобы агрегат действовал с максимальной прибылью или минимальными эксплуатационными расходами. Часто требуется, чтобы продукция обладала определенными оптимальными свойствами. Целевые величины, такие как пропускная способность, производительность, доход, часто связаны с величинами,

характеризующими качественные показатели. При этом одна из них (целевая величина или характеристика качества) выступает в виде ограничения.

Необходимость решения рассматриваемых задач возникает при различных формах рационализации производства, таких как интенсификация производственных процессов, улучшение качества продукции, устранение узких мест, увеличение выпуска продукции, а также при выборе наилучших режимов для заново проектируемых производственных единиц, лабораторных и полупромышленных установок.

Для решения задачи нахождения оптимума выбранной целевой величины в соответствии с конкретными условиями и требованиями применимы два принципиально различных подхода [1, с. 405–407].

1. Определение оптимальных условий с помощью модели объекта.

Здесь предполагается, что имеется статистическая (экспериментальная) модель, т. е. полученное с помощью эксперимента математическое описание объекта.

2. Нахождение оптимальных условий непосредственно на объекте без использования модели. Этот метод предполагает существование объекта и возможность проводить на объекте эксперимент. Поэтому такой подход не может быть использован при создании новых процессов до их технической реализации.

Между экспериментами на лабораторных и промышленных установках имеется ряд существенных различий, к которым относятся:

- малые возможности варьирования режимов в крупных промышленных установках из-за опасений нарушения качественных показателей продукции;
- относительно высокий уровень «шума» из-за большого числа неконтролируемых факторов в промышленных условиях;
- применение высокоточной измерительной аппаратуры в лабораторных условиях в отличие от неточных технических измерителей в промышленных установках;
- дрейф характеристик объекта в промышленных установках.

Эти различия привели к разработке специальных методов экспериментального поиска оптимума в промышленных условиях, о которых предстоит еще разговор. Для получения максимальной информации о положении оптимума с помощью небольшого числа опытов применяются специальные методы и стратегии планирования эксперимента.

Параметр оптимизации или целевая функция является математическим выражением результата действия процесса. Ее также называют критериальной функцией или показателем качества. Выбор целевой функции и нахождение ее максимального или минимального значения являются сутью проблемы оптимизации. В отличие от моделей физических процессов, целевые функции обычно выражают нефизические величины, такие, например, как прибыль, стоимость, качество и т. п.

Основные принципы определения параметров оптимизации [2, с. 169–173] выведены на основании опыта. Однако не следует считать эти принципы какой-то догмой; очень часто бывают случаи, когда руководствоваться этими принципами не рекомендуется.

Принцип однозначности состоит в том, что должна максимизироваться либо минимизироваться одна и только одна целевая функция. В тех случаях, когда

оптимизироваться должны две целевые функции P и W , их можно объединить в одну целевую функцию посредством линейной комбинации. В этом случае целевая функция имеет вид

$$F = \Psi_1 P + \Psi_2 W, \quad (8.1)$$

где Ψ_1 и Ψ_2 — весовые коэффициенты.

В связи с этим возникает вопрос: что такое $t_{\text{опт}} = 0,5t_1 + 0,3t_2 + 0,15t_3 + 0,05t_4$? Это своеобразная попытка сформулировать некий обобщенный показатель, характеризующий режим вулканизации — линейная комбинация.

Если функция P должна максимизироваться, а W — минимизироваться, то рекомендуется W заменить функцией V , такой, что максимум V имеет место в той же самой точке (x_1, x_2, \dots, x_n) , что и минимум W . Таким образом, целевая функция, которая должна максимизироваться, будет иметь вид

$$F = \Psi_3 P + \Psi_4 V, \quad (8.2)$$

где Ψ_3 и Ψ_4 — весовые коэффициенты.

Принцип соответствия заключается в том, что характер параметра оптимизации и масштабные (весовые) коэффициенты должны определяться таким образом, чтобы оптимизация целевой функции обеспечивала наиболее успешное управление процессом.

Принцип управляемости состоит в том, что целевая функция должна быть выражена через переменные управления, которые контролируются операторами или системой вычислительных устройств. Целевые функции (параметры оптимизации), которые выражены через переменные, не являющиеся переменными управления процессов, бесполезны.

Принцип ориентации на прибыль состоит в том, что параметры оптимизации обычно должны выражать прибыль или величины, которые тесно с ней связаны, например стоимость и качество. Если из двух возможных целевых функций необходимо выбрать одну, следует выбирать ту, которая оказывает большее влияние на прибыль.

Принцип подходящей формы состоит в том, что желательно пользоваться целевой функцией, имеющей экстремум. Целевым функциям, не имеющим экстремума, требуются ограничения для обеспечения решения, которое имело бы смысл. Так обстоит дело, например, в линейном программировании. К нежелательным формам целевой функции относятся функции, имеющие разрыв, функции, у которых есть несколько экстремумов и неоднозначные функции, когда одному значению x соответствует не одно значение y и/или наоборот. Одной из наиболее желательных форм целевой функции является квадратичная форма.

Процесс оптимизации должен сводиться к решению уравнений, которые можно использовать для нахождения переменных управления, оптимизирующих целевую функцию. Уравнения, которые выражают переменные оптимального управления через требуемые параметры работы, называются уравнениями оптимального управления.

Перечислим наиболее распространенные виды параметров оптимизации (целевых функций).

Целевая функция прибыли. Прибыль определяется как разница между общим приходом денежных средств и затратами. При управлении процессом можно пренебречь постоянными затратами, поскольку они входят в целевую функцию в качестве постоянного члена и не влияют на положение оптимума.

Целевая функция стоимости. Целевая функция стоимости выражает стоимость, связанную с осуществлением процесса. Обычно в целевую функцию стоимости включают лишь переменные стоимости, которые поддаются управлению, например стоимость материалов и стоимость топлива. Постоянные стоимости, а также прочие стоимости, не поддающиеся управлению, включать не следует, к примеру, постоянные капиталовложения, накладные расходы и другие косвенные затраты.

Задачи динамической оптимизации имеют целевые функции, являющиеся интегралами функции стоимости по времени. Задача минимизации целевой функции называется задачей оптимальной траектории, поскольку конечной целью является выбор такого пути или траектории между двумя граничными условиями, при котором эта функция будет минимизироваться.

Целевая функция качества. Наиболее полезной и удобной формой целевой функции качества является взвешенная квадратичная форма. Такая форма определяет оптимальное протекание процесса как состояние, при котором сумма квадратов разностей между требуемыми значениями переменных состояния и фактическими их значениями минимальна. Переменные состояния могут быть либо измерены, либо вычислены косвенным путем.

Разница между контролем качества при помощи динамических целевых функций и обычным контролем качества в установившемся состоянии заключается в том, что в первом случае стремятся вернуть процесс к оптимуму с минимальной стоимостью, тогда как во втором случае динамическая характеристика процесса и скорость достижения новой рабочей точки игнорируются.

Целевая функция времени. Целевая функция времени выражает время протекания процесса между двумя фиксированными граничными условиями.

Комплексная независимая переменная (параметр оптимизации) широко используется при разработке режимов вулканизации. Она включает в себя продолжительность процесса t и температуру T . Интересно, что t и T по сути своей есть факторы, а их комбинация, получившая название эквивалентное время вулканизации S , является мерилем степени завершенности процесса, т. е. откликом:

$$S = \frac{E}{J_{\text{экв}}} = \frac{\int_0^{\tau} J dt}{J_{\text{экв}}} = \frac{\int_0^{\tau} K^{\frac{T-T_0}{10}} dt}{K^{\frac{T_{\text{экв}}-T_0}{10}}} = \int_0^{\tau} K^{\frac{T-T_{\text{экв}}}{10}} dt \quad (8.3)$$

где E — эффективность (эффект) процесса; J — интенсивность процесса; $J_{\text{экв}}$ — интенсивность при эквивалентной температуре (традиционно она выбиралась равной температуре кипения воды при давлении, например, 4 атм — 143 °C); $\tau-0$ — временной

интервал вулканизации; t — время; K — температурный коэффициент скорости (отношение констант скоростей k при температурах $T+5$ К и $T-5$ К); $T(t)$ — переменная температура; T_0 — температура, ниже которой реакция идет с пренебрежимо малой скоростью.

Поскольку температурный коэффициент вулканизации зависит от температуры, используется интерпретация констант скоростей через уравнение Аррениуса:

$$k_1 = Ae^{-\frac{U}{R(T-5)}} \quad k_2 = Ae^{-\frac{U}{R(T+5)}} \quad K = \frac{k_2}{k_1} = \frac{Ae^{-\frac{U}{R(T+5)}}}{Ae^{-\frac{U}{R(T-5)}}} = e^{\frac{U}{R}\left(\frac{1}{T-5} - \frac{1}{T+5}\right)} = e^{\frac{U}{R} \frac{10}{T^2 - 25}}, \quad (8.4)$$

где A — предэкспоненциальный множитель; U — энергия активации (предполагается постоянной); R — универсальная газовая постоянная.

В этом случае эквивалентное время (продолжительность вулканизации при переменной температуре, при которой достигается такая же степень вулканизации, что и при постоянной эквивалентной температуре) вычисляется следующим образом:

$$S = \int_0^{\tau} e^{\frac{U}{R} \frac{T - T_{\text{зад.}}}{10} \frac{10}{T^2 - 25}} dt = \int_0^{\tau} e^{\frac{U}{R} \frac{T - T_{\text{зад.}}}{T^2 - 25}} dt, \quad (8.5)$$

Следующий пример обобщенной переменной. Давно известно, что продолжительность службы мягкой резины ограничена. Явления, которые мало-помалу приводят резину к явному разрушению, совершенно справедливо объясняли, с одной стороны, окислением ее (кислородом воздуха, особенно на свету) и, с другой — «последующей вулканизацией», путем воздействия свободной серы в вулканизате. Однако только тщательное изучение этих явлений различными исследователями в начале XX века показало, что они не так просты, как раньше предполагали, и что старение резины фактически в большинстве случаев вызывается окислением и последующей вулканизацией.

Широкой популярностью в качестве обобщенной целевой функции в течение длительного периода (практически до начала 40-х гг. XX века) пользовалось произведение прочности на относительное удлинение при разрыве [3, с. 236].

В 70–80-е гг. прошлого века достаточно широко применялось, например, отношение относительного удлинения к остаточному; правда, физический смысл этой величины не обоснован. Интересно использование отношения прочности (или модуля) к плотности. Оно характеризует количество энергии, отнесенное к единице массы. Можно использовать отношение модуля к относительному удлинению (отношение напряжения к деформации) и др.

Особый интерес представляет термодинамический подход к этой проблеме. Используя метод термодинамического подбора, целесообразно принимать в качестве обобщенного параметра отношение модуля к критическому напряжению. Введение таких обобщенных параметров позволяет получить наиболее общее описание явления.

Эффективный способ уменьшения набора переменных — применение теории подбора и анализа размерностей. При этом если исследуется зависимость какого-либо параметра от ряда факторов, то даже при условии получения модели последняя

может оказаться чрезвычайно громоздкой и будет иметь лишь частное применение для выбранной системы. При переходе к обобщенным переменным снижается размерность задачи и уравнения получают общность.

Создание единого признака, количественно отражающего все многообразие свойств материала, — непростая задача, она связана с необходимостью объединения величин с разными размерностями, физическим смыслом.

Один из наиболее удачных подходов к решению этой задачи — преобразование измеренных значений свойств в безразмерную психофизическую шкалу желательности [4, с. 55–63; 5, с. 244; 6, с. 98–102; 7, с. 18–20].

Шкала желательности служит для установления соответствия между физическими параметрами материала и психологическими параметрами: желательностью или предпочтительностью того или иного значения, свойства в частном случае или того или иного набора значений различных свойств в общем случае.

Таблица 8.1. Базовые отметки шкалы желательности

Количественные отметки на шкале d (D)	Желательность свойства (материала)
0,80–1,00	Очень хорошее (ий)
0,63*–0,80	Хорошее (ий)
0,37**–0,63	Удовлетворительное (ый)
0,20–0,37	Плохое (ой)
0,00–0,20	Очень плохое (ой)

* $d = 0,63 \approx (1 - 1/e)$; ** $d = 0,37 \approx (1/e)$. Такой выбор базовых отметок объясняется удобством вычислений.

Для построения шкалы желательности используется метод количественных оценок с интервалом значений желательности от нуля до единицы. Желательность для отдельного свойства обозначается через d , а для набора свойств через D . Значение $d = 0$ (или $D = 0$) соответствует абсолютно неприемлемому уровню данного свойства (очень плохое качество), а $d = 1$ (или $D = 1$) соответствует самому лучшему значению свойства (очень хорошее качество), причем дальнейшее улучшение его либо невозможно, либо не представляет интереса. Промежуточные значения желательности и соответствующие им числовые отметки приведены в табл. 8.1.

При построении шкалы желательности возможны две ситуации.

1. Имеется спецификация с одним или двумя ограничивающими пределами, в которой четко сформулированы требования по всем интересующим исследователя свойствам. Ограничения могут быть заданы в виде $y \leq y_{\max}$ или $y \geq y_{\min}$ для односторонней спецификации и $y_{\min} \leq y \leq y_{\max}$ в случае спецификации с двумя ограничивающими пределами. Здесь y — текущее значение свойства, а y_{\max} и y_{\min} — наибольшее и наименьшее допустимые значения свойства.

2. Спецификации на данный материал или продукт нет. В первом случае отметка на шкале желательности $d = 0,37$ ставится в соответствии со значением свойства y_{\max} и y_{\min} , остальные промежуточные отметки определяются важностью данного свойства и возможностью его улучшения. Во втором случае каждое значение свойства можно оценить с точки зрения его ценности лишь сугубо субъективно, поэтому при установлении количественных оценок желательности полезно учесть мнение нескольких исследователей и искать компромиссное представление ряда мнений, если эти мнения не полностью совпадают.

Построение шкалы желательности и установление переходного соотношения между значениями свойств и их желательности — наиболее сложный и ответственный шаг в процедуре вычисления обобщенного показателя качества D .

Преобразование, устанавливающее соответствие между значениями свойства y и его желательностью d , можно определить как частную функцию желательности в отличие от обобщенной функции желательности, устанавливающей соответствие между значениями ряда свойств и обобщенным показателем желательности D .

Простейший случай преобразования значения свойства в шкалу желательности имеет место, когда существует спецификация с одним или двумя ограничивающими пределами, и эти пределы являются единственными критериями качества. Тогда вне пределов спецификации устанавливается значение $d = 0$.

Пусть y — измеряемое свойство, а y_{\min} — нижний предел спецификации, задающей одностороннее ограничение. Тогда частная функция желательности имеет вид:

$$d = \begin{cases} 0, & y < y_{\min} \\ 1, & y \geq y_{\min} \end{cases} \quad (8.6)$$

Аналогичным образом получается частная функция желательности, если спецификация задает ограничение сверху. Если же для данного свойства имеет место двухстороннее ограничение, то

$$d = \begin{cases} 0, & y < y_{\min} \text{ и } y > y_{\max} \\ 1, & y_{\min} \leq y \leq y_{\max} \end{cases} \quad (8.7)$$

Однако далеко не всегда ограничивающие пределы спецификации являются единственным критерием качества. В большинстве случаев значения свойства, удаленные от ограничивающего предела в нужном направлении или расположенные ближе к центру интервала (y_{\min}, y_{\max}), оказываются предпочтительнее значений свойства, расположенных вблизи ограничивающего предела. Поэтому в общем случае преобразование y в d осуществляется по более сложным законам.

Если ограничения для данного свойства имеют вид $y \leq y_{\max}$ или $y \geq y_{\min}$, преобразование y в d имеет вид [4]:

$$d = \exp(-\exp(-y')), \quad (8.8)$$

где $y' = b_0 + b_1 y$, причем в некоторых случаях степень полинома может быть равна двум или более.

Коэффициенты b_0 и b_1 можно вычислить, если задать для двух значений свойства y соответствующие значения желательности, d , предпочтительно в интервале

$0,2 < d < 0,8$, если пределы спецификации заданы жестко. В том случае, когда нет спецификации и, следовательно, имеется некоторая неопределенность в задании контрольных точек, целесообразными являются статистические оценки b_0 и b_1 по ряду выбранных значений d и y .

Нелинейное преобразование y в d применяется в тех случаях, когда данное свойство имеет особую важность, нарушение ограничивающих условий недопустимо, и малому изменению свойства вблизи ограничивающего предела соответствует резкое изменение желательности.

Если ограничения для данного свойства имеют вид $y_{\min} \leq y \leq y_{\max}$, то преобразование y в d удобно задавать выражением

$$d = \exp(-(y')^n), \quad (8.9)$$

где n — положительное число ($0 < n < \infty$), $y' = (2y - (y_{\max} + y_{\min})) / (y_{\max} - y_{\min})$.

Показатель степени n можно вычислить, если задать некоторому свойству y значение d (предпочтительно в интервале $0,6 < d < 0,9$), по формуле: $n = (\ln \ln(1/d)) / \ln|y'|$.

В том случае, когда нет спецификации, целесообразно дать статистическую оценку n по ряду значений y и соответствующих d . Задавая с помощью контрольной точки кривизну кривой желательности, можно учесть особую важность отдельных свойств; для них n будет иметь большее значение, и малому изменению свойства вблизи ограничивающих пределов будет соответствовать резкое изменение желательности.

После того как проделано преобразование свойств в шкалу желательности, можно сформировать обобщенный показатель качества D , построить обобщенную функцию желательности.

Пусть качество продукта определяется N свойствами: y_1, y_2, \dots, y_N и для каждого из этих свойств установлено преобразование в шкалу желательности: d_1, d_2, \dots, d_N соответственно. Обобщенную функцию желательности можно задать как среднее геометрическое желательностей отдельных свойств, т. е.

$$D = \sqrt[n]{d_1 \cdot d_2 \cdot \dots \cdot d_N}. \quad (8.10)$$

Представленная в таком виде обобщенная функция желательности является удобной моделью психологической реакции исследователя, устанавливающего пригодность материала (продукта) с данным набором свойств к использованию его в нужных условиях.

Если хотя бы одно из свойств полностью не удовлетворяет требованиям спецификации, то, как бы ни были хороши остальные свойства, этот материал не может быть использован по назначению. Действительно, $D = 0$, если хотя бы одно из свойств y_i , например, имеет желательность $d_i = 0$, и $D = 1$ тогда и только тогда, когда все частные желательности $d_i = 1$ ($i = 1, 2, \dots, N$). Важно еще то, что такой способ задания обобщенной функции желательности позволяет применить к частным желательностям и обобщенному показателю единый способ задания базовых отметок шкалы желательности, представленный табл. 8.1.

С обобщенным показателем качества D можно проделывать все вычислительные операции, которые мы вправе проделывать со значениями свойств, и его можно использовать в роли критерия оптимизации при исследовании и оптимизации процессов любым из известных методов, в том числе при статистических исследованиях.

В этой связи представляет интерес исследовать статистическую чувствительность и эффективность частных и обобщенного показателя желательности.

Мерой чувствительности критерия оптимизации служит коэффициент вариации статистической выборки, включающей в себя значения параметра для разных технологических режимов:

$$V = S_y / \bar{y}, \quad (8.11)$$

где S_y — среднее квадратичное отклонение y по всей выборке; \bar{y} — среднее значение параметра y .

Статистическую эффективность критерия оптимизации можно определить с помощью отношения общей дисперсии выборки, S_y^2 , к дисперсии, обусловленной ошибкой в измерении критерия оптимизации $S_{\text{ош}}^2$, т. е.

$$F = S_y^2 / S_{\text{ош}}^2. \quad (8.12)$$

Пример. Изучение чувствительности и эффективности функций желательности и технологических показателей проводилось на статистической выборке, представляющей собой результаты полного факторного эксперимента (табл. 8.2), полученные усреднением по пяти испытаниям в каждом опыте для свойств y_1 и y_2 и их желательностей и по двум испытаниям для y_4 и его желательности. Свойство y_3 и его желательность в каждом опыте измерялись один раз.

Этот эксперимент был спланирован с целью изучения зависимости свойств кабельного пластика: прочности при растяжении (y_1), относительного удлинения (y_2) при разрыве, морозостойкости (y_3) и миграции пластификатора (y_4), от состава перерабатываемой композиции.

Таблица 8.2. Исходные данные для расчета статистической чувствительности и эффективности

№	y_1 , МПа	y_2 , %	y_3 , °C	y_4 , %	d_1	d_2	d_3	d_4	D
1	14,4	492	−62	2,59	0,359	0,698	0,925	0,562	0,601
2	23,9	276	−25	1,42	0,884	0,045	0	0,950	0
3	12,5	511	−65	1,47	0,254	0,755	1,00	0,934	0,551
4	22,6	316	−40	2,94	0,812	0,166	0,375	0,445	0,383
5	11,6	450	−65	1,38	0,204	0,571	1,00	0,964	0,579
6	22,5	338	−40	2,35	0,806	0,233	0,375	0,641	0,461
7	11,1	450	−65	2,79	0,177	0,571	1,00	0,495	0,473

Таблица 8.2, окончание

№	y_1 , МПа	y_2 , %	y_3 , °C	y_4 , %	d_1	d_2	d_3	d_4	D
8	24,6	354	–40	2,10	0,922	0,281	0,375	0,724	0,515
9	12,4	529	–65	2,21	0,248	0,810	1,00	0,688	0,610
10	22,9	327	–45	3,10	0,829	0,200	0,500	0,392	0,425
11	11,4	560	–65	3,85	0,193	0,903	1,00	0,143	0,397
12	22,7	317	–30	2,34	0,818	0,169	0,125	0,644	0,325
13	10,7	463	–65	3,94	0,154	0,610	1,00	0,113	0,321
14	23,9	308	–40	2,14	0,884	0,142	0,375	0,711	0,428
15	10,6	540	–62	2,25	0,149	0,843	0,925	0,674	0,529
16	22,6	349	–35	3,43	0,812	0,266	0,250	0,282	0,351

При построении частных функций желательности использовался следующий стандартный прием: худшему значению свойства, полученному в факторном эксперименте, приписывалось значение желательности $d = 0$ и лучшему значению $d = 1$, и равному по величине изменению свойства ставилось в соответствие равное изменение желательности.

Экстремальные значения откликов приведены в табл. 8.3.

Таблица 8.3. Минимальные и максимальные значения показателей

	y_1 , МПа	y_2 , %	y_3 , °C	y_4 , %
$d = 0$	7,9	261	–25	4,28
$d = 1$	26,0	592	–65	1,27

Для всех свойств и показателей желательности по данным табл. 8.2 вычислены коэффициенты вариации. Одна полуреплика от факторного эксперимента была проведена с дублированием опытов.

Это дало возможность вычислить ошибку в измерении всех свойств и частных желательностей. Ошибка в определении обобщенной функции желательности вычислена по формуле для нахождения ошибок косвенных измерений.

Оценки статистической чувствительности и эффективности представлены для всех показателей качества в табл. 8.4.

Оказалось, что чувствительность частных функций желательности значительно превышает чувствительность соответствующих технологических показателей качества, и чувствительность обобщенной функции желательности не меньше чувствительности технологических показателей.

Таблица 8.4. Исследование статистической чувствительности и эффективности

	y_1	y_2	y_3	y_4	d_1	d_2	d_3	d_4	D
$V = S_y / \bar{y}$	0,352	0,236	0,313	0,314	0,649	0,645	0,594	0,434	0,352
$F = S_y^2 / S_{i0}^2$	176,7	28,0	80,6	74,4	158,4	32,9	67,3	74,4	37,8

Следует отметить, однако, что эти выводы не являются абсолютными и могут более или менее значительно нарушаться в тех случаях, когда способ преобразования значений свойств в шкалу желательности будет существенно отличаться от принятого в данном случае.

8.2. Поисковые методы экспериментальной оптимизации

Рассмотрим основные методы поиска экстремума, получившие наибольшее распространение на практике для решения задач экспериментальной оптимизации. Эти методы используются в основном при проведении различных исследований в лабораторных условиях, когда сформулированные ранее предположения, на которых они базируются, выполняются достаточно хорошо. Начнем рассмотрение с простейшего случая одномерного поиска.

8.2.1. Одномерный поиск

При изучении зависимости свойств от рецептурно-технологических факторов возникают задачи (определение составов, обеспечивающих желаемое значение свойства, нахождение координат экстремальных точек и т. д.), которые можно решить с помощью различных методов оптимизации. Все задачи оптимизации можно разделить на поиск оптимальных точек непосредственно на объекте исследования и поиск оптимальных точек посредством анализа математической модели. В настоящем разделе мы рассмотрим первую из перечисленных проблем в одномерном варианте [1, с. 407–410; 8, с. 8–20; 9, с. 46–63; 10, с. 109–118; 11, с. 277–283].

Суть рассматриваемых ниже методов одномерного поиска (методов исключения) состоит в следующем. Предположим, что точка экстремума достигается при каком-то значении фактора x' из заранее известного интервала (x_{\min}, x_{\max}) , называемого интервалом неопределенности. Требуется с помощью наименьшего количества опытов в максимальной степени сузить длину этого интервала, последовательно исключая из рассмотрения те его части, в которых нахождение точки экстремума оказывается невозможным. При этом предполагается, что функция отклика $y(x)$ унимодальна, т. е. обладает единственным экстремумом в точке x' (согласно договоренности — максимумом) и не имеет участков постоянства, т. е. для всех $x_{(1)} < x_{(2)} \leq x'$ справедливо $y(x_{(1)}) < y(x_{(2)})$, а для $x' \leq x_{(3)} < x_{(4)}$ верно $y(x_{(3)}) > y(x_{(4)})$.

В этих условиях для того чтобы уменьшить длину исходного интервала неопределенности $L = x_{\max} - x_{\min}$, необходимо иметь, как минимум, два опыта в некоторых точках $x_{(1)}$ и $x_{(2)}$, таких, что $x_{\min} < x_{(1)} < x_{(2)} < x_{\max}$.

Могут иметь место только три варианта исходов подобного экспериментирования: а) $y(x_{(1)}) < y(x_{(2)})$ — тогда максимум наверняка находится в точке $x' > x_{(1)}$, и первоначальный интервал неопределенности превратится в новый — $(x_{(1)}, x_{\max})$; б) $y(x_{(1)}) > y(x_{(2)})$ — в этом случае максимум может располагаться лишь в точке $x' < x_{(2)}$, и исходный интервал неопределенности следует заменить на $(x_{\min}, x_{(2)})$; в) $y(x_{(1)}) = y(x_{(2)})$ — случай весьма редкий, означающий, что экстремальная точка находится между значениями $x_{(1)}$ и $x_{(2)}$, новый интервал неопределенности будет $(x_{(1)}, x_{(2)})$.

Существуют различные методы размещения указанных точек на каждом этапе экспериментирования. Для их сопоставления будем использовать показатель эффективности соответствующего плана эксперимента как отношение длин начального интервала неопределенности и полученного после реализации N опытов L_N :

$$E = L/L_N \quad (8.13)$$

Метод последовательной дихотомии предусматривает размещение на каждом этапе экспериментирования сразу двух новых точек, расположенных симметрично относительно середины интервала неопределенности на расстоянии ϵ друг от друга. Здесь ϵ — по возможности малая величина, ограниченная снизу разрешающей способностью $\epsilon_{\text{доп}}$ в измерении величины x . Значение $\epsilon_{\text{доп}}$ — это та минимальная разница между соседними наблюдениями x , которая может быть обнаружена инструментально с помощью тех измерительных средств, которые имеются в распоряжении экспериментатора.

Координаты первых двух точек равны:

$$x_{(1)} = (x_{\max} + x_{\min} - \epsilon)/2; \quad x_{(2)} = (x_{\max} + x_{\min} + \epsilon)/2. \quad (8.14)$$

Координаты экспериментальных точек на последующих этапах исследования определяются по аналогичным формулам с учетом новых границ получающегося интервала неопределенности.

Длина интервала неопределенности после проведения k -й пары опытов равна:

$$L_N = L/2^k + (1 - 1/2^k)\epsilon; \quad N = 2k. \quad (8.15)$$

Тогда показатель эффективности метода приближенно ($\epsilon \cong 0$) можно считать равным $E \cong 2^k = 2^{N/2}$.

Задаваясь допустимой относительной погрешностью δ локализации точки экстремума, можно найти количество наблюдений N , которое необходимо для обеспечения желаемой точности в определении ее положения. Действительно, должно быть справедливо

$$\delta \geq L_N/L = 1/2^k + (1 - 1/2^k)\epsilon_{\text{доп}}/L; \quad N = 2k. \quad (8.16)$$

С практической точки зрения желательно при данном числе опытов использовать максимально возможное значение ϵ . Поэтому, определив с помощью формулы 8.16 число опытов N , целесообразно затем найти подобное значение ϵ из условия

$$\delta = 1/2^k + (1 - 1/2^k)\epsilon/L; \quad K = N/2, \quad \text{т. е. } \epsilon = (\delta \times 2^k - 1) \times L / (2^k - 1), \quad (8.17)$$

а затем использовать это ϵ при планировании эксперимента. Ясно, что $\epsilon \geq \epsilon_{\text{доп}}$.

Пусть, например, $L = 1000$; $\epsilon_{\text{доп}} = 5$; $\delta = 0,05$.

Будем иметь тогда $\delta = 0,05 \geq 1/2^k + (1 - 1/2^k) \cdot 5/1000$, откуда легко найти подходящее значение $k = 5$, $N = 10$.

Соответствующее значение ϵ целесообразно выбрать равным

$$\epsilon = (0,05 \cdot 2^5 - 1) / (2^5 - 1) \cdot 1000 = 19,35 \approx 20.$$

Отметим, что следует задаваться такой относительной погрешностью δ , чтобы абсолютная ошибка $\Delta = \delta \times L$ была бы не меньше, чем $2\epsilon_{\text{доп}}$, т. е. $\delta \geq 2\epsilon_{\text{доп}}/L$, так как только в этом случае все экспериментальные точки удалены друг от друга не ближе, чем на $\epsilon_{\text{доп}}$.

Если проводится только два эксперимента, то лучшее, что можно сделать, — это провести оба опыта в середине интервала возможно ближе друг к другу. Длина интервала неопределенности при этом получается равной $[1/2 + \epsilon/2]$. Предположим, что третий и четвертый эксперименты мы производим в середине получившегося интервала, как показано на рис. 8.1, б. Это дало бы новый интервал неопределенности, равный $(1/2 + \epsilon/2)/2 + \epsilon/2 = 1/4 + 3\epsilon/4$.

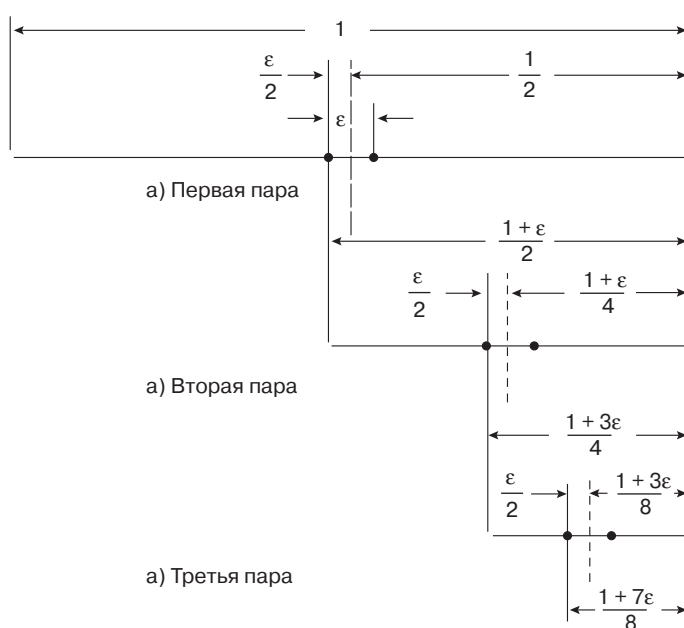


Рис. 8.1. Поиск методом дихотомии для $N = 6$

После пятого и шестого экспериментов, проведенных подобным же образом, интервал сократился бы до $1/8 + (7/8)\epsilon$ (рис. 8.1, в).

И вообще после N экспериментов (N , конечно, должно быть четным) оптимум окажется заключенным в интервал длиной $2^{-N/2} + (1 - 2^{-N/2})\epsilon$.

Таким образом, эффективность этого поиска методом дихотомии (половинным делением) возрастает с ростом N экспоненциально.

Метод поиска Фибоначчи базируется на использовании чисел Фибоначчи F_k , определяемых рекуррентным соотношением вида: $F_k = F_{k-1} + F_{k-2}$, $k > 1$, $F_0 = F_1 = 1$. Такая ϵ -минимаксная последовательная схема была предложена в 1953 г. Кифером.

Планирование эксперимента производится следующим образом. Координаты $x_{(1)}$ первого эксперимента определяются по формуле

$$x_{(1)} = x_{\min} + (f_{n-1} \times l + (-1)^n \epsilon) / f_n. \quad (8.18)$$

Здесь $\epsilon \geq \epsilon_{\text{доп}}$ — малая величина, играющая ту же роль, что и в методе последовательной дихотомии.

Вторая точка $x_{(2)}$ располагается в исходном интервале l симметрично первой. И вообще, поскольку в каждый очередной интервал неопределенности попадает один предыдущий эксперимент, для продолжения поиска новую точку следует располагать в этом интервале симметрично оставшейся. Если обозначить через $x_{(j)}$ координату оставшейся точки на j -м этапе поиска, а $l_{1(j)}$ и $l_{2(j)}$ — соответственно левую и правую границы очередного интервала неопределенности, то координата $x_{(j+1)}$ новой точки задается соотношением:

$$x_{(j+1)} = l_{1(j)} + l_{2(j)} - x_{(j)}. \quad (8.19)$$

Длина интервала неопределенности после проведения N опытов составляет

$$L_N = L \times (1 + F_{N-2} \times \epsilon) / F_N. \quad (8.20)$$

Теперь легко можно определить показатель эффективности метода. В первом приближении он равен $E \cong F_N$.

В методе поиска Фибоначчи предварительное определение необходимого числа опытов является совершенно обязательным, так как значение N используется при расчете координат первой точки согласно формуле (8.18). Для определения N следует задаться допустимой относительной погрешностью в определении положения экстремума δ и величиной $\epsilon_{\text{доп}}$. Тогда N можно найти с помощью соотношения:

$$\delta \geq L_N / L = (1 + F_{N-2} \times \epsilon_{\text{доп}} / L) / F_N. \quad (8.21)$$

Значения F_N приведены в табл. 8.5.

Таблица 8.5. Числа Фибоначчи

N	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
F_N	1	2	3	5	8	13	21	34	55	89	144	233	377	610	987	1597

После вычисления N можно определить наибольшее ϵ ($\epsilon \geq \epsilon_{\text{доп}}$), гарантирующее прежнее значение δ , и максимальное удаление экспериментальных точек друг от друга, что весьма желательно:

$$\epsilon = (F_N \times \delta - 1)L/F_{N-2}. \quad (8.22)$$

В методе поиска Фибоначчи последняя точка всегда располагается на расстоянии ϵ от одной из предыдущих. Укажем также, что, как и раньше, задаваемое значение δ должно соразмеряться с $\epsilon_{\text{доп}}$, т. е. $\delta \geq 2\epsilon_{\text{доп}}/L$.

Пусть по-прежнему $L = 1000$, $\epsilon_{\text{доп}} = 5$, $\delta = 0,05$. С помощью (8.21) подбираем подходящее значение N . Оно оказалось равным 7. Действительно,

$$\delta = 0,05 \geq 1/F_7 + (F_5/F_7) \cdot 5/1000 = 1/21 + (8/21) \cdot 5/1000 = 0,0495.$$

Значение ϵ , рекомендуемое для использования в эксперименте, равно

$$\epsilon = (F_7 \cdot 0,05 - 1) \cdot 1000/F_5 = (21 \cdot 0,05 - 1) \cdot 1000/8 = 50/8 \approx 6.$$

Метод золотого сечения является частной разновидностью метода Фибоначчи и отличается от него лишь тем, что в методе золотого сечения нет необходимости в обязательном предварительном определении общего числа опытов N . Координаты $x_{(1)}$ (первой точки в этом методе) находятся по формуле

$$x_{(1)} = x_{\min} + qL, \quad (8.23)$$

где $q = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F_{N-2}}{F_N} = 0,382$.

В остальном алгоритм данного метода не отличается от алгоритма метода поиска Фибоначчи. Можно заметить, что при указанном выборе начальной точки каждая новая точка делит очередной интервал неопределенности на две части, причем отношение большей части к меньшей равно отношению всего интервала к его большей части. Его эффективность после реализации N опытов будет равна $E = 1/((1 - q)^{N-1}) = 1/(0,618^{N-1})$. Количество опытов, как и раньше, может быть найдено исходя из условия

$$\delta \geq L_N/L = 1/E = 0,618^{N-1}. \quad (8.24)$$

Если, как в предыдущих примерах, $\delta = 0,05$, то $N = 8$.

В методе золотого сечения последняя точка располагается на расстоянии $l = (1 - 2q)L_{N-1}$ от одной из предыдущих точек. Так как $L_{N-2} = 0,618^{N-2} \times L$, то $l = (1 - 2q) \times 0,618^{N-2} \times L = 0,236 \times 0,618^{N-2} \times L$. Очевидно, что обязательно должно быть $l \geq \epsilon_{\text{доп}}$. Отсюда можно получить ограничение на задаваемое значение погрешности δ , обусловленное наличием допустимого приращения $\epsilon_{\text{доп}}$:

$$\delta \geq (0,618\epsilon_{\text{доп}})/(0,236L) = 2,619 \epsilon_{\text{доп}}/L.$$

Отношение большей части к меньшей в этой пропорции выражается квадратичной иррациональностью $\phi = (\sqrt{5} + 1)/2 \approx 1,6180339887...$ и, наоборот, отношение меньшей части к большей $1/\phi = (\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0,6180339887...$

Проиллюстрируем применение рассмотренных методов поиска на модельном примере [8, с. 14–16]. Пусть известно, что функция отклика принимает максимальное значение при некотором x из диапазона 0–1000. Требуется определить положение экстремума с погрешностью, не превышающей 5% от исходного диапазона, если допустимое разрешение измерительного устройства $\varepsilon_{\text{доп}} = 5$. По условию $L = 1000$; $\delta = 0,05$. Основные этапы расчета по каждому методу представлены на рис. 8.2, 8.3 и 8.4.

Отметим, что значения y вычислялись здесь по формуле $y = 50 \cdot 10^3 - (x - 700)^2$; экстремальное значение достигается при $x^* = 700$. Реально, конечно, зависимость $y(x)$ неизвестна; данный пример носит чисто иллюстративный характер, подтверждая работоспособность рассмотренных процедур.

В случае метода последовательной дихотомии, как уже упоминалось, в соответствии с формулой 8.17: $\delta = 0,05 \geq 1/2^k + (1 - 1/2^k) \times 5/1000$, откуда легко найти подходящее значение $k = 5$, $N = 10$. Соответствующее значение ε равно: $\varepsilon = (0,05 \times 2^5 - 1) \times 1000 / (2^5 - 1) = 19,35 \cong 20$.

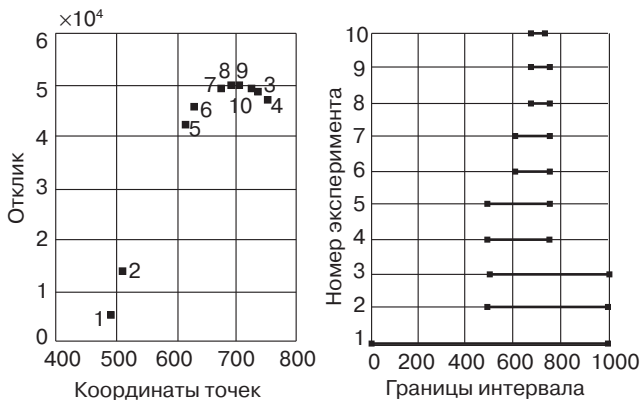


Рис. 8.2. Метод последовательной дихотомии

$$x_{(1)} = (x_{\max} + x_{\min} - \varepsilon)/2 = (1000 + 0 - 20)/2 = 490;$$

$$x_{(2)} = (x_{\max} + x_{\min} + \varepsilon)/2 = (1000 + 0 + 20)/2 = 510.$$

Поскольку, как это видно из рис. 8.2 (номера измерений обозначены на рис. 8.2 слева), значение отклика в точке $x_{(2)}$ больше соответствующего значения отклика в точке $x_{(1)}$: $y(x_{(2)}) > y(x_{(1)})$, экстремум находится в интервале между $x_{(1)}$ и x_{\max} (490 и 1000). Производим измерения в точках внутри этого нового интервала по той же схеме:

$$x_{(3)} = (x_{\max} + x_{(1)} - \varepsilon)/2 = (1000 + 490 - 20)/2 = 735;$$

$$x_{(4)} = (x_{\max} + x_{(1)} + \varepsilon)/2 = (1000 + 490 + 20)/2 = 755.$$

Из рис. 8.2 явствует, что значение отклика в точке $x_{(4)}$ меньше соответствующего значения отклика в точке $x_{(3)}$: $y(x_{(4)}) < y(x_{(3)})$, поэтому экстремум находится в интервале между $x_{(1)}$ и $x_{(4)}$ (490 и 755). Производим измерения в точках внутри этого нового интервала:

$$X_{(5)} = (x_{(4)} + x_{(1)} - \varepsilon)/2 = (755 + 490 - 20)/2 = 612;$$

$$X_{(6)} = (x_{(4)} + x_{(1)} + \varepsilon)/2 = (755 + 490 + 20)/2 = 632.$$

Поскольку, как это видно из рис. 8.2, значение отклика в точке $x_{(6)}$ больше соответствующего значения отклика в точке $x_{(5)}$: $y(x_{(6)}) > y(x_{(5)})$, экстремум находится в интервале между $x_{(5)}$ и $x_{(4)}$ (612 и 755). Производим измерения в точках внутри интервала по той же схеме:

$$x_{(7)} = (x_{(4)} + x_{(5)} - \varepsilon) / 2 = (755 + 612 - 20)/2 = 674;$$

$$x_{(8)} = (x_{(4)} + x_{(5)} + \varepsilon) / 2 = (755 + 612 + 20)/2 = 694.$$

Значение отклика в точке $x_{(8)}$ больше соответствующего значения отклика в точке $x_{(7)}$: $y(x_{(8)}) > y(x_{(7)})$, поэтому экстремум находится в интервале между $x_{(7)}$ и $x_{(4)}$ (674 и 755).

Производим последние измерения в точках внутри этого нового интервала:

$$x_{(9)} = (x_{(4)} + x_{(7)} - \varepsilon)/2 = (755 + 674 - 20)/2 = 704;$$

$$x_{(10)} = (x_{(4)} + x_{(7)} + \varepsilon)/2 = (755 + 674 + 20)/2 = 724.$$

Поскольку значение отклика в точке $x_{(10)}$ меньше значения отклика в точке $x_{(9)}$: $y(x_{(10)}) < y(x_{(9)})$, экстремум находится в интервале между $x_{(7)}$ и $x_{(10)}$ (674 и 724). На этом поиск может считаться законченным.

В случае метода поиска Фибоначчи пусть как и раньше $L = 1000$, $\varepsilon_{\text{доп}} = 5$, $\delta = 0,05$. По формуле (8.21) подбираем подходящее значение N . Оно равно 7. Действительно, $\delta = 0,05 > 1/F_7 + (F_5/F_7) \times (5/1000) = 1/21 + (8/21) \times (5/1000) = 0,0495$. Номера измерений, как и прежде, показаны на левом рисунке.

Значение ε , рекомендуемое для использования в эксперименте, здесь равно $\varepsilon = (F_7 \times 0,05 - 1) \times 1000 / F_5 = (21 \times 0,05 - 1) \times 1000 / 8 = 50 / 8 \cong 6$.

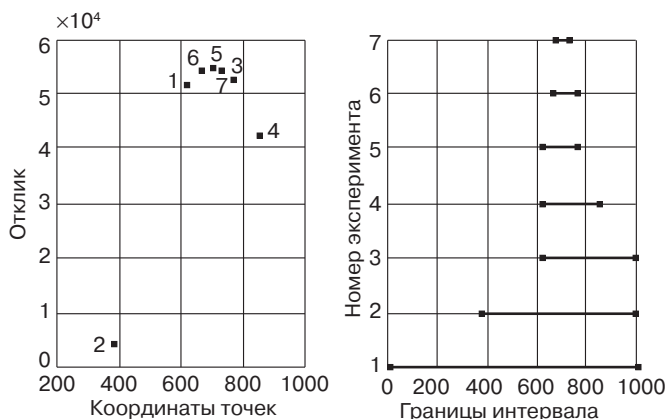


Рис. 8.3. Метод поиска Фибоначчи

Выбор точек становится ясным при анализе рис. 8.3. Границы интервала 1000–0 так относятся к границам 1000–381,2 = 618,8, как 618,8 относится к 381,2.

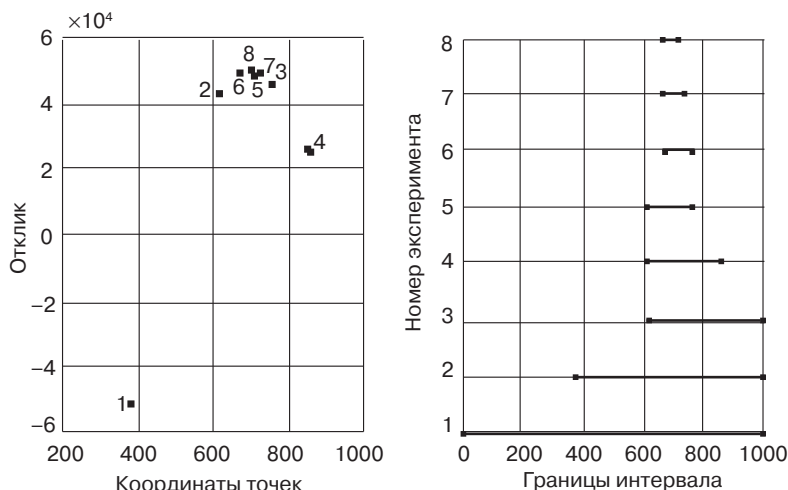


Рис. 8.4. Метод золотого сечения

В методе золотого сечения координаты $x_{(1)}$ (первой точки) находятся по формуле (8.23):

$$x_{(1)} = x_{\min} + qL = 0 + 0,382 \times 1000 = 382.$$

Вторая точка расположена, очевидно, симметрично относительно середины интервала:

$$x_{(2)} = x_{\max} - (x_{(1)} - x_{\min}) = 1000 - (382 - 0) = 618.$$

Поскольку, как это видно из рис. 8.4, значение отклика в точке $x_{(2)}$ больше соответствующего значения отклика в точке $x_{(1)}$: $y(x_{(2)}) > y(x_{(1)})$, экстремум находится в интервале между $x_{(1)}$ и x_{\max} (382 и 1000). Производим измерения в точке внутри этого нового интервала по той же схеме:

$$x_{(3)} = x_{\max} - (x_{(2)} - x_{(1)}) = 1000 - (618 - 382) = 764.$$

Из рис. 8.4 явствует, что значение отклика в точке $x_{(3)}$ больше соответствующего значения отклика в точке $x_{(2)}$: $y(x_{(3)}) > y(x_{(2)})$, поэтому экстремум находится в интервале между $x_{(2)}$ и x_{\max} (618 и 1000). Производим измерения в точке внутри этого нового интервала:

$$x_{(4)} = x_{\max} - (x_{(3)} - x_{(2)}) = 1000 - (764 - 618) = 854.$$

Поскольку, как это видно из рис. 8.4, значение отклика в точке $x_{(4)}$ меньше соответствующего значения отклика в точке $x_{(3)}$: $y(x_{(4)}) < y(x_{(3)})$, экстремум находится в интервале между $x_{(2)}$ и $x_{(4)}$ (618 и 854). Производим измерения в точке внутри интервала по той же схеме:

$$x_{(5)} = x_{(2)} + qL = 618 + 0,382 \times 236 = 708.$$

Значение отклика в точке $x_{(5)}$ больше соответствующего значения отклика в точке $x_{(3)}$: $y(x_{(5)}) > y(x_{(3)})$, поэтому экстремум находится в интервале между $x_{(2)}$ и $x_{(3)}$ (618 и 764). Производим измерения в точке внутри этого нового интервала:

$$x_{(6)} = x_{(2)} + qL = 618 + 0,382 \times 146 = 674.$$

Поскольку (см. рис. 8.4) значение отклика в точке $x_{(6)}$ меньше соответствующего значения отклика в точке $x_{(5)}$: $y(x_{(6)}) < y(x_{(5)})$, экстремум находится в интервале между $x_{(6)}$ и $x_{(3)}$ (674 и 764). Производим измерения в точке внутри этого нового интервала по той же схеме:

$$x_{(7)} = x_{(3)} - (x_{(5)} - x_{(6)}) = 764 - (708 - 674) = 730.$$

Из рис. 8.4 явствует, что значение отклика в точке $x_{(7)}$ меньше соответствующего значения отклика в точке $x_{(5)}$: $y(x_{(7)}) < y(x_{(5)})$, поэтому экстремум находится в интервале между $x_{(6)}$ и $x_{(7)}$ (674 и 730). Производим измерения в точке внутри этого нового интервала:

$$x_{(8)} = x_{(6)} + qL = 674 + 0,382 \times 56 = 696.$$

Поскольку значение отклика в точке $x_{(8)}$ больше значения отклика в точке $x_{(5)}$: $y(x_{(8)}) > y(x_{(5)})$, экстремум находится в интервале между $x_{(6)}$ и $x_{(5)}$ (674 и 708). На этом поиск может считаться законченным.

Бывают ситуации, когда сначала анализ проводится методом золотого сечения, а на заключительной стадии — по методу Фибоначчи.

Сопоставление трех указанных методов между собой позволяет сделать такие выводы: наибольшей эффективностью обладает метод поиска Фибоначчи; метод золотого сечения, мало в чем уступая ему в эффективности, несколько проще при проведении расчетов. Наконец, метод последовательной дихотомии наименее эффективен, хотя и представляется наиболее очевидным. Общий недостаток всех трех методов — полная потеря работоспособности при наличии помех случайного характера. Если такие помехи имеют место, приходится использовать шаговые процедуры поиска.

8.2.2. Многомерный поиск

С первого взгляда можно подумать, что разница между задачами поиска по многим переменным и уже решенными задачами поиска по одной переменной состоит только в том, что потребуются немного дополнительных вычислений для того, чтобы методы поиска для одной переменной распространить на многомерные задачи. К сожалению, это не так. Задачи поиска по многим переменным кардинальным образом отличаются по структуре от задач поиска по одной переменной. Для нас представляют интерес три возникающих при этом проблемы [8, с. 20–22; 9, с. 93–96].

Во-первых, многомерность делает унимодальность менее вероятной. Несомненно, определение унимодальности можно легко распространить на многомерный случай, но иногда трудно предположить унимодальность поверхности отклика при возрастании числа измерений.

Второе, более важное следствие состоит в том, что нельзя найти меру эффективности поиска, которая не зависела бы некоторым образом от удачи экспериментатора.

Многомерность ослабляет те методы поиска, которые были столь эффективны, когда мы имели дело только с линиями. Для любой частной задачи поиска площадь неопределенности можно использовать в качестве меры эффективности поиска. Но мы

не сможем заранее предсказать, какой величины или формы будет окончательная область. Следовательно, объективного способа сравнивать заранее различные методы не существует, и нельзя выявить метод многомерного поиска, оптимальный в каком-то смысле. Для любого алгоритма можно подобрать такую функцию отклика, когда она окажется предпочтительнее других, в то же время можно построить и другую функцию отклика, при которой этот алгоритм станет практически неработоспособным.

Третья трудность — само восприятие размера в многомерных пространствах. Попробуем вообразить, что произойдет с размером, когда мы переходим от прямой к двумерному квадрату и затем к трехмерному кубу.

Рассмотрим прямую единичной длины — верхнюю грань куба на рис. 8.5. Предположим, что мы применили метод поиска, который привел нас к интервалу неопределенности, имеющему одну десятую первоначальной длины. Такой метод обеспечивает эффективную выборку, так как среди десяти равных отрезков прямой выделен интервал, содержащий оптимум. Этот интервал выглядит сравнительно малым по сравнению с первоначальным отрезком единичной длины.

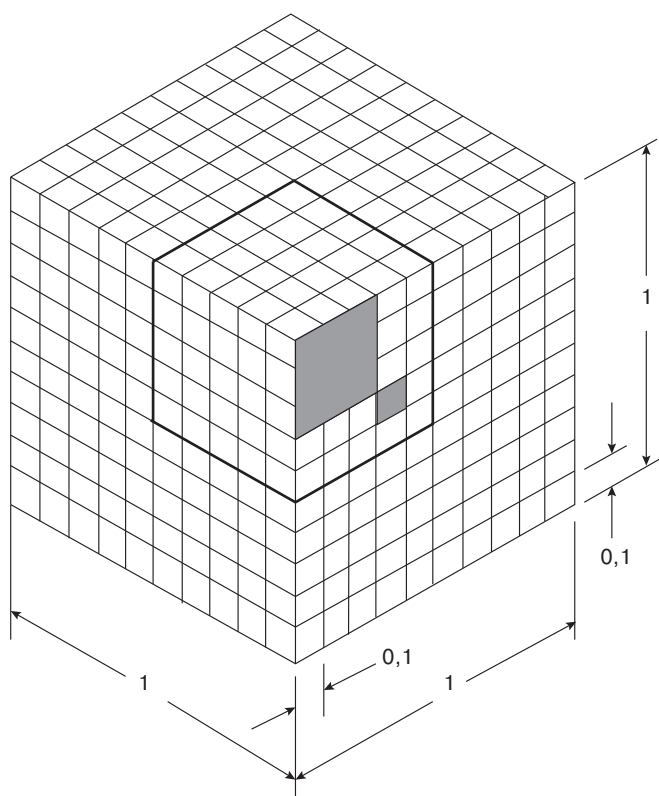


Рис. 8.5. Одно из последствий многомерности

Далее представим себе единичный квадрат, поделенный на квадратики, каждый со стороной 0,1, как на одной из сторон куба рис. 8.5. Показанная зачерненная область включает десять квадратов из ста, т. е. ровно десятую часть первоначальной области. Как бы то ни было, но каким-то образом эта десятая выглядит больше, чем десятая часть отрезка.

Это впечатление еще более заметно на единичном кубе, который разделен на тысячу кубических ячеек, каждая со стороной 0,10 единичной длины. Чтобы выделить десять процентов этой области, надо взять сто ячеек (на рис. 8.5 – объем, равный $0,4 \times 0,5 \times 0,5$). Мы видим, что десять процентов интервала неопределенности, которые выглядят достаточно малыми на прямой, на кубе кажутся довольно большими. Если мы имеем дело с функцией пятидесяти переменных, то гиперкуб, занимающий только десять процентов объема, будет иметь сторону, равную $(0,1)^{1/50} = 0,93$! Это явление, которое на первый взгляд может показаться парадоксальным, возникает из-за того, что способ измерения линейных, одномерных объектов (с помощью процентного отношения) мы хотим использовать для измерения многомерных объектов – объема и его многомерного обобщения. Таким образом, если мы имеем метод поиска, уменьшающий многомерный объем неопределенности до определенной его части, то эта величина в процентном отношении будет чрезвычайно мала по сравнению с диапазоном изменения отдельных независимых переменных.

Итак, эта многомерность причиняет нам вред в трех отношениях: она ослабляет нашу уверенность в унимодальности; она не позволяет использовать априорные меры эффективности, которые позволяют пользоваться мощным одномерным минимаксным методом; наконец, она заставляет нас искать области неопределенности, которые являются весьма малыми частями первоначальной области эксперимента. Но эти препятствия, которые затрудняют отыскание эффективных методов поиска, в то же самое время делают эти поиски более интересными.

Существует большое число разнообразных методов многомерного поиска. В дальнейшем будут рассмотрены лишь некоторые из них, получившие наибольшее распространение для целей экспериментальной оптимизации. Эти методы можно разделить на две большие группы: на *градиентные* и *неградиентные методы* поиска экстремума.

Все *градиентные методы* основаны на предварительном определении градиента функции целевого отклика Φ :

$$\Delta\Phi = \frac{\partial\Phi}{\partial x_1}i + \frac{\partial\Phi}{\partial x_2}j + \dots + \frac{\partial\Phi}{\partial x_k}k, \quad (8.25)$$

где $\Delta\Phi$ – обозначение градиента; $\partial\Phi/\partial x_i$ – частная производная функции по i -му фактору; i, j, k – единичные векторы в направлении координатных осей.

Предполагается, что функция Φ непрерывна и однозначна. Если ее разложить в ряд Тейлора в окрестностях точки, в которой берется значение градиента, и ограничиться лишь линейными членами, можно показать, что координаты градиента совпадают с коэффициентами полученного разложения.

Рассмотрим теперь одну из конкретных разновидностей градиентных методов поиска.

Метод крутого восхождения (МКВ) (метод Бокса–Уилсона, 1951 г.) представляет собой процедуру последовательного перемещения по пути крутого восхождения, т. е. в направлении наибольшего увеличения отклика [1, с. 410–425; 6, с. 118, 129–132; 8, с. 22–33; 10, с. 125–130; 11, с. 288–292; 12, с. 318–321; 13, с. 59–76; 14, с. 21–24; 15, с. 31–37; 16, с. 48–58; 17, с. 546–555; 18, с. 174–178; 19, с. 52–54; 20, с. 88–101; 21, с. 41–55; 22, с. 54–60; 23, с. 50–57; 24, с. 261–266]. Конечно же, если необходима минимизация, то тогда мы говорим о методе крутого (наискорейшего) спуска.

Подобранная модель первого порядка имеет вид:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i \quad (8.26)$$

где y — отклик; $b_0, b_1, b_2, \dots, b_i, \dots, b_k$ — коэффициенты регрессии (параметры модели); $x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k$ — факторы; k — количество факторов.

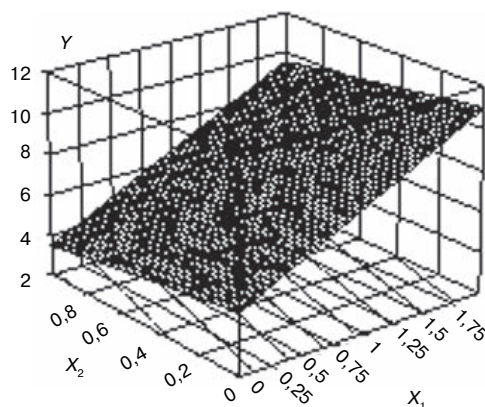


Рис. 8.6. Поверхность отклика

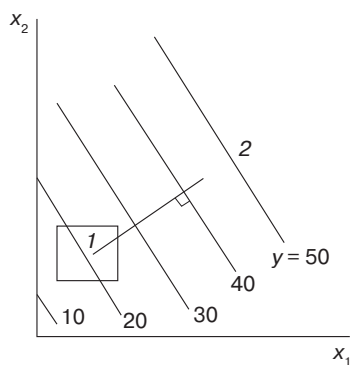


Рис. 8.7. Путь крутого восхождения

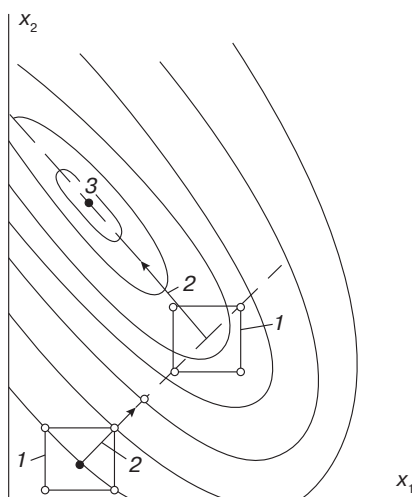


Рис. 8.8. Стратегия метода Бокса–Уилсона

Поверхность отклика первого порядка представляет собой плоскость (рис. 8.6). Эта поверхность пересекается горизонтальными плоскостями, соответствующими определенным значениям y . Строятся проекции линий пересечения (в данном случае прямых) на плоскость x_1 – x_2 . Полученные при этом контурные линии y представляются рядом параллельных прямых.

Направление крутого восхождения — это направление, в котором y возрастает наиболее быстро, оно параллельно нормали к контурам подобранной поверхности отклика. Обычно в качестве пути крутого восхождения мы выбираем линию, проходящую через центр области экспериментирования и нормальную к контурам подобранной поверхности (рис. 8.7). На этом рисунке 1 — область выбора поверхности отклика первого порядка, 2 — путь крутого восхождения. Таким образом, шаги вдоль этого пути пропорциональны коэффициентам регрессии b_i (точнее, шаги по каждому из координатных направлений). Фактическая длина шага определяется экспериментатором на основе опыта.

Рис. 8.8 отражает стратегию метода Бокса–Уилсона. Здесь 1 — план эксперимента для линейной модели, 2 — линейное приближение градиента, 3 — стационарная область

Эксперименты проводятся по линии крутого восхождения до тех пор, пока не перестанет наблюдаться увеличение отклика. Затем для описания отклика можно подобрать новую модель первого порядка и найти новую линию крутого восхождения. Продолжая процедуру таким образом, экспериментатор попадает в окрестность оптимума; об этом обычно свидетельствует неадекватность модели первого порядка. В таком случае для получения более точной оценки положения оптимума проводятся дополнительные эксперименты.

Рассмотрим пример, заимствованный из книги [6, с. 130–132].

Проведена оптимизация изготовления изделий из пластизоль на основе поливинилхлорида (Штаркман Б.П. и др., 1969 г.). Процесс состоит из стадий получения исходного материала и его желатинирования.

При разработке оптимальных режимов методом крутого восхождения авторы рассмотрели шесть факторов, определяющих процесс желатинирования и состав исходного материала: x_1 — массовое отношение пластификатора (диоктилфталат) к поливинилхлориду; x_2 — массовое отношение стабилизатора (двухосновной фталат свинца) к поливинилхлориду; x_3 — температура преджелатинизации; x_4 — температура желатинизации; x_5 — время преджелатинизации; x_6 — время желатинизации.

Параметров оптимизации было четыре: y_1 — разрушающее напряжение; y_2 — неравномерность по толщине; y_3 — толщина пленки; y_4 — относительное удлинение при разрыве.

В связи с наличием большого числа параметров оптимизации авторы работы воспользовались обобщенным критерием в форме (8.10).

Частные функции желательности d_1, d_2, d_3, d_4 (индексы соответствуют индексам параметров оптимизации), найденные по формуле (8.8), приведены на рис. 8.9.

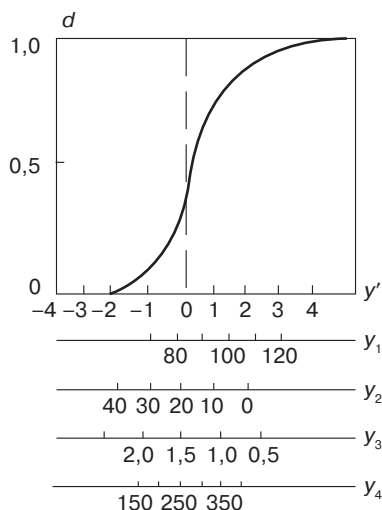


Рис. 8.9. Функция желательности

Для постановки опытов с целью определения направления крутого восхождения был выбран план ДФЭ (дробный факторный эксперимент) типа 2^{6-2} , содержащий 17 точек, включая точку в центре плана. План и результаты экспериментов приведены в табл. 8.6. В двух последних колонках табл. 8.6 записаны значения обобщенных критериев оптимальности.

Таблица 8.6. План и результаты экспериментов для получения линейных уравнений

№	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	y_1	y_2	y_3	y_4	D_1	D_2
1	–	–	–	–	+	–	45,4	20	1,83	355	0,0	0,0
2	+	–	–	–	–	+	81,9	31	1,08	358	0,29	0,13
3	–	+	–	–	–	+	93,7	29	1,24	300	0,37	0,20
4	+	+	–	–	+	–	69,0	19	1,34	298	0,25	0,11
5	–	–	+	–	–	+	55,1	18	1,51	167	0,0	0,0
6	+	–	+	–	+	–	84,6	16	2,34	2,70	0,0	0,44
7	–	+	+	–	+	–	78,3	5	1,78	383	0,33	0,36
8	+	+	+	–	–	+	80,5	21	1,38	364	0,41	0,26
9	–	–	–	+	–	–	97,0	2	1,27	339	0,57	0,45
10	+	–	–	+	+	+	71,4	38	1,26	380	0,0	0,0
11	–	+	–	+	+	+	106,0	15	1,43	395	0,63	0,66
12	+	+	–	+	–	–	91,0	24	1,16	350	0,48	0,30
13	–	–	+	+	+	+	78,4	15	2,11	337	0,16	0,30
14	+	–	+	+	–	–	81,0	28	1,21	382	0,32	0,14
15	–	+	+	+	–	–	90,3	21	1,22	330	0,55	0,42
16	+	+	+	+	+	+	78,0	16	1,83	381	0,26	0,28
17	0	0	0	0	0	0	82,9	25	1,43	346	0,36	0,22

$$D_1 = \sqrt[4]{d_1 d_2 d_3 d_4} \quad D_2 = \sqrt{d_1 d_2}. \quad (8.27)$$

В качестве основного был выбран критерий D_2 .

Значения факторов в точках плана приведены в табл. 8.7.

Таблица 8.7. Значения факторов в точках плана (см. табл. 8.6)

x_j	\tilde{x}_1 , масс. ч.	\tilde{x}_2 , масс. ч.	\tilde{x}_3 , °C	\tilde{x}_4 , °C	\tilde{x}_5 , с	\tilde{x}_6 , мин
+1	0.90	0.07	83	185	65	12
0	0.85	0.05	80	180	45	10
–1	0.80	0.03	77	175	25	8

После статистической обработки данных табл. 8.6 были получены следующие уравнения регрессии:

$$y_1 = 80,02 + 4,95x_1 - 1,75x_3 + 6,46x_4 - 3,29x_5 + 0,95x_6;$$

$$y_2 = 21,13 + 3,0x_1 - 2,38x_2 - 3,62x_3 + 1,25x_4 - 3,12x_5 + 1,76x_6;$$

$$y_3 = 1,5 - 0,077x_2 + 0,173x_3 + 0,241x_5;$$

$$y_4 = 336,8 + 11,06x_1 + 13,31x_2 - 10,06x_3 - 24,94x_4 - 13,06x_5;$$

$$D_1 = 0,3116 - 0,0140x_1 + 0,1435x_2 - 0,0123x_3 + 0,1058x_4 - 0,0620x_5 - 0,0011x_6;$$

$$D_2 = 0,253 - 0,046x_1 - 0,070x_2 + 0,0217x_3 + 0,0691x_4 + 0,0153x_5 - 0,0245x_6.$$

Таблица 8.8. Исходные данные для крутого восхождения

Параметр	Данные по факторам					
	\tilde{x}_1	\tilde{x}_2	\tilde{x}_3	\tilde{x}_4	\tilde{x}_5	\tilde{x}_6
\tilde{x}_{0j}	0,85	0,05	80	180	45	10
$\tilde{x}_{\max j} - \tilde{x}_{0j}$	0,05	0,02	3	5	20	2
b_j	-0,046	0,071	0,022	0,069	0,015	-0,024
$(\tilde{x}_{\max j} - \tilde{x}_{0j}) \cdot b_j$	-0,0023	0,00142	0,066	0,345	0,30	-0,048
$l(\tilde{x}_{\max j} - \tilde{x}_{0j}) \cdot b_j$	-0,01	0,008	0,4	2,0	1,7	-0,3

Среди этих уравнений только зависимость для y_4 оказалась неадекватной.

Крутое восхождение проводили в соответствии с уравнением регрессии для y_2 . Однако по ходу движения к оптимуму вычисляли значения всех параметров оптимизации, и окончательный вывод делали на основании сопоставления значений обоих обобщенных критериев оптимальности. Исходные данные для крутого восхождения приведены в табл. 8.8, l — коэффициент пропорциональности. Последняя строчка составлена с округлением.

Результаты опытов по плану крутого восхождения приведены в табл. 8.9.

Наилучшим был признан результат, достигнутый в точке 3. Значения факторов точки 3 были выбраны в качестве центра плана для следующей серии экспериментов.

Статистическая обработка данных второй серии опытов показала, что точка 3 крутого восхождения расположена вблизи оптимума. Значения факторов в этой точке были приняты в качестве оптимальных.

Неградиентные методы поиска отличаются большим разнообразием идей, положенных в их основу. Всех их роднит необходимость совершения пробных шагов с последующим движением в ту сторону, где результаты проб оказались благоприятными.

Таблица 8.9. Результаты экспериментов по плану крутого восхождения

№	\tilde{x}_1	\tilde{x}_2	\tilde{x}_3	\tilde{x}_4	\tilde{x}_5	\tilde{x}_6	y_1	y_2	y_3	y_4	D_1	D_2
1	0,84	0,058	80,4	182	46,7	9,7	83,4	23,4	1,15	356	0,45	0,26
2	0,83	0,066	80,8	184	48,4	9,4	88,7	25,1	1,59	367	0,37	0,28
3	0,82	0,074	81,2	186	50,1	9,1	109,8	16,0	0,82	379	0,71	0,68
4	0,81	0,082	81,6	188	51,8	8,8	81,6	23,4	1,15	344	0,42	0,23
5	0,80	0,090	82,0	190	53,5	8,5	89,7	22,5	1,55	360	0,43	0,36
6	0,79	0,098	82,4	192	55,2	8,2	122,0	29,0	1,00	364	0,47	0,26
7	0,78	0,106	82,8	194	56,9	7,9	90,0	22,0	1,22	340	0,51	0,36
8	0,77	0,114	83,2	196	58,6	7,6	93,0	16,0	1,96	310	0,34	0,72

Рассмотрим, прежде всего, метод *покоординатного поиска*, называемый также методом Гаусса-Зайделя [6, с. 116–118; 8, с. 33–35; 23, с. 33–36]. Метод состоит в последовательной оптимизации процесса по отдельным факторам при фиксированных значениях остальных. Исходную точку выбирают на основании результатов предшествующих стадий исследования. Анализ результатов экспериментов проводят графически в натуральной системе координат. Исследования осуществляются в несколько циклов. В первом цикле реализуется движение параллельно одной из осей факторного пространства, определятся наилучшее значение параметра оптимизации; затем в этой наилучшей точке проводится поворот, и движение ведется далее параллельно другой оси; подобная процедура продолжается, пока не будут рассмотрены все исследуемые факторы.

Координаты частного оптимума, полученного в первом цикле, используют в качестве исходной точки второго цикла, где варьируются другие переменные. Координаты частного оптимума, полученного во втором цикле, используют в качестве исходной точки третьего цикла и т. д.

Это, пожалуй, наипростейший способ поиска экстремума, когда каждый из факторов изменяется поочередно.

Он включает в себя следующие стадии.

1. Выбор начальной точки x^0 .
2. Проведение эксперимента вблизи x^0 путем варьирования фактора x_1 в точках $x_1 \pm \delta x_1$ при фиксированных значениях других факторов: $x_2 = x_2^0, \dots, x_n = x_n^0$.
3. Сравнение результатов опытов $y(x_1 - \Delta x_1)$, $y(x_1 + \Delta x_1)$ с целью выбора направления движения в сторону увеличения целевого отклика.
4. Осуществление движения в выбранную сторону до достижения точки частного экстремума. Определение этой точки может осуществляться с помощью любого

метода одномерного поиска. Если $y(x_1 - \Delta x_1) \approx y(x_1 + \Delta x_1)$, движение, естественно, не проводится и считается, что точка частного экстремума находится в x_1^0 . В любом случае в последующих циклах до n -го включительно фактор x_1 стабилизируется в найденной точке.

5. Последовательное повторение двух предыдущих частей алгоритма для каждого из факторов поочередно. После реализации n циклов все действия могут повторяться в прежнем порядке, снова начиная с фактора x_1 . Желательно, как и раньше, по мере продвижения к экстремуму уменьшать интервалы Δx .

Считается, что точка экстремума достигнута, если пробные движения по всем факторам не приводят к увеличению отклика.

На рис. 8.10 на примере двухфакторной задачи можно проследить, как осуществляется поиск методом Гаусса–Зайделя. При этом используется простейший алгоритм одномерного поиска с постоянным шагом.

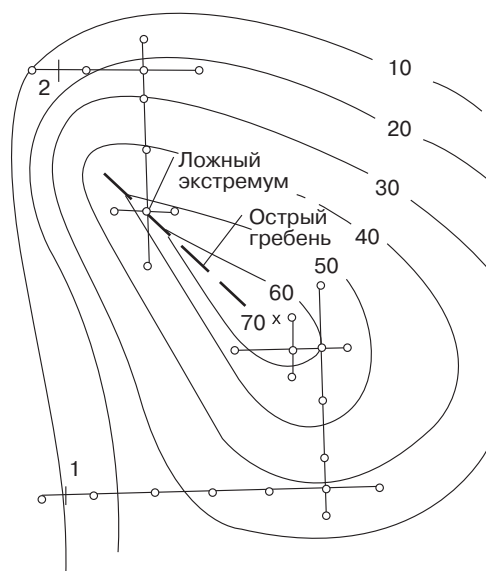


Рис. 8.10. Метод Гаусса–Зайделя

Метод Гаусса–Зайделя весьма прост при практической реализации, достаточно помехоустойчив. Однако ясно, что траектория поиска вряд ли будет наикратчайшей. Кроме того, что, пожалуй, важнее, метод Гаусса–Зайделя имеет тенденцию к ложной остановке процедуры, если в ходе движения поисковая точка окажется на узком «гребне». Подобная ситуация, когда метод Гаусса–Зайделя дает ложное значение экстремума, изображена на том же рис. 8.10 (движение из начальной точки 2). Ясно, что указанное обстоятельство существенно уменьшает область применимости данного метода.

Не зря этот метод еще называют методом блуждания в лабиринте.

Эффективным способом оптимизации является *последовательный симплексный метод (ПСМ)*. Все эксперименты в этом случае надо реализовывать при условиях, отвечающих вершинам правильных n -мерных симплексов [1, с. 430–438; 6, с. 81–85, 118–120; 8, с. 74–88; 14, с. 24–28; 16, с. 58–74; 18, с. 221–230; 20, с. 103–111; 21, с. 55–60; 22, с. 60–65; 23, с. 57–61; 25, с. 29–68]. Начальная точка поиска обычно соответствует установленному технологическому регламенту или наилучшему из известных режиму ведения процесса. Эта точка может являться вершиной или центром начального симметричного правильного симплекса. Ориентация начального симплекса может быть произвольной, так как наиболее выгодное направление движения не представляется возможным прогнозировать. Размеры симплекса в ПСМ должны быть достаточно малы, но при этом возникает проблема выделения полезного сигнала на фоне шума, а именно, статистически значимого различия значений отклика в вершинах симплекса малых размеров. Эти трудности могут быть преодолены путем накопления результатов повторных наблюдений в вершинах симплекса и сравнения полученных средних арифметических значений. Необходимо, по возможности, стремиться планировать симплекс возможно больших размеров, так как это сокращает количество необходимых повторных наблюдений в вершинах симплекса и ускоряет движение к экстремуму.

Движение к экстремуму поверхности отклика на каждом шаге должно осуществляться посредством перехода от реализуемого симплекса к новому путем отбрасывания наихудшей вершины и построения точки, симметричной к ней относительно центра $(n - 1)$ -мерной оставшейся грани симплекса. Каждую i -ю размерную координату зеркальной точки x_{n+h} h -го симплекса можно вычислить по формуле

$$x_{(n+h),i} = 2x_{gi}/n - (n + 2)x_{qi}/n. \quad (8.28)$$

Здесь x_{gi} — i -я размерная координата g -й из $n+1$ вершин рассматриваемого $(h - 1)$ -го симплекса, а x_{qi} — i -я размерная координата его q -ой отброшенной вершины. Далее таким же образом можно построить последовательные симплексы. При этом иногда может возникнуть ситуация, предусмотренная следующим правилом. Если одно и то же наихудшее значение отклика имеет место в нескольких вершинах рассматриваемого симплекса, то вопрос об отбрасывании одной из них должен быть решен случайным образом. Непрерывное смещение симплекса может привести к выходу новой зеркальной точки за границы допустимой области изменения факторов. В этом случае перемещение симплекса осуществляется по следующему правилу. Если в зеркальной точке формируемого симплекса нарушаются факторные или функциональные ограничения, то необходимо вернуться к предыдущему симплексу и отбросить в нем худшую вершину после наихудшей. Иногда это правило приходится применять повторно до тех пор, пока не будет найдена новая зеркальная точка, принадлежащая допустимой области факторного пространства.

Если зеркальная точка нового симплекса является его наихудшей вершиной, т. е. поступательное перемещение симплекса преобразуется в качание относительно

противолежащей грани, то это может свидетельствовать о приближении к экстремуму поверхности отклика или о наличии большой ошибки наблюдений. Пока точка экстремума в факторном пространстве остается неподвижной, симплекс постоянно качается (вращается) около некоторой близкой к ней точки. Если же точка экстремума начинает дрейфовать, то вслед за ней перемещается и симплекс, описывая спираль около ее траектории. При этом условия управления объектом будут непрерывно изменяться, приспособляясь к дрейфу.

Метод последовательного симплекс-планирования, или просто симплекс-планирование, является одним из сравнительно новых методов поиска экстремума функции многих переменных.

Главной особенностью симплекс-планирования является совмещение процессов движения по поверхности отклика и ее изучения. При этом движение в факторном пространстве предписывается после каждого опыта.

Метод симплекс-планирования был предложен в 1962 г. Спендлеем и др. Сейчас известно много примеров успешного его применения при решении различных практических задач.

Симплекс-планированием называется метод нахождения экстремума функции, основанный на шаговом движении путем последовательного отображения вершин регулярного симплекса в факторном пространстве. Опыты ставятся только в тех точках факторного пространства, которые соответствуют вершинам симплекса.

Симплекс — это простейшая выпуклая геометрическая фигура, образованная множеством $(k+1)$ независимых точек в k -мерном пространстве и обладающая минимальным количеством вершин. Вершинами называются точки, образующие симплекс. В k -мерном пространстве число вершин симплекса равно $k + 1$.

Симплекс является регулярным, если расстояния между его вершинами равны между собой. Регулярным можно сделать любой симплекс путем соответствующего преобразования координат.

На плоскости регулярный симплекс имеет вид правильного треугольника. В трехмерном пространстве регулярный симплекс является тетраэдром с четырьмя равноудаленными одна от другой вершинами (рис. 8.11).

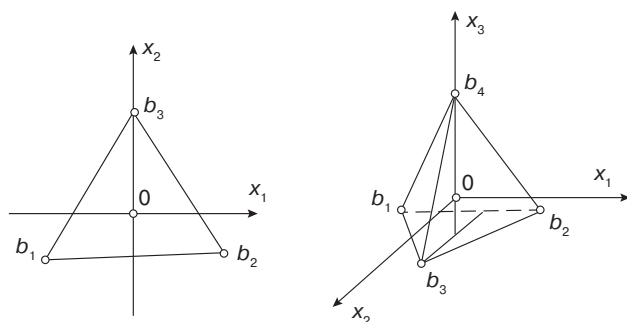


Рис. 8.11. Правильные симплексы

Из любого симплекса, добавив всего одну точку, можно получить новый симплекс, если отбросить одну из вершин исходного симплекса, но использовать оставшуюся грань.

При симплекс-планировании движение в область оптимума в факторном пространстве осуществляется перемещением симплекса путем последовательного отбрасывания вершин с минимальным значением параметра оптимизации и построением нового симплекса на оставшейся грани с новой вершиной, которая, в силу симметрии, является зеркальным отображением отброшенной. Здесь движение ведется не после серии опытов, как при методе крутого восхождения, а после каждого опыта, начиная с $(k+1)$ -го. В результате образуется цепочка симплексов, перемещающихся в область оптимума. Центр этих симплексов движется по линии, близкой направлению к градиенту.

Движение из центра каждого симплекса через грань, противоположную вершине с минимальным значением параметра оптимизации, обычно совпадает с направлением крутого восхождения, рассчитанного по результатам опытов, выполненных в вершинах симплекса. Подобное положение имеет место при условии, что поверхность отклика, ограниченная симплексом, близка к линейной.

На рис. 8.12 показаны схемы достижения экстремума одной и той же поверхности отклика методами крутого восхождения и симплекс-планирования [18, с. 222]. Рассмотрим движение к экстремуму на примере задачи отыскания наибольшего значения целевой функции двух факторов. Для достижения экстремума методом крутого восхождения (рис. 8.12, *а*) в окрестности точки M с известным значением целевой функции был поставлен полный факторный эксперимент 2^2 (точки 1–4), движение по градиенту осуществлялось в опытах 5–9 до тех пор, пока значение целевой функции не начало ухудшаться. С центром в лучшей точке 7 пришлось вновь реализовать, план 2^2 (точки 10–13). Новое движение по градиенту (точки 14–15) приводит к экстремальному значению целевой функции. При использовании симплекс-планирования (рис. 8.12, *б*) в исходном симплексе (точки 1–3) худшей оказалась точка 2. Точка 4 является зеркальным отражением худшей точки относительно c_1 — центра грани 1–3. В новом симплексе 1, 3, 4 худшей оказалась точка 1.

В результате применения симплексного метода достигли области оптимума (симплекс 9, 10, 11). Таким образом, оба метода потребовали примерно одинакового числа опытов.

Одним из удачных алгоритмов применения ПСМ является алгоритм с переменным размером симплекса [6, с. 119]. На рис. 8.13 представлен график, иллюстрирующий применение этого метода для определения оптимального режима в двухфакторном пространстве. Исходный симплекс выбирают таким образом, чтобы одна из его вершин (точка 1) помещалась в углу изучаемой области факторного пространства, а ребро совпадало с осью абсцисс.

После постановки экспериментов определяют вершину симплекса с наихудшим значением параметра оптимизации и вычисляют координаты симметричной ей точки. Затем строят уменьшенный симплекс.

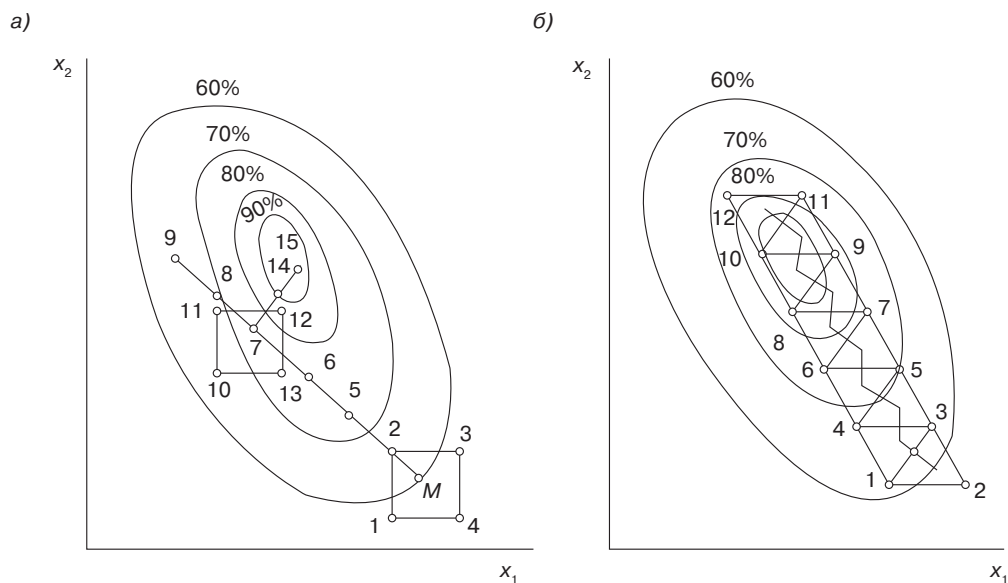


Рис. 8.12. Сравнение симплексного метода с крутым восхождением

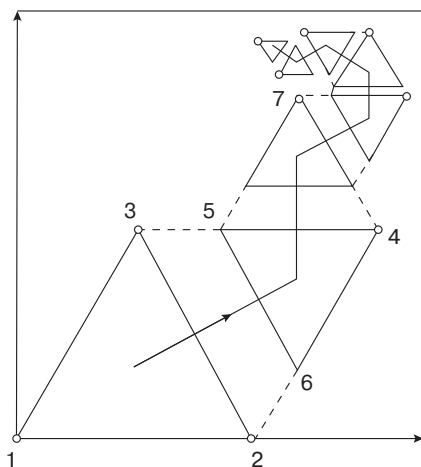


Рис. 8.13. Симплексы переменного размера

Эту процедуру продолжают, пока величина ребра очередного симплекса не будет значимо отличаться от ошибки воспроизводимости.

Некоторые варианты движения по поверхности отклика при симплекс-планировании показаны на рис. 8.14. Здесь *a* — движение без ошибок, *б* — с образованием петель, *в* — колебания, *г* — заикливание.

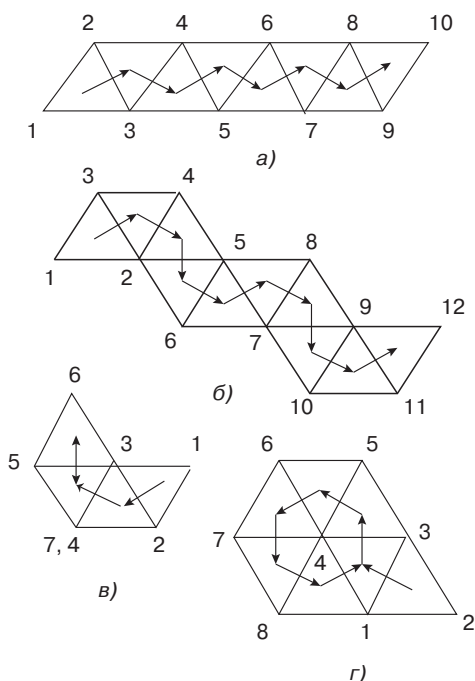


Рис. 8.14. Шаги ПСМ

Перечислим основные правила, используемые при ведении поиска [8, с. 76–82].

1. Все опыты надо ставить при условиях, отвечающих вершинам правильных n -мерных симплексов.

2. Движение к экстремуму поверхности целевого отклика на каждом шаге должно осуществляться путем перехода от реализуемого симплекса к новому.

3. Если одно и то же наихудшее значение отклика наблюдается в нескольких вершинах рассматриваемого симплекса, то вопрос об отбрасывании одной из них должен решаться случайным образом.

4. Если в зеркальной точке нового симплекса нарушаются факторные или функциональные ограничения, то необходимо вернуться к предыдущему симплексу и отбросить в нем худшую вершину после наихудшей.

5. Проводить новые наблюдения в тех вершинах последнего симплекса, которые были реализованы приблизительно $2(n + 1)$ шагов назад.

6. Если зеркальная точка нового симплекса является его наихудшей вершиной, то необходимо вернуться к симплексу предыдущего номера и отбросить в нем худшую вершину после наихудшей.

7. Если какая-либо вершина сохраняется в последовательности нескольких симплексов после применения предыдущих правил, т. е. является точкой качания (вращения) симплекса, то необходимо в ней в вершинах содержащих ее симплексов провести новые наблюдения отклика.

Пример. Необходимо найти область максимальных значений условной прочности при растяжении резин при варьировании содержания двух наполнителей (А и Б) в области от 0 до 25 массовых частей.

Метод Гаусса–Зайделя.

Метод состоит в последовательной оптимизации процесса по отдельным факторам при фиксированных значениях остальных. Исходную точку выбирают на основании результатов предшествующих стадий исследования. Осуществляется движение параллельно одной из осей факторного пространства, определяется наилучшее значение параметра оптимизации и затем в этой наилучшей точке проводится поворот и движение ведется далее параллельно другой оси. Подобная процедура продолжается, пока не будет найдена точка, любое движение из которой ухудшает отклик.

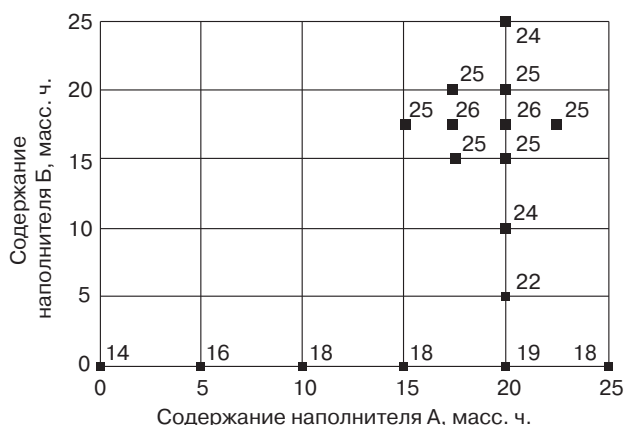


Рис. 8.15. Оптимизация методом Гаусса–Зайделя

Точка 1. $x_1 = 0$; $x_2 = 0$; $\sigma(1) = 14$ МПа.

Осуществляется движение вдоль оси x_1 (А) вправо.

Точка 2. $x_1 = 5$; $x_2 = 0$; $\sigma(2) = 16$ МПа.

Точка 3. $x_1 = 10$; $x_2 = 0$; $\sigma(3) = 18$ МПа.

Точка 4. $x_1 = 15$; $x_2 = 0$; $\sigma(4) = 18$ МПа.

Точка 5. $x_1 = 20$; $x_2 = 0$; $\sigma(5) = 19$ МПа.

Точка 6. $x_1 = 25$; $x_2 = 0$; $\sigma(6) = 18$ МПа.

Так как $\sigma(5) > \sigma(6)$, начинается движение из точки 5 вверх.

Точка 7. $x_1 = 20$; $x_2 = 5$; $\sigma(7) = 22$ МПа.

Точка 8. $x_1 = 20$; $x_2 = 10$; $\sigma(8) = 24$ МПа.

Точка 9. $x_1 = 20$; $x_2 = 15$; $\sigma(9) = 25$ МПа.

Точка 10. $x_1 = 20$; $x_2 = 20$; $\sigma(10) = 25$ МПа.

Точка 11. $x_1 = 20$; $x_2 = 25$; $\sigma(11) = 24$ МПа.

Поскольку наблюдается понижение значения отклика, можно ожидать максимального значения в интервале от 15 до 20 масс. ч. наполнителя Б (x_2), отсюда выбор следующего шага.

Точка 12. $x_1 = 20$; $x_2 = 17,5$; $\sigma(12) = 26$ МПа.

Осуществляем движение вправо.

Точка 13. $x_1 = 22,5$; $x_2 = 17,5$; $\sigma(13) = 25$ МПа.

Поскольку отклик уменьшается, начинаем движение влево.

Точка 14. $x_1 = 17,5$; $x_2 = 17,5$; $\sigma(14) = 26$ МПа.

Точка 15. $x_1 = 15$; $x_2 = 17,5$; $\sigma(15) = 25$ МПа.

Осуществляем движения вверх и вниз из точки 14.

Точка 16. $x_1 = 17,5$; $x_2 = 15$; $\sigma(16) = 25$ МПа.

Точка 17. $x_1 = 17,5$; $x_2 = 20$; $\sigma(17) = 25$ МПа.

Интерпретация.

Если движение из точки по всем направлениям ведет к уменьшению отклика, есть вероятность, что максимум находится вблизи этой точки.

Движение из точек 12 и 14 ($\sigma = 26$ МПа) во всех случаях приводит к уменьшению значения отклика. Следовательно, максимум лежит вблизи этих точек.

Метод крутого восхождения.

Метод представляет собой процедуру последовательного перемещения в направлении наибольшего увеличения (или уменьшения) отклика. Выбирается это направление на основе построения линейной модели. В случае необходимости направление крутого восхождения меняется в процессе эксперимента. Длина шага определяется на основе опыта.

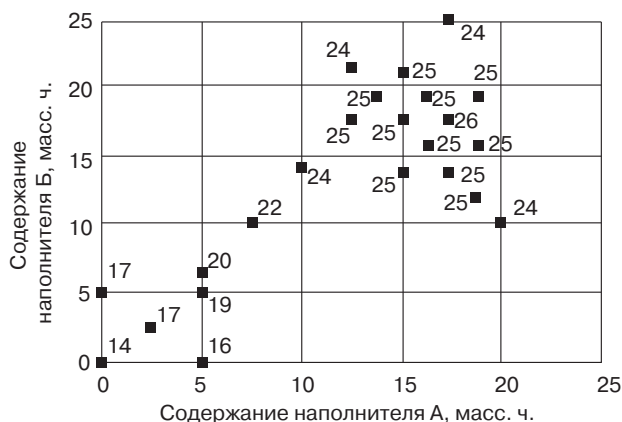


Рис. 8.16. Оптимизация методом крутого восхождения

Построение линейной модели $\sigma = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$ с центром в точке $[2,5; 2,5]$.

Точка 1. $x_1 = 0$; $x_2 = 0$; $\sigma(1) = 14$ МПа.

Точка 2. $x_1 = 5$; $x_2 = 0$; $\sigma(2) = 16$ МПа.

Точка 3. $x_1 = 0; x_2 = 5; \sigma(3) = 17$ МПа.

Точка 4. $x_1 = 5; x_2 = 5; \sigma(4) = 20$ МПа.

Вычисление коэффициентов модели.

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 5 & 0 \\ 1 & 0 & 5 \\ 1 & 5 & 5 \end{pmatrix}; Y = \begin{pmatrix} 14 \\ 16 \\ 17 \\ 19 \end{pmatrix}; B = (X' \cdot X) \times (X' \times Y).$$

$b_0 = 14; b_1 = 0,4; b_2 = 0,6$. Линейные коэффициенты относятся по величине как 2:3. Этим обусловлены последующие шаги.

Точка 5. $x_1 = 2,5; x_2 = 2,5; \sigma(5) = 17$ МПа. Точка 6. $x_1 = 5; x_2 = 6,25; \sigma(6) = 20$ МПа.

Точка 7. $x_1 = 7,5; x_2 = 10; \sigma(7) = 22$ МПа. Точка 8. $x_1 = 10; x_2 = 13,75; \sigma(8) = 24$ МПа.

Точка 9. $x_1 = 12,5; x_2 = 17,5; \sigma(9) = 25$ МПа. Точка 10. $x_1 = 15; x_2 = 21,25; \sigma(10) = 25$ МПа.

Точка 11. $x_1 = 17,5; x_2 = 25; \sigma(11) = 24$ МПа.

В точке 11 наблюдается падение прочности, и теперь формируется ПФЭ 2^2 в точках 9, 10, 13 и 14 с центром в точке 12.

Точка 12. $x_1 = 13,75; x_2 = 19,375; \sigma(12) = 25$ МПа.

Точка 13. $x_1 = 12,5; x_2 = 21,25; \sigma(13) = 24$ МПа.

Точка 14. $x_1 = 15; x_2 = 17,5; \sigma(14) = 25$ МПа.

Дальнейшее движение осуществляется из точки 12 по диагонали квадрата направо и вниз.

Точка 15. $x_1 = 16,25; x_2 = 15,625; \sigma(15) = 25$ МПа.

Точка 16. $x_1 = 17,5; x_2 = 13,75; \sigma(16) = 25$ МПа.

Точка 17. $x_1 = 18,75; x_2 = 11,875; \sigma(17) = 25$ МПа.

Точка 18. $x_1 = 20; x_2 = 10; \sigma(18) = 24$ МПа.

Формируется ПФЭ 2^2 в точках 14, 16, 19 и 20 с центром в точке 15.

Точка 19. $x_1 = 15; x_2 = 13,75; \sigma(19) = 25$ МПа.

Точка 20. $x_1 = 17,5; x_2 = 17,5; \sigma(20) = 26$ МПа.

Дальнейшее движение осуществляется из точки 15 по диагонали квадрата направо и вверх (точка 21).

Точка 21. $x_1 = 18,75; x_2 = 19,375; \sigma(21) = 25$ МПа.

Поскольку наблюдается падение отклика, формируется ПФЭ 2^2 в точках 15, 21, 22 и 23 с центром в точке 20.

Точка 22. $x_1 = 18,75; x_2 = 15,625; \sigma(22) = 25$ МПа.

Точка 23. $x_1 = 16,25; x_2 = 19,375; \sigma(23) = 25$ МПа.

Интерпретация.

Если движение из точки по всем направлениям ведет к уменьшению отклика, есть вероятность, что максимум находится вблизи этой точки.

Движение из точки 20 ($\sigma = 26$ МПа) во всех случаях приводит к уменьшению значения отклика. Следовательно, максимум лежит вблизи этой точки.

Последовательный симплексный метод.

Оптимизация производится путем сравнения значений отклика в вершинах симплекса (в данном примере, треугольника). Ориентация начального симплекса может быть произвольной, так как наиболее выгодное направление движения не представляется возможным прогнозировать.



Рис. 8.17. Оптимизация симплексным методом

Движение к экстремуму поверхности отклика на каждом шаге осуществляется посредством перехода от реализуемого симплекса к новому путем отбрасывания наихудшей вершины и построения точки, симметричной к ней относительно противоположной стороны.

Точка 1. $x_1 = 0$; $x_2 = 0$; $\sigma(1) = 14$ МПа.

Точка 2. $x_1 = 5$; $x_2 = 0$; $\sigma(2) = 16$ МПа.

Точка 3. $x_1 = 2,5$; $x_2 = 5$; $\sigma(3) = 18$ МПа.

Наихудшей вершиной из трех (1, 2 и 3) является точка 1, симплекс обращается вокруг стороны, противоположной этой точке, в точку 4.

Точка 4. $x_1 = 7,5$; $x_2 = 5$; $\sigma(4) = 20$ МПа.

Наихудшей вершиной из трех (2, 3 и 4) является точка 2, симплекс обращается вокруг стороны, противоположной этой точке, в точку 5.

Точка 5. $x_1 = 5$; $x_2 = 10$; $\sigma(5) = 21$ МПа.

Наихудшей вершиной из трех (3, 4 и 5) является точка 3, симплекс обращается вокруг стороны, противоположной этой точке, в точку 6.

Точка 6. $x_1 = 10$; $x_2 = 10$; $\sigma(6) = 23$ МПа.

Наихудшей вершиной из трех (4, 5 и 6) является точка 4, симплекс обращается вокруг стороны, противоположной этой точке, в точку 7.

Точка 7. $x_1 = 7,5; x_2 = 15; \sigma(7) = 23$ МПа.

Наихудшей вершиной из трех (5, 6 и 7) является точка 5, симплекс обращается вокруг стороны, противоположной этой точке, в точку 8.

Точка 8. $x_1 = 12,5; x_2 = 15; \sigma(8) = 25$ МПа.

В точках 6 и 7 наблюдается одинаковое значение прочности. В этом случае симплекс обращается последовательно вокруг двух сторон:

Точка 9. $x_1 = 15; x_2 = 10; \sigma(9) = 24$ МПа. Точка 10. $x_1 = 17,5; x_2 = 15; \sigma(10) = 25$ МПа.

Наихудшей вершиной из трех (8, 9 и 10) является точка 9, симплекс обращается вокруг стороны, противоположной этой точке, в точку 11.

Точка 11. $x_1 = 15; x_2 = 20; \sigma(11) = 25$ МПа.

В симплексе, образованном точками 8, 10 и 11, значения отклика одинаковые ($\sigma = 25$ МПа). В этом случае симплекс обращается последовательно вокруг двух сторон (обращение вокруг третьей ведет к качанию симплекса):

Точка 12. $x_1 = 20; x_2 = 20; \sigma(12) = 26$ МПа.

Точка 13. $x_1 = 22,5; x_2 = 15; \sigma(13) = 25$ МПа.

Исследуем окрестности точки 12.

Точка 14. $x_1 = 17,5; x_2 = 25; \sigma(14) = 24$ МПа. Точка 15. $x_1 = 22,5; x_2 = 25; \sigma(15) = 23$ МПа.

Точка 16. $x_1 = 25; x_2 = 20; \sigma(16) = 25$ МПа.

Интерпретация.

Если движение из точки по всем направлениям ведет к уменьшению отклика, есть вероятность, что максимум находится вблизи этой точки.

Движение из точки 12 ($\sigma = 26$ МПа) во всех случаях приводит к уменьшению значения отклика. Следовательно, максимум лежит вблизи этой точки.

8.3. Планирование экстремальных экспериментов в промышленных условиях

В производственных условиях мы обычно сталкиваемся со следующей ситуацией [26, с. 174–179]: кроме k контролируемых переменных x_i , имеется еще l неконтролируемых переменных z_1, z_2, \dots, z_l (изменение характеристик ингредиентов, старение каучука, износ элементов оборудования, варьирование параметров теплоносителей, сезонные изменения условий работы и т. д.). Спонтанное и неконтролируемое изменение переменных z_i приводит к смещению оптимума по отношению к переменным x_i . Для наблюдения за этим дрейфом требуется все время варьировать переменные x_i .

Здесь нужно учитывать два обстоятельства: а) переменные x_i нельзя варьировать в широком интервале, чтобы не удорожить производство и не увеличивать риска получения бракованной продукции; б) в производственных условиях имеется большое шумовое поле — ошибка эксперимента здесь всегда значительно больше, чем в лабораториях.

Таким образом, задача сводится к выделению слабого сигнала на фоне шума. Естественно здесь использовать в той или иной форме метод накопления результатов измерения. Для этого нужно иметь возможность все время слегка «покачивать» процесс, варьируя независимые переменные в узком интервале значений. Производственный процесс должен быть организован так, чтобы можно было получать не только готовую продукцию, но и информацию о смещении оптимума, обусловленном изменением неконтролируемых переменных z .

Исследователь должен все время приспосабливаться к изменяющимся условиям; отсюда и название метода — *адаптационная оптимизация*.

Задача адаптационной оптимизации как научной дисциплины заключается в разработке достаточно хорошо формализованной и в некотором смысле оптимальной стратегии для непрерывного экспериментирования в сложных производственных условиях.

Степень формализации задается постановкой задачи. Надо проводить разграничение между «эмпирической» и «технологической» обратной связью. Эмпирическая обратная связь — это полностью формализованный метод корректировки технологического процесса, при котором исключается вмешательство высококвалифицированного персонала. Процессом должна управлять вычислительная машина или малоквалифицированный персонал. Технологическая обратная связь — это корректировка процесса с периодическим привлечением новых технологических идей. В последнем случае не требуется очень высокой степени формализации стратегии управления, так как решения об изменении технологического режима принимает высококвалифицированный персонал. Здесь дело ограничивается выдачей четких рекомендаций о том, как «покачивать» процесс для того, чтобы периодически получать информацию, необходимую для принятия тех или иных решений.

Рассмотрим теперь отличительные особенности промышленного объекта исследования по отношению к лабораторному и вытекающие из них особые требования к промышленному эксперименту в сравнении с лабораторным [8, с. 50–54].

1. Под промышленным объектом исследования мы будем в дальнейшем понимать лишь одно звено технологической цепи, отдельную производственную установку, управляемую независимо от других установок цепи. Большое число самых разнообразных таких объектов можно найти в технологии переработки эластомеров. При этом, как и в лабораторном эксперименте, ограничиваем класс исследуемых промышленных объектов статическими (дискретными или непрерывными).

В связи с таким определением промышленного объекта промышленный эксперимент должен одновременно с нормальным функционированием объекта и производством товарной продукции обеспечить получение полезной информации для нахождения оптимальных условий управления объектом.

2. Чтобы извлечь такую информацию, можно реализовать целенаправленное «покачивание» объекта около так называемого «рабочего режима», планируя пробные шаги варьирования по управляемым факторам и выделяя влияние изучаемых переменных на отклик в условиях шума с помощью регрессионного анализа.

Но в промышленных условиях, в отличие от лабораторных, недопустимы аварийный режим или значительное удорожание производства, получение брака или резкое снижение количества производимой продукции, к которым может привести большое отклонение от «рабочего режима» в процессе «покачивания» объекта. Следовательно, в промышленном эксперименте для уменьшения связанного с указанными ситуациями риска допустимы лишь очень малые величины пробных шагов варьирования.

3. В производственных условиях, по сравнению с лабораторными, имеет место большое количество неконтролируемых и неуправляемых факторов, влияющих на ход процесса. Быстрые (по отношению к частоте постановки опытов) случайные флуктуации некоторых из них создают больший уровень шума на выходе объекта, в результате чего случайная ошибка воспроизводимости опыта значительно возрастает.

Поэтому в промышленном эксперименте да еще с малыми пробными шагами варьирования по управляемым факторам, чтобы статистически значимо (с определенным уровнем) выделить влияние последних на отклик при большой величине его дисперсии воспроизводимости, следует планировать гораздо большее число параллельных опытов, чем в лабораторных исследованиях.

4. Медленные (относительно частоты постановки опытов) случайные флуктуации одних неконтролируемых и неуправляемых факторов промышленного объекта вызывают нерегулярный временной дрейф поверхности целевого отклика по отношению к управляемым факторам, то есть нерегулярное изменение с течением времени всей поверхности, а значит, и координат точки ее экстремума в их пространстве. При этом ограничиваем класс исследуемых поверхностей откликов унимодальными. Нерегулярный временной дрейф может быть вызван, например, случайными изменениями свойств сырья и вспомогательных материалов, а также многими другими случайными факторами, физическую природу которых в промышленных условиях вскрыть не всегда удается.

Детерминированное (дискретное или непрерывное) изменение во времени других неконтролируемых и неуправляемых факторов вызывает регулярный временной дрейф. Такой дрейф может быть связан, например, с сезонными изменениями условий производства, амортизацией оборудования и старением материалов, внедрением рационализаторских предложений и модернизацией производства.

Чтобы постоянно корректировать уровни управляемых факторов, отвечающие оптимуму, необходимо в промышленных экспериментах осуществлять не однократный его поиск, а непрерывный — для постоянного приспособления к непрерывно изменяющимся условиям промышленного производства, то есть необходимо проводить адаптационную оптимизацию.

5. В промышленных условиях для реализации адаптационной оптимизации нет специального штата высококвалифицированных исследователей, а есть обслуживающий персонал довольно низкой квалификации у производственной установки. Здесь нет и той насыщенности исследования измерительными, регистрирующими приборами и вычислительными устройствами, которая присуща лабораторному эксперименту. Поэтому планы и вычислительные алгоритмы обработки наблюдений промышленного эксперимента должны быть достаточно просты.

6. Адаптационная оптимизация производственных установок предполагает постоянное исследование и подстройку объекта, то есть неограниченное временем проведение промышленного эксперимента, а значит, и неограниченное число его опытов. Таким образом, промышленный эксперимент — составная часть процедуры непрерывного оптимального управления промышленным объектом.

Все вышесказанное определяет своеобразную стратегию промышленного эксперимента. Она заключается отнюдь не в проведении, подобно лабораторным исследованиям, всестороннего однократного изучения объекта для выяснения причин дрейфа и нахождения оптимальных условий управления объектом.

В промышленных условиях это было бы трудно реализуемо в силу высказанных выше соображений, и нецелесообразно из-за быстрого старения в процессе дрейфа поверхностей целевого и контролируемых откликов собранной о них информации. Стратегия промышленного эксперимента состоит в частичном поэтапном изучении объекта, когда на каждом этапе проводится накопление и обработка информации об объекте для некоторого приближения условий управления им в конце этапа к оптимальным, в результате чего и достигается отслеживание дрейфующего оптимума.

Таким образом, управляющее воздействие на объект вырабатывается на основе полученной от него информации, то есть в результате использования обратной связи с объектом, которая может быть формализованной и неформализованной. Формализованная обратная связь имеет место, когда управляющее воздействие на объект формируется с помощью определенного алгоритма — неважно, экспериментатором или ЭВМ. Неформализованная обратная связь осуществляется при участии квалифицированных специалистов, принимающих решение об изменении управляющего воздействия с учетом теоретических сведений об объекте и накопленного опыта управления им.

Далее рассматриваются конкретные методы планирования промышленного эксперимента, отвечающие указанным требованиям.

Адаптационная оптимизация дискретных производственных процессов была рассмотрена Боксом в 1955 г. Этот метод получил название *эволюционного планирования* (*Evolutionary Operation*, сокращенно *EVOP*); он был задуман как метод управления с технологической обратной связью [1, с. 438–446; 2, с. 238–256; 6, с. 70–81; 12, с. 332–340; 16, с. 95–96; 17, с. 555–559; 27, с. 339–348].

Чтобы выделить небольшое изменение y -сигнала на большом шумовом поле, было предложено разбивать производственный процесс на отдельные «фазы», состоящие из нескольких повторных «циклов». В каждом цикле реализуется несколько опытов для одного и того же набора уровней независимых переменных. Эти опыты образуют полный факторный эксперимент или его дробную реплику с добавлением центральной точки. После окончания каждой фазы производят обработку результатов наблюдений и принимают решение относительно условий, в которых будет протекать производственный процесс в последующей фазе. Число циклов n выбирают так, чтобы можно было выделять слабые сигналы на флуктуирующем фоне; здесь используется обычный метод накопления результатов измерений, основанный на том, что ошибка среднего из независимых наблюдений в \sqrt{n} раз меньше ошибки единичного измерения.

Весь процесс выполнения эволюционного планирования строго стандартизован.

После окончания каждой фазы экспериментатор может принять одно из следующих решений: 1) изменить нулевую точку и, следовательно, сместить весь эксперимент в пространстве независимых переменных; 2) изменить интервал варьирования переменных; 3) изменить независимые переменные — прежние оставить на выбранном оптимальном уровне и начать варьировать новые переменные. Обращается внимание на необходимость притока новых идей при эволюционном планировании. Эти идеи могут рождаться как при обсуждении результатов, полученных при проведении экспериментов в предыдущих фазах, так и в результате дополнительных лабораторных опытов или информации, извлеченной из публикаций. Рекомендуются периодически устраивать консультационные советы с привлечением широкого круга разносторонних специалистов.

Новым здесь является сама постановка задачи — требование так организовать производственный процесс, чтобы он давал информацию о неконтролируемых причинах смещения оптимума.

Вообще говоря, метод ЭВОП может быть использован для оптимизации установившегося процесса главным образом в тех случаях, когда [2, с. 238]:

- составление модели невозможно по техническим причинам;
- составление модели невыгодно по экономическим соображениям;
- модель неудобна для внесения в нее различных усовершенствований;
- модель ненадежна (или неточна) в диапазоне предполагаемых условий работы;
- целью управления является «достижение ближайшего относительного оптимума» при небольших затратах, а не достижение абсолютного оптимума, если это требует значительных затрат.

Поясним задачу на таком примере. Варьируются три фактора, связанные с работой резиносмесителя: температура воды — два уровня: 40 и 50 °С; число оборотов ротора — два уровня: 40 и 50 об./мин; коэффициент заполнения смесительной камеры — два уровня: 0,60 и 0,65. Реализуется полный факторный эксперимент (ПФЭ) ²³. Полученные смеси проходят экспресс-контроль посредством определения вулканизационных характеристик.

Варьируя эти факторы, мы получаем результаты в течение такого периода времени, когда ошибка (с увеличением количества определений в каждой из восьми точек ошибка (или дисперсия воспроизводимости) падает) достигает такого уровня, когда можно сказать, что наилучшие результаты наблюдаются в точке с координатами (40; 40 и 0,65 соответственно). Пусть на этот поиск ушла неделя. Следующую неделю мы работаем, варьируя переменные вокруг этой выявленной нами точки. Прошла еще неделя, оказалось, что полученные результаты практически постоянны в реализованных нами условиях. Два выхода: расширить интервалы варьирования или ввести новый фактор — давление верхнего затвора. И так постоянно.

Отметим теперь главные достоинства и недостатки ЭВОП [8, с. 72–74].

Достоинства метода заключаются в следующем: 1) непрерывное проведение ЭВОП на предприятии резиновой промышленности позволяет систематически собирать и накапливать информацию о нем в постоянно изменяющихся условиях его

работы, выискивать резервы производства и использовать их для повышения его экономической эффективности и улучшения качества товарной продукции; 2) простота планирования и обработки результатов наблюдений делает ЭВОП легко доступным персоналу достаточно низкой квалификации; 3) неформализованная обратная связь, обеспечиваемая членами группы, осуществляющей ЭВОП, учитывает опыт, интуицию и профессиональные знания участников эксперимента, которые играют важную роль не только в управлении технологическими процессами при слежении за движением оптимума в тесной увязке со взаимоотношениями с поставщиками и потребителями, но и в изучении механизма физико-химических явлений и развитии теории процессов переработки каучуков, а также в организации совместной работы с научно-исследовательскими и проектно-конструкторскими организациями и высшими учебными заведениями.

Недостатки метода являются оборотной стороной его достоинств: 1) простота ЭВОП делает его пригодным лишь для решения сравнительно простых задач; в реальных условиях приходится иметь дело с достаточно сложными производственными ситуациями, которые трудно привести к простым схемам, доступным для анализа методом ЭВОП; 2) неформализованность целого ряда процедур в ЭВОП (например, выбор величины пробных шагов варьирования и рабочих шагов движения к оптимуму) оставляет слишком много места для произвола и интуитивного подхода, что далеко не всегда приводит к удаче; 3) метод ЭВОП при невыполнении предпосылки об унимодальности поверхности отклика позволяет находить и отслеживать лишь локальный экстремум последней.

Несмотря на отмеченные ограничения, метод ЭВОП заслуживает большего внимания к себе со стороны переработчиков резины, нежели это было до сих пор.

Другим приемом адаптационной оптимизации является рассмотренное выше симплекс-планирование. Основная его особенность — возможность заранее предложить четкие правила принятия решений относительно направления и момента движения в факторном пространстве. Здесь управление осуществляется с эмпирической обратной связью, его можно полностью автоматизировать. Наличие формализованной обратной связи существенно отличает ПСМ от ЭВОП.

Можно указать следующие существенные достоинства метода: 1) ПСМ обладает высокой эффективностью в связи с тем, что последовательный переход от одного симплекса к другому требует добавления лишь одной точки независимо от размерности плана; 2) в методе симплекс-планирования четко указывается, когда и куда двигаться, вычисления крайне просты и не требуют статистического анализа, это позволяет полностью автоматизировать процесс управления, используя управляющие ЭВМ или малоквалифицированный персонал; 3) на любом шаге поиска можно легко ввести дополнительный варьируемый фактор (в том числе качественный), добавив лишь одну экспериментальную точку; 4) при выборе размеров симплекса не нужно стремиться к адекватному представлению поверхностей отклика плоскостью, так как используется непараметрическое описание поверхности; с этим же связана и относительная нечувствительность метода к случайным ошибкам наблюдений; 5) нет строгих требований к правильности

симплекса; последний может служить основой для построения композиционного плана второго порядка.

Среди недостатков ПСМ отметим следующие: 1) метод дает мало информации о поверхности отклика из-за непараметрического описания ее; 2) частота ошибочных шагов заметно возрастает при приближении к области экстремума; 3) ПСМ отдает предпочтение количественным факторам в ущерб качественным.

До недавнего времени теория оптимального эксперимента применялась преимущественно при построении моделей статических объектов. Методология построения динамических моделей развивалась тем временем в рамках пассивного подхода, когда идентификация ведется в режиме нормальной эксплуатации.

С начала 70-х годов начинает бурно развиваться современная теория идентификации динамических моделей, опирающаяся на теорию оптимального управления и теорию оптимального эксперимента [2, с. 237–285; 28, с. 5–28; 29, с. 165–170].

Подведем *некоторые итоги*.

Есть несколько позиций, существование которых ставит под сомнение возможность применения описанных выше методов.

Во-первых, критический анализ современной организации технологических процессов в резиновой промышленности показывает, что существует чрезвычайно мало действительно эффективных приемов управления процессами; уровень производства, культура труда не позволяют обеспечить соответствующие уровни варьирования переменных, ряд важных характеристик технологического процесса вообще не может быть измерен или даже сколько-нибудь достоверно оценен.

Во-вторых, представляет определенные трудности выбор целевых функций для реализации промышленного эксперимента.

В-третьих, ограниченная, связанная чаще всего лишь с работой по рекламациям, обратная связь в цепочке поставщик – производитель – потребитель не позволяет эффективно корректировать технологический процесс, в частности, и производственно-финансовую деятельность предприятия, в целом.

В-четвертых, методы промышленного эксперимента в резиновой промышленности нашей страны ранее не применялись, за границей эти методы также не практикуются, поскольку обеспечивается высокая культура труда, стандартность сырья и исключается физический и моральный износ оборудования.

Не вызывают сомнения, по крайней мере, три соображения: 1) отсутствие соответствующих примеров в зарубежной практике резиновой промышленности не является основанием для отказа от применения методов промышленного эксперимента в нашей стране — там другие условия, но придумали эти методы за рубежом и широко и эффективно используют их в различных областях, где это необходимо; 2) промышленный эксперимент не следует рассматривать как разовое мероприятие, это иной стиль работы, делающий упор на гибкую обратную связь, формирующий соответствующую культуру труда, необходимые предпосылки для механизации и автоматизации процессов; 3) нельзя не учитывать и фактор нравственного характера — работник вовлекается в сферу творчества, связанного с совершенствованием технологического процесса на предприятии, на котором он работает.

8.4. Линейное программирование

Во многих ситуациях, которые могут встретиться в промышленности, в экономической деятельности требуется максимизировать или минимизировать некоторую количественную величину при определенных ограничениях.

Например, бизнесмен хочет максимизировать свою прибыль, однако при этом он ограничен общим числом имеющихся у него машин, наличием людей, капиталом, который он может инвестировать, и рядом других экономических факторов.

Разумеется, любая из возможных стратегий ведет к различного рода потерям и выигрышам. Для того чтобы выбрать оптимальную стратегию, руководитель должен точно оценить все возможные последствия ее применения.

Этот пример можно назвать оптимизационной задачей [29, с. 333–364].

При некоторых обстоятельствах величины, которые необходимо максимизировать или минимизировать, и все ограничения, входящие в задачу, могут быть записаны как линейные уравнения и неравенства.

С ростом применения прикладной математики в экономике, промышленности, в исследованиях операций вообще статистика постепенно вбирает в себя многие новые мощные отрасли математики. Как предмет прикладная статистика все более и более отождествляется с изучением проблем, которыми, как ожидают, будут заниматься статистики безотносительно к тому, будут ли эти проблемы относиться к теории статистики в строгом смысле слова. Однако истолкование статистики как процесса принятия решений неизбежно приводит к включению в ее сферу тех математических приемов, которые помогают в процессе выработки решений [30, с. 265–278].

Среди методов этой математической части процесса есть ряд весьма полезных. *Линейное программирование* является одним из относительно современных открытий, и это весьма действенный метод, с помощью которого, разумеется, при условии справедливости его основных предположений, можно подсказать определенный вывод насчет наилучшего использования имеющихся ресурсов в данных обстоятельствах.

Линейное программирование — математическая дисциплина, посвященная теории и методам решения задач об экстремумах линейных функций на множествах, задаваемых системами линейных неравенств и равенств; линейное программирование является одним из разделов математического программирования.

Классическая теория статистики имеет дело с умозаключениями, которые могут быть выведены из правильного истолкования данных. Функция линейного программирования совершенно иная. Вместо помощи в выработке решений путем облегчения условий получения выводов с помощью выборки, корреляции или других обычных статистических методов линейное программирование обеспечивает метод, который конкретно говорит: «это правильное решение».

Особенно ценным качеством статистико-контрольных методов является обеспечиваемая ими возможность контролируемого слежения, но эти методы сами по себе не ведут реально к управлению процессом. Напротив, они служат вспомогательными средствами, с помощью которых руководство может определять путь в недостаточно известных условиях с максимальной гарантией безопасности. Это своего рода

пробный контроль. Линейное программирование дает иную форму контроля в том смысле, что руководство может с его помощью в большей мере управлять своим собственным ближайшим будущим. Это метод, который был разработан для решения задачи, получившей известность под названием «транспортной задачи», и более конкретной проблемы получения оптимального распределения незагруженных судов между портами, в которых скопились грузы, ожидающие отправки. Этот способ, однако, был усовершенствован применительно ко многим экономическим и промышленным задачам, которые требовали распределения имеющихся ресурсов для удовлетворения различного рода спроса на них.

Принципы, на которых этот метод строится, лучше всего можно продемонстрировать с помощью конкретной задачи [29, с. 333–335, 354–358].

Предприятие производит изделия двух видов — A и B . На изготовление одного изделия вида A требуется 8 чел.-ч (т. е. для того чтобы сделать 1 изделие, необходимо, чтобы 1 человек работал 8 ч или чтобы 2 человека работали 4 ч и т. д.). На изготовление изделия вида B требуется 5 чел.-ч. Стоимость материалов для изготовления изделия вида A составляет 4 тыс. руб.; стоимость материалов для изготовления изделия B — 5 тыс. руб. Прибыль за одно изделие A равна 1,75 тыс. руб., за изделие типа B — 1,50 тыс. руб. Производство изделий ограничено следующими обстоятельствами:

- 1) по контракту предприятие за неделю должна сделать по меньшей мере 15 изделий вида A и 10 изделий вида B ;
- 2) на производство изделий может быть затрачено не более 320 чел.-ч в неделю;
- 3) еженедельные затраты материалов на изготовление изделий не должны превышать 200 тыс. руб.

Задача. Найти такое число изделий каждого вида, которое необходимо производить за неделю, чтобы прибыль была максимальной.

Исследуем предложенную задачу более подробно с тем, чтобы выделить в ней основное и записать эту задачу на математическом языке.

Решение директора предприятия состоит в выборе количеств изготавливаемых изделий вида A и вида B . Эти величины являются неизвестными задачи, их мы обозначим соответственно через x и y . Принимая во внимание информацию, которая содержится в условии задачи, мы можем последовательно записать следующие выражения:

(1) $8x + 5y$ (чел.-ч) — общее количество чел.-ч, необходимое для изготовления всех изделий;

(2) $4x + 5y$ (тыс. руб.) — суммарные затраты на материал;

(3) $1,75x + 1,50y = P$ (тыс. руб.) — общая прибыль.

P — функция x и y , она называется целевой функцией.

С помощью найденных выражений относительно x и y мы можем в терминах неравенств записать условия соглашения о поставках изделий предприятием, наличии человеко-часов и материала. На x и y надо наложить и другие естественные ограничения. Теперь можно привести все множество ограничений, которые записываются в виде неравенств.

Ограничение (1) $x \geq 15, y \geq 10$. Соглашение о поставке изделий должно быть выполнено.

Ограничение (2) $8x + 5y \leq 320$. На изготовление изделий можно затратить не более 320 чел.-ч в неделю.

Ограничение (3) $4x + 5y \leq 200$. Затраты на материалы не должны превышать 200 тыс. руб.

Ограничение (4) x и y — неотрицательные целые числа. Очень часто выпуск товаров выражается целым числом. Дробные значения выпуска при этом оказываются бессмысленными.

Эти неравенства представляют собой основу формулировки следующей задачи.

Задача. Найти значения x и y , которые максимизируют целевую функцию $1,75x + 1,50y = P$ и удовлетворяют приведенным неравенствам.

Как видим, задача может быть записана в виде некоторого множества алгебраических уравнений и неравенств с целевой функцией, которую необходимо максимизировать или минимизировать. Все ограничения и целевая функция линейны по рассматриваемым переменным, т. е. все переменные, входящие в некоторое выражение, имеют степень, равную единице. По этой причине такие задачи называют линейными, а поскольку мы ищем план или программу, которая приводила бы к оптимальному результату, то говорим, что нам задана задача линейного программирования, а соответствующие методы решения этих задач называются методами линейного программирования.

Таким образом, основные условия задач подобного рода будут следующими.

- 1) должна быть задана целевая функция, которую необходимо оптимизировать;
- 2) такие ресурсы, как капитал, машины и материал, должны быть некоторым образом ограничены;

- 3) целевую функцию и ограничения можно записать в виде линейных уравнений или неравенств относительно множества переменных.

Задача будет заключаться в том, чтобы выбрать такие значения для множеств переменных, при которых целевая функция оптимизируется.

Один из способов решения задач линейного программирования состоит в том, чтобы рассмотреть все множество возможных наборов значений переменных (в рассматриваемой задаче это будет множество пар (x, y)), которые удовлетворяют линейным ограничениям. Далее вычислить значение целевой функции для каждого набора и выбрать такую совокупность значений переменных, которая приводит к оптимуму (т. е. минимуму или максимуму). Эту процедуру удобно реализовать с помощью вычислительной техники.

Для сокращения вычислений при решении задач линейного программирования математиками было предложено большое число методов (алгоритмов), которые отыскивают решение шаг за шагом. Наиболее эффективный алгоритм, который известен под названием симплексный метод (или симплекс-метод), был предложен в 1947 г. Дж. Данцигом (G. B. Dantzig). Прежде чем начать изложение этого метода, мы обсудим графическое решение задач линейного программирования, которое применяется в случае, когда в задачу входят только две переменные. Это поможет читателю лучше понять смысл методов линейного программирования.

Рассмотрим неравенство $ax + by \leq c$, где a, b и c неотрицательны. Все точки, удовлетворяющие этому неравенству, должны либо лежать на прямой $ax + by = c$, либо принадлежать одной из полуплоскостей, на которые разбивается плоскость. Нетрудно догадаться, которая из полуплоскостей удовлетворяет неравенству. Для этого надо проверить, какая из них содержит точку $(0, 0)$. Поскольку $0 < c$, то, очевидно, начало координат удовлетворяет неравенству, поэтому это и будет допустимой точкой. Отсюда следует, что требуемой полуплоскостью будет та полуплоскость, которая содержит начало координат.

На рис. 8.18, а показаны прямая и соответствующая полуплоскость, которая, в свою очередь, разбивается на четыре части, каждая из которых обозначена буквой А. Все точки этих областей и точки, лежащие на прямой, удовлетворяют неравенству; это множество (прямую и соответствующую полуплоскость) мы назовем допустимым множеством, задаваемым неравенством. Черточками $////$ обозначена полуплоскость, не являющаяся допустимой.

Рассмотрим следующие три неравенства: $ax + by \leq c, x \geq 0, y \geq 0$.

Для каждого неравенства мы можем построить на графике соответствующее допустимое множество (рис. 8.18, б). Прямые для второго и третьего неравенств, очевидно, будут координатными осями.

Как видим, множеством точек, которые одновременно удовлетворяют всем трем неравенствам, будет множество точек, лежащее в первом квадранте и находящееся ниже прямой АВ. Таким образом, точки, лежащие внутри треугольника ОАВ или принадлежащие его сторонам, удовлетворяют всем неравенствам. Любая точка, лежащая вне этого треугольника, не удовлетворяет ни одному из неравенств.

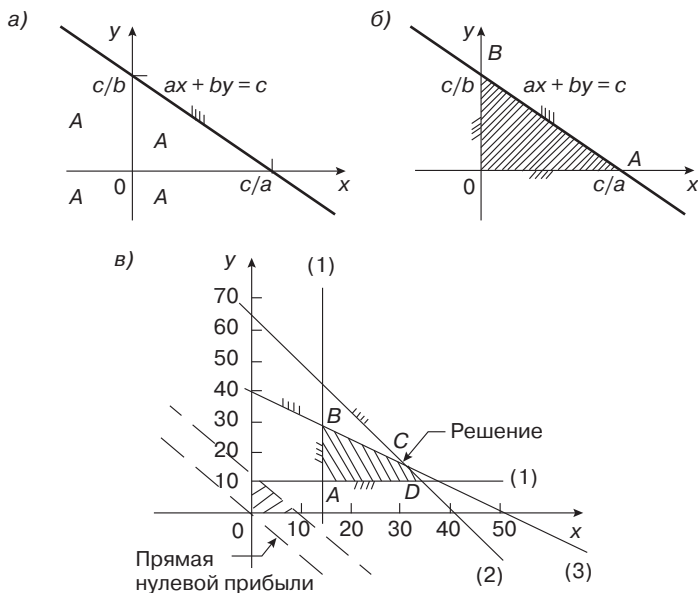


Рис. 8.18. Графическое решение задачи о двух видах изделий

Заметим, что найденное множество точек треугольника будет совпадать с пересечением допустимых множеств для трех неравенств.

Очевидно, что при отыскании решения задачи линейного программирования мы должны исследовать только те точки, которые принадлежат пересечению допустимых множеств, порождаемых всеми ограничениями в виде неравенств или уравнений. *Определение.* Точка, лежащая в пересечении допустимых множеств, порождаемых всеми ограничениями задачи, называется допустимым решением.

Таким образом, задача линейного программирования заключается в том, чтобы найти такую точку (или точки), которая принадлежала бы множеству допустимых решений и давала бы оптимальное значение целевой функции.

Легко показать, что для любой задачи линейного программирования множество допустимых решений будет выпукло. Если в задачу входит больше чем две переменные (скажем, n переменных), то множество допустимых решений нужно рассматривать как выпуклое «тело» в n -мерном пространстве. В этом пространстве каждое ограничение—уравнение будет определять некоторую гиперплоскость.

Для случая размерности второго порядка довольно просто найти допустимое решение, оптимизирующее целевую функцию. Чтобы показать, как это делается, мы рассмотрим задачу, стоящую перед руководителем предприятия, связанную с выбором решения об изготовлении различных видов изделий.

Прежде всего, нарисуем все прямые, соответствующие ограничениям, и найдем область допустимых решений, которая будет представлять собой многоугольник. На рис. 8.18, *в* этот многоугольник обозначен $ABCD$.

Затем нанесем на график прямую, которая пройдет через начало координат и будет соответствовать нулевой прибыли P . Эта прямая определяется уравнением $1,75x + 1,50y = 0$; на графике эта прямая изображена пунктиром и обозначена как прямая нулевой прибыли.

Для наглядности можно положить карандаш или прозрачную линейку на эту прямую и рассмотреть множество точек, которое она определяет. Любая точка на этой прямой задает некоторую комбинацию изделий видов A и B , производство которых ведет к тому, что прибыль будет равна нулю. В действительности на этой прямой имеется только одна точка, которая имеет смысл для этой задачи, а именно $(0, 0)$. Другие точки не подходят, потому что нет смысла говорить об отрицательном количестве изделий.

Теперь если читатель начнет двигать карандаш в направлении многоугольника до тех пор, пока карандаш не примет положение, которое на рисунке соответствует второй пунктирной линии, то он заметит, что карандаш при этом в положительном квадранте «замечает» некоторое множество точек, которое представляет собой треугольник. Каждая точка с целочисленными координатами на этой прямой определяет некоторую возможную комбинацию изготовления изделий. Причем точки, лежащие над карандашом, будут соответствовать комбинациям изделий с большей прибылью, а точки, лежащие под карандашом, т. е. принадлежащие треугольнику, соответствуют меньшей прибыли.

Очевидно, для того чтобы найти оптимальное решение, мы должны двигать карандаш в том же направлении до достижения области допустимых решений. Двигаясь по этой области дальше, мы должны дойти до такого места, когда карандаш целиком (за исключением одной точки) будет лежать вне области допустимых решений. Эта «последняя» точка из области допустимых решений и будет соответствовать такой комбинации производства изделий, которая приведет к максимальной прибыли.

Читатель легко определит, что последней допустимой точкой будет точка, обозначенная буквой *C*. Эта точка имеет координаты (30, 16), что означает: для того чтобы прибыль была максимальной, предприятию необходимо еженедельно выпускать 30 изделий вида *A* и 16 изделий вида *B*.

Действительно, если решить систему уравнений, соответствующих второму и третьему ограничениям ($8x + 5y = 320$ и $4x + 5y = 200$), то получим $x = 30$ и $y = 16$.

Эта комбинация удовлетворяет всем ограничениям и приводит к прибыли

$$P = 1,75 \cdot 30 + 1,50 \cdot 16 = 76,5 \text{ тыс. руб.}$$

Таким образом, решением этой задачи будет следующая комбинация изделий: 30 изделий вида *A*; 16 изделий вида *B*. $P_{\max} = 76,5$ тыс. руб.

Замечания [29, с. 340–341].

(1) Иногда прямая, соответствующая некоторому ограничению, может не участвовать в определении границы множества допустимых решений. Тогда это ограничение не влияет на решение задачи и им можно пренебречь.

(2) Задача может не иметь конечного оптимального решения. Это произойдет в том случае, когда прямую прибыли можно двигать до бесконечности, и она никогда не достигнет последней точки, принадлежащей множеству допустимых решений.

(3) Оптимального решения может вообще не существовать. Этот факт легко установить, нарисовав все прямые, соответствующие ограничениям. Тогда, если пересечение допустимых множеств будет пусто, то соответствующих всем ограничениям решений не существует. Это означает, что два или более ограничения противоречат друг другу.

(4) Может существовать много решений. Действительно, если прямая прибыли будет параллельна прямой, которая составляет последнюю границу множества допустимых решений, то все точки этой прямой будут показывать максимальную прибыль.

Мы описали графические методы решения двумерных задач. Размер рассмотренной задачи был довольно мал, однако уже на этой задаче можно познакомиться с основными этапами решения задач линейного программирования — запись задачи в виде системы неравенств и последовательное, шаг за шагом, отыскание их оптимального решения [10, с. 131–151; 31, с. 8–41; 32, с. 194–242; 33, с. 406–474; 34, с. 440–457].

Для решения задачи линейного программирования в системе *MATLAB* [35, с. 653–658] используется функция *linprog*. Область поиска для нее задается следующими условиями:

- $A * x \leq b$ — линейные неравенства (A — матрица, b — вектор);
- $Aeq * x = beq$ — линейные уравнения (Aeq — матрица, beq — вектор);
- $lb \leq x \leq ub$ — ограничения на координаты (lb, ub — два вектора).

Целевая функция f^*x в *linprog* задается вектором коэффициентов f .

Формы обращения к этой функции:

```
x = linprog(f,A,b,Aeq,beq)
x = linprog(f,A,b,Aeq,beq,lb,ub)
x = linprog(f,A,b,Aeq,beq,lb,ub,x0)
x = linprog(f,A,b,Aeq,beq,lb,ub,x0,options)
[x,fval] = linprog(...)
[x,fval,exitflag] = linprog(...)
[x,fval,exitflag,output] = linprog(...)
[x,fval,exitflag,output,lambda] = linprog(...)
```

Семантика входных и выходных параметров очевидна. Единственное необходимое пояснение касается стартовой точки x_0 . В большинстве случаев она не нужна (а если все же задана, то игнорируется).

В функции *linprog* по умолчанию используется так называемый *прямодвойственный алгоритм*, при использовании которого одновременно решается как данная задача, так и двойственная к ней. Впрочем, решение двойственной задачи не выдается.

Если для свойства *LargeScale* установлено значение *off*, будет использоваться хорошо известный симплекс-метод линейного программирования, для которого нужна стартовая точка x_0 . Однако если стартовая точка не задана, она выбирается автоматически.

Пример. Задача максимизации дохода.

Рассмотрим условное производство изделий А и Б. Сведения о затратах ресурсов на единицу продукции, их наличии и о доходе от производимой продукции отражены в табл. 8.10.

Таблица 8.10. Исходные данные

Ресурсы	Продукция		Ограничения по ресурсу
	А	Б	
1, кг/шт.	5	25	500
2, м ² /шт.	0,5	—	15
3, г/шт.	100	250	7500
Труд, затраты (чел.-ч/шт.)	10	10	400
Доход, руб./шт.	10	20	

Задача производственного планирования заключается в том, чтобы составить план выпуска изделий А и Б, обеспеченный имеющимися ресурсами и дающий максимально возможный доход. Ее математической моделью является задача линейного

программирования (ЗЛП) в стандартной форме — найти x_1 и x_2 такие, что функция $f(x) = 10x_1 + 20x_2$ достигает максимума при следующих ограничениях:

$$5x_1 + 25x_2 \leq 500;$$

$$0,5x_1 \leq 15;$$

$$100x_1 + 250x_2 \leq 7500;$$

$$10x_1 + 10x_2 \leq 400;$$

$$x_1 \geq 0; x_2 \geq 0;$$

Для обращения к функции *linprog* подготовим входную информацию:

- вектор коэффициентов целевой функции $f = [10; 20]$;
- матрицу коэффициентов системы линейных неравенств $A = [5 \ 25; 0,5 \ 0; 100 \ 250; 10 \ 10]$;
- вектор свободных членов системы линейных неравенств $b = [500; 15; 7500; 400]$;
- вектор нижних границ для переменных $lb = \text{zeros}(2,1)$.

Функция *linprog* ищет минимум, а в постановке задачи речь идет о максимуме, поэтому необходимо либо сменить знак коэффициентов целевой функции f , либо поставить знак минус перед именем этого вектора:

$$[x, fval] = \text{linprog}(-f, A, b, [], [], lb).$$

Получим следующие результаты:

$$x = [25 \ 15] \quad fval = -550.$$

Таким образом, найден оптимальный план производства: надо выпустить 25 изделий А и 15 изделий В, при этом получится доход 550 руб. План получился целочисленным, однако в общем случае решение может оказаться и вещественным. Если целочисленность решения — обязательное требование, его надо включать в постановку задачи, однако в *MATLAB* нет специальных функций для решения общей задачи целочисленного линейного программирования.

Для любой ЗЛП можно сформулировать так называемую *двойственную задачу*. Пусть в исходной задаче требуется найти максимум f^*x при $A^*x \leq b$ и $0 \leq x$. Тогда в двойственной задаче требуется найти минимум b^*y при $A^*y \geq f$ и $0 \leq y$.

Сформулируем задачу, двойственную к рассмотренной в примере. Чтобы привести неравенство к требуемому виду, умножим его на -1 , получим $-A^*y \leq -f$. Необходимо также скорректировать вектор нижних границ: $lb = \text{zeros}(4,1)$

Обращение к функции *linprog* теперь имеет такой вид:

$$[y, gval] = \text{linprog}(b, -A', -f, [], [], lb)$$

Получим следующие результаты:

$$y = [0,50 \ 0,00 \ 0,00 \ 0,75] \quad gval = 550,0000.$$

Видим, что значения целевых функций совпадают (если учесть искусственно внесенный минус в целевой функции прямой задачи). Это совпадение не случайно, о нем говорит теорема двойственности в ЛП. Значения двойственных переменных имеют экономическую интерпретацию: они представляют собой *оценки ресурсов*. Так, нулевые значения переменных y_2 и y_3 , соответствующих ресурсам 2 и 3, говорят, что эти ресурсы не являются ценными, поскольку для производства 25 изделий А и 15

изделий Б имеющиеся количества этих ресурсов избыточны, в чем можно убедиться, подставляя значения $x_1 = 25, x_2 = 15$ в левые части неравенств прямой задачи. Значение $y_1 = 0,5$ говорит о том, что при увеличении ресурса 1 на некоторое небольшое количество Δ_1 можно получить дополнительный доход $0,5 \cdot \Delta_1$. Аналогично значение $y_4 = 0,75$ говорит о том, что при увеличении ресурса «*трудозатраты*» на некоторое небольшое количество Δ_4 можно получить дополнительный доход $0,75 \cdot \Delta_4$.

Положим, например, $\Delta_1 = 0, \Delta_4 = 40$, т. е. возьмем $b = [500; 15; 7500; 440]$. Решив заново прямую ЗЛП, получим $x = [30 \ 14]$ $fval = -580$.

Видим, что (с учетом измененного знака $fval$) доход действительно увеличился на $0,75 \Delta_4 = 30$.

Решение задачи ЛП, т. е. точка оптимума, может быть не единственным (хотя оптимальное значение целевой функции определяется однозначно),

Рассмотрим другой пример задачи линейного программирования

Необходимо найти максимум функции $f = x_1 + x_2$ при $0 \leq x_i \leq 2$ ($i = 1, 2$) и $x_1 + x_2 \leq 3$. Эти неравенства задают на плоскости квадрат размером 2×2 со срезанной вершиной в правом верхнем углу.

Подготовим данные:

» $lb = \text{zeros}(2,1)$;

» $ub = 2 * \text{ones}(2,1)$;

» $A = \text{ones}(1,2)$;

» $b = 3$;

» $f = A$;

и обратимся к функции *linprog*:

» $[x, fval] = \text{linprog}(-f, A, b, [], [], lb, ub)$

$x =$

1,5000 1,5000 $fval = -3,0000$

Целевая функция принимает одно и то же значение ($f = 3$) во всех точках отрезка с концами $[1 \ 2]$, $[2 \ 1]$. Для концов отрезка это легко проверить подстановкой их координат в выражение целевой функции. Точка $x = [1,5 \ 1,5]$ является серединой этого отрезка.

Для двух переменных ЗЛП имеет простую геометрическую интерпретацию. Ограничения на переменные определяют выпуклый замкнутый многоугольник — область допустимых значений переменных. Функции цели соответствует прямая линия (в нашем примере $x + y = \text{const}$). Если параллельно перемещать линию функции цели (помните про карандаш?), то она сначала коснется одной вершины (или грани) допустимой области значений, а потом — противоположной вершины (или грани). Одно из этих положений соответствует минимуму целевой функции, а другое — максимуму. Это объяснение наглядно демонстрирует рис. 8.19, на котором маркером выделена точка, найденная с помощью функции *linprog*. Для построения этого рисунка использовалась программа *linprog_draw* с последующей ручной корректировкой полученного изображения (штриховка и маркировка функции цели).

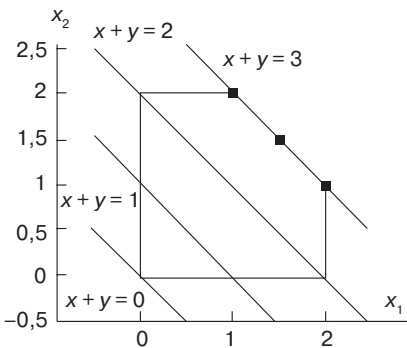


Рис. 8.19. Геометрическая интерпретация ЗЛП

```
function linprog_draw
axes('Xlim', [-0.5 2.5], 'Ylim', [-0.5 2.5]);
axis equal; hold on;
x = [0 2 2 1 0 0]; y = [0 0 1 2 2 0];
plot(x,y,'k');
line(2,1,'Marker','.', 'MarkerSize',40);
line(1,2,'Marker','.', 'MarkerSize',40);
line(1.5, 1.5, 'Marker','.', 'MarkerSize',40);
xlabel('x1'); ylabel('x2');
line([-0.5,0.5],[0.5,-0.5])
line([-0.5,1.5],[1.5,-0.5])
line([-0.5,2.5],[2.5,-0.5])
line([0.5,2.5],[2.5,0.5])
```

Пример. Имеется три вещества сложного состава B_1 , B_2 и B_3 разной цены. Каждое из них содержит определенное количество необходимых ингредиентов I_1 , I_2 , I_3 и I_4 (табл. 8.11). Известно, что в течение суток требуется I_1 — не менее 250, I_2 — не менее 60, I_3 — не менее 100 и I_4 — не менее 220. Требуется минимизировать затраты на приобретение этих веществ [36, с. 512–514]. Очевидно, что количество приобретаемых веществ не может быть отрицательным.

Таблица 8.11. Содержание необходимых ингредиентов в веществах и цены этих веществ

	B_1 ,	B_2	B_3
I_1	4	6	15
I_2	2	2	0
I_3	5	3	4
I_4	7	3	12
Цена	44	35	100

В состав *MATLAB* входит *ToolBox Optimization*, предназначенный для решения такого рода задач. Используется функция *linprog*.

Теория.

Первым аргументом *linprog* всегда является вектор f (вектор коэффициентов), далее задается матрица A и вектор b .

Решение.

x_1, x_2 и x_3 — искомые количества веществ.

Целевая функция:

$$f^T x = 44x_1 + 35x_2 + 100x_3.$$

Теория.

При наличии ограничений в виде равенств дополнительными аргументами могут быть A_{eq} и b_{eq} , наконец, двусторонние ограничения являются шестым и седьмым аргументами *linprog*. Поскольку линейные ограничения содержат «меньше или равно», а количество ингредиентов в продуктах не должно быть менее заданных величин, то следует изменить знаки обеих частей системы.

Для решения задачи составляется файл-программа. При вызове *linprog* вместо неиспользуемых аргументов (нет ограничений в виде равенств и верхней границы для неизвестных) задаются пустые массивы, обозначаемые $[]$.

Решение.

Матрица A и векторы b и lb :

$$A = \begin{pmatrix} -4 & -6 & -15 \\ -2 & -2 & 0 \\ -5 & -3 & -4 \\ -7 & -3 & -12 \end{pmatrix}; \quad b = \begin{pmatrix} -250 \\ -60 \\ -100 \\ -220 \end{pmatrix}; \quad lb = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

$$[x,p] = \text{linprog}(f,A,b,[],[],lb,[]);$$

$$x = \begin{pmatrix} 13.2143 \\ 16.7857 \\ 6.4286 \end{pmatrix}; \quad p = 1,8118e + 003; \quad p \text{ — общая стоимость продуктов.}$$

Интерпретация.

Представляет интерес умножить A на x , определить рекомендуемое содержание ингредиентов и сравнить его с минимально допустимым. $A^*x = [-250; -60; -142,14; -220]$;

Сравнивая эти числа с вектором b , можно констатировать завышенное содержание третьего ингредиента. Это объясняется тем, что не было введено ограничение на максимальное содержание.

Листинг программы и решение рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```
>> A=[ 4 6 15  - ЗАДАНИЕ МАТРИЦЫ И ВЕКТОРА ПРАВОЙ
      2 2 0      ЧАСТИ СИСТЕМЫ НЕРАВЕНСТВ;
      5 3 4
      7 3 12];
```

```
>> A=-A;
>> b=[250;60;100;220];
>> b=-b;
>> f=[44;35;100]; - ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ЦЕЛЕВОЙ ФУНКЦИИ;
>> lb=[0;0;0]; - ЗАДАНИЕ ОГРАНИЧЕНИЙ СНИЗУ НА ПЕРЕМЕННЫЕ;
>> [x,p]=linprog(f,A,b,[],[],lb,[]); - РЕШЕНИЕ
Optimization terminated. - ОПТИМИЗАЦИЯ ЗАВЕРШЕНА;
>> x
x =
    13.214
    16.786 - РЕШЕНИЕ
    6.4286
>> p
p =
    1811.8 - ОБЩАЯ ЦЕНА.
```

8.5. Контрольные наблюдения

Одно из наиболее важных применений статистической теории находит в методах статистического контроля, среди которых хорошо известным примером может служить контроль качества [30, с. 253–264, 37, с. 53–60, 81–90, 126–135, 38, с. 291–320, 39, с. 21–37]. Контроль качества находит наиболее широкое применение в промышленности. Однако теория и методы контроля могут быть с не меньшей пользой применены ко многим процессам повторяющегося характера почти в любой другой сфере деятельности.

Поскольку риск ошибки в выборочных методах больше, когда применяются выборки небольших размеров, выборочные данные могут иметь сравнительно широкий размах, и незначительные колебания могут оказаться скрытыми. С другой стороны, у небольших выборок все же имеется достаточный шанс обнаружить неожиданные большие изменения. Если приемлем определенный предел ошибки, то незначительные изменения в пограничных зонах можно игнорировать при условии, что основное изменение, выходящее за поставленные пределы, которое обнаруживается в наблюдении, может немедленно фиксироваться. Таков базис, на котором покоится теория контроля.

Методика контроля качества находит два основных применения. Первое применение она находит в *управлении технологическими процессами*, при котором какой-либо реальный процесс, например такой, как работа машины, измеряется с целью оценки хода работы в настоящее время и, как подразумевается, для получения отправных данных для работы в ближайшем будущем. Второе применение она находит в *приемочном контроле*, который оценивает ход работы в прошлом путем измерения качества произведенных товаров. Поэтому это второе применение имеет дело с конечной совокупностью вещей, которые уже были произведены, тогда как управление технологическим

процессом нацелено на проверку самого хода фактического производства. Это позволяет руководству выявить недостатки в процессе почти одновременно с их появлением и тем самым предотвратить выпуск изделий, имеющих дефекты.

Обе методики строятся на извлечении небольших выборок из соответствующих совокупностей и на проверках качества в этих выборках, после чего выносятся решения, распространяемые на всю совокупность. В контроле качества слово *качество* имеет ограниченное практическое значение для каждой системы, в которой применена данная методика. В практической деятельности качество определяется в связи с измерением объекта или процесса. Шины производятся с конкретной целью, и идеальный процесс давал бы первоклассные шины. Это значит, что размеры, масса, осевая симметрия, эстетические характеристики, если угодно, и любое другое свойство каждого изделия одного и того же процесса были бы одинаково безупречными.

Пока еще не создано такого процесса, который постоянно давал бы одинаковые результаты: такое вообще вряд ли возможно. Элементы оборудования будут изнашиваться или не поддаваться регулировке, в то время как человеческие ошибки (субъективный фактор) могут приводить ко многим другим поломкам.

Задача управления технологическим процессом заключается в том, чтобы обеспечивать соблюдение установленных статистических допусков и обнаруживать неисправности в момент их возникновения. Управление допускает изменчивость в установленных пределах, и любой из двух или больше произведенных предметов, размеры которых укладываются в эти пределы, рассматриваются как одинаковые в смысле их соответствия требованиям. Это именно так, если даже они могут незначительно различаться между собой. Важна не сама изменчивость, а степень изменчивости и ее направление. Величина изменчивости, присутствующей в процессе, будет обнаружена расхождением в показаниях измерений, и широкий размах показаний обратит внимание на дефект в работе как на причину отклонений. С другой стороны, диаграмма тенденции отразит любой значительный сдвиг в сторону от принятого стандарта; постоянно высокие или низкие показатели обычно будут скорее указывать на ошибку в наладке машины, чем на какой-либо дефект в механизме.

О процессе говорят, что он статистически контролируется, или же характеризуют его как устойчивый тогда когда изменчивость в регистрируемых замерах такова, что ее можно приписать случаю, во многом схожему с тем, который может произойти при случайном отборе из однородной совокупности. Процесс поэтому не контролируется статистикой непосредственно, но вместо этого статистика проверяет ход работы, чтобы гарантировать управляемость процесса. Если имеющая место изменчивость может быть отнесена на счет чистой случайности, то процесс управляем. Если же в подобных обстоятельствах полученные результаты не удовлетворяют техническим условиям, то неисправность таится в самом процессе, а не в его непрерывном движении во времени. Подобная ситуация возникает при наличии ошибок в регулировке процесса, и полученные результаты покажут, что процесс нуждается в пересмотре. Когда же изменчивость не может быть полностью приписана случаю, процесс не управляем, и именно это проблема такого характера, с которой в основном имеет дело контроль качества.

Метод контроля основывается на свойствах нормальной кривой. Около 99,7% всех наблюдаемых значений, взятых из нормально распределенной совокупности, располагаются в пределах интервала трех стандартных отклонений в любую сторону от среднего значения, и поэтому только около трех из каждой тысячи показаний наблюдений располагается вне этих пределов. Исходя из этого, может быть составлена *контрольная карта*, аналогичная изображенной на рис. 8.20, которая показывает возможные значения на вертикальной оси, и ряды последовательных целых чисел, представляющих последовательные наблюдения, расположенные вдоль горизонтальной оси. Горизонтальная линия проведена на высоте, соответствующей среднему значению; горизонтальные линии проведены также на высотах, представляющих контрольные пределы. Верхний контрольный предел установлен на высоте, соответствующей значению средней плюс три стандартных отклонения (С.о.); нижний контрольный предел установлен на высоте, соответствующей значению средней минус три стандартных отклонения, так что около 99,7% всех показаний должны расположиться в этих пределах.

Среднее значение $m = 5,0$; стандартное отклонение С.о. = 0,5. Принято обозначать стандартное отклонение греческой буквой σ .

Обычно принято пользоваться контрольными пределами с тремя интервалами стандартного отклонения (правило трех σ). Это несущественно, но обеспечивает более осторожные пределы, чем пределы, скажем, с двумя интервалами стандартного отклонения.

Если бы допускаемый размах отклонения нужно было сузить подобным путем, значительно большее количество значений расположилось бы за контрольными пределами. Фактически за пределами расположилось бы около 32% значений, что лишило бы контрольную систему желательной меры различия. С другой стороны, если размах стандартного отклонения расширяется, скажем, до шести стандартных отклонений, ненормальные значения могут располагаться внутри контрольных пределов и потому оставаться незамеченными.

Контрольные пределы должны устанавливаться таким образом, чтобы они пропустили небольшие колебания, в то же самое время привлекая наше внимание к крупным колебаниям, которые могут указывать на существенные нарушения процесса.

Среднее значение и стандартное отклонение, потребовавшиеся для этой диаграммы, являются именно параметрами совокупности. Довольно естественно, что такие параметры редко известны, и вместо них на практике необходимо выводить оценки из выборок, взятых раньше, а затем пересматривать эти оценки по мере увеличения количества данных. Индивидуальные наблюдения наносятся точками, и нет ничего проще, чем наблюдать, попадают ли они в установленные статистические пределы.

Диаграмма 8.20 дает представление об основной идее, но на практике обычно принято наносить на диаграмму арифметические средние малых выборок, объем которых очень часто бывает не больше 4. Для этого имеется ряд веских оснований. Во-первых, индивидуальные наблюдения могут не быть нормально распределенными; с другой стороны, вероятность того, что распределения показаний малых выборок будут ближе к нормальным, гораздо больше. Во-вторых, данные индивидуальных

наблюдений могут широко колебаться внутри принятых пределов, и необходимо, чтобы контрольные пределы устанавливались достаточно далеко друг от друга, если нужно, чтобы масштаб диаграммы был достаточным для отражения различий. Там, где пределы далеко отстоят друг от друга, не всегда легко различать значительные изменения непосредственно в момент их появления. Карта в таком случае приобретает вид поверхности, пораженной пылью, с массой точек, скрывающих общую структуру. Но изменчивость между средними выборок значительно меньше, чем изменчивость между индивидуальными наблюдениями. Так, если наносятся только средние выборок, контрольные пределы могут быть установлены ближе друг к другу, и гораздо легче различить значительные изменения в структуре.

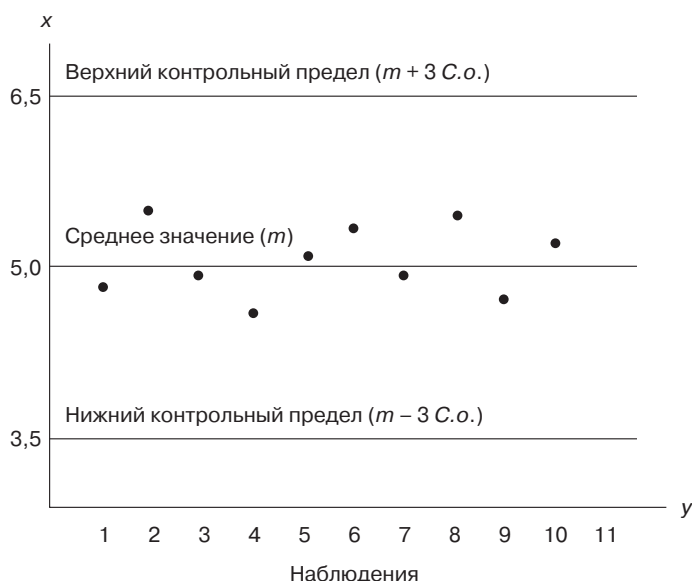


Рис. 8.20. Карта контроля качества

Верно, конечно, что нанесение на карту средних значений выборок может повлечь за собой пропуск случайного значения, которое располагается за контрольными пределами. Появление отклонения вне контрольного предела (т. е., например, одной из трех на одну тысячу, которую можно ожидать вне пределов) может остаться незамеченным, потому что ее влияние может быть в основном сведено на нет другими значениями выборки. Само по себе это неважно. Эти ненормальные значения представляют собою риск, на который идут сознательно. Однако там, где такие значения устойчиво повторяются, так что их появление не может быть полностью объяснено случаем, важно, чтобы эти значения были опознаны. Легче всего это сделать с помощью карт, на которые наносятся средние выборки.

Выборочные средние применяются специально для того, чтобы снизить изменчивость индивидуальных значений, но эту изменчивость нельзя игнорировать. Поэтому

для регистрации размахов значений в выборке применяются отдельные карты. Необходимость контроля размаха значений в дополнение к средним значениям вытекает из того факта, что две выборки могут иметь тождественные средние значения и тем не менее иметь совершенно различный размах значений. Действительно, возможно, что среднее значение может располагаться внутри контрольных пределов, тогда как все индивидуальные значения могут располагаться вне этих пределов. Подобная выборка, состоящая из четырех значений с нижним контрольным пределом, равным 0,995, и верхним пределом, равным 1,005, может быть, например, следующей: 0,990; 1,007; 1,010; 0,993. Выборочное среднее значение составляет 1,000.

Это выборочное среднее значение совпадает с предполагаемой средней всей совокупности, исходя из которой были измерены пределы. Она создает обманчивое впечатление совершенства, поскольку каждое из индивидуальных значений находится за ее пределами. Такая возможность возникает благодаря широкому размаху изменчивости внутри выборки. Процесс нерегулярно изменяется между высшим и низшим значениями, и не является больше устойчивым.

Хотя этот способ обходится без обращения к стопроцентной проверке, он, тем не менее, предлагает методы контролируемой проверки на любой стадии производства, и в этом ее основное преимущество. Обнаруживая выход процесса из-под контроля почти сразу же после того как это произошло, данный метод снижает бесполезную трату труда и материалов, которые в противном случае были бы потеряны в производстве бракованных изделий. Применяемая карта в своей основе проста, принципы ее легко усвоить без обращения к связанным с нею математическим вычислениям. Но ее внешняя простота может иногда быть обманчивой, поскольку принятые предположения (например, нормальность распределения) могут на деле не отражать истинного положения дел. Нужно также отметить, что метод призван лишь показать, когда процесс больше неуправляем, и что, хотя он может указывать на возможный общий тип нарушения, он не идет по пути показа того, насколько велики исправления, которые нужны, чтобы вновь сделать процесс управляемым.

В дополнение к наблюдениям за ненормальностями важно также следить за тем, насколько протяженны ряды наблюдений между появлениями ненормальностей. Ряд наблюдений будет обнаруживать любое смещение среднего значения процесса от предполагаемого среднего значения совокупности, если даже все зарегистрированные наблюдения по-прежнему размещаются в контрольных пределах. Тот факт, что процесс управляем, не есть еще достаточное оправдание для отказа от изменения процесса таким образом, чтобы контрольные пределы могли быть сужены. Чтобы повысить полезность этого применения, иногда пользуются кумулятивными картами данных, на которых регистрируются не индивидуальные значения, а кумулятивные целые значений. Значение каждого индивидуального измерения представлено сконом между двумя последовательными точками, и линия, проведенная через все точки, дает направленную картину процесса в целом. Любое реальное изменение в направлении (т. е. устойчиво повышающиеся или снижающиеся показания) сразу же станет очевидным.

Контроль технологического процесса представляет собой ряд технических приемов проверки процесса по ходу действия. Другая главная форма статистического контроля, приемочный контроль, связана с выборочной проверкой готовых изделий с целью определить, имеют ли партии изделий, из которых берутся выборки, приемлемое качество. Здесь следует указать, что готовые изделия существуют не обязательно в законченном или собранном виде, в котором их приобретают потребители. Любые продукты, которые были подвергнуты обработке, для наших целей являются конечным продуктом по отношению к процессу обработки.

Таким образом, приемочный контроль имеет место после окончания процесса производства. Если партия товаров была изготовлена на приемлемом качественном уровне посредством наблюдаемого технологического процесса, то, что касается изготовителя, выборочный приемочный контроль становится ненужным, поскольку его задачи уже были выполнены на стадии производства. Покупатель таких товаров, однако, мог не иметь доступа к данным контроля технологического процесса, а поэтому вынужден будет изобретать собственную схему выборочного приемочного контроля. В этой связи интересно отметить появление, особенно в США, требований со стороны некоторых крупных фирм, чтобы каждая партия товаров, поставленных им, сопровождалась копиями карт контроля технологического процесса изготовителя.

Обе формы контроля основаны на очевидности, полученной из случайных выборок, и обе пользуются основной идеей контрольных пределов, но, тем не менее, между ними существует коренное различие. Когда техника промышленного контроля обнаруживает, что процесс идет неправильно, регулировка процесса может быть проведена почти одновременно. Появление нескольких изделий с браком, поэтому, приведет к регулированию процесса, а также к прекращению выпуска брака. Выборочный же контроль связан с ограниченной совокупностью изделий, которые уже были произведены. В этом главная задача данного метода, и, хотя информация, полученная в результате его применения, может иметь и действительно имеет конечное воздействие на процесс, в котором создаются изделия, он не может изменить качество изделий в партии, которая подвергается инспекции.

Вероятность принятия партии товаров зависит от действительного качества входящих в нее изделий. Вероятность принятия есть вероятность того, что, если предложена партия изделий точно определенного качества, она будет принята. Вероятность принятия не есть вероятность того, что, если партия принята, она будет точно определенного качества. Каждая схема выборочного приемочного контроля влечет за собой элемент риска, и будут приняты некоторые партии товара с процентом дефектов более высоким, чем установленный.

Идеальная форма схемы выборочного изучения отвергла бы каждую неприемлемую партию изделий и приняла бы только те партии, которые отвечают требованиям. Такое совершенство, однако, требует почти эквивалента 100% инспекции, тем самым нарушая цели выборочного метода.

Теоретически методы статистического контроля, основанные на данных, полученных из выборок, опираются на теорию математической вероятности. Там, где

требуется абсолютная достоверность, этот метод непригоден, поскольку он не предназначен для операций с достоверным материалом. Но если достаточно почти достоверных данных, он может быть очень ценным. Теоретически единственным путем, которым можно достичь полной достоверности, служит стопроцентная проверка. И все же, сравнивая выборочные схемы контроля с полной проверкой, нужно согласиться с тем, что, в конце концов, полная проверка сама по себе тоже несовершенна. Теория полной проверки может быть неопровержимой, но инспекторы не столь надежными. Чем больше количество проверяемых изделий, тем менее вероятно, что отдельное изделие, имеющее дефекты, будет обнаружено. Парадоксально, что чем выше качество продукта, тем соответственно ниже уровень проверки. Там, где предполагается наличие очень немногих изделий с дефектами, приходится проверять столь большие количества высококачественных изделий, что проверка может превратиться в автоматическое занятие. У инспекторов могут сформироваться свои собственные интуитивные представления о вероятности обнаружения изделия, имеющего дефект, и они могут считать эту возможность отдаленной. Поскольку никаких дефектов не ожидается, они могут остаться незамеченными: по прошествии некоторого времени все кажется одинаковым.

Контрольные карты можно использовать [17, с. 182]:

1. Как сигнал о том, что в процессе произошло некоторое изменение, так и в качестве оценки величины изменения, для которого требуется коррекция.
2. Исклчительно как сигнал о том, что в процессе произошло некоторое изменение, чтобы оператор осознал, что процесс требует его внимания.
3. Для получения оценок числа случаев в прошлом, когда в процессе возникали изменения, и установления на их основе причин, вызывающих эти изменения.
4. Как меру качества продукции для классификации по периодам.

Из-за способа, с помощью которого на практике устанавливаются контрольные пределы, и в силу недостатка информации о функции распределения вероятности случайной величины обычно стараются избегать точных вероятностных формулировок. Контрольные карты оказываются особенно ценными при использовании в качестве простых графических средств, позволяющих оператору, плохо усвоившему статистические методы, мысленно представить себе картину происходящего процесса и решить, находится ли качество продукции на должном уровне.

В производстве чаще всего используются:

- 1) контрольные карты Шухарта (карты \bar{x} , R и s — средних значений, размаха и стандартного отклонения);
- 2) карты скользящих геометрических средних (скользящего экспоненциально взвешенного среднего) и скользящих размахов;
- 3) карты накопленных сумм;
- 4) многомерные контрольные карты.

В равной степени полезны и многие другие типы карт. В табл. 8.12 указана относительная эффективность обнаружения различных изменений в процессе для четырех типов контрольных карт [17, с. 183].

Таблица 8.12. Относительная эффективность обнаружения изменений в процессе

Причина изменения	Контрольные карты			
	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>
Отклонение с пересечением (грубое)	1	2	—	3
Сдвиг среднего	2	—	3	1
Сдвиг дисперсии	—	1	—	—
Медленная флуктуация (тренд)	2	—	—	1
Быстрая флуктуация (колебание)	—	1	2	—

A — среднее; *B* — размах; *C* — стандартное отклонение; *D* — кумулятивная сумма.

1 — наиболее эффективная, 2 — следующая по эффективности, 3 — наименее эффективная, — — неприменима.

Контрольные карты Шухарта для \bar{x} были одним из первых методов статистического контроля качества [Shewhart W.A. *Control quality of manufactured product*, 1931, Shewhart W.A., Fuiweiler W.H., Hundington E.V. *Application of statistical methods in engineering and manufacturing*, 1932, Shewhart W.A. *Statistical control in applied science*, 1943].

Берется некоторая выборка случайной переменной с нормальным по предположению законом распределения со средним значением μ_x и дисперсией σ_x^2 . Было показано [Burr I.W., 1967], что влияние отклонений от нормального закона слабое, и приведены таблицы поправочных коэффициентов. Вычисляется \bar{x} и затем откладывается на графике, как показано на рис. 8.20. Для выбранного значения уровня значимости α (обычно $\alpha = 0,0027$, так что $1 - \alpha = 0,9973$) подсчитывают верхний и нижний контрольные пределы, используя σ_x или ее оценку, и наносят на карту по обе стороны от известного или оцененного значения μ_x . Если выборочное среднее попадает за контрольные пределы, делают вывод, что процесс «вышел из-под контроля» [40, 262–292; 41, с. 52–69; 42, с. 366–385; 43, с. 98–148]. При этом очень важно решить, какое нужно выбрать значение α ; чем уже полоса между контрольными пределами, тем чаще будет неоправданно звучать сигнал «выхода из-под контроля». Также важно решить, какой объем выборки n использовать. Обычно принимают $n = 5$. Вместе с \bar{x} часто откладывают на графике вторую статистику, размах выборки R . Арифметическое среднее значение размаха \bar{R} можно использовать в качестве оценки выборочной дисперсии, а арифметическое среднее величин $\bar{x}, \bar{\bar{x}}$, может служить оценкой среднего μ_x .

Размах оказывается более удобной для подсчета мерой рассеяния данных, чем стандартное (среднеквадратичное) отклонение. Нанесение на контрольную карту наряду с \bar{x} размаха выборки позволяет легче заметить аномальное изменение. Размах служит грубой мерой скорости изменения переменной, за которой ведется наблюдение. Его значение может выйти за контрольные пределы на карте размаха и подать

сигнал тревоги значительно раньше, чем изменение среднего, которое при этом еще может находиться в заданных контрольных пределах.

Если превышение одного из двух контрольных пределов не вызывает особого беспокойства или ущерба, а для другого предела справедливо обратное утверждение, то среднее значение для процесса можно сдвинуть так, чтобы более важный предел находился дальше от среднего значения, а другой предел при этом не учитывать. Если один из пределов оказывается больше физически допустимого предела для процесса, например, если некоторое значение в процентах меньше 0 или больше 100, то в таком случае контрольный предел приводят в соответствие с физическим пределом.

На рис. 8.21 показана контрольная карта процесса, на которой приведены оба графика \bar{x} и R [17, с. 185]. В 7 ч 30 мин утра размах превысил контрольный предел, указывая на слишком быстрое падение производительности, приводящее к нарушению контрольных условий для \bar{x} в 8 ч 30 мин утра. Если причина этого изменения известна, то никакого вмешательства не требуется. Однако если причина неизвестна, то по карте не всегда легко решить, какую переменную следует регулировать, и какие поправки необходимы.



Рис. 8.21. Контрольные карты \bar{x} и R (нижний контрольный предел для размаха не указан)

На рис. 8.22 даны контрольные карты по вулканизационным характеристикам (данные предоставлены А.Ю. Куракиным).

Наблюдается значительное количество индивидуальных значений, выходящих за границы регулирования ($\pm 3\sigma$) в начале дня и в конце, что, видимо, связано с систематическими ошибками. Данные по скользящему размаху практически не выходят

за рассчитанную границу регулирования, что говорит об однородности процесса. Процесс протекает без резких флуктуаций значений.

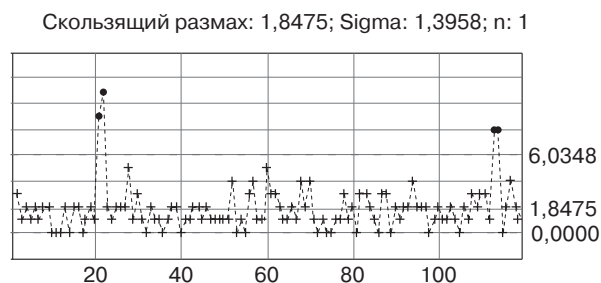
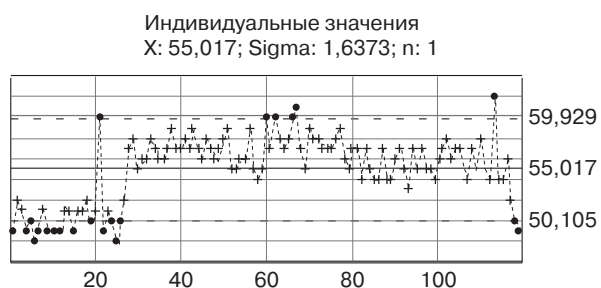
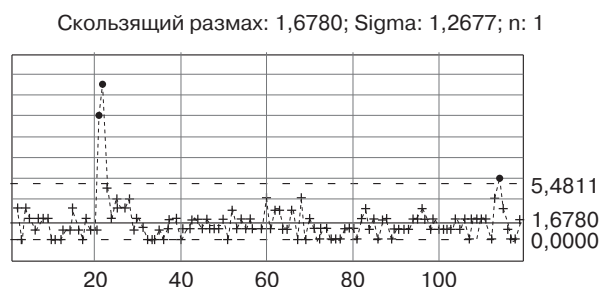
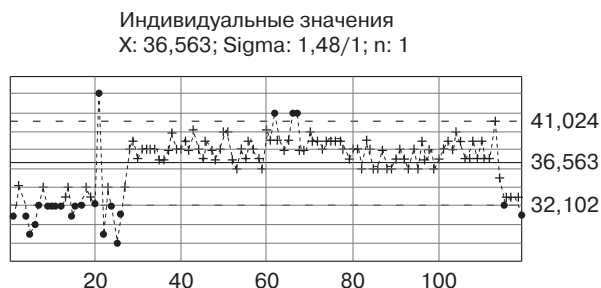


Рис. 8.22. Контрольные карты \bar{x} и R для вулканизационных характеристик (температура вулканизации 200 °C)

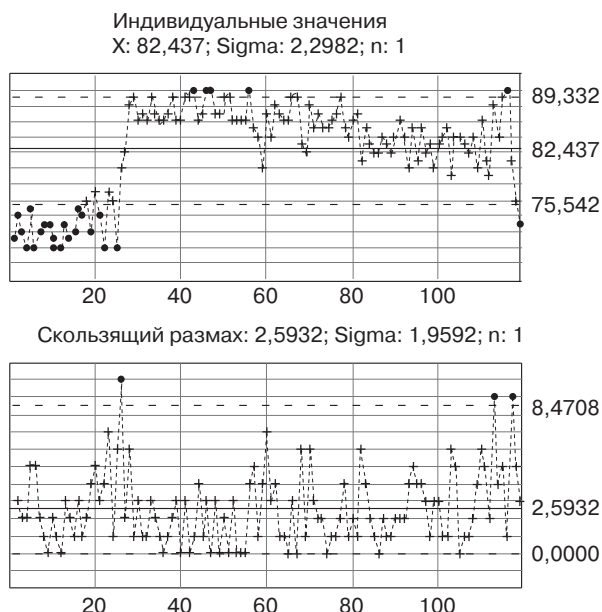


Рис. 8.22, окончание. Контрольные карты \bar{x} и R для вулканизационных характеристик (температура вулканизации 200 °С)

Для анализа систематических ошибок целесообразно проводить дифференциацию данных по сменам, резиносмесителям и типам реометров.

На рис. 8.23 показана блок-схема управления процессом с использованием контрольных карт в соответствии со стандартами *ISO*.

Общепринятая методология построения контрольных карт (например, карт Шухарта) имеет ту особенность, что проводимый контроль не учитывает предыдущего поведения контролируемого параметра. В конце пятидесятих годов в этой связи была предпринята попытка разработать методику, учитывающую для анализа текущего состояния информацию о прошлых данных. В основе этой методики лежит исследование не индивидуальных значений признака, а учет их накопленных (кумулятивных) сумм [41, с. 70–109].

Контрольная карта накопленных (кумулятивных) сумм имеет несколько иное назначение, чем карта Шухарта, и более чувствительна, чем последняя, к скачкообразным изменениям параметров процесса (в отличие от постепенного тренда). Относительная стоимость этих карт (измеряемая числом необходимых наблюдений) ниже, чем у карты Шухарта, но не при всех значениях α (уровень значимости) и не для всякого изменения среднего значения процесса. Это становится понятным при рассмотрении средней длины серии — среднего числа наблюдений, необходимых для обнаружения заданного изменения характеристик процесса [42, с. 387–411].

Разработка кумулятивных карт связана с работами [Bernard G.A. *Cumulative charts and stochastic processes*, 1959, Page E.S. *Cumulative sum charts*, 1961, Goldsmith P.L., Whitfield H. *Average run length to cumulative sum chart when V-mask is used*, 1961].

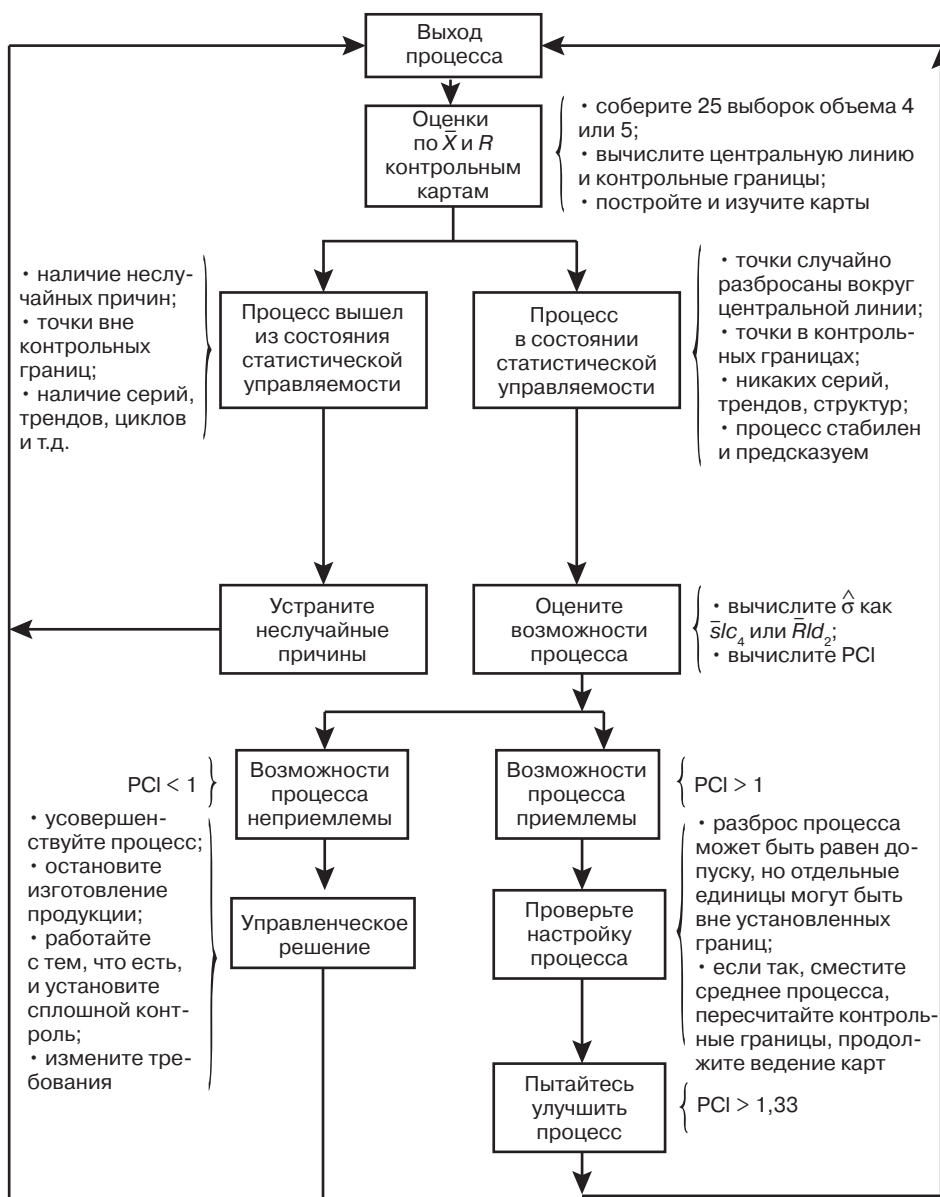


Рис. 8.23. Блок-схема управления процессами

Если есть ряд значений признака x_1, x_2, \dots , то образование кумулятивных сумм будет происходить следующим образом:

$$S_1 = (x_1 - k);$$

$$S_2 = (x_1 - k) + (x_2 - k) = S_1 + (x_2 - k);$$

•
•
•

$$S_r = \Sigma(x_i - k) = S_{r-1} + (x_r - k),$$

где k — константа, представляющая собой некоторое *эталонное значение*. Вычисленные и нанесенные на график в порядке появления кумулятивные суммы (S_r) образуют карту накопленных сумм.

Константа k может принимать любое значение, даже нулевое, однако, чтобы карта имела компактный вид и уместилась на обычном листе бумаги, величину k приравнивают чаще всего точно или приблизительно к математическому ожиданию (среднему значению). Это удобно еще и потому, что константа k оказывается тогда близкой к номиналу параметра процесса.

Если среднее значение параметра процесса возрастает, то будет иметь место и общий рост уровня кумулятивной суммы, поскольку все большее число значений $(x_i - k)$ станут положительными. Аналогичным образом, если среднее значение будет падать, то и график будет стремиться вниз.

Действительно, изменение среднего значения исходных данных приводит к изменению угла наклона графика кумулятивных сумм. Фактическая величина кумулятивной суммы в отдельной точке не имеет никакого значения. Из-за мелких случайных колебаний параметров процесса на отдельных участках графика могут проявляться различные тенденции в угле наклона. И только построение среднего наклона графика позволяет установить, имели ли место какие-либо изменения.

Карты кумулятивных сумм более широко применяются, чем карты Шухарта еще и потому, что во многих случаях создают основу для управления, когда доступны лишь индивидуальные значения (т. е. объем выборки $n = 1$). Это обстоятельство делает метод кумулятивных сумм идеальным средством управления процессами с относительно низким уровнем производительности или высокой стоимостью измерений. Карты кумулятивных сумм более эффективны, чем карты Шухарта, при обнаружении небольших изменений в среднем значении параметра процесса.

На рис. 8.24 показана контрольная карта накопленных сумм средних значений \bar{x} , а в нижней части — соответствующая классическая контрольная карта. Начиная с 11-й выборки, распределение модели сдвинулось влево на единицу среднего квадратического отклонения; следовательно, новое среднее значение распределения будет $\mu_1 = \mu_0 - \sigma = 45$. С помощью контрольной карты накопленных сумм это замечается уже на 13-й выборке, в то время как на классической карте среднее значение продолжает находиться между 3σ -границами и тем самым не обнаруживается помеха, поскольку остается незамеченным смещение процесса.

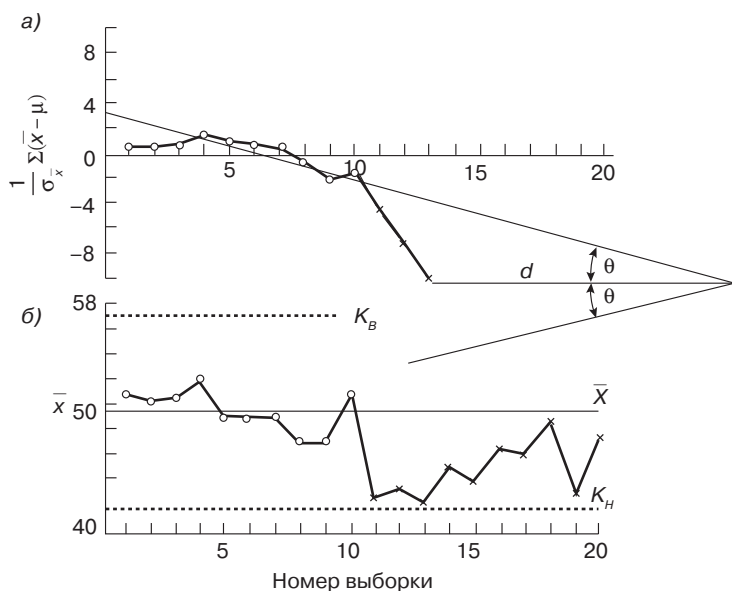


Рис. 8.24. Карта накопленных сумм

Карту накопленных сумм можно вести также для средних квадратических отклонений s . В этом случае предполагается, что процесс является статистически управляемым [43, с. 185–190].

В контрольных картах накопленных сумм, как видно из самого названия, используются накопленные суммы случайной переменной или некоторой функции случайной переменной, начиная с некоторого данного опорного времени. Например, статистиками, значения которых накапливаются, могут быть: 1) сама переменная; 2) разность между измеренным значением переменной и ее математическим ожиданием; 3) разность между измеренным значением переменной и некоторым целевым значением; 4) последовательные разности между значениями переменной или абсолютные величины разностей; 5) выборочное среднее; 6) размах.

Основное преимущество карт накопленных сумм по сравнению с картами Шухарта, как уже упоминалось, состоит в том, что они более чувствительны к небольшим отклонениям исследуемой статистики процесса от ее математического ожидания; они «подавляют» случайный шум, одновременно «усиливая» реальные изменения в процессе [17, с. 197–208]. Правда, карты Шухарта можно сделать более чувствительными, используя помимо контрольных пределов (для одной статистики) один или несколько из следующих критериев [17, с. 197–199]: 1) линии «предупреждения» внутри контрольных пределов и линии «вмешательства» на месте обычных контрольных пределов; 2) серии значений статистики, например три последовательные точки за контрольными линиями, проведенными на расстоянии $\pm\sigma$ от центральной, или семь последовательных точек по одну из сторон от центральной линии.

В таком варианте правила принятия решения позволяют использовать часть дополнительной информации, записанной на контрольной карте, помимо той, которая содержится в текущей выборке. В картах накопленных сумм также учитывается не только текущая выборка; следовательно, с правилами принятия решений можно связать заметно больший объем информации.

В зависимости от характера диаграммы на карте накопленной суммы используются различные критерии вмешательства. Контрольные пределы на карте накопленной суммы определяются по распределению статистики, наносимой на карту; однако контрольные линии на карте не проводятся, а задаются с помощью специального шаблона или накладной маски. На карте накопленной суммы интерес представляет не абсолютное значение суммы, а *наклон* кривой, определяемый по последовательным (недавним) точкам. Для каждого типа карт требуются различные шаблоны, указывающие величину наклона.

На рис. 8.25 показан типичный шаблон и приведены правила для его построения и использования [17, с. 199], выводимые из распределения статистики, наносимой на карту, в предположении, что случайная переменная распределена по нормальному закону.

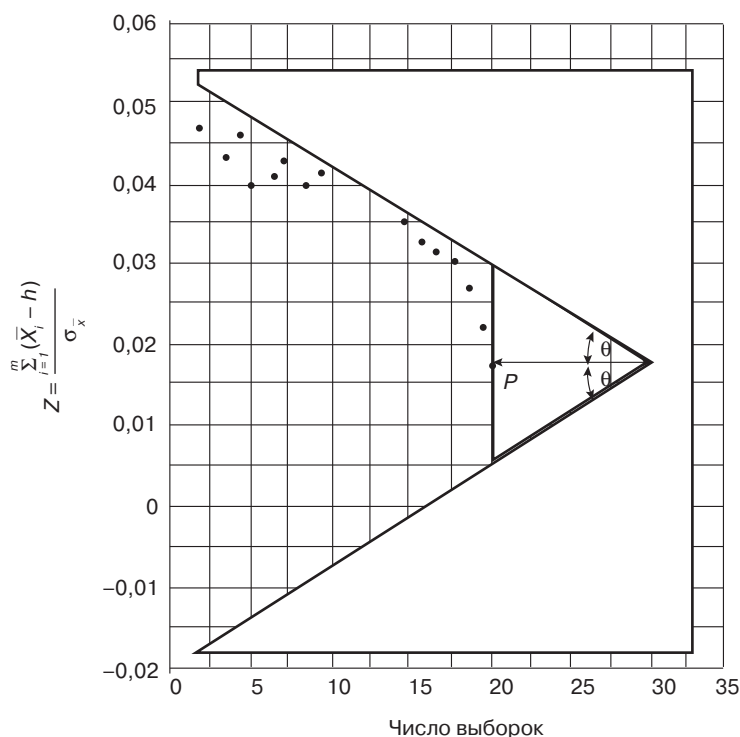


Рис. 8.25. Шаблон для контрольной карты накопленной суммы. Правила обращения: 1. Поместите точку P в последнюю точку, отложенную на контрольной карте. 2. Изменение произошло, если какая-либо отложенная точка закрыта маской

После того как каждая точка отмечена на карте, опорная точка P на маске совмещается с самой последней точкой. Тогда наблюдатель может увидеть, попадают ли ранее отмеченные точки под маску (или вообще исчезают, если маска непрозрачна), если правильно расположить маску в соответствии с данным правилом принятия решения. Когда такое событие происходит, говорят, что процесс «вышел из-под контроля». Для V-образных масок полагают, что визуальное проявление некоторого изменения оптимально, если горизонтальный шаг приблизительно равен 2σ вертикального шага.

Если данные представлены графически, вычисление и построение графика кумулятивных сумм (*CUSUM*) может оказать существенную помощь при выяснении момента наступления сдвига в изменении динамики показателя, поскольку [44, с. 115–123]: 1) при этом мы освобождаемся от эффекта зашумления случайными колебаниями; 2) увеличивается шкала наблюдений за ошибками; 3) легко определяется размер сдвига.

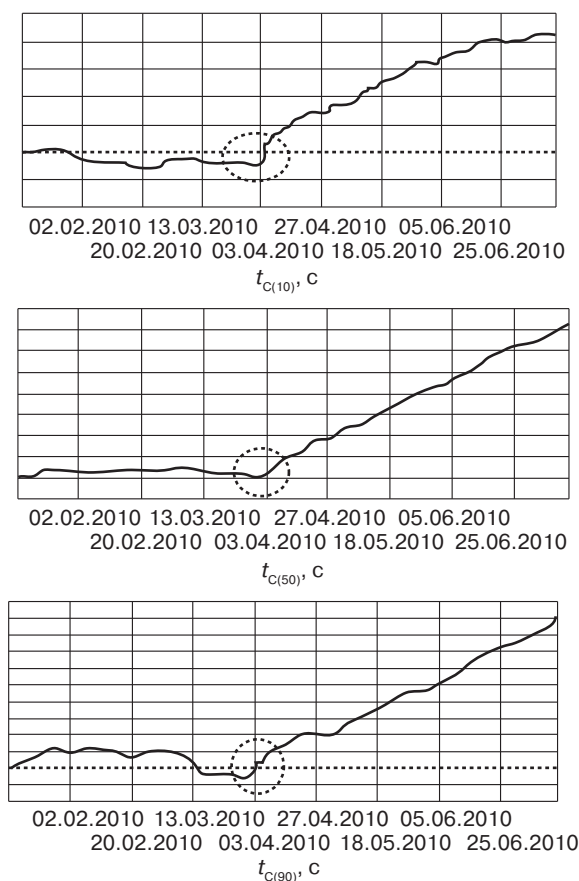


Рис. 8.26. Контрольные карты кумулятивных сумм для вулканизационных характеристик (температура вулканизации 200 °C)

На рис. 8.26 даны контрольные карты по вулканизационным характеристикам (данные предоставлены А.Ю. Куракиным).

Достаточно надежно можно идентифицировать момент замены CBS (N-циклогексил-2-бензтиазолилсульфенамид) на MBS (N-морфолинил-2-бензтиазолилсульфенамид).

Литература

1. Планирование эксперимента в исследованиях технологических процессов. Под ред. Э.К. Лецкого / Пер. с нем. М.: Мир, 1977. — 552 с.
2. Ли Т.Г., Адамс Г.Э., Гейнз У.М. Управление процессами с помощью ЭВМ. Моделирование и оптимизация / Пер. с англ. М.: Советское радио, 1972. — 312 с.
3. Агаянц И.М. Натуральный каучук, в поисках рецепта. М.: Петергоф, 1910. — 700 с.
4. Информационные материалы // Сборник статей под ред. С.И. Самойленко. 8 (45). М.: АН СССР, НТС по комплексной проблеме «Кибернетика», 1970. — 132 с.
5. Маркова Е.В., Лисенков А.Н. Комбинаторные планы в задачах многофакторного эксперимента. М.: Наука, 1979. — 348 с.
6. Рузинов Л.П., Слободчикова Р.И. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. М.: Химия, 1980. — 280 с.
7. Агаянц И.М., Хлебов Г.А., Мешандин А.Г. Основные понятия планирования эксперимента при синтезе связующих. Москва: ЦНИИНТИ, 1981. — 58 с.
8. Иванов А.З., Круг Г.К., Филаретов Г.Ф. Специальные вопросы планирования эксперимента. М.: Изд. МЭИ, 1980. — 90 с.
9. Уайлд Д.Дж. Методы поиска экстремума / Пер. с англ. М.: Наука, 1967. — 267 с.
10. Тихонов А.Н., Костомаров А.П. Рассказы о прикладной математике. М.: Наука, 1979. — 206 с.
11. Закгейм А.Ю. Общая химическая технология. Введение в моделирование химико-технологических процессов. М.: Логос, 2009. — 302 с.
12. Монтгомери Д.К. Планирование эксперимента и анализ данных / Пер. с англ. Л.: Судостроение, 1980. — 384 с.
13. Налимов В.В., Чернова Н.А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. М.: Физматгиз, 1965. — 340 с.
14. Саутин С.Н. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. Л.: Химия, 1975. — 48 с.
15. Сычевская И.Д. Планирование научного эксперимента. М.: Изд. ЦНИИТЭИ приборостроения, 1976. — 75 с.
16. Тихомиров В.Б. Математические методы планирования эксперимента при изучении нетканых материалов. М.: Легкая индустрия, 1968. — 156 с.
17. Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами / Пер. с англ. М.: Мир, 1973. — 957 с.
18. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. М.: Высшая школа, 1978. — 319 с.

19. Горюшко В.Е. Планирование эксперимента в бытовой химии. М.: НИИТЭХИМ, 1974. — 88 с.
20. Зедгинидзе И.Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. М.: Наука, 1976. — 390 с.
21. Грановский Ю.В. Основы планирования экстремального эксперимента при оптимизации многофакторных технологических процессов. М.: Изд. МИНХ, 1971. — 73 с.
22. Назаров В.И., Хоц М.С. Прикладные математические методы в нефтепереработке и нефтехимии. М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1975. — 111 с.
23. Ашмарин И.П., Васильев Н.Н., Амбросов В.А. Быстрые методы статистической обработки и планирование эксперимента. Л.: Изд. ЛГУ, 1971. — 78 с.
24. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов. М.: Академкнига, 2006. — 415 с.
25. Математическое описание и оптимизация многофакторных процессов. М.: Труды МЭИ, вып. LXVII. Под ред. Г.К. Круга. 1966. — 211 с.
26. Налимов В.В. Теория эксперимента. М.: Наука, 1971. — 207 с.
27. Хикс Ч. Основные принципы планирования эксперимента / Пер. с англ. М.: Мир, 1967. — 406 с.
28. Горский В.Г., Адлер Ю.П., Талалай А.М. Планирование промышленных экспериментов. Москва: Металлургия, 1978. — 112 с.
29. Тернер Д. Вероятность, статистика и исследование операций / Пер. с англ. М.: Статистика, 1976. — 432 с.
30. Рейхман У.Дж. Применение статистики / Пер. с англ. М.: Статистика, 1969. — 296 с.
31. Щедрин Н.И., Кархов А.Н. Математические методы программирования в экономике. М.: Статистика, 1974. — 143 с.
32. Сырцова Е.Д. Математические методы в планировании и управлении строительным производством. М.: Высшая школа, 1972. — 335 с.
33. Бояринов А.И., Кафаров В.В. Методы оптимизации в химической технологии. М.: Химия, 1975. — 576 с.
34. Аллен Р. Математическая экономия / Пер. с англ. М.: Изд. И.Л., 1963. — 607 с.
35. Кетков Ю.Л., Кетков А.Ю., Шульц М.М. MATLAB 7: Программирование, численные методы. СПб.: БХВ-Петербург, 2005. — 737 с.
36. Ануфриев И. Е. Самоучитель MATLAB 5.3/6.x. СПб.: БХВ-Петербург, 2004. — 736 с.
37. Ачеркан Н.С. Статистические методы контроля. М.: Машгиз, 1946. — 137 с.
38. Хальд А. Математическая статистика с техническими приложениями / Пер. с англ. М.: Изд. И.Л., 1956. — 664 с.
39. Сиволуп Н.П. Использование математических методов и средств вычислительной техники для контроля качества резиновых смесей. М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1972. — 97 с.
40. Шторм Р. Теория вероятностей. Математическая статистика. Статистический контроль качества / Пер. с нем. М.: Мир, 1970. — 368 с.

41. Мердок Дж. Контрольные карты / Пер. с англ. М.: Финансы и статистика, 1986. — 152 с.
42. Джонсон Н., Лион Ф. Статистика и планирование эксперимента в технике и науке, методы обработки данных / Пер. с англ. М.: Мир, 1980. — 510 с.
43. Шиндовский Э., Шюрц О. Статистические методы управления качеством / Пер. с нем. М.: Мир, 1976. — 597 с.
44. Льюис К.Д. Методы прогнозирования экономических показателей / Пер. с англ. М.: Финансы и статистика, 1986. — 134 с.

Глава 9. Описание почти стационарной области

Итак, мы вплотную подошли к вершине, и то, что перед нами открывается, называется почти стационарной областью. И здесь уже линейные планы о двух уровнях не годятся.

При изучении почти стационарной области возникает ряд новых сложных проблем. Если мы хотим описать эту часть поверхности отклика полиномом (многочленом) второго порядка, то переменные нужно варьировать уже на трех уровнях, потому что через две точки можно провести бесчисленное множество кривых второго порядка. Возникает сложная задача построения таких планов [1, с. 152–158]. Здесь, прежде всего, нужно выбрать какой-то достаточно разумный критерий оптимальности. Во всяком случае, с самого начала было ясно, что планы полного факторного эксперимента типа 3^n (n — количество факторов) здесь неприемлемы, так как они потребуют слишком большого числа опытов. Если три фактора — $3^3 = 27$, четыре фактора — $3^4 = 81$.

В работе [G.E.P. Box, K.M. Wilson, *On the experimental attainment of optimal conditions*, 1951] была выдвинута идея построения композиционных планов, ядром которых служат линейные ортогональные планы. Предполагается что, попав в почти стационарную область, исследователь сначала ставит опыты, используя линейные планы. Затем, убедившись в том, что гипотеза линейности здесь не проходит, он достраивает линейный план до плана второго порядка; отсюда и само название — *композиционный план*.

Рассмотрим такую ситуацию: имеется два фактора, и на первом этапе мы строим полный факторный эксперимент (ПФЭ) 2^2 .

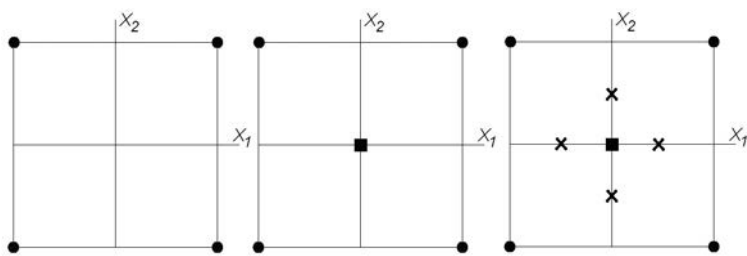


Рис. 9.1. Формирование плана второго порядка

На рис. 9.1, *а*, точки этого плана изображены зачерненными кружками. Далее ставится эксперимент в центре квадрата (рис. 9.1, *б*) для проверки гипотезы адекватности.

9.1. Проблема оптимальности планов

Экспериментальные точки могут быть различно расположены в факторном пространстве, и в зависимости от их расположения и количества экспериментальные планы будут давать разные возможности для экспериментатора. Точки должны быть расположены *оптимально*, однако в планировании эксперимента можно указать более 20 критериев оптимальности. Критерии оптимальности планов обычно предъявляют некоторые требования к свойствам ковариационной (или информационной) матрицы оценок коэффициентов. Некоторые из них, кроме того, учитывают систематическую ошибку модели.

Напомним, что такое эти матрицы. Вспомним ПФЭ 2^2 . Модель, которую можно построить с помощью этого эксперимента имеет вид: $y_p = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2$.

$$Z = \begin{vmatrix} +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 & +1 \end{vmatrix} \quad Z' = \begin{vmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 \end{vmatrix} \quad Z'Z = \begin{vmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{vmatrix}$$

Матрица планирования Транспонированная Информационная

Ковариационная матрица (обратная информационной) будет подобна ей, только вместо цифры «4» будет $\frac{1}{4} = 0,25$, потому что она диагональная.

Все критерии можно разделить на две основные группы. К первой группе относятся критерии, связанные с точностью оценок коэффициентов регрессии, ко второй — критерии и свойства планов, связанные с ошибкой в оценке поверхности отклика. Свойствам оценок параметров можно дать наглядное геометрическое истолкование, связав их со свойствами их эллипсоида рассеяния, форма и объем которого будут полностью зависеть от выбранного плана.

Ниже приведен перечень основных критериев оптимальности и свойств планов [2, с. 18–24; 3, с. 744–748; 4, с. 11–18; 5, с. 37–41; 6, с. 166–170; 7, с. 198–199; 8, с. 38–45]. Рассмотрим критерии *первой группы*, непосредственно связанные со свойствами оценок параметров.

D-оптимальность (Determinant). Этим планам соответствует минимальный на множестве планов определитель ковариационной матрицы. Эллипсоид рассеяния оценок коэффициентов имеет минимальный объем.

A-оптимальность (Average variance of parameters). Этому критерию отвечают планы с минимальной средней дисперсией оценок коэффициентов (наименьший след,

т. е. сумма диагональных элементов ковариационной матрицы). Соответствующий им эллипсоид рассеяния имеет минимальную сумму квадратов длин осей и наименьшую длину диагонали прямоугольника, описанного около этого эллипсоида.

Е-оптимальность. Таким планам соответствует наименьшее максимальное собственное значение (*Eigen value*) ковариационной матрицы. План минимизирует максимальную ось эллипсоида рассеяния, при этом отдельные оценки коэффициентов не будут иметь больших дисперсий и ковариаций.

Минимум суммы квадратов уклонений собственных значений ковариационной матрицы оценок от среднего.

Минимум максимальной дисперсии оценок коэффициентов или геометрический минимум максимальной от проекций осей эллипсоида рассеяния на координатные оси в пространстве параметров.

Минимум суммы относительных ошибок оценок.

Ортогональность плана. План называется ортогональным, если ковариационная матрица плана содержит все нулевые элементы, кроме элементов главной диагонали (диагональная матрица). Для ортогональных планов все оценки коэффициентов независимы: эллипсоид рассеяния ориентирован так, что направление его главных осей совпадает с направлением координатных осей в пространстве коэффициентов.

Среди критериев *второй* группы, связанных с ошибкой оценки поверхности отклика, в первую очередь рассмотрим такие, при использовании которых ориентируются исключительно на случайную ошибку, не принимая во внимание возможную ошибку в выборе модели.

G-оптимальность. Такие планы минимизируют на множестве планов максимальное значение дисперсии оценки поверхности отклика (*General variance*). При этом обеспечивают отсутствие в области планирования точек, в которых точность оценки поверхности отклика слишком низкая.

Минимум средней дисперсии поверхности отклика.

Ротатабельность плана. Ротатабельные планы имеют ковариационную матрицу, инвариантную к вращению координат, позволяют получить одинаковую дисперсию предсказанных значений функции отклика во всех равноудаленных от центра эксперимента точках. Выполнение этого условия делает любое направление от центра эксперимента равнозначным в смысле точности оценки поверхности. Если информационные контуры плана представить как поверхности с равными значениями дисперсии оценки поверхности отклика, то для ротатабельного плана эти поверхности будут представлять собой сферы.

Максимальная точность оценки координат экстремума для построения планов, минимизирующих дисперсию оценки поверхности отклика в области экстремума, необходимо иметь предварительную грубую оценку положения экстремума.

Минимум общего (случайного и систематического) *среднего квадратического отклонения оценки модели от поверхности отклика.* Практически этот критерий сводится к минимизации средней квадратической ошибки при условии выбора заведомо упрощенной модели.

Кроме приведенных, следует отметить еще ряд критериев, выполнение которых крайне желательно, что определяется, в основном, выбранной стратегией эксперимента.

Близость плана к насыщенному, т. е. такому, где число экспериментальных точек равно числу неизвестных коэффициентов.

Композиционность планов — это свойство, позволяющее разделить эксперимент на несколько этапов и постепенно переходить от простых моделей к более сложным, используя предыдущие наблюдения.

Униформность — критерий, требующий постоянства дисперсии оценки модели в некоторой области вокруг центра эксперимента. Это свойство обычно связывают с ротатабельностью.

Возможность разбиения эксперимента на ортогональные блоки для исключения неоднородности в условиях проведения эксперимента и для оценки этого влияния. Это требование эквивалентно возможности ввести дополнительные переменные, характеризующие неоднородность, и оценить коэффициенты регрессии независимо от неконтролируемой неоднородности. Разбиение на блоки широко применяется при использовании полного факторного эксперимента и его регулярных дробных реплик. Это свойство непосредственно связано с композиционностью планов: на ортогональные блоки легко разбиваются композиционные ротатабельные планы второго порядка.

Простота вычислений и наглядность представления результатов. Обработку можно производить вручную по простейшим формулам. Таким требованиям удовлетворяют информационные матрицы блочной структуры с большим числом нулевых элементов.

Возможность преобразования независимых переменных и перехода без дополнительных измерений к более удовлетворительной модели.

Нечувствительность результатов к грубым ошибкам в наблюдениях.

Нечувствительность к возможным ошибкам в фиксировании уровней варьирования независимых переменных.

Перечень критериев оптимальности планов можно было бы *расширить*, включив критерии оптимальности планов дискриминирующих экспериментов (они реализуются при выборе наилучшей из ряда конкурирующих моделей), планов дисперсионного анализа, планирования отсеивающих экспериментов, планирования при прослеживании за неконтролируемым временным дрейфом и др.

В общем случае критерии *диктуются непосредственно постановкой задач*, многообразие которых позволяет утверждать, что количество критериев можно значительно увеличить.

Некоторые критерии противоречат друг другу, поэтому не удастся строить планы, удовлетворяющие всем требованиям, и приходится ограничиваться построением планов, отвечающих отдельным из них. В зависимости от постановки задачи любой из критериев может оказаться заслуживающим внимания. И все же, если это возможно, следует отдавать предпочтение планам, близким к *D*-оптимальным.

Критерии оптимальности планов формируют, по существу, основные положения планирования эксперимента. Эти критерии хотя и носят аксиоматический характер, но не образуют привычных нам математических структур. Здесь мы имеем дело скорее с некоторой мозаикой подчас не согласованных, а иногда и явно противоречащих друг другу высказываний о том, что есть хороший эксперимент. Многообразие планов, порождаемых этой мозаикой высказываний, требует в иных случаях принятия компромиссных решений при выборе оптимального плана.

Выбор оптимального плана — отнюдь не тривиальная задача. Ему предшествует построение математической модели, которая представляет собой компактную и отчетливую формулировку наших, иногда весьма нечетких представлений об изучаемом процессе.

Математическая модель, как уже упоминалось, — это вопрос, задаваемый исследователем природе. А что мы хотим узнать? Прежде всего, числовые значения параметров модели. И вопрос можно задать по-разному.

Покажем расположение точек в факторном пространстве для некоторых планов второго порядка (рис. 9.2) в случае варьирования двух факторов [3, с. 336].

Выбор плана — это всегда *компромиссное решение*, принимаемое в результате диалога. Раньше это был диалог со справочником-каталогом планов, сейчас — диалог с компьютером.

В общем случае модель второго порядка выглядит следующим образом:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i x_i + \sum_{i=1}^n b_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j. \quad (9.1)$$

На рис. 9.3 [3, с. 553–554] показано расположение точек для реализации планов третьего порядка, отвечающих модели:

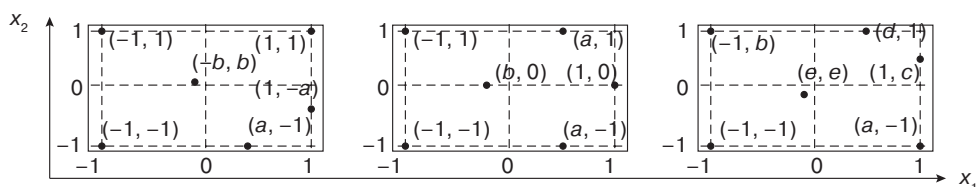
$$y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i x_i + \sum_{i,j=1}^n b_{ij} x_i x_j + \sum_{i,j,l=1}^n x_i x_j x_l. \quad (9.2)$$

В случае двух факторов эта модель трансформируется следующим образом:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + b_{111} x_1^3 + b_{222} x_2^3 + b_{112} x_1^2 x_2 + b_{122} x_1 x_2^2. \quad (9.3)$$

Но это далеко не полный перечень планов. Есть еще такие разновидности, которые предназначены для формирования моделей, в которых отсутствуют эффекты взаимодействия (b_{ij}) или (b_{ij} и b_{ijj}), без кубов (и/или квадратов) переменных, но с тройными взаимодействиями, без линейной составляющей по одной переменной и кубической — по другой.

Постановка задачи обычно содержит информацию относительно области планирования и ограничения на число опытов N , которая расширяет или, наоборот, сужает возможности выбора плана. Из реальных условий эксперимента может следовать также, например, необходимость выбора плана с наименьшим числом уровней по каждому фактору (этому требованию в случае планов второго порядка удовлетворяют трехуровневые планы).



Точный D -оптимальный насыщенный план.

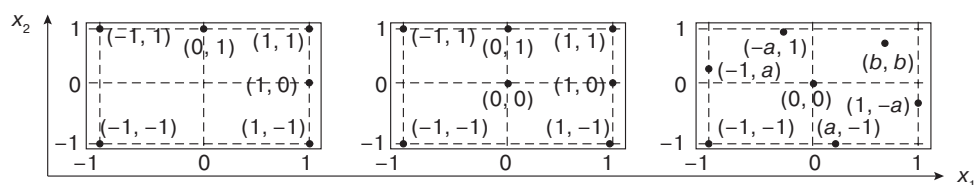
$a = 0,400$; $b = 0,099$.

Точный A -оптимальный насыщенный план.

$a = 0,503$; $b = -0,220$.

Точный E -оптимальный насыщенный план.

$a = 0,986$; $b = 0,974$; $c = 0,477$; $d = 0,473$; $e = -0,107$.

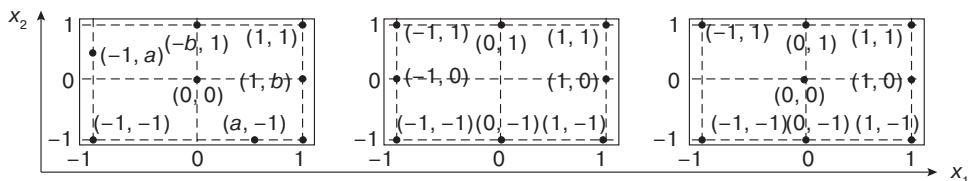


Насыщенный композиционный трехуровневый план.

Композиционный трехуровневый план.

Симплексно-суммируемый композиционный план.

$a = 0,268$; $b = 0,732$.

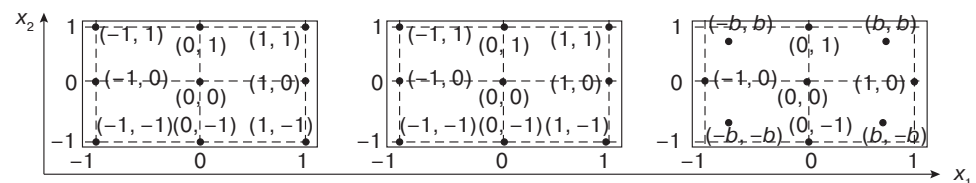


Симплексно-суммируемый композиционный план.

$a = 0,474$; $b = 0,072$.

Композиционный симметричный трехуровневый план.

Композиционный трехуровневый план.

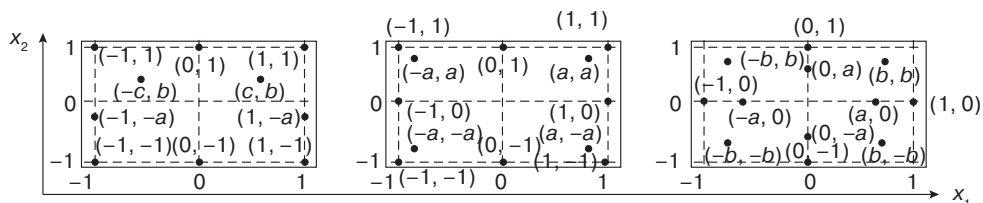


ПФЭ 3^2 ; композиционный симметричный ортогональный трехуровневый план

Композиционный симметричный трехуровневый план. Точки ядра плана дублируются.

Композиционный симметричный ротatableльный равномерный план. В центре 5 точек. $b = 0,707$.

Рис. 9.2. Двухфакторные оптимальные планы второго порядка

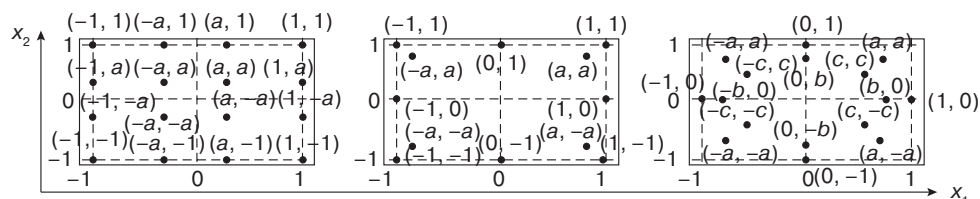


Точный D -оптимальный насыщенный план.

$a = 0,300$; $b = 0,500$; $c = 0,600$.

Композиционный, симметричный, локально-ортogonalный. $a = 0,815$.

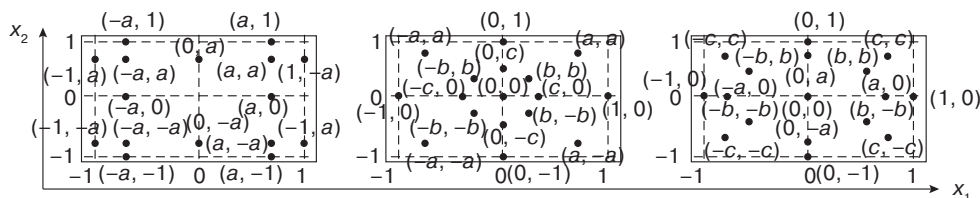
G -оптимальный симметричный план. $a = 0,602$; $b = 0,707$.



Симметричный ПФЭ 4^2 . $a = 1/3$.

Композиционный, симметричный, локально-ортogonalный. Звездные точки дублируются. $a = 0,706$.

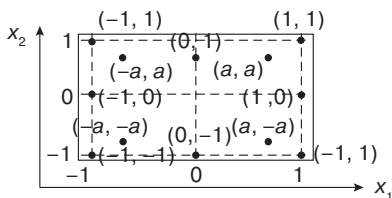
G -оптимальный ротативный, композиционный, симметричный. $a = 0,707$; $b = 0,733$; $c = 0,518$.



Симметричный ортogonalный. Звездные точки дублируются. $a = 0,707$.

Ротативный, композиционный, симметричный. В центре 4 точки. $a = 0,707$; $b = 0,354$; $c = 0,5$.

Ротативный, композиционный, симметричный. В центре 4 точки. $a = 2/3$; $b = 0,471$; $c = 0,707$.



Композиционный, симметричный, локально-ортogonalный. Звездные точки повторяются 3 раза. $a = 0,630$.

Рис. 9.3. Двухфакторные оптимальные планы третьего порядка

Ограничив выбор требованиями конкретного эксперимента, можно обратиться к рассмотрению эффективности подходящих планов по разным статистическим критериям.

Для каждой размерности в отдельности имеются планы с высокой эффективностью по всем критериям.

Если условия эксперимента позволяют не налагать слишком жестких ограничений на число опытов, естественно останавливаться на планах симметричных, так как они позволяют параметры одного и того же типа оценить с одинаковой точностью и, кроме того, большинство параметров оценить независимо.

Рассмотренные выше планы — так называемые планы на кубе, а есть еще планы на шаре. В качестве сравнения можно привести ПФЭ 4^2 на кубе (показанный выше) и такой же ПФЭ 4^2 , но на шаре (рис. 9.4).

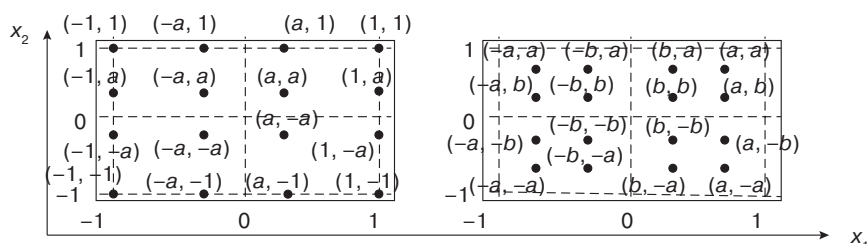


Рис. 9.4. Сопоставление полного факторного эксперимента ПФЭ 4^2 на кубе (слева) и на шаре (справа)

В случае построения плана на шаре приняты следующие координаты: $a = 1/\sqrt{2}$; $b = 1/(3\sqrt{2})$.

Выбор конкретной модели третьего порядка зависит от уровня априорной информации об изучаемом признаке [3, с. 682–684].

Если экспериментатор находится на начальной стадии изучения процесса и теоретические и экспериментальные данные в литературе отсутствуют, то естественно взять в качестве модели полный полином третьего порядка.

Если же результаты предварительных исследований или литературные данные указывают на то, что по каждой из переменных зависимость y от x линейная или квадратическая (но приближение полиномом второго порядка оказалось неадекватным), то следует остановиться на модели без кубов переменных.

Если имеются основания полагать, что существует несколько линейных комбинаций факторов, на которых процесс претерпевает какие-то коренные изменения, то в этом случае бессмысленно пользоваться моделью без членов $x_i x_j^2$. Такой априорной информации не будет противоречить модель без кубов переменных.

Если предполагается наличие у функции отклика точки локального максимума и локального минимума, то неразумно брать модель, где отсутствуют кубы всех переменных. Если предполагается отсутствие взаимодействия между факторами, то следует выбрать модель главных эффектов.

Для проведения исследований в случае двух факторов при получении моделей третьего порядка рекомендуется [3, с. 684] использовать ПФЭ 4^2 , точный D -оптимальный насыщенный план или композиционный, симметричный, локально-ортогональный план.

9.2. Анализ некоторых разновидностей планов второго порядка

При анализе почти стационарной области в резиновой отрасли поначалу активно использовались ортогональные планы, затем им на смену пришли планы ротатабельные и в некоторой степени планы Хартли. На описании этих планов мы и остановимся, потому что они достаточно просты для понимания.

Ортогональные планы второго порядка являются композиционными, предложены 60 лет назад [G.E.P. Box, K.B. Wilson, *On the experimental attainment of optimum conditions*]. Общее количество точек плана N определяется соотношением:

$$N = n_c + n_\alpha + n_0, \quad (9.4)$$

где n_c — количество точек в ядре плана; n_α — количество «звездных» точек; n_0 — количество точек в центре плана.

Как уже отмечалось, свойства плана зависят от величины звездного плеча α и количества экспериментов в центре плана.

Формулы для расчета величины звездного плеча ортогональных планов второго порядка в зависимости от числа факторов k и количества экспериментов в центре плана n_0 имеют вид:

$$\alpha^4 + 2^k \alpha^2 - 2^{k-1} (k + 0,5n_0) = 0 \quad (9.5)$$

и для полуреплики ($k > 4$)

$$\alpha^4 + 2^{k-1} \alpha^2 - 2^{k-2} (k + 0,5n_0) = 0. \quad (9.6)$$

Вычисления, произведенные по этим формулам, сведены в табл. 9.1 [7, с. 184].

Таблица 9.1. Значения α^2 для различного числа факторов и количества опытов в центре плана

n_0	k				n_0	k			
	2	3	4	5		2	3	4	5
1	1,000	1,476	2,000	2,39	6	1,742	2,325	2,950	3,31
2	1,160	1,650	2,164	2,58	7	1,873	2,481	3,140	3,49
3	1,317	1,831	2,390	2,77	8	2,000	2,633	3,310	3,66
4	1,475	2,000	2,580	2,95	9	2,113	2,782	3,490	3,83
5	1,606	2,164	2,770	3,14	10	2,243	2,928	3,660	4,00

На простейшем примере ($n_0 = 1, k = 2$) покажем процедуру формирования ортогонального плана.

Модель:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{12}x_1x_2. \quad (9.7)$$

Сформируем план второго порядка при $n_0 = 1, k = 2$ и $\alpha = 1$ (табл. 9.2).

Таблица 9.2. Ортогональный план второго порядка

№	x_0	x_1	x_2	x_1^2	x_2^2	x_1x_2	$x_1^{2'}$	$x_2^{2'}$	
1	+1	-1	-1	+1	+1	+1	1/3	1/3	Ядро плана, ПФЭ $n_c = 2^2 = 4$
2	+1	+1	-1	+1	+1	-1	1/3	1/3	
3	+1	-1	+1	+1	+1	-1	1/3	1/3	
4	+1	+1	+1	+1	+1	+1	1/3	1/3	
5	+1	-1	0	+1	0	0	1/3	-2/3	«Звездные точки» $n_\alpha = 2 \cdot 2 = 4$
6	+1	+1	0	+1	0	0	1/3	-2/3	
7	+1	0	-1	0	+1	0	-2/3	1/3	
8	+1	0	+1	0	+1	0	-2/3	1/3	
9	+1	0	0	0	0	0	-2/3	-2/3	Центральные точки $n_0 = 1$
Σ	9	0	0	6	6	0	0	0	

Сумма элементов каждого из квадратичных столбцов в табл. 9.2 равна 6, а чтобы соблюдалось условие ортогональности, требуется, чтобы эта сумма была равна нулю. Для того чтобы осуществить это превращение, из каждого элемента квадратичного столбца вычитается отношение этой суммы (6) к общему числу точек плана ($N = 9$), т. е. 2/3. Ортогональные столбцы записаны в двух последних столбцах табл. 9.2.

Аналитически эта процедура записывается следующим образом:

$$x_i^{2'} = x_i^2 - \bar{x}_i^2 = x_i^2 - \left(\sum_{j=1}^N x_{ij}^2 \right) / N. \quad (9.8)$$

Благодаря ортогональности матрицы планирования все коэффициенты определяются независимо друг от друга по формуле

$$b_i = \left(\sum_{j=1}^N x_{ij} y_j \right) / \left(\sum_{j=1}^N x_{ij}^2 \right). \quad (9.9)$$

После проведения эксперимента в соответствии с тем или иным планом и вычисления параметров модели (9.7) приступают к оценке *качества модели*.

Эта оценка включает в себя несколько процедур. Прежде всего, проверяют *значимость коэффициентов*. Для этого вычисляют отношение соответствующего параметра модели b к среднему квадратическому отклонению при его определении S_b . Это отношение распределено по Стьюденту:

$$t = |b_i|/S_b. \quad (9.10)$$

Дисперсии коэффициентов с учетом знания дисперсии воспроизводимости равны:

$$S_{b_i}^2 = P \cdot S_{\text{воспр}}^2 = S_{\text{воспр}}^2 / \left(\sum_{j=1}^N x_{ij}^2 \right). \quad (9.11)$$

где P — соответствующий диагональный элемент ковариационной матрицы $(Z'Z)^{-1}$; $S_{\text{воспр}}^2$ — дисперсия воспроизводимости, рассчитываемая по повторным наблюдениям в одной или нескольких точках. Если критерий t , найденный по формуле (9.10), оказывается больше табличного, взятого при числе степеней свободы $v = m - 1$ (m — количество повторных наблюдений), то влияние соответствующего фактора следует принять значимым при выбранном уровне значимости. В противном случае коэффициент может быть исключен из модели, если он вычислялся независимо от остальных.

Следующим этапом является проверка *содержательности модели*. Проверка содержательности модели выполняется с использованием критерия Фишера. Для этого (в случае ненасыщенных планов, в которых число точек плана N больше количества коэффициентов в модели p , т. е. $v = N - p > 0$) вычисляется остаточная дисперсия:

$$S_R^2 = \Sigma(y_u - y_{u_{\text{расч}}})^2 / (N - p). \quad (9.12)$$

Она характеризует различия между экспериментальными значениями отклика y_u и расчетными значениями $y_{u_{\text{расч}}}$. Кроме того, находится также дисперсия относительно среднего значения отклика (остаточная дисперсия для уравнения нулевого порядка):

$$S_{R0}^2 = \Sigma(y_u - y_{u_{\text{ср}}})^2 / (N - 1); \quad (9.13)$$

$$y_{u_{\text{ср}}} = \Sigma y_u / N. \quad (9.14)$$

Модель можно считать содержательной, если S_{R0}^2 значительно (не менее чем в 3–5 раз) превосходит величину остаточной дисперсии S_R^2 .

Проверку *адекватности модели* (т. е. соответствия между экспериментальными и расчетными значениями отклика) также можно осуществить по критерию Фишера:

$$F = S_R^2 / S_{\text{воспр}}^2 = (\Sigma(y_u - y_{u_{\text{расч}}})^2 / (N - p)) / (\Sigma(y_{0i} - y_{0_{\text{ср}}})^2 / (m - 1)). \quad (9.15)$$

Рассчитанное значение критерия Фишера следует сравнить с табличным при числе степеней свободы $v_1 = N - p$ и $v_2 = m - 1$ (уровень значимости $\alpha = 0,05$). Условие адекватности модели $F_{\text{расч}} < F_{\text{табл}}$.

Другая возможность оценки адекватности модели связана с вычислением коэффициента корреляции между экспериментальными и рассчитанными значениями отклика.

При использовании планов второго порядка иногда оказывается, что уравнение регрессии адекватно описывает опытные данные, но неудовлетворительно характеризует внутреннюю часть рассматриваемой области факторного пространства (из-за обедненности ее экспериментальными измерениями). Поэтому использованные для оценки дисперсии воспроизводимости опыты в центре плана целесообразно сопоставить со свободным членом b_0 уравнения регрессии. Это сравнение проводится по критерию Стьюдента:

$$t = |b_0 - y_{0cp}| / (S^2_{восп}/m)^{0.5}. \quad (9.16)$$

Рассчитанное значение критерия Стьюдента следует сравнить с табличным при числе степеней свободы $v = m - 1$ (уровень значимости $\alpha = 0,05$). Предсказание в центре плана следует считать удовлетворительным при условии $t_{расч} < t_{табл}$.

Остаточная дисперсия является усредненной оценкой точности математической модели. Исследователя могут интересовать не только усредненные характеристики, но и отклонения (остатки) в отдельных точках. *Анализ остатков* осуществляется визуально посредством нанесения их на график. Если модель адекватно описывает опытные данные и не содержит никаких нарушений, то остатки случайно распределены в пределах доверительного интервала. Нарушения распределения остатков могут быть сопряжены с наличием выбросов, т. е. отдельных остатков, превосходящих доверительный интервал по абсолютной величине; такие точки следует еще раз экспериментально проверить. Другое нарушение распределения остатков может быть связано с изменениями значений отклика в процессе эксперимента при длительных измерениях (временной дрейф).

Подробное освещение ортогональных планов второго порядка дано в [7, с. 184–189; 9, с. 29–31; 10, с. 58–62; 11, с. 256–261; 12, с. 118–123; 13, с. 65–67; 14, с. 77–82; 15, с. 141–152; 16, с. 100–111, 141–191; 17, с. 37–47].

Полное уравнение второго порядка является моделью, которая вряд ли может быть получена на основе знания физики явления [18, с. 44–49]. По утверждению Бокса и Уилсона (1951 г.), такое уравнение эквивалентно применяемому в теории аппроксимации разложению истинной функции в ряд Тейлора с членами второго порядка в окрестности некоторой точки внутри интересующей области. Может оказаться, что истинная физическая модель нелинейна по параметрам и аппроксимируется рядом, коэффициенты которого являются функциями истинных параметров.

Существует, по меньшей мере, один, а возможно, два серьезных недостатка при использовании ортогонального плана ПФЭ 3^2 для оценки коэффициентов полного квадратичного уравнения. Оба они были замечены Боксом, Иелом и Хантером (1954–57 гг.), которые предложили меры по их устранению. Наиболее серьезный из них может быть пояснен с помощью трех искусственных планов типа 3^2 ,

представленных на рис. 9.5. Цифры в ячейках указывают значения откликов. Во всех трех случаях члены $b_{12}x_1x_2$ одинаковы, а отклики в центрах существенно различны. Очевидно, что на общую форму и ориентацию поверхностей отклика большое влияние оказывает центральная точка. Это в значительной мере предопределяет, что если какая-либо точка может быть дублирована, то ею должна быть центральная. *Желательно ее дублировать три-четыре раза.*

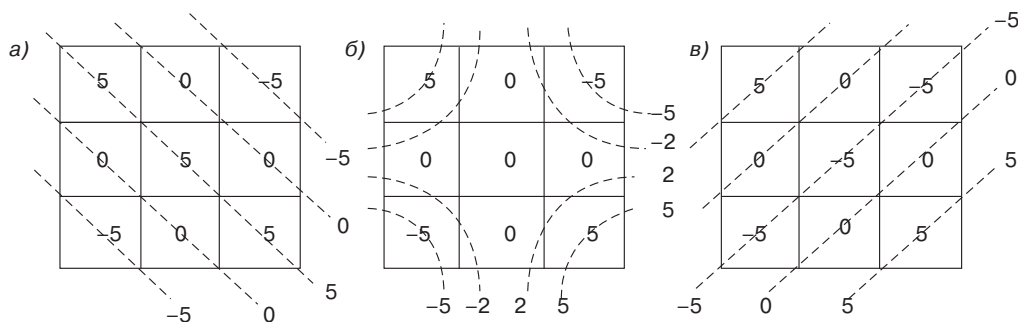


Рис. 9.5. ПФЭ 3^2 , характер изолиний

Анализ показывает, что рис. 9.5, а соответствует большим отрицательным значениям b_{11} и b_{22} , а рис. 9.5, б — большим положительным значениям тех же коэффициентов. Для рис. 9.5, в, оба эти коэффициента равны нулю.

Вторым недостатком плана 3^2 в случае его использования для построения поверхности отклика второго порядка является отсутствие радиальной симметрии относительно центра. Контурные равных дисперсий оценки отклика вытянуты в диагональных направлениях. Информационные контуры уже не являются концентрическими окружностями относительно центра. Этот недостаток считается очень существенным в планах с тремя и более факторами, а для плана 3^2 он не важен.

Ротатабельные планы второго порядка.

В 1957 г. было предложено ротатабельное планирование второго порядка [G.E.P. Box, J.S. Hunter, *Multifactor experimental designs for exploring response surfaces*].

При ротатабельном планировании второго порядка дорабатывают план ПФЭ или его регулярную дробную реплику (обычно полуреплику) до плана второго порядка, добавляя к ядру определенное количество «звездных» и нулевых точек [7, с. 189–198; 9, с. 32–37; 10, с. 62–65; 12, с. 123–133; 14, с. 82–94; 15, с. 152–159; 17, с. 48–60; 19, с. 74–80; 20, с. 56–62; 21, с. 14–18; 22, с. 22–33; 23, с. 336–339; 24, с. 5–12]. Матрицу ПФЭ рекомендуется использовать в качестве ядра ротатабельного плана второго порядка при числе факторов $k < 5$, а полуреплику при $k \geq 5$. «Звездные» точки строят на осях координат, определяя величину «звездного» плеча α (расстояние от нулевой до «звездной» точки по оси координат).

Главное свойство ротатабельных планов — независимость дисперсий предсказанного значения отклика y от вращения координат. При этом сами дисперсии равны на равных расстояниях от центра плана.

«Звездное» плечо α выбирают из условия инвариантности плана к вращению. Значение «звездного» плеча можно вычислить для ядра, содержащего полный факторный эксперимент, из соотношения:

$$\alpha = 2^{k/4}, \quad (9.17)$$

а для ядра, содержащего полуреплику, из:

$$\alpha = 2^{(k-1)/4}. \quad (9.18)$$

После выбора α возникает вопрос, как выбрать число нулевых точек. Если раньше нулевые точки использовались для оценки дисперсии воспроизводимости и для проверки адекватности, то теперь на них ложится еще одна функция. Экспериментатор стремится к тому, чтобы внутри области экспериментирования дисперсия предсказанного значения отклика y была постоянной, т. е. не зависела от расстояния до центра плана. Оказывается, что это стремление можно удовлетворить, если выбрать подходящее число нулевых точек. При этом увеличивается количество информации в центре плана в области, в которой ее мало, и информационная матрица $Z' \cdot Z$ (Z — матрица планирования) становится невырожденной (определитель не равен нулю). Планирование, удовлетворяющее этим требованиям, называется равномерным планированием.

Постоянство информации (равномерность) обеспечивается, когда константа λ_4 равна:

$$\lambda_4 = (k + 3 + \sqrt{9k^2 + 14k - 7}) / (4(k + 2)) = Nk / ((k + 2)(N - n_0)). \quad (9.19)$$

Отсюда можно определить количество экспериментов n_0 в центре ротатабельного плана (табл. 9.3).

Таблица 9.3. Параметры для планирования [12, с. 126]

k	2	3	4	5	6	7	8
λ_4	0,7844	0,8385	0,8704	0,8918	0,9070	0,9184	0,9274
n_0	4,5504	5,5511	7,3344	10,2836	14,7000	20,7908	28,4776

Таблица 9.4. Характеристики ротатабельных планов

k	n_c	n_α	n_0	N	α	k	n_c	n_α	n_0	N	α
2	4	4	5	13	1,4142	5	32	10	10	52	2,3784
3	8	6	6	20	1,6818	5*	16	10	6	32	2,0000
4	16	8	7	31	2,0000	6*	32	12	9	53	2,3784

k — количество факторов; n_c — количество экспериментов в вершинах квадрата, куба, гиперкуба (ядро плана); n_α — количество точек на осях координат («звездные» точки); n_0 — количество точек в центре плана; N — общее количество точек плана; α — величина звездного плеча; * — полуреплика.

Количество экспериментов, которое необходимо реализовать, показано в табл. 9.4.

Сопоставим между собой расположение точек для двух факторов в ортогональном плане (ПФЭ 3^2) и в ротatableм плане. На рис. 9.6, а показано расположение точек в центральном ортогональном композиционном плане ПФЭ 3^2 . Величина звездного плеча в этом случае равна 1. На рис 9.6, б мы видим расположение точек в ротatableм плане; звездное плечо $\alpha = 2^{k/4} = 2^{2/4} = 1,4142$. Однако для сопоставления планов целесообразно обеспечить одинаковый объем факторного пространства. В случае двух факторов нагляднее всего эту процедуру представить следующим образом: берем точки ядра ортогонального плана и сдвигаем их по диагонали в сторону центра так, чтобы расстояние от этих точек до центра составляло 1, или чтобы расстояние от сдвинутых точек до осей координат было равно $2^{0.5}/2 = 0,7071$. Эта ситуация изображена на рис. 9.6, в. Естественно, в центре плана надо добавить еще 4 точки.

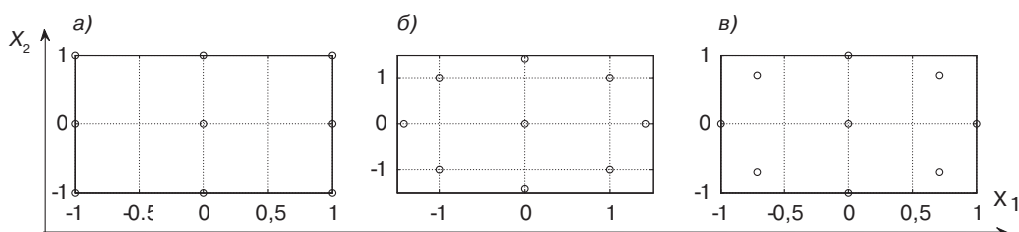


Рис. 9.6. Формирование ротatableм плана

Подчеркиваем, в этом случае точки ядра плана и звездные точки лежат на одной окружности. И пусть вас не смущает разный масштаб по осям координат на этом рисунке.

На рис. 9.7 слева показаны линии равной информации для ортогонального плана второго порядка для двух факторов (ПФЭ 3^2) [7, с. 190; 14, с. 84]. Чтобы эта информация была равномерно «размазана» по сферам, нужно эту «морскую звезду» превратить в окружность. А как это осуществить? Сначала надо понять, почему тут получилось такое сложное семейство кривых. Потому, что в углах квадрата расположены точки ядра плана. Если мы сдвинем их по диагонали в сторону центра на нужное расстояние, то получим окружности.

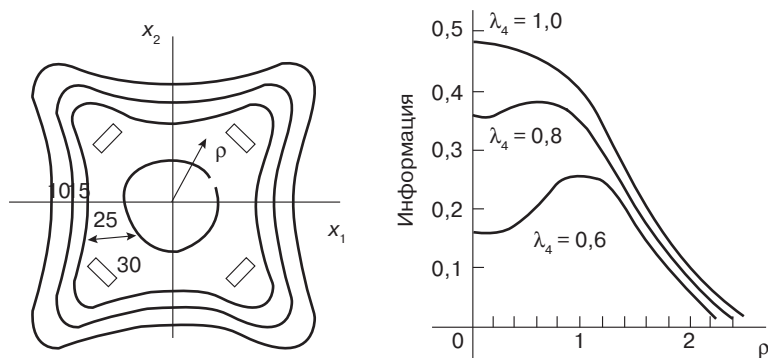


Рис. 9.7. Информационные профили

На этом рисунке справа показаны информационные профили для ротатабельного плана при $k = 2$ [7, с. 190; 10, с. 63]. Под информацией здесь понимается величина, обратная остаточной дисперсии (дисперсия, характеризующая рассеяние опытных данных относительно уравнения регрессии).

Аналогичный вид имеют кривые для любого числа факторов. Выбрав λ_4 немного меньше единицы, можно построить план, для которого информация в области факторного пространства, ограниченного радиусом, равным 0,5–0,8, постоянна. Такие планы и получили название *ротатабельных униформ-планов*.

Дальнейшие процедуры во многом аналогичны реализации ортогонального плана.

Рассмотрим некоторые некомпозиционные планы второго порядка для наиболее распространенных значений k , использование которых может оказаться предпочтительней, чем композиционных в случаях, когда последовательное планирование не проводится, а сразу ставится задача получения полинома второго порядка.

Для $k = 2$ в таких случаях полезными являются планы типа шестиугольника (рис. 9.8) с центральными точками [25, с. 79–88, 103]. Они являются наименьшими ротатабельными планами второго порядка, более экономными по числу опытов, чем соответствующие ротатабельные центральные композиционные планы.

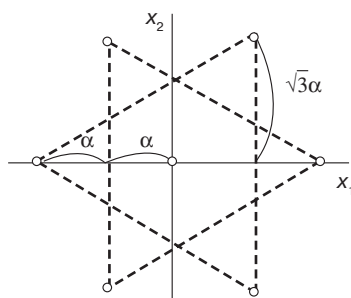


Рис. 9.8. Наименьший ротатабельный план второго порядка

Особенно ценными свойствами обладает план, образованный вершинами шестиугольника с $n_0 \geq 1$. Этот план, относящийся к классу симплексно-суммируемых, легко разбить на два блока типа: три вершины треугольника + $n_0/2$ центральных точек. Достоинство плана состоит также в том, что для фактора x_1 он требует пяти уровней, а для x_2 всего лишь трех уровней варьирования. Последнее очень важно, так как на практике число уровней варьирования часто ограничено. Если принять $2a = 1$ и значит $a = 0,5$ и $\sqrt{3}a = 0,866$, то соответствующие уровни кодированных переменных будут: $(-1; -0,5; 0; +0,5; +1)$ для x_1 и $(-0,866; 0; +0,866)$ для x_2 .

Указанный план является ротатабельным и легко допускает разбиение на ортогональные блоки при проведении эксперимента в условиях дрейфа.

Этим условиям удовлетворяет и план, построенный в виде правильного пятиугольника.

Для исследователей значительный интерес представляют *планы Хартли* второго порядка, предложенные в 1959 г. [H.O. Hartley, *Smallest composite designs for quadratic*

response surface]. Наряду с другими положительными характеристиками, они обладают минимальным числом экспериментальных точек. Недостатком планов Хартли является невозможность вычисления трехфакторных, четырехфакторных и других эффектов взаимодействия, т. е. получения уравнений, более сложных, чем полное уравнение второй степени.

Планы Хартли строят на основе дробных реплик от ПФЭ [10, с. 66–67; 25, с. 98–102]. При выборе плана ДФЭ необходимым условием является отсутствие соотношений $x_i x_j = x_r x_p$, т. е. двойные эффекты не должны быть смешаны один с другим. Двойные эффекты не смешаны, если в качестве определяющего контраста использовано произведение нечетного числа факторов. Нарушение этого условия приводит к невозможности получения полного квадратного уравнения и наличию нескольких вариантов математических моделей.

Планы Хартли можно сделать почти ортогональными, если, как и в случае ортогональных центральных композиционных планов, провести замену переменной (соотношение 9.8).

Сравнение планов второго порядка по числу опытов дано в табл. 9.5.

Таблица 9.5. Сопоставление планов по числу точек

k , число факторов	p , число коэффициентов	N , число опытов		
		ОЦКП	РЦКП	План Хартли
2	6	9	13	7
3	10	15	20	11
4	15	25	31	17
5	21	27	32	27
6	28	45	53	29
7	36	79	92	47

ОЦКП — ортогональный центральный композиционный план; РЦКП — ротatableльный центральный композиционный план.

Возможное расположение точек в планах Хартли в сравнении с ортогональным центральным композиционным планом дано на рис. 9.9. В ядре плана исключаются точки $(-1, +1)$ и $(+1, -1)$ или $(-1, -1)$ и $(+1, +1)$.

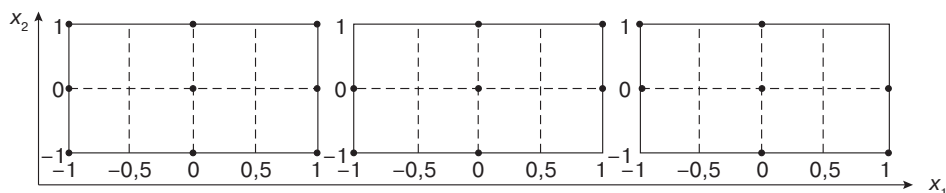


Рис. 9.9. Сопоставление ортогональных планов второго порядка

9.3. Применение современных программных продуктов для анализа почти стационарной области

Целесообразно проанализировать эту проблему на конкретных примерах.

Рассмотрим свойства вулканизатов на основе бутадиен-стирольного каучука *SBR* 1712, наполненных техническим углеродом N 330 (*HAF*). Варьировалось два фактора: \tilde{x}_1 — продолжительность вулканизации при 150 °С, мин и \tilde{x}_2 — содержание технического углерода, масс. ч. Исследовались следующие отклики: y_1 — условное напряжение при удлинении 100%, МПа; y_2 — условное напряжение при удлинении 200%, МПа; y_3 — условное напряжение при удлинении 300%, МПа; y_4 — условное напряжение при удлинении 400%, МПа; y_5 — условная прочность при растяжении, МПа; y_6 — относительное удлинение при разрыве, %; y_7 — сопротивление раздиру, кН/м; y_8 — твердость по Шору А;

Ниже представлены значения факторов и откликов, подготовленные для ввода в редакторы соответствующих программ. Данные заимствованы из выставочного каталога.

```
x1=[15;30;45;60;90;15;30;45;60;90;15;30;45;60;90];
x2=[50;50;50;50;50;60;60;60;60;60;70;70;70;70;70];
y1=[9;13;13;13;14;12;15;15;16;17;9;15;20;21;23];R1=R1/10;
y2=[20;34;35;36;35;27;45;47;45;49;33;60;65;69;71];R2=R2/10;
y3=[45;70;73;74;73;58;90;93;91;96;75;118;125;132;134];R3=R3/10;
y4=[75;110;113;118;113;96;142;144;144;150;114;172;179;192;193];
R4=R4/10;
y5=[240;246;250;259;255;226;251;253;248;250;207;227;240;236;240];
R5=R5/10;
y6=[775;640;655;655;655;700;605;595;580;615;685;520;540;495;
505];
y7=[56;51;46;51;51;73;59;54;54;56;77;62;63;57;57];
y8=[52;55;55;56;55;56;59;59;59;59;58;63;62;64;64];
```

С использованием программы *Table Curve 3D* по представленным выше данным построена поверхность отклика для условного напряжения при удлинении 100% с использованием сетки, сформированной ломаными линиями (рис. 9.10). Этот рисунок дает общее представление о характере изучаемой поверхности отклика. По нему можно качественно судить о влиянии факторов на изучаемое свойство.

Затем было получено семейство моделей (536 уравнений). Ранжирование моделей осуществлялось по коэффициенту детерминации. Поверхность отклика, соответствующая лучшему из полученных уравнений, изображена на рис. 9.11. Уравнение имеет вид:

$$\text{Ранг 1, уравнение 312 } z = a + b/x + cy + d/x^2 + ey^2 + \\ + fy/x + g/x^3 + hy^3 + iy^2/x + jy/x^2. \quad (9.20)$$

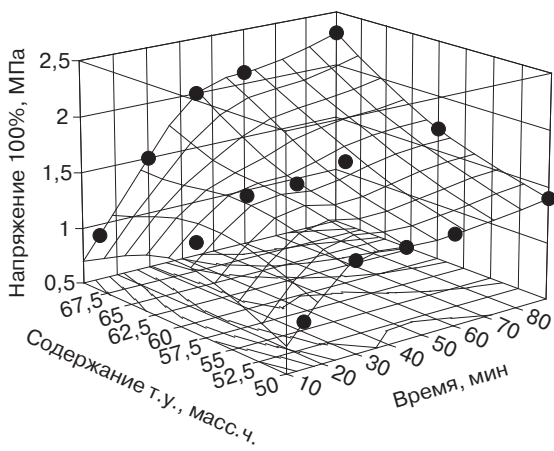


Рис. 9.10. Экспериментальная сетка, сформированная ломаными линиями без аппроксимации уравнением

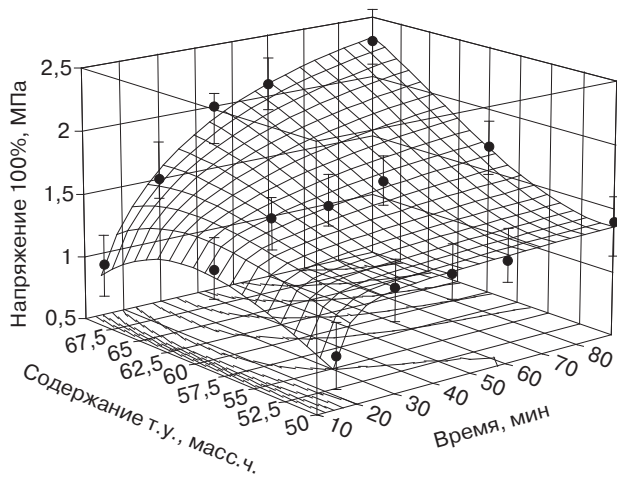


Рис. 9.11. Поверхность отклика, отвечающая наибольшему значению коэффициента детерминации

Критерии качества модели, ее параметры, результаты дисперсионного анализа и данные о соотношении экспериментальных и рассчитанных значений напряжения при удлинении 100% сведены в табл. 9.6–9.9.

Таблица 9.6. Критерии качества модели

R^2	$R^2_{\text{СК}}$	S_r	F
0,9893531575	0,9627360513	0,0690636332	51,624755815

Таблица 9.7. Параметры модели

Параметр	Ошибка	<i>t</i> -критерий	95% доверительные пределы	
$a = 31,0415378$	$2,14054e+07$	$1,45017e-06$	$-5,5024e+07$	$5,50244e+07$
$b = -190,166769$	$82,03607919$	$-2,31808701$	$-401,047225$	$20,71368634$
$c = -1,47072779$	$1,09066e+06$	$-1,3485e-06$	$-2,8036e+06$	$2,80362e+06$
$d = -671,498146$	$1000,180857$	$-0,67137672$	$-3242,5449$	$1899,548604$
$e = 0,023352912$	$18347,48488$	$1,27281e-06$	$-47163,6881$	$47163,73483$
$f = 7,862682323$	$2,383298656$	$3,29907555$	$1,736218075$	$13,98914657$
$g = -3934,55774$	$8075,842288$	$-0,48720091$	$-24694,1713$	$16825,0558$
$h = -0,0001155$	$101,9304716$	$-1,1331e-06$	$-262,020735$	$262,0205038$
$i = -0,08544304$	$0,019151774$	$-4,46136406$	$-0,13467424$	$-0,03621183$
$j = 19,39340102$	$7,730458007$	$2,508700131$	$-0,47837397$	$39,265176$

Таблица 9.8. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	$SSR = 2,2161511$	$m - 1 = 9$	$MSR = 0,24623901$	$F = 51,6248$
Ошибка	$SSE = 0,0238489$	$n - m = 5$	$MSE = 0,00476979$	
Сумма	$SSM = 2,24$	$n - 1 = 14$		

Таблица 9.9. Экспериментальные и рассчитанные значения отклика

№	x	y	z	z_p	$z - z_p$	$z - z_p, \%$	95% доверител. пределы	
1	90	70	2,3	2,3339383	$-0,033938$	$-1,47558$	2,1926619	2,4752147
2	90	60	1,7	1,6872667	0,0127333	0,7490153	1,5667975	1,807736
3	90	50	1,4	1,36338	0,03662	2,6157173	1,2105633	1,5161966
4	60	70	2,1	2,1022687	$-0,002269$	$-0,108034$	1,9888239	2,2157135
5	60	60	1,6	1,605942	$-0,005942$	$-0,371373$	1,5255865	1,6862974
6	60	50	1,3	1,3374633	$-0,037463$	$-2,881793$	1,231929	1,4429976
7	45	70	2,0	1,9008036	0,0991964	4,9598224	1,7994462	2,0021609

Таблица 9.9, окончание

№	x	y	z	z_p	$z - z_p$	$z - z_p, \%$	95% доверител. пределы	
8	45	60	1,5	1,5428504	-0,04285	-2,856693	1,4456866	1,6400142
9	45	50	1,3	1,3178086	-0,017809	-1,369894	1,2039127	1,4317045
10	30	70	1,5	1,572295	-0,072295	-4,819664	1,4304855	1,7141044
11	30	60	1,5	1,4551753	0,0448247	2,9883134	1,3525934	1,5577572
12	30	50	1,3	1,2810936	0,0189064	1,4543377	1,1327023	1,4294849
13	15	70	0,9	0,8906944	0,0093056	1,033952	0,716214	1,0651749
14	15	60	1,2	1,2087656	-0,008766	-0,730467	1,0525445	1,3649868
15	15	50	0,9	0,9002545	-0,000254	-0,028278	0,7236061	1,0769029

Напомним некоторые соотношения.

$$SSE = \sum_{i=1}^n (Y_i - Y_{ip})^2; SSM = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2; R^2 = 1 - \frac{SSE}{SSM}; R_{ск}^2 = 1 - \frac{SSE/(f-1)}{SSM/(n-1)};$$

$$MSE = SSE/f; S = \sqrt{MSE}; SSR = SSM - SSE; MSR = SSR/(m-1); F = MSR/MSE.$$

SSE — сумма квадратов, связанная с ошибкой; SSM — сумма квадратов относительно среднего (общая сумма квадратов); m — количество параметров модели; f — число степеней свободы; R^2 — коэффициент детерминации; $R_{ск}^2$ — скорректированный коэффициент детерминации; MSE — средний квадрат ошибки; S — стандартная ошибка; SSR — сумма квадратов, связанная с влиянием фактора; MSR — средний квадрат фактора; F — критерий Фишера.

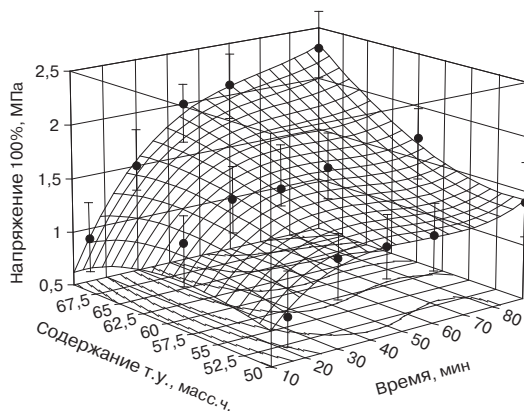


Рис. 9.12. Поверхность отклика, отвечающая модели 310 по каталогу программы ТС 3D

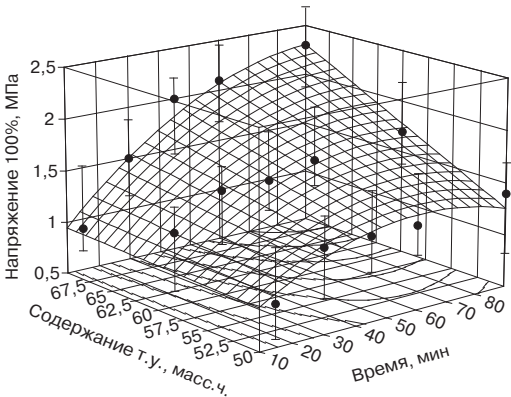


Рис. 9.13. Поверхность отклика, отвечающая модели 301 по каталогу программы TC 3D

Теперь рассмотрим модель третьего порядка. Соответствующая ей поверхность отклика представлена на рис. 9.12. Уравнение имеет вид:

Ранг 8, уравнение 310 $z = a + bx + cy + dx^2 + ey^2 + fxy + gx^3 + hy^3 + ixy^2 + jx^2y.$ (9.21)

Критерии качества модели, ее параметры, результаты дисперсионного анализа и данные о соотношении экспериментальных и рассчитанных значений напряжения при удлинении 100% даны в табл. 9.10–9.13.

Таблица 9.10. Критерии качества модели

R^2	$R^2_{СК}$	S_f	F
0,9791168447	0,9269089564	0,0967246276	26,04749112

Таблица 9.11. Параметры модели

Параметр	Ошибка	t-критерий	95% доверительные пределы	
$a = 0,805153299$	2,98766e+07	2,69493e-08	-7,68e+07	7,68004e+07
$b = 0,161020587$	0,081733091	1,970078276	-0,04908101	0,371122187
$c = -0,13799444$	1,52229e+06	-9,0649e-08	-3,9132e+06	3,91316e+06
$d = -0,00039314$	0,000511278	-0,76893595	-0,00170742	0,000921142
$e = 0,004636719$	25608,55474	1,81061e-07	-65828,8812	65828,89045
$f = -0,00503388$	0,002523214	-1,99502701	-0,01152001	0,001452248
$g = 5,3265e-06$	2,63806e-06	2,01909906	-1,4548e-06	1,21078e-05
$h = -4,0775e-05$	142,2697485	-2,866e-07	-365,716073	365,7159915
$i = 5,63063e-05$	2,05287e-05	2,742814644	3,53571e-06	0,000109077
$j = -1,0326e-05$	5,01754e-06	-2,05791081	-2,3224e-05	2,57235e-06

Таблица 9.12. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	$SSR = 2,1932217$	$m - 1 = 9$	$MSR = 0,2436913$	$F = 26,0475$
Ошибка	$SSE = 0,0467783$	$n - m = 5$	$MSE = 0,0093557$	
Сумма	$SSM = 2,24$	$n - 1 = 14$		

Таблица 9.13. Экспериментальные и рассчитанные значения отклика

№	x	y	z	z_p	$z - z_p$	$z - z_p, \%$	95% доверительные пределы	
1	90	70	2,3	2,3332258	-0,033226	-1,444599	2,116552	2,5498996
2	90	60	1,7	1,6428365	0,0571635	3,3625587	1,4162294	1,8694437
3	90	50	1,4	1,4254202	-0,02542	-1,815728	1,1909406	1,6598997
4	60	70	2,1	2,0859413	0,0140587	0,6694639	1,8983888	2,2734937
5	60	60	1,6	1,61668	-0,01668	-1,042501	1,4358788	1,7974812
6	60	50	1,3	1,2825539	0,0174461	1,3420059	1,1042381	1,4608698
7	45	70	2,0	1,9101436	0,0898564	4,4928208	1,7838993	2,0363879
8	45	60	1,5	1,6211445	-0,121144	-8,076297	1,4847783	1,7575106
9	45	50	1,3	1,2983616	0,0016384	0,1260345	1,1570768	1,4396463
10	30	70	1,5	1,5557601	-0,05576	-3,717342	1,4145246	1,6969956
11	30	60	1,5	1,4934885	0,0065115	0,4340999	1,3237836	1,6631934
12	30	50	1,3	1,2285142	0,0714858	5,4989096	1,071608	1,3854203
13	15	70	0,9	0,9149292	-0,014929	-1,658805	0,700179	1,1296795
14	15	60	1,2	1,1258505	0,0741495	6,1791239	0,919647	1,332054
15	15	50	0,9	0,9651502	-0,06515	-7,238907	0,7447175	1,1855829

И наконец, рассмотрим модель второго порядка. Соответствующая ей поверхность отклика представлена на рис. 9.13. Уравнение имеет вид:

$$\text{Ранг 82, уравнение 301 } z = a + bx + cy + dx^2 + ey^2 + fxy \quad (9.22)$$

Критерии качества модели, ее параметры, результаты дисперсионного анализа и данные о соотношении экспериментальных и рассчитанных значений напряжения при удлинении 100% даны в табл. 9.14–9.17.

Таблица 9.14. Критерии качества модели

R^2	$R^2_{\text{ск}}$	S_r	F
0,9129807685	0,847716345	0,1471669794	18,88508271

Таблица 9.15. Параметры модели

Параметр	Ошибка	t -критерий	95% доверительные пределы	
$a = 0,893758707$	2,912632522	0,30685598	-5,69507381	7,482591226
$b = -0,00858377$	0,012770027	-0,67218085	-0,03747158	0,020304041
$c = -0,00405405$	0,09722598	-0,04169723	-0,2239945	0,215886394
$d = -0,0001824$	6,2333e-05	-2,92627086	-0,00032341	-4,1396e-05
$e = -3,9266e-19$	0,000806067	-4,8713e-16	-0,00182345	0,00182345
$f = 0,000626126$	0,000180332	3,472070735	0,000218186	0,001034066

Таблица 9.16. Дисперсионный анализ

Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	$SSR = 2,0450769$	$m - 1 = 5$	$MSR = 0,4090154$	$F = 18,8851$
Ошибка	$SSE = 0,1949231$	$n - m = 9$	$MSE = 0,0216581$	
Сумма	$SSM = 2,24$	$n - 1 = 14$		

Таблица 9.17. Экспериментальные и рассчитанные значения отклика

№	x	y	z	z_p	$z - z_p$	$z - z_p, \%$	95% доверительные пределы	
1	90	70	2,3	2,3045635	-0,004564	-0,198415	2,0217401	2,587387
2	90	60	1,7	1,7815906	-0,081591	-4,799446	1,5565716	2,0066096
3	90	50	1,4	1,2586176	0,1413824	10,098743	0,9757941	1,5414411
4	60	70	2,1	2,0680266	0,0319734	1,5225408	1,8824954	2,2535579

Таблица 9.17, окончание

№	x	y	z	z_p	$z-z_p$	$z-z_p, \%$	95% доверительные пределы	
5	60	60	1,6	1,7328915	-0,132892	-8,305719	1,5539349	1,9118481
6	60	50	1,3	1,3977564	-0,097756	-7,519721	1,2122251	1,5832876
7	45	70	2,0	1,826636	0,173364	8,6682024	1,652807	2,0004649
8	45	60	1,5	1,5854197	-0,08542	-5,694649	1,4120221	1,7588173
9	45	50	1,3	1,3442035	-0,044204	-3,400271	1,1703746	1,5180325
10	30	70	1,5	1,5031638	-0,003164	-0,210918	1,3252596	1,681068
11	30	60	1,5	1,3558665	0,1441335	9,608902	1,1938231	1,5179099
12	30	50	1,3	1,2085692	0,0914308	7,0331405	1,030665	1,3864734
13	15	70	0,9	1,0976101	-0,19761	-21,95668	0,8449062	1,350314
14	15	60	1,2	1,0442317	0,1557683	12,980691	0,8303704	1,2580931
15	15	50	0,9	0,9908533	-0,090853	-10,09481	0,7381494	1,2435572

Прокомментируем результаты.

Прежде всего, необходимо отметить, что нам неизвестна воспроизводимость результатов. Мы, к сожалению, имеем дело с усредненными значениями. Но то обстоятельство, что экспериментальные значения содержат только две значащие цифры, говорит о том, что дисперсия воспроизводимости достаточно велика.

Далее, тревожным обстоятельством являются, даже в случае самой хорошей модели, чрезвычайно низкие значения критерия Стьюдента (табл. 9.7, 9.11 и 9.15), характеризующие значимость коэффициентов, потому что при вычислении этих критериев значение коэффициента делится на ошибку его определения. А она большая, потому что зависит от косвенно определяемой ошибки опыта.

Но есть и мажорные обстоятельства. Даже если взять точку №13, которая дает относительную погрешность около 22%, абсолютная ошибка в этом случае (самая слабая из рассмотренных моделей №301) составляет около 0,2 МПа. Много это или мало? Если много, то мы остановимся на модели третьего порядка, а если приемлемо, то успокоимся на втором порядке. Надо понимать, что условное напряжение при удлинении 100% определяется с такой же абсолютной ошибкой, что и условное напряжение при удлинении 400%. А условное напряжение при удлинении 400% в этой точке 11,4 МПа. Следовательно, относительная ошибка составляет 1,8%.

Можно остановиться на модели №301. Минус — это то, что она предсказывает существование максимума при варьировании продолжительности вулканизации для смесей с относительно низким содержанием технического углерода (рис. 9.13). Но этот максимум находится в пределах ошибки опыта.

А с другой стороны, почему бы не использовать сразу несколько моделей? К этому нас когда-то призывал В. В. Налимов.

Количественная *интерпретация* полученной модели предполагает построение зависимости величины отклика как функции рассматриваемых факторов в виде множества линий равного уровня. Для этого необходимо определить наибольшее и наименьшее значения отклика в заданном диапазоне изменения факторов, выбрать несколько (рекомендуется 5–6) значений отклика, для которых найти пары значений факторов и построить затем несколько линий равного уровня (изолиний).

Делать это надо с помощью пакета *MATLAB*.

Теперь сделаем то же самое с условным напряжением при удлинении 200%.

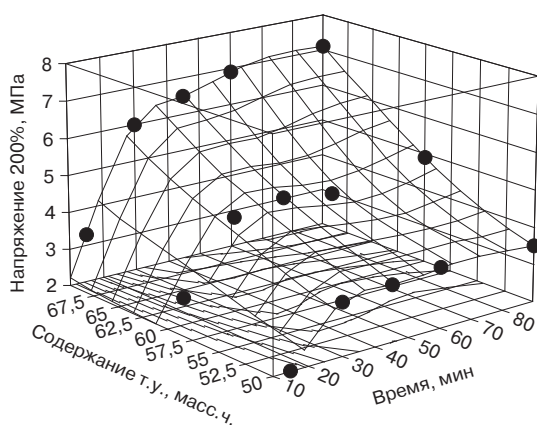


Рис. 9.14. Экспериментальная сетка, сформированная ломаными линиями без аппроксимации уравнением

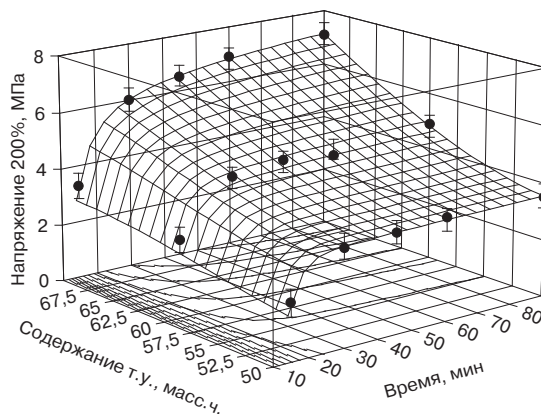


Рис. 9.15. Поверхность отклика, отвечающая наибольшему значению коэффициента детерминации

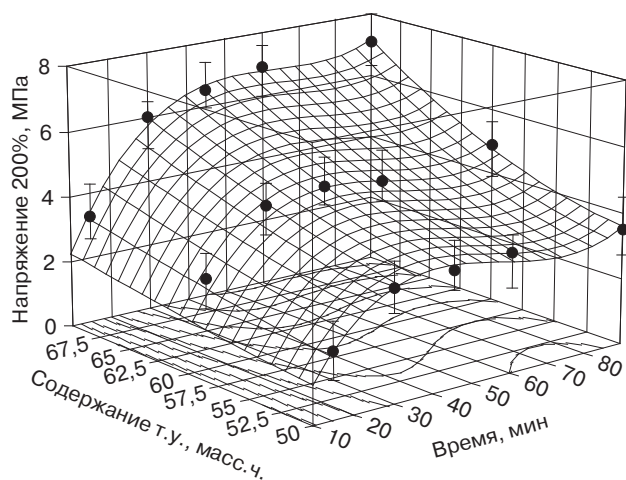


Рис. 9.16. Поверхность отклика, отвечающая модели 310 по каталогу программы *TC 3D*

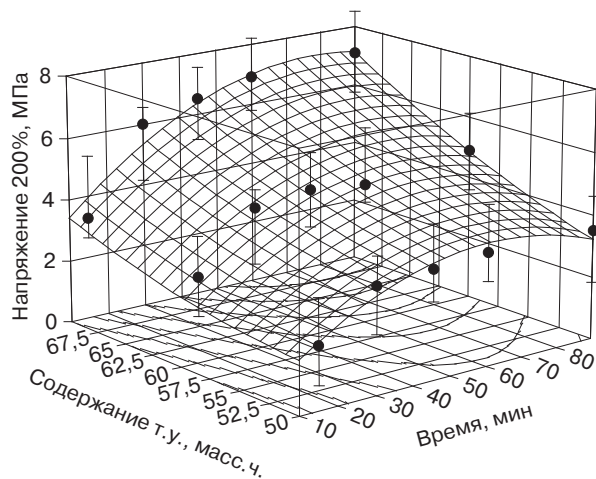


Рис. 9.17. Поверхность отклика, отвечающая модели 301 по каталогу программы *TC 3D*

Таблица 9.18. Критерии качества модели

Модель	Ранг	R^2	$R^2_{\text{ск}}$	S_r	F
312	1	0,9976223975	0,9916783913	0,126982609	233,10653076
310	97	0,9910086421	0,9685302472	0,2469376251	61,232169869
301	396	0,9419176363	0,8983558635	0,4678003173	29,190474307

Таблица 9.19. Параметры модели

Модель					
312		310		301	
Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка
$a = 43,15052589$	3,93567e+07	$a = 3,771259328$	7,6275e+07	$a = 8,406620$	9,258398
$b = -276,010881$	150,8341639	$b = 0,311971722$	0,208664286	$b = 0,032447$	0,040592
$c = -1,95213805$	2,00532e+06	$c = -0,27849535$	3,88639e+06	$c = -0,312378$	0,309053
$d = 756,328926$	1838,964573	$d = -0,00398851$	0,00130529	$d = -0,000830$	0,000198
$e = 0,029755822$	33734,27362	$e = 0,005016217$	65378,54782	$e = 0,0032$	0,002562
$f = 10,36868305$	4,382009277	$f = -0,00396909$	0,006441756	$f = 0,001383$	0,000573
$g = -16302,3509$	14848,50241	$g = 3,08409e-05$	6,73495e-06		
$h = -0,00012954$	187,4126312	$h = -2,8468e-05$	363,2141545		
$i = -0,10794304$	0,035213066	$i = 6,89189e-05$	5,24096e-05		
$j = 6,960478608$	14,2134678	$j = -2,7475e-05$	1,28098e-05		

Таблица 9.20. Дисперсионный анализ

Модель	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
312	Фактор	$SSR = 33,828710$	$m - 1 = 9$	$MSR = 3,758746$	$F = 233,107$
	Ошибка	$SSE = 0,080623$	$n - m = 5$	$MSE = 0,016125$	
	Сумма	$SSM = 33,909333$	$n - 1 = 14$		
310	Фактор	$SSR = 33,604442$	$m - 1 = 9$	$MSR = 3,733827$	$F = 61,2322$
	Ошибка	$SSE = 0,304891$	$n - m = 5$	$MSE = 0,060978$	
	Сумма	$SSM = 33,909333$	$n - 1 = 14$		
301	Фактор	$SSR = 31,939799$	$m - 1 = 5$	$MSR = 6,387960$	$F = 29,1905$
	Ошибка	$SSE = 1,969534$	$n - m = 9$	$MSE = 0,218837$	
	Сумма	$SSM = 33,909333$	$n - 1 = 14$		

Таблица 9.21. Экспериментальные и рассчитанные значения отклика

	№	x	y	z	z_p	$z - z_p$	$z - z_p, \%$	95% пределы	
312	5	60	60	4,5	4,7047106	-0,204711	-4,549123	4,5569664	4,8524547
310	6	60	50	3,6	3,3348155	0,2651845	7,3662371	2,8795758	3,7900552
301	13	15	70	3,3	3,9721906	-0,672191	-20,36941	3,1689196	4,7754616

Было получено семейство моделей (541 уравнение). Ранжирование моделей осуществлялось, как и в первом случае, по коэффициенту детерминации. Поверхности отклика изображены на рис. 9.14, 9.15, 9.16 и 9.17. Лучшей оказалась, аналогично первому случаю, модель 312.

Критерии качества моделей, их параметры, результаты дисперсионного анализа и данные о соотношении экспериментальных и рассчитанных значений напряжения при удлинении 200% сведены в табл. 9.18–9.21. В табл. 9.21 указаны максимальные невязки.

Результаты существенно хуже, чем в случае условного напряжения при удлинении 100%. Даже в случае модели №312 ошибка составила 0,13 МПа, а для №301 — целых 0,47 МПа.

Рассмотрим напряжение при удлинении 300%.

Программа рассчитывает 539 уравнений. Интересующие нас уравнения 310 и 301 занимают не лучшие места в общей иерархии, а победитель прежний — уравнение №312.

Соответствующие пространственные изображения приведены на рис. 9.18–9.21.

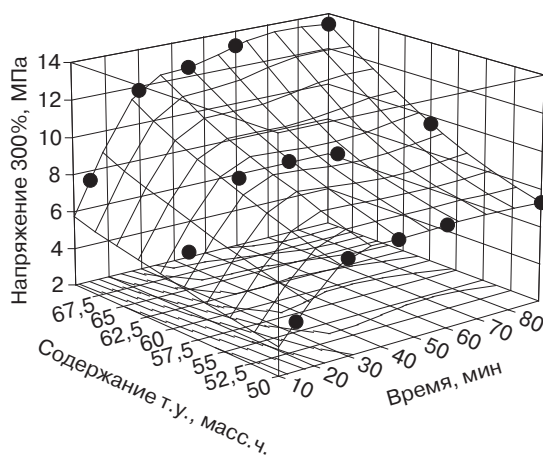


Рис. 9.18. Экспериментальная сетка, сформированная ломаными линиями без аппроксимации уравнением

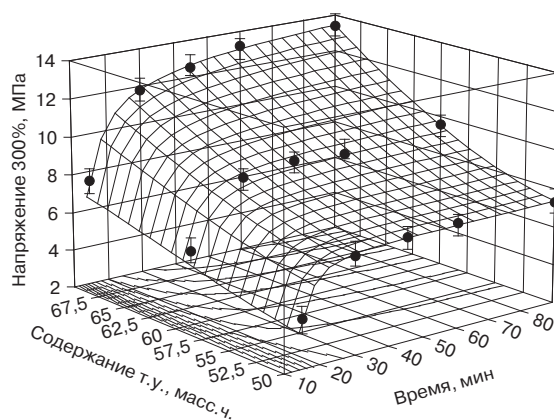


Рис. 9.19. Поверхность отклика, отвечающая наибольшему значению коэффициента детерминации

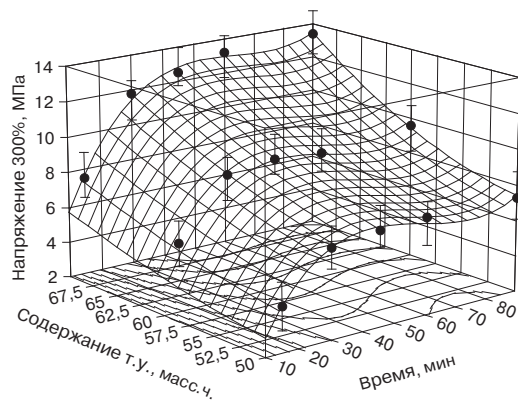


Рис. 9.20. Поверхность отклика, отвечающая модели 310 по каталогу программы TC 3D

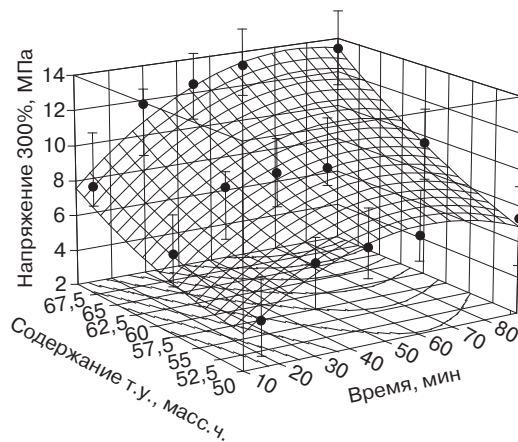


Рис. 9.21. Поверхность отклика, отвечающая модели 301 по каталогу программы TC 3D

Статистические данные относительно моделей для условного напряжения при удлинении 300% можно видеть в табл. 9.22, 9.23, 9.24 и 9.25.

Характер поверхностей во всех случаях одинаковый, но погрешности достаточно велики. Модель третьего порядка упорно показывает небольшой (в пределах ошибки опыта) минимум зависимости от продолжительности вулканизации в диапазоне 60–90 минут, а модель второго порядка — максимум в том же диапазоне. И большие ошибки определения параметров.

Обратим внимание на напряжение (условное) при растяжении 400%.

Таблица 9.22. Критерии качества модели

Модель	Ранг	R^2	$R^2_{ск}$	S_r	F
312	1	0,9983084954	0,994079734	0,1863271133	327,88313909
310	170	0,9929637847	0,9753732466	0,3800222507	78,401033274
301	415	0,9517813362	0,9156173384	0,7414993932	35,529943622

Таблица 9.23. Параметры модели

Модель					
312		310		301	
Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка
$a = 54,56062448$	$5,77497e+07$	$a = 5,076702587$	$1,17383e+08$	$a = 16,473458$	$14,675271$
$b = -323,853092$	$221,3255387$	$b = 0,517563191$	$0,321121869$	$b = 0,084833$	$0,064342$
$c = -2,32141329$	$2,94249e+06$	$c = -0,31996799$	$5,98092e+06$	$c = -0,596946$	$0,489872$
$d = 719,6554569$	$2698,39282$	$d = -0,00715504$	$0,002008764$	$d = -0,001429$	$0,000314$
$e = 0,034285439$	$49499,76907$	$e = 0,004746874$	$100613,6788$	$e = 0,0063$	$0,004061$
$f = 12,59618119$	$6,429913084$	$f = -0,00506129$	$0,009913478$	$f = 0,001874$	$0,000909$
$g = -21679,3418$	$21787,85436$	$g = 5,11686e-05$	$1,03647e-05$		
$h = -0,00013312$	$274,9987171$	$h = -1,5636e-05$	$558,9648821$		
$i = -0,13414557$	$0,051669666$	$i = 9,0991e-05$	$8,06552e-05$		
$j = 9,437273387$	$20,8560404$	$j = -3,7506e-05$	$1,97134e-05$		

Таблица 9.24. Дисперсионный анализ

Модель	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
312	Фактор	$SSR = 102,45041$	$m - 1 = 9$	$MSR = 11,383379$	$F = 327,883$
	Ошибка	$SSE = 0,17359$	$n - m = 5$	$MSE = 0,034718$	
	Сумма	$SSM = 102,624$	$n - 1 = 14$		
310	Фактор	$SSR = 101,90192$	$m - 1 = 9$	$MSR = 11,322435$	$F = 78,401$
	Ошибка	$SSE = 0,72208$	$n - m = 5$	$MSE = 0,1444169$	
	Сумма	$SSM = 102,624$	$n - 1 = 14$		
301	Фактор	$SSR = 97,675608$	$m - 1 = 5$	$MSR = 19,535122$	$F = 35,5299$
	Ошибка	$SSE = 4,948392$	$n - m = 9$	$MSE = 0,549821$	
	Сумма	$SSM = 102,624$	$n - 1 = 14$		

Таблица 9.25. Экспериментальные и рассчитанные значения отклика

	№	x	y	z	z_p	$z - z_p$	$z - z_p, \%$	95% пределы	
312	5	60	60	9,1	9,3568414	-0,256841	-2,822433	9,14005	9,5736328
310	6	60	50	7,4	7,0527519	0,3472481	4,6925415	6,3521652	7,7533386
	10	30	70	11,8	11,428549	0,3714506	3,1478863	10,873648	11,983451
301	10	30	70	11,8	10,750872	1,0491284	8,8909188	9,8545031	11,64724
	13	15	70	7,5	8,4756815	-0,975682	-13,00909	7,2024354	9,7489276

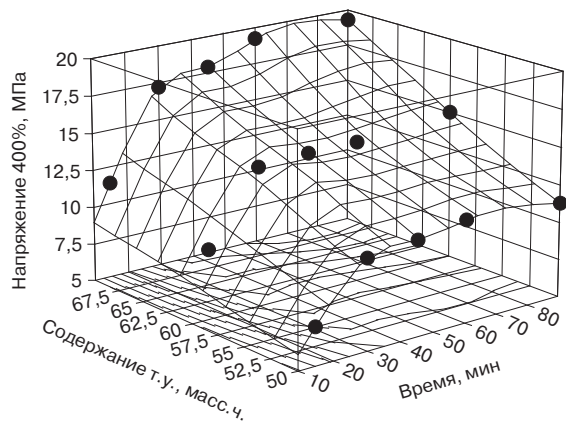


Рис. 9.22. Экспериментальная сетка, сформированная ломаными линиями без аппроксимации уравнением

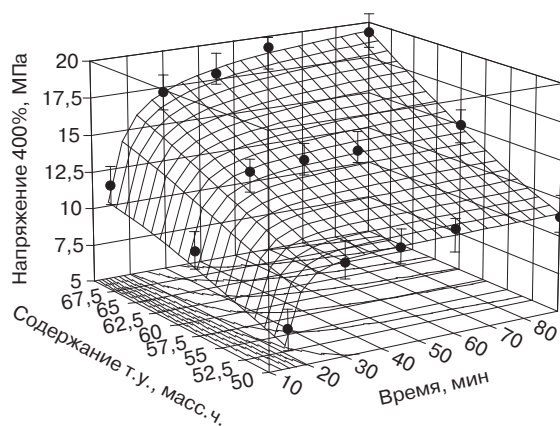


Рис. 9.23. Поверхность отклика, отвечающая наибольшему значению коэффициента детерминации

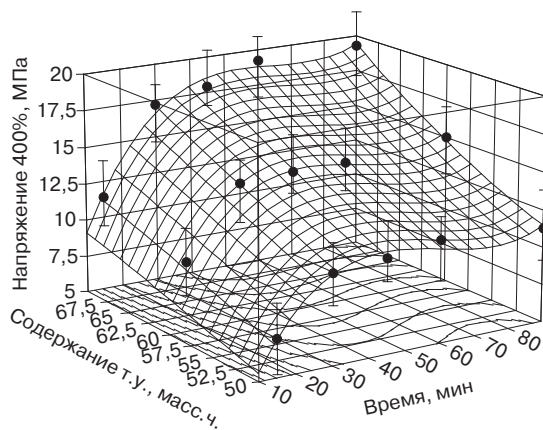


Рис. 9.24. Поверхность отклика, отвечающая модели 310 по каталогу программы TC 3D

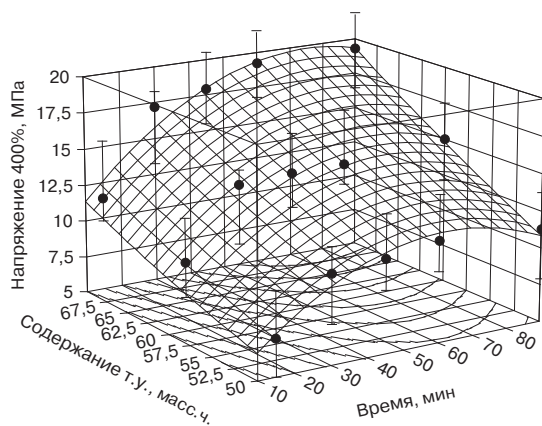


Рис. 9.25. Поверхность отклика, отвечающая модели 301 по каталогу программы TC 3D

Соответствующие пространственные изображения представлены на рис. 9.22, 9.23, 9.24 и 9.25.

Таблица 9.26. Критерии качества модели

Модель	Ранг	R^2	$R^2_{\text{ек}}$	S_r	F
312	1	0,9963001855	0,9870506492	0,3622907945	149,6021221
310	187	0,9875469146	0,9564142011	0,6646695852	44,05632479
301	419	0,950882353	0,9140441177	0,9838974784	34,846706604

Статистические данные по моделям для условного напряжения при удлинении 400%, даны в табл. 9.26–9.29. В табл. 9.29 представлены максимальные невязки.

Таблица 9.27. Параметры модели

Модель					
312		310		301	
Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка
$a = 49,22900043$	$1,12287\text{e}+08$	$a = -0,22111946$	$2,05306\text{e}+08$	$a = 3,854396$	$19,472655$
$b = -291,604886$	$430,3410483$	$b = 0,639266787$	$0,561651164$	$b = 0,125948$	$0,085375$
$c = -2,19331501$	$5,72131\text{e}+06$	$c = -0,26610866$	$1,04608\text{e}+07$	$c = -0,121703$	$0,650013$
$d = 1043,980137$	$5246,702217$	$d = -0,0095551$	$0,003513385$	$d = -0,001993$	$0,000417$
$e = 0,03735802$	$96246,38275$	$e = 0,008309704$	$175976,1488$	$e = 0,0027$	$0,005389$
$f = 11,92527882$	$12,50219723$	$f = -0,00455794$	$0,017338951$	$f = 0,002473$	$0,001206$
$g = -34078,0782$	$42363,87783$	$g = 6,47566\text{e}-05$	$1,81281\text{e}-05$		
$h = -0,00016886$	$534,7021264$	$h = -5,6751\text{e}-05$	$977,645271$		
$i = -0,14212025$	$0,100465487$	$i = 9,59459\text{e}-05$	$0,000141068$		
$j = 19,98078318$	$40,55207703$	$j = -4,2203\text{e}-05$	$3,44794\text{e}-05$		

Таблица 9.28. Дисперсионный анализ

Модель	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
312	Фактор	$SSR = 176,72373$	$m - 1 = 9$	$MSR = 19,63597$	$F = 149,602$
	Ошибка	$SSE = 0,65627$	$n - m = 5$	$MSE = 0,131255$	
	Сумма	$SSM = 177,38$	$n - 1 = 14$		
310	Фактор	$SSR = 175,17107$	$m - 1 = 9$	$MSR = 19,463452$	$F = 44,0563$
	Ошибка	$SSE = 2,20893$	$n - m = 5$	$MSE = 0,44178566$	
	Сумма	$SSM = 177,38$	$n - 1 = 14$		
301	Фактор	$SSR = 168,66751$	$m - 1 = 5$	$MSR = 33,733502$	$F = 34,8467$
	Ошибка	$SSE = 8,71249$	$n - m = 9$	$MSE = 0,96805425$	
	Сумма	$SSM = 177,38$	$n - 1 = 14$		

Таблица 9.29. Экспериментальные и рассчитанные значения отклика

	№	x	y	z	z_p	$z - z_p$	$z - z_p, \%$	95% пределы	
312	4	60	70	19,2	18,800004	0,399996	2,0833124	18,204901	19,395107
	6	60	50	11,8	11,416779	0,3832205	3,2476317	10,863173	11,970386
310	6	60	50	11,8	11,220565	0,5794346	4,910463	9,9952196	12,445911
	7	45	70	17,9	18,538594	-0,638594	-3,567564	17,671072	19,406116
301	11	30	60	14,2	12,70812	1,4918802	10,506199	11,624765	13,791475
	13	15	70	11,4	12,602574	-1,202574	-10,54889	10,9131	14,292047

Общее количество рассчитанных моделей — 536. Прежний лидер и прежние ошибки.

А что с прочностью?

Соответствующие поверхности отклика показаны на рис. 9.26–9.29. Они достаточно серьезно отличаются от тех, которые наблюдались в случае анализа условных напряжений при различных удлинениях.

Произошла смена лидера. Максимальное значение коэффициента детерминации среди 391 модели обеспечивает уравнение №318 по каталогу программы.

Это уравнение имеет следующий вид:

$$z = a + b/x + c/y + d/x^2 + e/y^2 + f/(xy) + g/x^3 + h/y^3 + i/(xy^2) + j/(x^2y). \quad (9.23)$$

Статистическая оценка моделей приводится в табл. 9.30–9.33.

Обращают на себя внимание чрезвычайно низкие значения критерия Фишера, причем максимальное значение наблюдается в случае квадратичной модели, что объясняется меньшим количеством коэффициентов, в ней фигурирующих.

В противоположность этому можно отметить небольшие отклонения рассчитанных значений отклика от экспериментальных.

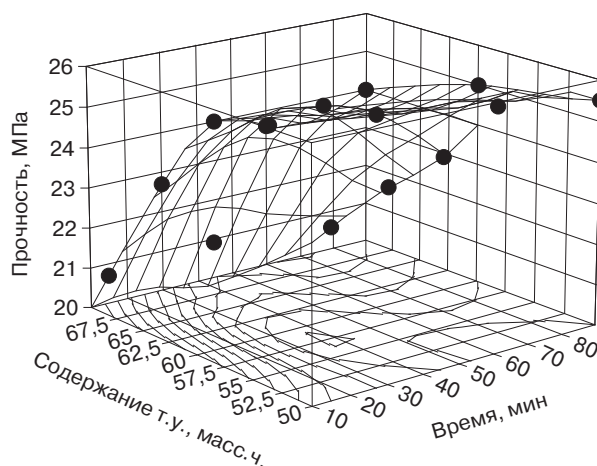


Рис. 9.26. Экспериментальная сетка, сформированная ломаными линиями без аппроксимации уравнением

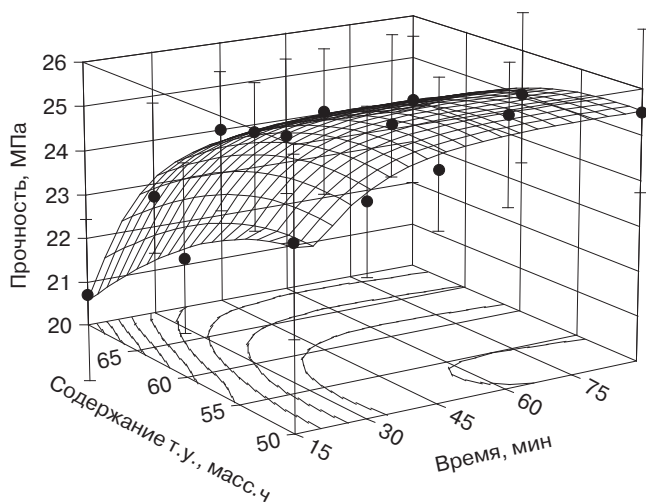


Рис. 9.27. Поверхность отклика, отвечающая наибольшему значению коэффициента детерминации

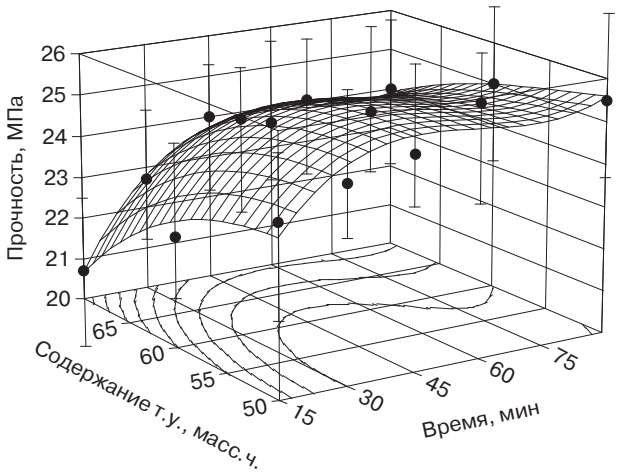


Рис. 9.28. Поверхность отклика, отвечающая модели 310 по каталогу программы TC 3D

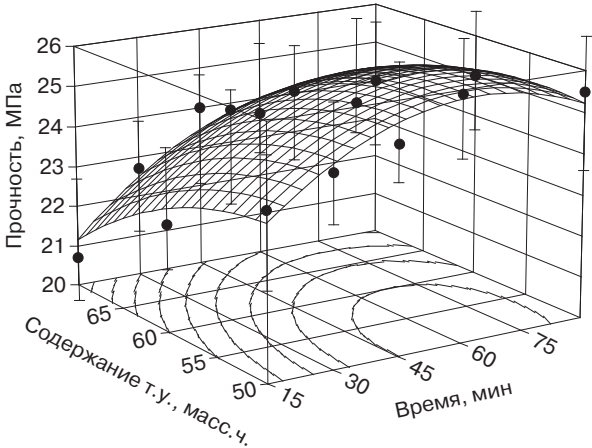


Рис. 9.29. Поверхность отклика, отвечающая модели 301 по каталогу программы TC 3D

Таблица 9.30. Критерии качества модели

Модель	Ранг	R^2	$R^2_{ск}$	S_r	F
318	1	0,9508449847	0,8279574465	0,5049653485	10,746557819
310	21	0,9434438282	0,8020533986	0,5416486464	9,2675201163
301	181	0,8977444843	0,8210528476	0,5428561704	15,802962424

Таблица 9.31. Параметры модели

Модель					
318	310	301			
Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка
$a = -34,3637651$	1,5761e+08	$a = 19,54141637$	1,67306e+08	$a = 9,6195189$	10,74385397
$b = 104,1534573$	615,5082998	$b = 0,312723121$	0,457697478	$b = 0,0705040$	0,047104916
$c = 8393,602124$	2,83699e+10	$c = -0,15907411$	8,52466e+06	$c = 0,532$	0,358638355
$d = -7037,10404$	7291,310019	$d = -0,00272028$	0,002863107	$d = -0,0008767$	0,000229928
$e = -396208,123$	1,68643e+12	$e = 0,00872971$	143405,4527	$e = -0,0056$	0,002973346
$f = 7986,540084$	63124,97756	$f = -0,00525871$	0,014129756	$f = 0,0008333$	0,000665193
$g = 33392,56538$	59047,292	$g = 2,32471e-05$	1,47729e-05		
$h = 6,26185e+06$	3,30982e+13	$h = -0,00010015$	796,6969597		
$i = -480275,316$	1,77253e+06	$i = 7,7027e-05$	0,000114959		
$j = 173088,3202$	196917,3825	$j = -2,9668e-05$	2,80977e-05		

Таблица 9.32. Дисперсионный анализ

Модель	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
318	Фактор	$SSR = 24,662383$	$m - 1 = 9$	$MSR = 2,7402648$	$F = 10,7466$
	Ошибка	$SSE = 1,27495$	$n - m = 5$	$MSE = 0,25499$	
	Сумма	$SSM = 25,937333$	$n - 1 = 14$		
310	Фактор	$SSR = 24,470417$	$m - 1 = 9$	$MSR = 2,7189352$	$F = 9,26752$
	Ошибка	$SSE = 1,466916$	$n - m = 5$	$MSE = 0,2933832$	
	Сумма	$SSM = 25,937333$	$n - 1 = 14$		
301	Фактор	$SSR = 23,285098$	$m - 1 = 5$	$MSR = 4,6570196$	$F = 15,803$
	Ошибка	$SSE = 2,652235$	$n - m = 9$	$MSE = 0,29469282$	
	Сумма	$SSM = 25,937333$	$n - 1 = 14$		

Таблица 9.33. Экспериментальные и рассчитанные значения отклика

	№	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>z_p</i>	<i>z-z_p</i>	<i>z-z_p</i> , %	95% пределы	
318	11	30	60	25,1	24,546709	0,5532909	2,2043464	23,587446	25,505972
310	6	60	50	25,9	25,322718	0,5772816	2,2288867	24,324167	26,32127
301	11	30	60	25,1	24,205636	0,8943643	3,5632042	23,607905	24,803367

Рассмотрим соответствующие зависимости для относительного удлинения при разрыве.

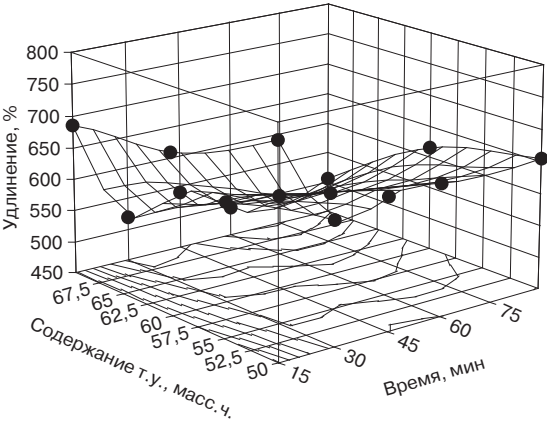


Рис. 9.30. Экспериментальная сетка, сформированная ломаными линиями без аппроксимации уравнением

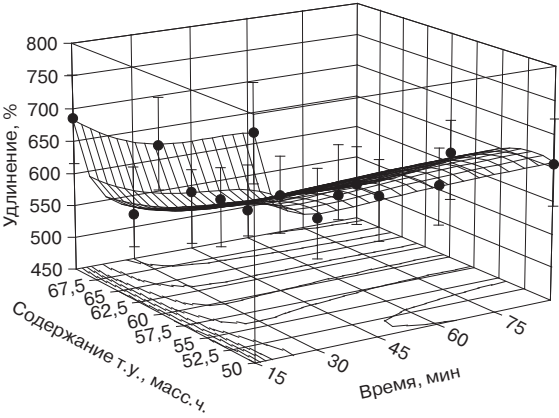


Рис. 9.31. Поверхность отклика, отвечающая наибольшему значению коэффициента детерминации

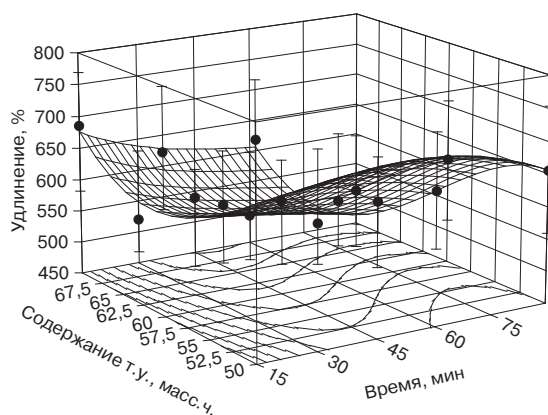


Рис. 9.32. Поверхность отклика, отвечающая модели 310 по каталогу программы TC 3D

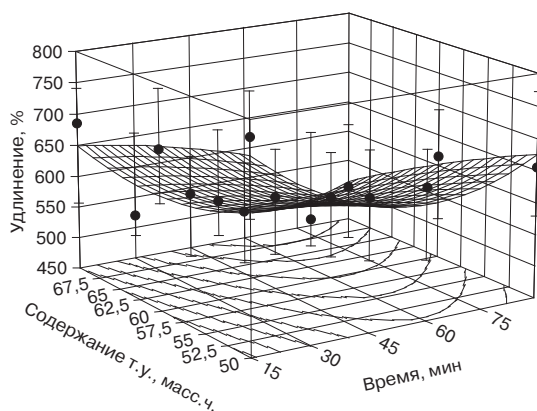


Рис. 9.33. Поверхность отклика, отвечающая модели 301 по каталогу программы TC 3D

Соответствующие поверхности отклика применительно к относительному удлинению при разрыве можно видеть на рис. 9.30–9.33. Получено 411 моделей, наилучшей по коэффициенту детерминации вновь явилась модель 318.

Статистическая оценка моделей приводится в табл. 9.34–9.37.

Таблица 9.34. Критерии качества модели

Модель	Ранг	R^2	$R^2_{\text{ек}}$	S_r	F
318	1	0,9802862762	0,9310019668	18,416515577	27,625602017
310	128	0,9557212782	0,8450244736	27,60073639	11,991228379
301	265	0,8889387623	0,8056428341	32,581279337	14,407274812

Таблица 9.35. Параметры модели

Модель					
318	310	301			
Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка
$a = 2598,940895$	5,74819e+09	$a = 1157,322105$	8,52541e+09	$a = 830,122040$	644,827353
$b = 44610,5016$	22448,11099	$b = -35,3181695$	23,32284502	$b = -4,819614$	2,827155
$c = -531688,682$	1,03467e+12	$c = 9,266472635$	4,3439e+08	$c = 3,428378$	21,524848
$d = -123596,67$	265920,2754	$d = 0,306996765$	0,145895055	$d = 0,056303$	0,013800
$e = 3,95729e+07$	6,15056e+13	$e = -0,44380634$	7,3075e+06	$e = -0,065$	0,178455
$f = -4,6942e+06$	2,30222e+06	$f = 0,634866125$	0,720008591	$f = -0,041216$	0,039924
$g = 1,18894e+06$	2,1535e+06	$g = -0,00187126$	0,00075278		
$h = -8,9137e+08$	1,20712e+15	$h = 0,003768143$	40597,20801		
$i = 1,23059e+08$	6,46456e+07	$i = -0,00623874$	0,00585793		
$j = 3,49822e+06$	7,18174e+06	$j = 0,000683194$	0,001431773		

Таблица 9.36. Дисперсионный анализ

Модель	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
318	Фактор	$SSR = 84327,493$	$m - 1 = 9$	$MSR = 9369,7215$	$F = 27,6256$
	Ошибка	$SSE = 1695,840$	$n - m = 5$	$MSE = 339,16805$	
	Сумма	$SSM = 86023,333$	$n - 1 = 14$		
310	Фактор	$SSR = 82214,33$	$m - 1 = 9$	$MSR = 9134,9256$	$F = 11,9912$
	Ошибка	$SSE = 3809,003$	$n - m = 5$	$MSE = 761,80065$	
	Сумма	$SSM = 86023,333$	$n - 1 = 14$		
301	Фактор	$SSR = 76469,475$	$m - 1 = 5$	$MSR = 15293,895$	$F = 14,4073$
	Ошибка	$SSE = 9553,858$	$n - m = 9$	$MSE = 1061,5398$	
	Сумма	$SSM = 86023,333$	$n - 1 = 14$		

Таблица 9.37. Экспериментальные и рассчитанные значения отклика

	№	x	y	z	z_p	$z - z_p$	$z - z_p, \%$	95% пределы	
318	7	45	70	540	516,65361	23,346386	4,3234048	481,90206	551,40517
310	7	45	70	540	506,65843	33,341567	6,1743643	470,63415	542,68272
301	10	30	70	520	571,1386	-51,1386	-9,834347	531,75242	610,52479

Вновь необходимо отметить низкие значения критерия Фишера. Квадратичная модель характеризуется весьма существенной абсолютной погрешностью в одной из точек. Экспериментальное значение не охватывается 95%-ным доверительным интервалом.

Рассмотрим влияние выбранных факторов на сопротивление резин раздиру. Графические зависимости изображены на рис. 9.34–9.37. Модель, обеспечивающая максимальное значение коэффициента детерминации, вновь 312 по каталогу программы. Всего получено 519 уравнений.

Статистический анализ моделей нашел отражение в табл. 9.38–9.41.

Модель, представляющая собой полином второй степени, характеризуется максимальным значением критерия Фишера.

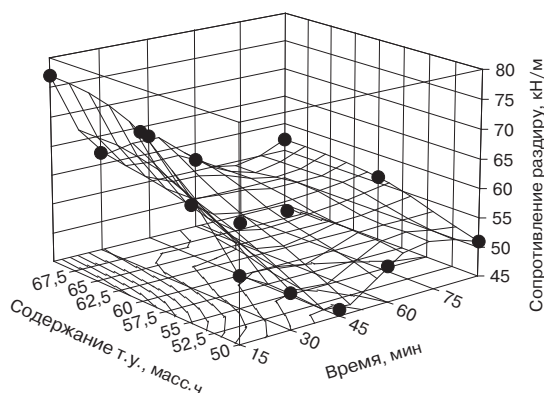


Рис. 9.34. Экспериментальная сетка, сформированная ломаными линиями без аппроксимации уравнением

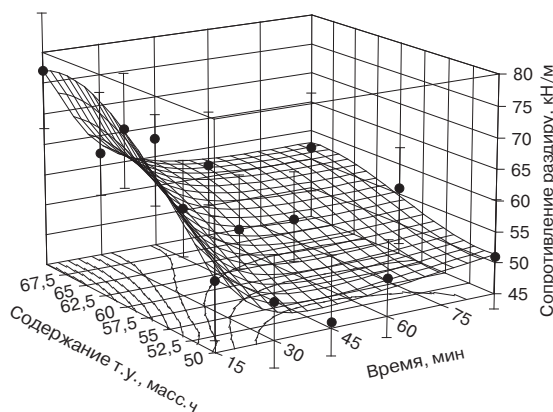


Рис. 9.35. Поверхность отклика, отвечающая наибольшему значению коэффициента детерминации

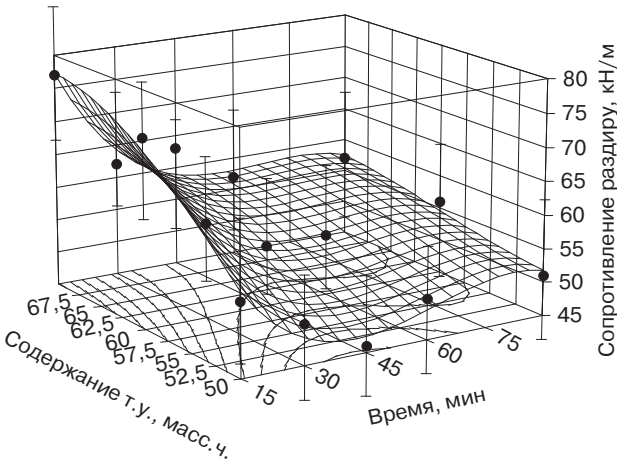


Рис. 9.36. Поверхность отклика, отвечающая модели 310 по каталогу программы TC 3D

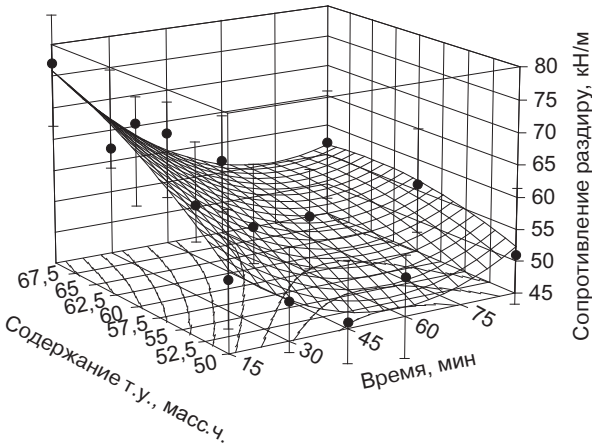


Рис. 9.37. Поверхность отклика, отвечающая модели 301 по каталогу программы TC 3D

Таблица 9.38. Критерии качества модели

Модель	Ранг	R^2	$R^2_{ск}$	S_r	F
312	1	0,9648255719	0,8768895018	2,5992891612	15,238746898
310	9	0,9544279496	0,8404978235	2,958627967	11,635152352
301	167	0,9114186855	0,8449826997	3,0745097967	18,520312596

Таблица 9.39. Параметры модели

Модель					
312		310		301	
Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка
$a = 561,5069574$	8,05617e+08	$a = -9,69871801$	9,13872e+08	$a = -59,83360$	60,848685
$b = -5969,9333$	3087,522066	$b = 1,217139851$	2,500064512	$b = -0,219237$	0,2667825
$c = -25,0477989$	4,10481e+07	$c = -0,30757944$	4,65639e+07	$c = 3,575405$	2,031177
$d = 35172,60922$	37642,95536	$d = 0,023702654$	0,015639046	$d = 0,005844$	0,001302
$e = 0,411069447$	690528,6672	$e = 0,073456849$	783318,4592	$e = -0,021$	0,016840
$f = 153,4134187$	89,69818234	$f = -0,08261925$	0,077180461	$f = -0,009279$	0,003767
$g = -212437,555$	303943,6004	$g = -0,00015312$	8,06933e-05		
$h = -0,00221858$	3836,270374	$h = -0,0006641$	4351,769218		
$i = -1,09082278$	0,720799026	$i = 0,000522523$	0,000627934		
$j = -126,678753$	290,9446663	$j = 0,000100147$	0,000153477		

По всем рассмотренным моделям различия между экспериментальными и рассчитанными значениями сопротивления раздиру не превосходят 10%.

Таблица 9.40. Дисперсионный анализ

Модель	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
312	Фактор	$SSR = 926,61848$	$m - 1 = 9$	$MSR = 102,95761$	$F = 15,2387$
	Ошибка	$SSE = 33,78152$	$n - m = 5$	$MSE = 6,7563041$	
	Сумма	$SSM = 960,4$	$n - 1 = 14$		
310	Фактор	$SSR = 916,6326$	$m - 1 = 9$	$MSR = 101,84807$	$F = 11,6352$
	Ошибка	$SSE = 43,7674$	$n - m = 5$	$MSE = 8,7534794$	
	Сумма	$SSM = 960,4$	$n - 1 = 14$		
301	Фактор	$SSR = 875,32651$	$m - 1 = 5$	$MSR = 175,0653$	$F = 18,5203$
	Ошибка	$SSE = 85,07349$	$n - m = 9$	$MSE = 9,4526105$	
	Сумма	$SSM = 960,4$	$n - 1 = 14$		

Таблица 9.41. Экспериментальные и рассчитанные значения отклика

	№	x	y	z	z_p	$z - z_p$	$z - z_p, \%$	95% пределы	
312	7	45	70	63	59,286014	3,7139856	5,8952152	55,471313	63,100716
310	7	45	70	63	58,900919	4,0990812	6,5064781	55,039338	62,762499
301	6	60	50	51	46,483371	4,5166289	8,856135	42,607382	50,359361

И последнее свойство – твердость вулканизатов.

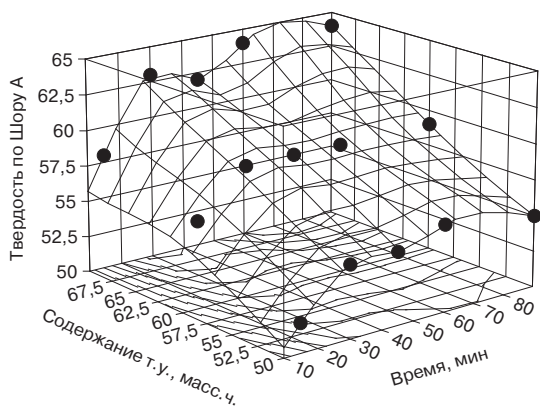


Рис. 9.38. Экспериментальная сетка, сформированная ломаными линиями без аппроксимации уравнением

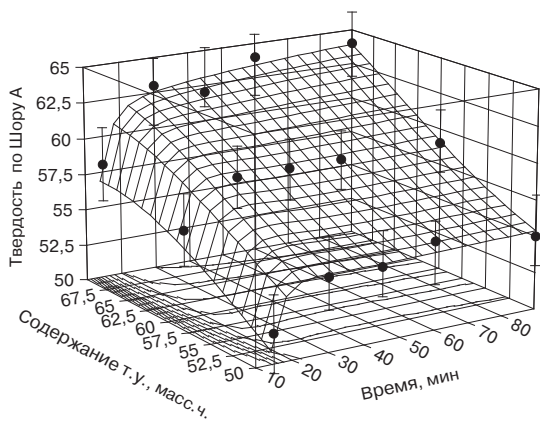
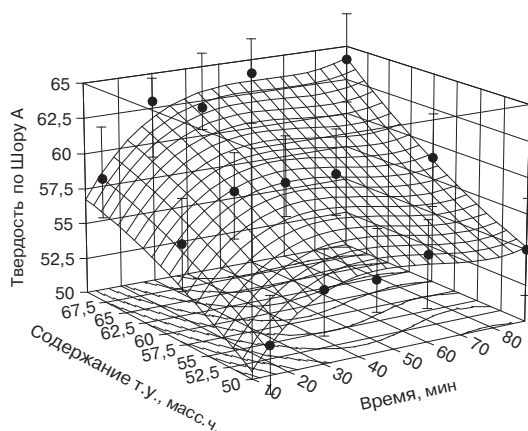
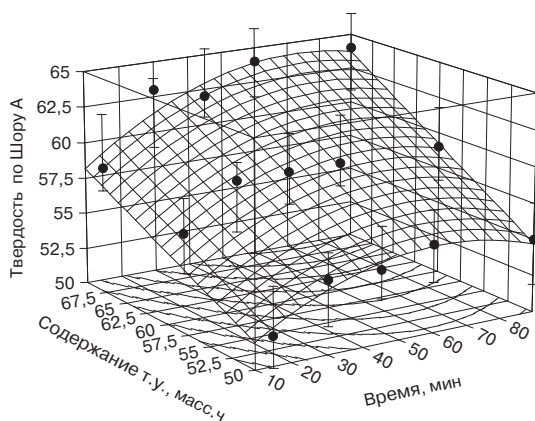


Рис. 9.39. Поверхность отклика, отвечающая наибольшему значению коэффициента детерминации

Рис. 9.40. Поверхность отклика, отвечающая модели 310 по каталогу программы *TC 3D*Рис. 9.41. Поверхность отклика, отвечающая модели 301 по каталогу программы *TC 3D*

Пространственные изображения представлены на рис. 9.38–9.41, статистические сведения — в табл. 9.42–9.45.

Таблица 9.42. Критерии качества модели

Модель	Ранг	R^2	$R^2_{\text{ск}}$	S_r	F
312	1	0,9862240173	0,9517840604	0,7150975315	39,772279182
310	227	0,9752927242	0,9135245347	0,9576711741	21,929948717
301	366	0,9561169284	0,9232046247	0,9512972479	39,218095023

Таблица 9.43. Параметры модели

Модель					
312		310		301	
Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка	Параметр	Ошибка
$a = 141,5817219$	2,21635e+08	$a = 12,48209155$	2,95809e+08	$a = 35,134021$	18,82745242
$b = -969,861747$	849,4166178	$b = 1,08303587$	0,809239872	$b = 0,102455$	0,082546316
$c = -4,55473958$	1,12929e+07	$c = 0,718634868$	1,50722e+07	$c = 0,3$	0,628475273
$d = 4327,094902$	10356,05613	$d = -0,00803444$	0,005062165	$d = -0,001499$	0,000402925
$e = 0,075659368$	189973,2253	$e = 0,002652354$	253550,4689	$e = -2,885e-18$	0,00521047
$f = 30,91887581$	24,67711162	$f = -0,02201456$	0,024982358	$f = 0,0016667$	0,001165679
$g = -59482,5154$	83618,753	$g = 4,42581e-05$	2,61194e-05		
$h = -0,00037286$	1055,406807	$h = -6,8789e-05$	1408,613716		
$i = -0,28481013$	0,198300986	$i = 0,000202703$	0,000203254		
$j = 13,60768673$	80,04258078	$j = -6,0547e-06$	4,96787e-05		

Таблица 9.44. Дисперсионный анализ

Модель	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
312	Фактор	$SSR = 183,04318$	$m - 1 = 9$	$MSR = 20,338131$	$F = 39,7723$
	Ошибка	$SSE = 2,55682$	$n - m = 5$	$MSE = 0,51136448$	
	Сумма	$SSM = 185,6$	$n - 1 = 14$		
310	Фактор	$SSR = 181,01433$	$m - 1 = 9$	$MSR = 20,112703$	$F = 21,9299$
	Ошибка	$SSE = 4,58567$	$n - m = 5$	$MSE = 0,91713408$	
	Сумма	$SSM = 185,6$	$n - 1 = 14$		
301	Фактор	$SSR = 177,4553$	$m - 1 = 5$	$MSR = 35,49106$	$F = 39,2181$
	Ошибка	$SSE = 8,1447$	$n - m = 9$	$MSE = 0,90496645$	
	Сумма	$SSM = 185,6$	$n - 1 = 14$		

Таблица 9.45. Экспериментальные и рассчитанные значения отклика

	№	x	y	z	z_p	$z-z_p$	$z-z_p, \%$	95% пределы	
312	7	45	70	62	63,074728	-1,074728	-1,733432	62,025255	64,124201
310	7	45	70	62	63,180052	-1,180052	-1,90331	61,930106	64,429998
301	10	30	70	63	61,358616	1,6413844	2,605372	60,208631	62,5086

Общее количество моделей — 542, наибольшее значение коэффициента детерминации обеспечивает модель 312 по каталогу программы *Table Curve 3D*. Наблюдаются сравнительно низкие значения невязок.

В целом по всем свойствам наибольшее количество точек, в которых имеет место значительное различие экспериментальных и рассчитанных показателей, соответствуют содержанию технического углерода 70 масс. ч. По координате времени существенные невязки сконцентрированы в диапазоне 45–60 мин.

Линии на нижней плоскости каждого из приведенных рисунков — это проекции на плоскость сечений поверхности горизонтальными плоскостями, изолинии, или линии равного уровня. Семейства таких изолиний для каждого из восьми показателей приводятся на рис. 9.42. Получены они с помощью пакета *MATLAB*.

На контурных графиках сплошными жирными линиями обозначены изолинии для уравнений, обеспечивающих максимальный коэффициент детерминации, пунктирными линиями — изолинии, построенные по уравнению третьей степени и тонкими линиями — для квадратичных моделей.

Примем пока на веру то обстоятельство, что наиболее достоверными являются графики, полученные с использованием уравнений, имеющих ранг №1.

Линии, показанные на рис. 9.42, обычно группируются по трое, причем сплошная жирная линия располагается чаще всего посередине между двумя остальными, а пунктирная (модель 310) «старается» повторить эту жирную сплошную и вьется вокруг нее. И это происходит очень часто. Но кривые модели 310 просто пытаются отразить тенденцию изменения значений в экспериментальных точках. Чтобы проиллюстрировать это, рассмотрим одну из наиболее неблагоприятных «картинок», характеризующих соответствующую зависимость для относительного удлинения при разрыве. На рис. 9.43 к тому, что изображено на рис. 9.42, добавлены кружочками экспериментальные точки и значения отклика в них. Возьмем верхний ряд чисел в интервале времени от 15 до 90 мин (при дозировке технического углерода 70 масс. ч.): 685; 520; 540; 495; 505. Что предсказывает модель 318 в этом случае? Падение отклика с 700% при $t = 15$ мин до 550 при $t = 25$ мин и с $t = 40$ мин практически постоянное значение в районе 500%. А что делает в этом случае модель 310? Она уверяет нас, что $495 < 505$. А модель 301 все эти тонкости игнорирует. Аналогичные тенденции можно проследить, двигаясь параллельно оси абсцисс при содержании технического углерода 60 масс. ч. А вот чего нельзя «простить» модели 301, так это того, что она «не видит» седла в нижней части диаграммы.

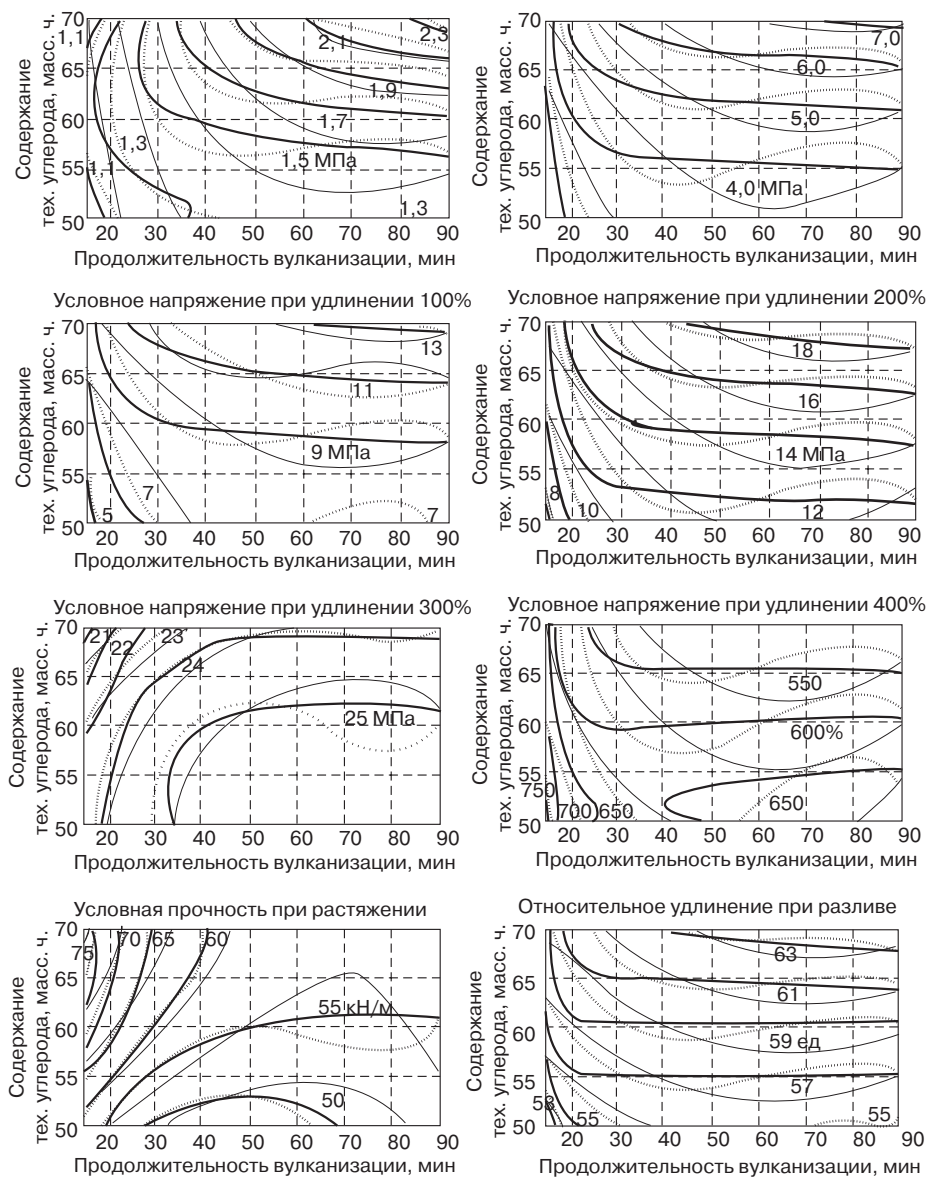


Рис. 9.42. Зависимость физико-механических показателей вулканизатов от продолжительности вулканизации и содержания технического углерода N 330

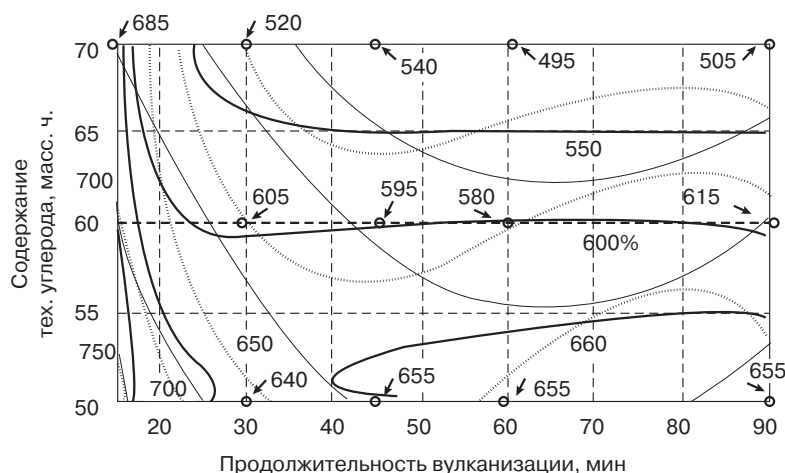


Рис. 9.43. Изолинии для относительного удлинения при разрыве с добавлением экспериментальных точек

Из рассмотренных выше уравнений легко может быть получена зависимость относительного удлинения при разрыве от продолжительности вулканизации при различном содержании усилителя и наоборот — от его дозировки при различной продолжительности вулканизации. Такие зависимости показаны на рис. 9.44 (слева для модели 318, в середине — для модели 310, справа — для модели 301).

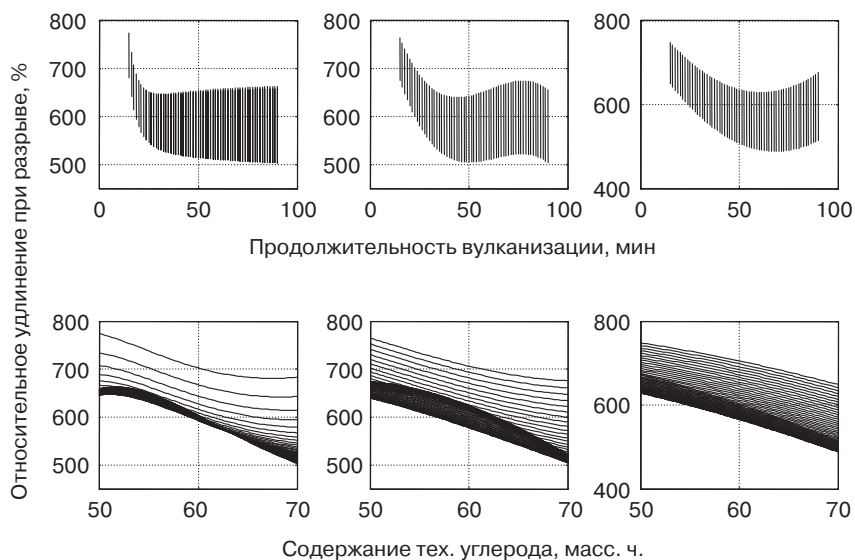


Рис. 9.44. Изменение относительного удлинения

Что еще может быть получено из массива экспериментальных данных в плане анализа почти стационарной области?

Есть возможность построить контурный график строго по экспериментальным точкам. Покажем это на примере условного напряжения при удлинении 400%. Для этого необходимо предварительно в программе *Table Curve 2D* получить зависимость отклика z от продолжительности вулканизации x отдельно при каждом значении y дозировки технического углерода. В нашем примере содержание технического углерода варьировалось на трех уровнях. Во всех трех случаях была получена модель следующего вида: $z = a + bx^{0.5} + cx + dx^{1.5} + ex^2 + fx^{2.5}$.

Параметры этих моделей представлены в табл. 9.46.

Таблица 9.46. Параметры уравнений зависимости условного напряжения при удлинении 400% от продолжительности вулканизации

y , мин	a	b	c	d	e	f
50	-274,948553	211,463599	-61,8551250	8,92222257	-0,63313387	0,01766637
60	-184,987336	133,809078	-35,7546185	4,75764468	-0,31561567	0,00836533
70	-206,316580	151,965627	-41,4516411	5,63515673	-0,37880678	0,01004017

Далее с помощью той же программы *Table Curve 2D* находим зависимость каждого из этих параметров от содержания технического углерода. Эти зависимости могут иметь различный вид. В рассматриваемом случае получено:

$$a = -2394,11155 + 70,20587525*y - 0,55645231*y^2;$$

$$b = 2036,902058 - 60,4615345*y + 0,479055303*y^2;$$

$$c = -669,320594 + 20,09869166*y - 0,15898765*y^2;$$

$$d = 105,3764611 - 3,18960725*y + 0,025210450*y^2;$$

$$e = -7,93136452 + 0,241141940*y - 0,00190355*y^2;$$

$$f = 0,228809847 - 0,00696684*y + 5,48794e-05*y^2.$$

В *MATLAB* сформируется следующая программа:

```
>> x=[15:75/60:90]';y=[50:20/60:70]'; (СТОЛБЦЫ ЗНАЧЕНИЙ ФАКТОРОВ);
>> m=max(size(x));n=max(size(y)); (ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАЗМЕРОВ ВЕКТОРОВ);
>> a=-2394.11155+70.20587525*y-0.55645231*y.^2; (ЗАВИСИМОСТЬ
>> b=2036.902058-60.4615345*y+0.479055303*y.^2; ПАРАМЕТРОВ
>> c=-669.320594+20.09869166*y-0.15898765*y.^2; МОДЕЛИ ОТ
>> d=105.3764611-3.18960725*y+0.025210450*y.^2; СОДЕРЖАНИЯ
>> e=-7.93136452+0.241141940*y-0.00190355*y.^2; ТЕХНИЧЕСКОГО
>> f=0.228809847-0.00696684*y+5.48794e-05*y.^2; УГЛЕРОДА);
>> o=ones(n,1); (СТОЛБЕЦ ЕДИНИЦ)
>> A=a*o';B=b*o';C=c*o';D=d*o';E=e*o';F=f*o'; (МАТРИЦЫ КОЭФФИЦИЕНТОВ);
```

```
>> X=o*x'; (МАТРИЦА ФАКТОРА - ВРЕМЕНИ);
>> z=A+B.*X.^0.5+C.*X+D.*X.^1.5+E.*X.^2+F.*X.^2.5; (ФУНКЦИЯ);
>> [min(min(z)) max(max(z))] (ЗАПРОС ОБЛАСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОТКЛИКА);
ans =
    7.49147628165463e+000    19.2271582115275e+000
>> p=[8:2:18 19]'; (ЗНАЧЕНИЯ ОТКЛИКОВ, ВЫВОДИМЫХ В ВИДЕ ИЗОЛИНИЙ);
>> contour(x,y,z,p); grid (ОПЕРАТОР СМЕНЫ ГРАФИЧЕСКОГО ОКНА И ОПЕРАТОР ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ДИАГРАММЫ КОНТУРНЫХ ЛИНИЙ).
```

На рис. 9.45 показано два семейства изолиний. Сплошными линиями обозначена зависимость условного напряжения при удлинении 400% от рассматриваемых факторов с использованием представленной выше программы. Отклонения экспериментальных значений отклика от расчетных (невязки) в этом случае равны нулю. Пунктиром обозначены изолинии для модели 312 по каталогу программы *Table Curve 3D*. Анализ рисунка убеждает нас в том, что аппроксимация зависимости отклика (в данном случае условного напряжения при удлинении 400%) от двух рассматриваемых факторов моделью $z=a + b/x + cy + d/x^2 + ey^2 + fy/x + g/x^3 + hy^3 + iy^2/x + jy/x^2$ (312), безусловно, оправдана.

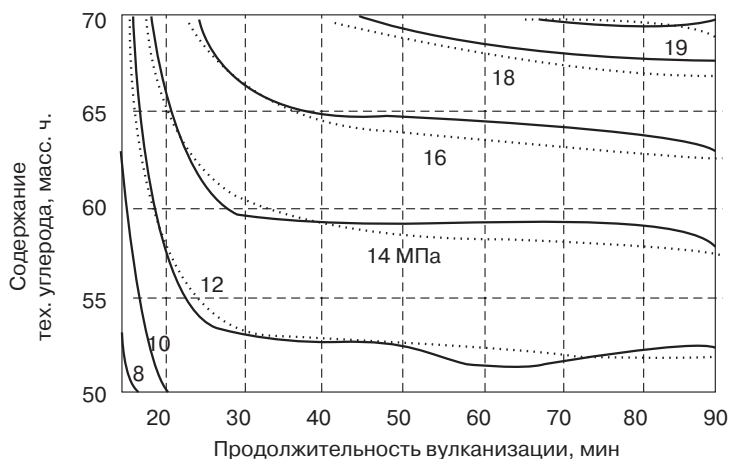


Рис. 9.45. Изолинии условного напряжения при удлинении 400%

Возможно еще графическое изображение, взятое из анонимной работы 1931 г., цитированной в Журнале резиновой промышленности (№ 5–6, 1932 г.). Рассматривается прямоугольная система координат $x-o-y$; по оси абсцисс отложено содержание тиурама, а по оси ординат – содержание серы, что отражено на рис. 9.46. Из точки с координатами (0,2; 1,4) проведена прямая в точку (3; 0). Уравнение этой прямой имеет следующий вид: $y = 1,5 - 0,5x$. Приравнявая y последовательно 1,4, 1,2, 1,0, ..., 0,4, 0,2, 0, можно получить для x значения: 0,2, 0,4, ..., 3.

Эти значения на графике соответствуют точкам 1, 2, 3, ..., 7, 8. Авторы статьи приготовили ряд смесей, содержащих пропорции серы и тиурама, соответствующие точкам указанной выше прямой.

С этими смесями были проделаны опыты вулканизации и искусственного старения.

В точке o_1 к прямой $y = 1,5 - 0,5x$ был восстановлен перпендикуляр o_1y_1 .

Далее в координатах $x_1 - y_1$ была построена зависимость произведения $A \cdot C$ от отношения сера – ускоритель. Здесь A – прочность (г/мм^2), C – относительное удлинение при разрыве (%). $A \cdot C$ – произведение упругости вулканизатов, характеризующее работу деформации. Данные получены при вулканизации в течение 10 мин, при температуре 133°C . Зависимость произведения упругости от соотношения сера – ускоритель дана на рисунке кривой A , которая, по мнению авторов, показывает, что наилучшие механические свойства соответствуют смеси № 5, т. е. содержанию серы 0,6% и тиурама 1,8%.

Возрастающая кривая B на графике характеризует зависимость от соотношения сера – ускоритель величины произведения упругости для смесей 1, 2, ..., 8 после искусственного старения (10 дней). На том же рисунке кривая, нанесенная пунктиром, показывает ход изменения потери в % произведения упругости после старения.

Эта потеря, равная приблизительно 39% для смеси 1, равняется 43% для смеси № 5, в то время как для смеси 7 она равна всего 19% и для № 8 только 8%.

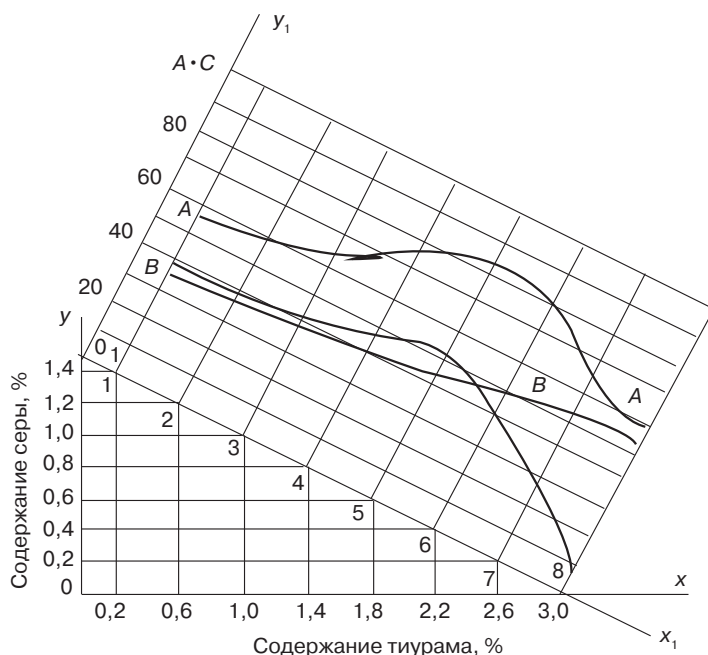


Рис. 9.46. Зависимость произведения упругости от состава вулканизирующей группы

Из этих опытов следует, что смеси с небольшим количеством серы или даже в отсутствие ее и с большим содержанием ускорителя, вулканизованные в продолжение 10 мин при 133 °С, в условиях искусственного старения сохраняются лучше всего.

Кроме того, эти опыты показывают, что при определенных температуре и продолжительности вулканизации существуют количества серы и ускорителя, при которых способность вулканизованной смеси противостоять старению заметно лучше, чем при других. Для тиурама и дефенилгуанидана оказывается выгодным применение больших количеств ускорителя. Чем не эффективные вулканизирующие системы?

Нечто подобное можно найти в недавно переведенной у нас книге «Каучук и резина. Наука и технология».

Влияние изменений концентраций ускорителя на условное напряжение при удлинении 300%, термоокислительное старение и усталостную выносливость (рост трещин при многократном изгибе по Де Матиа) показано на рис. 9.47.

Зависимость условного напряжения от соотношения сера/N-циклогексил-2-бензтиазолилсульфенамид обозначена на рисунке сплошными линиями, соответствующая зависимость для усталостной выносливости показана пунктирной кривой. Процент сохранения разрывного удлинения после двух дней хранения представлен в виде цепочки кружочков.

Отличием является использование логарифмической шкалы. Но как заставить компьютер рисовать такую картинку в течение обозримого интервала времени?

Давайте пока нарисуем пространственное изображение и семейство изолиний для произведения упругости $\sigma\epsilon/100$, где σ — прочность (МПа), а $\epsilon/100$ показывает, во сколько раз мы растянули образец в момент разрыва (рис. 9.48). Сравним эти зависимости с соответствующими изображениями для работы деформации, которая определялась как площадь по кривой напряжение–деформация. Эти графики даны на рис. 9.49.

Сравнивая контурные графики, можно заметить наличие в обоих случаях седла в нижней части диаграмм, а верхняя часть «подкачала»: минимум произведения упругости наблюдается при максимальной продолжительности вулканизации, а минимум работы деформации — в районе 25 мин в обоих случаях, правда, при максимальном содержании технического углерода. Заметим, что при построении пространственного изображения работа деформации дана в МПа, а на контурном графике — в ГПа.

На рис. 9.50 показаны результаты корреляционного анализа. Анализируется взаимосвязь произведения упругости (x) и работы деформации (y). Коэффициент корреляции в рассматриваемом случае составил 0,777. Табличное значение коэффициента корреляции при числе степеней свободы $15 - 2 = 13$ и уровне значимости (ошибка первого рода) 5% равно 0,514. Поскольку $0,777 > 0,514$, можно утверждать, что между рассматриваемыми величинами существует положительная парная корреляция. Тангенс угла между линиями регрессии равен $-0,02367$. Уравнения регрессии имеют следующий вид: $y = 3610,4 + 16,733 \cdot x$ и $x = -71,105 + 0,03604 \cdot y$.

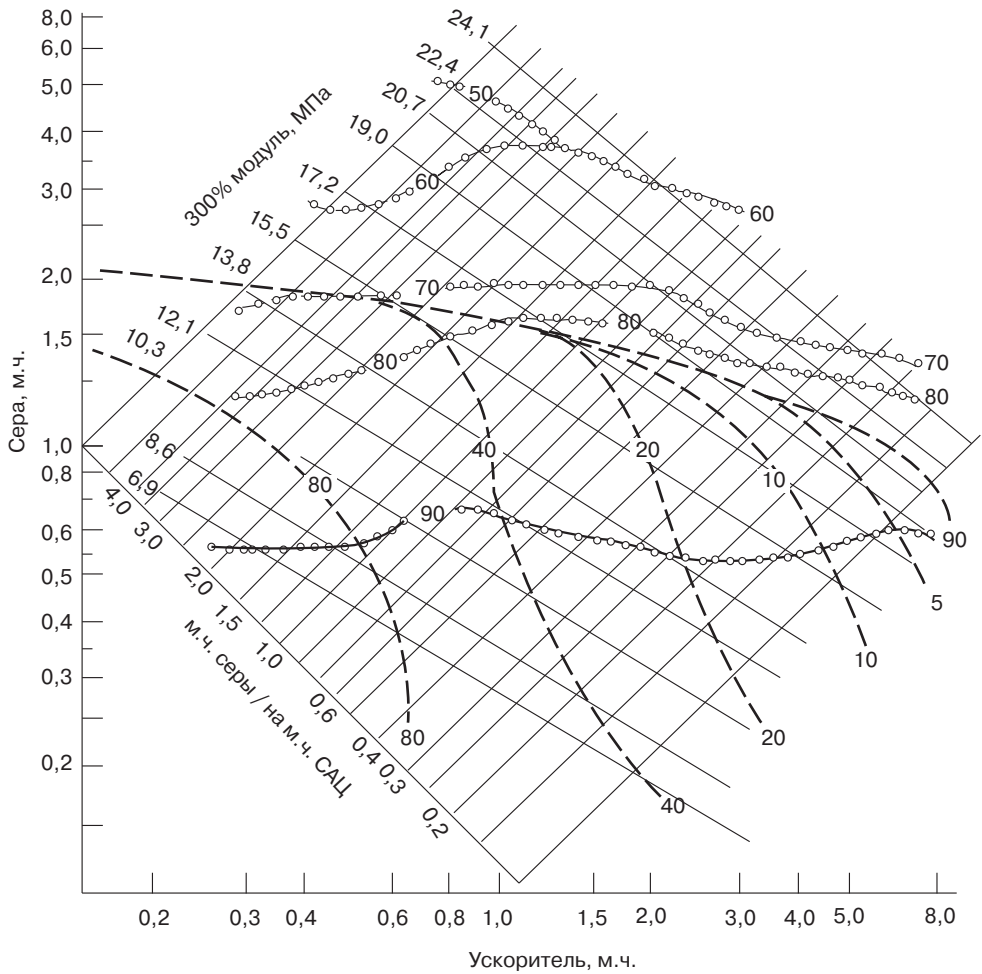


Рис. 9.47. Свойства вулканизатов на основе натурального каучука

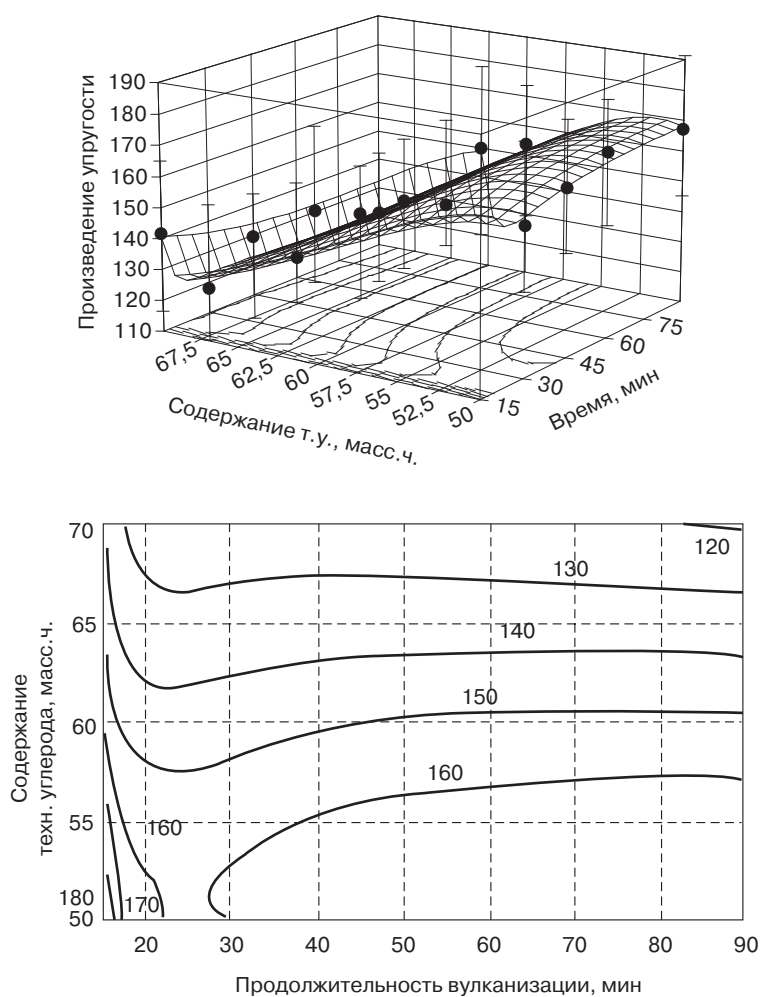


Рис. 9.48. Зависимость произведения упругости от продолжительности вулканизации и содержания технического углерода N 330

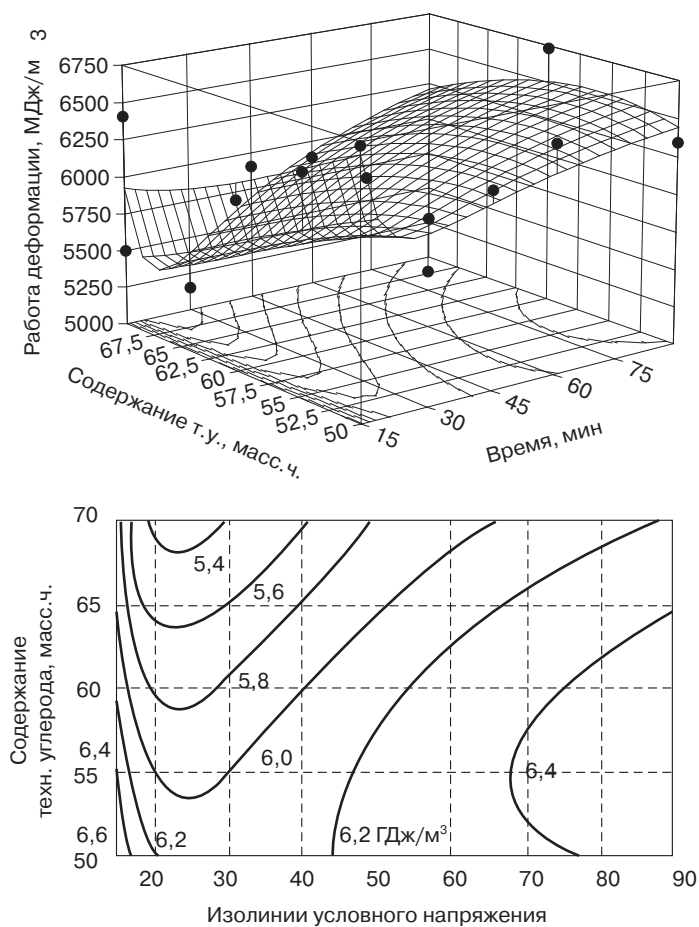


Рис. 9.49. Зависимость работы деформации от продолжительности вулканизации и содержания технического углерода N 330

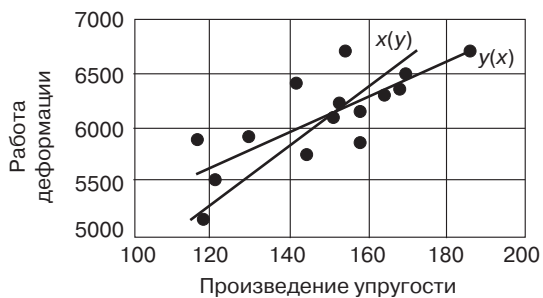


Рис. 9.50. Поле рассеяния и линии регрессии

Числовой массив, который мы так долго эксплуатируем, содержит, напомним, два фактора (продолжительность вулканизации и содержание технического углерода) и восемь откликов (условные напряжения при удлинении 100, 200, 300 и 400%, условная прочность при растяжении, относительное удлинение при разрыве, сопротивление раздиру и твердость по Шору А). Есть возможность ввести еще один фактор, не привлекая дополнительную информацию.

Речь идет о деформации. Если деформация равна нулю, то и напряжение равно нулю, если деформация 100%, то ей соответствуют напряжение при удлинении 100%, если деформация 200%, то ей, как это ни странно, отвечает напряжение при удлинении 200%. Аналогично, обстоит дело, с деформациями 300, 400; 500% у нас отсутствует. А вот разрывной деформации (относительное удлинение при разрыве) соответствует прочность. Таким образом, относительное удлинение из отклика переквалифицируется в факторы.

Следовательно, первый фактор имеет 5 уровней (15, 30, 45, 60 и 90 мин), второй фактор — 3 уровня (50, 60 и 70 масс. ч), а третий фактор — 6 уровней (0, 100, 200, 300, 400 и ϵ — относительное удлинение — разное при разных x_1 и x_2). А отклик получается один — напряжение (0, при удлинении 10%, 200, 300, 400% и при разрывном удлинении — прочность). Сопротивление раздиру и твердость не учитываются.

На рис. 9.51 показаны кривые напряжение–деформация при варьировании продолжительности вулканизации для дозировки технического углерода 60 масс. ч. (слева) и кривые напряжение–деформация (справа) при варьировании содержания усилителя для значения продолжительности вулканизации 45 мин. Визуально, если не учитывать участок от 0 до 100% деформации, все эти кривые вполне сойдут за прямые — своего рода гуковская деформация.

Рассмотрим еще три примера построения зависимостей.

Пример. Построить зависимость тангенса угла диэлектрических потерь ($\text{tg}\delta$) высоконаполненной композиции от времени выдержки под давлением $x_1 \in [2; 8]$ мин, и частоты $x_2 \in [50; 90]$ кГц, пользуясь следующими данными (табл. 9.47).

Таблица 9.47. Результаты определения $\text{tg}\delta$

x_1	2	2	2	2	2	4	4	4	4	4
x_2	50	60	70	80	90	50	60	70	80	90
$\text{tg}\delta \times 10^4$	180	120	152	174	183	181	126	156	173	176
x_1	6	6	6	6	6	8	8	8	8	8
x_2	50	60	70	80	90	50	60	70	80	90
$\text{tg}\delta \times 10^4$	182	128	158	170	170	182	123	153	166	165

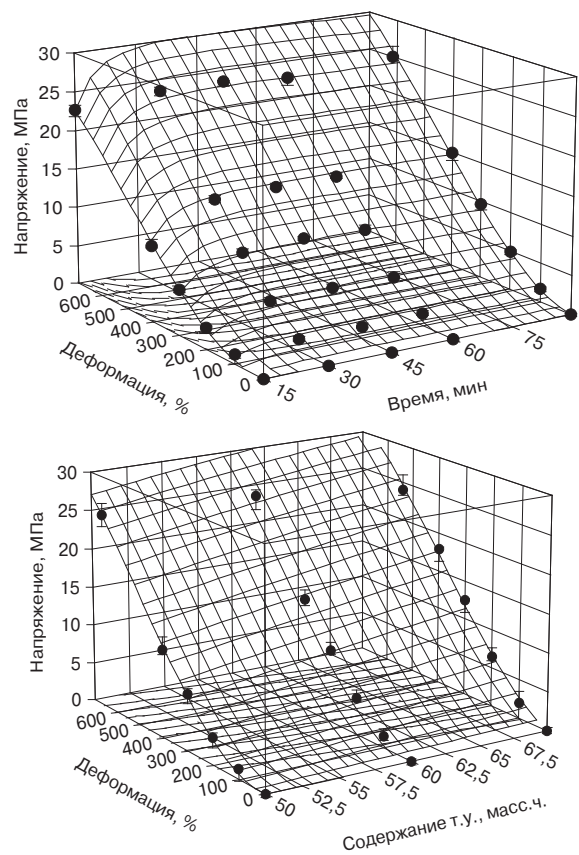


Рис. 9.51. Кривые напряжение–деформация

С использованием системы *Table Curve 3D* получена серия моделей.

Ранг 1 Модель 318 $z = a + b/x + c/y + d/x^2 + e/y^2 + f/(xy) + g/x^3 + h/y^3 + i/(xy^2) + j/(x^2y)$;

Ранг 298 Модель 310 $z = a + bx + cy + dx^2 + ey^2 + fxy + gx^3 + hy^3 + ix^2y + jx^2y$;

Ранг 395 Модель 301 $z = a + bx + cy + dx^2 + ey^2 + fxy$.

Результаты статистического анализа представлены в табл. 9.48.

Таблица 9.48. Критерии качества модели

Модель	Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
318	0,9932077506	0,9856608067	0,0002400785	162,4740341
310	0,924952189	0,8415657324	0,000798023	13,694265579
301	0,4416177614	0,1839028821	0,0018397049	2,214486147

Рассмотрение таблицы, в которой приводятся критерии качества трех моделей, убеждает нас в том, что полином второго порядка в данном случае не может быть принят в качестве аппроксимирующей модели. Здесь низкие значения коэффициентов детерминации и критерия Фишера и большая стандартная ошибка. Невязка (различие экспериментальных и рассчитанных значений отклика) в ряде случаев превышает 20%. Так что использование модели третьего порядка следует признать оправданным.

Было рассмотрено две таких модели: одна относительно факторов x_1 и x_2 , а другая — относительно обратных величин. Во втором случае невязки не превышали долей процента, а в первом случае были не более 3%, что вполне приемлемо для такого материала. Однако представляло интерес построить изолинии для обеих моделей и сопоставить их характер.

Для построения использовалась система *MATLAB*.

Окончательные построения семейств изолиний для двух моделей показаны на рис. 9.52.

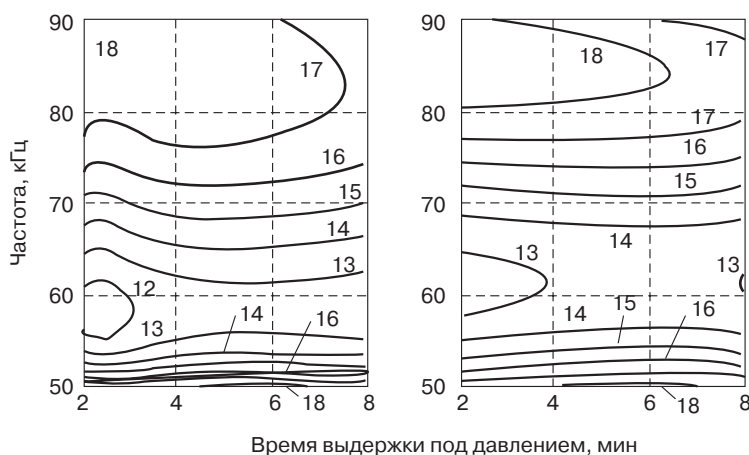


Рис. 9.52. Изолинии тангенса угла диэлектрических потерь ($\text{tg}\delta \cdot 10^2$).

Приведем фрагмент программы.

```
>> B1=[-0.18282555 0.107195296 41.75647061 -0.17959921 -2911.90887  
-6.91727963 0.16448 65983.80902 170.201271 1.691570048]'; (ПАРА-  
МЕТРЫ МОДЕЛИ 318)  
>> B2=[0.321372857 -0.00047574 -0.01326492 -3.875e-05 0.000185598  
3.265e-05 -3.3333e-06 -8.3958e-07 -3.5714e-07 8.75e-07]'; (ПАРА-  
МЕТРЫ МОДЕЛИ 310)  
>> [x,y]=meshgrid(2:6/60:8, 50:40/60:90); (ОБЛАСТЬ ИЗМЕНЕНИЯ  
ФАКТОРОВ)  
>> U1=B1(1)+B1(2)./x+B1(3)./y+B1(4)./x./x+B1(5)./y./y+
```

```

B1(6)./x./y+B1(7)./x./x./x+B1(8)./y./y./y+B1(9)./x./y./
y+B1(10)./x./x./y;
>> U2=B2(1)+B2(2).*x+B2(3).*y+B2(4).*x.*x+B2(5).*y.*y+
B2(6).*x.*y+B2(7).*x.*x.*x+B2(8).*y.*y.*y+B2(9).*x.*y.*y+B2(10)
.*x.*x.*y;
(ВВОД ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ)
>> [min(min(U1)) min(min(U2)) max(max(U1)) max(max(U2)) ]
ans = 11.520640685e-003 12.659265587e-003 18.295374629e-003
18.756115507e-003
(ЗАПРОС ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ОТКЛИКА)
>> v1=[.012:.001:.018]; v2=[.013:.001:.018]; (ВВОД ЗНАЧЕНИЙ ОТ-
КЛИКА, ОТОБРАЖАЕМЫХ В ВИДЕ ИЗОЛИНИЙ)
>> subplot(1,2,1);contour(x,y,U1,v);grid
>> subplot(1,2,2);contour(x,y,U2,v);grid (ВВОД ДВУХ ГРАФИКОВ)

```

Пример. Исследовать зависимость твердости резин на основе хлоропренового каучука от трех переменных: содержания (x_1) технического углерода П 367-Э (20–40 масс. ч.); (x_2) технического углерода П 701 (25–45 масс. ч.) и (x_3) волокнистого наполнителя (12–18 масс. ч.).

Задача решается в следующей последовательности.

1. В системе *MATLAB* реализуется программа вычисления параметров модели; раздел программы, связанный с проверкой значимости коэффициентов и оценкой качества модели опущен, т. к. этот вопрос был рассмотрен ранее.

```

>> x1=[20;40;20;40;20;40;30;30;30;30;30]; (ВВОД ЗНАЧЕНИЙ ФАКТО-
РОВ)
>> x2=[25;25;45;45;35;35;25;45;35;35;35];
>> x3=[18;12;12;18;15;15;15;15;12;18;12];
>> y=[87.2;86.1;86.8;86.4;84.4;92.1;86.4;90.1;87.2;89.2;89.0];
(ВВОД СТОЛБЦА ТВЕРДОСТИ)
>> n=max(size(y)); (РАЗМЕР СТОЛБЦА)
>> x0=ones(n,1); (ФОРМИРОВАНИЕ СТОЛБЦА ЕДИНИЦ)
>> z=[x0 x1 x2 x3 x1.*x2 x1.*x3 x2.*x3 x1.^2 x2.^2 x3.^2];
(МАТРИЦА ПЛАНИРОВАНИЯ)
>> B=(inv(z'*z))*(z'*y); (РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ПОЛИНОМА ВТОРОГО ПО-
РЯДКА)
>> B= -74.3406 2.0612 3.1188 9.0292 -0.0037 -0.0625 -0.1408
-0.0101 -0.0101 -0.0681

```

Полученная модель вводится в редактор системы *Table Curve 3D* в окне *View* и далее *Function(XY)*.

A=20 (ЗАДАЕТСЯ ЗНАЧЕНИЕ X_1 – ТЕХНИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА П 367-Э)
Z=-74.3406+2.0612*A+3.1188*X+9.0292*Y-0.0037*A*X... (УРАВНЕНИЕ)

Далее формируется и редактируется показанное на рис. 9.53 пространственное изображение $y = f(x_2, x_3)$. Если это необходимо, строится контурный график (семейство линий равного уровня) в системе *MATLAB*.

Обозначая через A другой фактор в уравнении, можно построить любое сечение куба, образующего факторное пространство с координатами x_1, x_2 и x_3 .

Аналогичным образом можно ввести уравнение с любым количеством факторов, и тогда появятся буквы (константы) B, C, D . И строятся, попарно варьируя факторы, требуемые изображения.

Пример. Исследовать зависимость комплекса физико-механических характеристик протекторных резин на основе комбинации натурального каучука и винил-бутиadiенового каучука *VBR* (80% винила), (*Raojia Cheng*, 2002).

Таблица 9.49. План и экспериментальные результаты

№	Факторы					Свойства				
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5
1	25,5	1,30	1,30	7	0	22,7	12,7	58,4	18,3	26,4
2	18,5	1,85	0,40	10	24	20,6	7,7	43,3	18,2	23,0
3	32,5	1,85	1,30	6	28	19,5	12,3	30,5	18,5	22,7
4	32,5	2,00	0,55	8	20	19,0	10,5	39,3	17,3	22,4
5	22	2,15	1,00	9	8	23,3	10,7	60,2	19,7	20,2
6	25	1,80	0,90	8	25	23,6	10,1	47,5	19,6	17,0
7	29	1,55	0,70	6	44	21,3	7,7	43,7	24,8	22,1
8	15	1,40	0,55	8	48	21,2	7,1	57,3	23,4	17,7
9	18,5	1,70	1,15	7	32	24,9	11,3	53,2	18,0	18,3
10	35	2,15	0,85	6	12	16,9	12,6	35,0	16,5	21,7
11	25,5	1,40	0,40	9	50	21,9	5,5	51,2	20,7	27,0
12	15	1,55	0,85	10	40	22,4	8,3	56,0	16,1	17,6
13	29	1,70	1,00	9	36	23,1	9,9	47,6	18,3	17,3
14	25	1,80	0,90	8	25	23,9	10,5	48,0	18,7	17,7
15	35	2,30	1,15	8	4	16,5	13,4	51,4	20,2	22,0
16	22	2,00	0,70	7	16	23,7	10,6	48,0	19,0	16,9

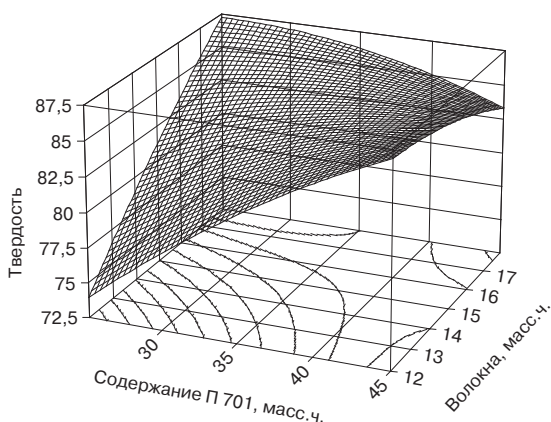


Рис. 9.53. Поверхность отклика

Исследованы следующие факторы (масс. ч.): содержание каучука *VBR* (x_1 , 15–35); содержание серы (x_2 , 1,4–2,3); содержание N-циклогексил-2-бензтиазолилсульфенамида (x_3 , 0,4–1,3); содержание масла (x_4 , 6–10); содержание технического углерода *ISAF* (x_5 , 0–50). При введении НК технический углерод *ISAF* пропорционально заменялся на *HAF*. Отклики: условная прочность при растяжении (y_1 , МПа); условное напряжение при удлинении 300% (y_2 , МПа); сопротивление раздиру (y_3 , кН/м); теплообразование (y_4 , °С); оптимальное время вулканизации (y_5 , мин).

Уровни варьирования факторов и полученные результаты даны в табл. 9.49.

В работе реализован униформ-план, особенность которого состоит в том, что вычисляются вспомогательные отклики z как функции перечисленных факторов в виде полиномов второго порядка. А собственно отклики вычисляются как линейные функции z .

В качестве примера покажем результаты вычислений для условного напряжения при удлинении 300%.

$$y_2 = -0,4932 - 0,0152z_1 + 1,0511z_2 + 0,3020z_3 - 0,3192z_4;$$

$$z_1 = -12,4303 - 0,3746x_1 + 23,5411x_2 + 0,5551x_1x_2 - 0,0117x_1^2 - 8,5891x_2^2;$$

$$z_2 = 6,4937 - 14,1970x_2 + 24,8549x_3 - 12,7956x_2x_3 + 8,0024x_2^2 + 1,6267x_3^2;$$

$$z_3 = -38,7529 + 33,4989x_3 + 3,8941x_4 - 0,9750x_3x_4 - 5,4121x_3^2 - 0,1685x_4^2;$$

$$z_4 = 13,1020 - 0,6532x_3 - 0,2625x_5 + 0,1470x_3x_5 + 0,5038x_3^2 + 0,0010x_5^2.$$

На рис. 9.54 приведены линии равного уровня для условного напряжения при удлинении 300% при стабилизированных значениях содержания полибутадиена (25 масс. ч.), серы (2,0 масс. ч.) и ускорителя (1,0 масс. ч.). Варьируется содержание масла и технического углерода *ISAF* в комбинации с *HAF* при их общем содержании 50 масс. ч.

Вариант программы для расчетов приводится ниже.

```

>> x1=25;x2=2;x3=1;
>> [x4,x5]=meshgrid(6:4/60:10, 0:50/60:50);
>> z1=-12.4303-0.3746*x1+23.5411*x2+0.5551*x1.*x2-0.0117*x1.^2-
8.5891*x2.^2;
>> z2=6.4937-14.1970*x2+24.8549*x3-12.7956*x2.*x3+8.0024*x2.^2
+1.6267*x3.^2;
>> z3=-38.7529+33.4989*x3+3.8941*x4-0.9750*x3.*x4-5.4121*x3.^2-
0.1685*x4.^2;
>> z4=13.1020-0.6532*x3-0.2625*x5+0.1470*x3.*x5+0.5038*x3.^2+0
.0010*x5.^2;
>> y=-0.4932-0.0152*z1+1.0511*z2+0.3020*z3-0.3192*z4;
>> [min(min(y)) max(max(y)) ]
ans =      6.99756015000000e+000      8.40354157222222e+000
>>p=[7:.2:8.4]';
>>contour(x4,x5,y,p);grid

```

$$\begin{aligned}
 \frac{dF}{db_{11}} &= 2 \cdot \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (f(x) - \bar{f}) \frac{d}{db_{11}} (f(x) - \bar{f}) dx; \\
 f(x) &= b_0 + 0,5(A - B)x + b_{11}x^2; \\
 f(x) - \bar{f} &= 0,5(A - B)x + b_{11}x^2 - b_{11}/3; \\
 \frac{dF}{db_{11}} &= \int_{-1}^1 \left(\frac{A - B}{2}x + b_{11}x^2 - \frac{b_{11}}{3} \right) \left(x^2 - \frac{1}{3} \right) dx = 0; \\
 \frac{d}{db_{11}} (f(x) - \bar{f}) &= x^2 - 1/3.
 \end{aligned}$$

Рис. 9.54. Концентрационные треугольники

9.4. Построение диаграмм состав–свойство

Частным случаем решения задачи описания почти стационарной области является построение регрессионных моделей для систем, являющихся смесями двух и более различных компонентов. Переменные x_i таких систем являются пропорциями (относительным содержанием) нескольких (например, трех) компонентов смеси и удовлетворяют условию

$$\Sigma x_i = x_1 + x_2 + x_3 = 1. \quad (9.24)$$

Геометрическое место точек, удовлетворяющих условию нормированности сумм переменных, представляет собой двумерный *симплекс* (треугольник). Каждой точке симплекса соответствует смесь определенного состава, и любой комбинации относительных содержаний трех компонентов соответствует определенная точка симплекса.

В рассматриваемой нами ситуации вершины симплекса соответствуют 100%-ном содержанию каждого компонента; стороны треугольника, лежащие напротив этих вершин, соответствуют нулевому содержанию данного компонента; относительное содержание каждого компонента откладывается вдоль соответствующей стороны треугольника состава. Состав может быть выражен в мольных, массовых и объемных долях или в процентах.

Опустив из каждой вершины треугольника высоту, разделив каждую из них на десять равных по величине отрезков и проведя через полученные деления прямые, параллельные сторонам треугольника, получим треугольную сетку. Приближение от каждой данной стороны к противоположной вершине отвечает пропорциональному возрастанию содержания соответствующего компонента, поэтому прямые, параллельные данной стороне, при последовательном переходе от одной прямой к другой отражают возрастание третьего компонента на 10%.

На рис. 9.55 [7, с. 250] слева на соответствующих высотах треугольника указано содержание каждого из компонентов (в точке d — 30% A и 70% C). Практически большей частью не прибегают к построению высот, можно откладывать содержание компонентов непосредственно на сторонах треугольника. Такой способ отсчета принят в треугольнике Гиббса. В треугольнике Розебума (справа) состав тройной системы отсчитывается по трем отрезкам одной стороны треугольника. В концентрационном треугольнике точки, лежащие на прямой, выходящей из вершины треугольника, соответствуют смесям с постоянным отношением содержаний компонентов, изображаемых двумя другими вершинами. Свойство (y) обычно представляют проекциями линий равного значения на плоскость концентрационного треугольника.

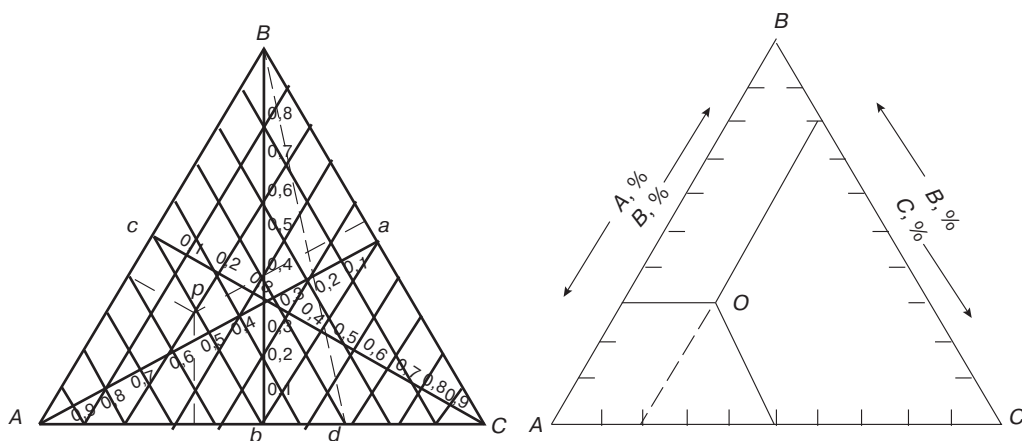


Рис. 9.55. Концентрационные треугольники

При числе компонентов $q = 4$ правильный симплекс — тетраэдр, каждая вершина которого соответствует чистым компонентам. Ребро представляет собой двухкомпонентную систему, грань — трехкомпонентную. Точки внутри тетраэдра соответствуют

четырёхкомпонентным системам. Так, компонент x_1 отсутствует на грани x_2, x_3, x_4 , а по сечениям тетраэдра, приближающимся к вершине x_1 , содержание компонента x_1 увеличивается.

Представление кривых свойств этой системы на плоскости не представляется возможным. Поэтому графически такую систему представляют в виде сечений трехмерного симплекса плоскостями, перпендикулярными одной из его осей. Состав четырехкомпонентных смесей, лежащих в плоскости сечения, определяется уже двумерным симплексом, что позволяет изменение свойств системы представлять в виде контурных кривых. При этом в одном сечении варьируют только тремя компонентами. Переход от одного сечения к другому соответствует изменению четвертого компонента.

Для решения задачи построения диаграммы свойство–состав на симплексе целесообразно рассматривать модель $y = y(x_1, x_2, x_3)$ (y — отклик) в форме приведенного полинома. Такие приведенные полиномы для трехкомпонентных смесей показаны ниже.

Модель второго порядка для трех переменных:

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3. \quad (9.25)$$

Неполная кубическая модель:

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3. \quad (9.26)$$

Модель третьего порядка:

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \gamma_{12}(x_1 - x_2) + \gamma_{13}(x_1 - x_3) + \gamma_{23}(x_2 - x_3) + \beta_{123} x_1 x_2 x_3. \quad (9.27)$$

Модель четвертого порядка:

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \gamma_{12}(x_1 - x_2) + \gamma_{13}(x_1 - x_3) + \gamma_{23}(x_2 - x_3) + \delta_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2)^2 + \delta_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3)^2 + \delta_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3)^2 + \beta_{1123} x_1^2 x_2 x_3 + \beta_{1223} x_1 x_2^2 x_3 + \beta_{1233} x_1 x_2 x_3^2. \quad (9.28)$$

Полиномы такого вида получаются из обычных полиномов соответствующей степени введением соотношения (9.24).

Так, например, полином второй степени, в общем случае имеющий вид

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + b_{33} x_3^2, \quad (9.29)$$

в приведенной форме с учетом условия (9.24) приобретет форму (9.25).

При переходе к приведенной форме (9.25) постоянный член b_0 исключается из уравнения (9.27) умножением обеих сторон (9.24) на b_0 :

$$b_0 x_1 + b_0 x_2 + b_0 x_3 = b_0 \quad (9.30)$$

и подстановкой полученных результатов в уравнение (9.29):

$$y = (b_0 + b_1)x_1 + (b_0 + b_2)x_2 + (b_0 + b_3)x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2. \quad (9.31)$$

Исключения квадратичных членов в (9.29) можно достичь подстановкой в уравнение (9.31) вместо величин x_1^2, x_2^2 и x_3^2 значений

$$x_1^2 = x_1 - x_1x_2 - x_1x_3, \quad x_2^2 = x_2 - x_1x_2 - x_2x_3, \quad x_3^2 = x_3 - x_1x_3 - x_2x_3, \quad (9.32)$$

образованных путем умножения соотношения (9.24) соответственно на x_1, x_2 и x_3 :

$$y = (b_0 + b_1 + b_{11})x_1 + (b_0 + b_2 + b_{22})x_2 + (b_0 + b_3 + b_{33})x_3 + (b_{12} - b_{11} - b_{22})x_1x_2 + (b_{13} - b_{11} - b_{33})x_1x_3 + (b_{23} - b_{22} - b_{33})x_2x_3. \quad (9.33)$$

Введя обозначения

$$\begin{aligned} \beta_1 &= b_0 + b_1 + b_{11}; & \beta_2 &= b_0 + b_2 + b_{22}; & \beta_3 &= b_0 + b_3 + b_{33}; \\ \beta_{12} &= b_{12} - b_{11} - b_{22}; & \beta_{13} &= b_{13} - b_{11} - b_{33}; & \beta_{23} &= b_{23} - b_{22} - b_{33}, \end{aligned} \quad (9.34)$$

получим приведенную форму (9.25) уравнения (9.29).

Для оценки коэффициентов приведенных полиномов (9.25)–(9.28) были предложены *симплекс-решетчатые планы* [3, с. 687–692; 7, с. 249–270; 10, с. 186–197; 12, с. 186–215; 13, с. 69–74; 14, с. 285–289; 20, с. 63–72; 21, с. 18–20; 22, с. 34–70; 26, с. 191–208; 27, с. 286–291]

В табл. 9.50 представлено расположение точек (матрица планирования) и обозначение откликов для случая модели второго порядка (9.25).

Таблица 9.50. Матрица планирования модели второго порядка

Отклик	Координаты точек			Отклик	Координаты точек		
	x_1	x_2	x_3		x_1	x_2	x_3
y_1	1	0	0	y_{12}	1/2	1/2	0
y_2	0	1	0	y_{13}	1/2	0	1/2
y_3	0	0	1	y_{23}	0	1/2	1/2

Из табл. 9.50 видно, что для построения модели второго порядка реализуются точки в вершинах треугольника и в серединах его сторон. Для построения неполной кубической модели (9.26) добавляется экспериментальная точка в центре треугольника (табл. 9.51). План, использующий все точки плана предшествующей по сложности модели, называется композиционным. Следовательно, план, реализуемый для построения неполной кубической модели, будет композиционным по отношению к плану, использованному для построения модели второго порядка.

Таблица 9.51. Матрица планирования неполной кубической модели

Отклик	Координаты точек			Отклик	Координаты точек		
	x_1	x_2	x_3		x_1	x_2	x_3
y_1	1	0	0	y_{12}	1/2	1/2	0
y_2	0	1	0	y_{13}	1/2	0	1/2
y_3	0	0	1	y_{23}	0	1/2	1/2
				y_{123}	1/3	1/3	1/3

Таблица 9.52. Матрица планирования кубической модели

Отклик	Координаты точек			Отклик	Координаты точек		
	x_1	x_2	x_3		x_1	x_2	x_3
y_1	1	0	0	y_{113}	2/3	0	1/3
y_2	0	1	0	y_{133}	1/3	0	2/3
y_3	0	0	1	y_{223}	0	2/3	1/3
y_{112}	2/3	1/3	0	y_{233}	0	1/3	2/3
y_{122}	1/3	2/3	2/3	y_{123}	1/3	1/3	1/3

Иначе обстоит дело при переходе к модели третьего порядка (9.27). Здесь реализуется 10 точек: три в вершинах треугольника, одна — в центре и по две на каждой из сторон (табл. 9.52). Этот план не является композиционным по отношению к предыдущему. Модель четвертого порядка требует для своего построения 15-ти точек: три в вершинах треугольника, по три на каждой из сторон и три точки во внутренней области симметрично относительно центра (табл. 9.53).

Ниже приводится схема расположения экспериментальных точек в симплексных решетках (рис. 9.56).

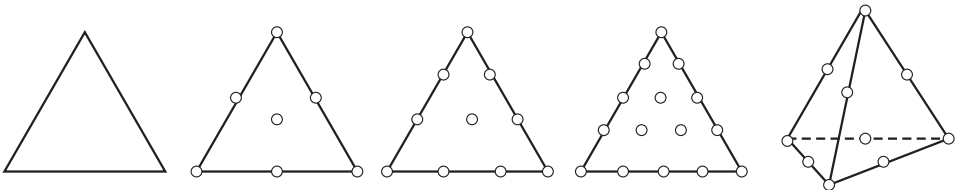


Рис. 9.56. : Некоторые {q,n}-решетки, q – число компонентов смеси, n – степень полинома

Таблица 9.53. Матрица планирования модели четвертого порядка

Отклик	Координаты точек			Отклик	Координаты точек		
	x_1	x_2	x_3		x_1	x_2	x_3
y_1	1	0	0	y_{1222}	1/4	3/4	0
y_2	0	1	0	y_{1333}	1/4	0	3/4
y_3	0	0	1	y_{2223}	0	3/4	1/4
y_{12}	1/2	1/2	0	y_{2333}	0	1/4	3/4
y_{13}	1/2	0	1/2	y_{1123}	1/2	1/4	1/4
y_{23}	0	1/2	1/2	y_{1223}	1/4	1/2	1/4
y_{1112}	3/4	1/4	0	y_{1233}	1/4	1/4	1/2
y_{1113}	3/4	0	1/4				

Оценка коэффициентов приведенных полиномов может производиться по упрощенным расчетным формулам. Поскольку симплекс-решетчатые планы являются *насыщенными*, для получения расчетных формул в полином последовательно подставляются координаты всех точек плана, а вместо откликов — соответствующие данным точкам значения y .

Например, $y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3$.

Если $x_1 = 1$, все просто: $y_1 = \beta_1 \cdot 1 + \beta_2 \cdot 0 + \beta_3 \cdot 0 + \beta_{12} \cdot 1 \cdot 0 + \beta_{13} \cdot 1 \cdot 0 + \beta_{23} \cdot 0 \cdot 0 \rightarrow \beta_1 = y_1$.

Если $x_1 = 0,5$ и $x_2 = 0,5$, $y_{12} = \beta_1 \cdot 0,5 + \beta_2 \cdot 0,5 + \beta_3 \cdot 0 + \beta_{12} \cdot 0,5 \cdot 0,5 + \beta_{13} \cdot 0,5 \cdot 0 + \beta_{23} \cdot 0,5 \cdot 0 = y_1 \cdot 0,5 + y_2 \cdot 0,5 + \beta_{12} \cdot 0,25 \rightarrow \beta_{12} = 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2$.

Формулы для вычисления параметров модели второго порядка (9.25):

$$\beta_1 = y_1; \beta_2 = y_2; \beta_3 = y_3; \beta_{12} = 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2; \beta_{13} = 4y_{13} - 2y_1 - 2y_3; \beta_{23} = 4y_{23} - 2y_2 - 2y_3. \quad (9.35)$$

Формулы для вычисления параметров неполной кубической модели (9.26):

$$\begin{aligned} \beta_1 &= y_1; \beta_2 = y_2; \beta_3 = y_3; \beta_{12} = 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2; \\ \beta_{13} &= 4y_{13} - 2y_1 - 2y_3; \beta_{23} = 4y_{23} - 2y_2 - 2y_3; \\ \beta_{123} &= 27 y_{123} - 12(y_{12} + y_{13} + y_{23}) + 3(y_1 + y_2 + y_3). \end{aligned} \quad (9.36)$$

Формулы для вычисления параметров кубической модели (9.27):

$$\beta_1 = y_1; \beta_2 = y_2; \beta_3 = y_3; \beta_{12} = 9(y_{112} + y_{122} - y_1 - y_2)/4; \beta_{13} = 9(y_{113} + y_{133} - y_1 - y_3)/4;$$

$$\begin{aligned}
\beta_{23} &= 9(y_{223} + y_{233} - y_2 - y_3)/4; \gamma_{12} = 9(3y_{112} - 3y_{122} - y_1 + y_2)/4; \\
\gamma_{13} &= 9(3y_{113} - 3y_{133} - y_1 + y_3)/4; \gamma_{23} = 9(3y_{223} - 3y_{233} - y_2 + y_3)/4; \\
\beta_{123} &= 27y_{123} - 27(y_{112} + y_{122} + y_{113} + y_{133} + y_{223} + y_{233})/4 + 9(y_1 + y_2 + y_3)/2. \quad (9.37)
\end{aligned}$$

Формулы для вычисления параметров модели четвертого порядка (9.28):

$$\begin{aligned}
\beta_1 &= y_1; \beta_2 = y_2; \beta_3 = y_3; \beta_{12} = 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2; \beta_{13} = 4y_{13} - 2y_1 - 2y_3; \beta_{23} = 4y_{23} - 2y_2 - 2y_3; \quad (9.38) \\
\gamma_{12} &= 8(-y_1 + 2y_{112} - 2y_{122} + y_2)/3; \quad \delta_{12} = 8(-y_1 + 4y_{112} - 6y_{12} + 4y_{122} - y_2)/3; \\
\gamma_{13} &= 8(-y_1 + 2y_{113} - 2y_{133} + y_3)/3; \quad \delta_{13} = 8(-y_1 + 4y_{113} - 6y_{13} + 4y_{133} - y_3)/3; \\
\gamma_{23} &= 8(-y_2 + 2y_{223} - 2y_{233} + y_3)/3; \quad \delta_{23} = 8(-y_2 + 4y_{223} - 6y_{23} + 4y_{233} - y_3)/3; \\
\beta_{1123} &= 32(3y_{1123} - y_{1223} - y_{1233}) + 8(6y_1 - y_2 - y_3)/3 - 16(y_{12} + y_{13}) - \\
&\quad - 16(5y_{112} + 5y_{113} - 3y_{122} - 3y_{133} - y_{223} - y_{233})/3; \\
\beta_{1223} &= 32(3y_{1223} - y_{1123} - y_{1233}) + 8(6y_2 - y_1 - y_3)/3 - 16(y_{12} + y_{23}) - \\
&\quad - 16(5y_{122} + 5y_{223} - 3y_{112} - 3y_{233} - y_{113} - y_{133})/3; \\
\beta_{1233} &= 32(3y_{1233} - y_{1123} - y_{1233}) + 8(6y_3 - y_1 - y_2)/3 - 16(y_{13} + y_{23}) - \\
&\quad - 16(5y_{133} + 5y_{233} - 3y_{113} - 3y_{223} - y_{112} - y_{122})/3.
\end{aligned}$$

Если в каждой точке симплексной решетки проводится одинаковое число наблюдений, равное r , то формулы для дисперсии предсказанного значения исследуемого свойства $S^2\{y\}$ примут вид:

$$S^2\{y\} = S_E^2 \times \xi / r, \quad (9.39)$$

где S_E^2 — ошибка опыта (дисперсия воспроизводимости);

Для трехкомпонентных смесей значения ξ могут быть представлены графически проекциями линий уровня на симплекс (рис. 9.57) [7, с. 263–264; 12, с. 204; 22, с. 53–54; 26, с. 193].

Тогда, зная дисперсию S_E^2 и число параллельных опытов r , легко найти дисперсии предсказанного значения исследуемого свойства в любой точке диаграммы состав–свойство, снимая соответствующие значения ξ с графика.

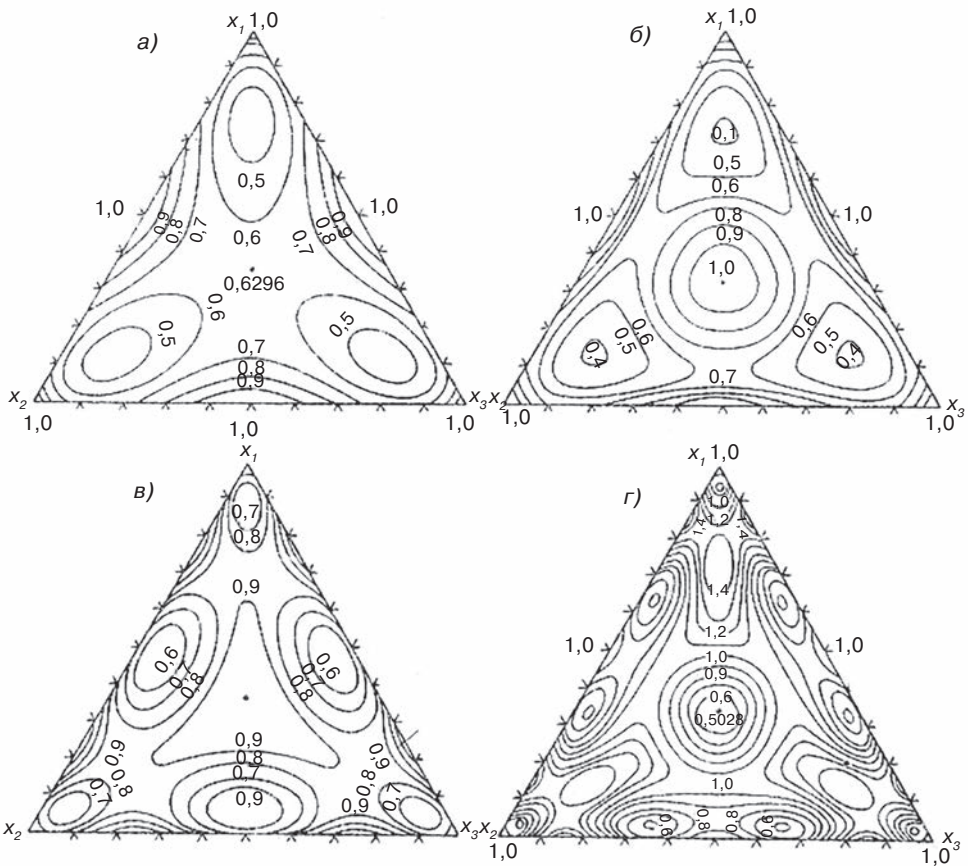
На рис. 9.57, *a* позиция соответствует полиномам второго порядка, график 9.57, *б* построен для полинома неполного третьего порядка, график 9.57, *в* отвечает полиному третьего порядка и, наконец, 9.57, *г* — полиному четвертой степени.

Формулы для расчета параметра ξ имеют следующий вид:

$$\xi = a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + a_{12}^2 + a_{13}^2 + a_{23}^2 \text{ — для модели второго порядка;}$$

$$\xi = b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 + b_{12}^2 + b_{13}^2 + b_{23}^2 + b_{123}^2 \text{ — для неполной кубической модели;}$$

$$\xi = c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_{112}^2 + c_{122}^2 + c_{113}^2 + c_{133}^2 + c_{223}^2 + c_{233}^2 + c_{123}^2 \text{ — для модели третьего порядка.}$$

Рис. 9.57. Проекция параметра ξ

$\xi = d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 + d_{12}^2 + d_{13}^2 + d_{23}^2 + d_{1112}^2 + d_{1222}^2 + d_{1113}^2 + d_{1333}^2 + d_{2223}^2 + d_{2333}^2 + d_{1123}^2 + d_{1223}^2 + d_{1233}^2$ — для модели четвертого порядка.

$$\begin{aligned}
 a_1 &= x_1(2x_1 - 1); a_2 = x_2(2x_2 - 1); a_3 = x_3(2x_3 - 1); a_{12} = 4x_1x_2; a_{13} = 4x_1x_3; a_{23} = 4x_2x_3; \\
 b_1 &= x_1(6x_1^2 - 2x_1 + 1)/2 - 3(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2); b_{12} = 4x_1x_2(3x_1 + 3x_2 - 2); \\
 b_2 &= x_2(6x_2^2 - 2x_2 + 1)/2 - 3(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2); b_{13} = 4x_1x_3(3x_1 + 3x_3 - 2); \\
 b_3 &= x_3(6x_3^2 - 2x_3 + 1)/2 - 3(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2); b_{23} = 4x_2x_3(3x_2 + 3x_3 - 2); b_{123} = 27x_1x_2x_3; \\
 c_1 &= x_1(3x_1 - 1)(3x_1 - 2)/2; c_2 = x_2(3x_2 - 1)(3x_2 - 2)/2; c_3 = x_3(3x_3 - 1)(3x_3 - 2)/2; \\
 c_{112} &= 9x_1x_2(3x_1 - 1)/2; c_{122} = 9x_1x_2(3x_2 - 1)/2; c_{113} = 9x_1x_3(3x_1 - 1)/2; \\
 c_{133} &= 9x_1x_3(3x_3 - 1)/2; c_{223} = 9x_2x_3(3x_2 - 1)/2; c_{233} = 9x_2x_3(3x_3 - 1)/2; c_{123} = 27x_1x_2x_3; \\
 d_1 &= x_1(4x_1 - 1)(4x_1 - 2)(4x_1 - 3)/6; d_2 = x_2(4x_2 - 1)(4x_2 - 2)(4x_2 - 3)/6; d_3 = \\
 &= x_3(4x_3 - 1)(4x_3 - 2)(4x_3 - 3)/6;
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d_{12} &= 4x_1x_2(4x_1 - 1)(4x_2 - 1); d_{13} = 4x_1x_3(4x_1 - 1)(4x_3 - 1); d_{23} = 4x_2x_3(4x_2 - 1)(4x_3 - 1); \\
d_{1112} &= 8x_1x_2(4x_1 - 1)(4x_1 - 2)/3; d_{1113} = 8x_1x_3(4x_1 - 1)(4x_1 - 2)/3; d_{2223} = \\
&= 8x_2x_3(4x_2 - 1)(4x_2 - 2)/3; \\
d_{1222} &= 8x_1x_2(4x_2 - 1)(4x_2 - 2)/3; d_{1333} = 8x_1x_3(4x_3 - 1)(4x_3 - 2)/3; d_{2333} = \\
&= 8x_2x_3(4x_3 - 1)(4x_3 - 2)/3; \\
d_{1123} &= 32x_1x_2x_3(4x_1 - 1)3; d_{1223} = 32x_1x_2x_3(4x_2 - 1)3; d_{1233} = 32x_1x_2x_3(4x_3 - 1)3.
\end{aligned}$$

Так как в выражении (9.39) S_E^2/r зависит от экспериментальной ситуации, а ξ — только от состава смеси (ξ является функцией только координат точек симплекса), то значения ξ можно заранее вычислить. Эта величина нигде не превышает единицу, а максимальное значение $\xi = 1$ достигается в экспериментальных точках.

Адекватность полученной модели проверяется по критерию Стьюдента:

$$t = \Delta y / (S_E^2(1 + \xi))^{1/2}, \quad (9.40)$$

где $\Delta y = |y_{\text{расч}} - y_{\text{сп}}|$ — модуль разности отклика, рассчитанного по уравнению, и среднего отклика, определенного экспериментально в проверочной точке по r повторным наблюдениям. Эти вычисления следует производить отдельно по каждой проверочной точке.

Это значение критерия сравнивается с табличным при числе степеней свободы $v = p(r - 1)$ (p — количество коэффициентов в модели) и уровне значимости $\alpha = 5\%$. Условие адекватности: $t_{\text{расч}} < t_{\text{табл}}$.

Кроме симплекс-решетчатых планов разработан целый ряд планов, позволяющих решать самые разнообразные задачи. Можно упомянуть симплекс-центроидные планы [7, с. 270–273; 10, с. 197; 12, с. 215–220; 22, с. 70–72], в которых содержится $2^q - 1$ точек, q из которых приходится на чистые компоненты, C_q^2 — на двухкомпонентные смеси, C_q^3 — на трехкомпонентные смеси и т. д. и одно наблюдение — на q -компонентную смесь. Например, для тетраэдра $q = 4$ (четыре вершины), число сочетаний из 4 элементов по 2 $C_4^2 = 4!/((4-2)!2!) = 6$ — точки в середине ребер, число сочетаний из 4 элементов по 3 $C_4^3 = 4!/((4-3)!3!) = 4$ — точки в центрах граней. Всего 15 точек.

Симплекс-симметричные планы [10, с. 198; 12, с. 221–228]. Такие планы представляют собой дальнейшее развитие симплекс-решетчатых планов, направленное на повышение равномерности расположения точек в объеме симплекса. Эти планы являются ненасыщенными, поэтому для статистической обработки опытных данных используют рассмотренный выше регрессионный анализ.

D -оптимальные планы на симплексе выше второго порядка, как и симплекс-решетчатые планы Шеффе, являются насыщенными. Поэтому в данном случае формулы для вычисления коэффициентов и проведения статистического анализа выводят методом подстановки [12, с. 232–252].

Планы Дрепера–Лоуренса [7, с. 289–299; 12, с. 258–290] представляют собой наборы экспериментальных точек, обеспечивающие минимизацию ошибок, связанных с аппроксимацией сложных поверхностей полиномами невысоких порядков. Суммарную ошибку аппроксимации можно разделить на две составляющие: случайную

и систематическую. Первая из них возникает вследствие ошибки воспроизводимости, вторая — ошибки смещения, которая появляется при аппроксимации сложных поверхностей полиномами невысоких порядков. При построении планов рассматривают два направления: минимизацию систематической ошибки и минимизацию суммарной ошибки. Для обоих вариантов получено большое число планов.

Чтобы ориентироваться во всех этих планах, необходимо иметь в виду, что специалист в области переработки эластомеров имеет дело чаще с задачами, которые не требуют использования планов чрезвычайно высоких степеней.

С другой стороны, представляют интерес ситуации, когда требуется описание не всей диаграммы, а лишь ее *локальной области*. Для решения таких задач в резиновой промышленности достаточно широко применяли планы, в которых использовались логарифмические преобразования факторов [16, с. 208–223]. Это был эффективный метод изучения локальной области диаграммы, но затруднения вызывала процедура оценки качества модели.

С нашей точки зрения заслуживает внимания следующий подход к решению рассматриваемой задачи. Пусть имеется три фактора, каждый из которых варьируется в определенной области. Тогда факторное пространство будет представлять собой параллелепипед.

Для простоты рассмотрим куб; такое упрощение принципиального характера не имеет. Если теперь представить себе сечения этого куба диагональными плоскостями $x_1 + x_2 + x_3 = P$, можно построить семейство диаграмм состав–свойство с использованием какого-либо подходящего плана.

Схема такого подхода показана на рис. 9.58.

Здесь каждый фактор изменяется от 0 до 20 единиц. Если $P = 10$, мы получаем диаграмму состав–свойство для этого общего содержания компонентов. Эта диаграмма (как и диаграмма для $P = 20$) полностью находится внутри куба, образующего факторное пространство. Если какой-то компонент содержится в большем количестве, то содержание $x_i - P$ является как бы началом отсчета для этого фактора. При $P > 20$ внутри куба находится уже некоторая часть треугольника состава, т. е. описывается локальная область диаграммы.

Получим формулы для вычисления коэффициентов для полинома второго порядка.

Имеем следующие уравнение регрессии:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2, \quad (9.41)$$

где факторы выражены в натуральном масштабе, а не в долях единицы.

Кроме того, имеем взаимосвязь между факторами, задаваемую сечением:

$$x_1 + x_2 + x_3 = P. \quad (9.42)$$

Отсюда

$$x_1/P + x_2/P + x_3/P = 1;$$

$$x_1 = P - x_2 - x_3; x_2 = P - x_1 - x_3; x_3 = P - x_1 - x_2;$$

$$b_0 = b_0 x_1 / P + b_0 x_2 / P + b_0 x_3 / P;$$

$$x_1^2 = P x_1 - x_1 x_2 - x_1 x_3; x_2^2 = P x_2 - x_1 x_2 - x_2 x_3; x_3^2 = P x_3 - x_1 x_3 - x_2 x_3. \quad (9.43)$$

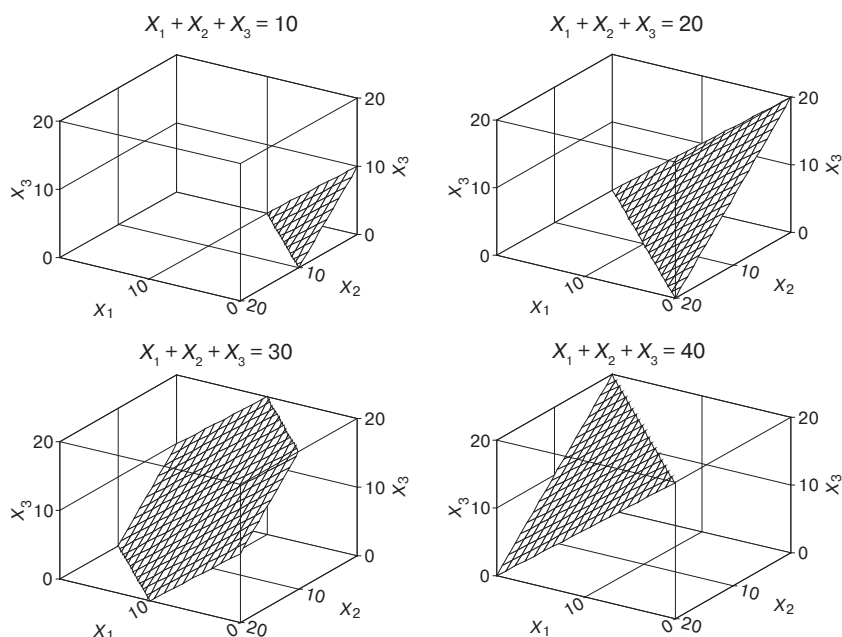


Рис. 9.58. Диаграммы состав–свойство на диагональных сечениях

Подставляя соотношения (9.43) в уравнение (9.41), получим после преобразований:

$$y = (b_0 + b_1 P + b_{11} P^2) \cdot x_1 / P + (b_0 + b_2 P + b_{22} P^2) \cdot x_2 / P + (b_0 + b_3 P + b_{33} P^2) \cdot x_3 / P + \quad (9.44)$$

$$+ (b_{12} - b_{11} - b_{22}) \cdot (x_1 / P) \cdot (x_2 / P) \cdot P^2 + (b_{13} - b_{11} - b_{33}) \cdot (x_1 / P) \cdot (x_3 / P) \cdot P^2 +$$

$$+ (b_{23} - b_{22} - b_{33}) \cdot (x_2 / P) \cdot (x_3 / P) \cdot P^2.$$

В соотношении (9.44) отношение $x_i / P \zeta[0;1]$ представляет собой переменную в условном масштабе.

Пример. Рассмотрим результаты исследования прочности пористых резин на основе комбинации каучуков СКМС-30РП и БС-45К, содержащих три типа порообразователей x_1 – N,N'-динитрозопентаметилентетрамин (ЧХЗ-18), x_2 – азодикарбонамид (ЧХЗ-21), x_3 – бикарбонат натрия.

Матрица планирования и результаты эксперимента представлены в табл. 9.54.

Симплекс-решетчатый план второго порядка.

При реализации плана второго порядка на симплексе экспериментальные точки располагаются в вершинах треугольника и на серединах его сторон.

Точка для проверки адекватности располагалась в центре симплекса.

Таблица 9.54. Координаты точек и результаты эксперимента

Координаты точек			σ , МПа	Координаты точек			σ , МПа
x_1	x_2	x_3		x_1	x_2	x_3	
1	0	0	5,6; 5,9	1/2	1/2	0	4,4; 4,7
0	1	0	3,0; 3,2	1/2	0	1/2	5,1; 5,4
0	0	1	6,0; 6,3	0	1/2	1/2	3,8; 4,0

Вычисление коэффициентов приведенного полинома

Теория.

$$\sigma = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3, x_i \in [0;1],$$

$$\beta_1 = \sigma_1; \beta_2 = \sigma_2; \beta_3 = \sigma_3; \beta_{12} = 4\sigma_{12} - 2\sigma_1 - 2\sigma_2; \beta_{13} = 4\sigma_{13} - 2\sigma_1 - 2\sigma_3; \beta_{23} = 4\sigma_{23} - 2\sigma_2 - 2\sigma_3;$$

Решение,

$$\beta_1 = (5,6 + 5,9)/2 = 5,75; \beta_2 = (3,0 + 3,2)/2 = 3,10; \beta_3 = (6,0 + 6,3)/2 = 6,15;$$

$$\beta_{12} = 4(4,4 + 4,7)/2 - 2(5,6 + 5,9)/2 - 2(3,0 + 3,2)/2 = 0,50;$$

$$\beta_{13} = 4(5,1 + 5,4)/2 - 2(5,6 + 5,9)/2 - 2(6,0 + 6,3)/2 = -2,80;$$

$$\beta_{23} = 4(3,8 + 4,0)/2 - 2(3,0 + 3,2)/2 - 2(6,0 + 6,3)/2 = -2,90.$$

Уравнение регрессии имеет вид:

$$\sigma = 5,75x_1 + 3,10x_2 + 6,15x_3 + 0,50x_1x_2 - 2,80x_1x_3 - 2,90x_2x_3.$$

Проверка однородности дисперсий

Теория.

$$\text{Критерий Кохрена: } G = S_{\max}^2 / \Sigma S_j^2.$$

Решение.

Средние значения: 5,75; 3,10; 6,15; 4,55; 5,25; 3,90.

Дисперсии: 0,045; 0,020; 0,045; 0,045; 0,045; 0,020.

Интерпретация.

Условие однородности дисперсий: $G < G_T$.

$$G = 0,045 / (0,045 + 0,020 + 0,045 + 0,045 + 0,045 + 0,020) = 0,205.$$

$$0,205 < G_{(1;6;0,05)} = 0,781. \text{ Дисперсии однородны.}$$

Расчет дисперсии воспроизводимости

Теория.

$$S_A^2 = \sum_{j=1}^n S_j^2 / N.$$

Значения отклика в проверочной точке ($x_1 = x_2 = x_3 = 1/3$).

Решение.

$$N = 6;$$

$$S_E^2 = (0,045 + 0,020 + 0,045 + 0,045 + 0,045 + 0,020)/6 = 0,037.$$

Значения отклика в проверочной точке 4,1; 4,3. $\sigma_{0cp} = 4,20$ МПа

Проверка адекватности модели

Теория.

$$\xi = a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + a_{12}^2 + a_{13}^2 + a_{23}^2; a_i = x_i(2x_i - 1); a_{ij} = 4x_i x_j.$$

Значения прочности в центре плана (при $x_1 = x_2 = x_3 = 1/3$).

$$t = \Delta\sigma \cdot (r/(S_E^2(1 + \xi)))^{1/2}, v = p(r - 1),$$

$\Delta y = |\sigma_{расч} - \sigma_{ср}|$ — модуль разности отклика, рассчитанного по уравнению, и среднего отклика, определенного экспериментально в проверочной точке по r повторным наблюдениям.

Решение.

$$a_1 = a_2 = a_3 = 1/3 \cdot (2 \cdot 1/3 - 1) = -1/9; a_{12} = a_{13} = a_{23} = 4 \cdot 1/3 \cdot 1/3 = 4/9;$$

$$\xi = 3(-1/9)^2 + 3(4/9)^2 = 0,630.$$

Значения прочности в центре плана:

$$\sigma_{0расч} = 5,75/3 + 3,10/3 + 6,15/3 + 0,50/9 - 2,80/9 - 2,90/9 = 4,42 \text{ МПа.}$$

$$t = |4,42 - 4,20| / (2 / (0,037(1 + 0,630)))^{1/2} = 1,27;$$

$$v = 6(2 - 1) = 6; \alpha = 5\%; t_{(6; 0,05)} = 2,45.$$

Интерпретация.

Условие адекватности: $t_{расч} < t_{табл}$.

$$t_{расч} = 1,27 < t_{табл} = 2,45. \text{ Уравнение адекватно.}$$

Графическое изображение полученной диаграммы состав–свойство в виде семейства изолиний представлено на рис. 9.59.

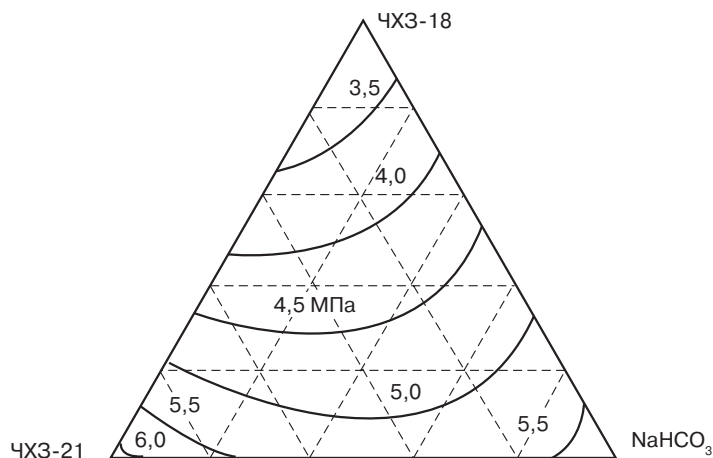


Рис. 9.59. Диаграмма состав–свойство для прочности

Листинг программы для решения рассмотренной задачи с помощью пакета *MATLAB*.

```

N=100; - ЗАДАНИЕ РАЗМЕРОВ МАССИВОВ;
%*****
x=[0:1/N:1]; - ОБЛАСТЬ ИЗМЕНЕНИЯ
y=[0:1/N:1]; ФАКТОРОВ;
N=size(x,2);
for j=1:N
    for i=1:N
        if i<=N-j+1
            X(i,j)=x(i)+y(j)/2;
            Y(i,j)=sqrt(3)*y(j)/2;
            Z(i,j)=5.75*x(i)+3.1*y(j)+6.15*(1-x(i)-y(j))+.5*x(i).*y(j)-
            2.8*x(i).*(1-x(i)-y(j))-2.9*y(j).*(1-x(i)-y(j)); - ЗАПИСЬ УРАВ-
            НЕНИЯ РЕГРЕССИИ;
        else
            X(i,j)=X(i-1,j);
            Y(i,j)=Y(i-1,j);
            Z(i,j)=Z(i-1,j);
        end
    end
end
end
%*****
hold on - ВВОД НОВОГО ГРАФИКА В ТЕКУЩЕЕ ГРАФИЧЕСКОЕ ОКНО;
v=[3.5:.5:6]'; - ИЗОЛИНИИ, КОТОРЫЕ ПОЯВЯТСЯ НА ЭКРАНЕ;
contour(X,Y,Z,v,'-k') - ПОСТРОЕНИЕ ИЗОЛИНИЙ;
plot([0 0.5 1],[0 sqrt(3)/2 0],'k')
plot([0 1],[0 0],'--k') - ПОСТРОЕНИЕ ТРЕУГОЛЬНИКА И СЕТКИ;
plot([.2 .6],[0 0.4*sqrt(3)],':k')
plot([.4 .7],[0 0.3*sqrt(3)],':k')
plot([.6 .8],[0 0.2*sqrt(3)],':k')
plot([.8 .9],[0 0.1*sqrt(3)],':k')
plot([.1 .2],[0.1*sqrt(3) 0],':k')
plot([.2 .4],[0.2*sqrt(3) 0],':k')
plot([.3 .6],[0.3*sqrt(3) 0],':k')
plot([.4 .8],[0.4*sqrt(3) 0],':k')
plot([.1 .9],[0.1*sqrt(3) 0.1*sqrt(3)],':k')
plot([.2 .8],[0.2*sqrt(3) 0.2*sqrt(3)],':k')
plot([.3 .7],[0.3*sqrt(3) 0.3*sqrt(3)],':k')
plot([.4 .6],[0.4*sqrt(3) 0.4*sqrt(3)],':k')
axis equal - ПОСТРОЕНИЕ РАВНОСТОРОННЕГО ТРЕУГОЛЬНИКА;

```

Пример. Рассмотрим результаты исследования теплопроводности (λ , Вт/(м·К)) резин на основе каучука СКИ-3, содержащих 100 масс. ч. порошка алюминия со средним диаметром частиц < 5 мкм (x_1), $5-15$ мкм (x_2) и > 15 мкм (x_3). Матрица планирования и результаты эксперимента представлены в табл. 9.55.

Симплекс-решетчатый план третьего порядка.

При реализации плана третьего порядка на симплексе экспериментальные точки располагаются в вершинах треугольника, на его сторонах в соотношении 1:2 для каждого из факторов и в центре треугольника.

Таблица 9.55. Координаты точек и результаты эксперимента

Координаты точек			λ , Вт/(м·К)	Координаты точек			λ , Вт/(м·К)
x_1	x_2	x_3		x_1	x_2	x_3	
1	0	0	$\lambda_1 = 0,35$	2/3	0	1/3	$\lambda_{113} = 0,40$
0	1	0	$\lambda_2 = 0,32$	1/3	0	2/3	$\lambda_{133} = 0,39$
0	0	1	$\lambda_3 = 0,30$	0	2/3	1/3	$\lambda_{223} = 0,43$
2/3	1/3	0	$\lambda_{112} = 0,40$	0	1/3	2/3	$\lambda_{233} = 0,42$
1/3	2/3	0	$\lambda_{122} = 0,39$	1/3	1/3	1/3	$\lambda_{123} = 0,52$

Вычисление коэффициентов приведенного полинома

$$\lambda = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \gamma_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + \gamma_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \gamma_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \beta_{123} x_1 x_2 x_3, x_i \in [0; 1].$$

Теория.

$$\beta_1 = \lambda_1; \beta_2 = \lambda_2; \beta_3 = \lambda_3;$$

$$\beta_{12} = 9(\lambda_{112} + \lambda_{122} - \lambda_1 - \lambda_2)/4; \beta_{13} = 9(\lambda_{113} + \lambda_{133} - \lambda_1 - \lambda_3)/4; \beta_{23} = 9(\lambda_{223} + \lambda_{233} - \lambda_2 - \lambda_3)/4;$$

$$\gamma_{12} = 9(3\lambda_{112} - 3\lambda_{122} - \lambda_1 + \lambda_2)/4; \gamma_{13} = 9(3\lambda_{113} - 3\lambda_{133} - \lambda_1 + \lambda_3)/4; \gamma_{23} = 9(3\lambda_{223} - 3\lambda_{233} - \lambda_2 + \lambda_3)/4;$$

$$\beta_{123} = 27\lambda_{123} - 27(\lambda_{112} + \lambda_{122} + \lambda_{113} + \lambda_{133} + \lambda_{223} + \lambda_{233})/4 + 9(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)/2.$$

Решение.

$$\beta_1 = 0,35; \beta_2 = 0,32; \beta_3 = 0,30;$$

$$\beta_{12} = 9(0,40 + 0,39 - 0,35 - 0,32)/4 = 0,270;$$

$$\beta_{13} = 9(0,40 + 0,39 - 0,35 - 0,30)/4 = 0,315;$$

$$\beta_{23} = 9(0,43 + 0,42 - 0,32 - 0,30)/4 = 0,518;$$

$$\gamma_{12} = 9(3 \cdot 0,40 - 3 \cdot 0,39 - 0,35 + 0,32)/4 = 0;$$

$$\gamma_{13} = 9(3 \cdot 0,40 - 3 \cdot 0,39 - 0,35 + 0,30)/4 = -0,045;$$

$$\gamma_{23} = 9(3 \cdot 0,43 - 3 \cdot 0,42 - 0,32 + 0,30)/4 = 0,022;$$

$$\beta_{123} = 27 \cdot 0,52 - 27(0,40 + 0,39 + 0,40 + 0,39 + 0,43 + 0,42)/4 + 9(0,35 + 0,32 + 0,30)/2 = 2,00.$$

Уравнение регрессии имеет вид:

$$\lambda = 0,350x_1 + 0,320x_2 + 0,300x_3 + 0,270x_1x_2 + 0,315x_1x_3 + 0,518x_2x_3 - 0,045x_1x_3(x_1 - x_3) + 0,022x_2x_3(x_2 - x_3) + 2,00x_1x_2x_3.$$

Графическое представление полученной диаграммы состав–свойство в виде семейства изолиний дано на рис. 9.60.

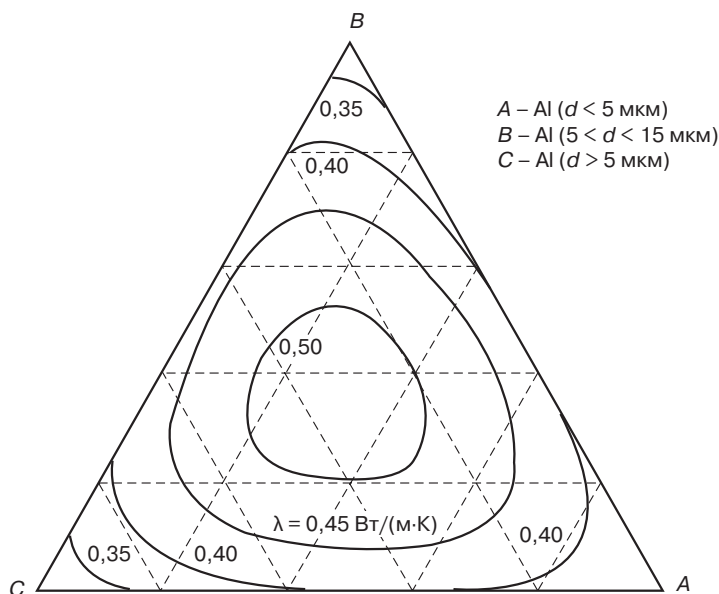


Рис. 9.60. Диаграмма состав–свойство для теплопроводности

Пример. Рассмотрим влияние состава полимерной матрицы на тепловой эффект вулканизации. Все рецептуры содержали 15 %масс. каучука СКМС-30РП и 30 %масс. смеси полимеров: каучук СКД (x_1), полистирол (x_2) и каучук СКМС-30РП (x_3) в различных соотношениях. Все системы содержали порообразователи.

На рис. 9.60 показаны диаграммы состав–свойство при варьировании компонентов полимерной матрицы. Для построения использована приведенная выше программа в системе *MATLAB*. Но в нее были внесены определенные коррективы, которые позволили реализовать процедуру в следующей последовательности.

С использованием программы *Table Curve 3D* формируется модель, включающая два фактора x_1 и x_2 . Затем составляется столбец значений параметров полученной модели b . Этот столбец вводится в командное окно *MATLAB*. Затем открывается программа-модуль для построения диаграмм.

В эту программу заранее внесены возможные уравнения. Такой подход позволяет рассчитать несколько конкурирующих моделей и оценить их статистические характеристики.

В рассматриваемом случае получены следующие модели:

$$310 \quad z = a + bx + cy + dx^2 + ey^2 + fxy + gx^3 + hy^3 + ixy^2 + jx^2y;$$

$$1301 \quad z = (a + cx + ey + gx^2 + iy^2 + kxy)/(1 + bx + dy + fx^2 + hy^2 + jxy);$$

$$301 \quad z = a + bx + cy + dx^2 + ey^2 + fxy;$$

$$65 \quad z = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4 + fx^5 + gy + hy^2 + iy^3 + jy^4 + ky^5;$$

$$50 \quad z = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4 + fy + gy^2 + hy^3 + iy^4 + jy^5.$$

Критерии качества моделей и результаты дисперсионного анализа представлены в табл. 9.56 и 9.57.

Таблица 9.56. Критерии качества моделей

№	Ранг	Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент детерминации	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
310	8	0,9754056724	0,9508113447	3,2501748205	48,473066871
1301	10	0,9714148871	0,9364775269	3,6749847619	33,983244744
301	12	0,9661250983	0,9516072832	3,2664722974	85,561142517
65	28	0,8779919806	0,728871068	7,5924121478	7,196182555
50	39	0,8779902703	0,7559805406	7,2391316847	8,7951938068

Таблица 9.57. Дисперсионный анализ

Модель	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
310	Фактор	$SSR = 4608,4667$	$m - 1 = 9$	$MSR = 512,05185$	$F = 48,4731$
	Ошибка	$SSE = 116,2$	$n - m = 11$	$MSE = 10,563636$	
	Сумма	$SSM = 4724,6667$	$n - 1 = 20$		
1301	Фактор	$SSR = 4589,6115$	$m - 1 = 10$	$MSR = 458,96115$	$F = 33,9832$
	Ошибка	$SSE = 135,0552$	$n - m = 10$	$MSE = 13,505513$	
	Сумма	$SSM = 4724,6667$	$n - 1 = 20$		
301	Фактор	$SSR = 4564,619$	$m - 1 = 5$	$MSR = 912,92381$	$F = 85,5611$
	Ошибка	$SSE = 160,04767$	$n - m = 15$	$MSE = 10,669841$	
	Сумма	$SSM = 4724,6667$	$n - 1 = 20$		
65	Фактор	$SSR = 4148,2194$	$m - 1 = 10$	$MSR = 414,82194$	$F = 7,19618$
	Ошибка	$SSE = 576,44728$	$n - m = 10$	$MSE = 57,644728$	
	Сумма	$SSM = 4724,6667$	$n - 1 = 20$		

Таблица 9.57, окончание

Модель	Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
50	Фактор	$SSR = 4148,2114$	$m - 1 = 9$	$MSR = 460,91237$	$F = 8,79519$
	Ошибка	$SSE = 576,4553$	$n - m = 11$	$MSE = 52,405028$	
	Сумма	$SSM = 4724,6667$	$n - 1 = 20$		

На рис. 9.61 слева сплошными линиями показаны изолинии, полученные с использованием модели третьего порядка (310), а пунктиром — модели второго порядка. Справа даны изолинии (сплошные) применительно к моделям 65 и 50. Они практически совпадают; исключение одного коэффициента существенно не влияет на результаты. Пунктиром показаны изолинии для модели 1301 по каталогу TC3D.

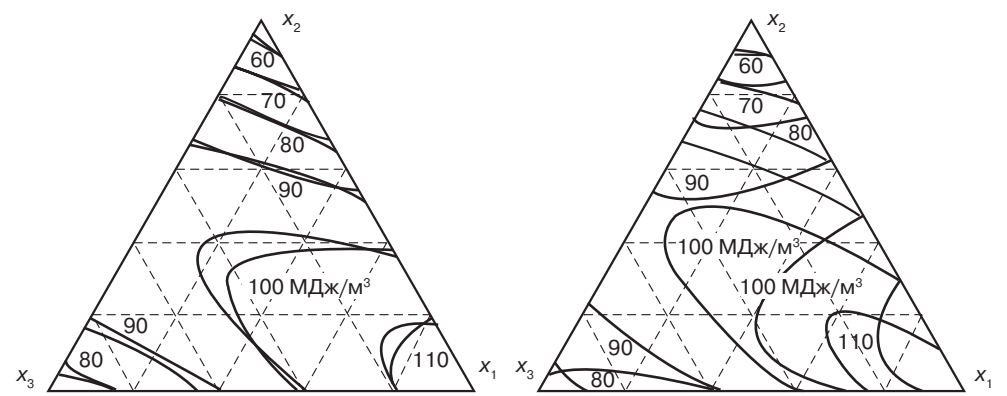


Рис. 9.61. Влияние состава полимерной матрицы на тепловой эффект вулканизации

9.5. Анализ стабильности значений
зависимой переменной

Оценка стабильности значений измеряемой величины очень важна с практической точки зрения при решении задач, связанных с контролем качества. Стабильность значений, характеризующих поверхность отклика, нельзя оценивать только по размаху, игнорируя характер поверхности. Кроме того, необходимо иметь инструмент, позволяющий сравнивать стабильность показателей различной физической природы.

Для объективизации процедуры оценки стабильности целесообразно вычислять обобщенные характеристики разброса. Одной из таких характеристик является функционал вида:

$$F = 2^{-K} \int_{-1}^1 (f(x) - \bar{f}(x))^2 d\{x\}; \quad (9.45)$$

$$\bar{f}(x) = 2^{-K} \int_{-1}^1 f(x) d\{x\}, \quad (9.45, a)$$

где $f(x)$ — функция отклика, заданная уравнением регрессии; $x \in [-1; +1]$; x — вектор независимых переменных $\{x_1, x_2, \dots, x_K\}$; $\bar{f}(x)$ — среднее значение отклика. Символом $d\{x\}$ обозначаются дифференциалы « K » независимых переменных.

В случае полиномиальной модели третьего порядка

$$f(x) = b_0 + \sum_{i=1}^K b_i x_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^K b_{ij} x_i x_j + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^K b_{ij} x_i^2 x_j + \sum_{\substack{i,j,l=1 \\ i \neq j \neq l}}^K b_{jil} x_i x_j x_l + \sum_{i=1}^K b_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^K b_{iii} x_i^3 \quad (9.46)$$

функционал (9.45) имеет вид:

$$F = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^K b_i^2 + \frac{1}{9} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^K b_{ij}^2 + \frac{4}{45} \sum_{i=1}^K b_{ii}^2 + \frac{1}{7} \sum_{i=1}^K b_{iii}^2 + \frac{1}{15} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^K b_{ij}^2 + \frac{1}{27} \sum_{\substack{i,j,l=1 \\ i \neq j \neq l}}^K b_{jil}^2 + \frac{2}{5} \sum_{i=1}^K b_i b_{iii} + \quad (9.47)$$

$$+ \frac{2}{9} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^K b_i b_{ijj} + \frac{2}{27} \sum_{\substack{i,j,l=1 \\ i \neq j \neq l}}^K b_{ijj} b_{jll} + \frac{2}{15} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^K b_{ijj} b_{jjj}.$$

Анализ соотношения (9.47) показывает, что высокую стабильность показателей обеспечивают модели, содержащие эффекты взаимодействия всех размерностей и квадратичные эффекты. Наличие линейных эффектов и кубов переменных отвечает системам с пониженной стабильностью показателей.

Сопоставление стабильностей показателей различной физической природы затруднено вследствие того, что числовые значения коэффициентов регрессии зависят от величин и размерностей соответствующих показателей. В таком случае целесообразно при вычислении функционала (9.47) предварительно каждый компонент уравнения (9.46) разделить на свободный член b_0 . Тогда каждое слагаемое в выражении (9.47) следует разделить на квадрат свободного члена.

После такой нормировки относительная стабильность комплекса показателей может быть оценена как среднее геометрическое

$$\bar{F} = \sqrt[m]{\prod_{i=1}^m F_i}. \quad (9.48)$$

Если вклад какого-либо показателя следует усилить, можно ввести веса при оценке значения стабильности F_i .

Может быть произведена минимизация функционала (9.47). Так, в случае модели второго порядка $F(b_0, b_1, b_{11}) = 1/3 \cdot b_1^2 + 4/45 \cdot b_{11}^2$, и задача сводится к следующему:

$$F(b_0, b_1, b_{11}) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (f(x) - \bar{f})^2 dx = \min_{b_0, b_1, b_{11}}; \quad \begin{cases} \max f(x) = A \\ \min F(x) = B. \end{cases} \quad (9.49)$$

$$\text{где } f(x) = b_0 + b_1 x + b_{11} x^2. \quad (9.50)$$

Найдя производную $f'(x)$, получим абсциссу экстремума функции (9.50):

$$x_c = -b_1/(2b_{11}). \quad (9.51)$$

Если $x_c \notin [-1; +1]$, то $f(x)$ монотонна на $[-1; +1]$. Если $b_{11} > 0$, то $f(x)$ возрастает и, если $b_{11} < 0$, то $f(x)$ убывает. Если справедливо первое предположение, то $f(x) = B$ при $x = -1$ и $f(x) = A$ при $x = +1$.

$$\begin{aligned} f(-1) &= b_0 + b_1(-1) + b_{11}(-1)^2 = B; \\ f(+1) &= b_0 + b_1(+1) + b_{11}(+1)^2 = A. \end{aligned} \quad (9.52)$$

Отсюда:

$$\begin{aligned} b_1 &= 0,5(A - B); \\ b_0 + b_{11} &= 0,5(A - B). \end{aligned} \quad (9.53)$$

Дифференцируя выражение (9.49), получим:

$$\begin{aligned} \frac{dF}{db_{11}} &= 2 \cdot \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (f(x) - \bar{f}) \frac{d}{db_{11}} (f(x) - \bar{f}) dx; \\ f(x) &= b_0 + 0,5(A - B)x + b_{11}x^2; \\ f(x) - \bar{f} &= 0,5(A - B)x + b_{11}x^2 - b_{11}/3; \\ \frac{dF}{db_{11}} &= \int_{-1}^1 \left(\frac{A - B}{2} x + b_{11}x^2 - \frac{b_{11}}{3} \right) \left(x^2 - \frac{1}{3} \right) dx = 0; \\ \frac{d}{db_{11}} (f(x) - \bar{f}) &= x^2 - 1/3. \end{aligned} \quad (9.54)$$

Отсюда $b_{11} = 0$ и окончательно

$$f(x) = \frac{A + B}{2} + \frac{A - B}{2} x. \quad (9.55)$$

Если $f(x)$ убывает, получим:

$$\begin{aligned} f(-1) &= b_0 + b_1(-1) + b_{11}(-1)^2 = A; \\ f(+1) &= b_0 + b_1(+1) + b_{11}(+1)^2 = B \end{aligned} \quad (9.56)$$

и тогда

$$f(x) = \frac{A + B}{2} - \frac{A - B}{2} x. \quad (9.57)$$

Следовательно, при условии $x_c \notin [-1; +1]$ максимальную стабильность показателя (при одинаковых $A - B$) обеспечивает прямолинейная зависимость.

Если $x_c \in [-1; +1]$, то $f(x)$ имеет экстремум на $[-1; +1]$. Если $b_{11} < 0$, то на интервале $[-1; +1]$ имеется максимум, если $b_{11} > 0$ — минимум.

В первом случае:

$$\begin{aligned} x = -1 & \quad f(-1) = b_0 - b_1(-1) + b_{11} = B \\ x = x_c & \quad f(x_c) = b_0 + b_1 x_c + b_{11} x_c^2 = A \end{aligned} \quad (9.58)$$

или

$$\begin{aligned} x = +1 & \quad f(+1) = b_0 + b_1 + b_{11} = B \\ x = x_c & \quad f(x_c) = b_0 + b_1 x_c + b_{11} x_c^2 = A \end{aligned} \quad (9.59)$$

Из условия (9.58):

$$b_1 x_c + b_1 + b_{11} x_c^2 - b_{11} = A - B$$

Учитывая (9.51) и решая квадратное уравнение, получим:

$$b_{1,2} = 2b_{11} \pm 2i\sqrt{b_{11}(A - B)}. \quad (9.60)$$

Тогда:

$$f(x) = b_0 + 2b_{11}x \pm 2i\sqrt{b_{11}(A - B)}x + b_{11}x^2 \quad (9.61)$$

$$f(x) - \bar{f} = 2b_{11}x \pm 2i\sqrt{b_{11}(A - B)}x + b_{11}x^2 - b_{11}/3 \quad (9.62)$$

$$\frac{d}{db_{11}}(f(x) - \bar{f}) = 2x \pm \frac{ix\sqrt{A - B}}{\sqrt{b_{11}}} + x^2 - \frac{1}{3} \quad (9.63)$$

Подставляя (9.62) и (9.63) в (9.54), получим после преобразований:

$$1024b_{11}^2 + 1065b_{11}(A - B) + 255(A - B)^2 \quad (9.64)$$

Решая квадратное уравнение, находим:

$$b'_{11} = -0,249(A - B); b''_{11} = -0,7452(A - B) \quad (9.65)$$

Подставляя корни (9.65) в (9.58) и принимая $A = 1$ и $B = 0$, получим четыре значения b_1 , из которых лишь два удовлетворяют условию $x_c \in [-1; +1]$,

Окончательно получим:

$$f(x) = 0,7912 + 0,4963x - 0,2949x^2 \quad (9.66)$$

$$f(x) = 0,9814 + 0,2362x - 0,7452x^2 \quad (9.67)$$

Для модели (9.66) $x_c = 0,8415$, для модели (9.67) $x_c = 0,1585$.

Условию (9.59) соответствуют модели:

$$f(x) = 0,7912 - 0,4963x - 0,2949x^2 \quad (9.68)$$

$$f(x) = 0,9814 - 0,2362x - 0,7452x^2 \quad (9.69)$$

Если $f(x)$ — кривая с минимумом, искомые модели имеют вид:

$$f(x) = 0,2088 \pm 0,4963x + 0,2949x^2 \quad (9.70)$$

$$f(x) = 0,0186 \pm 0,2362x + 0,7452x^2 \quad (9.71)$$

Проведем сопоставительный анализ полученных моделей.

Для модели (9.55) при $A = 1$ и $B = 0$ характеристика рассеяния составляет $F = (1/3) \cdot 0,5^2 = 0,0833$.

Для моделей (9.66), (9.68) и (9.70): $F = (1/3) \cdot (\pm 0,4963)^2 + (4/45) \cdot (\pm 0,2949)^2 = 0,0989$.

Для моделей (9.67), (9.69) и (9.71): $F = (1/3) \cdot (\pm 0,2362)^2 + (4/45) \cdot (\pm 0,7452)^2 = 0,0680$.

Для модели $f(x) = 1 - x^2$, симметричной относительно $x = 0$, характеристика рассеяния составляет $F = (4/45) \cdot (-1)^2 = 0,0889$.

Таким образом, из всех кривых второго порядка, определенных на интервале $f(x) \in [0; 1]$ и $x \in [-1; +1]$, наибольшую стабильность показателей обеспечивает модель (9.67) и ее симметричные отображения относительно линии $x = 0$ и $f(x) = 0,5$. Наименьшей стабильностью обладает модель (9.66) и соответствующие ее отображения.

Еще раз отметим, что параметры моделей (9.66)–(9.71) не являются эмпирическими; они получены в результате теоретических расчетов.

Одному и тому же значению F может соответствовать несколько зависимостей. Для их дифференциации можно использовать другие моменты кривой. Одним из таких примеров может быть характеристика асимметрии относительно среднего значения (третий момент). Такая характеристика имеет вид:

$$R = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (f(x) - \bar{f})^3 dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \left(b_1 x + b_{11} x^2 - \frac{1}{3} b_{11} \right)^3 dx \quad (9.72)$$

Окончательно

$$R = \frac{4}{15} b_1^2 b_{11} - \frac{124}{945} b_{11}^3 \quad (9.72a)$$

Рассмотренные выше кривые представлены графически на рис. 9.62. Характеристики кривых, отображенных на рисунке, показаны в табл. 9.58.

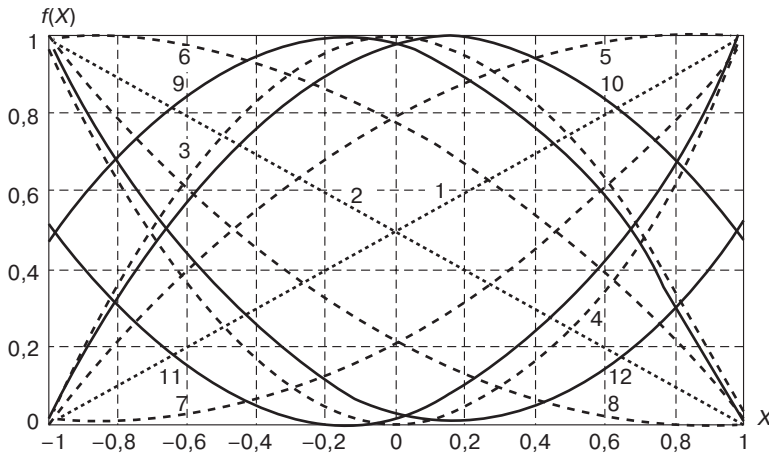


Рис. 9.62. Классификация кривых по уровню стабильности

Таблица 9.58. Характеристики стабильности

№	Уравнение	F	R
1	$f(x) = 0,5 + 0,5x$	0,0833	0
2	$f(x) = 0,5 - 0,5x$	0,0833	0
3	$f(x) = 1 - x^2$	0,0889	+0,131
4	$f(x) = x^2$	0,0889	-0,131
5	$f(x) = 0,7912 + 0,4963x - 0,2949x^2$	0,0898 — максимум	-0,00315
6	$f(x) = 0,7912 - 0,4963x - 0,2949x^2$	0,0898 — максимум	-0,00315
7	$f(x) = 0,2088 + 0,4963x + 0,2949x^2$	0,0898 — максимум	+0,00315
8	$f(x) = 0,2088 - 0,4963x + 0,2949x^2$	0,0898 — максимум	+0,00315
9	$f(x) = 0,9814 + 0,2362x - 0,7452x^2$	0,0680 — минимум	+0,0432
10	$f(x) = 0,9814 - 0,2362x - 0,7452x^2$	0,0680 — минимум	+0,0432
11	$f(x) = 0,0186 + 0,2362x + 0,7452x^2$	0,0680 — минимум	-0,0432
12	$f(x) = 0,0186 - 0,2362x + 0,7452x^2$	0,0680 — минимум	-0,0432

Перейдем к рассмотрению стабильности ситуаций с двумя факторами. Ограничимся анализом полинома второго порядка.

$$f(x_1, x_2) = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{12}x_1x_2; x_i \in [-1; +1] \quad (9.73)$$

$$\begin{aligned}\max (x_1, x_2) &= 1 \\ \min (x_1, x_2) &= 0\end{aligned}\quad (9.74)$$

Характеристикой стабильности является функционал:

$$F(b_i) = \frac{1}{4} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (f(x_1, x_2) - \bar{f}) dx_2 dx_1, \quad (9.75)$$

где

$$\bar{f} = \frac{1}{4} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f(x_1, x_2) dx_2 dx_1 = b_0 + \frac{1}{3} b_{11} + \frac{1}{3} b_{22}, \quad (9.76)$$

Из выражения (9.47) получим:

$$F(b_i) = \frac{1}{3} b_1^2 + \frac{1}{3} b_2^2 + \frac{1}{9} b_{12}^2 + \frac{4}{45} b_{11}^2 + \frac{4}{45} b_{22}^2 \quad (9.77)$$

Рассмотрим некоторые примеры для случая $f(x_1, x_2) \in [0; 1]$; $x_i \in [-1; +1]$.

Несколько вариантов представлено на рис. 9.63. Кроме модели показаны значения параметра стабильности.

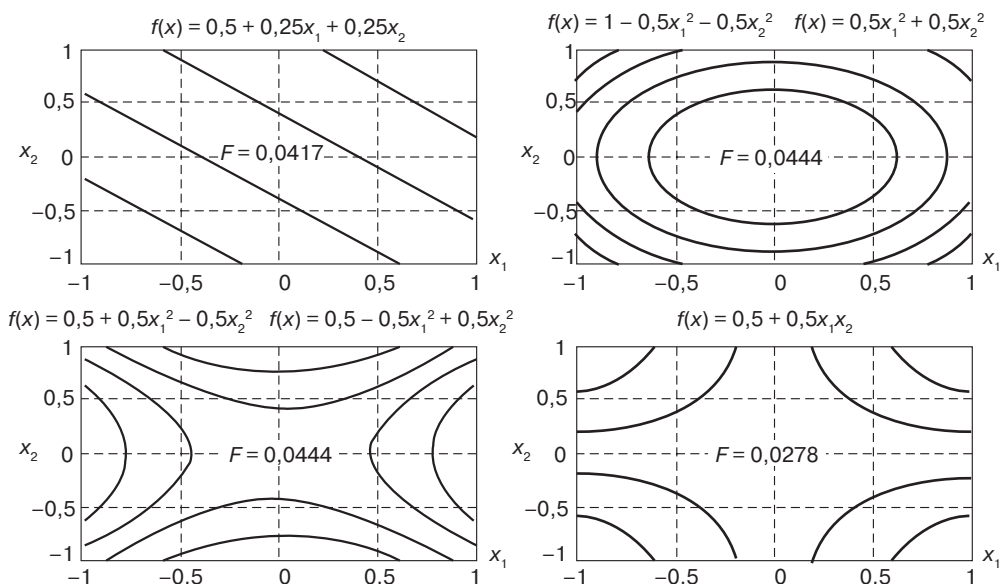


Рис. 9.63. Классификация поверхностей отклика по уровню стабильности

Таким образом, из рассмотренных выше геометрических образов наибольшей стабильностью характеризуется гиперболический параболоид. Такая поверхность имеет место, когда проявляются эффекты взаимодействия между факторами (синергические эффекты)

Эту проблему можно рассмотреть на примере анализа рецептур резиновых смесей на основе наирита, используемых при изготовлении слоя сжатия кордошнуровых клиновых ремней без обертки боковых поверхностей. Для снижения удельного объемного электрического сопротивления и увеличения теплопроводности резины в смеси используется электропроводный наполнитель — технический углерод ПЗ67-Э. Известно, что резиновые смеси, содержащие печной технический углерод с высокой удельной поверхностью, обладают повышенной жесткостью и склонностью к подвулканизации. Поэтому для придания резинам большей эластичности и меньшей жесткости используется технический углерод П701, а для обеспечения анизотропии свойств вдоль и поперек направления каландрования — волокнистый наполнитель.

Исследование проводили по плану Хартли для трех переменных: содержание технического углерода ПЗ67-Э (x_1), технического углерода П701 (x_2) и волокнистого наполнителя (x_3). Все переменные варьировались на трех уровнях: первая — в интервале от 20 до 40 масс. ч. на 100 масс. ч. каучука с шагом 10 масс. ч., вторая — в интервале от 25 до 45 масс. ч. с шагом 10 масс. ч. и третья — в интервале от 12 до 18 масс. ч. с шагом 3 масс. ч.

В качестве примера рассмотрим двумерные сечения поверхности отклика (твердость по Шору А), которые адекватно описываются уравнениями регрессии вида:

$$y_1 = 89,2 + 2,0x_1 - 2,4x_2 - 0,8x_1x_2 - 0,8x_1^2 - 0,8x_2^2; \quad (9.78)$$

$$y_2 = 92,0 + 1,0x_2 - 0,8x_3 - 4,2x_2x_3 - 0,8x_2^2 - 0,8x_3^2. \quad (9.79)$$

В первом случае постоянным является содержание волокнистого наполнителя, во втором — содержание технического углерода ПЗ67-Э. Все факторы в уравнениях варьируются в условном масштабе от -1 до $+1$.

При сопоставлении двух моделей обращает на себя внимание тот факт, что соответствующие коэффициенты двух моделей имеют одинаковые знаки. Расчеты показывают, что размах показателя твердости для модели (9.78) составляет 9,0 единиц, а для модели (9.79) он равен 10,7 единиц. Следовательно, в случае второй модели твердость меняется в большей степени, чем для первой модели (рис. 9.64).

На основании этого можно было бы заключить, что модель (9.78) отвечает более стабильной ситуации. Однако оценка стабильности по величине размаха не учитывает топологических особенностей рассматриваемых поверхностей отклика. Вычисление параметра стабильности по формуле (9.77) дает информацию обратного характера.

Действительно, для модели (9.78) получим:

$$F(b_i) = \frac{2,0^2}{3} + \frac{(-2,4)^2}{3} + \frac{(-0,8)^2}{9} + \frac{4 \cdot (-0,8)^2}{45} + \frac{4 \cdot (-0,8)^2}{45} =$$

$$1,333 + 1,920 + 0,071 + 0,057 + 0,057 = 3,428.$$

В случае модели (9.79) имеем:

$$F(b_i) = \frac{1,0^2}{3} + \frac{(-0,8)^2}{3} + \frac{(-4,2)^2}{9} + \frac{4 \cdot (-0,8)^2}{45} + \frac{4 \cdot (-0,8)^2}{45} =$$

$$0,333 + 0,213 + 1,960 + 0,057 + 0,057 = 2,620$$

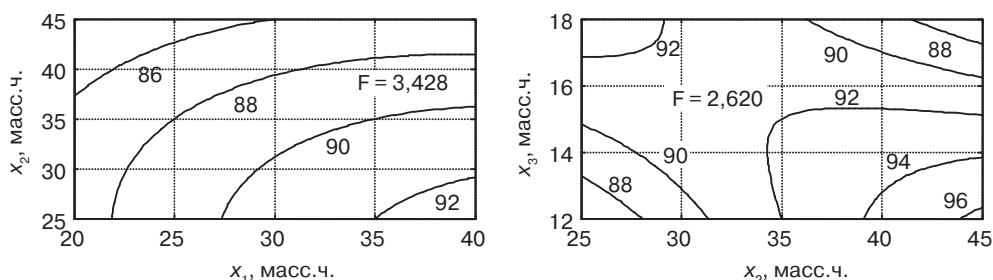


Рис. 9.64. Зависимость твердости по Шору А резин для клиновых ремней от содержания технического углерода П367-Э (x_1), П701 (x_2) и волокнистого наполнителя (x_3)

Рассматривая структуру параметров стабильности в обоих случаях, можно констатировать, что относительно низкая стабильность первой модели обусловлена большим вкладом линейной части модели (в формуле (9.78) при коэффициентах линейной части модели самые малые по величине делители, т. е. линейная часть имеет больший вес при вычислении параметра стабильности). Вторая модель имеет высокое значение эффекта взаимодействия, однако, согласно (9.77), это значение при вычислении параметра стабильности делится на 9, и вклад компонента существенно снижается.

При оценке стабильности не одного показателя, а группы величин целесообразно применить подход, подобный тому, который используется при расчетах обобщенного критерия качества — функции желательности. Это проще всего сделать для одномерного случая, приняв за единицу различие между минимальным и максимальным значением параметра стабильности ($0,0898 - 0,0680 = 0,0218$). Тогда максимальной стабильности будет отвечать значение параметра, равное нулю, и минимальной стабильности — значение, равное единице. Например, параметр стабильности прямой линии равен $F = (0,0833 - 0,0680)/(0,0898 - 0,0680) = 0,702$. В таком новом масштабе параметра стабильности относительная стабильность комплекса показателей может быть оценена как среднее геометрическое по формуле (9.48).

Поскольку все коэффициенты регрессии модели (9.47) оцениваются с соответствующими дисперсиями, можно попытаться рассчитать дисперсию определения параметра стабильности по закону накопления ошибок. Для этого можно использовать приближенные методы [28, с. 175]. Дисперсия определения функционала (9.77) для моделей (9.78) и (9.79) может вычисляться по формуле

$$S^2\{F\} = \frac{4}{9} \sum_{i=1}^K b_i^2 S^2\{b_i\} + \frac{4}{81} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^K b_{ij}^2 S^2\{b_{ij}\} + \frac{64}{2025} \sum_{i=1}^K b_{ii}^2 S^2\{b_{ii}\}. \quad (9.80)$$

Дисперсии определения коэффициентов регрессии [3, с. 381]:

$$S^2\{b_i\} = 0,1667 S^2\{y\}; S^2\{b_{ij}\} = 0,2500 S^2\{y\}; S^2\{b_{ii}\} = 0,1377 S^2\{y\}, \quad (9.81)$$

где дисперсия воспроизводимости $S^2\{y\} = 1,0$.

После вычисления средних квадратических отклонений окончательно получим:

$$F_1 = 3,44 \pm 0,86; \quad F_2 = 2,62 \pm 0,59.$$

Следует обратить внимание на аддитивность как самого параметра стабильности, так и его дисперсии.

При отсутствии модели функционал стабильности можно рассчитать численными методами.

Таким образом, при оценке стабильности показателей кроме размаха целесообразно учитывать комплексную характеристику изменения показателей в области определения.

Может быть, максимальной стабильности отвечала бы зависимость, показанная на рис. 9.65 слева, а максимальной нестабильности – то, что изображено справа.

Для левого графика некое подобие представляет собой полином Чебышева 7-го порядка (внизу слева показана эта линия). Что же касательно самого уравнения, то выглядит оно следующим образом: $y = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4 + fx^5 + gx^6 + hx^7$. А для правого графика можно использовать уравнение, которое отлично описывает реометрические кривые:

$$y = a + b(1 - (1 + \exp((x + d \ln(2^{1/e} - 1) - c)/d))^{-e}).$$

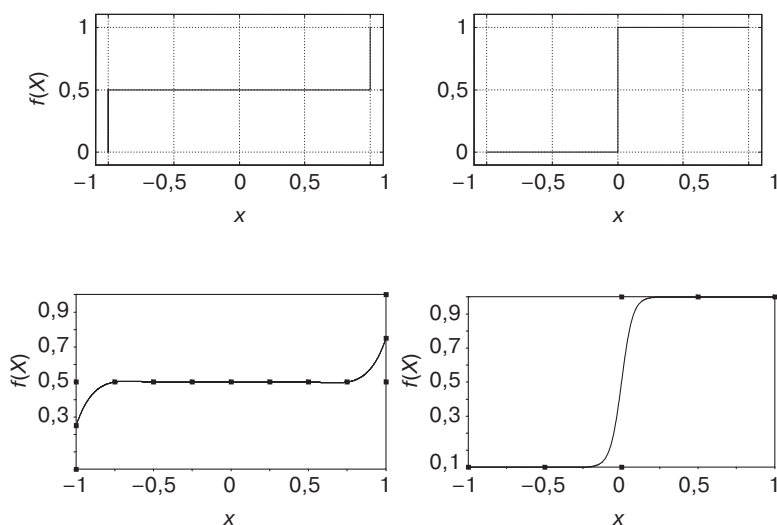


рис. 9.65 Оценка стабильности

Литература

1. Налимов В.В. Теория эксперимента. — М.: Наука. 1971. — 207 с.
2. Налимов В.В. Логические основания прикладной математики. — М.: Изд. МГУ. 1971. — 57 с.

3. Таблицы планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей. Справочное издание под ред. В.В. Налимова. — М.: Металлургия. 1982. — 751 с.
4. Круг Г.К., Сосулин Ю.А., Фатуев В.А. Планирование эксперимента в задачах идентификации и экстраполяции. — М.: Наука. 1977. — 206 с.
5. Горский В.Г., Адлер Ю.П., Талалай А.М. Планирование промышленных экспериментов. — М.: Металлургия. 1978. — 112 с.
6. Горский В.Г. Планирование кинетических экспериментов. — М.: Наука. 1984. — 241 с.
7. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. — М.: Высшая школа. 1978. — 319 с.
8. Адлер Ю.П., Грановский Ю.В., Маркова Е.В. Теория эксперимента: прошлое, настоящее, будущее. — М.: Знание. 1982. — 64 с.
9. Саутин С.Н. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. — Л.: Химия. 1975. — 48 с.
10. Рузинов Л.П., Слободчикова Р.И. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. — М.: Химия. 1980. — 280 с.
11. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов. — М.: Академкнига. 2006. — 415 с.
12. Зедгинидзе И.Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. — М.: Наука. 1976. — 390 с.
13. Назаров В.И., Хоц М.С. Прикладные математические методы в нефтепереработке и нефтехимии. — М.: ЦНИИТЭнефтехим. 1975. — 111 с.
14. Налимов В.В., Чернова Н.А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. — М.: Физматгиз. 1965. — 340 с.
15. Планирование эксперимента в исследованиях технологических процессов. Под ред. Э.К. Лецкого. Пер. с нем. — М.: Мир. 1977. — 552 с.
16. Планирование эксперимента и применение вычислительной техники в процессе синтеза резины. Сборник статей под ред. В.Ф. Евстратова и А.Г. Шварца. — М.: Химия. 1970. — 252 с.
17. Сычевская И.Д. Планирование научного эксперимента. — М.: Изд. ЦНИИТЭИ приборостроения. 1976. — 75 с.
18. Дэниел К. Применение статистики в промышленном эксперименте. Пер. с англ. — М.: Мир. 1979. — 300 с.
19. Тихомиров В.Б. Математические методы планирования эксперимента при изучении нетканых материалов. — М.: Легкая индустрия. 1968. — 156 с.
20. Горюшко В.Е. Планирование эксперимента в бытовой химии. — М.: НИИТЭХИМ. 1974. — 88 с.
21. Гуревич Х.Г., Шварц А.Г. Экспериментально-статистические методы планирования эксперимента и вычислительная техника при разработке рецептуры резиновых смесей. — М.: ЦНИИТЭнефтехим. 1972. — 59 с.
22. Зедгинидзе И.Г. Математическое планирование эксперимента для исследования и оптимизации свойств смесей. — Тбилиси: Мицниереба. 1971. — 151 с.

23. Хикс Ч. Основные принципы планирования эксперимента. Пер. с англ. — М.: Мир. 1967. — 406 с.
24. Агаянц И.М., Рубин В.С. Методика планирования эксперимента в промышленности искусственной кожи. — М.: ЦНИИТЭИ легкой промышленности. 1969. — 30 с.
25. Проблемы планирования эксперимента. Под ред. Г.К. Круга. — М.: Наука. — 394 с.
26. Новые идеи в планировании эксперимента. Сборник статей под ред. В.В. Налимова. — М.: Физматгиз. 1969. — 334 с.
27. Каблов В.Ф., Агаянц И.М. Информационные технологии в разработке и в производстве эластомерных материалов. — Волгоград: Изд. ВолгГТУ. 2009. — 408 с.
28. Смирнов Н.В., Дунин-Барковский И.В. Курс теории вероятностей и математической статистики. — М.: Наука. 1969. — 511 с.

Глава 10. Анализ случайных полей и процессов

Случайное поле — многозначное понятие, связанное с протяженностью в пространстве. Случайный процесс (вероятностный, или стохастический < греч. *στοχαστικός*, умеющий отгадывать) процесс (т. е. изменение во времени состояния некоторой системы), течение которого может быть различным в зависимости от случая и для которого определена вероятность того или иного его течения. Принципы изучения того и другого имеют много общего.

10.1. Некоторые подходы при проведении морфологических исследований резин

Комплекс свойств резины как конструкционного материала формируется под эгидой структуры объекта, являющегося диффузной системой с громадным количеством источников изменчивости.

Характер структуры определяется размерами и взаимным расположением элементов структуры. Имея в виду изучение макроструктуры материала, в данном случае целесообразно при рассмотрении резины как многокомпонентной системы выделять размеры и характер распределения полимера в полимере, наполнителя в полимере, наполнителя в наполнителе и пр.

Под структурой в данном случае мы понимаем размеры и взаимное расположение различных элементов системы, а именно, если материал включает в себя комбинацию полимеров, то характер их распределения, аналогично для наполнителя и т. д. Склонность составляющих системы к агрегированию приводит к большей неоднородности материала, и, следовательно, к внутренней гетерогенности.

Характер структуры материала, в частности резин, во многом определяет большое многообразие их свойств.

Таким образом, исследование физической структуры должно быть направлено на оценку распределения структурных элементов и их размеров, что поможет пролить свет на механизм происходящих при переработке процессов.

Физико-механические и эксплуатационные свойства резин во многом зависят от степени дисперсности и характера распределения ингредиентов в резиновой смеси. Изучение основных закономерностей, связанных с распределением ингредиентов в резине, представляет значительный теоретический и практический интерес, поскольку решение этой задачи позволит исследовать механизм усиления и разрушения резин.

Изучение характера распределения ингредиентов в резине ведется, преимущественно, визуальным субъективным методом качественной оценки срезов и микрофотографий образцов. Использование электронной микроскопии хотя и расширило возможности исследования, но не внесло ничего нового в отношении объективизации анализа. Попытки объективизации сводились к зарисовкам, микрофотографированию и элементарному анализу — типа подсчета и измерения размеров частиц.

Переход от качественной интерпретации к количественной оценке характера распределения ингредиентов в резине немыслим без использования математико-статистических методов исследования и машинного анализа.

Морфологические исследования особенно интенсивно и успешно проводятся при изучении объектов методами физики твердого тела (например, в рентгеноструктурном анализе). С другой стороны, в области оптической спектроскопии имеет место сугубо эмпирический подход. Речь идет о применении принципов анализа, принятых в физике твердого тела, в сфере квазикристаллических структур, и в том числе полимеров.

Основой подхода является такое представление о квазикристаллической структуре, когда в узлах квазикристалла расположены не атомы, ионы или молекулы, а макроскопические объекты (доли мкм). Существует некоторая вероятность нахождения этого объекта в узле решетки, другими словами, нет детерминизма физики твердого тела. Отсюда вытекает возможность применения статистических методов.

С точки зрения оптико-структурного анализа изучаемый объект представляет собой поле оптических плотностей. Визуальное изучение такого поля может быть информативным лишь в самых простых ситуациях.

Количественный оптико-структурный анализ резин в общем случае затруднен из-за большого числа фаз в поле оптических плотностей, что вызвано многокомпонентностью объекта.

Поскольку в большинстве случаев элементы структуры характеризуются различной оптической плотностью, использование метода сканирования и анализ сканогаммы позволяет судить о характере структуры всего объекта.

В качестве объектов исследования были выбраны пористые резины, которые вследствие ярко выраженной гетерогенности (наличие двух фаз — поры и собственно резина) могут рассматриваться как модельные системы.

При оценке пористых структур возникают два самостоятельных аспекта этой проблемы: изучение пор и пористости.

Обычно при анализе пористого строения материалов, в частности пористых резин, ограничиваются изучением распределения пор по размерам, т. е. оценивают только однородность дисперсности пор. В то же время в большинстве случаев решающее влияние оказывают не сами поры, а структура пористости.

Функция распределения пор по размерам еще не дает представления о структуре пористости, которую характеризует взаимное расположение пор, приводящее к различной однородности пористости.

Неоднородность расположения пор или других элементов приводит к образованию их группировок. Так возникает структура пористости. *Следовательно, если первичным элементом является пора, то структурной единицей является группировка пор.*

Поэтому именно структура пористости определяет распределение напряжений в пористых материалах.

При оценке однородности пористости в случае исследования линейным методом, разработанным К.И. Бахтияровым, случайная секущая разбивается на отрезки, равные базе измерения B . В качестве характеристики однородности используется дисперсия пористости D .

Увеличение базы измерения сопровождается пропорциональным уменьшением дисперсии. Линейный характер зависимости $D = f(1/B)$ нарушается, если имеет место корреляция во взаимном расположении пор. Расчетная формула для дисперсии полусуммы имеет вид:

$$D\left(\frac{x_1 + x_2}{2}\right) = \frac{D(x_i)}{2}(1 + r), \quad (10.1)$$

где r — коэффициент корреляции.

Положительная корреляция соответствует случаю, когда образуются группировки пор («притяжение» пор), при $r < 0$ происходит «отталкивание» между порами, что ведет к регулярному (несгруппированному) расположению. Нулевая корреляция имеет место при отсутствии связи в расположении пор (случайное расположение).

Решение задачи количественной характеристики упорядоченности структуры позволяет подойти к проблеме распознавания структур.

Метод статистических характеристик структуры может быть построен на анализе сигнала, полученного при сканировании изучаемого объекта и характеризующего изменение оптической плотности по пути сканирования (метод разработан К.М. Богдановым).

Сканограмма представляет собой случайную функцию, которая для любого значения своего аргумента является случайной величиной.

Пусть u — множество элементарных событий, t — непрерывный параметр. Тогда можно ввести функцию двух аргументов $x(t) = \phi(e, t)$, ($e \in u$). Для каждого значения параметра t функция $\phi(e, t)$ является функцией только e и, следовательно, есть случайная величина. Для каждого фиксированного аргумента e (т. е. для каждого события) $\phi(e, t)$ зависит только от t . Случайный процесс — это совокупность случайных величин, зависящих от t , или совокупность реализаций процесса $x(t)$.

В качестве числовых характеристик функции распределения можно использовать центральные моменты первых порядков: математическое ожидание случайной функции; дисперсию; асимметрию и эксцесс.

Принципиальная схема оптико-структурного машинного анализа в сканирующем варианте дана на рис. 10.1. Здесь: 1 — испытуемый образец; 2 — сканограмма; 3 — функция распределения по оптической плотности; 4 — автокорреляционная функция; 5 — функция спектральной плотности.

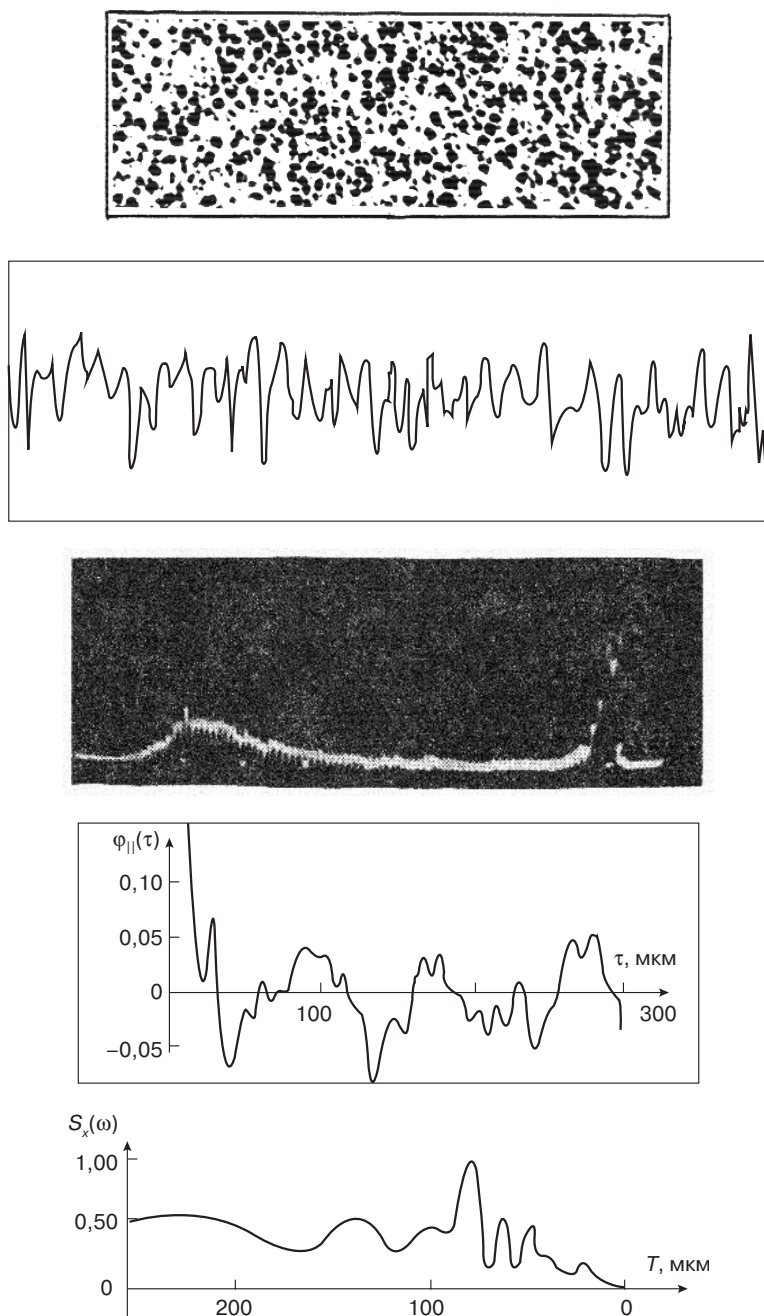


Рис. 10.1. Схема анализа структур

Исследуемый образец сканируется оптическим или электронным пучком в режиме прохождения или отражения. Сигнал датчика, регистрирующего сканирующий пучок на выходе, усиливается, записывается и поступает в соответствующие анализаторы.

Изучаемая пористая структура оптически негомогенна. Сканограмма является специфичной для каждой резины ввиду различного характера пространственного распределения пор. Это находит свое выражение в различных кривых распределения амплитуд сканограммы, что видно из сопоставления моментов функции плотности вероятности распределения амплитуд.

В результате амплитудного анализа рассчитываются первые четыре момента функции плотности вероятности распределения амплитуд: математическое ожидание, дисперсия, асимметрия и эксцесс [1, с. 50–52; 2, с. 226–227; 3, с. 14, 4; с. 423–427; 5, с. 25–36; 6, с. 210–211, 216–217; 7, с. 247–248; 8, с. 67–76].

Эти параметры дают возможность описания микроструктуры в аналитической форме кривой плотности вероятности амплитудного распределения. Плотность распределения случайного процесса определяет вероятность того, что значения процесса в произвольный момент времени будут заключены в определенном интервале [9, с. 31].

При корреляционном анализе рассматривается автокорреляционная функция или взаимная корреляционная функция.

Автокорреляционная функция выявляет внутреннюю структуру случайного процесса, оценивая зависимость между двумя сечениями, отделенными друг от друга интервалом τ . Такой анализ позволяет выделить «сигнал» на фоне случайного «шума», характеризующего степень неупорядоченности исследуемой структуры. Существенной количественной оценкой стационарного шума может служить интервал корреляции $\tau_{\text{мк}}$. Чем меньше $\tau_{\text{мк}}$, тем больше вероятность появления ближнего порядка в структуре и тем, по-видимому, более упорядочена сама структура [1, с. 38–41; 2, с. 227–229; 4, с. 452–453; 6, с. 211–216; 9, с. 35–38; 10, с. 39–52; 11, с. 136–138; 12, с. 102–106; 13, с. 640–641; 14, 224–228; 15, с. 240–245].

Автокорреляция означает корреляцию параметра с самим собой, а коэффициенты автокорреляции являются обычными коэффициентами линейной корреляции между временным рядом в данный момент времени и тем же рядом в последующий момент времени.

Автокорреляционная функция случайного процесса характеризует общую зависимость значений процесса в некоторый данный момент времени от значений в другой момент. Оценку величины автокорреляционной функции, связывающей значения $x(t)$ в моменты времени t и $t + \tau$, можно получить, вычисляя произведение этих ординат и усредняя величину произведения в пределах времени наблюдения T . Найденное среднее значение произведения приближается к точному значению автокорреляционной функции при стремлении T к бесконечности:

$$\varphi_x(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T x(t)x(t+\tau)dt. \quad (10.2)$$

Величина $\phi_x(\tau)$ — всегда действительная четная функция с максимумом в точке $\tau = 0$; она может быть как положительной, так и отрицательной.

Взаимная корреляционная функция получается при сопоставлении сигнала от анализируемой структуры с сигналом от структуры, принятой за «эталон», она характеризует общую зависимость значений одного процесса от другого [1, с. 43–44; 3, с. 15–17; 9, с. 44–47]:

$$\varphi_{xy}(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T x(t)y(t+\tau)dt \quad (10.3)$$

Спектральная плотность случайного процесса описывает общую частотную структуру процесса через спектральную плотность среднего значения квадрата его значений [7, с. 245–251; 9, с. 38–41; 10, с. 52–61; 11, с. 138–144; 12, 108–114; 13, с. 644–650; 14, с. 253–261; 15, с. 148–154; 16, с. 95–98; 17, с. 243–254]. Важное свойство спектральной плотности заключается в ее связи с автокорреляционной функцией. В частности, для стационарного процесса эти функции связаны преобразованием Фурье [18, с. 516–527; 19, с. 195–197]:

$$S_x(\omega) = 4 \int_0^{\infty} \varphi_x(\tau) \cos 2\pi\omega\tau d\tau. \quad (10.4)$$

Предварительные эксперименты показали, что сканограммы, полученные при анализе пористых резин, обладают свойством стационарности, статистические характеристики не изменяются (в пределах погрешности измерения) при переходе от одного участка структуры к другому. Это означает однородность, монотонность, правильность чередования элементов структуры (как простых, так и целых комплексов, например, агрегатов пор).

При условии стационарности с увеличением длины сканограммы увеличивается эффективность статистической оценки (т. е. уменьшается погрешность).

Таким образом, применение статистических принципов, и в частности теории случайных процессов, позволяет не только определить количество того или иного вещества в исследуемом образце (в нашем случае пористость), но и решить более важную задачу о структурном распределении данного вещества в матрице, оценить степень перераспределения при варьировании тех или иных факторов, дать количественную оценку степени упорядоченности структур (в том числе анизотропных).

Пористые резины с одинаковой плотностью могут значительно отличаться по своим физико-механическим показателям. Эти отличия, чаще всего, объясняются размерами пор: чем мельче поры, тем выше показатели резин.

Свойства пористых материалов, и в частности пористых резин, главным образом определяются не размерами пор, а степенью упорядоченности пористой структуры. Чем больше упорядоченность в расположении пор, тем равномернее распределение напряжений, тем выше прочностные показатели. Наличие неоднородностей, группировок пор должно способствовать концентрации напряжений при деформации резин и, следовательно, их преждевременному разрушению.

В качестве объектов исследования были выбраны пористые резины на основе комбинации каучуков СКМС-ЗОРП и БСК-45К, полученные при различных удельных давлениях и продолжительности вулканизации.

Было обнаружено, что такие вулканизаты, хотя и имеют одну и ту же химическую структуру, значительно отличаются друг от друга, по физико-механическим свойствам.

В табл. 10.1 приведены условия процесса вулканизации и результаты определения пористости, математического ожидания диаметра пор, среднего квадратического отклонения диаметра пор, условной прочности при растяжении и содержания свободной серы в исследованных пористых вулканизатах.

Пористость рассчитывалась как отношение суммарной длины хорд в порах на данной базе (l_x) к базе измерения (интервалу усреднения B).

Использование светового микроскопа ограничивает область исследуемых размеров пор. В связи с этим пористость Pr , определенная по плотности, будет выше линейной пористости Pr_l , вычисленной по сканограмме, на величину, зависящую от содержания микропор, размеры которых не регистрируются использованными методами.

Таблица 10.1. Результаты анализа пористой структуры резин на основе БСК

№	t	P	M_n	M_d	S_d	S_k	E	V	σ	$S_{св}$
1	20	9	0,26	22,2	16,3	1,6	1,2	73	5,6	0,21
2	10	9	0,26	22,5	19,8	1,2	1,3	86	3,4	0,84
3	20	5	0,21	20,2	18,0	1,4	1,8	89	4,7	0,21
4	10	5	0,24	25,1	23,4	1,3	1,6	85	3,0	0,84

t — продолжительность вулканизации, мин; P — удельное давление, МПа; M_n — математическое ожидание пористости; M_d — математическое ожидание диаметра пор, мкм; S_d — среднее квадратическое отклонение диаметра пор, мкм; S_k — асимметрия функции распределения размеров пор; E — эксцесс функции распределения размеров пор; V — коэффициент вариации размеров пор, %; σ — условная прочность резин при растяжении, МПа; $S_{св}$ — содержание свободной серы, %.

Поскольку математические ожидания диаметров пор и статистические моменты более высоких порядков четырех серий образцов практически равны между собой, а физико-механические показатели существенно отличаются друг от друга, высказанные выше соображения о влиянии структуры пористости на свойства приобретают реальную основу.

Для оценки однородности распределения пор по результатам сканирования были определены математические ожидания и дисперсии пористости на нормированных базах, равных 1, 2, 4, 8, 16 и 32.

Под нормированной базой следует понимать интервал усреднения, единицей измерения которого является математическое ожидание длины ячейки $\tau_{мк} = MI$ — интервал

корреляции, представляющий собой сумму математических ожиданий длины хорды MI_x и длины перегородки MI_{II} (длина ячейки есть отрезок секущей, приходящийся на одну пору).

Полученные результаты графически представлены на рис. 10.2 в двойных логарифмических координатах. Зависимость относительной дисперсии пористости $D_{отн} = D_x/D_{max}$ ($D_{max} = \Pi(1-\Pi)$) от нормированной базы измерения $1/(B/MI)$ дает представление об однородности пористости в исследуемых образцах.

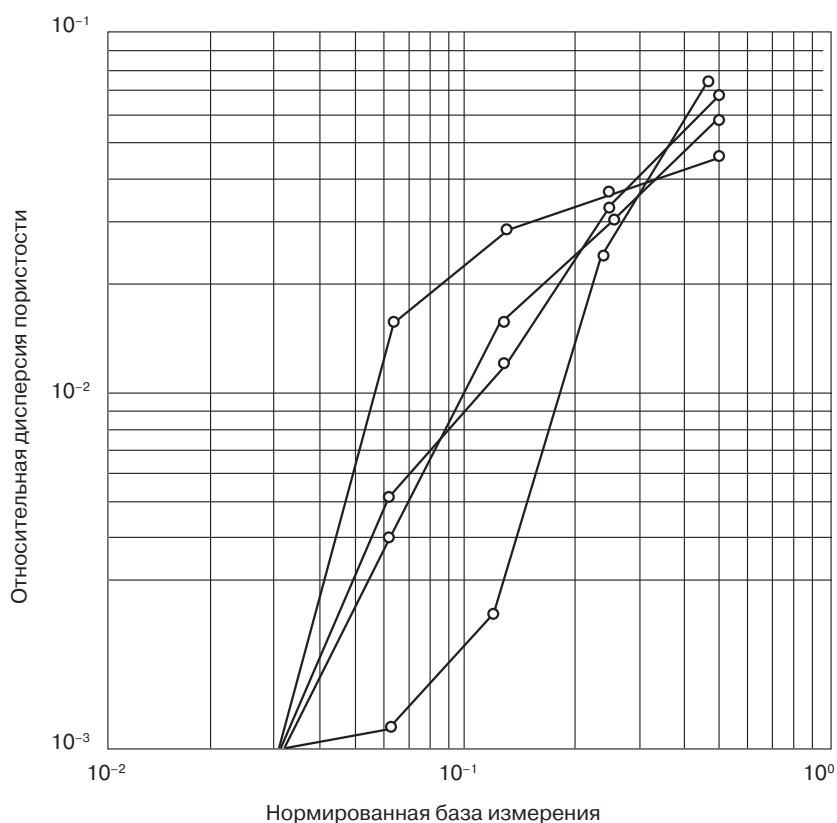


Рис. 10.2. Зависимость дисперсии пористости от нормированной базы измерения

Изучение характера изменения дисперсии пористости для серии образцов № 3, полученных при удельном давлении 5 МПа и продолжительности процесса 20 мин, показало, что переход к удвоенной базе в диапазоне интервалов усреднения с 1 до 16 сопровождается уменьшением дисперсии в два раза. Например, увеличение базы с 2 до 4 приводит к уменьшению дисперсии с 0,016 до 0,0076. В рассматриваемом случае мы имеем дело с независимыми случайными величинами ($r = 0$), т. е. распределение пор носит случайный характер.

При повышении давления до 9 МПа и при той же продолжительности процесса при анализе наблюдается более резкое уменьшение дисперсии пористости с увеличением базы измерения по сравнению с линейной зависимостью (линия 1 на рис. 10.2; номера линий на графике совпадают с номерами в табл. 10.1). Так, при $B/Ml = 2$ $D_x = 0,015$; при $B/Ml = 4$ $D_x = 0,005$; при $B/Ml = 8$ $D_x = 0,0005$. В этом случае $r < 0$. Такие структуры характеризуются более упорядоченным расположением пор. Установлено, что увеличение удельного давления в исследуемом интервале практически не влияет на количество связанной серы (табл. 10.1). Таким образом, увеличение удельного давления с 5 до 9 МПа не вызывает существенного изменения степени вулканизации, но приводит к значительному упорядочению макропористой структуры резин, в результате чего условная прочность при растяжении вулканизатов увеличивается на 20%.

Следовательно, помимо традиционных путей улучшения качества пористых резин за счет использования новых полимерных материалов и других ингредиентов, появляется возможность повышения физико-механических и эксплуатационных свойств вулканизатов за счет внутренних резервов в результате регулирования их структуры с целью получения оптимальной макропористой структуры.

При недостаточной степени вулканизации пористых резин ($t = 10$ мин) образуются структуры с $r > 0$ (линия 4 на рис. 10.2). Так, исследование однородности распределения пор в образцах резины, полученных при удельном давлении 5 МПа за 10 мин (линия 4), позволило обнаружить положительную корреляцию между значениями пористости на смежных интервалах измерения. Здесь переход к удвоенной базе приводит к незначительному уменьшению дисперсии. При $B/Ml = 2$ $D_x = 0,0116$, при $B/Ml = 4$ $D_x = 0,009$ и при $B/Ml = 8$ $D_x = 0,007$. Такая структура характеризуется наличием группировок пор, которые должны снижать физико-механические и эксплуатационные свойства пористых резин из-за повышенной концентрации напряжений в зоне группировок. Действительно, условная прочность при растяжении в этом случае лишь 3,0 МПа. Увеличение удельного давления до 9 МПа при той же продолжительности вулканизации (10 мин) ведет к образованию структур со случайным характером распределения пор и прочностью 3,4 МПа (линия 2 на рис. 10.2). Прочностные свойства вулканизатов в этом случае зависят скорее от степени вулканизации, нежели от характера расположения пор.

Зависимость коэффициента корреляции пористости от продолжительности и удельного давления при вулканизации иллюстрируются рис. 10.3. Можно констатировать, что увеличение продолжительности и удельного давления при вулканизации способствует образованию более упорядоченных структур. При оптимальной продолжительности процесса вулканизации, чем больше упорядоченность в расположении пор, тем выше прочностные свойства вулканизатов вследствие равномерного распределения напряжений. Наличие неоднородностей, группировок пор должно способствовать концентрации напряжений при деформации резин.

К аналогичному выводу приводят результаты исследования структуры пористости резин на основе комбинации каучуков СКМС-ЗОРП и БС-45К, которые в одном

случае содержали порообразователь ЧХЗ-21 — азодикарбонамид (серия I), в другом — комбинацию (всего 4 %масс.) порообразователей ЧХЗ-21 и бикарбоната натрия в соотношении 1:1 (серия 2). Последний характеризуется худшим распределением в резиновой смеси.

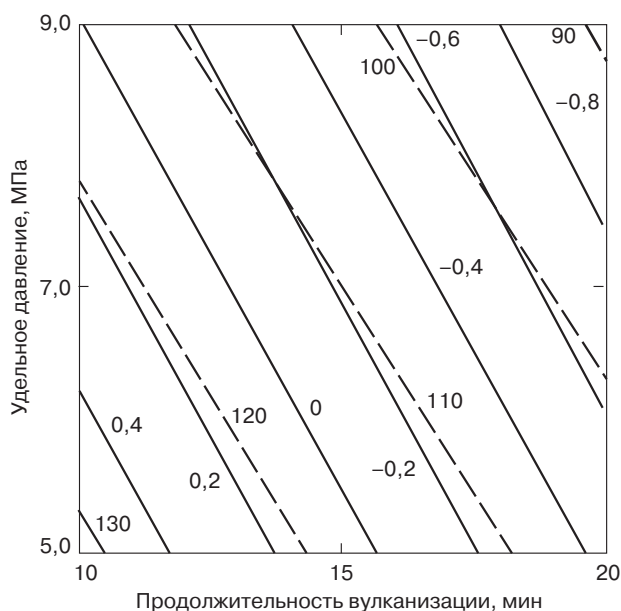


Рис. 10.3. Зависимость коэффициента корреляции (—) и интервала корреляции (---), мкм, в структуре пористых резин от условий вулканизации

Смеси вулканизовались при одной температуре и одинаковой продолжительности процесса методом постоянного сжатия (содержание свободной серы 0,15–0,22%).

В табл. 10.2 представлены результаты определения математического ожидания пористости (M_n), диаметра пор (M_d), среднего квадратического отклонения размеров пор (S_d), условной прочности при растяжении (σ) резин и объемной пористости (Π).

Таблица 10.2. Результаты анализа пористой структуры резин с различными порообразователями

№	M_n	M_d , мкм	S_d , мкм	σ	Π
1	0,27	11,6	10,5	6,4	0,36–0,39
2	0,29	11,4	11,0	5,3	
3	0,23	15,4	8,6	5,4	0,44–0,47
4	0,25	36,2	33,0	3,8	

В случае образцов серии 1 при переходе к удвоенной базе (с 1 до 2) происходит уменьшение дисперсии пористости с 0,0405 до 0,0170, т. е. более чем в 2 раза. Такие структуры, как было показано выше, характеризуются упорядоченным расположением пор. При анализе образцов серии 2 (комбинация порообразователей) обнаружена положительная корреляция между значениями пористости на смежных интервалах измерения. Переход к удвоенной базе (с 2 до 4) сопровождается лишь незначительным уменьшением дисперсии пористости с 0,0473 до 0,0363. Такие структуры, вследствие повышенной концентрации напряжений в зоне группировок пор, характеризуются пониженным значением условной прочности при растяжении.

Поскольку математическое ожидание диаметра пор и средние квадратические отклонения размеров пор двух серий исследуемых образцов практически равны между собой, а значения прочности (при одинаковом, в пределах погрешности, содержании связанной серы) значительно отличаются друг от друга, становится ясным, что причина этих отличий заключается не в размерах пор, а в характере пористой структуры.

Были также исследованы серии образцов пористых резин, содержащих ЧХЗ-21 (серия 3) и комбинацию ЧХЗ-18 (N,N'-динитрозопентаметилентетрамин) и ЧХЗ-21 (серия 4) в отношении 1:1. Условия вулканизации обеспечивали одинаковую пористость вулканизатов. Математическое ожидание диаметра пор резин, содержащих комбинацию порообразователей (серия 4), более чем в два раза превышает этот показатель резин, содержащих ЧХЗ-21 (серия 3). При этом образцы серии 3 имеют в 4 раза меньшие значения среднего квадратического отклонения диаметра пор. Следовательно, использование комбинации порообразователей ведет к увеличению разброса размеров пор, что повышает значение дисперсии пористости таких резин, снижает упорядоченность пористых структур и прочность вулканизатов (см. табл. 10.2).

Анализ экспериментальных результатов показал, что корреляция во взаимном расположении пор существует, т. е. исследуемая картина не является бесструктурной.

На рис. 10.3, как уже упоминалось выше, показана зависимость коэффициента корреляции пористости от продолжительности вулканизации и удельного давления при вулканизации. Здесь же изображены изолинии интервала корреляции $\tau_{\text{МК}}$ (мкм).

Автокорреляция дает возможность отделить «сигнал» от случайного «шума» и выявить внутреннюю структуру случайного процесса. Математическое ожидание централизованного значения «шума» стремится к нулю, что позволяет выделить периодическую составляющую при увеличении интервала $\tau > \tau_{\text{МК}}$.

Таким образом, при увеличении продолжительности и удельного давления вулканизации уменьшается значение коэффициента корреляции и интервала корреляции, т. е. формируются более упорядоченные структуры. Характерно, что при этом плотность увеличивается более чем в два раза, т. е. в общем случае материалу с большей плотностью соответствует более упорядоченная структура.

Это иллюстрирует и рис. 10.4, где показана зависимость условной прочности при растяжении пористых вулканизатов от коэффициента корреляции. Наблюдается общая тенденция увеличения прочности при уменьшении численного значения r , т. е. большей плотности и прочности соответствует большая упорядоченность структуры. Каждой линии прочности соответствует постоянное значение связанной серы

и плотности, численные величины которой (г/см^3) указаны на рис. 10.4. Каждой линии прочности, кроме того, соответствует одинаковое (в пределах погрешности измерения) значение моментов функции распределения пор по размерам. Наклон линий прочности к оси абсцисс возрастает по мере увеличения упорядоченности структуры. Этот факт можно объяснить следующим образом: при малых временах вулканизации упорядоченность структуры мало сказывается на прочности, все зависит от химизма процесса. Наоборот, при анализе пористых резин, вулканизованных большее время, наблюдается существенная зависимость прочности от коэффициента корреляции.

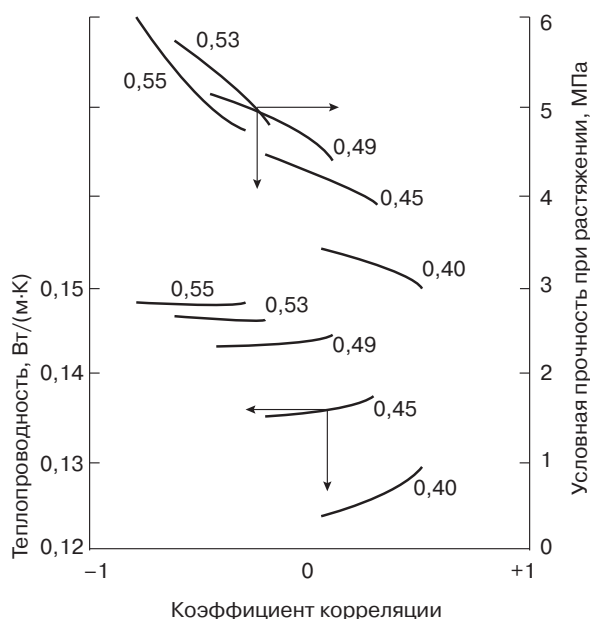


Рис. 10.4. Влияние коэффициента корреляции в структуре пористых резин на теплопроводность и прочность вулканизатов

Поскольку резины низкой плотности получаются в данном случае при меньшей продолжительности процесса, можно наметить следующую кинетику изменения свойств в процессе вулканизации. В начальной стадии процесса порообразование происходит так, что образуются агрегаты пор ($r > 0$), такие вулканизаты из-за локализации дефектов обладают низким значением прочности. По мере вулканизации происходит перераспределение структуры, коэффициент корреляции уменьшается, прочность возрастает. Процесс изменения структуры происходит по цепочке: «от порядка к порядку через беспорядок», однако упорядоченность структуры при $r < 0$ затрагивает уже более тонкие аспекты организации.

В рассматриваемом случае, видимо, упорядоченные структуры ($|r| > 0$) следует считать тонкими структурами, а промежуточное состояние — грубой структурой, отвечающей максимальному значению энтропии.

На том же рисунке показана зависимость теплопроводности от коэффициента корреляции структуры. При высоком значении плотности теплопроводность практически не зависит от упорядоченности структуры. С другой стороны, при низкой плотности теплопроводность возрастает по мере формирования агрегатов пор (при $r > 0$). Такое явление может быть объяснено локализацией термических потоков в матрице полимера.

Таким образом, можно констатировать существование взаимосвязи между макроструктурой пористых вулканизатов и их теплофизическими свойствами. Образование агрегатов пор ведет к концентрации дефектов структуры в определенных зонах, в то время как в других участках длина свободного пробега фононов, ответственных за перенос тепла, возрастает.

Рис. 10.4 может рассматриваться как диаграмма структура–свойство, однако ее анализ не позволяет утверждать, что одной макроструктуре соответствует единственный комплекс свойств вулканизатов, нельзя утверждать и обратное. Причина этого лежит в том, что свойства зависят не только от макроструктуры, а от целого комплекса структурных параметров. Можно предположить, что комплексу структурных параметров (в том числе параметров, характеризующих макроструктуру) соответствует единственный комплекс свойств.

Это подтверждается и анализом экспериментальных результатов изучения сканогаммы как реализации случайного процесса.

Исследовались фотоизображения (негативы) пористых резин на основе комбинации каучуков СКМС-ЗОРП и БС-45К. Фотографирование производилось в отраженном свете при косом освещении, что определило резкое отличие резины и пор по оптической плотности и позволило анализировать пористую резину как двухфазную систему.

Негативы сканировались на установке «Протва-2» при следующих режимах: диаметр сканирующего зонда 70 мкм, скорость перемещения столика 60 мм/мин, шаг отсчета 50 мкм, время измерения 3 мин, число измерений в каждом негативе — около 4000.

Было обнаружено, что гистограмма распределения вероятности для пористых резин имеет два пика. Левый пик кривой распределения характеризует математическое ожидание фазы пор, правый — математическое ожидание твердой фазы — собственно резины.

Статистический анализ, включающий расчет моментов (амплитудный анализ), автокорреляционной функции и функции спектральной плотности производился по первичной сканогамме объекта с применением ЭВМ.

В результате *амплитудного анализа* по первичной сканогамме были определены четыре статистических момента распределения (M_x — математическое ожидание пористости, D — дисперсия пористости, S_k — коэффициент асимметрии, E — коэффициент эксцесса), количественно характеризующие пористость материала.

Параллельно была определена пористость резин (Пр, %) по стандартной методике.

Необходимо объяснить, что это такое.

Математическое ожидание — среднее значение статистики, вычисленное по бесконечному числу выборок одинакового объема, взятых из данной совокупности.

$$M_x = \int_a^b x \varphi(x) dx, \quad (10.5)$$

где $\varphi(x)$ — плотность вероятности распределения случайной величины. Понятие «математическое ожидание» можно представить как абсциссу центра тяжести стержня.

Дисперсия случайной величины — математическое ожидание квадрата отклонений случайной величины от ее математического ожидания. Характеризует рассеяние точек около математического ожидания:

$$D_x = \int_a^b (x - M_x)^2 \varphi(x) dx. \quad (10.6)$$

Механическим аналогом дисперсии может служить момент инерции системы.

Третий момент относительно среднего связан с асимметрией кривой:

$$m_3 = \int_a^b (x - M_x)^3 \varphi(x) dx. \quad (10.7)$$

Унимодальная (одновершинная) кривая с $m_3 < 0$ имеет левостороннюю (отрицательную) асимметрию, т. е. имеет «хвост» слева. Если $m_3 > 0$, то имеет место правосторонняя (положительная) асимметрия. Для симметричной кривой $m_3 = 0$. Для сравнения кривых, имеющих различный масштаб, используют нормированный показатель — коэффициент асимметрии $S_k = m_3/D^{3/2}$.

Четвертый момент относительно среднего связан с островершинностью кривой:

$$m_4 = \int_a^b (x - M_x)^4 \varphi(x) dx. \quad (10.8)$$

Поскольку этот момент для нормального распределения равен 3, удобно в качестве характеристики крутовершинности использовать коэффициент эксцесса $E = m_4/D^2 - 3$. Островершинные кривые характеризуются $E > 0$, кривые с пологими вершинами и многовершинные кривые имеют $E < 0$.

Воспроизводимость амплитудного анализа иллюстрируется на примере пористых резин, полученных при продолжительности вулканизации 15 мин и удельном давлении 6,5 МПа (табл. 10.3).

Таблица 10.3. Результаты амплитудного анализа резин

№	M_x	D	S_k	E	Π_p
1	59,3	1455	−0,11	−1,8	58,3
2	59,4	1475	−0,12	−1,8	58,3
3	59,1	1380	−0,08	−1,7	60,0
4	54,4	1464	−0,04	−1,7	56,6
Среднее	58,1±2,4	1444±43	−0,09±0,04	−1,75±0,05	58,3±1,4

Результаты, приведенные в табл. 10.3, свидетельствуют о высокой воспроизводимости амплитудного анализа. Пористость, рассчитанная по сканограмме (M_x), практически совпадает с пористостью P_p , определяемой по стандартной методике. В случае анализа сканограмм рассмотрение статистических моментов, безусловно, оправдано. Причем если каждый из моментов предполагается конечным, то функция распределения есть единственная функция, обладающая этими моментами [20, с. 199].

Значение дисперсии для сканограммы может характеризовать стабильность величины оптической плотности, т. е. является параметром стабильности именно в том смысле, в котором он был введен в предыдущей главе.

В случае двухфазного распределения в системе резина–поры физический смысл коэффициента асимметрии состоит в том, что фазы дают различный вклад в общую структуру материала. Отрицательное значение коэффициента асимметрии указывает на преобладание фазы пор. При анализе по оптической плотности отрицательный эксцесс свидетельствует о «размытости» среднего значения оптической плотности.

Амплитудный анализ не дает возможности исследовать закономерности распределения пор в материале. Для решения этой задачи производится автокорреляционный и спектральный анализ по сканограмме.

Эти два вида анализа могут рассматриваться как частные случаи фазового анализа, позволяющие отделить сигнал от шума и выявить скрытые периодичности в расположении элементов структуры, т. е. разделить геометрический образ на составляющие, находившиеся ранее в суперпозиции. В данном случае сложность оценивается величиной массива элементарных гармоник, составляющих спектральную плотность.

Ситуацию можно представить следующим образом. На листе бумаги изображены жирные точки – это поры на белом фоне. Причем проставлены регулярно с каким-то шагом. А теперь представьте себе, что это не бумага, а абсолютно прозрачная пленка, и не один лист, а сто. Если расположить листы друг под другом, мы не будем видеть, что этих листов много, а если их все хаотически сдвинуть, получится такая картина, в котором мы никогда не узнаем, что на самом деле это множество идеально расположенных относительно друг друга точек. Картина усложнится, если еще расстояния между точками на листах будет различным. Задача состоит в том, чтобы в этом множестве точек выявить порядок.

Рассмотрим результаты исследования структуры двух срезов образца пористой резины. Первый срез соответствовал среднему сечению образца, второй – сечению, расположенному вблизи поверхности пресс-формы. Четыре статистических момента исследуемых образцов и результаты корреляционного и спектрального анализа приведены в табл. 10.4.

Результаты анализа показывают, что при практически одинаковых закономерностях расположения пор в резине (табл. 10.4), объекты исследования имеют различную пористость.

Рассмотрим влияние продолжительности и удельного давления при вулканизации на результаты амплитудного, автокорреляционного и спектрального анализа.

Таблица 10.4. Результаты амплитудного и спектрально-частотного анализа резин

№	M_x	D	S_k	E	τ_{mk} , мкм
1	69,2	1218	−0,60	−1,4	140
2	54,0	1541	−0,07	−1,7	120
№	Координаты максимумов, мкм				
	автокорреляционной функции			спектра	
1	220	320	520	100	250
2	190	270	500	90	240

На рис. 10.5 показана зависимость математического ожидания пористости, дисперсии пористости, коэффициентов асимметрии и эксцесса от указанных факторов. Пористость мало зависит от давления и существенно уменьшается при увеличении продолжительности вулканизации. При этом возрастает дисперсия, уменьшается коэффициент эксцесса. Гистограмма амплитудного распределения становится размытой, в меньшей степени проявляется ее бимодальность. Третий центральный момент — коэффициент асимметрии соответствует отношению темных и светлых участков структуры. Положительная асимметрия свидетельствует о преобладании темной фазы, отрицательная — светлой (при измерении в коэффициентах пропускания).

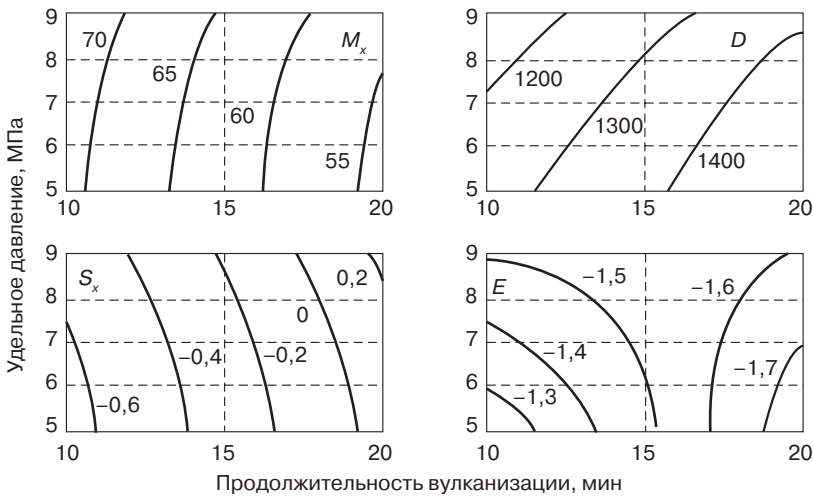


Рис. 10.5. Амплитудный анализ структур пористых резин при варьировании рецептурных факторов

Возрастание асимметрии связано с уменьшением пористости.

Автокорреляционные функции и функции спектральной плотности четырех резин в качестве примера представлены на рис. 10.6. Наблюдается уменьшение интервала корреляции при возрастании давления и продолжительности вулканизации (см. рис. 10.3).

Можно выделить следующие общие тенденции:

- 1) высокая вероятность наличия периода идентичности в области 150–170 мкм;
- 2) наличие таких периодов на кратных расстояниях: 350 мкм (спектр 1), 380 мкм (спектр 2), 560, 600 мкм (спектры 3, 4);
- 3) малая вероятность наличия упорядоченности в области 280 мкм (спектры 2, 4).

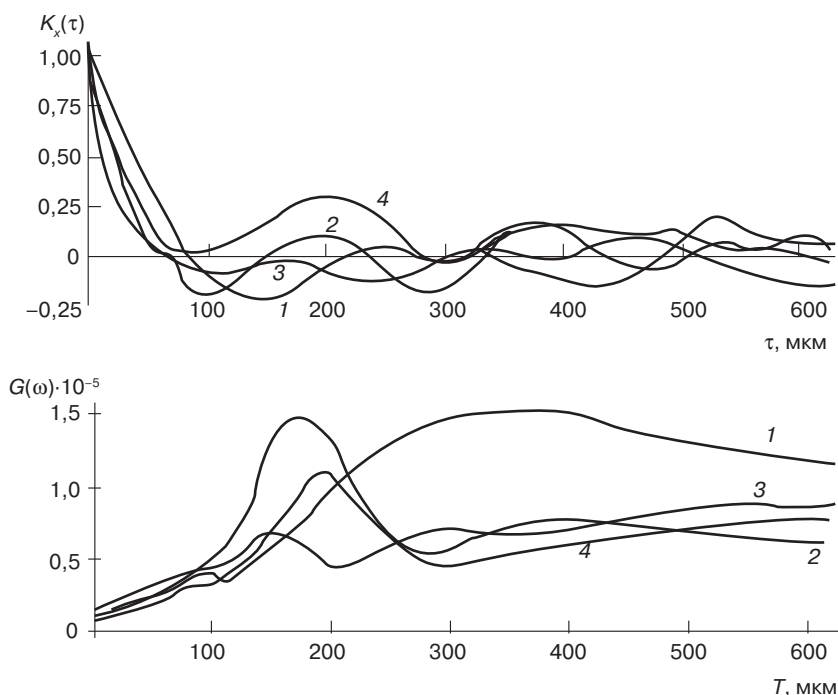


Рис. 10.6. Результаты автокорреляционного и спектрального анализа пористых резин при варьировании рецептурных факторов

Использованный способ оптико-структурного анализа пористых резин на основе их статистических характеристик дает возможность количественно определить содержание фазы пор и решить важную задачу о характере распределения пор в резине.

Таким образом, взаимосвязь свойств резин (в том числе и тепловых свойств) и их зависимость от структуры наблюдается на всех уровнях ее организации. Это усложняет и одновременно упрощает задачу формулирования условий однозначности при решении дифференциального уравнения теплопроводности. Упрощает, потому что использование достаточно надежных корреляционных соотношений позволяет сократить объем экспериментальных исследований, увеличивает

их экспрессность. С другой стороны, такой подход требует серьезного физического обоснования, которое не может быть сделано в рамках ограниченной экспериментальной выборки.

Комплексная стратегия поиска условий однозначности при активном применении математико-статистических методов обуславливает и несколько иной подход к решению прямых задач теплопроводности. Основные принципы этого подхода и результаты его реализации обсуждаются в следующем разделе главы.

10.2. Моделирование процессов теплообмена при изготовлении резиновых изделий с использованием математического аппарата теории случайных процессов

Тепло является важнейшим фактором технологического процесса получения резиновых изделий. Поэтому значительные усилия направлены на решение задачи снижения тепловых затрат в процессе вулканизации резин. Это и использование различных систем обогрева, и применение оптимальных методов контроля и регулирования температуры и продолжительности процесса, и создание непрерывных линий.

Во всех случаях большое влияние на качество вулканизатов и резиновых изделий оказывает структура температурного поля в вулканизуемом объекте. Непрерывная регистрация этой структуры и ее оптимальное регулирование дает возможность получения наилучших технологических решений. Чаще всего аналитические описания поля температур трудно получить в силу сложной конфигурации изделий, наличия переноса массы, внутренних источников тепла и др. В этой ситуации особое значение приобретает возможность получения математических моделей, обычно используемых для описания динамических свойств химико-технологических объектов. К ним относятся: нелинейные разностные уравнения, дискретные и непрерывные функциональные ряды, дифференциальные уравнения, обыкновенные и в частных производных, уравнения в конечных разностях [7, с. 205–207, 240–245, 21, с. 254–255, 22, с. 427–430, 23, с. 290–294, 24, с. 236–239, 25, с. 189–193].

В настоящее время наблюдается тенденция к переходу от управления отдельными объектами и контурами к комплексному управлению всем технологическим процессом на основе применения современных вычислительных средств. При этом ЭВМ используется как для оперативной обработки, контроля и анализа протекания процесса, так и для непосредственного управления технологическим процессом.

Обычно используется следующая процедура синтеза алгоритма управления.

1. Анализ модели объекта на основе детерминированных физических законов и синтез номинального алгоритма управления без учета ошибок, возмущений и неопределенностей.

2. Анализ и синтез стохастических алгоритмов оценивания, позволяющих устранить наличие неопределенностей в оценке состояний объекта и ошибок в измерениях.

3. Синтез стохастического алгоритма управления, обеспечивающего минимальное отклонение реальной траектории объекта от номинальной.

В этой связи большое значение имеет построение математической модели, адекватно описывающей объект, поскольку все последующие этапы разработки системы управления зависят от нее.

Можно указать два возможных подхода к созданию математической модели объекта управления. Первый подход базируется на теоретическом анализе комплекса физико-химических процессов, протекающих в объекте, и получении на основе этого анализа математической модели. Другой подход реализует экспериментально-статистические методы построения математических моделей объекта на основе изучения входных и выходных координат объекта.

Одним из наиболее сложных с физико-химической точки зрения и с позиций возможности его формализации является процесс производства пенорезин из латекса.

Используемый в нашей промышленности агрегат для желатинирования-вулканизации латексной пены предоставляет некоторые, но, строго говоря, ограниченные возможности для управления.

Поскольку разница между температурой греющей среды и температурой внутри формы может достигать существенной величины, здесь имеются определенные возможности в плане интенсификации режимов термообработки, однако они лимитируются тем, что чрезмерное повышение температуры приводит к ухудшению структуры пористости в пенорезине.

Поэтому основные усилия, направленные на построение оптимальных режимов термообработки, должны быть сконцентрированы в следующих направлениях:

- а) анализ термограмм желатинирования-вулканизации латексных пен (изменение температуры в характерных точках изделия и греющей среды во времени);
- б) анализ температурных полей при термообработке латексной пены при изготовлении изделий различных конструкций;
- в) нахождение координат точки с минимальной температурой, временного дрейфа этих координат и значений температуры как функции времени для этой точки;
- г) вычисление эффектов вулканизации для характерных точек изделия и точки среды;
- д) расчет тепловых потоков и анализ уравнений теплового баланса агрегата;
- е) построение разностных моделей для управления.

Система управления должна включать внешний контур, определяющий наилучший температурный режим вулканизации изделия. Этот режим зависит от формы изделия, скорости движения конвейера и начальных условий, определяемых предварительным прогревом форм. Контур вырабатывает управляющее воздействие, сопряженное с исполнительными устройствами, определяющими параметры греющей среды. Кроме того, система управления процессом вулканизации должна использовать локальные регуляторы для стабилизации оптимальных температурных режимов по зонам.

При этом наилучший температурный режим можно определить с помощью ЭВМ в зависимости от начальных условий, геометрии изделия, критерия оптимальности режима. В таком случае необходимо предварительное знание математической модели,

описывающей изменение температур в зонах аппарата как функции количества и параметров теплоносителя, и модели, связывавшей температуру греющей среды с температурой внутри изделия.

Некоторую трудность представляет необходимость измерения начального распределения температур в изделии, но ее можно преодолеть, используя допущение об одинаковых начальных условиях для всех форм идентичной геометрии.

В этом случае управление процессом термообработки может осуществляться в программном режиме, причем оптимальные режимы прогрева могут определяться для различных форм и скоростей конвейера заранее и оформляться в виде инструкций.

Построение модели базируется на экспериментально-статистических методах оценивания параметров динамических объектов [26–28].

Так, дифференциальное уравнение теплопроводности в общем виде можно представить следующим образом:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = F\left(x, t, A, T(x, t), \frac{\partial T(x, t)}{\partial x}, \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}\right), \quad (10.9)$$

где T — температура; параметр характеризующий состояние объекта в момент времени t в точке x ; A — условия однозначности.

Заменяя дифференциальное уравнение в частных производных уравнением в частных разностях, будем иметь (аппарат разработан Л. А. Бахваловым):

$$T(r, n) = f(A, r, n, T(r-1, n-1), T(r, n-1), T(r+1, n-1), \dots) \quad (10.10)$$

где $r = 1, 2, \dots, R$; $n = 0, 1, \dots, N$; $T[0, n]$ и $T[r, 0]$ характеризуют краевые условия.

При использовании модели (10.10) следует брать достаточно малые приращения Δx и Δt , что повышает точность аппроксимации, но увеличивает число экспериментальных точек, где необходимо измерить состояние объекта. Кроме того, уменьшение Δx и Δt ведет к тому, что становится необоснованным предположение о независимости ошибок измерений $T[r, n]$; появляется опасность получения смещенных оценок.

В связи с этим необходимо организовать эксперимент так, чтобы при небольшом числе измерений получить наилучшие оценки неизвестных коэффициентов уравнения (10.10). В рассматриваемом случае решения прямой задачи теплопроводности при небольших значениях коэффициента теплопроводности описание может быть достигнуто с достаточной точностью при использовании небольшого числа членов уравнения в частных разностях.

Следовательно, температурное поле в любой момент времени можно получить, если известны оценки коэффициентов уравнений. При этом величина дисперсии восстановления состояния объекта в любой момент времени является минимальной.

Этим требованиям удовлетворяет применение либо минимаксных планов, обеспечивающих получение наименьшего значения максимума дисперсии восстановления, либо D -оптимальных планов, минимизирующих обобщенную дисперсию [29]. Если число экспериментальных точек достаточно велико, D -оптимальные планы будут одновременно и минимаксными, но при ограниченном числе точек применяемый

D -оптимальный план целесообразно проверить по величине дисперсии восстановления в узлах пространственно-временной решетки.

В рассматриваемой ситуации анализа теплового режима вулканизации наиболее эффективным с точки зрения осуществления контроля этого процесса явилось бы построение моделей, связывающих параметры, которые поддаются управлению (температура или количество тепла) и параметры, характеризующие степень завершенности процесса.

Обычно в качестве такого параметра используется эквивалентное время, которое в точке x является некоторым функционалом от изменения температуры в этой точке, а последняя зависит от начальных условий, температуры греющей среды, условий теплообмена (граничные условия), скорости переноса внутри тела (физические условия), геометрии. Этим проблемам посвящены обстоятельные исследования, проведенные А.И. Лукомской и ее сотрудниками.

Можно использовать в качестве критерия оптимальности режима термообработки следующую величину:

$$G(T(t), S) = \int_x (S(x, \tau) - S^*(x, \tau))^2 dx \quad (10.11)$$

где $S(x, \tau)$ — распределение эквивалентного времени в пространстве в момент времени $t = \tau$; $S^*(x, \tau)$ — желаемое распределение эквивалентного времени в момент времени $t = \tau$.

Другим более простым критерием оптимальности может служить выражение:

$$G^*(T(t), S(x, t)) = S(x_0, \tau) - S(x_1, \tau) \quad (10.12)$$

где $S(x_0, \tau)$ и $S(x_1, \tau)$ — максимальное и минимальное эквивалентное время в двух точках изделия в момент времени τ .

Минимизация этого отклонения осложнена крайней трудностью формализации изучаемого процесса, разнообразием геометрии изделий, малой изученностью краевых условий задачи.

Одним из элементов, необходимых для осуществления контроля процесса, является система, производящая измерение температуры $T = T(t)$ и непрерывное интегрирование для вычисления эквивалентного времени вулканизации.

Экспериментальное исследование температурных полей в изделиях в процессе желатинирования-вулканизации латексной пены, изготовленной по серийной рецептуре, позволило обнаружить наличие существенных градиентов температур внутри изделий и непроизводительного расхода тепла. Это относится как к анализу формовых (двухместная подушка ГАЗ-53, спинка двухместного сидения автомобиля «Москвич»), так и неформовых изделий (губчатая пластина толщиной 40 мм).

Перепад температур в различных участках изделия в зависимости от его размеров достигал для формовой губки 10–15 °С (при толщине 150 мм) и 5–6 °С (при толщине 50 мм). При термообработке пенорезины в форме в среде горячего воздуха разность температур греющей среды и наружных участков изделия, прилегающих к поверхности формы, может достигать 40 °С, что, вероятно, связано с низким значением

коэффициента теплоотдачи при использовании воздуха в качестве теплоносителя. В случае неформовой губчатой пластины перепад температур в различных участках изделия достигал 5–6 °С, а разность температур греющей среды и материала — 80 °С. Температура внутри изделия при неформовом способе получения на 15–20 °С меньше, чем в случае вулканизации в форме, тогда как температура греющей среды на 30 °С выше аналогичных показателей формовой вулканизации.

На рис. 10.7 показаны температурные кривые для различных участков изделия — двухместной подушки ГАЗ-53 в процессе термообработки на агрегате желатинирования-вулканизации. По этим кривым можно просчитать кинетику изменения эквивалентного времени. Результаты такого расчета иллюстрируются рис. 10.7.

Можно видеть, что к моменту окончания вулканизации накопленное эквивалентное время (т. е. степень вулканизации) в различных точках лежит в пределах 70–120 мин, т. е. имеет место существенная неоднородность в свойствах вулканизата по сечению изделия.

Эти различия меньше для изделий меньших габаритов: спинка автомобиля «Москвич» (рис. 10.8) и неформовая пластина (рис. 10.9). Небезынтересно заметить, что в первом случае режим может быть сокращен. Действительно, из рис. 10.8 видно, что за 55 мин вулканизации (с учетом 10 мин охлаждения) процесс проходит на 160–170 мин эквивалентного времени, тогда как эксперимент показывает, что достаточно 80 мин. Следовательно, длительность пребывания формы в вулканизаторе можно сократить на 5–7 мин без опасности недовулканизации.

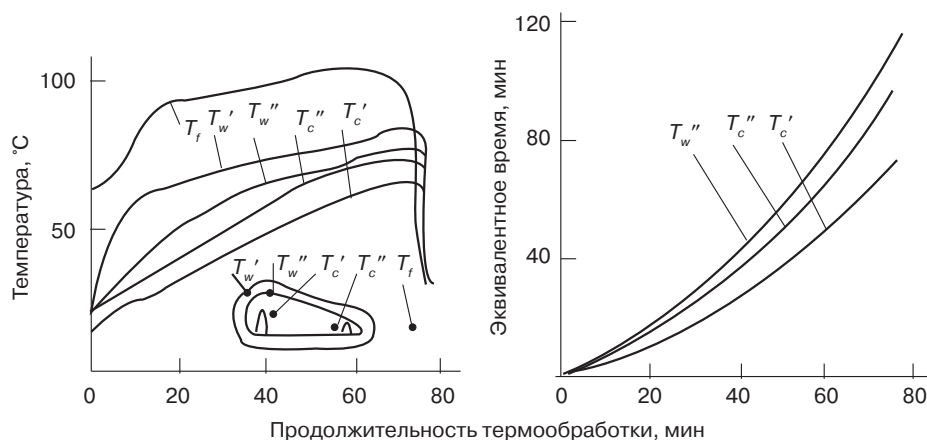


Рис. 10.7. Термограммы и диаграммы вулканизации (подушка ГАЗ-53)

Неформовая губка вулканизуется воздухом лишь до 30–35 мин эквивалентного времени и поступает на дальнейшую термообработку.

Более подробно были изучены температурные поля при термообработке латексной пены в форме, поперечный разрез которой (без указания пальцев) иллюстрируется рис. 10.10. Здесь же показано расположение шаблонов, на которых монтировались спайи термпар (точки размещения спаев обозначены на рисунке). Параллельно

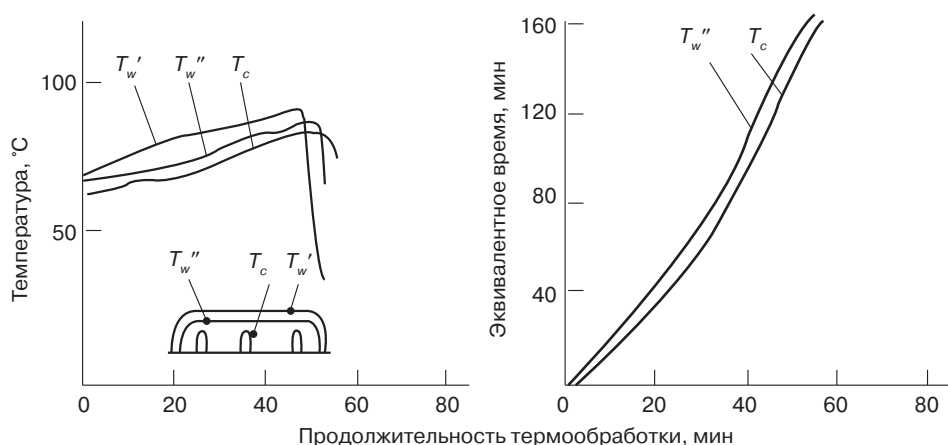


Рис. 10.8. Термограммы и диаграммы вулканизации (сидение автомобиля «Москвич»)

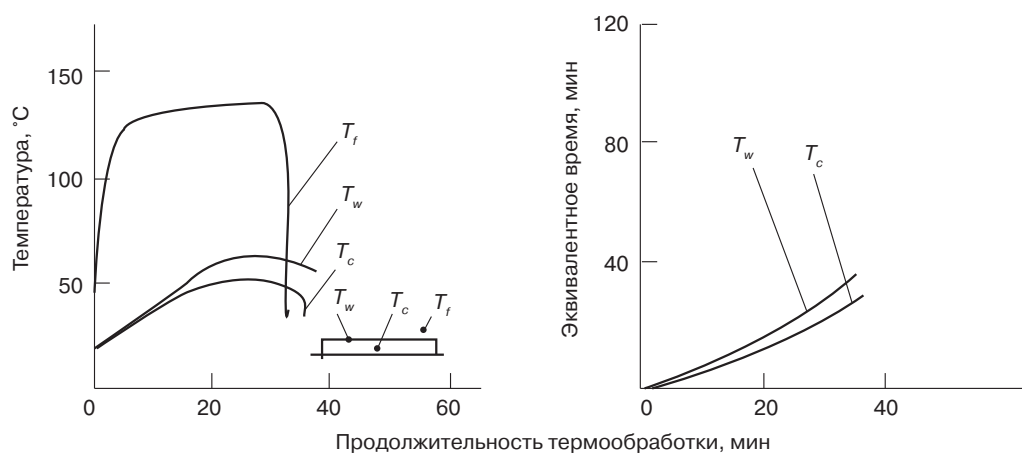


Рис. 10.9. Термограммы и диаграммы вулканизации (неформовая пластина)

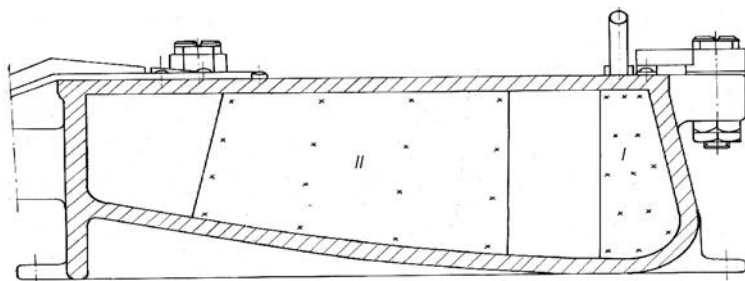


Рис. 10.10. Схема размещения измерительных ячеек



Рис. 10.11. Термограммы (схема I)

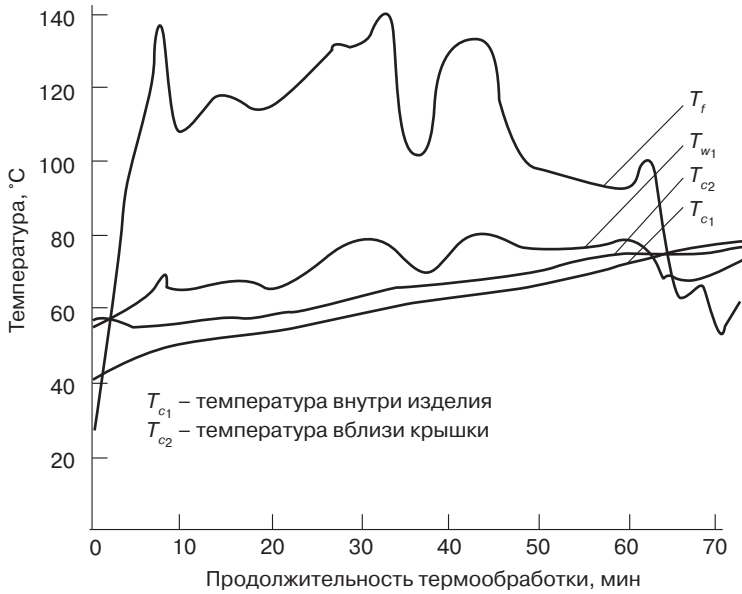


Рис. 10.12. Термограммы (схема II)

измерялась температура греющей среды, температуры на наружной и внутренней поверхности формы. На рис. 10.11 в качестве иллюстрации показана зависимость температуры греющей среды, температуры на наружной и внутренней поверхности формы, температуры в центральной точке изученной области (см. схему I размещения термопар в торцевой части на рис. 10.10) и температуры вблизи крышки от продолжительности термообработки.

Можно утверждать, что наблюдается три ярко выраженных пика на термограмме: на 7–8 мин, на 24–30 мин, на 40–46 мин, причем в последних двух случаях эти пики имеют существенное (5–6 мин) плато.

Разница между температурой греющей среды и температурой наружной поверхности формы составляет в интервале от десятой до тридцатой минуты 30°C и более, затем снижается вследствие уменьшения температуры среды, а к сороковой минуте опять возрастает до 30°C . Перепад температур на стенке формы составляет $20\text{--}40^{\circ}\text{C}$, а разница температур в различных участках формы доходит до $15\text{--}20^{\circ}\text{C}$. Характерно, что чем больше температура материала, тем выше темп повышения температуры во времени. Колебания температуры среды сказываются на изменении температуры на наружной поверхности формы, а на температурах внутри формы практически не сказываются.

При размещении термопар в рабочем участке изделия (схема II на рис. 10.10) обнаружилась картина, более близкая к изотермической (рис. 10.12).

Как видно из рис. 10.11, имеет место практически линейное возрастание температуры изделия во времени в различных его участках. Причем чем меньше температура, тем меньше скорость роста. Поэтому с увеличением продолжительности термообработки общий разброс температур в изученной области будет возрастать. Это можно наблюдать на рис. 10.13, где представлены изотермы как функции координат и времени.

Изотермы построены методом линейной интерполяции по экспериментальным точкам и дают грубое представление о распределении температур. Можно видеть, что если на десятой минуте перепад температур в изученной области составлял не более $6\text{--}8^{\circ}\text{C}$, то через 50 мин после начала процесса эта величина достигла 20°C .

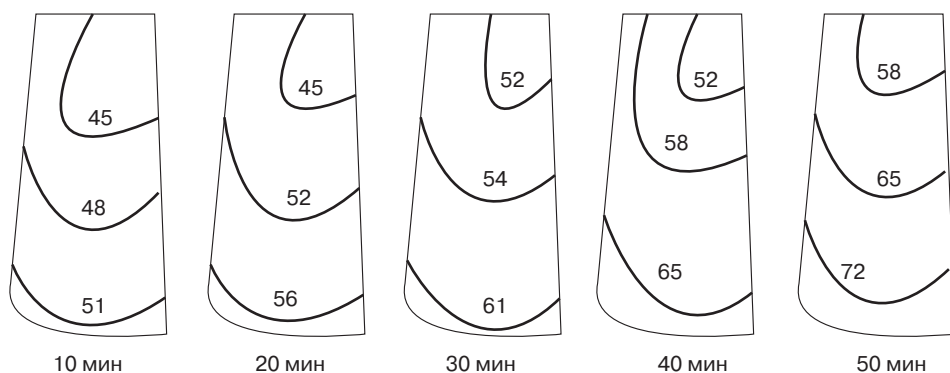


Рис. 10.13. Изотермы ($^{\circ}\text{C}$), схема I

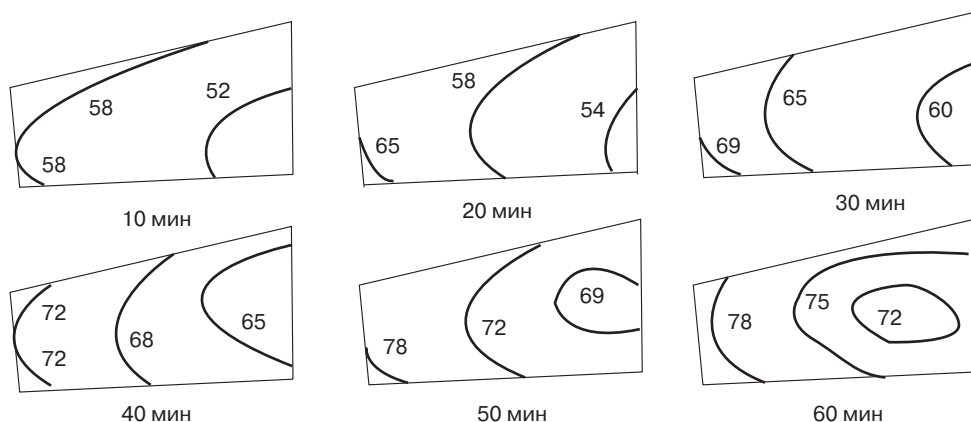


Рис. 10.14. Изотермы (°C), схема II

Вид изотерм сравнительно прост, и можно утверждать, что во всех случаях минимальная температура имеет место вблизи крышки формы, что связано с интенсивным остыванием крышки по время перезарядки и с особенностями работы калориферов.

Построение изотерм для схемы II в различные моменты времени показано на рис. 10.14. Перепад температур в изученной области меняется с 7 °C (десятая минута) до 12 °C (двадцатая-тридцатая минута), затем несколько снижается в связи с уменьшением температуры греющей среды (см. рис. 6.12) до 8–11 °C, а в конце процесса — до 6–7 °C.

Как уже упоминалось, минимальная температура для схемы I (см. рис. 10.10) имеет место вблизи крышки формы, координата этой точки лишь незначительно «дрейфует» по горизонтали. Зависимость минимальной температуры внутри исследованной зоны изделия от времени и координаты по горизонтали представлена на рис. 10.15. Эти вычисления производились следующим образом. По данным экспериментальных измерений температур в 13 точках по схеме I были построены уравнения регрессии, характеризующие зависимость температуры от координат $T = f(x_1, x_2)$, затем определялись координаты экстремальной точки. На рис. 10.15 координата x_1 отсчитывалась от переднего края изделия со стороны крышки формы (в мм). Координата x_2 во всех случаях соответствовала положению на крышке формы. Общий разброс значений по координате x_1 составляет не более 4 мм, что свидетельствует о сравнительной устойчивости температурного поля, о сохранении взаиморасположения изотерм.

Применяя в качестве эквивалентной температуры 50 °C, можно вычислить кинетику накопления эквивалентного времени для различных точек исследованной области.

Анализ этих результатов показывает, что в случае схемы I степень вулканизации в нижней части формы почти вдвое превосходит степень вулканизации точек вблизи крышки, где, как уже было показано, температура существенно меньше. Этот факт свидетельствует о скрытых резервах интенсификации процесса термообработки пенорезины.

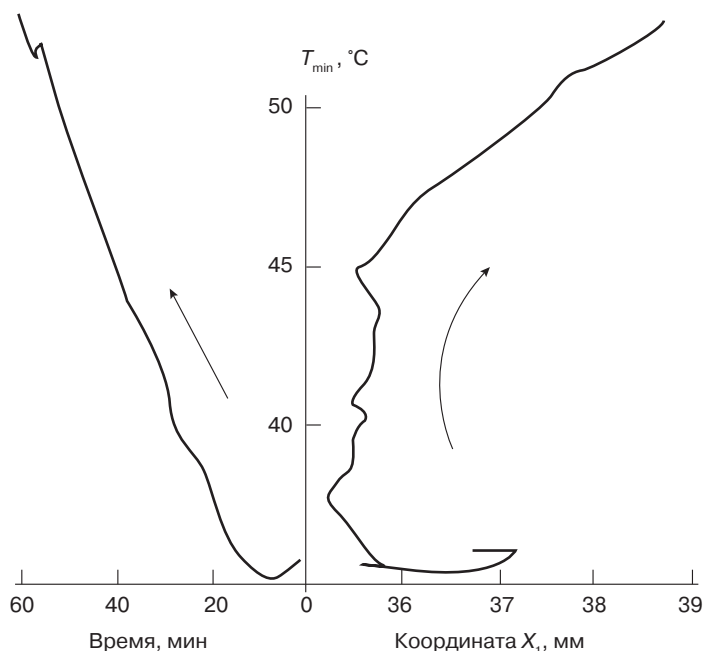


Рис. 10.15. Траектория движения точки с минимальной температурой в пространстве и времени

В рабочей части изделия нет столь существенных различий в эффектах процесса, в накопленных эквивалентных временах. Здесь и температура выше (см. рис. 10.14) и перепад температур в изученной области меньше. Это, вне сомнения, объясняется наличием пальцев, облегчающих конструкцию, улучшающих эксплуатационные качества и условия теплообмена.

Независимо от конструкции изделия лимитирующей зоной при желатинировании-вулканизации будет являться зона около крышки в месте, где резина имеет наибольшую протяженность между греющими поверхностями.

Поэтому основные мероприятия по интенсификации теплообмена при изготовлении пенорезин должны быть сведены к регулированию съема тепла с крышки. С учетом этого необходимо организовывать систему дополнительного обогрева.

Тепловой поток, поступающий в форму, может быть рассчитан как разница энтальпий воздуха, нагреваемого в калориферах, до и после процесса теплообмена на границе воздух-форма. Однако такой расчет вызвал бы затруднения, т. к. точные значения энтальпий неизвестны.

Величина коэффициента теплоотдачи от воздуха к стенке может быть ориентировочно рассчитана по критериальным уравнениям, однако скорости движения теплоносителя и угол атаки также неизвестны.

Остается экспериментальный путь. Анализируя приведенные выше термограммы, можно видеть, что разность между температурой греющей среды и поверхности

составляет 40–50 °С. Учитывая загрязненность формы, принимаем эффективное значение теплопроводности составной стенки 60 Вт/(м·К). Тогда получим в качестве приближения коэффициент теплоотдачи $\alpha = 60\text{--}120 \text{ Вт}/(\text{м}^2\cdot\text{К})$.

Прямые определения коэффициента теплоотдачи также дают близкие к указанным значения. Опробован был еще один метод определения коэффициента теплоотдачи, в котором используется особенность изотерм, состоящая в том, что в экстремальных точках на рис. 10.11 и 10.12 градиенты температуры равны нулю и, следовательно, равны нулю тепловые потоки. В этом случае также получены результаты, входящие в указанный выше интервал.

На рис. 10.16 показано изменение во времени удельного теплового потока, поступающего в форму. Наблюдается чрезвычайно неравномерный подвод тепла, связанный, вероятно, с несовершенной системой обогрева. Общее количество тепла можно вычислить путем графического интегрирования.

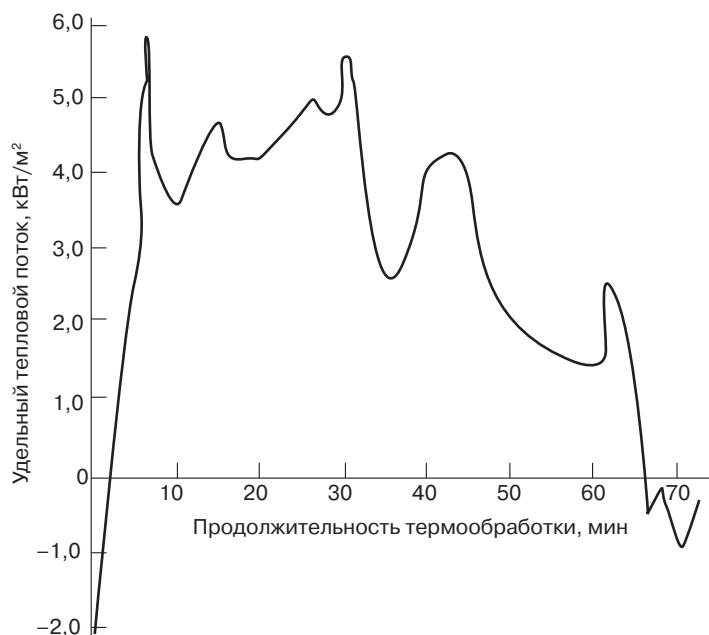


Рис. 10.16. Изменение удельного теплового потока во времени

Для нахождения уравнений, описывающих температурные поля в изделии в процессе термообработки, был проведен эксперимент по плану, близкому к G -оптимальному, минимизирующему на множестве планов максимальное значение дисперсии оценки поверхности отклика.

Поскольку высота формы в виде параллелепипеда была существенно меньше длины и ширины, то еще до эксперимента было очевидно, что наибольшие температурные перепады должны быть по высоте формы (координата x_1).

Латексная пена заливалась в холодную форму, которая помещалась в печь, предварительно нагретую до 90°C .

На рис. 10.17 показан реализованный температурный режим в печи, температуры в поверхностном слое, у дна формы и температуры в середине изделия в зависимости от времени. Перепады температур по высоте изделия намного больше, чем перепады температур по длине, что позволяет описать процесс распространения тепла для данной формы как функцию лишь одной координаты x_1 .

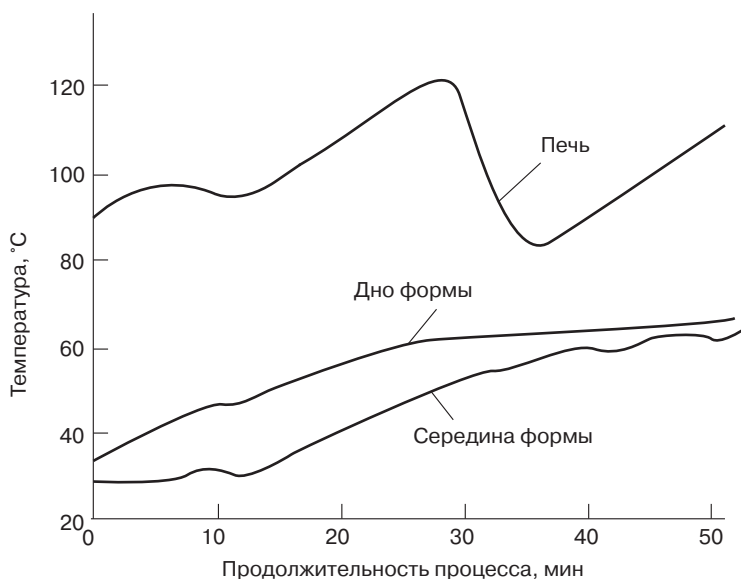


Рис. 10.17. Термограммы

Было найдено уравнение регрессии, описывающее распределение накопленного эквивалентного времени к моменту окончания процесса внутри параллелепипеда размерами $30 \times 60 \times 70$ мм, симметрично расположенного относительно центра формы.

Уравнение имеет вид:

$$S_{\text{экр}}(x_1, x_2, x_3, \tau = 70 \text{ мин}) = 88,1 - 23,5x_1 + 15,0x_2 - 17,0x_2x_3 + 11,7x_1^2.$$

По этому уравнению была определена точка $x_{\min}^* = \{\tilde{x}_1 = 15; \tilde{x}_2 = -30; \tilde{x}_3 = -35\}$, для которой $S_{\text{экр}}(\tau = 70 \text{ мин}) = \min$.

Кинетика накопления эквивалентного времени в этой точке показана на рис. 10.18. Там же показано накопление эквивалентного времени для точки, лежащей у дна формы, и точки в центре изделия.

На рис. 10.19 показаны распределения эквивалентного времени по координате x_1 в различные моменты времени. Имеет место неравномерность накопления эквивалентного времени по координате x_1 и смещение точки с минимальным эквивалентным временем по оси x_1 вследствие неравномерного по времени и по высоте формы прогрева.

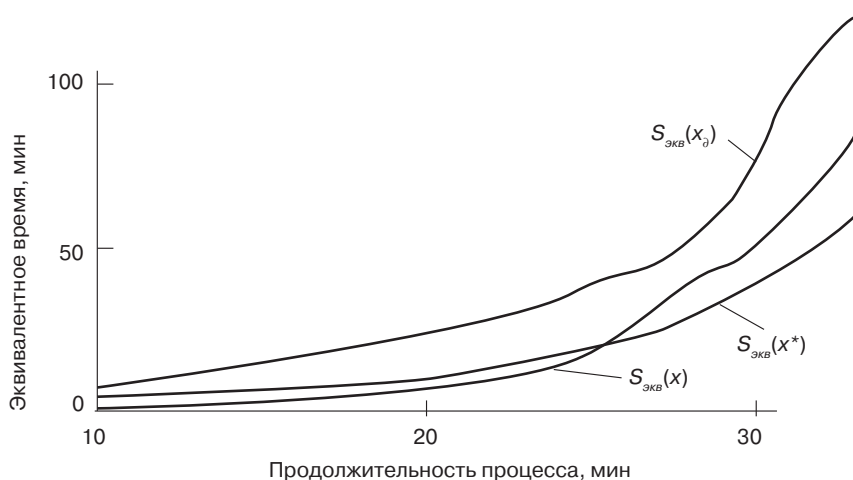


Рис. 10.18. Диаграмма вулканизации

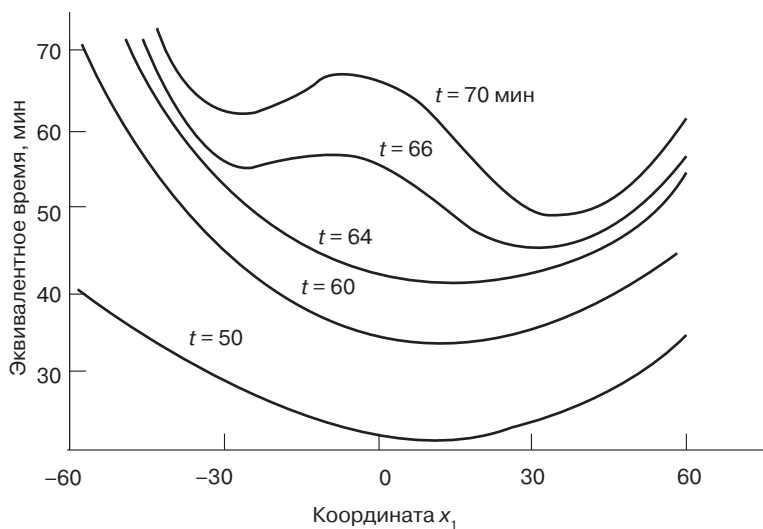


Рис. 10.19. Распределение эквивалентных времен

Был получен дискретный аналог нестационарного уравнения температурного поля:

$$T[i, k+1] = T[i, k] - 27l(T[i-1, k]) - 27T[i, k] + T[i+1, k] + 293k - 0,129k^2 + 0,209k^3 - 58,6 + 93(T[i-1, k]) - 2T[i, k] + T[i+1, k])k. \quad (10.13)$$

Уравнение определялось для интервала $-1 < x_1 < +1$ (т. е. $-15 < \tilde{x}_1 < 15$ в натуральном масштабе).

Однако вычисление таких моделей не всегда возможно из-за трудоемкости эксперимента. Поэтому для получения уравнений, связывающих температуру в середине изделия с температурой в поверхностном слое, а также моделей, связывающих температуру в поверхностном слое с температурой в печи, и, наконец, моделей, связывающих температуру в печи с напряжением питания, был организован специальный эксперимент. Здесь напряжение питания печи изменялось по специальному закону, обеспечивающему получение оценок коэффициентов уравнения, связывающего температуру в печи с напряжением термостата, с минимальной обобщенной дисперсией.

Были получены следующие уравнения:

1. Уравнение, связывающее напряжение питания с температурой в печи:

$$y[n+1] = 0,82y[n] + 0,34y[n-1] - 0,32y[n-2] + 0,15y[n-4] - 0,1y[n-5] + \\ + 1,36U[n] + 0,38U[n-1] + 10,68 \quad (10.14)$$

где n — момент времени.

2. Уравнение, связывающее температуру в печи с температурой на дне формы:

$$T_d[n+1] = 0,64T_d[n] + 0,18T_d[n-1] - 0,36T_d[n-2] + 0,31T_d[n-4] + \\ + 0,1y[n-1] + 0,17y[n-2] - 1,29y[n-3] + 0,41y[n-4]. \quad (10.15)$$

3. Уравнение, связывающее температуру в поверхностном слое у дна формы с температурой в середине изделия в процессе вулканизации:

$$T_c[n+1] = -8,52 + 0,40T_0[n] + 0,25T_0[n-1] - 0,13T_0[n-3] - 0,20T_0[n-5] + 0,39T_0[n-7] - \\ - 0,15T_0[n-8] + 0,20T_d[n-2] - 0,13T_d[n-3] + 0,16T_d[n-5] + 0,23T_d[n-6]. \quad (10.16)$$

Статистический анализ показал, что соотношение (10.16) достаточно хорошо (критерий Фишера $F = 81,1$) описывает поведение температуры в середине изделия как функции температуры у дна формы, что позволяет использовать его для контроля и управления процессом вулканизации.

Аналогичные результаты были получены при построении математических моделей, описывающих изменение температуры в середине изделия в зависимости от температуры греющей среды.

Для схемы I (см. рис. 10.10) изучена температура $T[n]$ внутри изделия в произвольный момент времени n как функция температуры в той же точке в предыдущие моменты времени $T[n-1], T[n-2], \dots, T[n-10]$ и температуры среды в предыдущие моменты времени $T_f[n-1], T_f[n-2], \dots, T_f[n-10]$.

В результате обработки трех серий измерений была получена разностная модель, коэффициенты a_i которой при соответствующих переменных $T[n-i]$ и $T_f[n-j]$ представлены в табл. 10.5.

Таблица 10.5. Коэффициенты модели для температуры T внутри изделия, как функции самой себя и температуры среды T_f в предыдущие моменты времени

№	Коэффициент a_i	Переменная	№	Коэффициент a_i	Переменная
1	-1,6859e000	T_{f0}	12	-1,1657e-001	$T[n - 10]$
2	-1,7555e-002	$T_f[n - 1]$	13	-5,7072e-002	$T[n - 9]$
3	2,2297e-002	$T_f[n - 2]$	14	-2,1331e-003	$T[n - 8]$
4	8,5834e-003	$T_f[n - 3]$	15	8,3561e-002	$T[n - 7]$
5	-2,9843e-003	$T_f[n - 4]$	16	3,0252e-002	$T[n - 6]$
6	4,3742e-003	$T_f[n - 5]$	17	8,4429e-002	$T[n - 5]$
7	2,6265e-003	$T_f[n - 6]$	18	1,6085e-001	$T[n - 4]$
8	1,8141e-002	$T_f[n - 7]$	19	1,5819e-001	$T[n - 3]$
9	4,3622e-003	$T_f[n - 8]$	20	3,0260e-001	$T[n - 2]$
10	-3,0832e-004	$T_f[n - 9]$	21	3,2649e-001	$T[n - 1]$
11	-1,4257e-003	$T_f[n - 10]$	$P = 2,1000e001$ (число коэффициентов)		

Статистический анализ модели дал следующие результаты:

$md = -9,0999e-006$	$d = 9,1227e000$	$r = 2,1721e-001$	$K = 7,4000e001$	$SS = 5,0359e001$
$S = 7,0964e000$	$SS_0 = 1,9670e000$	$S_0 = 1,4025e000$	$F = 2,5602e001$	

$md = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y - y)$ — среднее отклонение экспериментального и расчетного значения отклика (невязки);

$d = \max_i (y - y)$ — максимальное значение невязки;

$r = d_{\max} / y$ — относительная ошибка;

K — номер точки i ($i = 1, 2, \dots, n$), в которой было обнаружено d ;

$SS = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y - y)^2$ — общая дисперсия;

$S = \sqrt{SS}$ — среднее квадратическое отклонение;

$SS_0 = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^n (y - y)^2$ — остаточная дисперсия;

$S_0 = \sqrt{SS_0}$ — среднее квадратическое отклонение;

$F = SS/SS_0$ — значение критерия Фишера.

Коэффициенты модели, представленные в табл. 10.5, различны по величине, и некоторые из них могут быть исключены из уравнения. Для того, чтобы исключение выглядело правомерным, вычисляется критерий Стьюдента:

$$t = \frac{|a|}{SS_0 \sqrt{S^2\{a\}}}, \quad (10.17)$$

где $S^2\{a\}$ — дисперсия определения коэффициента модели.

Для схемы I строилась модель, характеризующая зависимость температуры T внутри изделия от температуры среды T_f :

$$T[n] = \sum_{i=1}^{20} a_i T_{fi}[n-i] + a_0 \quad (10.18)$$

Коэффициенты полученной упрощенной модели и ее статистические характеристики представлены ниже:

P	a	P	a	P	a	P	a
1	8,8701e001	2	-4,0551e-002	6	-8,8884e-002	9	-5,2585e-002
10	-5,7364e-002	13	-5,6002 e-002	20	4,8269e-002	21	7,3115e-002
$P=8,0000e000$							

или

$$T[n] = 88,701 - 0,041T_f[n-1] - 0,089T_f[n-5] - 0,053T_f[n-8] - \\ - 0,057T_f[n-9] - 0,056T_f[n-12] + 0,048T_f[n-19] + 0,073T_f[n-20] \quad (10.19)$$

при

$$md = -2,1725e-006 \quad d = 6,1722e000 \quad r = 9,9879e-002 \quad K = 2,7000e001 \quad SS = 1,9890e001 \\ S = 4,4599e000 \quad SS_0 = 5,7865e000 \quad S_0 = 2,4055e000 \quad F = 3,4374e000$$

Кроме того оказалось возможным построить модель, связывающую температуру среды T_f и минимальную температуру T внутри изделия (см. формулу 10.18).

Получены следующие коэффициенты упрощенной модели для схемы I:

P	a	P	a	P	a	P	a
1	3,1308e001	2	-4,6318e-002	4	7,6660e-002	12	3,2422e-002
19	5,0833e-002	20	5,7029e-002	$P=6,0000e000$			

или

$$T[n] = 31,308 - 0,046T_f[n-1] + 0,077T_f[n-3] + 0,032T_f[n-11] + \\ + 0,051T_f[n-18] + 0,057T_f[n-20] \quad (10.20)$$

при

$$md = -8,3066e-008 \quad d = 1,3310e001 \quad r = 5,8788e-001 \quad K = 8,1000e001 \quad SS = 6,6359e001$$

$$S = 8,1461e000 \quad SS_0 = 2,6292e001 \quad S_0 = 5,1276e000 \quad F = 2,5239e000$$

Для схемы II эта модель имела следующий вид:

P	a	P	a	P	a	P	a
1	3,8303e001	3	4,2531e-002	7	4,2718e-002	11	4,2532e-002
21	1,2610e-001						$P = 5,0000e000$

или

$$T[n] = 38,303 + 0,043T_f[n-2] + 0,043T_f[n-6] + 0,043T_f[n-10] + 0,126T_f[n-20] \quad (10.21)$$

при

$$md = 2,4750e-008 \quad d = 9,4984e000 \quad r = 1,5571e-001 \quad K = 6,5000e001 \quad SS = 7,1195e001$$

$$S = 8,4377e000 \quad SS_0 = 8,1026e000 \quad S_0 = 2,8465e000 \quad F = 8,7866e000$$

Резюмируя результаты экспериментальных решений некоторых задач теплопроводности, хотелось бы обратить внимание на сравнительно простой характер полученных разностных моделей и близкую к линейной зависимость температуры точек внутри формы от времени, тогда как температура греющей среды изменяется во времени по весьма сложному закону. Это обстоятельство упрощает процедуру применения метода приращения эквивалентных времен при оптимизации процесса термообработки латексной пены.

Во временных рядах можно наблюдать тенденции трех видов: тенденция среднего уровня; тенденция дисперсии; тенденция автокорреляции [12, с. 95]. *Тенденцию среднего уровня* наглядно можно представить графиком временного ряда. Аналитически она выражается в виде функции $f(t)$, вокруг которой варьируют фактические значения изучаемого явления. *Тенденция дисперсии* — это изменения отклонений эмпирических значений временного ряда от значений, вычисленных по уравнению тренда. *Тенденция автокорреляции* — это тенденция изменения связи между отдельными уровнями временного ряда.

Среди моделей, отражающих свойства временных рядов, особо следует выделить модели автокорреляции. *Автокорреляция* — это корреляционная зависимость между последовательными (соседними) значениями уровней временного ряда y_1 и y_2 , y_2 и y_3 , y_3 и y_4 и т. д. Чтобы оценить степень зависимости между соседними уровнями временного ряда (автокорреляцию), рассчитывают *коэффициенты автокорреляции* между уровнями исходного ряда и того же ряда, но сдвинутого на τ шагов во времени. Величину τ называют шагом. Последовательность значений коэффициентов

автокорреляции r_τ , вычисленных при $\tau = 1, 2, \dots, l$, называют *автокорреляционной функцией*. Эта функция дает достаточно глубокое представление о внутренней структуре изучаемого явления.

Коэффициенты автокорреляции рассчитываются по формуле парного коэффициента корреляции. Так, коэффициент автокорреляции первого порядка ($\tau = 1$) есть парный коэффициент корреляции между двумя рядами: $y_1, y_2, y_3, \dots, y_{n-1}$ и $y_2, y_3, \dots, y_{n-1}, y_n$.

Тогда:

$$r_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} (y_i - \bar{y}_1)(y_{i+1} - \bar{y}_2)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n-1} (y_i - \bar{y}_1)^2 \sum_{i=1}^{n-1} (y_{i+1} - \bar{y}_2)^2}} \quad (10.22)$$

где \bar{y}_1 — средний уровень первого ряда; \bar{y}_2 — средний уровень второго ряда.

Аналогично вычисляются коэффициенты автокорреляции второго порядка ($\tau = 2$), третьего и т. д.

При расчете коэффициентов автокорреляции с ростом порядка число коррелируемых пар уменьшается, а при небольшом числе наблюдений значимыми оказываются лишь высокие коэффициенты корреляции. Отсюда следует, что наибольшее значение τ должно быть таким, чтобы число пар наблюдений оказалось достаточным для вычисления коэффициентов автокорреляции r_τ . Обычно ориентируются на правило $\tau < n/4$.

Если на оси абсцисс отложить значения τ , а на оси ординат — значения коэффициентов автокорреляции r_τ , а затем точки с координатами (τ, r_τ) соединить отрезками прямой, то получится ломаная линия, которая называется *коррелограммой*. Анализ коррелограмм позволяет определить особенности стохастического процесса, отраженного в изучаемом ряду. Однако интерпретация коррелограмм требует определенного навыка и не всегда осуществима.

Одним из важных вопросов анализа *авторегрессии* является определение порядка авторегрессионной модели. Низкий порядок модели может дать несущественные результаты, так как в модели не использована важная информация за предыдущие моменты времени. Повышение порядка авторегрессионной модели может привести к снижению качества модели. Поэтому анализ авторегрессии не ограничивается построением только одной модели, строится несколько моделей, по которым определяется ее порядок.

Рассмотрим особенности анализа автокорреляции по данным табл. 10.6, представляющим собой изменение во времени температуры внутри изделия (см. рис. 10.11, схема I).

По двум столбцам табл. 10.6 (второй столбец — отклик, третий столбец — фактор, предиктор) по формулам, приведенным во второй главе работы (или с использованием программы *Table Curve 2D*) рассчитываем параметры модели:

$$y_i = a_0 + a_1 y_{i-1} \quad (10.23)$$

Таблица 10.6. Исходная информация для построения авторегрессионных моделей

t , мин	T_t , °C	T_{t-1} , °C	T_{t-2} , °C	T_{t-3} , °C	T_{t-4} , °C	T_{t-5} , °C	T_{t-6} , °C	T_{t-7} , °C
0	47,7	—	—	—	—	—	—	—
2	49,1	47,7	—	—	—	—	—	—
4	49,8	49,1	47,7	—	—	—	—	—
6	49,1	49,8	49,1	47,7	—	—	—	—
8	48,2	49,1	49,8	49,1	47,7	—	—	—
10	47,5	48,2	49,1	49,8	49,1	47,7	—	—
12	47,0	47,5	48,2	49,1	49,8	49,1	47,7	—
14	46,8	47,0	47,5	48,2	49,1	49,8	49,1	47,7
16	46,8	46,8	47,0	47,5	48,2	49,1	49,8	49,1
18	47,0	46,8	46,8	47,0	47,5	48,2	49,1	49,8
20	47,7	47,0	46,8	46,8	47,0	47,5	48,2	49,1
22	48,4	47,7	47,0	46,8	46,8	47,0	47,5	48,2
24	48,9	48,4	47,7	47,0	46,8	46,8	47,0	47,5
26	49,3	48,9	48,4	47,7	47,0	46,8	46,8	47,0
28	49,8	49,3	48,9	48,4	47,7	47,0	46,8	46,8
30	50,5	49,8	49,3	48,9	48,4	47,7	47,0	46,8
32	51,1	50,5	49,8	49,3	48,9	48,4	47,7	47,0
34	52,0	51,1	50,5	49,8	49,3	48,9	48,4	47,7
36	52,7	52,0	51,1	50,5	49,8	49,3	48,9	48,4
38	53,2	52,7	52,0	51,1	50,5	49,8	49,3	48,9
40	53,9	53,2	52,7	52,0	51,1	50,5	49,8	49,3
42	55,5	53,9	53,2	52,7	52,0	51,1	50,5	49,8
44	57,3	55,5	53,9	53,2	52,7	52,0	51,1	50,5
46	59,5	57,3	55,5	53,9	53,2	52,7	52,0	51,1
48	61,8	59,5	57,3	55,5	53,9	53,2	52,7	52,0
50	64,3	61,8	59,5	57,3	55,5	53,9	53,2	52,7
52	66,4	64,3	61,8	59,5	57,3	55,5	53,9	53,2
54	67,5	66,4	64,3	61,8	59,5	57,3	55,5	53,9
56	66,4	67,5	66,4	64,3	61,8	59,5	57,3	55,5
59	64,8	66,4	67,5	66,4	64,3	61,8	59,5	57,3
60	64,1	64,8	66,4	67,5	66,4	64,3	61,8	59,5
62	63,2	64,1	64,8	66,4	67,5	66,4	64,3	61,8

Кроме того, вычисляются статистические критерии (коэффициент детерминации, скорректированный коэффициент детерминации, стандартная ошибка и критерий Фишера). Далее вводится еще один предиктор (четвертый столбец) и по тем же формулам (или с использованием программы *Table Curve 3D*) рассчитываем упомянутые выше характеристики и модель:

$$y_i = a_0 + a_1 y_{i-1} + a_2 y_{i-2} \quad (10.24)$$

И так далее.

Вот полученные методом наименьших квадратов линейные модели:

$$\begin{aligned} T_i &= 0,2637 + 1,0044 \cdot T_{i-1}; \\ T_i &= 1,3287 - 0,8846 \cdot T_{i-1} + 1,8597 \cdot T_{i-2}; \\ T_i &= 0,6391 + 0,5172 \cdot T_{i-1} - 1,8098 \cdot T_{i-2} + 2,2826 \cdot T_{i-3}; \\ T_i &= 1,6399 - 0,2906 \cdot T_{i-1} + 1,0009 \cdot T_{i-2} - 2,0818 \cdot T_{i-3} + 2,3414 \cdot T_{i-4}; \\ T_i &= 1,0122 + 0,2224 \cdot T_{i-1} - 0,7014 \cdot T_{i-2} + 1,2894 \cdot T_{i-3} - 2,1757 \cdot T_{i-4} + 2,3487 \cdot T_{i-5}; \\ T_i &= 1,2428 + 0,2311 \cdot T_{i-1} - 0,3149 \cdot T_{i-2} - 0,3770 \cdot T_{i-3} + 1,3762 \cdot T_{i-4} - 2,3043 \cdot T_{i-5} + \\ &+ 2,3684 \cdot T_{i-6}; \\ T_i &= 2,0756 - 0,2336 \cdot T_{i-1} + 0,7017 \cdot T_{i-2} - 0,7294 \cdot T_{i-3} - 0,2247 \cdot T_{i-4} + \\ &+ 1,4510 \cdot T_{i-5} - 2,4143 \cdot T_{i-6} + 2,4111 \cdot T_{i-7}; \end{aligned} \quad (10.25)$$

В табл. 10.7 в обозначенном выше порядке представлены значения критериев качества моделей.

Таблица 10.7. Критерии качества моделей

Количество предикторов	Коэффициент детерминации	Скорректированный коэффициент детерминации	Стандартная ошибка	Критерий Фишера
1	0,97735	0,97573	1,08583	1251,2
2	0,99348	0,99272	0,59851	2056,1
3	0,99525	0,99446	0,52698	1745,6
4	0,99617	0,99530	0,48805	1496,2
5	0,99614	0,99498	0,50492	1084,0
6	0,99617	0,99468	0,51797	822,9
7	0,99604	0,99405	0,54187	610,2

Анализ полученных результатов убеждает в необходимости ориентироваться на модель с четырьмя предикторами.

Коэффициенты парной корреляции между T_i и T_{i-1} , между T_i и T_{i-2} , между T_i и T_{i-3} , и т. д. падают в следующей последовательности:

0,9893→0,9611→0,9205→0,8766→0,8396→0,8145→0,8053.

В книге «*The tire as a vehicle component*» на с. 623 приводится такая картинка анализа кривой отклонения от габаритов шины (рис. 10.20).

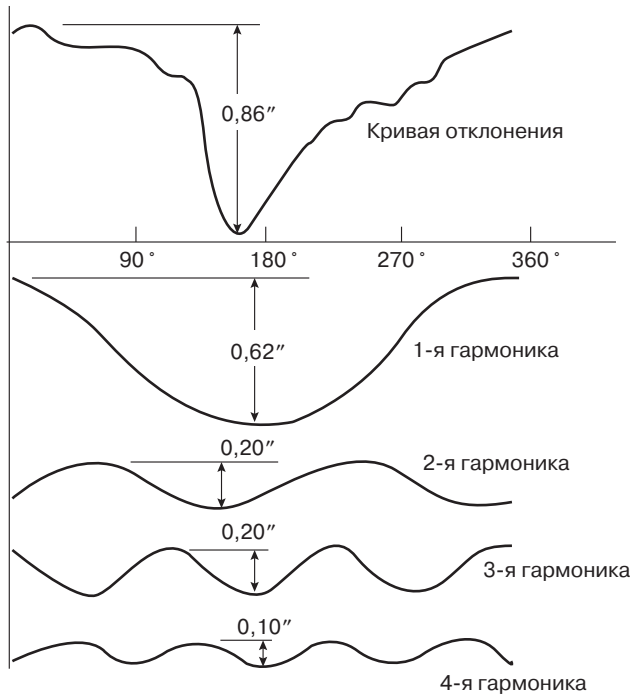


Рис. 10.20. Фурье-анализ кривой отклонения

Это, конечно, несколько не соответствует рассматриваемым проблемам теплообмена, но прекрасно иллюстрирует подход к анализу реализации случайного процесса.

Синусоидальные кривые, называемые гармониками, суммируются и образуют реально наблюдаемую кривую отклонения от габаритов шины.

Амплитуды A_n гармоник равны коэффициентам Фурье периодической функции следующего вида:

$$F(t) = A_0 + \sum_{n=1}^N A_n \sin(2\pi n f + \phi_n),$$

где f — частота и ϕ_n — угол сдвига фаз.

Литература

1. Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами / Пер. с англ. — М.: Мир. 1973. — 957 с.
2. Виноградов Ю.С. Сборник задач по применению математической статистики и теории вероятностей в текстильной и швейной промышленности. — М.: Легкая индустрия. 1968. — 266 с.
3. Кильдишев Г.С., Френкель А.А. Анализ временных рядов и прогнозирование. — М.: Статистика. 1973. — 100 с.
4. Смирнов Н.В., Дунин-Барковский И.В. Курс теории вероятностей и математической статистики. — М.: Наука. 1969. — 511 с.
5. Шиндовский Э., Шюрц О. Статистические методы управления качеством / Пер. с нем. — М.: Мир. 1976. — 597 с.
6. Гурский Е.И. Теория вероятностей с элементами математической статистики. — М.: Высшая школа. 1971. — 328 с.
7. Королюк В.С., Портенко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф. Справочник по теории вероятностей и математической статистике. — М.: Наука. 1985. — 640 с.
8. Митрополевский А.К. Техника статистических вычислений. — М.: Наука. 1971. — 576 с.
9. Бендат Дж., Пирсол А. Измерение и анализ случайных процессов / Пер. с англ. — М.: Мир. 1974. — 464 с.
10. Бокс Дж., Дженкинс Г. Анализ временных рядов. Прогноз и управление / Пер. с англ. Вып. 1 — М.: Мир. 1974. — 406 с.
11. Пановский Г.А., Брайер Г.В. Статистические методы в метеорологии. — Л.: Гидрометеоиздат. 1972. — 204 с.
12. Статистическое моделирование и прогнозирование. — Под ред. А.Г. Гранберга. — М.: Финансы и статистика. 1990. — 383 с.
13. Анго А. Математика для электро- и радиоинженеров / Пер. с фр. — М.: Наука. 1965. — 778 с.
14. Гихман И.И., Скороход А.В. Теория случайных процессов. Т. 1. — М.: Наука. 1971. — 664 с.
15. Розанов Ю.А. Случайные процессы. — М.: Наука. 1979. — 183 с.
16. Компьютерная биометрика. — Под ред. В.Н. Носова. — М.: Изд. МГУ. 1990. — 232 с.
17. Пугачев В.С. Введение в теорию вероятностей. — М.: Наука. 1968. — 368 с.
18. Зельдович Я.Б., Мышкис А.Д. Элементы прикладной математики. — М.: Наука. 1972. — 592 с.
19. Элементы вычислительной математики. — Под ред. С.Б. Норкина. — М.: Высшая школа. 1963. — 210 с.
20. Крамер Г. Математические методы статистики / Пер. с англ. — М.: Мир. 1975. — 648 с.
21. Коваленко И.Н., Филиппова А.А. Теория вероятностей и математическая статистика. — М.: Высшая школа. 1973. — 368 с.

22. Феллер В. Введение в теорию вероятностей / Пер. с англ. Том 1. — М.: Мир. 1967. — 498 с.
23. Гнеденко Б.В. Курс теории вероятностей. — М.: Наука. 1988. — 447 с.
24. Боровков А.А. Курс теории вероятностей. — М.: Наука. 1972. — 287 с.
25. Налимов В.В. Применение математической статистики при анализе вещества. — М.: Физматгиз. 1960. — 430 с.
26. Льюис К.Д. Методы прогнозирования экономических показателей / Пер. с англ. — М.: Финансы и статистика. 1986. — 134 с.
27. Мердок Дж. Контрольные карты / Пер. с англ. — М.: Финансы и статистика. 1986. — 152 с.
28. Купер Дж., Макгиллем К. Вероятностные методы анализа сигналов и систем / Пер. с англ. — М.: Мир, 1989. — 376 с.
29. Федоров В.В. Теория оптимального эксперимента. — М.: Наука. 1971. — 312 с.

Глава 11. Топология и теория графов как инструменты экспериментатора

На результаты эксперимента необходимо взглянуть со стороны, отвлекаясь даже от физико-химической сущности. И тогда откроются новые грани, закономерности иного характера, более общие и глубинные.

Попытаемся осмыслить геометрические образы, которыми представляются результаты экспериментальных исследований. И начнем с анализа контурных графиков, представляющих собой семейство изолиний (линий равного уровня).

11.1. Классификация двумерных сечений поверхности отклика

Рассмотрим в качестве примера результаты определения условной прочности при растяжении резин на основе полихлоропрена для слоя сжатия кордшнуровых клиновых ремней без обертки боковых поверхностей.

При решении этой задачи варьировалось содержание двух марок технического углерода ПЗ67-Э (x_1) и П701 (x_2) и волокнистого наполнителя (x_3), использованного для обеспечения анизотропии свойств резин вдоль и поперек направления каландрования.

Все переменные варьировались на трех уровнях: первая в интервале от 20 до 40 масс. ч. с шагом 10 масс. ч., вторая — в интервале от 25 до 45 масс. ч. с шагом 10 масс. ч. и третья — в интервале от 12 до 18 масс. ч. с шагом 3 масс. ч.

Очевидно, факторное пространство представляет собой куб. На рис. 11.1 показаны контурные графики в координатах $x_1 - x_2$, $x_1 - x_3$, и $x_2 - x_3$ для условной прочности при растяжении вулканизатов, измеренной в направлении каландрования.

Эти графики представляют значения отклика на гранях куба в зависимости от двух факторов при минимальном и максимальном значении третьего фактора.

Чем они отличаются друг от друга? Два верхних графика характеризуют влияние дозировок двух марок технического углерода на прочность резин при фиксированном содержании волокнистого наполнителя. На правом графике можно

идентифицировать наличие минимума практически в центре диаграммы, а изолинии формируют эллипсы. Левый график во втором ряду показывает монотонный рост прочности из левого нижнего угла в правый верхний. А в нижних двух графиках наблюдаются линии, которые следует трактовать как гиперболы.

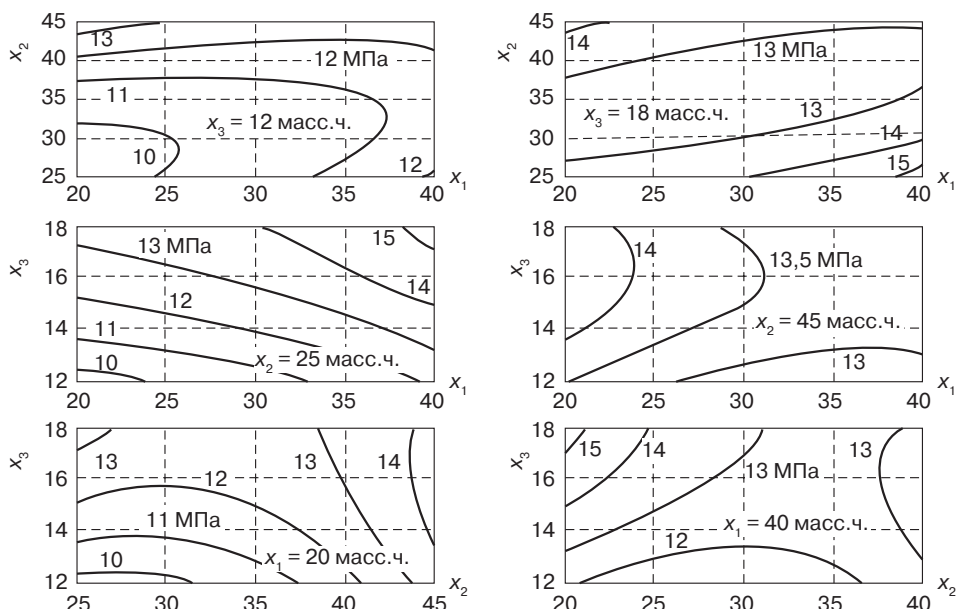


Рис. 11.1. Изолинии прочности резин для клиновых ремней вдоль направления каландрования

Есть такое понятие «особая точка». В Википедии можно найти такое ее определение: «В математике *особой точкой* векторного поля называется точка, в которой векторное поле равно нулю. Особая точка векторного поля является положением равновесия или точкой покоя динамической системы, определяемой данным векторным полем: фазовая траектория с началом в особой точке состоит в точности из этой особой точки, а соответствующая ей интегральная кривая представляет собой прямую, параллельную оси времени».

Приводятся такие рисунки.

Не очень понятно, что это. Но давайте используем такое представление. Пусть стрелки на рис. 11.2 показывают направление движения воды. В первом случае вода просто обращается вокруг центра по эллипсам или окружностям и ничего с ней не происходит. Во втором и в четвертом случае (устойчивый фокус и устойчивый узел) вода «устойчиво» сливается в «трубу» в начале координат. А третье и пятое изображение (неустойчивый фокус и неустойчивый узел) показывает, что вода в начале координат удержаться не может и стекает вниз. Что касается последней картинки, то вода стекает с левого верхнего угла и правого нижнего в начало координат, но не задерживается там, а стекает вниз.

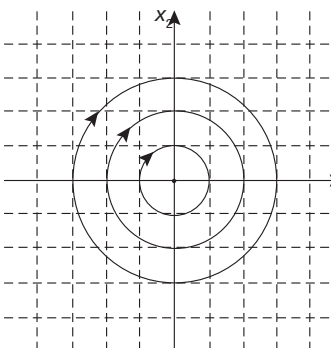
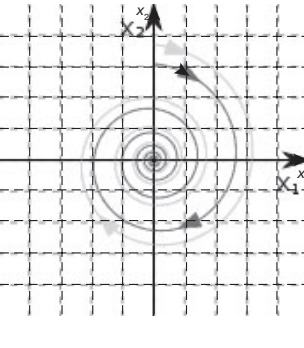
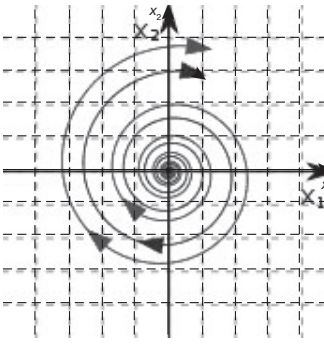
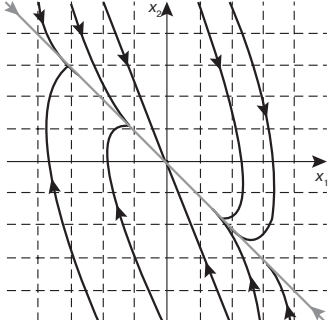
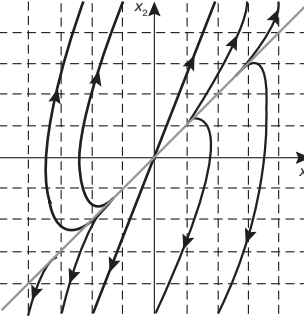
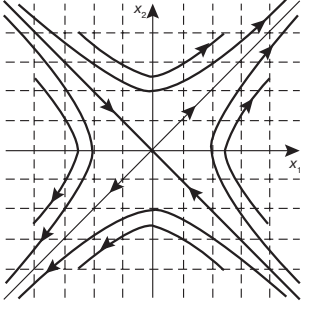
		
<p>Тип особой точки – центр. Тип фазовых траекторий – окружности, эллипсы</p>	<p>Тип особой точки – устойчивый фокус. Тип фазовых траекторий – логарифмические спирали</p>	<p>Тип особой точки – неустойчивый фокус. Тип фазовых траекторий – логарифмические спирали</p>
		
<p>Тип особой точки – устойчивый узел. Тип фазовых траекторий – параболы</p>	<p>Тип особой точки – неустойчивый узел. Тип фазовых траекторий – параболы</p>	<p>Тип особой точки – седло. Тип фазовых траекторий – гиперболы</p>

Рис. 11.2. Особые точки векторных полей

Таким образом, если поверхность отклика не содержит серьезных «искривлений», можно представить себе следующие разновидности (рис. 11.3).

Первые две поверхности носят название эллиптический параболоид. Это значит, что в горизонтальном сечении получается эллипс (окружность, в частном случае), а в вертикальном сечении – парабола. Поверхность справа – гиперболический параболоид. В горизонтальном сечении – гипербола, в вертикальном, как и прежде, – парабола. А монотонный рост или падение – это частный случай на периферии этих поверхностей.

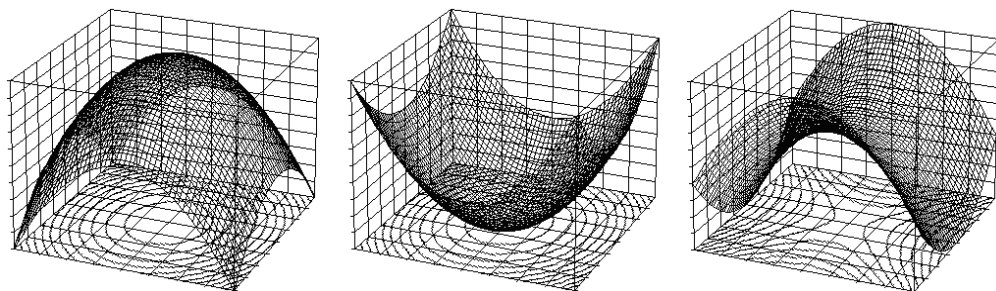


Рис. 11.3. Поверхности отклика второго порядка

Основатель топологии Анри Пуанкаре писал: КУДА ВСТАВЛЯТЬ???

«Полное изучение функции состоит из двух частей: 1) качественной (так сказать), или геометрического изучения кривой, определенной функцией; 2) количественной, или вычисления значений функции.

Таким же образом, например, для изучения алгебраического уравнения начинают с того, что посредством теоремы Штурма выясняют, каково число вещественных корней; это качественная сторона изучения. Затем вычисляют численное значение этих корней, что составляет количественное изучение уравнения...

Естественно, что именно с качественной стороны должна начинаться теория всякой функции, и вот почему в первую очередь возникает следующая задача: построить кривые, определяемые дифференциальным уравнением.

Это качественное изучение; когда оно будет проделано полностью, то принесет самую большую пользу численному анализу функции...

Для моей новой цели – качественной геометрии – меня интересовало теперь лишь вещественное, и мне пришлось провести специальное обсуждение, которое привело меня к различению четырех видов особых точек...

Я дал этим четырем видам следующие названия:

1) седла, через которые проходят две и только две кривые, определенные уравнением;

2) узлы, где сходится бесконечное число кривых, определенных уравнением;

3) фокусы, вокруг которых эти кривые закручиваются, сближаясь наподобие логарифмической спирали;

4) центры, вокруг которых эти кривые располагаются в виде замкнутых циклов, охватывающих один другого, и все вместе охватывающие центр. (Центры встречаются лишь в крайне редких случаях).

Я изучил затем распределение этих особых точек в плоскости. Я показал при этом, что они всегда имеются (на конечном или бесконечном расстоянии) и что всегда имеется простое соотношение между числом седел, фокусов и центров, и также что на кривой $X=0$ (X – это многочлен) седла или узлы и фокусы идут чередуясь».

Так что Википедия повторила то, на что указывал А. Пуанкаре.

Математическая *модель* для описания искомой зависимости в общем виде может быть записана следующим образом:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (11.1)$$

где y — зависимая переменная, отклик, целевая функция, параметр оптимизации; x_i — независимая переменная (??? Где в формуле?), фактор, $i = 1, 2, \dots, n$; n — количество факторов.

Ограничивая задачу на первом этапе анализом только двух факторов, попытаемся рассмотреть графическую интерпретацию двумерного сечения поверхности отклика. Такое сечение представляет собой прямоугольник (квадрат, при должном выборе масштаба), заключенный между линиями, параллельными осям координат. Внутри него изображаются в виде изолиний (линий равного уровня) проекции сечения поверхности отклика горизонтальными плоскостями. Можно представить себе громадное многообразие всевозможных рельефов таких двумерных сечений. Их классификация позволила бы ориентироваться в геометрических образах, облегчить решение задач прогнозирования и оптимизации.

В основу такой классификации может быть положено количество и взаимное расположение *особых точек* поверхности $y = f(x_1, x_2)$, т. е. в вершинах прямоугольника, на его сторонах и внутри. Ограничиваясь рассмотрением сечений для двух факторов с количеством особых точек не более одной на сторонах и внутри прямоугольника, получим диаграммы пяти классов (0; 1; 2; 3 и 4). Номер *класса* принимается равным количеству экстремальных точек на сторонах прямоугольника; наличие особой точки внутри фигуры находит свое отражение в следующих символах (0,1; 1,1; 2,1; 3,1; 4,1). Классификация должна учитывать также качественные особенности экстремальных точек, порядок их следования вдоль линии, ограничивающей рассматриваемую область, и тенденции изменения функции отклика.

Все особые точки поверхности могут быть подразделены на эллиптические, параболические и гиперболические [1].

По классификации, принятой в качественной теории дифференциальных уравнений, точки эллиптические и гиперболические составляют группу простых особых точек, в то время как точки параболические относятся к сложным особым точкам.

В общем виде соотношение между простыми особыми точками дается уравнением А. Пуанкаре [2], преобразованием которого для любой замкнутой области, например, для выбранного нами прямоугольника, можно получить соотношение типа [3, с. 73]:

$$Z_1 + 2Z_2 + 4Z_3 = C_1 + 2C_2 + 4C_3 \quad (11.2)$$

где Z_1, Z_2, Z_3 — число эллиптических особых точек (вершин и впадин) и C_1, C_2, C_3 — число гиперболических особых точек (седел), соответственно, в вершинах прямоугольника, на его сторонах и во внутренней области.

Для классификации двумерных сечений необходимо записать систему *ограничений*:

$$\begin{aligned}
 Z_1 &= 0,1,2,3 \text{ или } 4; & Z_2 &= 0,1,2,3 \text{ или } 4; & Z_3 &= 0 \text{ или } 1; \\
 C_1 &= 0,1,2,3 \text{ или } 4; & C_2 &= 0,1,2,3 \text{ или } 4; & C_3 &= 0 \text{ или } 1; \\
 Z_1 + C_1 &= 4; & Z_2 + C_2 &= 0,1,2,3 \text{ или } 4; & Z_3 + C_3 &= 0 \text{ или } 1.
 \end{aligned} \tag{11.3}$$

Системе ограничений (11.3) соответствует 10 классов и 29 типов ситуаций. Все они сведены в табл. 11.1.

Двумерные сечения, относящиеся к одному и тому же типу, характеризуются одинаковым количеством и одинаковым качественным набором особых точек, но могут отличаться друг от друга порядком их следования по контуру рассматриваемой области [4–6, 7, с. 266–294, 8, с. 205–233]. Для идентификации таких подтипов ситуаций можно использовать методы комбинаторики.

Для изображения *подтипов* сечений используем матрицы следующего вида:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

Наличие нуля вместо каждого из элементов матрицы означает отсутствие особой точки в соответствующем фрагменте диаграммы (кроме точек C_1). Цифра «1» вместо элементов матрицы a_{11} , a_{13} , a_{31} , и/или a_{33} свидетельствует о существовании особой точки эллиптического типа (Z_1) в вершинах прямоугольника.

Цифра «1» вместо элементов a_{12} , a_{21} , a_{32} , и/или a_{23} обозначает наличие особой точки эллиптического типа (Z_2) на сторонах прямоугольника. Цифра «1» вместо элемента a_{22} вводится для обозначения особой точки эллиптического типа внутри рассматриваемой области. Появление цифры «2» вместо соответствующих элементов матриц свидетельствует о наличии особых точек гиперболического типа (C_2 или C_3). Для обозначения подтипов сечений вводятся литерные наращенные в виде латинских букв, записываемых после номера типа диаграммы.

Предполагается, что матрицы подтипов обладают свойствами симметрии (ситуация не изменяется при перестановке первого и третьего столбца, первой и третьей строки, при вращении вокруг центрального элемента и вокруг главной диагонали). Таким образом, получено 95 подтипов диаграмм, которые изображены в виде матриц на рис. 11.4.

Таблица 11.1. Классы и типы геометрических образов

Класс	Тип	Распределение особых точек					
		Z_1	C_1	Z_2	C_2	Z_3	C_3
0	1	2	2	0	0	0	0
0.1	1	0	4	0	0	1	0
	2	4	0	0	0	0	1

Таблица 11.1, окончание

Класс	Тип	Распределение особых точек					
		Z_1	C_1	Z_2	C_2	Z_3	C_3
1	1	1	3	1	0	0	0
	2	3	1	0	1	0	0
1.1	1	1	3	0	1	1	0
	2	3	1	1	0	0	1
2	1	0	4	2	0	0	0
	2	2	2	1	1	0	0
	3	4	0	0	2	0	0
2.1	1	0	4	1	1	1	0
	2	2	2	0	2	1	0
	3	2	2	2	0	0	1
	4	4	0	1	1	0	1
3	1	1	3	2	1	0	0
	2	3	1	1	2	0	0
3.1	1	1	3	1	2	1	0
	2	3	1	0	3	1	0
	3	1	3	3	0	0	1
	4	3	1	2	1	0	1
4	1	0	4	3	1	0	0
	2	2	2	2	2	0	0
	3	4	0	1	3	0	0
4.1	1	0	4	2	2	1	0
	2	2	2	1	3	1	0
	3	4	0	0	4	1	0
	4	0	4	4	0	0	1
	5	2	2	3	1	0	1
	6	4	0	2	2	0	1

Дальнейший анализ разновидностей контурных графиков сопряжен со значительными трудностями.

Они связаны с тем, что одному и тому же подтипу диаграмм в ряде случаев соответствует несколько *видов* диаграмм, поиск которых на первый взгляд представляется неформализуемым.

$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$
0-1a	0-1b	0.1-1a	0.1-2a	1-1a	1-1b	1-2a	1-2b	1.1-1a	1.1-1b
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
1.1-2a	1.1-2b	2-1a	2-1b	2-2a	2-2b	2-2c	2-2d	2-2e	2-2f
$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
2-2g	2-2h	2-2i	2-2j	2-3a	2-3b	2.1-1a	2.1-1b	2.1-2a	2.1-2b
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
2.1-2c	2.1-2d	2.1-2e	2.1-2f	2.1-2g	2.1-3a	2.1-3b	2.1-3c	2.1-3d	2.1-3e
$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$
2.1-3f	2.1-3g	2.1-4a	2.1-4b	3-1a	3-1b	3-1c	3-1d	3-1e	3-1f
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
3-2a	3-2b	3-2c	3-2d	3-2e	3-2f	3.1-1a	3.1-1b	3.1-1c	3.1-1d
$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
3.1-1e	3.1-1f	3.1-2a	3.1-2b	3.1-3a	3.1-3b	3.1-4a	3.1-4b	3.1-4c	3.1-4d
$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
3.1-4e	3.1-4f	4-1a	4-2a	4-2b	4-2c	4-2d	4-2e	4-2f	4-2g
$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
4-3a	4.1-1a	4.1-1b	4.1-2a	4.1-2b	4.1-2c	4.1-2d	4.1-3a	4.1-4a	4.1-5a
$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$		$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$		$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$		$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$		$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$	
4.1-5b		4.1-5c		4.1-5d		4.1-6a		4.1-6b	

Рис. 11.4. Подтипы контурных графиков

Виды диаграмм, принадлежащие одному и тому же подтипу, имеют одинаковый количественный и качественный набор особых точек, идентичный порядок их следования вдоль линии, ограничивающей прямоугольник (с учетом круговой симметрии), но различные особенности особых точек C_2 .

Для обозначения различных видов сечений введены литерные наращивания — греческие буквы.

Теоретически получено 170 видов таких диаграмм; качественное изображение изолиний (линий равного уровня) диаграмм представлено графически на рис. 11.5.

Большинству видов ситуаций соответствует два *антипода* (то, что было минимумом для одного антипода, превращается в максимум для другого и наоборот).

Изображение антиподов не может быть осуществлено на рис. 11.5, т. к. он не позволяет выявить тенденции изменения функции отклика.

Эта задача может быть решена путем представления контурных графиков в форме *графов*. *Вершинами* графа являются особые точки Z_1, Z_2, Z_3, C_1, C_2 и C_3 . *Ребрами* графа (или дугами в случае ориентированных графов) служат линии «тока», характеризующие направление изменения свойства [9–12].

Для идентификации эллиптических и гиперболических особых точек в вершинах прямоугольника, на его сторонах и внутри необходимо, чтобы различные вершины графа имели различные степени (валентности). Степенью вершины называется количество входящих в него и исходящих из него дуг.

Пусть вершина графа C_1 имеет степень 2; особая точка Z_1 имеет степень 3; особые точки Z_2 и C_2 имеют степень 5 и особые точки Z_3 и C_3 имеют степень 4 (рис. 11.6).

Можно было принять какое-то иное решение? Да, можно, так что вопрос открыт для обсуждения.

Теперь становится ясным, что классу диаграмм соответствует количество вершин графа со степенью 5.

Представление диаграмм в форме графов не только дает возможность изобразить графически антиподы, но и формализовать задачу поиска видов диаграмм. При этом следует использовать методы комбинаторики. Два разных вида диаграмм одного подтипа имеют различные графы (т. е. отличаются характером взаимодействия между особыми точками).

Полученные ориентированные графы показаны на рис. 11.7.

Из 170 видов диаграмм 14 не имеют антиподов, на рис. 11.7 они снабжены звездочкой *. Из двух антиподов для каждого вида на рисунке изображен лишь один, второй получается обращением стрелок в обратную сторону.

Один из видов диаграмм нуждается в комментариях. Речь идет о сечении класса 0.1 и типа 1а. Это δ -функция Дирака.

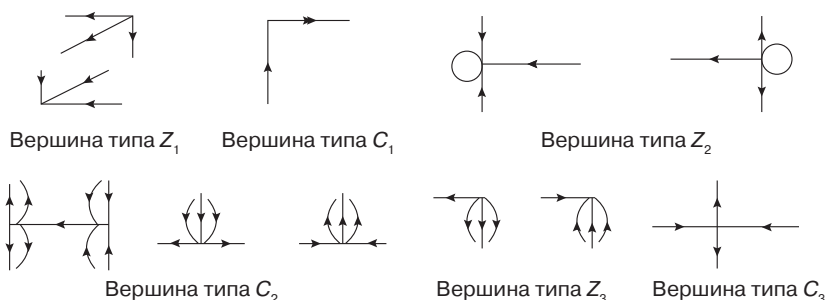


Рис. 11.6. Ассортимент вершин графа



Рис. 11.5. Качественное изображение изолиний (виды контурных графиков)

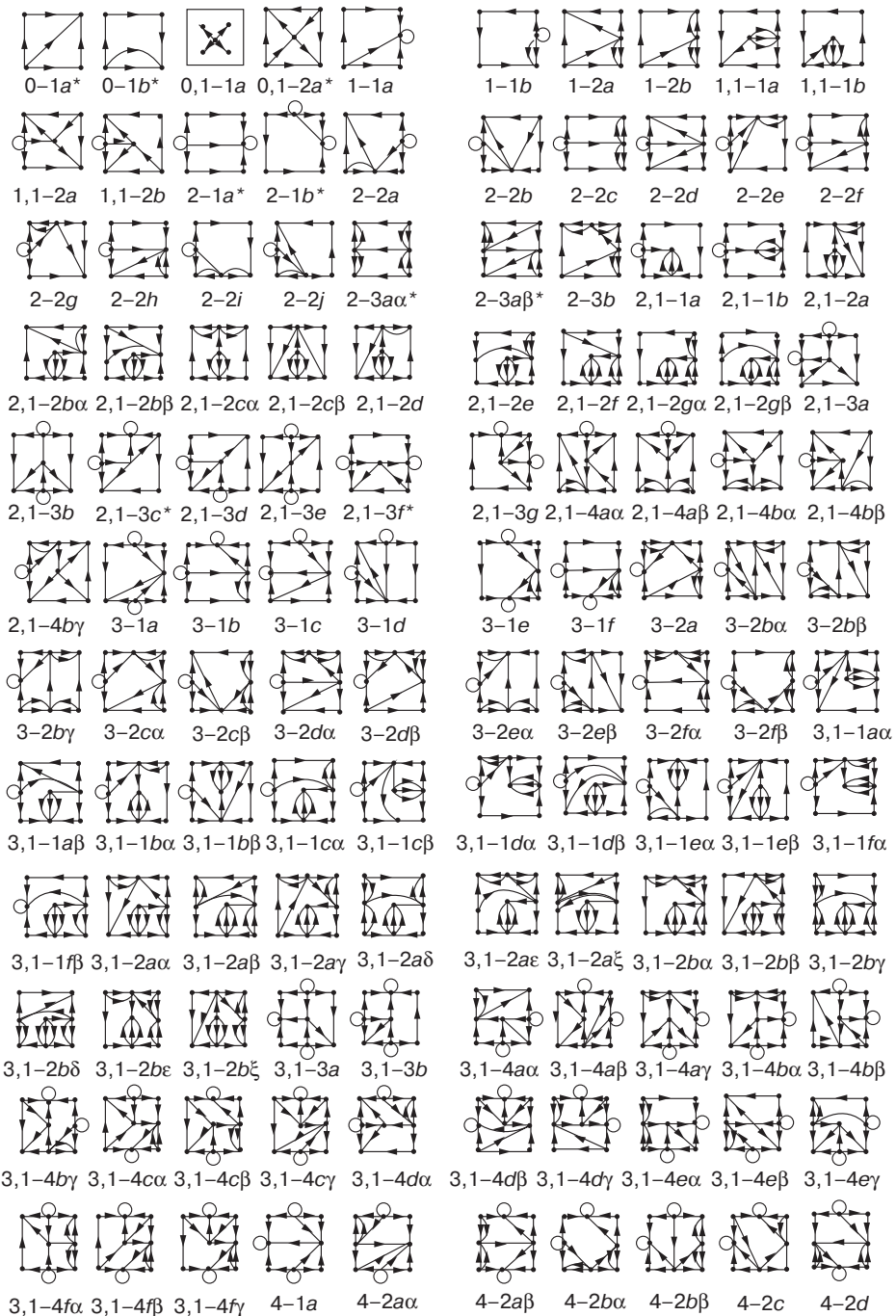


Рис. 11.7. Представление контурных графиков в виде графов

Нельзя сказать, что эта классификация обладает полнотой. Действительно, рассмотрим подробно граф, отвечающий контурному графику 4.1-2aβ.

Пронумеруем вершины и начнем «лить воду» (рис. 11.8). Пусть вода льется с вершины 5, прежде всего она достигает вершины 8 (потому, что там три стрелки — это допущение), далее вода течет к вершинам 9, 6 и 7. Можно утверждать, что вершина 9 находится выше вершины 6, а вершина 6 — выше вершины 7. Но вершина 2 находится выше вершины 6 и ниже вершины 4. Итак, самая высокая вершина 4 или 5, причем вершина 5 может оказаться даже на третьем месте, а вершина 4 может оказаться третьей, если на втором месте вершина 8. Ниже всех находятся вершины 7 и 1, и кто из них ниже, определить невозможно.

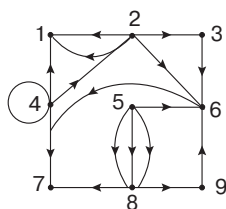


Рис. 11.8. Граф сечения 4.1-2aβ

Определенный интерес разбираться в этих хитросплетениях, безусловно, существует.

Разночтения возникают даже в случае сравнительно простой диаграммы (рис. 11.9). Вершина 1 выше вершины 2, но может быть ниже вершины 5. Но тут хоть ясно, кто самый высокий и кто самый низкий.

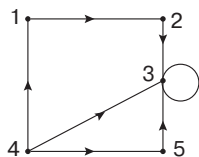


Рис. 11.9. Граф сечения 1-1a

Невозможно не согласиться с тем, что, начертив одну стрелку, направление всех остальных мы получаем автоматически — здесь нет каких-либо вариантов.

11.2. Классификация диаграмм состав–свойство

Рассмотрим двумерные диаграммы, для которых уравнение (11.2) приобретает несколько иной вид, поскольку $Z_1 + C_1 = 3$:

$$Z_1 + 3Z_2 + 6Z_3 = 2C_1 + 3C_2 + 6C_3, \quad (11.4)$$

где, как и прежде, Z_1, Z_2, Z_3 — число эллиптических особых точек (вершин и впадин) и C_1, C_2, C_3 — число гиперболических особых точек (седел), соответственно, в вершинах треугольника, на его сторонах и во внутренней области.

Для классификации диаграмм запишем систему *ограничений*:

$$\begin{aligned} Z_1 = 0, 1, 2 \text{ или } 3; & \quad Z_2 = 0, 1, 2 \text{ или } 3; & \quad Z_3 = 0 \text{ или } 1; \\ C_1 = 0, 1, 2 \text{ или } 3; & \quad C_2 = 0, 1, 2 \text{ или } 3; & \quad C_3 = 0 \text{ или } 1; \\ Z_1 + C_1 = 3; & \quad Z_2 + C_2 = 0, 1, 2 \text{ или } 3; & \quad Z_3 + C_3 = 0 \text{ или } 1. \end{aligned} \quad (11.5)$$

Системе ограничений (11.5) соответствует 8 классов и 17 типов ситуаций. Все они сведены в табл. 11.2.

Таблица 11.2. Классы и типы геометрических образов диаграмм

Класс	Тип	Распределение особых точек					
		Z_1	C_1	Z_2	C_2	Z_3	C_3
0	1	2	1	0	0	0	0
0.1	1	0	3	0	0	1	0
1	1	1	2	1	0	0	0
	2	3	0	0	1	0	0
1.1	1	1	2	0	1	1	0
	2	3	0	1	0	0	1
2	1	0	3	2	0	0	0
	2	2	1	1	1	0	0
2.1	1	0	3	1	1	1	0
	2	2	1	0	2	1	0
	3	2	1	2	0	0	1
3	1	1	2	2	1	0	0
	2	3	0	1	2	0	0
3.1	1	1	2	1	2	1	0
	2	3	0	0	3	1	0
	3	1	2	3	0	0	1
	4	3	0	2	1	0	1

Диаграммы, принадлежащие одному и тому же типу, характеризуются одинаковым количеством и одинаковым качественным набором особых точек, но могут отличаться друг от друга порядком их следования по контуру рассматриваемой области.

Для изображения *подтипов* сечений используем «матрицы» следующего вида:

$$\begin{pmatrix} & a_{12} & \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

Почему в кавычках? Потому, что это уже не матрицы, а такие таблицы, в которых отсутствуют два элемента. Но можно без труда представить, что элементы a_{12} , a_{31} и a_{33} отвечают вершинам треугольника, вершины a_{21} , a_{23} и a_{32} — сторонам, а вершина a_{22} — внутренней области. Наличие нуля вместо каждого из элементов матрицы означает отсутствие особой точки в соответствующем фрагменте диаграммы (кроме точек C_1). Цифра «1» вместо элементов матрицы a_{12} , a_{31} и/или a_{33} свидетельствует о существовании особой точки эллиптического типа (Z_1) в вершинах треугольника.

Цифра «1» вместо элементов a_{21} , a_{32} и/или a_{23} обозначает наличие особой точки эллиптического типа (Z_2) на сторонах треугольника. Цифра «1» вместо элемента a_{22} вводится для обозначения особой точки эллиптического типа внутри рассматриваемой области. Появление цифры «2» вместо соответствующих элементов матриц свидетельствует о наличии особых точек гиперболического типа (C_2 или C_3). Для обозначения подтипов сечений вводятся литерные наращения в виде латинских букв, записываемых после номера типа диаграммы.

Таким образом, получено 25 подтипов диаграмм, которые изображены в виде «матриц» на рис. 11.10.

$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & & \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & & \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & & \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & & \\ 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & & \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & & \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & & \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
0-1a	0.1-1a	1-1a	1-1b	1-2a	1.1-1a	1.1-1b	1.1-2a	2-1a	2-2a
$\begin{pmatrix} 0 & & \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & & \\ 0 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & & \\ 2 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & & \\ 2 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & & \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$
2-2b	2-2c	2.1-1a	2.1-2a	2.1-2b	2.1-3a	2.1-3b	3-1a	3-1b	3-2a
$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$		$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$		$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$		$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$		$\begin{pmatrix} 1 & & \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$	
3.1-1a		3.1-1b		3.1-2a		3.1-3a		3.1-4a	

Рис. 11.10. Подтипы диаграмм

Таким образом, для рассматриваемого случая общее число типов диаграмм равно 17, а с учетом диаграмм, которые характеризуются одним и тем же набором особых точек, но различаются ходом изолиний, общее число подтипов диаграмм — 25, а видов — 28. Если учесть антиподы, то общее число разновидностей диаграмм составит 53.

Три подтипа диаграмм (2.1-1b, 3.1-1b и 3.1-4a) имеют по два вида; три вида не имеют антиподов (0-1a, 2-1a и 2.1-3a). На рис. 11.11 для каждого из видов качественно воспроизведен ход изолиний свойств как функций состава тройной смеси.

На рис. 11.12 графически представлены все антиподы диаграмм на симплексе в виде ориентированных графов. В основу их построения были положены описанные выше принципы. Изображение диаграммы в виде графа представляет собой, по существу, обобщение графических методов парагенетического анализа, в классическом варианте которого идентифицируются лишь компоненты системы (устойчивые или неустойчивые образования), но не рассматриваются тенденции перехода от одних образований к другим.

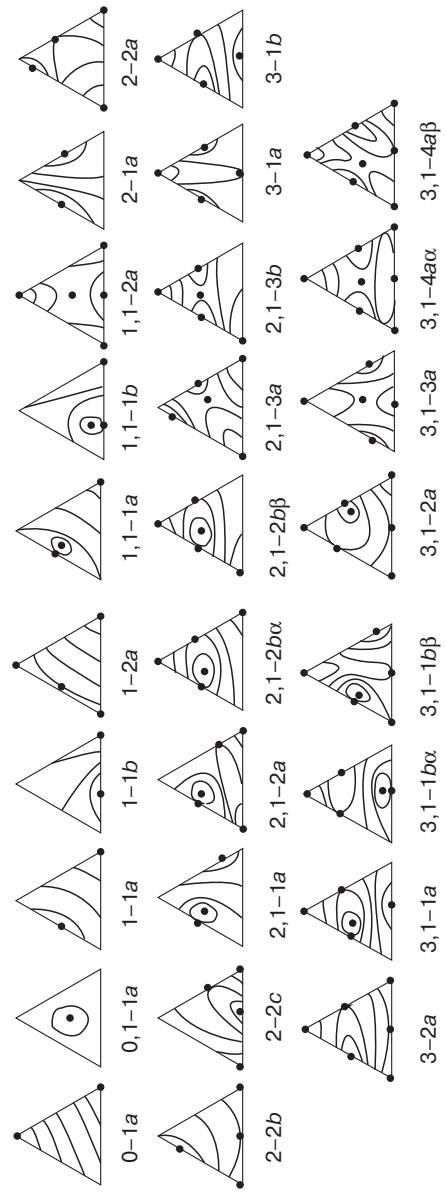


Рис. 11.11. Качественное изображение изолиний (виды диаграмм состав-свойство)

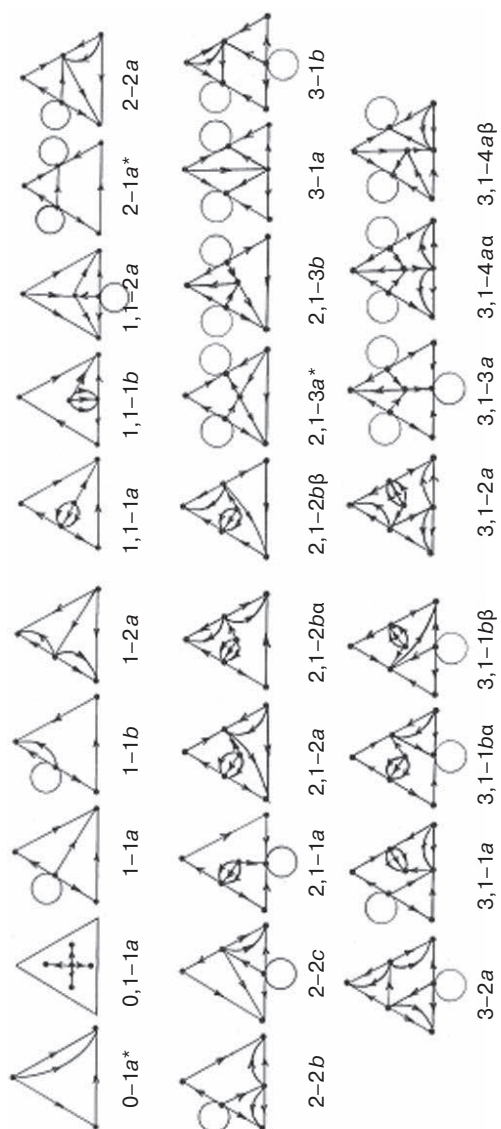


Рис. 11.12. Представление диаграмм на симплексе в форме графов (антиподы)

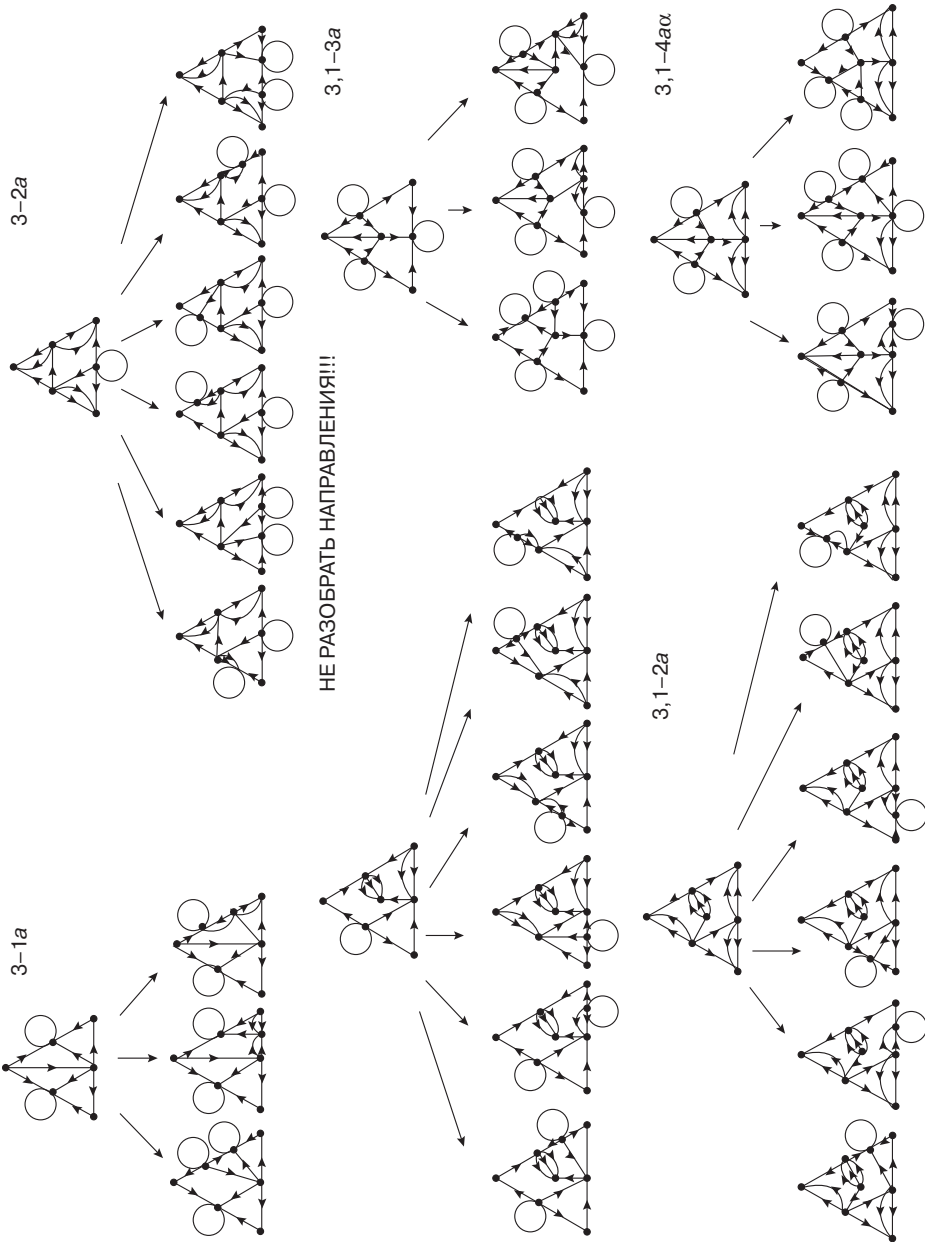


Рис. 11.13. Примеры формирования диаграмм четвертого класса

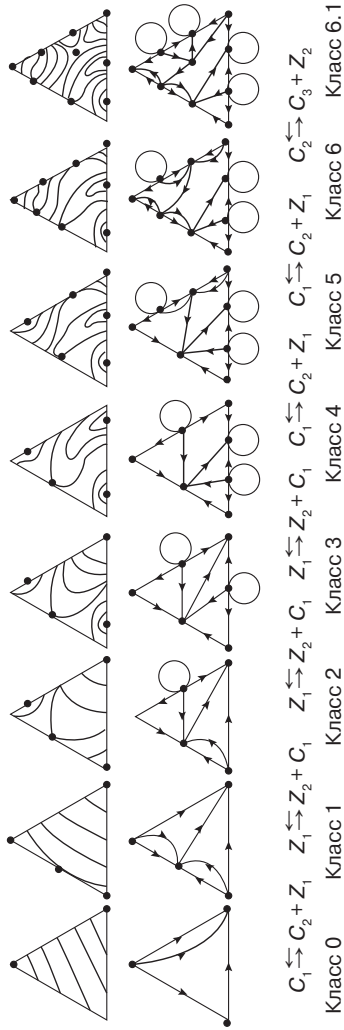


Рис. 11.14. Последовательный ряд диаграмм состав-свойство

Естественно, среди полученных диаграмм есть для каждого из свойств наиболее и наименее вероятные, однако уже сейчас можно с уверенностью сказать, что наиболее простая диаграмма нулевого класса, в которой отсутствуют экстремальные точки как на сторонах, так и внутри треугольника Гиббса, скорее будет составлять исключение, нежели правило. Таким образом, использовать уравнение аддитивности для расчета различных интенсивных свойств нужно с большой осторожностью.

Из 28 видов диаграмм 3 не имеют антиподов, на рис. 11.12 они обозначены звездочкой*. Из двух антиподов для каждого вида на рисунке изображен лишь один, второй получается обращением стрелок в обратную сторону.

Можно представить себе формирование диаграмм четвертого класса. Некоторые примеры построения таких диаграмм из соответствующих диаграмм-«родителей» третьего класса показаны на рис. 11.13.

Приведенные примеры показывают, что более сложные диаграммы, содержащие на одной из сторон две особые точки, формируются в результате того, что пропадает вершина C_1 , а вместо нее появляются две вершины C_2 и Z_1 . Или пропадает вершина Z_1 , а возникают вершины Z_2 и C_1 . Но можно рассматривать и обратный процесс перехода от более сложных диаграмм (в смысле количества особых точек) к более простым. Все это происходит в результате своего рода «реакций»: $C_1 \rightleftharpoons C_2 + Z_1$ или $Z_1 \rightleftharpoons Z_2 + C_1$.

На рис 11.14 ситуация доведена до абсурда — показано последовательное повышение класса диаграммы, а в последней позиции внутрь диаграммы еще и «вплывает» седло, что сопровождается «реакцией» $C_2 \rightleftharpoons C_3 + Z_2$.

В ряде случаев целесообразно использовать такие методы планирования эксперимента на симплексе, когда треугольник состава разбивается на множество треугольников, в каждом из которых можно реализовать какой-либо план, например, симплексную решетку. В простейшем случае равносторонний треугольник можно разбить на четыре равносторонних треугольника. И тогда исходный треугольник будет рассматриваться как объединение четырех составляющих.

При объединении симплексов суммарная диаграмма состав–свойство может оказаться достаточно простой, тогда как формирующие ее диаграммы могут быть более сложными. Для этого необходимо, чтобы при объединении имели место «реакции», в результате которых исчезают особые точки Z_2 и/или C_2 .

Например, диаграмма первого класса 1.1-2a (см. рис. 11.11 и 11.12) может быть сформирована путем объединения трех диаграмм первого класса 1-2a и одной диаграммы третьего класса 3.1-3a. Но это будет иметь место лишь в том случае, если особая точка C_3 расположена внутри центрального треугольника, формирующего объединение. Если такое условие не выполняется, тогда диаграмма 1.1-2a может быть получена из двух диаграмм 1-1a, одной диаграммы 1-2a и одной диаграммы 1.1-2a, т. е. симплексы, участвующие в объединении, по сложности не превосходят суммарную диаграмму.

Даже простейшая диаграмма $0-1a$ может быть образована путем объединения диаграмм $0-1a$, $1-1a$, $1-2a$ и диаграммы второго класса $2-2b$ (рис. 11.15).

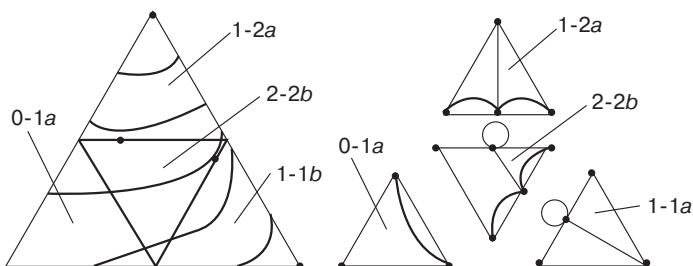


Рис. 11.15. Объединение симплексов

При объединении симплексов центральный симплекс выполняет как бы роль стержня для трех периферийных треугольников. При этом структура периферийных треугольников накладывает жесткие ограничения на структуру внутреннего стержневого треугольника.

Поскольку расположение и тип особых точек на сторонах внутреннего треугольника уже заданы периферийными структурами, в большинстве случаев структура внутреннего треугольника может быть единственной. Исключение составляют лишь диаграммы $2.1-2b$, $3.1-1b$ и $3.1-4a$, для которых могут существовать различные виды диаграмм свойство–состав.

В этом случае при идентичности периферийных треугольников стержневые могут принадлежать различным видам, но одному и тому же подтипу.

Но можно ограничиться и сечением исходного треугольника на два треугольника. И, кстати, нет нужды, чтобы они были прямоугольными.

Например, диаграмму 1-го класса типа $1a$ можно получить объединениями четырех различных пар. Это графически показано на рис. 11.16.

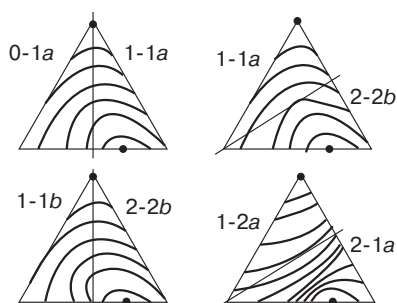


Рис. 11.16. Объединение симплексов

Эти приемы, естественно, могут быть применены при анализе двумерных сечений, рассмотренных в первом разделе данной главы.

11.3. Возможности использования тополого-графовых подходов при интерпретации экспериментальных результатов

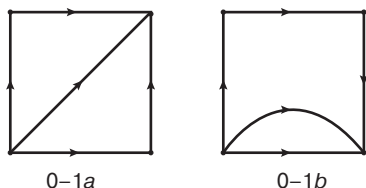
Как же можно осмыслить эти графы, которые в изобилии фигурировали в двух предыдущих разделах этой главы?

Попытаемся сформулировать понятие *сложности* применительно к графу, за которым маячит контурный график.

Резина является в общем случае многокомпонентной, многофазной, анизотропной системой, изучение которой в силу этого сопряжено с существенными затруднениями. Сложность объекта изучения не обуславливает, однако, сложности геометрических образов, о которых идет речь. Понятие сложности нуждается в специальном обсуждении. Прежде всего, сложность систем, явлений, процессов вряд ли может быть охарактеризована единым показателем. Системы или процессы, сложные в одних отношениях и в определенных условиях, могут оказаться несложными в других отношениях и в иной обстановке. Целесообразно рассматривать статическую и динамическую сложность, сложность объекта и сложность функционирования, внутреннюю сложность системы и сложность управления ею [13]. Системы могут сравниваться и оцениваться по сложности моделирования, алгоритмической сложности, информационной сложности и др.

Сложность геометрического образа, прежде всего, зависит от размеров области варьирования факторов. Если эта область велика, вероятность получения сложных геометрических образов и контурных графиков возрастает, однако возрастают и трудности получения адекватных моделей. Контурный график будет усложняться также при наличии эффектов взаимодействия между факторами.

В изложенной выше классификации двумерных сечений поверхностей отклика сложность диаграммы возрастает при увеличении номера класса. Представление двумерных сечений в виде графов может оказаться полезным для оценки сложности ситуации. Препятствием является здесь некоторый произвол при выборе степени вершин графа. Поэтому целесообразно сравнивать между собой геометрические образы в пределах одной и той же группы.



Простейшая диаграмма нулевого класса и первого типа имеет два подтипа («a» и «b»). Каждая из этих двух диаграмм, представленная в виде графов, имеет две вершины степени 3 и две вершины степени 2, поэтому общее число вершин полностью не характеризует сложности ситуации. Для ее оценки целесообразно использовать известный в литературе индекс связности Рандича, в основе которого лежит

топологическое понятие степени [14, с. 183–203]. При этом каждое ребро (дуга) графа характеризуется определенным параметром, обратным корню квадратному из степеней вершин, связанных этим ребром. Индекс Рандича для графа представляет собой сумму таких параметров всех ребер графа.

Так, графы для геометрических образов $0-1a$ и $0-1b$ имеют по пять ребер и по четыре вершины с параметрами $1/\sqrt{3}$ и $1/\sqrt{2}$.

Индекс Рандича для графа $0-1a$ составит $4 \cdot (1/\sqrt{3}) \cdot (1/\sqrt{2}) + 1 \cdot (1/\sqrt{3}) \cdot (1/\sqrt{3}) = 1,967$, а для графа $0-1b - 2 \cdot (1/\sqrt{3}) \cdot (1/\sqrt{2}) + 2 \cdot (1/\sqrt{3}) \cdot (1/\sqrt{3}) + 1 \cdot (1/\sqrt{2}) \cdot (1/\sqrt{2}) = 1,983$. Из этого расчета можно сделать вывод, что ситуация $0-1b$ более сложная, нежели ситуация $0-1a$; кроме того, следует признать, что индекс Рандича отражает структурные особенности графа и технологической ситуации, представленной этим графом.

Значения индексов Рандича для графов контурных графиков первой группы (отсутствие особых точек внутри исследуемой области) дано в табл. 11.3.

Таблица 11.3. Значения индексов Рандича для графов первой группы ($Z_3 = 0$, $C_3 = 0$)

Класс	Тип	Подтип	Индекс	Подтип	Индекс	$S^2 \cdot 10^4$
0	1	a	1,967	b	1,983	1,3
1	1	a	2,407	b	2,441	2,6
	2	a	2,424	b	2,441	
2	1	a, b	2,865			6,6
	2	a, b	2,865	c, d, e, f, g	2,882	
		h	2,899	i, j	2,916	
	3	a, b	2,932			
3	1	a, b, c	3,306	d, e, f	3,340	9,6
	2	a, b, c	3,373	d, e, f	3,390	
4	1	a	3,730			18,8
	2	a, b, c, d, e, f, g	3,814			
	3	a	3,898			

Анализ расчетов, представленных в табл. 11.3, показывает, что индекс связности Рандича возрастает при переходе от нулевого к четвертому классу почти в 2 раза. Можно попытаться объяснить тот факт, что, например, структуры 2-2 имеют широкий спектр значений индекса Рандича (четыре величины), тогда как все семь подтипов структур 4-2 имеют одно единственное значение индекса. Такое явление связано с тем, что структуры 4-2 имеют большое количество ребер графа и малое число степеней свободы в их расположении.

Таблица 11.4. Значения индексов Рандича для графов второй группы ($Z_3 = 1, C_3 = 0$)

Класс	Тип	Подтип	Индекс	Подтип	Индекс	$S^2 \cdot 10^4$
0.1	1	a	2,000			—
1.1	1	a	2,909	b	2,942	5,4
2.1	1	a, b	3,359			6,0
	2	a	3,318	b	3,359	
		c, d, e, f	3,376	g	3,410	
3.1	1	a, b, c	3,800	d, e, f	3,834	11,1
	2	a	3,868	b	3,885	
4.1	1	a, b	4,224			16,8
	2	a, b, c, d	4,309			
	3	a	4,393			

При увеличении номера класса структуры наблюдается и повышение величины размаха показателей индекса в пределах каждого класса. Для нулевого класса размах составил 0,016, для первого — 0,034, для второго — 0,067, для третьего — 0,084 и для четвертого — 0,168.

Аналогичные данные получены и для графов второй группы (табл. 11.4). В этом случае при переходе от нулевого класса к четвертому индекс Рандича увеличивается более чем в два раза; наиболее широкую номенклатуру значений индекса опять имеют диаграммы второго класса 2.1-2. Размах показателя составил: для ситуаций первого класса — 0,033, для второго — 0,051, для третьего — 0,085 и для четвертого — 0,169.

Таблица 11.5. Значения индексов Рандича для графов третьей группы ($Z_3=0, C_3=1$)

Класс	Тип	Подтип	Индекс	Подтип	Индекс	$S^2 \cdot 10^4$
0.1	2	a	2,488			—
1.1	2	a	2,939	b	2,956	1,4
2.1	3	a	3,373	b, c, d, e	3,390	7,2
		f	3,407	g	3,424	
	4	a	3,440			
		$b (\alpha, \beta)$	3,440	$b (\gamma)$	3,447	

Таблица 11.5, окончание

Класс	Тип	Подтип	Индекс	Подтип	Индекс	$S^2 \cdot 10^4$
3.1	3	a	3,807	b	3,841	
	4	$a(\alpha)$	3,875	$a(\beta, \gamma)$	3,881	
		$b(\alpha, \beta)$	3,875	$b(\gamma)$	3,881	5,4
		c	3,881			
		$d, e, f(\alpha)$	3,891	$d, e, f(\beta, \gamma)$	3,898	
4.1	4	a	4,224			30,2
	5	$a(\alpha)$	4,309	$a(\beta)$	4,316	
		$b(\alpha)$	4,316	$b(\beta)$	4,322	
		$c(\alpha, \beta)$	4,316	$c(\gamma)$	4,322	
		d	4,316			
	6	$a(\alpha)$	4,393	$a(\beta)$	4,400	
		$a(\gamma, \delta)$	4,407			
		$b(\alpha, \beta)$	4,400	$b(\gamma, \delta, \epsilon)$	4,407	

Необходимо отметить, что в случае диаграмм первой и второй группы индекс Рандича не позволяет идентифицировать виды геометрических образов. Это объясняется тем, что особые точки Z_3 связаны ребрами только с вершинами степени 5.

Графы третьей группы в этом отношении стоят особняком, поскольку вершины графа C_3 могут быть связаны как с вершинами степени 5, так и с вершинами степени 3. Этим обусловлено большее разнообразие значений индекса Рандича. Результаты расчетов можно видеть в табл. 11.5.

В последней группе размах значений индекса Рандича составляет для диаграмм первого класса 0,017; второго класса — 0,074; третьего класса — 0,091 и четвертого класса — 0,183.

Представленные данные более объективно иллюстрируются значениями дисперсий S^2 , подсчитанных по величинам индекса Рандича для каждого из классов трех групп графов. Наличие тенденции роста дисперсий с повышением сложности геометрического образа не может вызывать сомнений.

Заметно также, что большинство подтипов диаграмм одного и того же типа имеют одинаковое значение индекса. Для того чтобы обнаружить топологические различия рассматриваемых графов, целесообразно осуществить ряд преобразований графов [15, с.90–103, 16, с. 199–206, 17, с. 344–502].

Например, структуры второго класса, первого типа и подтипов « a » и « b » имеют один и тот же индекс 2,865. Если исключить одно из ребер каждого из рассматриваемых графов, можно получить некоторое множество суграфов, имеющих свои значения индекса Рандича. Для диаграммы 2-1 a (4 суграфа) среднее значение индекса составляет 2,829, для диаграммы 2-1 b (5 суграфов) — 2,836. Полученные в результате такого преобразования суграфы показаны на рис. 11.17.

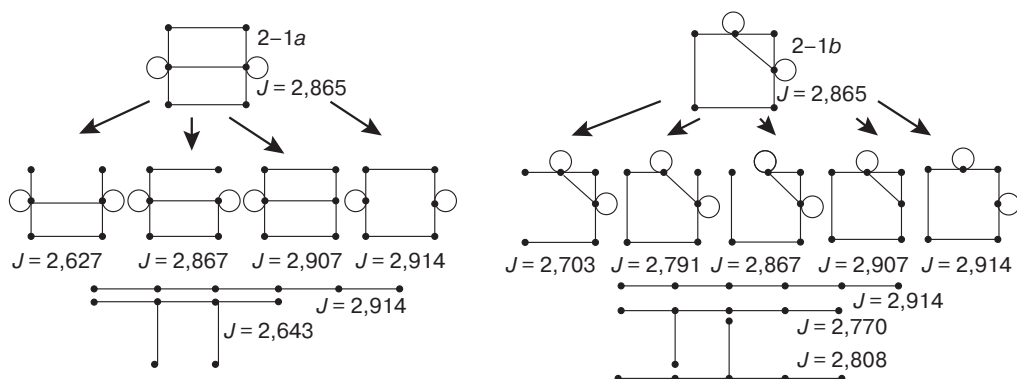


Рис. 11.17. Идентификация подтипов диаграмм при формировании суграфов при исключении одного ребра и созданием покрывающих деревьев исключением четырех ребер

Последовательное исключение четырех ребер дает возможность получить суграфы, являющиеся покрывающими деревьями.

Для диаграммы 2-1a существует два таких дерева, для диаграммы 2-1b — три (рис. 11.17, внизу). Среднее значение индекса Рандича в первом случае 2,779, во втором — 2,831.

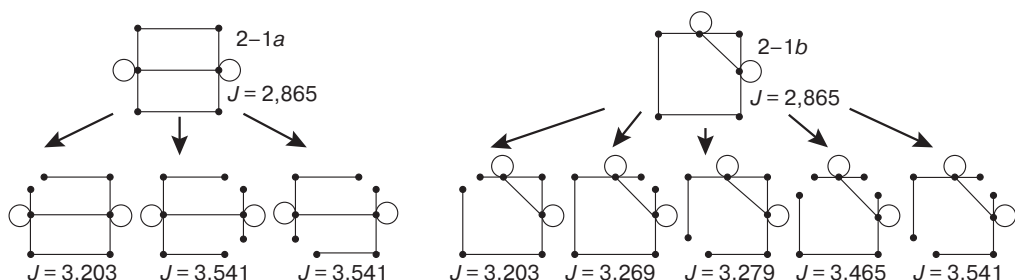


Рис. 11.18. Идентификация подтипов диаграмм путем «стирания» одной или двух вершин

Следующая возможность сопоставительного анализа графов состоит в их разрезе, который может сводиться к «стиранию» одной или нескольких вершин и снабжению полученных ребер висячими вершинами. При таком «стирании» не должна нарушаться связность графа. Результаты такого анализа иллюстрируются рис. 11.18. Для диаграммы 2-1a (индекс Рандича 2,865) «стирание» одной вершины дает граф с индексом Рандича 3,203. Для диаграммы 2-1b (тот же индекс 2,865) можно в этом случае образовать уже три производных графа со средним значением индекса Рандича — 3,250. При «стирании» двух вершин в первом случае (2-1a) формируется два производных графа с одинаковым значением индекса связности, во втором случае (2-1b) также получаются два производных графа, но с различными значениями индекса Рандича.

Указанные выше приемы могут быть опробованы и при дифференциации различных видов геометрических образов одного и того же подтипа. В качестве примера можно рассмотреть две диаграммы $2-3a\alpha$ и $2-3a\beta$, имеющие одинаковое значение индекса связности 3.373.

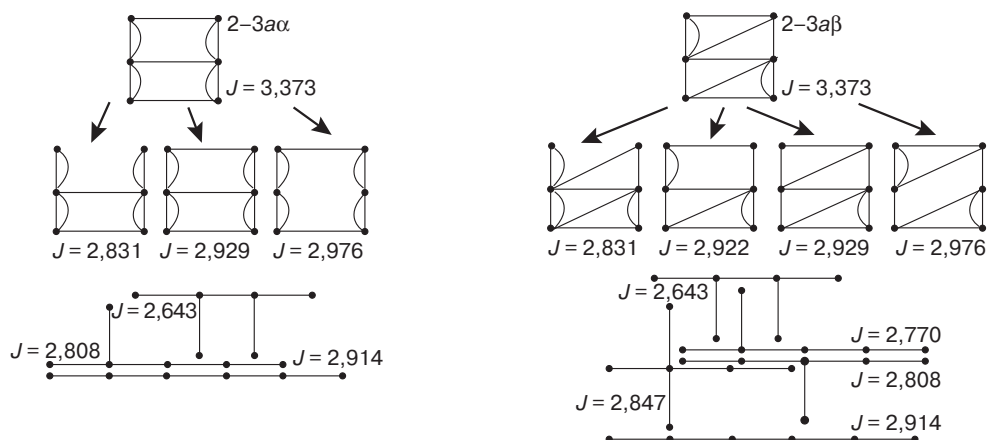


Рис. 11.19. Идентификация видов диаграмм при формировании суграфов при исключении одного ребра и создание покрывающих деревьев исключением шести ребер графа

Исключение одного ребра в случае диаграммы $2-3a\alpha$ приводит к образованию трех суграфов со средним значением индекса Рандича 2,912. Аналогичная операция для диаграммы $2-3a\beta$ дает четыре суграфа со средним значением индекса связности 2,915. Эти преобразования показаны графически на рис. 11.19. Первая из рассматриваемых ситуаций имеет три покрывающих дерева со средним значением индекса 2,788; вторая ($2-3a\beta$) имеет пять покрывающих деревьев со средним значением индекса связности 2,796. Разновидности образующихся деревьев показаны на рис. 11.19 внизу.

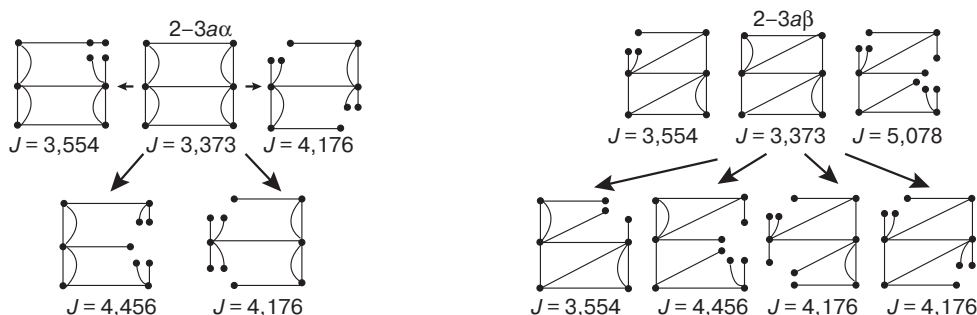


Рис. 11.20. Идентификация видов диаграмм путем «стирания» одной или двух вершин

Стирание одной из вершин графов представлено графически на рис. 11.20. Для ситуации $2-3a\alpha$ образуется два графа; для ситуации $2-3a\beta$ — три. Однако набор

численных значений индексов Рандича в этих двух случаях совпадает. В этом плане более информативно стирание двух вершин: здесь обнаруживается, что ситуация $2-3a\beta$ топологически более «богата», нежели ситуация $2-3a\alpha$.

Приведенные примеры не позволяют утверждать, что использованный индекс связности Рандича характеризует однозначно сложность контурного графика. Но анализ в пределах одного типа и/или одного вида, безусловно, оправдан.

Приведем теперь значения индексов Рандича для графов, отражающих диаграммы состав–свойство (табл. 11.6).

Таблица 11.6. Значения индексов Рандича для графов диаграмм состав–свойство

Диаграмма	Индекс	Диаграмма	Индекс	Диаграмма	Индекс
0-1a	1,483	0.1-1a	2,000	1.1-2a	2,473
1-1a	1,907	1.1-1a	2,408	2.1-3a	2,907
1-1b	1,941	1.1-1b	2,442	2.1-3b	2,924
1-2a	1,958	2.1-1a	2,859	3.1-3a	3,341
2-1a	2,365	2.1-2a	2,893	3.1-4a α	3,425
2-2a	2,399	2.1-2b α	2,910	3.1-4a β	3,432
2-2b	2,415	2.1-2b β	2,910		
2-2c	2,415	3.1-1a	3,334		
3-1a	2,840	3.1-1b α	3,334		
3-1b	2,840	3.1-1b β	3,334		
3-2a	2,924	3.1-2a	3,418		

Анализ табл. 11.16 показывает, что в пределах каждой группы диаграмм топологические инварианты возрастают при переходе от одного класса к другому. В ряде случаев по индексу Рандича нельзя идентифицировать различные подтипы (в трех случаях из девяти) и различные виды (в двух случаях из трех) диаграмм.

Для разделения можно использовать построение суграфов путем исключения одного ребра графа. Так, для диаграммы $2-2b$ получается семь суграфов, а для диаграммы $2-2c$ — восемь. Для диаграммы $3-1a$ получено шесть суграфов, а для $3-1b$ — уже десять.

Могут быть разделены и различные виды диаграмм. Так, диаграмма $2.1-2b\alpha$ дает семь суграфов, а $2.1-2b\beta$ — восемь.

Несколько сложнее осуществить идентификацию диаграмм 1 типа класса 3.1. Граф диаграммы $3.1-1a$ формирует 10 суграфов, в случае $3.1-1b\alpha$ также образуется 10 суграфов, а в случае $3.1-1b\beta$ — 11. Таким образом, разделение видов осуществляется, а разделение подтипов в одном случае не достигается. Не приводит к желаемому результату и построение покрывающих деревьев.

Следует отметить различные значения индексов для двух видов 3.1-4aα и 3.1-4aβ.

Рассмотрим три примера, которые иллюстрируют возможности прогнозирования структурных особенностей поверхности отклика с использованием топологических представлений.

Оценим возможность повышения теплопроводности пенополиуретана, который готовился по следующей рецептуре: полиэфир лапрол-805 — 100 масс. ч., триэтаноламин — 4 масс. ч., уксуснокислый натрий — 1 масс. ч., вода — 2 масс. ч., пенорегулятор КЭП-2 — 0,5 масс.ч., фреон-113 — 12 масс. ч., полиизоцианат — 145 масс. ч.

Задача состояла в повышении теплопроводности материала при условии сохранения величины электрического сопротивления и плотности (40–50 кг/м³).

При введении в исходную композицию нитрида бора как агента, существенно повышающего теплопроводность, резко увеличивается вязкость системы, что препятствует образованию качественной пористой структуры. Для получения однородной структуры пористости было в три раза увеличено содержание пенорегулятора, который снижает поверхностное натяжение в системе, инициирует зарождение активных центров порообразования и повышает устойчивость пены до момента потери ею подвижности. В композицию вводилось 30 масс. ч. нитрида бора. Содержание воды варьировалось в пределах 2–4 масс.ч., а фреона-113 — 12–16 масс. ч. на 100 масс.ч. полиэфира.

Перед началом эксперимента, если нет каких-либо априорных соображений, мы можем ожидать получения любого из 326 двумерных сечений (рис. 11.5).

В качестве первого шага исследована зависимость плотности пенополиуретана от содержания фреона $x_1 \in [12; 16]$ при минимальном количестве воды (2 масс. ч.).

Обнаружена общая тенденция увеличения плотности, что сопряжено с ухудшением структуры пористости и интенсивным выходом образующихся газообразных продуктов. Однако при низком содержании фреона плотность несколько снижается, и можно констатировать наличие минимума Z_2 или C_2 на исследуемой стороне двумерного сечения (рис. 11.21).

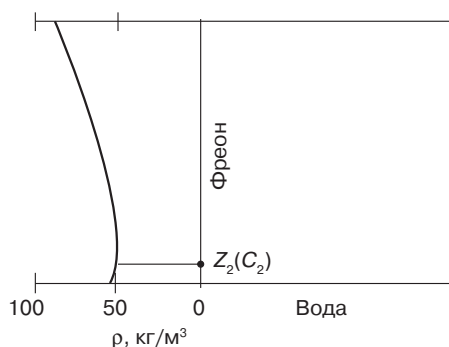


Рис. 11.21. Первый этап

Присутствие экстремума исключает существование двумерных сечений классов 0 и 0,1. Кроме того, этому условию не могут соответствовать некоторые антиподы 2, 3 и 4 классов. Таким образом, остается возможность получить 257 антиподов.

Вторая стадия исследования заключалась в поиске зависимости плотности пенополиуретана от содержания фреона в том же диапазоне концентраций, но при максимальном содержании воды (4 масс. ч.). Плотность падает, достигая минимального значения, и затем несколько возрастает (рис. 11.22). Таким образом, на правой стороне исследуемого прямоугольника состава также наблюдается минимум Z_2 (или C_2).

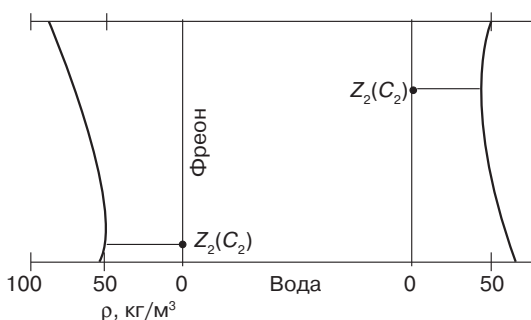


Рис. 11.22. Второй этап

Наличие двух экстремумов исключает возможность существования ситуаций классов 1 и 1.1, всех разновидностей второго класса, имеющих особые точки на смежных сторонах, а также всех антиподов, в которых на противоположных сторонах расположены минимум и максимум. Анализ показал, что количество возможных двумерных сечений после этого шага исследования сократилось до 85. Эти рассуждения справедливы, разумеется, если выполняются условия (11.3).

На третьем этапе (рис. 11.23) исследования содержание фреона фиксировалось на максимальном уровне, и дозировка воды варьировалась от 2 до 4 масс. ч. На верхней стороне прямоугольника не было обнаружено особых точек, поэтому можно утверждать, что левая верхняя вершина — Z_1 , а правая верхняя — C_1 . Таким условиям может соответствовать три двумерных сечения второго класса, пять двумерных сечений класса 2.1, девять двумерных сечений третьего класса и двадцать два сечения класса 3.1 (всего 39 антиподов). С увеличением содержания воды плотность существенно понижается.

Четвертый этап поиска включал исследование влияния содержания воды на плотность материала при минимальной (12 масс. ч.) концентрации фреона (рис. 11.24). Плотность незначительно возрастает, особых точек на нижней стороне прямоугольника не обнаружено. Поэтому левая нижняя вершина — C_1 , а правая нижняя — Z_1 .

Таким образом, после завершения исследования контура рассматриваемой области количество возможных топологических структур сокращается до трех: 2-2f; 2.1-2d или 2.1-3e.

Пятый этап работы содержал исследование окрестностей экстремума на левой стороне прямоугольника состава. Использовался метод дихотомии на дуге в окрестностях особой точки (рис. 11.25).

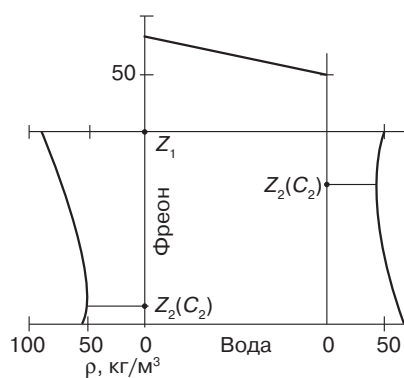


Рис. 11.23. Третий этап

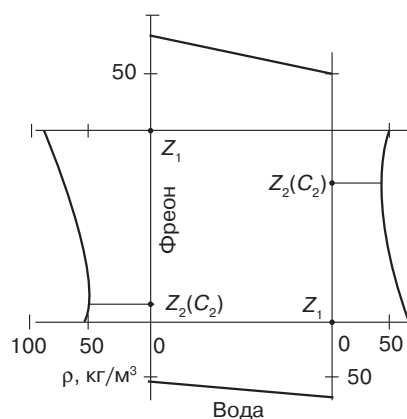


Рис. 11.24. Четвертый этап

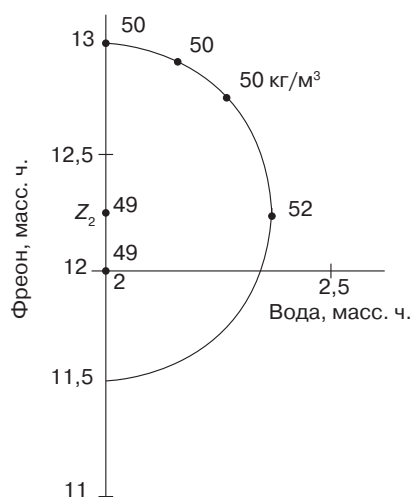


Рис. 11.25. Пятый этап

Показано, что во всех направлениях значение отклика возрастает, это означает, что наличествует минимум типа Z_2 . Такое положение соответствует лишь ситуации 2-2f или 2.1-3e.

Шестой этап включал идентификацию особой точки на правой стороне прямоугольника (рис. 11.26).

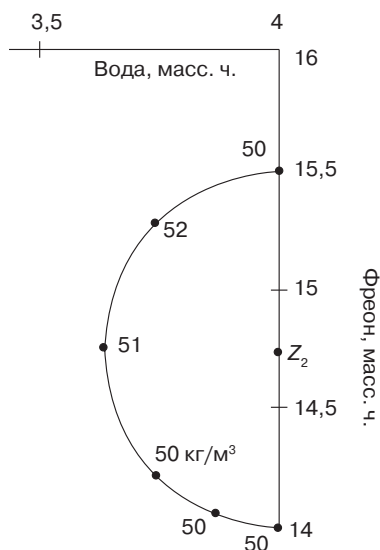


Рис. 11.26. Шестой этап

Было показано, что здесь также имеет место экстремум (минимум) типа Z_2 . Поэтому остается лишь одна возможная структура 2.1-3e. Однако изучение поведения функции отклика во всей области определения не позволило получить адекватного уравнения регрессии.

Поэтому седьмой этап работы состоял в оптимизации ситуации на текущей, соединяющей две особые точки Z_2 . Существование особой точки C_3 внутри исследованного факторного пространства экспериментально подтверждается (рис. 11.27).

Внутри заштрихованной области сочетание уровней факторов обеспечивает получение пенополиуретана плотностью ниже 50 кг/м^3 . При этом теплопроводность в 1,7 раза превышает значения, полученные для ненаполненной композиции.

В целом получение такой композиции оказалось возможным лишь в силу того, что формируется синергизм в направлении долинной линии седла. Ротатабельный план, построенный в районе экстремума, практически не выявляет существенных тенденций изменения отклика.

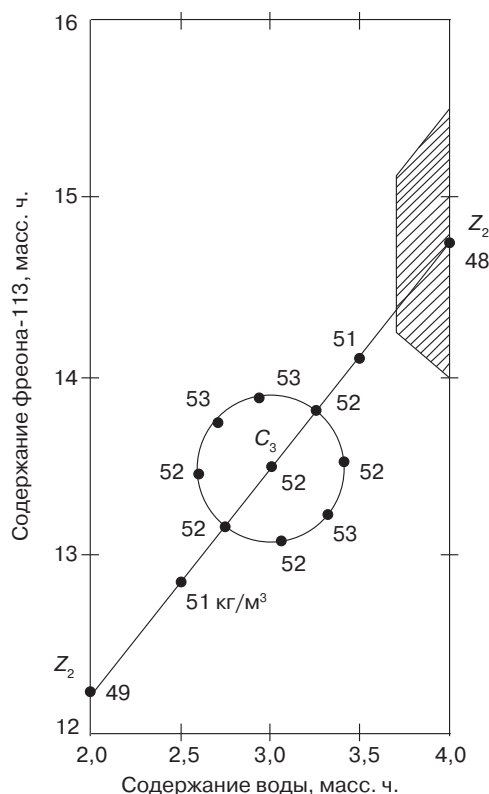


Рис. 11.27. Седьмой этап

Другой пример касается определения коэффициента поглощения ультразвука, как функции частоты и температуры измерения.

Анализ производился над образцами из полиизобутилена. В силу отсутствия соответствующих датчиков измерения произведены в двух областях факторного пространства.

Результаты определений в виде двух контурных графиков представлены на рис. 11.28.

Оба контурных графика относятся, согласно классификации, к структурам 2-2с. Задача состоит в определении типа промежуточной структуры, которую можно назвать тонкой, поскольку ей может соответствовать несколько геометрических образов. Стабильные структуры, отражающие контурные графики, назовем грубыми.

Хотя качественно тенденции изменения отклика в обоих исследованных областях факторного пространства принципиально однотипны (диаграмма 2-2с), не вызывает сомнений, что область релаксационного перехода при низких частотах смещается в сторону более высоких температур (40–60 °С против 5–40 °С при высоких частотах).

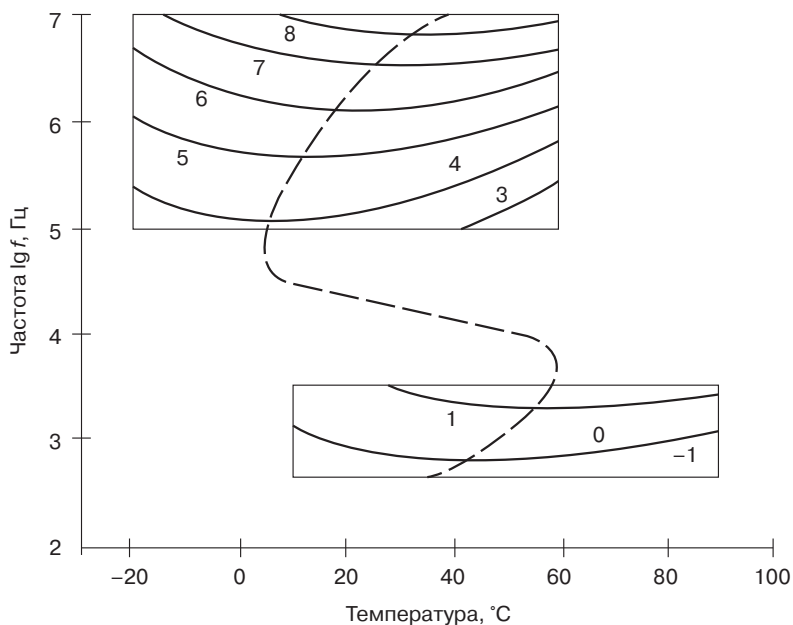


Рис. 11.28. Зависимость логарифма коэффициента поглощения от частоты и температуры (полиизобутилен)

Возможные тонкие структуры, обеспечивающие сочленение двух грубых структур 2-2с, показаны на рис. 11.29.

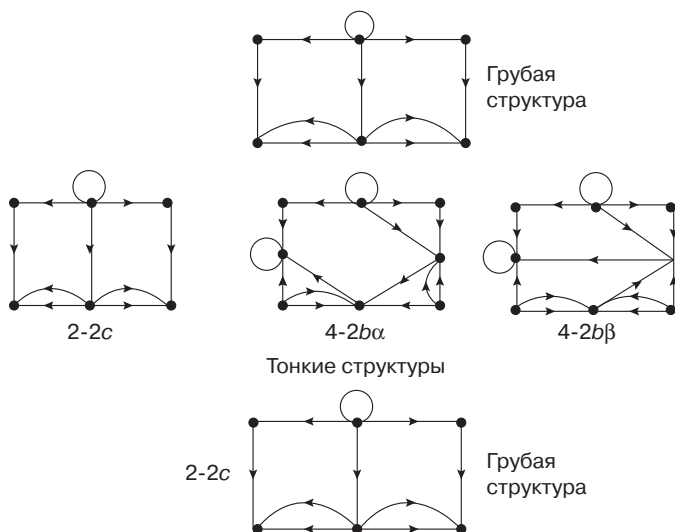


Рис. 11.29. Поиск промежуточной структуры

Характерно, что путем анализа графов можно показать невозможность существования тонкой структуры (в данном случае) в виде ситуации с экстремумом любого типа внутри рассматриваемой области, а также любых диаграмм четвертого класса. Стоит лишь изобразить стрелки, и становится ясно, что возможна лишь одна промежуточная структура 2-2с, поскольку только она характеризуется максимумом на верхней и нижней сторонах прямоугольника.

Следующий пример был связан с определением теплопроводности вулканизатов на основе комбинации каучуков СКИ-3 и НК, содержащих в различных соотношениях и количествах три марки технического углерода П234, П324 и П514.

На рис. 11.30 представлены диаграммы состав–свойство в тех случаях, когда общее содержание технического углерода составляло 10 и 50 масс. ч. на 100 масс. ч. полимерной основы.

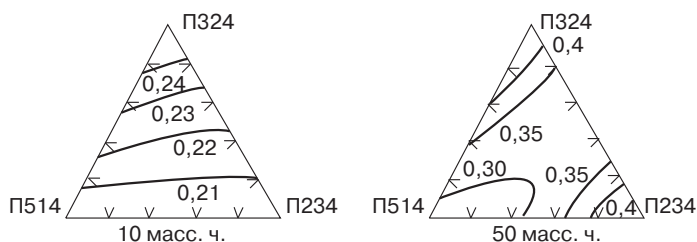


Рис. 11.30. Диаграммы состав–свойство теплопроводности, Вт/(м·К)

Диаграмма, соответствующая содержанию 10 масс.ч., относится к классу 0-1a, однако минимум, в пределах ошибки опыта, может находиться в любой точке на нижней стороне треугольника (рис. 11.31) и даже «выползть» на боковые стороны.

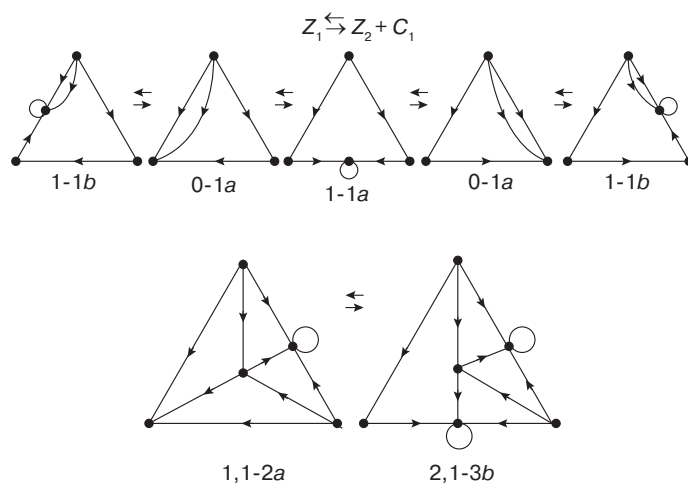


Рис. 11.31. Переходы в пределах погрешности

Диаграмма для повышенного содержания технического углерода «резонирует» между двумя возможными структурами 1.1-2a и 2.1-3b. «Реакции» в обоих случаях одинаковые $Z_1 \rightleftharpoons Z_2 + C_1$.

А теперь вопрос: через какие структуры проходит система при переходе от 0-1a (или 1-1a, 1-1b) к 2.1-3b (1.1-2a)?

Можно предложить такой ход рассуждений. Возьмем за исходный пункт диаграмму 0.1a (та, которая на рис. 11.31 вторая слева). Цель — диаграмма 2.1-3b. Эта диаграмма содержит седло C_3 внутри исследованной области. Проще всего предположить, что это седло «вползло» во внутреннюю область снаружи (из области отрицательных концентраций) с правой стороны диаграммы (П234-П324). Следовательно, на этой стороне была когда-то особая точка C_2 .

Как она могла появиться на правой стороне треугольника, если за начало брать структуру 0-1a? Только один путь — через «реакцию», превращающую вершину C_1 (а она одна на диаграмме 0-1a) в вершину C_2 : $C_1 \rightarrow C_2 + Z_1$.

Итак, первый этап — переход от 0-1a к 1-2a.

Второй этап представляет собой «реакцию» $Z_1 \rightarrow Z_2 + C_1$. На этом этапе происходит переход от диаграммы 1-2a к диаграмме 2-2b.

И, наконец, третий этап — следствие «реакции» $C_2 \rightarrow C_3 + Z_2$. Диаграмма 2-2b трансформируется в 2.1-3b (рис. 11.32).

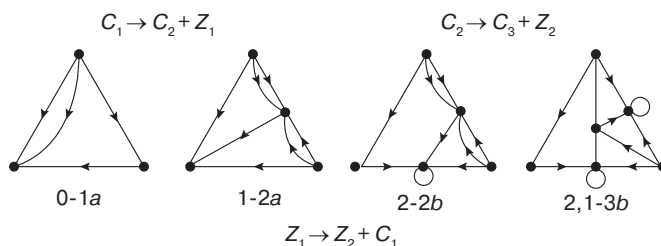


Рис. 11.32. Метаморфозы диаграмм

А теперь экспериментальная проверка — построение диаграммы при суммарном содержании технического углерода 30 масс. ч. (рис. 11.33).

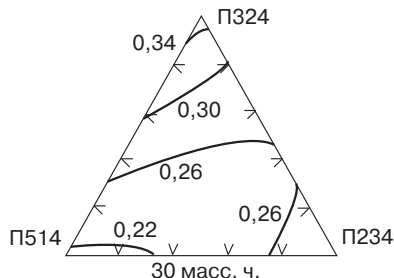


Рис. 11.33. Диаграмма состав–свойство

Получилась диаграмма 2-2b.

Можно высказать предположение, что в области дозировок технического углерода 30–40 масс. ч. формируются пространственные структуры, ответственные за перенос тепла в системе. При повышенном содержании технического углерода наблюдается синергический эффект в направлении долинной линии седла.

Еще одна возможность повышения теплопроводности может быть связана с варьированием гранулометрического состава вводимых наполнителей. Такой пример был приведен в 9-ой главе, и касался использования с этой целью порошка алюминия различной дисперсности. Вводилось три фракции АСД (алюминий сферический дисперсный): со средним диаметром частиц < 5 мкм; со средним диаметром частиц 5–15 мкм и со средним диаметром частиц > 15 мкм.

Формируется диаграмма 3.1-2a (рис. 11.34) с вершиной C_3 максимумом. При увеличении среднего диаметра частиц наполнителя теплопроводность уменьшается, что свидетельствует о снижении количества контактов между сферическими частицами оксида алюминия. Для всех бинарных систем и для тройной композиции наблюдается эффект синергизма, что, возможно, связано с внедрением мелких частиц в пространства между крупными и образованием совместных пространственных структур.

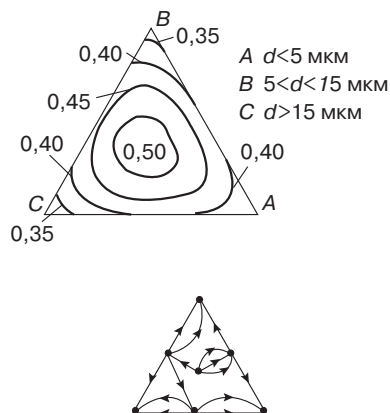


Рис. 11.34. Диаграмма состав–свойство

Таким образом, при модификации тепловых свойств с помощью наполнителей можно использовать синергический эффект гиперболического типа, связанный с протеканием процессов адсорбции, взаимодействия в межфазном слое, формирования геля и т. д. и синергический эффект эллиптического типа, более «механического» по своей природе, сопряженного с изменением количества «пятен» контакта частиц при варьировании гранулометрического состава.

Рекомендовать какой-то один путь было бы неправильно, нужно использовать обе возможности.

Пространственное изображение, построенное по какому-либо уравнению регрессии $y = f(x_1, x_2)$, представляет собой как бы «слоеный пирог», каждый слой которого

формирует какой-то один или группа эффектов, объединенных в уравнение. Например, модель второго порядка состоит из линейной части $b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$, квадратных эффектов $b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2$ и эффекта взаимодействия $b_{12}x_1x_2$. В случае модели третьего порядка в этот «пирог» добавятся кубы переменных $b_{111}x_1^3 + b_{222}x_2^3$ и расширится набор эффектов взаимодействия $b_{12}x_1x_2 + b_{112}x_1^2x_2 + b_{122}x_1x_2^2$. Такой фазовый анализ поверхности в сочетании с оценкой ее стабильности и сложности по описанным методикам позволяет судить о механизме протекающих процессов и возможностях управления ими.

Рассмотрим зависимость сопротивления раздиру (y , кН/м) вулканизатов на основе бутадиен-стирольного каучука *SBR* 1500 от продолжительности вулканизации ($x_1 \in [15; 90]$ минут) и содержания технического углерода *HAF* ($x_2 \in [30; 70]$ масс. ч.). Исходные данные представлены в табл. 11.7.

Таблица 11.7. Результаты определения сопротивления раздиру

x_1	15	30	45	60	90	15	30	45	60	90	15	30	45	60	90	15	30	45	60	90
x_2	30	30	30	30	30	40	40	40	40	40	50	50	50	50	50	70	70	70	70	70
y	49	40	35	35	36	69	55	53	50	51	76	64	63	63	62	69	61	59	57	55
y_p	48	41	36	34	35	<u>65</u>	<u>58</u>	53	51	52	75	<u>68</u>	62	60	62	70	62	58	55	57

В программе *Table Curve 3D* рассчитываем коэффициенты уравнения № 301 (модель второго порядка). Пространственное изображение дано на рис. 11.35. Параметры модели:

$$b_0 = -40,7184429; b_1 = -0,71462445; b_2 = 4,466883117;$$
$$b_{11} = 0,005101456; b_{22} = -0,03936364; b_{12} = 9,52381e-05.$$

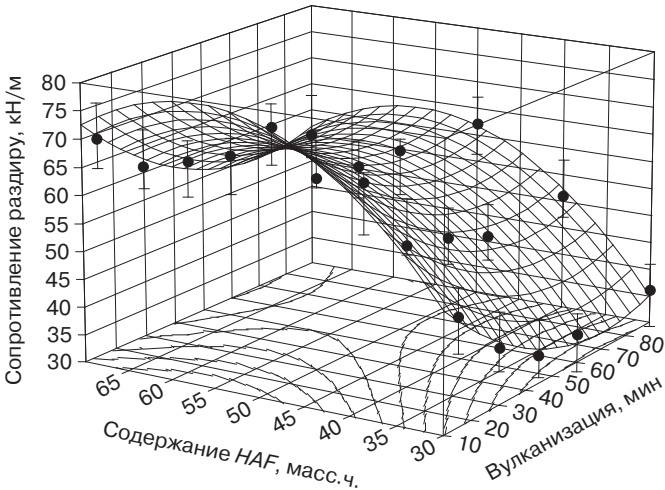


Рис. 11.35. Сопротивление раздиру

Критерии качества модели:

Коэффициент детерминации 0,9746952937;

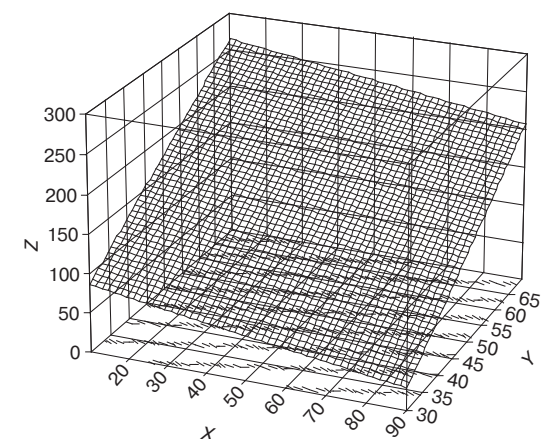
скорректированный коэффициент 0,9630161985; стандартная ошибка 2,1735658867;

критерий Фишера 107,85135348.

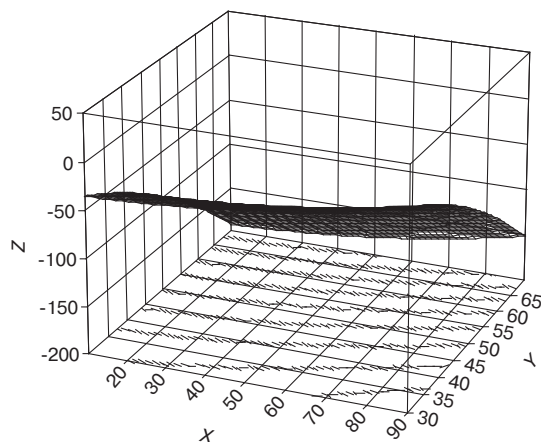
Рассчитанные по уравнению значения сопротивления раздиру y_p указаны в нижней строке табл. 11.7. Подчеркнуты значения, отличающиеся от экспериментальных на 5,1–5,9%, в остальных случаях — меньше 5%. И это при том, что уравнение имеет ранг только 269.

Результаты фазового анализа (рис. 11.36) показывают близкую к линейной геометрию отдельных фаз и отсутствие влияния эффекта взаимодействия.

Три структуры 0-1a при наложении образуют структуру 4.1-4a.



$$z = -40,7184429 - 0,71462445 \cdot x + 4,466883117 \cdot y$$



$$z = 0,005101456 \cdot x^2 - 0,03936364 \cdot y^2$$

Рис. 11.36. Фазовый анализ модели второго порядка

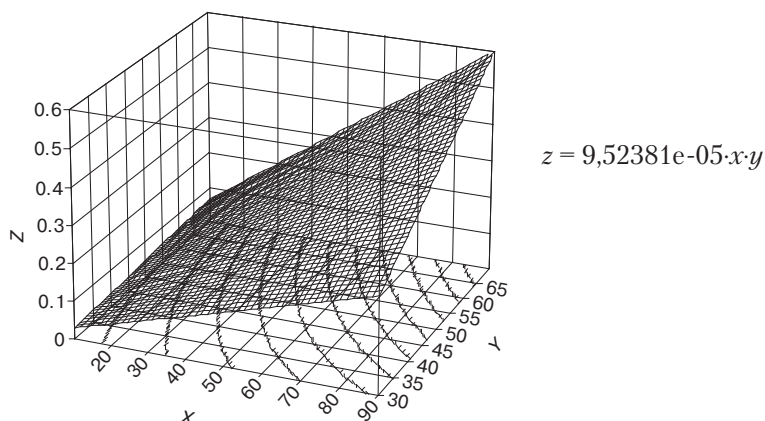


Рис. 11.36, окончание. Фазовый анализ модели второго порядка

Теперь в той же программе *Table Curve 3D* рассчитываем коэффициенты уравнений № 310 (модель третьего порядка). Пространственное изображение дано на рис. 11.37.

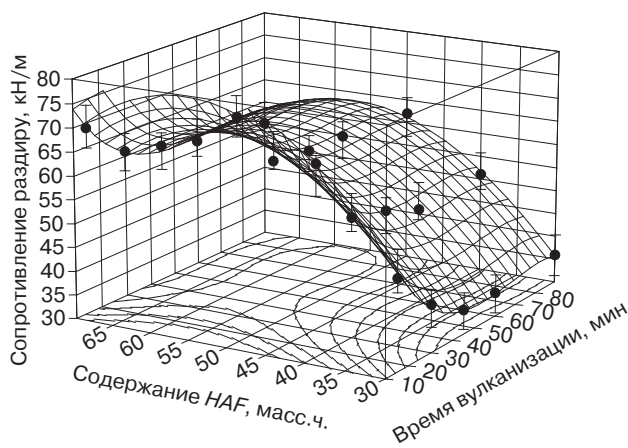


Рис. 11.37. Сопротивление раздиру

Параметры модели:

$$b_0 = -1,15311077; b_1 = -1,97694254; b_2 = 2,804664826;$$

$$b_{11} = 0,029836033; b_{22} = -0,00594349; b_{111} = -0,0001358;$$

$$b_{222} = -0,00023333; b_{12} = 0,006076028; b_{122} = 1,9656e-05;$$

$$b_{112} = -7,5078e-05.$$

Критерии качества модели:

Коэффициент детерминации 0,9914555936;

скорректированный коэффициент 0,9819618087;
 стандартная ошибка 1,494435328;
 критерий Фишера 128,92847933.
 Максимальная невязка составляет 3,4%. Ранг уравнения 12.

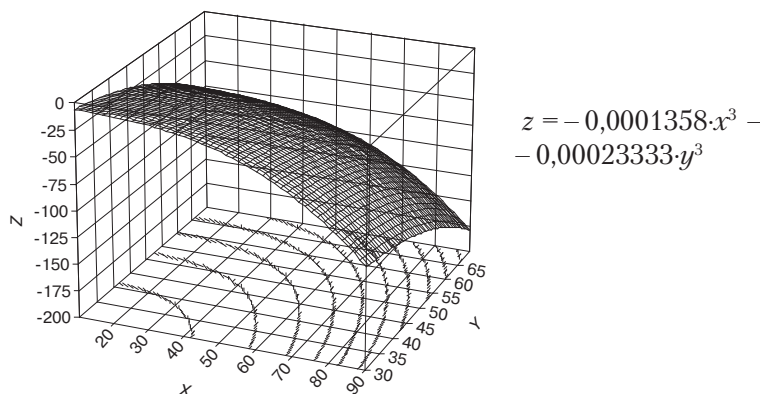
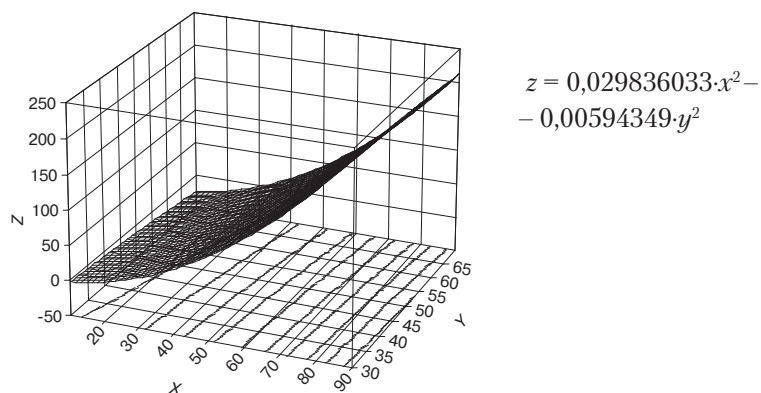
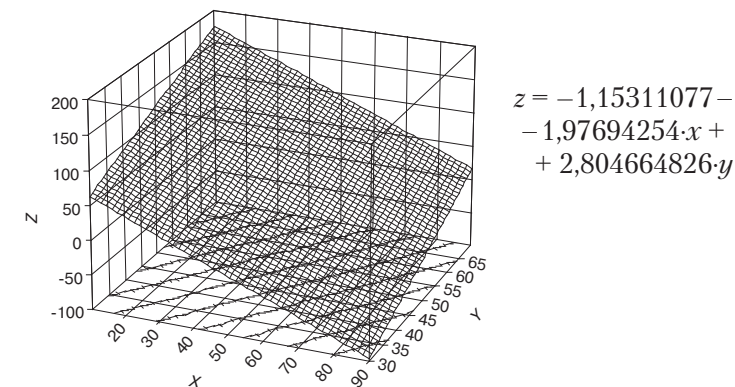


Рис. 11.38. Фазовый анализ модели третьего порядка

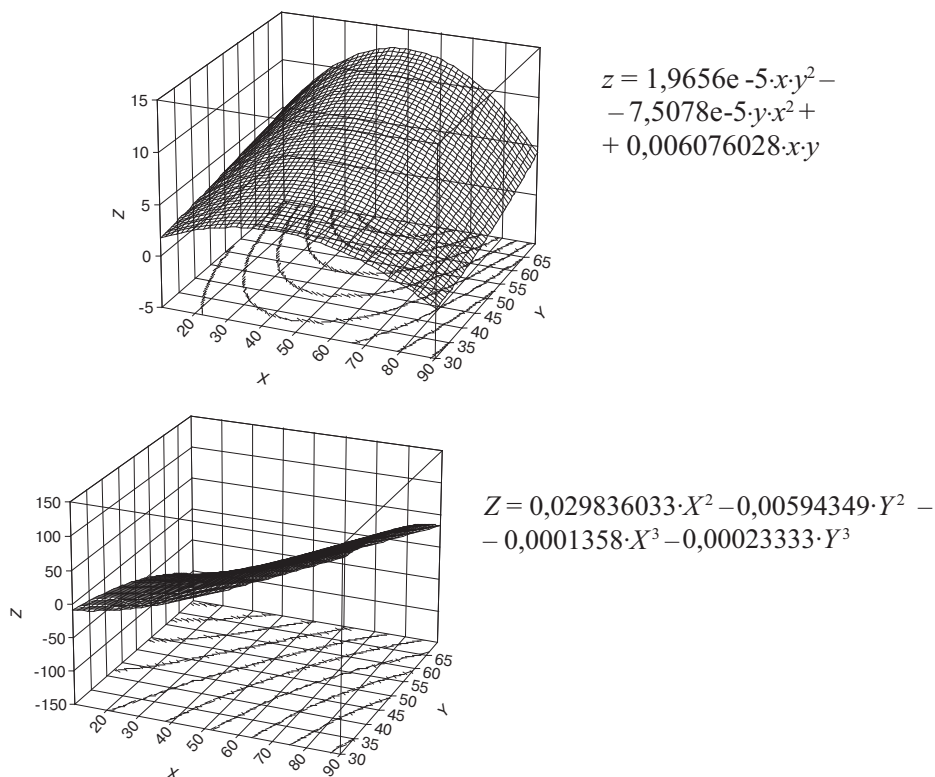


Рис. 11.38, окончание. Фазовый анализ модели третьего порядка

Результаты фазового анализа (рис. 11.38) показывают небольшой вклад эффектов взаимодействия. Объединение квадратичных эффектов и кубов переменных дает поверхность, близкую по геометрии к плоскости. Суперпозиция этой поверхности и плоскости, образуемой линейной частью модели, дает седло.

А теперь несколько слов о суперпозиции.

Суперпозицией двух произвольных функций действительной переменной $f(x)$ и $g(x)$ именно в том порядке, в котором они записаны, называется такая функция $h(x)$, что [18, 19]:

а) область определения $h(x_0)$ образована теми числами x_0 из области определения функции $f(x)$, для которых $f(x_0)$ принадлежит области определения функции $g(x)$;

б) значение функции $h(x)$ в какой угодно точке x_0 из области ее определения связано со значениями $f(x)$ и $g(x)$ равенством

$$h(x_0) = g(f(x_0)) \quad (11.6)$$

Для нахождения значения функции $h(x)$ в точке x_0 необходимо найти $f(x_0) = y_0$, а затем $g(y_0)$. Число $g(y_0)$ и есть значение функции $h(x)$ в точке x_0 .

Если функции $f(x)$ и $g(x)$ принадлежат заданному множеству функций, то и суперпозиции $(f \cdot g)(x)$ и $(g \cdot f)(x)$ этих функций также принадлежат этому множеству, т. е. множество замкнуто относительно операции суперпозиции функций.

Примером множества функций, замкнутых относительно суперпозиции, является множество всех многочленов вида

$$a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_{n-1} x + a_n \quad (11.7)$$

с целочисленными коэффициентами.

Формальные процедуры поиска суперпозиции могут использоваться и в случае многочленов, заданных уравнениями регрессии.

Так, зависимость плотности ρ и теплопроводности λ пористых вулканизатов от продолжительности вулканизации $t \in [5; 17]$ дается уравнениями регрессии:

$$\rho(x) = 0,605 + 0,052 \cdot x - 0,021 \cdot x^2; \quad x \in [-2; 2];$$

$$\lambda(x) = 0,162 + 0,0063x; \quad x = (t - 11)/6.$$

Суперпозиции имеют вид:

$$\begin{aligned} (\lambda \cdot \rho)(x) &= 0,605 + 0,052 \cdot (0,162 + 0,0063 \cdot x) - 0,021 \cdot (0,162 + 0,0063x)^2 = \\ &= 0,6129 + 2,847 \cdot 10^{-4} \cdot x - 8,335 \cdot 10^{-7} \cdot x^2; \end{aligned}$$

$$(\rho \cdot \lambda)(x) = 0,162 + 0,0063(0,605 + 0,052 \cdot x - 0,021x^2) = 0,1658 + 3,276 \cdot 10^{-4} \cdot x - 1,323 \cdot 10^{-4} \cdot x^2.$$

Первая суперпозиция описывается моделью, не имеющей экстремума на отрезке $x \in [-2; 2]$, тогда как для модели второй суперпозиции наблюдается максимальное значение при $x = 1,237$.

Очевидно, что если бы две функции $\rho(x)$ и $\lambda(x)$ были бы идентичными, совпадали бы и их суперпозиции $(\lambda \cdot \rho)(x)$ и $(\rho \cdot \lambda)(x)$. Различие исходных функций обуславливает и различие суперпозиций. Две суперпозиции можно сопоставлять между собой по величине средних значений и размаха. Так для суперпозиции $(\lambda \cdot \rho)(x)$ при $x = -2$ получим значение 0,6123; при $x = 2$ соответственно получим 0,6135; следовательно, размах суперпозиции составит $1,139 \cdot 10^{-3}$. В случае суперпозиции $(\rho \cdot \lambda)(x)$ размах составляет $1,387 \cdot 10^{-3}$. Однако средние значения суперпозиций различаются весьма существенно (0,6129 против 0,1656).

Целесообразно предварительно произвести нормирование многочленов. Тогда получим:

$$\rho_1(x) = \rho(x)/0,605 = 1 + 0,08595x - 0,03471x^2;$$

$$\lambda_1(x) = \lambda(x)/0,162 = 1 + 0,03889x.$$

Суперпозиции приобретают вид:

$$(\lambda_1 \cdot \rho_1)(x) = 1,0512 + 6,429 \cdot 10^{-4} \cdot x - 5,250 \cdot 10^{-5} \cdot x^2;$$

$$(\rho_1 \cdot \lambda_1)(x) = 1,0389 + 3,343 \cdot 10^{-3} \cdot x - 1,350 \cdot 10^{-3} \cdot x^2.$$

Средние значения рассматриваемых суперпозиций составили соответственно 1,0511 и 1,0371 (различие составляет менее двух процентов). Размах же в первом случае равен $2,57 \cdot 10^{-3}$, а во втором — $1,41 \cdot 10^{-2}$, т. е. в 5,5 раз больше.

Сравнение двух суперпозиций является более объективной оценкой тесноты связи, нежели вычисление коэффициента парной корреляции между двумя показателями

$\rho_1(x)$ и $\lambda_1(x)$. Последний зависит от объема выборки, и при сравнении с табличным значением коэффициента корреляции решение вопроса о значимости коэффициента корреляции определяется величиной ошибки первого рода.

Этот подход может быть распространен на изучение многомерного случая. В качестве примера такого анализа можно рассмотреть суперпозицию прочности (y_1), удельного объемного электрического сопротивления $\lg \rho_v(y_2)$ и твердости резин по Шору А (y_3). Уравнения регрессии имеют вид:

$$y_1 = 12,0 + 0,33x_1 + 0,37x_2 - 0,78x_1x_2 + 0,32x_1^2 + 1,12x_2^2;$$

$$y_2 = 1,96 - 1,28x_1 - 0,24x_2 - 0,07x_1x_2 + 0,20x_1^2 - 0,09x_2^2;$$

$$y_3 = 88,6 + 3,83x_1 + 1,83x_2 - 0,75x_1x_2 - 0,76x_1^2 - 0,76x_2^2,$$

где x_1 — содержание технического углерода ПЗ67-Э; x_2 — содержание технического углерода П701; $x_i \in [-1; +1]$.

В этом случае можно сформировать шесть суперпозиций. Их графическая интерпретация в координатах $x_1 - x_2$ показана на рис. 11.39. Здесь же даны графы соответствующих суперпозиций.

Суперпозиция $((y_1, y_2)y_3)(x_1, x_2)$ дает геометрический образ типа 3а и класса 3.1, имеющий размах показателя 0,0137.

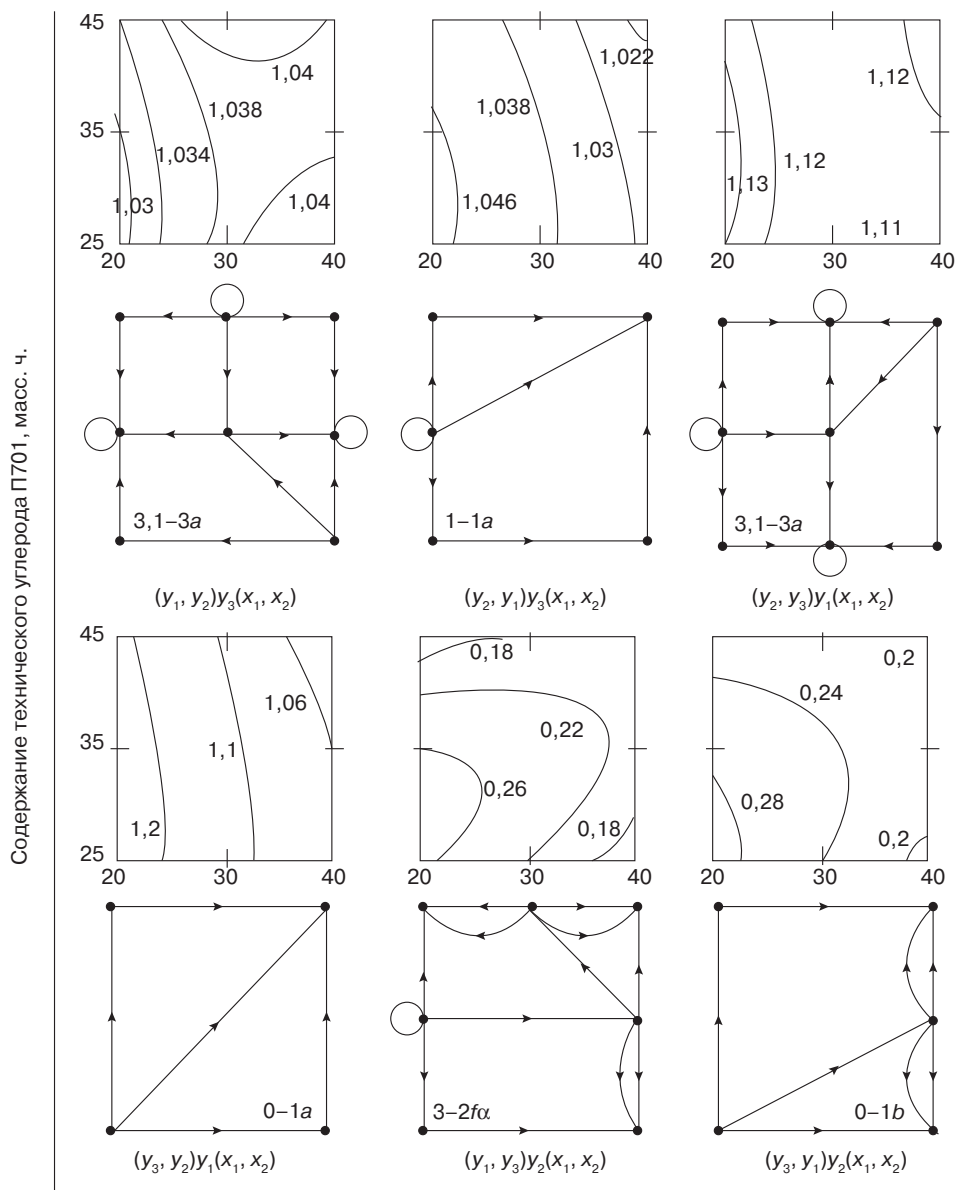
Перемена мест компонентов суперпозиции $((y_2, y_1)y_3)(x_1, x_2)$ ведет к ситуации типа 1а первого класса (здесь размах составляет 0,0270). Следует заметить, что такой же класс и тип имеет ситуация для самого отклика y_2 , т. е. того отклика, который вводится в суперпозицию вместо фактора x_1 .

Суперпозиция $((y_2, y_3)y_1)(x_1, x_2)$ приводит к ситуации типа 3а и класса 3.1 со сравнительно низким значением величины размаха (0,0261). В случае же суперпозиции $((y_3, y_2)y_1)(x_1, x_2)$ получим ситуацию типа 0-1а, при этом размах резко возрастает (0,2433). Такая же ситуация получается для отклика y_3 , который в суперпозиции вводится вновь вместо фактора x_1 .

Суперпозиция $((y_1, y_3)y_2)(x_1, x_2)$ приводит к получению ситуации 3-2fа (аналогичная картина получается для отклика y_1 , который опять вводится в суперпозицию вместо фактора x_1); размах при этом составляет 0,1181. В противоположном случае (суперпозиция $((y_3, y_1)y_2)(x_1, x_2)$) формируется ситуация 1-2b (размах составляет 0,0988).

Если сопоставить величину размаха показателя суперпозиции для шести случаев со значением индекса Рандича соответствующих графов, обнаруживается, что коэффициент корреляции $r = -0,656$, что меньше табличного даже при уровне значимости $\alpha = 0,10$. При исключении из расчетов ситуации 0-1а коэффициент корреляции вообще близок к нулю. Следовательно, нет смысла в поиске взаимосвязи сложности графа и величины размаха показателя.

Можно попытаться связать величину размаха с наличием или отсутствием особых точек гиперболического типа. Для этого вычислим средние значения размаха и дисперсии для двух групп ситуаций, содержащих и не содержащих особые точки C_2 и C_3 . Сравнение двух средних значений размаха убеждает нас в том, что нет оснований утверждать, что между этими средними существует значимое различие.



Содержание технического углерода П367-Э, масс. ч.

Рис. 11.39. Суперпозиция геометрических образов

При интерпретации полученных результатов целесообразно учесть, что при суперпозиции происходит суммирование ошибок. Поэтому можно утверждать, что суперпозиции $((y_1, y_2) \cdot y_3)(x_1, x_2)$ и $((y_2, y_1) \cdot y_3)(x_1, x_2)$, отличающиеся порядком введения компонентов, различны по своей сложности и описываются разными графами. При изменении порядка введения компонентов размах возрастает в два раза.

Подобная картина наблюдается и для пары суперпозиций $((y_2, y_3) \cdot y_1)(x_1, x_2)$, а также $((y_3, y_2) \cdot y_1)(x_1, x_2)$, только изменение размаха здесь более резкое. Что же касается суперпозиций $((y_1, y_3) \cdot y_2)(x_1, x_2)$ и $((y_3, y_1) \cdot y_2)(x_1, x_2)$, то они описываются схожими контурными графиками (и величины размаха у них близки между собой).

Вместо величины размаха можно использовать параметр стабильности, но вычислить этот параметр аналитически затруднительно, т. к. суперпозиция описывается моделью четвертого порядка; необходимо использовать численные методы. Сравнение двух или нескольких параметров стабильности можно производить по критериям Фишера и Кохрена.

В рассматриваемом нами примере в уравнениях регрессии величины коэффициентов при квадратичных эффектах достаточно малы.

Поэтому хотя суперпозиции и описываются моделями четвертого порядка, но коэффициенты регрессии при четвертых степенях незначительны, и контурные графики сравнительно просты.

При нахождении суперпозиции (например, $((y_2, y_3) \cdot y_1)(x_1, x_2)$) выражение $y_1 = f(x_1, x_2)$ заменяется на выражение $y_1 = \phi(y_2, y_3)$. На базе уравнения регрессии $y_1 = \phi(y_2, y_3)$ можно построить две суперпозиции.

Если контурные графики для исходного отклика и какой-либо суперпозиции близки по своей топологической природе, из этого следует, что комплекс откликов y_2 и y_3 линейно связан с комплексом факторов x_1 и x_2 . Так, в рассматриваемом нами случае, как упоминалось выше, суперпозиция $((y_2, y_1) \cdot y_3)(x_1, x_2)$ топологически близка ситуации $y_3 = f(x_1, x_2)$.

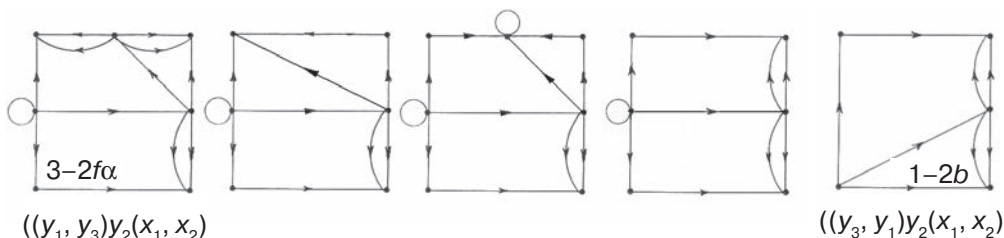
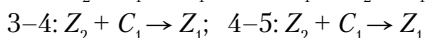
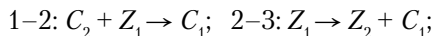


Рис. 11.40. Переход от структуры 3-2fα к 1-2b

«Реакции»:



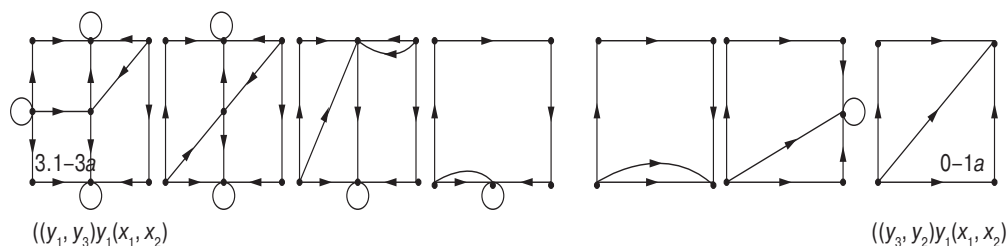


Рис. 11.41. Переход от структуры 3.1-3а к 0-1а

«Реакции»:

1–2: $Z_2 + C_1 \rightarrow Z_1$; 2–3: $C_3 + Z_2 \rightarrow C_2$; 3–4: $C_2 + Z_1 \rightarrow C_1$;

4–5: $Z_2 + C_1 \rightarrow Z_1$; 5–6: $Z_1 \rightarrow Z_2 + C_1$; 6–7: $Z_2 + C_1 \rightarrow Z_1$.

Переход от суперпозиции $((y_1, y_3) \cdot y_2)(x_1, x_2)$ к $((y_3, y_1) \cdot y_2)(x_1, x_2)$, осуществляется через три промежуточные структуры (рис. 11.40), что подтверждает высказанное ранее предположение об их топологическом «родстве».

В случае суперпозиций $((y_2, y_3) \cdot y_1)(x_1, x_2)$ и $((y_3, y_2) \cdot y_1)(x_1, x_2)$, переход требует уже формирования пяти промежуточных структур (рис. 11.41). Соответствующие «реакции» показаны на рисунках.

«Рекордсменом» является переход от суперпозиции $((y_1, y_2) \cdot y_3)(x_1, x_2)$ к суперпозиции $((y_2, y_1) \cdot y_3)(x_1, x_2)$, где формируется восемь промежуточных структур (рис. 11.42).

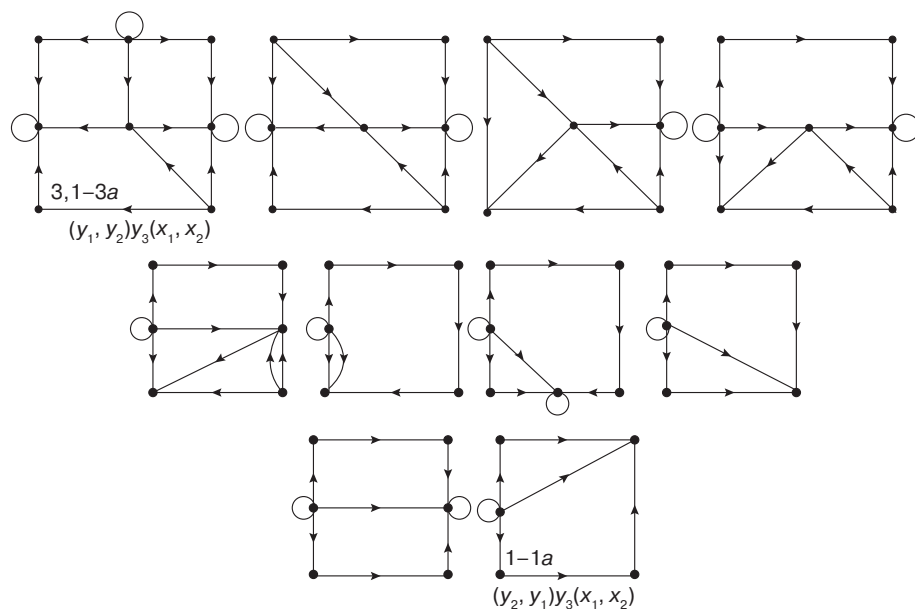


Рис. 11.42. Переход от структуры 3.1-3а к 1-1а

«Реакции»:

$$1-2: Z_2 + C_1 \rightarrow Z_1; \quad 2-3: Z_2 + C_1 \rightarrow Z_1; \quad 3-4: Z_1 \rightarrow Z_2 + C_1;$$

$$4-5: C_3 + Z_2 \rightarrow C_2; \quad 5-6: C_2 + Z_1 \rightarrow C_1; \quad 6-7: Z_1 \rightarrow Z_2 + C_1;$$

$$7-8: Z_2 + C_1 \rightarrow Z_1; \quad 8-9: Z_1 \rightarrow Z_2 + C_1; \quad 9-10: Z_2 + C_1 \rightarrow Z_1.$$

Это связано с необходимостью «замены» минимума Z_2 на левой стороне квадрата на соответствующий максимум.

Количество промежуточных структур может служить критерием подобия геометрических образов суперпозиций.

Суперпозиция, применительно к уравнениям регрессии не имеет ярко выраженного физического смысла. Однако сопоставление двух суперпозиций и их сравнение с ситуацией для отклика дает возможность выявить некоторые особенности взаимосвязей между свойствами.

Если, например, зависимость откликов от двух факторов задана тремя уравнениями регрессии второго порядка, то после проведения нормировки (деления всех компонентов уравнений на соответствующий свободный член) и осуществления суперпозиции получим:

$$((y_2, y_3) \cdot y_1)(x_1, x_2) = b_1 y_2 + b_2 y_3 + b_{12} y_2 y_3 + b_{11} y_2^2 + b_{22} y_3^2; \quad (11.8)$$

$$((y_3, y_2) \cdot y_1)(x_1, x_2) = b_1 y_3 + b_2 y_2 + b_{12} y_3 y_2 + b_{11} y_3^2 + b_{22} y_2^2. \quad (11.9)$$

Вычитая (11.9) из (11.8) и деля полученное выражение на разность откликов, получим:

$$\frac{((y_2, y_3) \cdot y_1)(x_1, x_2) - ((y_3, y_2) \cdot y_1)(x_1, x_2)}{y_2(x_1, x_2) - y_3(x_1, x_2)} = (b_1 - b_2) + (b_{11} - b_{22})(y_2(x_1, x_2) + y_3(x_1, x_2)). \quad (11.10)$$

Для этой модели можно находить показатель стабильности и его дисперсию. Выражение (11.10) может быть равно нулю лишь в случае, когда равны между собой два линейных эффекта и два квадратичных.

Уравнение регрессии, в свою очередь, может быть представлено как результат суперпозиции. Особый интерес представляют две системы суперпозиции.

В первом случае система уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned} y_1 &= x_1 + x_2; \\ y_2 &= b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2; \\ y_3 &= b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2. \end{aligned} \quad (11.11)$$

При введении компонента y_2 вместо x_1 и y_3 вместо x_2 (или наоборот) может быть получено полное уравнение регрессии.

Две суперпозиции $((y_2, y_3) \cdot y_1)(x_1, x_2)$ и $((y_3, y_2) \cdot y_1)(x_1, x_2)$ идентичны. При этом уравнения $y_2 = f(x_1, x_2)$ и $y_3 = \phi(x_1, x_2)$ могут быть составлены 64 способами, и операция

суперпозиции фактически сводится к объединению ситуаций. Следовательно, при таком построении системы уравнений объединение ситуаций представляет собой частный случай суперпозиции.

Во втором случае система уравнений может быть сформирована следующим образом:

$$\begin{aligned}
 y &= ((y_2, y_3) \cdot y_1)(x_1, x_2) = ((y_3, y_2) \cdot y_1)(x_1, x_2) = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2; \\
 b_0 &= c_0 + c_1 m_0 + c_2 n_0 + c_{12} m_0 n_0 + c_{11} m_0^2 + c_{22} n_0^2; \\
 b_1 &= c_1 m_1 + c_2 n_1 + c_{12} m_0 n_1 + c_{12} m_1 n_0 + 2c_{11} m_0 m_1 + 2c_{22} n_0 n_1; \\
 b_2 &= c_1 m_2 + c_2 n_2 + c_{12} m_0 n_2 + c_{12} m_2 n_0 + 2c_{11} m_0 m_2 + 2c_{22} n_0 n_2; \\
 b_{12} &= c_{12} m_1 n_2 + c_{12} m_2 n_1 + 2c_{11} m_1 m_2 + 2c_{22} n_1 n_2; \\
 b_{11} &= c_{12} m_1 n_1 + c_{11} m_1^2 + c_{22} n_1^2; \\
 b_{22} &= c_{12} m_2 n_2 + c_{11} m_2^2 + c_{22} n_2^2.
 \end{aligned} \tag{11.12}$$

Так для формирования уравнения $y = 12,0 + 0,33x_1 + 0,37x_2 - 0,78x_1 x_2 + 0,32x_1^2 + 1,12x_2^2$, характеризующего зависимость условной прочности при растяжении от рецептурных факторов, можно использовать несколько суперпозиций.

Приведем два примера:

$$1) y_1 = 11,91528 - 1,30290x_1 x_2 + x_1^2 + x_2^2;$$

$$y_2 = 0,27237 + 0,56568x_1;$$

$$y_3 = 0,03862 + 1,05830x_2;$$

$$2) y_1 = 11,68370 + x_1^2 + x_2^2;$$

$$y_2 = 0,29168 + 0,56568x_1 - 0,68943x_2;$$

$$y_3 = 0,48086 + 0,80292x_2.$$

В обоих случаях суперпозиция $((y_2, y_3) \cdot y_1)(x_1, x_2)$ дает уравнение регрессии. Этот «синтез» модели второго порядка показан графически на рис. 11.43. Очевидно, что перечень возможных суперпозиций для получения модели можно было бы увеличить.

Таким образом, метод суперпозиции ситуаций может рассматриваться как обобщение способов их объединения и как инструмент анализа взаимосвязей.

В последнем случае в качестве разновидности суперпозиции может рассматриваться корреляция различных признаков.

Могут быть многомерные суперпозиции. Один из таких примеров дан в уже упоминавшемся (глава 9) издании *Polymer testing* (2002 г., Б. Ченг и др.) и посвящен поиску оптимальной рецептуры резин на основе комбинации натурального каучука и винил-бутадиенового каучука *VBR* (80% винила). Варьируется пять факторов (масс. ч.): содержание каучука *VBR* ($x_1 \in [15; 35]$), содержание серы ($x_2 \in [1,4; 2,3]$), содержание N-циклогексил-2-бензтиазолилсульфенамида ($x_3 \in [0,4; 1,3]$), содержание масла ($x_4 \in [6; 10]$), содержание технического углерода *ISAF* ($x_5 \in [0; 50]$) в смеси с *HAF*.

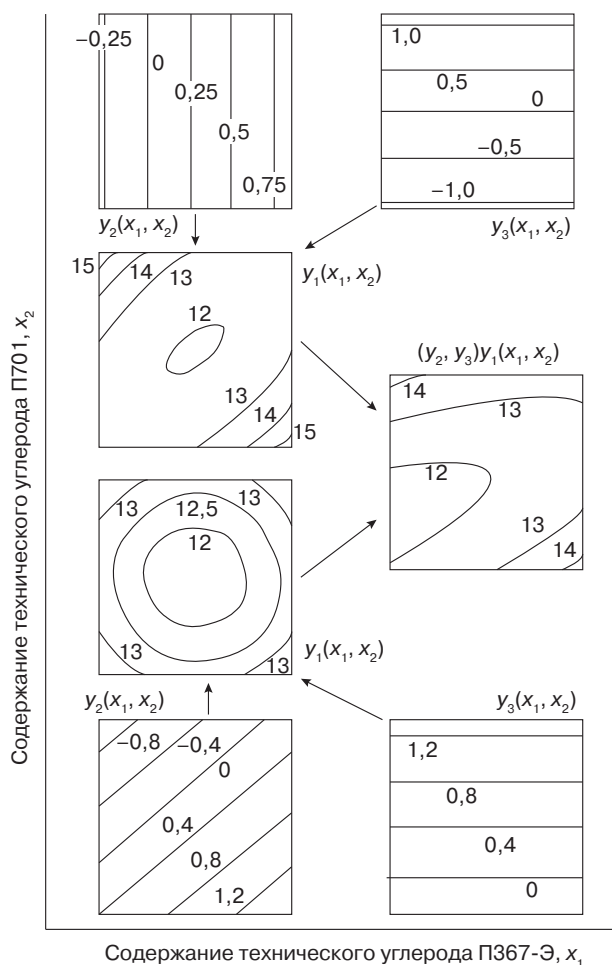


Рис. 11.43. Формирование контурного графика путем суперпозиции

Еще раз приведем уравнения для одного из откликов — y (условного напряжения при удлинении 300%).

$$y = -0,4932 - 0,0152z_1 + 1,0511z_2 + 0,3020z_3 - 0,3192z_4;$$

$$z_1 = -12,4303 - 0,3746x_1 + 23,5411x_2 + 0,5551x_1x_2 - 0,0117x_1^2 - 8,5891x_2^2;$$

$$z_2 = 6,4937 - 14,1970x_2 + 24,8549x_3 - 12,7956x_2x_3 + 8,0024x_2^2 + 1,6267x_3^2;$$

$$z_3 = -38,7529 + 33,4989x_3 + 3,8941x_4 - 0,9750x_3x_4 - 5,41214x_3^2 - 0,1685x_4^2;$$

$$z_4 = 13,1020 - 0,6532x_3 - 0,2625x_5 + 0,1470x_3x_5 + 0,5038x_3^2 + 0,0010x_5^2.$$

По четырем уравнениям с использованием программы *MatLab* построены контурные графики, характеризующие зависимости переменных z_1 , z_2 , z_3 и z_4 от соответствующих двух факторов в форме полиномов второго порядка (рис. 11.44).

Далее в форме пространственного изображения (рис. 45) построена зависимость условного напряжения при удлинении 300% от содержания серы и ускорителя при фиксированных дозировках остальных компонентов ($x_1 = 25$; $x_4 = 8$; $x_5 = 25$).

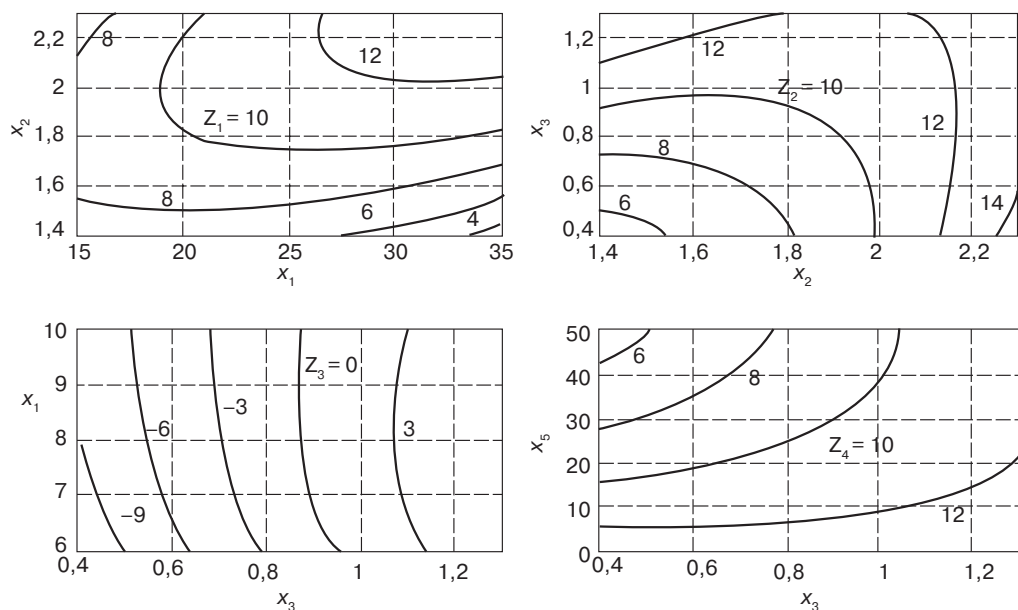


Рис. 11.44. Контурные графики для дополнительных переменных

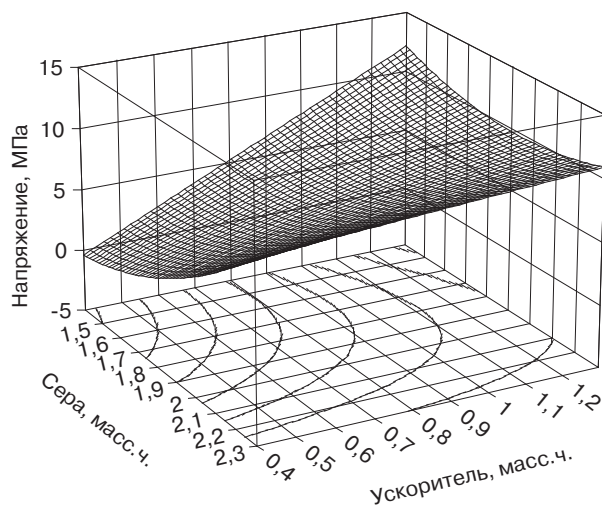


Рис. 11.45. Пространственное изображение суперпозиции

Отрицательные значения отклика при минимальных дозировках компонентов вулканизирующей системы не должны вызывать удивления: это находится в пределах погрешностей. Впрочем, в цитируемой работе графический материал не представлен.

Многомерные суперпозиции существенно расширяют возможности получения разнообразных топологических структур.

Литература

1. Математическая энциклопедия. Под ред. И.М. Виноградова в 5 т. — М.: Советская энциклопедия. 1984. — т. 4, с. 113-125.
2. Пуанкаре А. О кривых, определяемых дифференциальными уравнениями / Пер. с франц. — М.-Л.: Гостехиздат. 1947. — 392 с.
3. Жаров В.Т., Серафимов Л.А. Физико-химические основы дистилляции и ректификации. — Л.: Химия. 1975. — 240 с.
4. Стинрод Н., Чинн У. Первые понятия топологии / Пер. с англ. М.: Наука. 1967. — 224 с.
5. Спенсер Э. Алгебраическая топология / Пер. с англ. — М.: Мир. 1971. — 579 с.
6. Келли Дж. Общая топология / Пер. с англ. М.: Наука. 1981. — 432 с.
7. Курант Р., Роббинс Г. Что такое математика? / Пер. с англ. — М.: Просвещение. 1967. — 558 с. .
8. Фор Р., Хофман А., Денни-Папен М. Современная математика. Пер. с франц. — М.: Мир. 1966. — 271 с.
9. Оре О. Графы и их применение / Пер. с англ. — М.: Мир. 1965. — 174 с.
10. Уилсон Р. Введение в теорию графов / Пер. с англ. — М.: Мир. 1977. — 208 с.
11. Оре О. Теория графов / Пер. с англ. — М.: Наука. 1980. — 336 с.
12. Применение теории графов в химии. Под ред. Н.С. Зефинова, С.И. Кучанова. — Новосибирск: Наука. 1988. — 306 с.
13. Юдин Д.Б., Юдин А.Д. Число и мысль. Вып. 8 (Математики измеряют сложность). — М.: Знание. 1985. — 192 с.
14. Химические приложения топологии и теории графов. Под ред. Р. Кинга / Пер. с англ. — М.: Мир. 1987. — 560 с.
15. Тернер Д. Вероятность, статистика и исследование операций / Пер. с англ. — М.: Статистика. 1976. — 432 с.
16. Искусственный интеллект: применение в химии. Под ред. Т. Пирса и Б. Хони / Пер. с англ. — М. Мир. 1988. — 428 с.
17. Сигорский В.П. Математический аппарат инженера. — Киев: Техніка. 1977. — 766 с.
18. Хамермеш М. Теория групп и ее применение к физическим проблемам / Пер. с англ. — М.: Мир. 1966. — 588 с.
19. Калужнин Л.А., Суцанский В.И. Преобразования и перестановки. — М.: Наука. 1985. — 160 с.

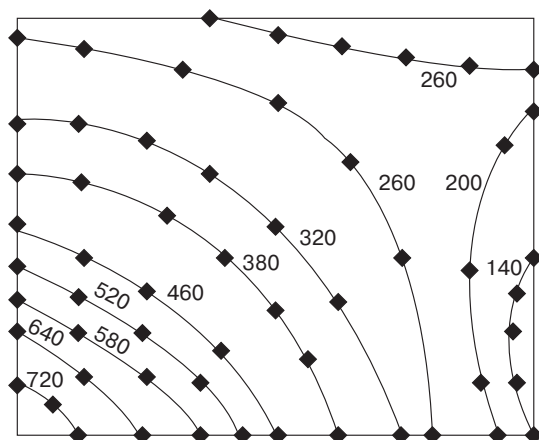
Заключение

Ознакомившись со ссылками на литературные источники, можно видеть, что нет новых публикаций.

Откроем журнал «Каучук и резина». Возьмем последние 10 лет. За это время в журнале опубликовано 11 статей, имеющих хотя бы какое-то отношение к проблеме обработки экспериментальных данных.

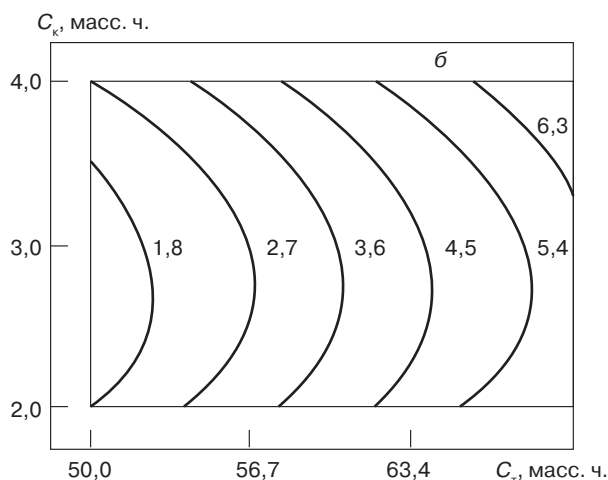
Четыре из 11 статей посвящены проблеме описания почти стационарной области.

В статье 2002 г. получены зависимости ряда характеристик от четырех факторов. Приводится три контурных графика, которые характеризуют влияние двух факторов (x_3 и x_4 (из этих четырех) на эти самые характеристики. Каковы при этом значения двух других фиксированных на определенном уровне факторов, не ясно. И какие это факторы можно только догадываться.



Уравнения регрессии содержат небольшое количество значимых коэффициентов. Незначимые, видимо, исключены, но ведь это можно делать не всегда: только в случае ортогональных планов это можно делать без оговорок. Области изменения факторов не оговорены. Есть упоминание о том, что уравнения адекватны, но как это проверялось, остается догадываться.

Приведем один из контурных графиков. Зачем на нем обозначены точки? Вряд ли это обозначение координат экспериментальных точек: слишком их много. Цель неизвестна.

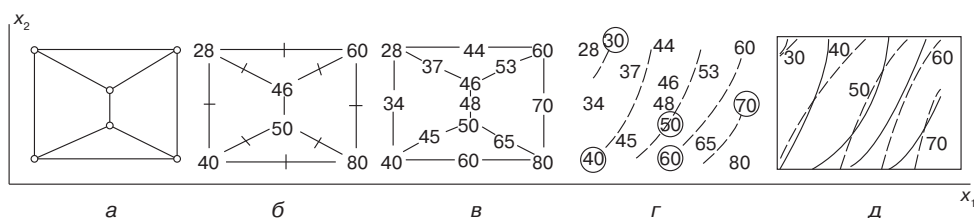


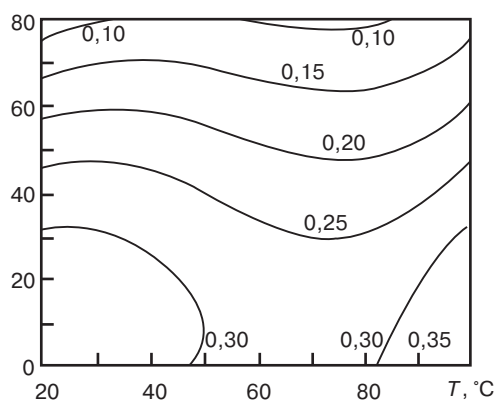
В статье 2003 г. рассмотрено применение схемы Клеймана для описания зависимости отклика от двух факторов. В качестве аргументации применения схемы Клеймана в статье указывается ее распространенное применение в резиновой промышленности при решении задач оптимизации. При этом дается ссылка на публикацию 1980 г. Но ведь прошло уже более 20 лет! К тому же ссылка указана ошибочно.

В рассматриваемый период уже можно было избежать рутинной операции линейной интерполяции: по шести точкам можно построить модель и получить уравнение регрессии. Тем более, что характер полученных изолиний, как это видно из рисунка, свидетельствует о возможности применения уравнения регрессии второго порядка.

Почему именно так проставлены значения фактора по осям? 56,7, 63,4? Почему изолинии нарисованы они с шагом 0,9? Нет ответа.

Статья 2006 г. содержит контурные графики, полученные по ротатабельному плану второго порядка. Опять, как и в предыдущих случаях, нет обоснования выбора плана, нет каких-либо указаний о проверке качества моделей, без оговорок в двух полученных уравнениях отсутствуют незначимые коэффициенты (заметим, что ротатабельный план точно не является ортогональным).





Последняя статья из этой серии размером в четыре публикации датируется 2009 годом. Полученные в работе контурные графики содержат весьма витиеватые линии равного уровня, что видно из представленного рисунка.

Эти линии построены по уравнениям, во всяком случае, не второго порядка. Можно вполне обоснованно полагать, что контурные графики, приведенные в этой статье, получены с использованием современных программных продуктов. И эти современные продукты, безусловно, позволяют получить исчерпывающую информацию статистического характера касательно критериев качества моделей. Но в публикации этой информации нет.

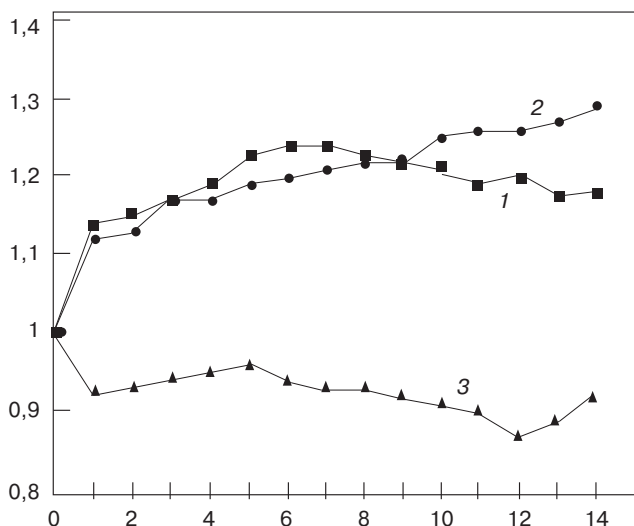
В работе 2003 г. построены уравнения, представляющие собой многочлены высоких степеней (от 8 до 15). Почему необходимы модели столь высоких степеней, в работе не оговаривается. Требования относительно ошибки аппроксимации также не указаны, но использование уравнений, параметры которых содержат до 10 значащих цифр, должно как-то аргументироваться. В качестве критерия адекватности моделей использован коэффициент корреляции, видимо, между экспериментальными и рассчитанными значениями отклика, но об этом надо догадываться.

Статья 2004 г. посвящена аппроксимации кривых напряжение–деформация. Здесь все корректно представлено с точки зрения математической статистики. Даны значения критерия — дисперсии адекватности при использовании для аппроксимации различного количества параметров.

Оригинальная работа 2011 г. той же научной школы посвящена построению планов линейных комбинаций факторов при оптимизации состава многокомпонентных смесей. Статья представляет собой, по существу, формирование стратегических принципов решения задач оптимизации.

Статья 2008 г. и три статьи 2011 г. другой научной школы посвящены решению задач управления, содержат целый ряд полезных рекомендаций, но непосредственно отношения к теории эксперимента не имеют, если не считать использованных в работе методов дисперсионного, корреляционного и спектрально-частотного анализа.

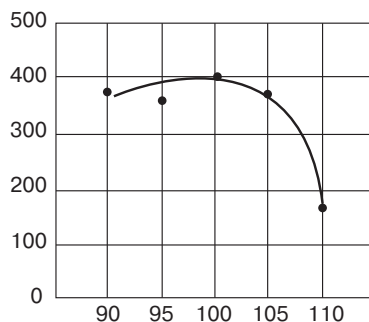
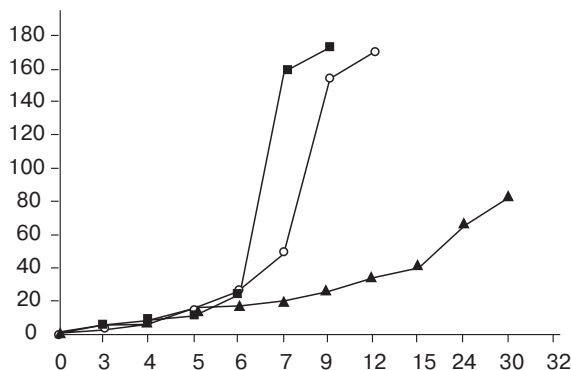
Таким образом, шесть работ из двух источников, вне сомнений, написано грамотно с точки зрения статистики, пять статей включают в себя определенные попытки использования статистических методов.



А в остальном превалирует построение графиков строго по точкам. Вот типичный пример. Это называется полигон — семейство ломаных линий. Но рядом с этим авторы дают график с экстремумом (он здесь не приведен), где есть и ломаные, и кривые линии, соединяющие точки. А это уже не очень корректно.

Лучше ли обстоят дела за рубежом? Едва ли.

В книге «Технология резины: рецептуростроение и испытания» под редакцией Дж. С. Дика (перевод 2010 года) есть глава под названием «Технический подход к планированию эксперимента и разработке рецептуры». Список литературы включает, между прочим, шесть наименований: по одному 40-х, 50-х и 60-х, два — 70-х и одно 1989 года.



Но не это главное. Все написано так, как будто ЭВМ вообще нет. В приложении приводятся планы (это еще терпимо) и длинные формулы для вычисления коэффициентов, которые совершенно не нужны, потому что, как уже было показано, мы обозначаем матрицу плана буквой z , столбец результатов буквой y , столбец коэффициентов буквой b . И без труда (программных средств тьма) решаем уравнение

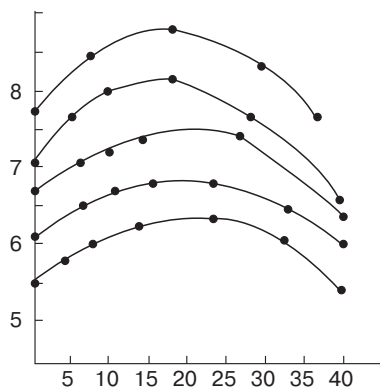
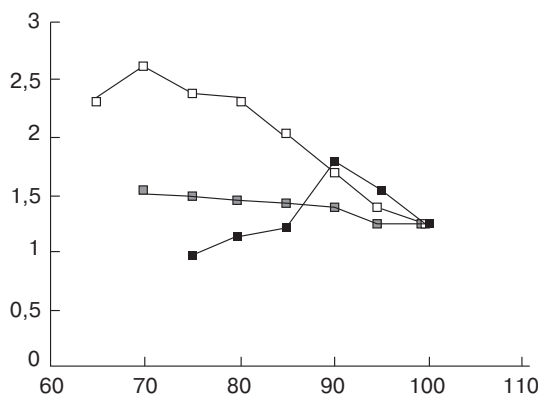
$y = z \cdot b$ относительно b .

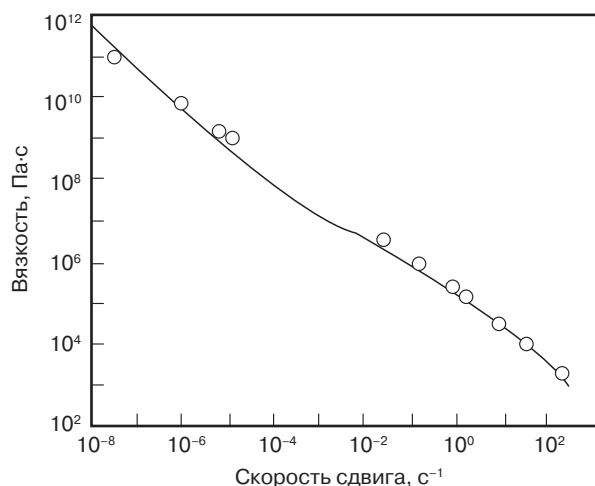
Но самое забавное, что в тексте книги (617 с.) нет ни одного графика, претерпевшего статистический анализ. Два примера. На левом ломаные, которые мы уже видели, а на правом почему-то абсолютно проигнорирована точка при абсциссе 95.

В книге «Каучук и резина, наука и технология» под редакцией Дж. Марка и др. (2011 г.) нет главы про планирование эксперимента, но и самого планирования тоже нет.

Опять зигзаги многочисленные, опять кривые, строго по точкам проведенные...

А вот правый график нуждается в серьезном обсуждении. Значения по оси ординат отличаются друг от друга на восемь порядков. Что это значит? Возьмем, в качестве примера, первую точку сверху ($\sim 10^{11}$) и четвертую сверху ($\sim 10^9$). Предположим (это сомнительно), что ошибка 1%. Этот 1% от 10^{11} составляет 10^9 , а тот же 1% от 10^9 будет 10^7 . Если ошибки 10^9 и 10^7 , то дисперсии 10^{18} и 10^{14} соответственно. Вряд ли эти дисперсии однородны. И следовательно, линию из первой точки в четвертую проводить нельзя. Должна быть кусочная аппроксимация, в пределах однородности дисперсии. Впрочем, есть специальные приемы построения линий в условиях отсутствия однородности дисперсии, что, видимо, неизвестно авторам книги.





И надо строго доказать, статистически обосновать, что здесь две прямые, а между ними кривая, но в тексте этого нет.

Возникает вопрос: «Но раз методы статистической обработки мало применяются и у нас, и за рубежом, может быть, они и не нужны? Ведь работают же научно-исследовательские центры, заводы, шины бегают, ремни ...».

Скажем так. Если работать, не применяя статистических методов, значит обрекать себя на необходимость постоянно лукавить. Любой полученный в результате экспериментальных изысканий вывод, не подкрепленный статистическими характеристиками, можно подвергнуть сомнению.

Приложения

1. Статистические таблицы

Таблица I. Квантили распределения Стьюдента t для уровня значимости 5%

v	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
t	12,706	4,303	3,183	2,777	2,571	2,447	2,365	2,306	2,262	2,228
v	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
t	2,201	2,179	2,160	2,145	2,132	2,120	2,110	2,101	2,093	2,086
v	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
t	2,080	2,074	2,069	2,064	2,060	2,056	2,052	2,048	2,045	2,042
v	40	60	120	200	500		∞			
t	2,021	2,000	1,980	1,97	1,96		1,95996			

Таблица II. Значения коэффициента d_m для оценки стандартного отклонения по размаху варьирования

m	d_m	m	d_m	m	d_m	m	d_m	m	d_m
2	1,128	6	2,534	10	3,078	14	3,407	18	3,640
3	1,693	7	2,704	11	3,173	15	3,472	19	3,689
4	2,059	8	2,847	12	3,258	16	3,532	20	3,735
5	2,326	9	2,970	13	3,336	17	3,588		

Таблица III. Значения коэффициента k_R для расчета границ доверительных интервалов средних по размаху варьирования.

m	$1-\alpha = 95\%$	$1-\alpha = 99\%$	m	$1-\alpha = 95\%$	$1-\alpha = 99\%$	m	$1-\alpha = 95\%$	$1-\alpha = 99\%$
2	8,00	49,03	9	0,25	0,37	16	0,15	0,20
3	1,48	3,39	10	0,23	0,33	17	0,14	0,19
4	0,77	1,41	11	0,21	0,30	18	0,14	0,19
5	0,53	0,88	12	0,19	0,28	19	0,13	0,18
6	0,41	0,64	13	0,18	0,25	20	0,12	0,17
7	0,34	0,52	14	0,17	0,23			
8	0,29	0,43	15	0,16	0,22			

Таблица IV. Номера результатов опытов, которые могут быть приняты в качестве пограничных значений доверительного интервала медианы при условии, что данные расположены и пронумерованы в порядке возрастания значений

m	$1 - \alpha = 95\%$		$1 - \alpha = 99\%$		m	$1 - \alpha = 95\%$		$1 - \alpha = 99\%$	
	m_1	m_2	m_1	m_2		m_1	m_2	m_1	m_2
6	1	6	—	—	54	20	35	18	37
7	1	7	—	—	55	20	36	18	38
8	1	8	1	8	56	21	36	18	39
9	2	8	1	9	57	21	37	19	39
10	2	9	1	10	58	22	37	19	49
11	2	10	1	11	59	22	38	20	40
12	3	10	2	11	60	22	39	20	41
13	3	11	2	12	61	23	39	21	41
14	3	12	2	13	62	23	40	21	42
15	4	12	3	13	63	24	40	21	43
16	4	13	3	14	64	24	41	22	43
17	5	13	3	15	65	25	41	22	44
18	5	14	4	15	66	25	42	23	44
19	5	15	4	16	67	26	42	23	45
20	6	15	4	17	68	26	43	23	46
21	6	16	5	17	69	26	44	24	46

Таблица IV, окончание

m	$1 - \alpha = 95\%$		$1 - \alpha = 99\%$		m	$1 - \alpha = 95\%$		$1 - \alpha = 99\%$	
	m_1	m_2	m_1	m_2		m_1	m_2	m_1	m_2
22	6	17	5	18	70	27	44	24	47
23	7	17	5	19	71	27	45	25	47
24	7	18	6	19	72	28	45	25	48
25	8	18	6	20	73	28	46	26	48
26	8	19	7	20	74	29	46	26	49
27	8	20	7	21	75	29	47	26	50
28	9	20	7	22	76	29	48	27	50
29	9	21	8	22	77	30	48	27	51
30	10	21	8	23	78	30	49	28	51
31	10	22	8	24	79	31	49	28	52
32	10	23	9	24	80	31	50	29	52
33	11	23	9	25	81	32	50	29	53
34	11	24	10	25	82	32	51	29	54
35	12	24	10	26	83	33	51	30	54
36	12	25	10	27	84	33	52	30	55
37	13	25	11	27	85	33	53	31	55
38	13	26	11	28	86	34	53	31	56
39	13	27	12	28	87	34	54	32	56
40	14	27	12	29	88	35	54	32	57
41	14	28	12	30	89	35	55	32	58
42	15	28	13	30	90	36	55	33	58
43	15	29	13	31	91	36	56	33	59
44	16	29	14	31	92	37	56	34	59
45	16	30	14	32	93	37	57	34	60
46	16	31	14	33	94	38	57	35	60
47	17	31	15	33	95	38	58	35	61
48	17	32	15	34	96	38	59	35	62
49	18	32	16	34	97	39	59	36	62
50	18	33	16	35	98	39	60	36	63
51	19	33	16	36	99	40	60	37	63
52	19	34	17	36	100	40	61	37	64
53	19	35	17	37					

Таблица V. Квантили распределения Пирсона χ^2 для уровня значимости 95% и 5%

ν	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\alpha = 5\%$	3,841	5,991	7,815	9,488	11,070	12,592	14,067	15,507	16,919
$\alpha = 95\%$	0,0039	0,103	0,352	0,711	1,145	1,635	2,167	2,733	3,325
ν	10	11	12	13	14	15	16	17	18
$\alpha=5\%$	18,307	19,675	21,026	22,362	23,685	24,996	26,296	27,587	28,869
$\alpha = 95\%$	3,940	4,575	5,226	5,892	6,571	7,261	7,962	8,672	9,390
ν	19	20	21	22	23	24	25	26	27
$\alpha = 5\%$	30,144	31,410	32,671	33,924	35,172	36,415	37,652	38,885	40,113
$\alpha = 95\%$	10,117	10,851	11,591	12,338	13,091	13,848	14,611	15,379	16,151
ν	28	29	30	40	50	60	70	80	100
$\alpha = 5\%$	41,337	42,557	43,773	55,76	67,50	79,08	90,53	101,9	124,3
$\alpha = 95\%$	16,928	17,708	18,493	26,51	34,76	43,19	51,74	60,39	77,93

Таблица VI. Значения критерия Романовского t' для уровня значимости 5%

m	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
t'	15,561	4,969	3,558	3,041	2,777	2,616	2,508	2,431	2,372	2,327
m	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
t'	2,291	2,261	2,236	2,215	2,197	2,181	2,168	2,156	2,145	2,135
m	22	23	24	25	26	27	28	29	30	40
t'	2,127	2,119	2,112	2,105	2,099	2,094	2,088	2,083	2,079	2,048
m	60	120	∞							
t'	2,018	1,988	1,960							

Таблица VII. Квантили распределения величины τ' для уровня значимости 5%

$m-2$	1	2	3	4	5	6	7	8	10	15	20
τ'	1,41	1,69	1,87	2,00	2,09	2,17	2,24	2,29	2,39	2,55	2,66

Таблица VIII. Квантили распределения величины R для уровня значимости 5%

$m - 2$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
R	1,412	1,689	1,869	1,996	2,093	2,172	2,237	2,294	2,343	2,387
$m - 2$	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
R	2,426	2,461	2,493	2,523	2,551	2,577	2,600	2,623	2,644	2,664
$m - 2$	21	22	23	30	40	50				
R	2,683	2,701	2,717	2,82	2,92	3,00				

Таблица IX. Значения критерия Q для уровня значимости 5%

v	3	4	5	6	7	8	9
Q	0,941	0,765	0,642	0,560	0,507	0,468	0,437
v	10	11	12	15	20	24	30
Q	0,412	0,392	0,376	0,338	0,300	0,281	0,260

Таблица X. Критические границы (нижняя — a , верхняя — b) отношения размаха к средневзвешенному отклонению. Вероятность ошибки 10%. Объем выборки m

m	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
a	1,782	2,04	2,22	2,37	2,49	2,59	2,68	2,76	2,84	2,90
b	1,997	2,409	2,712	2,949	3,143	3,308	3,449	3,57	3,68	3,78
m	13	14	15	16	17	18	19	20	25	30
a	2,96	3,02	3,07	3,12	3,17	3,21	3,25	3,29	3,45	3,59
b	3,87	3,95	4,02	4,09	4,15	4,21	4,27	4,32	3,53	4,70
m	35	40	45	50	55	60	65	70	75	80
a	3,70	3,79	3,88	3,95	4,02	4,08	4,14	4,19	4,24	4,28
b	4,84	4,96	5,06	5,14	5,22	5,29	5,35	5,41	5,46	5,51
m	85	90	95	100	150					
a	4,33	4,36	4,40	4,44	4,72					
b	5,56	5,60	5,64	5,69	5,96					

Таблица XI. Коэффициенты a_{m-i+1}

i при $n = 3-9$	Коэффициенты a_{m-i+1} при различных значениях m						
	3	4	5	6	7	8	9
1	0,7071	0,6872	0,6646	0,6431	0,6233	0,6052	0,5888
2	—	0,1677	0,2413	0,2806	0,3031	0,3164	0,3244
3	—	—	—	0,0875	0,1401	0,1743	0,1976
4	—	—	—	—	—	0,0561	0,0947
i при $n = 10-16$	Коэффициенты a_{m-i+1} при различных значениях m						
	10	11	12	13	14	15	16
1	0,5739	0,5601	0,5475	0,5359	0,5251	0,5150	0,5056
2	0,3291	0,3315	0,3325	0,3325	0,3318	0,3306	0,3290
3	0,2141	0,2260	0,2347	0,2412	0,2460	0,2495	0,2531
4	0,1224	0,1429	0,1586	0,1707	0,1802	0,1878	0,1939
5	0,0399	0,0695	0,0922	0,1099	0,1240	0,1353	0,1447
6	—	—	0,0303	0,0539	0,0727	0,0880	0,1005
7	—	—	—	—	0,0240	0,0433	0,0593
8	—	—	—	—	—	—	0,0196
i при $n=17-23$	Коэффициенты a_{m-i+1} при различных значениях m						
	17	18	19	20	21	22	23
1	0,4968	0,4886	0,4808	0,4734	0,4643	0,4590	0,4543
2	0,3273	0,3253	0,3232	0,3211	0,3185	0,3156	0,3126
3	0,2540	0,2553	0,2561	0,2565	0,2578	0,2571	0,2563
4	0,1988	0,2027	0,2059	0,2085	0,2119	0,2131	0,2139
5	0,1524	0,1587	0,1641	0,1686	0,1736	0,1764	0,1787
6	0,1109	0,1197	0,1271	0,1334	0,1399	0,1443	0,1480
7	0,0725	0,0837	0,0932	0,1013	0,1092	0,1150	0,1201
8	0,0359	0,0496	0,0612	0,0711	0,0804	0,0878	0,0941
9	—	0,0163	0,303	0,0422	0,0530	0,0618	0,696
10	—	—	—	0,0140	0,0263	0,0368	0,0459
11	—	—	—	—	—	0,0122	0,0228

Таблица XI, окончание

i при $n = 24-30$	Коэффициенты a_{m-i+1} при различных значениях m						
	24	25	26	27	28	29	30
1	0,4493	0,4450	0,4407	0,4366	0,4328	0,4291	0,4254
2	0,3098	0,3069	0,3043	0,3018	0,2992	0,2968	0,2944
3	0,2554	0,2543	0,2533	0,2522	0,2510	0,2499	0,2487
4	0,2145	0,2148	0,2151	0,2152	0,2151	0,2150	0,2148
5	0,1807	0,1822	0,1833	0,1848	0,1857	0,1864	0,1870
6	0,1512	0,1539	0,1563	0,1584	0,1601	0,1616	0,1630
7	0,1245	0,1283	0,1316	0,1346	0,1372	0,1395	0,1415
8	0,0997	0,1046	0,1089	0,1128	0,1162	0,1192	0,1219
9	0,0764	0,0823	0,0876	0,0923	0,0965	0,1002	0,1036
10	0,0539	0,0610	0,0672	0,0728	0,0778	0,0822	0,0862
11	0,0323	0,0403	0,0476	0,0540	0,0598	0,0650	0,0697
12	0,0107	0,0200	0,0284	0,0358	0,0424	0,0483	0,0537
13	—	—	0,0094	0,0178	0,0253	0,0360	0,0381
14	—	—	—	—	0,0084	0,0159	0,0227
15	—	—	—	—	—	—	0,0076

Таблица XII. Квантили распределения Фишера F для уровня значимости 5%. n_1 — число степеней свободы для большей дисперсии; v_2 — число степеней свободы для меньшей дисперсии

v_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
v_2										
2	18,51	19,00	19,16	19,25	19,30	19,33	19,36	19,37	19,38	19,39
3	10,13	9,55	9,28	9,12	9,01	8,94	8,88	8,84	8,81	8,78
4	7,71	6,94	6,59	6,39	6,26	6,16	6,09	6,04	6,00	5,96
5	6,61	5,79	5,41	5,19	5,05	4,95	4,88	4,82	4,78	4,74
6	5,99	5,14	4,76	4,53	4,39	4,28	4,21	4,15	4,10	4,06
7	5,59	4,74	4,35	4,12	3,97	3,87	3,79	3,73	3,68	3,63
8	5,32	4,46	4,07	3,84	3,69	3,58	3,50	3,44	3,39	3,34

Таблица XII, продолжение

9	5,12	4,26	3,86	3,63	3,48	3,37	3,29	3,23	3,18	3,13
10	4,96	4,10	3,71	3,48	3,33	3,22	3,14	3,07	3,02	2,97
11	4,84	3,98	3,59	3,36	3,20	3,09	3,01	2,95	2,90	2,86
12	4,75	3,88	3,49	3,26	3,11	3,00	2,92	2,85	2,80	2,76
13	4,67	3,80	3,41	3,18	3,02	2,92	2,84	2,77	2,72	2,67
14	4,60	3,74	3,34	3,11	2,96	2,85	2,77	2,70	2,65	2,60
15	4,54	3,68	3,29	3,06	2,90	2,79	2,70	2,64	2,59	2,55
16	4,49	3,63	3,24	3,01	2,85	2,74	2,66	2,59	2,54	2,49
17	4,45	3,59	3,20	2,96	2,81	2,70	2,62	2,55	2,50	2,45
18	4,41	3,55	3,16	2,93	2,77	2,66	2,58	2,51	2,46	2,41
19	4,38	3,52	3,13	2,90	2,74	2,63	2,55	2,48	2,43	2,38
20	4,35	3,49	3,10	2,87	2,71	2,60	2,52	2,45	2,40	2,35
21	4,32	3,47	3,07	2,84	2,68	2,57	2,49	2,42	2,37	2,32
22	4,30	3,44	3,05	2,82	2,66	2,55	2,47	2,40	2,35	2,30
23	4,28	3,42	3,03	2,80	2,64	2,53	2,45	2,38	2,32	2,28
24	4,26	3,40	3,01	2,78	2,62	2,51	2,43	2,36	2,30	2,26
25	4,24	3,38	2,99	2,76	2,60	2,49	2,41	2,34	2,28	2,24
26	4,22	3,37	2,98	2,74	2,59	2,47	2,39	2,32	2,27	2,22
27	4,21	3,35	2,96	2,73	2,57	2,46	2,37	2,30	2,25	2,20
28	4,20	3,34	2,95	2,71	2,56	2,44	2,36	2,29	2,24	2,19
29	4,18	3,33	2,93	2,70	2,54	2,43	2,35	2,28	2,22	2,18
30	4,17	3,32	2,92	2,69	2,53	2,42	2,34	2,27	2,21	2,16
32	4,15	3,30	2,90	2,67	2,51	2,40	2,32	2,25	2,19	2,14
34	4,13	3,28	2,88	2,65	2,49	2,38	2,30	2,23	2,17	2,12
36	4,11	3,26	2,86	2,63	2,48	2,36	2,28	2,21	2,15	2,10
38	4,10	3,25	2,85	2,62	2,46	2,35	2,26	2,19	2,14	2,09
40	4,08	3,23	2,84	2,61	2,45	2,34	2,25	2,18	2,12	2,07
42	4,07	3,22	2,83	2,59	2,44	2,32	2,24	2,17	2,11	2,06
44	4,06	3,21	2,82	2,58	2,43	2,31	2,23	2,16	2,10	2,05
46	4,05	3,20	2,81	2,57	2,42	2,30	2,22	2,14	2,09	2,04
48	4,04	3,19	2,80	2,56	2,41	2,30	2,21	2,14	2,08	2,03

Таблица XII, продолжение

50	4,03	3,18	2,79	2,56	2,40	2,29	2,20	2,13	2,07	2,02
55	4,02	3,17	2,78	2,54	2,38	2,27	2,18	2,11	2,05	2,00
60	4,00	3,15	2,76	2,52	2,37	2,25	2,17	2,10	2,04	1,99
65	3,99	3,14	2,75	2,51	2,36	2,24	2,15	2,08	2,02	1,98
70	3,98	3,13	2,74	2,50	2,35	2,23	2,14	2,07	2,01	1,97
80	3,96	3,11	2,72	2,48	2,33	2,21	2,12	2,05	1,99	1,95
100	3,94	3,09	2,70	2,46	2,30	2,19	2,10	2,03	1,97	1,92
125	3,92	3,07	2,68	2,44	2,29	2,17	2,08	2,01	1,95	1,90
150	3,91	3,06	2,67	2,43	2,27	2,16	2,07	2,00	1,94	1,89
200	3,89	3,04	2,65	2,41	2,26	2,14	2,05	1,98	1,92	1,87
400	3,86	3,02	2,62	2,39	2,23	2,12	2,03	1,96	1,90	1,85
1000	3,85	3,00	2,61	2,38	2,22	2,10	2,02	1,95	1,89	1,84
∞	3,84	2,99	2,60	2,37	2,21	2,09	2,01	1,94	1,88	1,83

v_1	12	14	16	20	24	30	40	50	100	∞
v_2										
2	19,41	19,42	19,43	19,44	19,45	19,46	19,47	19,47	19,49	19,50
3	8,74	8,71	8,69	8,66	8,64	8,62	8,60	8,58	8,56	8,53
4	5,91	5,87	5,84	5,80	5,77	5,74	5,71	5,70	5,66	5,63
5	4,68	4,64	4,60	4,56	4,53	4,50	4,46	4,44	4,40	4,36
6	4,00	3,96	3,92	3,87	3,84	3,81	3,77	3,75	3,71	3,67
7	3,57	3,52	3,49	3,44	3,41	3,38	3,34	3,32	3,28	3,23
8	3,28	3,23	3,20	3,15	3,12	3,08	3,05	3,03	2,98	2,93
9	3,07	3,02	2,98	2,93	2,90	2,86	2,82	2,80	2,76	2,71
10	2,91	2,86	2,82	2,77	2,74	2,70	2,67	2,64	2,59	2,54
11	2,79	2,74	2,70	2,65	2,61	2,57	2,53	2,50	2,45	2,40
12	2,69	2,64	2,60	2,54	2,50	2,46	2,42	2,40	2,35	2,30
13	2,60	2,55	2,51	2,46	2,42	2,38	2,34	2,32	2,26	2,21
14	2,53	2,48	2,44	2,39	2,35	2,31	2,27	2,24	2,19	2,13

Таблица XII, продолжение

15	2,48	2,43	2,39	2,33	2,29	2,25	2,21	2,18	2,12	2,07
16	2,42	2,37	2,33	2,28	2,24	2,20	2,16	2,13	2,07	2,01
17	2,38	2,33	2,29	2,23	2,19	2,15	2,11	2,08	2,02	1,96
18	2,34	2,29	2,25	2,19	2,15	2,11	2,07	2,04	1,98	1,92
19	2,31	2,26	2,21	2,15	2,11	2,07	2,02	2,00	1,94	1,88
20	2,28	2,23	2,18	2,12	2,08	2,04	1,99	1,96	1,90	1,84
21	2,25	2,20	2,15	2,09	2,05	2,00	1,96	1,93	1,87	1,81
22	2,23	2,18	2,13	2,07	2,03	1,98	1,93	1,91	1,84	1,78
23	2,20	2,14	2,10	2,04	2,00	1,96	1,91	1,88	1,82	1,76
24	2,18	2,13	2,09	2,02	1,98	1,94	1,89	1,86	1,80	1,73
25	2,16	2,11	2,06	2,00	1,96	1,92	1,87	1,84	1,77	1,71
26	2,15	2,10	2,05	1,99	1,95	1,90	1,85	1,82	1,76	1,69
27	2,13	2,08	2,03	1,97	1,93	1,88	1,84	1,80	1,74	1,67
28	2,12	2,06	2,02	1,96	1,91	1,87	1,81	1,78	1,72	1,65
29	2,10	2,05	2,00	1,94	1,90	1,85	1,80	1,77	1,71	1,64
30	2,09	2,04	1,99	1,93	1,89	1,84	1,79	1,76	1,69	1,62
32	2,07	2,02	1,97	1,91	1,86	1,82	1,76	1,74	1,67	1,59
34	2,05	2,00	1,95	1,89	1,84	1,80	1,74	1,71	1,64	1,57
36	2,03	1,98	1,93	1,87	1,82	1,78	1,72	1,69	1,62	1,55
38	2,02	1,96	1,92	1,85	1,80	1,76	1,71	1,67	1,60	1,53
40	2,00	1,95	1,90	1,84	1,79	1,74	1,69	1,66	1,59	1,51
42	1,99	1,94	1,89	1,82	1,78	1,73	1,68	1,64	1,57	1,49
44	1,98	1,92	1,88	1,81	1,76	1,72	1,66	1,63	1,56	1,48
46	1,97	1,91	1,87	1,80	1,75	1,71	1,65	1,62	1,54	1,46
48	1,96	1,90	1,86	1,79	1,74	1,70	1,64	1,61	1,53	1,45
50	1,95	1,90	1,85	1,78	1,74	1,69	1,63	1,60	1,52	1,44
55	1,93	1,88	1,83	1,76	1,72	1,67	1,61	1,58	1,50	1,41
60	1,92	1,86	1,81	1,75	1,70	1,65	1,59	1,56	1,48	1,39

Таблица XII, окончание

65	1,90	1,85	1,80	1,73	1,68	1,63	1,57	1,54	1,46	1,37
70	1,89	1,84	1,79	1,72	1,67	1,62	1,56	1,53	1,45	1,35
80	1,88	1,82	1,77	1,70	1,65	1,60	1,54	1,51	1,42	1,32
100	1,85	1,79	1,75	1,68	1,63	1,57	1,51	1,48	1,39	1,28
125	1,83	1,77	1,72	1,65	1,60	1,55	1,49	1,45	1,36	1,25
150	1,82	1,76	1,71	1,64	1,59	1,54	1,47	1,44	1,34	1,22
200	1,80	1,74	1,69	1,62	1,57	1,52	1,45	1,42	1,32	1,19
400	1,78	1,72	1,67	1,60	1,54	1,49	1,42	1,38	1,28	1,13
1000	1,76	1,70	1,65	1,58	1,53	1,47	1,41	1,36	1,26	1,08
∞	1,75	1,69	1,64	1,57	1,52	1,46	1,40	1,35	1,24	1,00

Таблица XIII. Квантили распределения Кохрена. Пятипроцентные пределы для отношения наибольшей эмпирической дисперсии к сумме n эмпирических дисперсий для уровня значимости 5%. $m-1$ — число степеней свободы для числителя, n — число степеней свободы для знаменателя

$m-1$	1	2	3	4	5	6	7
n							
2	0,9985	0,9750	0,9392	0,9057	0,8772	0,8534	0,8332
3	0,9669	0,8709	0,7977	0,7457	0,7071	0,6771	0,6530
4	0,9065	0,7679	0,6841	0,6287	0,5895	0,5598	0,5365
5	0,8412	0,6838	0,5981	0,5441	0,5065	0,4783	0,4564
6	0,7808	0,6161	0,5321	0,4803	0,4447	0,4184	0,3980
7	0,7271	0,5612	0,4800	0,4307	0,3974	0,3726	0,3535
8	0,6798	0,5157	0,4377	0,3910	0,3595	0,3362	0,3185
9	0,6385	0,4775	0,4027	0,3584	0,3286	0,3067	0,2901
10	0,6020	0,4450	0,3733	0,3311	0,3029	0,2823	0,2666
12	0,5410	0,3924	0,3264	0,2880	0,2624	0,2439	0,2299
15	0,4709	0,3346	0,2758	0,2419	0,2195	0,2034	0,1911
20	0,3894	0,2705	0,2205	0,1921	0,1735	0,1602	0,1501

Таблица XIV. Значимые ранги критерия Дункана для уровня значимости 5%. v — число степеней свободы, p — номер ранга

p	2	3	4	5	6	7	8	9
v								
1	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0
2	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09
3	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50
4	3,93	4,01	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02
5	3,64	3,74	3,79	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83
6	3,46	3,58	3,64	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68
7	3,35	3,47	3,54	3,58	3,60	3,61	3,61	3,61
8	3,26	3,39	3,47	3,52	3,55	3,56	3,56	3,56
9	3,20	3,34	3,41	3,47	3,50	3,52	3,52	3,52
10	3,15	3,30	3,37	3,43	3,46	3,47	3,47	3,47
11	3,11	3,27	3,35	3,39	3,43	3,44	3,45	3,46
12	3,08	3,23	3,33	3,36	3,40	3,42	3,44	3,44
13	3,06	3,21	3,30	3,35	3,38	3,41	3,42	3,44
14	3,03	3,18	3,27	3,33	3,37	3,39	3,41	3,42
15	3,01	3,16	3,25	3,31	3,36	3,38	3,40	3,42
16	3,00	3,15	3,23	3,30	3,34	3,37	3,39	3,41
17	2,98	3,13	3,22	3,28	3,33	3,36	3,38	3,40
18	2,97	3,12	3,21	3,27	3,32	3,35	3,37	3,39
19	2,96	3,11	3,19	3,26	3,31	3,35	3,37	3,39
20	2,95	3,10	3,18	3,25	3,30	3,34	3,36	3,38
22	2,93	3,08	3,17	3,24	3,29	3,32	3,35	3,37
24	2,92	3,07	3,15	3,22	3,28	3,31	3,34	3,37
26	2,91	3,06	3,14	3,21	3,27	3,30	3,34	3,36
28	2,90	3,04	3,13	3,20	3,26	3,30	3,33	3,35
30	2,89	3,04	3,12	3,20	3,25	3,29	3,32	3,35
40	2,86	3,01	3,10	3,17	3,22	3,27	3,30	3,33
60	2,83	2,98	3,08	3,14	3,20	3,24	3,28	3,31
100	2,80	2,95	3,05	3,12	3,18	3,22	3,26	3,29
∞	2,77	2,92	3,02	3,09	3,15	3,19	3,23	3,26

Таблица XIV, окончание

p	10	12	14	16	18	20	50	100
v								
1	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0	18,0
2	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09
3	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50
4	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02
5	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83
6	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68
7	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61
8	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56
9	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52
10	3,47	3,47	3,47	3,47	3,47	3,48	3,48	3,48
11	3,46	3,46	3,46	3,46	3,47	3,48	3,48	3,48
12	3,46	3,46	3,46	3,46	3,47	3,48	3,48	3,48
13	3,45	3,45	3,46	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
14	3,44	3,45	3,46	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
15	3,43	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
16	3,43	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
17	3,42	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
18	3,41	3,43	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
19	3,41	3,43	3,44	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
20	3,40	3,43	3,44	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
22	3,39	3,42	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47
24	3,38	3,41	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47
26	3,38	3,41	3,43	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47
28	3,37	3,40	3,43	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47
30	3,37	3,40	3,43	3,44	3,46	3,47	3,47	3,47
40	3,35	3,39	3,42	3,44	3,46	3,47	3,47	3,47
60	3,33	3,37	3,40	3,43	3,45	3,47	3,48	3,48
100	3,32	3,36	3,40	3,42	3,45	3,47	3,53	3,53
∞	3,29	3,34	3,38	3,41	3,44	3,47	3,61	3,67

Таблица XV. Критические коэффициенты корреляции рангов Спирмена P для $\alpha = 5\%$ и n ранжируемых переменных

n	4	5	6	7	8	9	10	12	14
P	1,000	0,900	0,829	0,714	0,643	0,600	0,564	0,506	0,456
n	16	18	20	22	24	26	28	30	
P	0,425	0,399	0,377	0,359	0,343	0,329	0,317	0,306	

Таблица XVI. Вероятности, связанные с суммами S в коэффициенте корреляции рангов Кендалла

S	Величины n				S	Величины n		
	4	5	8	9		6	7	10
0	0,625	0,592	0,548	0,540	1	0,500	0,500	0,500
2	0,375	0,408	0,452	0,460	3	0,360	0,386	0,431
4	0,167	0,242	0,360	0,381	5	0,235	0,281	0,364
6	0,042	0,117	0,274	0,306	7	0,136	0,191	0,300
8		0,042	0,199	0,238	9	0,068	0,119	0,242
10		0,0083	0,138	0,179	11	0,028	0,068	0,190
12			0,089	0,130	13	0,0083	0,035	0,146
14			0,054	0,090	15	0,0014	0,015	0,108
16			0,031	0,060	17		0,0054	0,078
18			0,016	0,038	19		0,0014	0,054
20			0,0071	0,022	21		0,00020	0,036
22			0,0028	0,012	23			0,023
24			0,00087	0,0063	25			0,014
26			0,00019	0,0029	27			0,0083
28		0,000025		0,0012	29			0,0046
30			0,00043		31			0,0023
32			0,00012		33			0,0011
34			0,000025		35			0,00047
36			0,0000028		37		0,00018	
					39		0,000058	
					41		0,000015	
					43		0,0000028	
					45		0,00000028	

Таблица XVII. Значения коэффициента корреляции для уровня значимости 5%

v	1	2	3	4	5	6	7	8
r_{xy}	0,997	0,950	0,878	0,811	0,754	0,707	0,666	0,632
v	9	10	11	12	13	14	15	16
r_{xy}	0,602	0,576	0,553	0,532	0,514	0,497	0,482	0,468
v	17	18	19	20	25	30	35	40
r_{xy}	0,456	0,444	0,433	0,423	0,381	0,349	0,325	0,304
v	45	50	60	70	80	90	100	
r_{xy}	0,287	0,273	0,250	0,232	0,217	0,205	0,195	

2. Основные команды *MatLab*

Элементарные функции

sin, cos, tan, cot — синус, косинус, тангенс, котангенс; sec, csc — секанс, косеканс;
 asin, acos, atan, acot — арксинус, арккосинус, арктангенс, арккотангенс;
 asec, acsc — арксеканс, арккосеканс;
 sinh, cosh, tanh, coth, sech, csch, asinh, acosh, atanh, acoth — гиперболические функции;

кции;

exp — экспоненциальная функция;

log — натуральный логарифм;

log10 — десятичный логарифм;

log2 — логарифм по основанию 2;

pow2 — возведение числа 2 в степень;

sqrt — квадратный корень;

nextrpow2 — степень, в которую надо возвести 2, чтобы получить ближайшее число (большее или равное аргументу), например:

```
>> nextrpow2(1000) ans = 10;
```

abs — вычисление модуля;

fix — округление до ближайшего целого по направлению к нулю, например:

```
>> fix(1.9) ans = 1; >> fix(-1.9) ans = -1;
```

floor, ceil — округление до ближайшего целого по направлению к минус бесконечности или плюс бесконечности, например:

```
>> floor(3.2) ans = 3; >> ceil(3.2) ans = 4;
```

round — округление до ближайшего целого, например:

```
>> round(4.1) ans = 4; >> round(4.5) ans = 5;
```

sign — возвращает знак числа: sign(x) возвращает -1, если $x < 0$, 0, если $x = 0$ и 1, если $x > 0$.

Управление средой, файлами и переменными

`clc` – очистка содержания командного окна;
`clear` – удаление переменных рабочей среды; например:
`>> x = 5; clear x`
`>> x ??? Undefined function or variable 'x'.` – переменная не определена;
`echo` – управление отображением строк выполняемого файла в командное окно;
`echo on` – вывод строк, `echo off` – подавление вывода строк;
`format` – определение формата вывода чисел в командное окно; примеры:
`>> format short >> 2/3 ans = 0.6667;`
`>> format long >> 2/3 ans = 0.666666666666667`
`>> format short e >> 2/3 ans = 6.6667e-001`
`>> format long e >> 2/3 ans = 6.666666666666666e-001`
`>> format bank >> 2/3 ans = 0.67` два десятичных знака
`>> format rat >> 5.2 ans = 26/5;`
`help` – вывод разделов встроенной справки в командное окно; например, `help max`;
`quit` – окончание сеанса MatLab;
`length` – нахождение длины вектора столбца или вектора строки; например:
`x = [2 3 5]` – строка; `y = [2;3;5]` – столбец;
`>> length(x) ans = 3`
`>> length(y) ans = 3;`

Операторы и специальные символы

1) `-`, `+` – вычитание и сложение скаляров и массивов (векторов, матриц); массивы должны быть одинаковых размеров, одно из слагаемых может быть скаляром, например:

```

>> [2 3 5]+4 ans = 6 7 9;
>> [2 3 5]-[3 4 2] ans = -1 -1 3;
>> [2 3 5]-[3 4] ??? Error using ==> -Matrix dimensions must agree; ошибка, матрицы должны иметь одинаковый размер;

```

2) `*` – умножение скаляров или матриц подходящих размеров, один из сомножителей может быть скаляром, например:

```

>> [2 3 5]*4 ans = 8 12 20;
>> [2 3 5]*[4;1;1] ans = 16;

           8  12  20
>> [4;1;1]*[2 3 5] ans = 2   3   5
           2   3   5
>> [4;1;1]*[2 3] ans = 2   3
           2   3

```

```

>> [4 1 1]*[2;3] ??? Error using ==> ошибка;
>> [4 1 1]*[2 3] ??? Error using ==> ошибка;

```

3) `/` – деление скаляров, поэлементное деление матрицы на скаляр, если оба операнда – матрицы, то $A/B = A \cdot \text{inv}(B)$, где $\text{inv}(B)$ – обратная матрица; примеры:

```

>> [4 1 1]/3 ans = 1,3333 0,3333 0,3333;

```

>> [3 2 5]/[4 1 2] ans = 8/7;

A=[1 2 3;3 4 2;5 4 7]; B=[6 6 2;5 4 8;3 6 4];

A =	B =	>> C = A/B =	>> C = A*inv(B) =
1 2 3	6 6 2	-0,2273 0,2273 0,4091	-0,2273 0,2273 0,4091
3 4 2	5 4 8	0,3333 0 0,3333	0,3333 0 0,3333
5 4 7	3 6 4	0,1364 0,8636 -0,0455	0,1364 0,8636 -0,0455

4) ^ – возведение скаляра в степень, вычисление степени квадратной матрицы, например:

```
>> A^2 ans = 22    22    28
              25    30    31
              52    54    72
```

5) \ – левое матричное деление; если A – квадратная матрица, то $A \setminus B = \text{inv}(A) * B$; если A – квадратная матрица размера n, а B – вектор-столбец из n элементов, то $X = A \setminus B$ содержит решение системы линейных уравнений $AX = B$, например:

система:

$$\begin{cases} 2X + 3Y + Z = 6; \\ X + 2Y - 2Z = 8; \\ 3X - 3Y + Z = 2; \end{cases} \quad A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & -2 \\ 3 & -3 & 1 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 6 \\ 8 \\ 2 \end{bmatrix}$$

>> A = [2 3 1;1 2 -2;3 -3 1]; B = [6;8;2]; >> X = A \ B

```
X = 2,0000
     1,0000
    -1,0000;
```

6) .* – поэлементное умножение массивов одинаковых размеров, например:

>> [2 3 1].*[1 2 -2] ans = 2 6 -2;

7) ./ – поэлементное деление массивов одинаковых размеров, например:

>> [2 3 1]./[1 2 -2] ans = 2,0000 1,5000 -0,5000;

8) \. – поэлементное левое деление массивов одинаковых размеров, например:

>> [2 3 1].\[1 2 -2] ans = 0,5000 0,6667 -2,0000;

9) .^ – поэлементное возведение матрицы в степени, являющиеся элементами другой матрицы тех же размеров, например:

>> [2 3 1].^[1 2 -2] ans = 2 9 1;

10) ' – транспонирование, например:

>> A =	>> A' =
2 3 1	2 1 3
1 2 -2	3 2 -3
3 -3 1	1 -2 1

11) > -a > b больше; 12) < -a < b меньше; 13) == -a == b равно; 14) ~= -a ~= b не равно;

15) = – оператор присвоения;

16) [] – квадратные скобки используются для формирования вектор-строк, вектор-столбцов и массивов; например:

```
>> x = [2 3 5] x = 2 3 5
>> y = [2;3;5] y = 2
                    3
                    5
>> z = [2 3 5;3 4 6]
                    2 3 5
                    3 4 6
```

Пустые квадратные скобки используют для удаления строк из массива и определения пустого массива:

```
>> A = [2 3 5 7 9]; A(2) = []; >> A = 2 5 7 9
```

17) () – круглые скобки определяют порядок выполнения арифметических и логических операций, индексы массивов и входные аргументы функций заключаются в круглые скобки

18) : – двоеточие позволяет произвести сечение массива:

```
>> A = [2 3 5 7 9 6 8 14 pi 21]; B = A(5:9)
```

```
B = 9,0000 6,0000 8,0000 14,0000 3,1416;
```

создать вектор, компоненты которого изменяются с одинаковым шагом:

```
> A = [0:.5:2 10] шаг 0,5
```

```
A = 0 0,50 1,00 1,50 2,00 10,00
```

```
>> B = [1:4] по умолчанию шаг равен 1
```

```
B = 1,00 2,00 3,00 4,00;
```

выделение строки и столбца из матрицы превращение матрицы в столбец

```
>> A =          >> A =          >> D = A(:)  D = 1
[1 2 4          [1 2 4          5
 5 7 3]          5 7 3]          2
>> B = A(2,:)    >> C = A(:,2)    7
B = 5 7 3        C = 2            4
                    7            3
```

19) ... – продолжение команды на следующей строке:

```
>> x = [1 2 3 ...
```

```
7]
```

```
x = 1,00 2,00 3,00 7,00;
```

20) , – запятой отделяются индексы массива и аргументы функций; несколько команд, набранных в одной строке, также отделяются запятой: >> x = [1:20]; y = x.^2; plot(x,y),grid

21) ; – точка с запятой отделяет строки матрицы при наборе элементов внутри квадратных скобок:

```
>> A=[1 2 5;3 6 4] <Enter>
```

```
A = 1,00    2,00    5,00
      3,00    6,00    4,00
```

завершение выражения точкой с запятой приводит к подавлению вывода результата в командное окно при нажатии клавиши <Enter>:

```
>> A = [1 2 5; 3 6 4]; <Enter>
```

```
>>
```

22) % – начало комментария в *m*-файле (программы, создаваемые пользователями для выполнения расчетов, например:

```
echo on
```

```
% ТЕЧЕНИЕ АНОМАЛЬНО-ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ В КРУГЛОЙ ТРУБЕ
```

```
echo off
```

Логические функции

all – проверка наличия нулевого элемента в массиве:

```
>> A = 1    2    4          >> all(A)
      5    7    3          ans = 1    1    1
>> B = 1    0    4          >> all(B)
      5    7    3          ans = 1    0    1
```

any – проверка наличия ненулевого элемента в массиве:

```
>> B = 1    0    4          >> any(B)
      5    7    3          ans = 1    1    1
>> C = 1    0    4          >> any(C)
      5    0    3          ans = 1    0    1
```

find – нахождение индексов и значений ненулевых элементов массива:

```
>> D = 0    0    0          >> [x,y,v] = find(D)    x = 2    y = 1    v = 1
      1    0    5                                2    3    5
```

x – номера строк с элементами, не равными нулю;

y – номера столбцов с элементами, не равными нулю; *v* – элементы, не равные нулю.

Программирование

ans – автоматически создаваемая переменная для хранения значения выражения или результата функции, если не применяется оператор присвоения;

break – выход из циклов *while* и *for*;

calendar – календарь любого месяца любого года;

clock – получение даты и времени;

else – ветвь оператора *if*, работающая при невыполнении всех условий;

elseif – ветвь оператора *if*, работающая при невыполнении некоторого условия;

end – завершение конструкций *for*, *while*, *if*;

error — отображение в командное окно сообщения об ошибке;

for — оператор для организации циклов с известным числом повторов;

if — условный оператор;

input — запрос на ввод с клавиатуры:

```
>> p=input('Введите значение p')
```

pause — приостанавливает выполнение файла;

realmax — возвращает максимально допустимое вещественное положительное число:

```
>> realmax ans = 1.7977e+308;
```

realmin — возвращает минимально допустимое вещественное положительное число:

```
>> realmin ans = 2.2251e-308;
```

while — организация цикла с неизвестным числом повторений, выполняющегося при истинности условия цикла:

Работа с матрицами и массивами:

diag — выделение диагонали и конструирование диагональной матрицы:

```
>> A= [1  2  3      >> a=[3;5;8];
       5  7  9      >> A=diag(a)
       3  5 12]    A =  3   0   0
>> a=diag(A)      0   5   0
                  7   0   8
                  12
```

eye — создание единичной матрицы:

```
>> eye(3)          >> eye(3,1)      >> eye(1,3)  ans =  1   0   0
ans =  1   0   0    ans =  1          >> eye(2,3)  ans =  1   0   0
       0   1   0          0              0   1   0
       0   0   1          0
```

fliplr — перестановка столбцов матрицы слева направо:

```
A =  1   2   3      >> B = fliplr(A)  B =  3   2   1
     5   7   9          9   7   5
     3   5  12          12   5   3
```

flipud — перестановка строк матрицы сверху вниз:

```
A =  1   2   3      >> C = flipud(A)  C =  3   5  12
     5   7   9          5   7   9
     3   5  12          1   2   3
```

linspace — создание вектора, значения элементов которого изменяются с постоянным шагом:

linspace(a,b,n); a , b — минимальный и максимальный элементы, n — количество элементов


```
>> v=linspace(0,10,2) v = 0 10
>> v=linspace(0,10,3) v = 0 5 10
>> v=linspace(0,10,4) v = 0 3.3333 6.6667 10
>> v=linspace(0,10,5) v = 0 2.5 5 7.5 10
```

logspace – создание вектора, значения элементов которого изменяются с постоянным шагом в логарифмической шкале:

```
>> logspace(1,5,2) ans = 10 100000
>> logspace(1,5,3) ans = 10 1000 100000
>> logspace(1,5,5) ans = 10 100 1000 10000 100000
```

magic – создание магического квадрата:

```
>> magic(3) ans = 8      1      6      >> magic(4) ans = 16     2      3     13
                    3      5      7                    5     11     10     8
                    4      9      2                    9      7      6     12
                                                4     14     15     1
```

ones – создание массива, элементы которого являются единицами:

```
>> A=ones(3) A = 1      1      1      >> A = ones(3,1) A = 1      >> A = ones(1,3)
                    1      1      1                    1      A = 1      1      1
                    1      1      1                    1
```

rand – создание массивов равномерно распределенных случайных чисел:

```
>> rand(3) ans =      >> rand(3,1) ans =      >> rand(1,3) ans =
    0,2785    0,9649    0,9572      0,9134      0,1419    0,4218    0,9157
    0,5469    0,1576    0,4854      0,6324
    0,9575    0,9706    0,8003      0,0975
```

randn – создание массивов, состоящих из чисел, распределенных по нормальному закону:

```
>> randn(3) ans =      >> randn(3,1) ans =      >> randn(1,3) ans =
   -0,4326    0,2877    1,1892      0,1746      -0,5883    2,1832   -0,1364
   -1,6656   -1,1465   -0,0376     -0,1867
    0,1253    1,1909    0,3273      0,7258
```

rot90 – поворот матрицы против часовой стрелки k раз:

```
A = 1      2      3      >> B=rot90(A,1)= 3      9      12
      5      7      9                    2      7      5
      3      5     12                    1      5      3
```

size(A) – количество строк и столбцов в матрице A;

tril – выделение нижнего треугольника из матрицы:

```
A = 1      2      3      >> B=tril(A) 1      0      0
      5      7      9                    5      7      0
      3      5     12                    3      5     12
```

zeros – создание массивов, состоящих из нулей:

```
>> zeros(3)      >> zeros(3,1)      >> zeros(1,3)
    0    0    0          0          0    0    0
    0    0    0          0
    0    0    0          0
```

Специальные математические функции

beta, betainc, betaln — бета-функция, неполная бета-функция и логарифм бета-функции.

$$B(z, w) = \int_0^1 t^{z-1} (1-t)^{w-1} dt \quad B_x(z, w) = \frac{1}{B(z, w)} \int_0^x t^{z-1} (1-t)^{w-1} dt$$

erf, erfc, erfcx — вычисление функции ошибок, дополнительного интеграла вероятностей и обратной к функции ошибок.

$$\operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad \operatorname{erfc} x = 1 - \operatorname{erf} x \quad \operatorname{erfc} x = e^{x^2} \operatorname{erfc} x$$

factorial — факториал;

gamma, gammainc, gammaln — гамма-функция $\Gamma(\alpha)$, неполная гамма-функция $\Gamma_x(\alpha)$, логарифм гамма-функции.

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty e^{-t} t^{\alpha-1} dt \quad \Gamma_x(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^x e^{-t} t^{\alpha-1} dt$$

Решение различных математических задач

det — вычисление определителя матрицы:

```
A =   1   2   3      >> det(A)
      5   7   9      ans = -15
      3   5  12
```

diff — нахождение конечных разностей:

```
>> Y =      -6   3.5   12   22.5   38   61.5   96   144.5   210
>> diff(Y) =   9.5   8.5  10.5  15.5  23.5  34.5  48.5  65.5
```

символьное дифференцирование:

```
>> syms x y n      >> diff(y,x)
>> y=x^n            ans = x^n*n/x
```

int — символьное интегрирование

```
вычислить интеграл:      >> syms a b x
                           >> int(1/(a^2+(b*x)^2))
                           ans = 1/a/b*atan(b*x/a)
                           >> syms a b x
                           >> int(1/(a^2+(b*x)^2),0,a/b)
                           ans = 1/4*pi/a/b
```

polyfit – приближение функции одной переменной, заданной таблицей, полиномом заданного порядка:

rank – нахождение ранга матрицы:

```
A = 1  2  3      >> rank(A)
     5  7  9      ans =  3
     3  5 12
```

inv – обращение матрицы:

```
A = 1  2  3      >> B=inv(A) B = -13/5   3/5   1/5
     5  7  9      11/5   -1/5  -2/5
     3  5 12      -4/15  -1/15  1/5
```

rat – приближение вещественных чисел отношением двух целых чисел (рациональной дробью):

```
>> [n,d]=rat(6.125) n = 49 d = 8      >> [n,d]=rat(pi) n = 355 d = 113
```

roots – вычисление всех корней полинома:

```
>> p=[2;3;4;-9];      ans = -1.2500 + 1.7139i      решение уравнения следую-
>> roots(p)           -1.2500 - 1.7139i      щего вида:
                                     y = 2x^3+3x^2+4x-9,
                                     1.0000      два корня мнимые
```

trace – след матрицы:

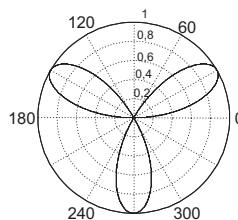
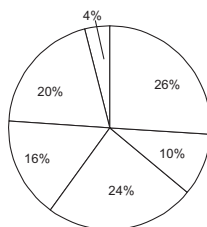
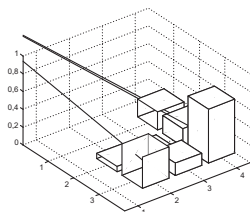
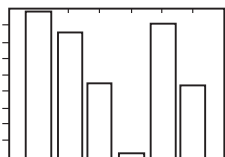
```
A = 1  2  3      >> trace(A)      >> sum(diag(A))
     5  7  9      ans = 20          ans = 20
     3  5 12
```

Графика и визуализация данных

bar, barh – вертикальная и горизонтальная столбиковые диаграммы;

bar3 – вертикальная столбиковая трехмерная диаграмма;

bar3h – горизонтальная столбиковая трехмерная диаграмма.



```
bar(rand(1,6))  bar3(rand(3,4))  y=[2;10;8;12;5;13];  phi=0:.001:2*pi;
                                     >> pie(y)              r=sin(3*phi);
                                     polar(phi,r)
```

comet, comet3 – анимированный график плоской и трехмерной линии;

contour — построение линий равного уровня;
 hist — гистограмма;
 loglog, semilogx, semilogy — построение графиков в логарифмическом и полулוגарифмическом масштабе;
 pie — отображение данных в виде круговой диаграммы;
 polar — построение графика в полярных координатах;
 plot — визуализация функций одной переменной;
 sphere — отображение сферы

Оформление графиков

grid — сетка;
 gtext — режим интерактивного размещения текстовых подписей в пределах графического окна (>> gtext('подпись'));
 hold — управление выводом нескольких графиков в одно окно; hold on — каждый новый график добавляется в текущее графическое окно; hold off — каждый новый график отображается в текущем графическом окне, переписывая содержание окна;
 legend — помещение легенды на график;
 set(gca,'xtick',[],'ytick',[]); — отключение режима оцифровки осей;
 set(gca,'XColor','w','Ycolor','w'); — установка цвета рисования осей (белый — равносильно отключению);
 subplot — разбиение графического окна на несколько подграфиков: subplot(nm3), n — количество строк, m — количество столбцов, 3 — номер графика;
 title, xlabel, ylabel, zlabel — заголовок и надписи по осям;
 text — размещение надписи в произвольном месте рисунка; text(x,y,'текст'), x,y — координаты нижнего левого угла прямоугольника, в котором размещается текст;
 тип маркера (обозначение точек на графиках):
 . — точка o — кружок x — крестик + — знак плюс * — звездочка
 s — квадрат d — ромб v, ^, <, > — треугольники
 p — пятиконечная звезда h — шестиконечная звезда
 тип линии:
 - сплошная : пунктирная
 -. штрих-пунктирная -- штриховая
 изображение подстрочных символов: H₂O (H₂O); t_{C(90)} (t_{C(90)});
 изображение надстрочных символов: \alpha, Вт/(м²·K) (α , Вт/(м²·K));
 здесь \cdot позволяет изобразить точку (умножение);
 изображение греческих букв и специальных символов:
 \alpha α \beta β \gamma γ \Gamma Γ \delta δ
 \Delta Δ \epsilon ϵ \zeta ζ \eta η \theta θ
 \vartheta ϑ \Theta Θ \iota ι \kappa κ \lambda λ

<code>\Lambda</code> Λ	<code>\mu</code> μ	<code>\nu</code> ν	<code>\xi</code> ξ	<code>\Xi</code> Ξ
<code>\pi</code> π	<code>\Pi</code> Π	<code>\rho</code> ρ	<code>\sigma</code> σ	<code>\Sigma</code> Σ
<code>\tau</code> τ	<code>\upsilon</code> υ	<code>\Upsilon</code> Υ	<code>\phi</code> ϕ	<code>\Phi</code> Φ
<code>\chi</code> χ	<code>\psi</code> ψ	<code>\Psi</code> Ψ	<code>\omega</code> ω	<code>\Omega</code> Ω
<code>\sim</code> \sim	<code>\leq</code> \leq	<code>\infty</code> ∞	<code>\leftrightarrow</code> \leftrightarrow	<code>\rightarrow</code> \rightarrow
<code>\uparrow</code> \uparrow	<code>\rightarrow</code> \rightarrow	<code>\downarrow</code> \downarrow	<code>\circ</code> \circ	<code>\pm</code> \pm
<code>\geq</code> \geq	<code>\propto</code> \propto	<code>\partial</code> ∂	<code>\bullet</code> \bullet	<code>\div</code> \div
<code>\neq</code> \neq	<code>\aleph</code> \aleph	<code>\wp</code> \wp	<code>\oslash</code> \oslash	<code>\supseteq</code> \supseteq
<code>\subset</code> \subset	<code>\nabla</code> ∇	<code>\ldots</code> \ldots	<code>\mid</code> \mid	<code>\copyright</code> \copyright
<code>\equiv</code> \equiv	<code>\Im</code> \Im	<code>\cap</code> \cap	<code>\supset</code> \supset	<code>\int</code> \int
<code>\rfloor</code> \rfloor	<code>\lfloor</code> \lfloor	<code>\perp</code> \perp	<code>\rceil</code> \rceil	<code>\langle</code> \langle
<code>\rangle</code> \rangle	<code>\forall</code> \forall	<code>\exists</code> \exists	<code>\ni</code> \ni	<code>\cong</code> \cong
<code>\approx</code> \approx	<code>\Re</code> \Re	<code>\oplus</code> \oplus	<code>\otimes</code> \otimes	<code>\cup</code> \cup
<code>\subseteq</code> \subseteq	<code>\in</code> \in	<code>\cdot</code> \cdot	<code>\neg</code> \neg	<code>\times</code> \times
<code>\surd</code> \surd	<code>\varpi</code> ϖ			

Словарь терминов

Адекватность — соответствие.

Адекватность уравнения регрессии — описание опытных данных уравнением регрессии с точностью, соответствующей ошибке воспроизводимости эксперимента.

Активный эксперимент — эксперимент, при планировании и анализе результатов которого исследователь учитывает рекомендации математической теории эксперимента.

Априорная информация — сведения об объекте, подлежащем изучению, имеющиеся у исследователя до постановки опытов.

Взаимодействие между двумя факторами означает, что изменение результата на различных уровнях одного фактора не одинаково для всех уровней другого фактора.

Воспроизводимость результатов измерений — повторяемость (в пределах установленной погрешности) результатов измерений одной и той же величины, полученных в разных местах, разными методами, разными средствами, разными операторами, в разное время.

Временной дрейф — нестационарное изменение параметра во времени; обычно происходит под воздействием неконтролируемых факторов.

Выборка — часть генеральной совокупности.

Генеральная совокупность — совокупность всех значений случайной величины.

Генерирующее соотношение — соотношение, показывающее, какие взаимодействия

заменены новыми факторами при построении дробной реплики.

Греко-латинский квадрат — план эксперимента, в котором четыре фактора располагаются таким образом, что каждый уровень каждого фактора сопоставляется лишь один раз, с каждым уровнем трех остальных факторов.

Двумерное сечение — сечение двухфакторной поверхности отклика плоскостью, перпендикулярной оси параметра оптимизации.

Дискриминация моделей — выбор модели среди нескольких конкурирующих, которая наиболее правильно отражает механизм процесса и обладает наилучшей предсказательной способностью.

Дисперсионный анализ — раздел математической статистики, посвященный методам выявления влияния отдельных факторов на результат эксперимента на фоне ошибки.

Дисперсия — величина, характеризующая рассеяние значений случайной величины относительно ее математического ожидания.

Дисперсия воспроизводимости — дисперсия, характеризующая воспроизводимость эксперимента при дублировании опытов.

Дисперсия выборочная — сумма квадратов отклонений экспериментальных значений от среднего выборки, деленная на число степеней свободы.

Дисперсия остаточная — дисперсия, характеризующая рассеяние опытных данных относительно уравнения регрессии.

Доверительные пределы — два значения, между которыми с заданной степенью достоверности заключено значение параметра.

D-оптимальный план — план экспериментов, имеющий максимальный определитель информационной матрицы.

Дробная реплика — план эксперимента, когда проводится лишь часть полного факторного эксперимента.

Звездная точка — точка на оси кодированной системы координат; звездные точки имеются в центральных композиционных планах.

Звездное плечо — расстояние от центра кодированной системы координат до звездной точки.

Значимость — условие, показывающее, что некоторые характеристики, найденные из двух и более выборок, различаются (одна от другой или от иных величин), в большей степени, чем можно ожидать вследствие случайных колебаний в выборках.

Интервал варьирования — разность между двумя натуральными значениями фактора, соответствующая единице его кодированного значения.

Информационная матрица — произведение транспонированной матрицы, включающей все комбинации факторов в предполагаемом уравнении регрессии, на ее не-транспонированный вариант.

Каноническая форма — форма уравнения, характеризующая тип поверхности отклика.

Квадрат Юдена — неполный латинский квадрат.

Ковариационная матрица — матрица, обратная информационной, умноженной на соответствующую дисперсию; иногда ковариационной матрицей называют матрицу, обратную информационной.

Ковариационный анализ — раздел анализа данных, ставящий своей целью определить модель связи между зависимой величиной и набором количественных и качественных величин.

Ковариация — величина, характеризующая взаимосвязь между двумя случайными величинами; недиагональные элементы матрицы, обратной информационной матрице, умноженные на соответствующую дисперсию, являются ковариациями, характеризующими взаимосвязь коэффициентов регрессии.

Кодирование факторов — линейное преобразование факторного пространства с переносом начала координат в центр эксперимента и выбором масштаба по осям координат в единицах варьирования факторов.

Кодированная система координат — безразмерная система координат, в которой на осях откладывают кодированные значения факторов.

Контраст — линейная функция, ортогональная среднему значению параметра оптимизации.

Контрольная карта Шухарта — в управлении производством, бизнес-процессами — визуальный инструмент, график изменения параметров выборки для обеспечения статистического контроля качества.

Коэффициент вариации — относительная мера рассеивания, выраженная в процентах.

Коэффициент детерминации — количественная оценка доли дисперсии результативного признака, объясняющейся влиянием независимых переменных.

Коэффициент конкордации — величина, характеризующая степень согласованности различных источников информации.

Коэффициент корреляции — коэффициент, показывающий наличие линейной связи между двумя случайными величинами.

Коэффициент регрессии — коэффициент уравнения регрессии.

Критерий для проверки гипотезы — правило, согласно которому гипотеза принимается или отвергается.

Критическая область — множество значений проверочной статистики, при которых проверяемая гипотеза отвергается.

Латинский квадрат — план эксперимента, в котором каждый уровень каждого фактора сопоставляется лишь один раз с каждым уровнем двух других факторов.

Линейное программирование — математическая дисциплина, посвященная теории и методам решения задач об экстремумах линейных функций на множествах, задаваемых системами линейных неравенств и равенств; линейное программирование является одним из разделов математического программирования.

Линейный регрессионный анализ — регрессионный анализ, позволяющий построить математическую модель, линейную по параметрам (коэффициенты регрессии находятся только в линейной форме).

Листинг — бумажная распечатка текста компьютерной программы или ее части.

Математическая модель — приближенное математическое описание объекта исследования.

Математическая статистика — принятие решений в условиях неопределенности.

Математическое ожидание — среднее взвешенное, представляющее собой сумму произведений значений случайной величины на их вероятности.

Матрица планирования — стандартная форма записи условий эксперимента в кодированной системе координат.

Метод крутого восхождения — метод проведения последовательных экспериментов, указывающий направление на оптимальную точку поверхности отклика.

Метод наименьших квадратов — математико-статистический метод, используемый для вычисления коэффициентов регрессии.

Насыщенный план — план, число точек которого равно числу коэффициентов предполагаемого уравнения регрессии; число степеней свободы для такого плана равно нулю.

Натуральная система координат — система координат, в которой на осях откладывают именованные значения факторов.

Натуральное значение фактора — именованное значение фактора.

Нелинейный регрессионный анализ — вариант регрессионного анализа, обеспечивающий построение моделей, нелинейных по параметрам.

Ненасыщенный план — план, число точек которого больше числа коэффициентов предполагаемой модели; число степеней свободы для такого плана больше нуля.

Нулевой уровень — натуральное значение фактора, соответствующее центру кодированной системы координат (центр эксперимента).

Определяющий контраст — выражение, показывающее, какие эффекты смешиваются с межблоковым эффектом при планировании факторного эксперимента.

Оптимальный режим — набор значений факторов, позволяющий получить наилучшее значение параметра оптимизации.

Ортогональный план — план эксперимента, позволяющий получить диагональную информационную матрицу; при этом коэффициенты регрессии оказываются взаимно независимыми.

Ошибка второго рода — принятие ложной статистической гипотезы.

Ошибка первого рода — отказ от истинной статистической гипотезы.

Параллельные измерения — измерения, выполненные при одинаковых значениях факторов.

Параметр оптимизации (функция отклика) — величина, характеризующая результаты экспериментов.

Пассивный эксперимент — эксперимент, при планировании которого не учитывают рекомендации математической теории эксперимента.

Планирование эксперимента — это область математической статистики, ставящая своей целью выбор количества и условий постановки экспериментов, необходимых и достаточных для решения задачи с требуемой точностью, разработку методов и приемов математической обработки результатов эксперимента и принятия на основе этого определенных решений.

Полный факторный эксперимент — эксперимент, включающий все возможные комбинации уровней факторов при выбранном их числе.

Предсказанное значение параметра оптимизации — значение параметра оптимизации, вычисленное по математической модели.

Преобразование переменных — замена переменных в модели процесса на функции этих переменных.

Размах набора чисел — разность между наибольшим и наименьшим значением из набора чисел.

Разрешающая способность дробных реплик — число несмешанных эффектов, которое может быть вычислено по данной дробной реплике.

Рандомизация — способ включения систематических ошибок в состав случайной ошибки.

Ранжирование факторов — расположение факторов в упорядоченный ряд, например, в порядке убывания их влияния на параметр оптимизации.

Регулярный многоуровневый план — план, в котором соблюдается пропорциональность числа комбинаций уровней факторов.

Ротатбельный план — план эксперимента, который обладает одинаковой способностью предсказания во всех направлениях относительно центральной точки.

Сверхнасыщенный план — план, число точек которого меньше числа коэффициентов предполагаемой модели процесса; число степеней свободы такого плана меньше нуля.

Сигмоид — гладкая монотонная нелинейная S-образная функция.

Симплекс — простейшая выпуклая фигура в k -мерном пространстве, имеющая $+1$ вершину.

Симплексный план — план эксперимента, точки которого расположены в вершинах симплекса.

Симплекс-решетчатый план — насыщенный план, точки которого расположены на поверхности и внутри симплекса.

Система нормальных уравнений — система линейных уравнений, используемая в методе наименьших квадратов для вычисления коэффициентов регрессии.

Случайное поле — случайная функция нескольких непрерывных переменных (параметров), т. е. такая функция, реализации которой подчиняются вероятностным законам, задающим значение функции в каждой точке пространства и взаимосвязь значений в соседних точках.

Случайный процесс (вероятностный, или стохастический) — процесс (т. е. изменение во времени состояния некоторой системы), течение которого может быть различным в зависимости от случая и для которого определена вероятность того или иного его течения.

Смешанные оценки коэффициентов регрессии — оценки, одновременно учитывающие несколько эффектов; соответствующие колонки в плане экспериментов имеют одинаковые наборы значений.

Смешивание — такое проведение экспериментов, при котором некоторые эффекты невозможно отличить от других эффектов; обычно одним из смешиваемых эффектов является межблоковый.

Сплайн (от англ. *Spline*, планка, рейка) — кусочно-заданная функция, совпадающая с функциями более простой природы на каждом элементе разбиения своей области определения.

Среднее выборочное — сумма всех значений, деленная на число наблюдений.

Среднеквадратическое отклонение — корень квадратный из дисперсии случайной величины.

Средний квадрат — несмещенная оценка дисперсии совокупности, которая находится путем деления суммы квадратов на соответствующее число степеней свободы.

Статистика — показатель, вычисляемый на основании выборки.

Статистическая гипотеза — предположение относительно совокупности, из которой берется выборка.

Статистический вывод — получение какого-либо заключения относительно генеральной совокупности на основании выборки из этой совокупности.

Топология — раздел математики, изучающий качественные свойства геометрических фигур, не зависящие от их длины, величины углов, прямолинейности и т.п.

Транспонирование матрицы — перемена местами столбцов и строк матрицы.

Уравнение регрессии — математическая модель процесса, полученная с помощью регрессионного анализа.

Уровень значимости — вероятность совершения ошибки первого рода.

Уровень фактора — значение фактора, которым задаются при изучении его влияния на параметр оптимизации.

Факторное пространство — пространство, оси координат которого соответствуют рассматриваемым факторам.

Факторы — независимые переменные, варьируемые при изучении объекта исследования.

Центр эксперимента — условия проведения эксперимента, соответствующие середине изучаемой области факторного пространства.

Центральное планирование — планирование, симметричное относительно центра эксперимента.

Черный ящик — объект изучения, внутреннее устройство которого либо неизвестно, либо слишком сложно для того, чтобы можно было по свойствам его составных частей (элементов) и структуре связей между ними делать выводы о поведении объекта.

Число степеней свободы — число экспериментально определенных значений случайной величины за вычетом числа ограничений, наложенных на ее изменение, т. е. объем информации, которым можно воспользоваться для вычисления очередной статистической характеристики.

Эффект взаимодействия — величина, характеризующая совместное влияние одного или нескольких факторов на связь других факторов с параметром оптимизации.

Эволюционное планирование — экспериментальный метод накопления информации с целью улучшения процесса без нарушения его нормального протекания.

Эффект фактора — изменение выхода, вызываемое изменением уровня фактора.

Литература

1. Хикс Ч. Основные принципы планирования эксперимента. Пер. с англ. — М.: Мир. 1967. — 406 с.
2. Рузинов Л. П., Слободчикова Р. И. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. — М.: Химия. 1980. — 280 с.

Агаянц Иван Михайлович

АЗЫ СТАТИСТИКИ В МИРЕ ХИМИИ:
ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

ISBN 978-5-91703-044-9



Редактор *Е. Попова*
Художественный редактор, верстка *В. Королева*
Корректор *О.Д. Камнева*

Издательство «Научные основы и технологии»
197342, Санкт-Петербург,
Красногвардейский пер. д.23
Тел./факс: (812) 655-08-37, URL: *ft-publishing.ru*,
e-mail: *mail@ft-publishing.ru*

Подписано в печать 10.02.15. Формат 70×100¹/₁₆. Усл. п. л.49,50
Тираж 500 экз. Заказ №