

Парадигма развития науки

Методологическое обеспечение

А.Е. Кононюк

ОСНОВЫ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

(Общая теория эксперимента)

Книга 2

**Киев
КНТ
2010**

УДК 519.237.5:515.126.2

ББК 22.172+22.152

К 15

Рецензент:

Н.К.Печурин - д-р техн. наук, проф. (Национальный авиационный университет).

Кононюк А.Е.

К15 Основы научных исследований (общая теория эксперимента)
- В 4-х кн.-К.2. -К.: 2011.- 452 с.

ISBN 978-966-373-696-9 (многотомное издание)

ISBN 978-966-373- (книга 2)

Серия книг посвящена основам научного исследования, методы которых широко используются в экспериментальных исследованиях. Подробно рассмотрена техника факторного планирования эксперимента. Особое внимание уделено вопросам интерпретации результатов эксперимента и проверки правильности исходных предпосылок, приемам планирования в лабораторных и промышленных условиях, в том числе блочному планированию. Изложение сопровождается детальным анализом большого числа практических примеров.

Монография рассчитана на магистров, аспирантов, докторантов и других научных работников различного профиля.

УДК 519.237.5:515.126.2

ББК 22.172+22.152

ISBN 978-966-373-696-9 (многотомное издание)

ISBN 978-966-373- (книга 2)

© Кононюк А.Е., 2011

© КНТ, 2011

Оглавление

5. Полный факторный эксперимент типа 2^k	7
5.1. Свойства полного факторного эксперимента типа 2^k	11
5.2. Полный факторный эксперимент и математическая модель.13	
5.3. Двухфакторный эксперимент с двумя уровнями для каждого фактора.....	20
5.3.1. Факторное представление.....	21
5.3.2. Алгоритм Йетса вычисления эффектов в факторном эксперименте типа 2^2	26
5.3.3. Интерпретация факторных экспериментов при наличии взаимодействий.....	29
5.4. Двухфакторный эксперимент с тремя уровнями для каждого фактора.....	31
5.4.1. Пример, когда уровни обоих факторов выражаются численно.....	32
5.4.2. Стандартные вычисления в планах 3^2	36
5.4.3. Однородное взаимодействие.....	37
5.4.4. Простой способ вычисления и интерпретации взаимодействий $A_L B_O$, $A_O B_L$ и $A_O B_O$	42
5.4.5. Критерий Тьюки мультипликативной неаддитивности... 43	
5.4.6. Критерий «глазного яблока» для взаимодействия..... 45	
5.4.7. Эксперимент 3^2 без повторений при исследовании загрязнения воздуха.....	46
5.4.8. Эксперимент 3^2 с дискретными факторами.....	47
5.4.9. Эксперимент 3^2 с одним непрерывным и одним дискретным факторами.....	48
5.5. Трехфакторные эксперименты без повторений с факторами на двух уровнях.....	50
5.5.1. Пример применения плана 2^3	51
5.5.2. Алгоритм Йетса для эксперимента 2^3	53
5.5.3. Предварительная интерпретация результатов эксперимента 2^3	53
5.5.4. Обратный алгоритм Йетса.....	54
5.5.5. Интерпретация в случае, когда один фактор дискретный.. 54	
5.5.6. Интерпретация в случае, когда все факторы непрерывные.56	
5.5.7. Линии равных значений стандартной ошибки Y 57	
5.5.8. Способ проверки вычислений по алгоритму Йетса для эксперимента 2^p	60

5.5.9. Интерпретация эксперимента 2^3	60
5.5.10. Одно аномальное наблюдение в эксперименте 2^{3+0}	61
5.5.11. Разбиение эксперимента 2^3 на блоки.....	63
5.5.12. Дисперсия линейных функций некоррелированных случайных переменных.....	65
5.6. Алгоритмы полного факторного эксперимента(ПФЭ) первого порядка.....	66
5.6.1. Алгоритм полного факторного эксперимента на двух уровнях с равным числом параллельных опытов.....	66
5.6.2. Алгоритм ПФЭ с параллельными опытами в одной точке факторного пространства.....	73
5.6.3. Алгоритм ПФЭ при неравном числе параллельных опытов.74	
5.6.4. Алгоритм ПФЭ с расчетом коэффициентов взаимодействий факторов.....	76
5.7. Факторный эксперимент второго порядка.....	77
5.7.1. Алгоритм ортогонального плана второго порядка (ЦКОП).79	
5.7.2. Алгоритм ротатабельности плана второго порядка (ЦКРП).84	
5.8. Большие двумерные таблицы.....	87
5.8.1. План Йетса 7×4	88
5.8.2. План Дэвиса $5 \times 3 \times 4$	90
5.8.3. План Шеффе 8×5	93
5.8.4. План Фишера $6 \times 5 \times 2$ на ячмене.....	96
5.8.5. План Фистера 33×31	100
5.8.6. Обобщение на анализ сбалансированных данных.....	108
5.8.7. Частичное дублирование двумерных таблиц.....	109
6. Дробный факторный эксперимент	112
6.1. Разбиение факторных планов на блоки.....	112
6.1.1. Простейшее разбиение на блоки; план 2^2 с блоками по два опыта.....	113
6.1.2. План 2^3 с разбиением на блоки по четыре и два опыта...116	
6.1.3. План 2^4 с разбиением на блоки по два, четыре и восемь опытов.....	122
6.1.4. Разбиение на блоки плана 2^5	126
6.1.5. Разбиение плана 3^2 на блоки по два и три опыта.....	126
6.2. Минимизация числа опытов.....	129
6.3. Дробная реплика.....	131
6.3.1. Дробные части планов 2^k	133
6.3.2. Некоторые простейшие дробные реплики.....	134
6.3.3. Полуреплика 2^{3-1}	135
6.3.4. Полуреплика 2^{4-1}	136

6.4. Выбор полуреplik. Генерирующие соотношения и определяющие контрасты.....	140
6.5. Выбор 1/4-реplik.....	145
6.6. Реплики большой дробности.....	150
6.7. Последовательности дробных реplik.....	155
6.7.1. Простейшие дополнения дробных планов 2^{3-1}_{III} и 2^{4-1}_{IV}	156
6.7.2. Дополнение плана 2^{8-4}_{IV}	160
6.8. Планы, робастные к дрейфам.....	164
6.8.1. Простейшие планы, робастные к дрейфу.....	166
6.8.2. Робастные к дрейфам планы $2^{2+1}_{//8}$ и $2^{4+7}_{//8}$	167
6.9. Планы с группировкой данных.....	171
6.9.1. Группировка с расслоенной выборкой.....	172
6.9.2. Планы расщепленных делянок.....	182
6.9.3. Дробные факторные планы типа 2^{p-q} с расщепленными делянками.....	185
6.10. Двухуровневые факторные планы с расщепленными делянками.....	191
7. Планирование, подготовка и проведение эксперимента	199
7.1. Методология и классификация экспериментальных исследований.....	199
7.2. Планирование эксперимента.....	201
7.3. Подготовка к опытам.....	205
7.4. Анкета для сбора априорной информации.....	208
7.5. Реализация плана эксперимента.....	210
7.6. Ошибки параллельных опытов.....	220
7.7. Дисперсия параметра оптимизации.....	225
7.8. Проверка однородности дисперсий.....	227
7.9. Рандомизация.....	233
7.10. Разбиение матрицы типа 2^k на блоки.....	243
7.11. Использование алгоритмов отсеивания для выделения существенных факторов.....	248
8. Обработка экспериментальных данных	274
8.1. Задача обработки опытных данных.....	274
8.2. Нахождение функциональных связей.....	277
8.3. Анализ опытных данных.....	305
8.4. Выражение опытных закономерностей формулами.....	329
8.5. Установление степени взаимной связи между явлениями.....	340
9. Другие методы обработки экспериментальных данных	378
9.1. Анализ периодических колебаний.....	378
9.2. Метод факторного эксперимента при исследовании компонентных систем.....	381

9.3. Методы идентификации при получении математических моделей процессов.....	397
9.4. Примеры применения методов идентификации.....	407
9.5. Метод исследования формальной кинетики в непрерывных технологических процессах.....	415
9.6. Примеры исследования формальной кинетики технологических процессов.....	418
Приложения	429
Список литературы	451

5. Полный факторный эксперимент типа 2^k

Первый этап планирования эксперимента для получения линейной модели основан, как об этом говорилось выше, на варьировании факторов на двух уровнях. В этом случае, если число факторов известно, можно сразу найти число опытов, необходимое для реализации всех возможных сочетаний уровней факторов. Простая формула, которая для этого используется, уже приводилась ранее, и мы ее напомним: $N = 2^k$, где N — число опытов, k — число факторов, 2 — число уровней. В общем случае эксперимент, в котором реализуются все возможные сочетания уровней факторов, называется **полным факторным экспериментом**. Если число уровней каждого фактора равно двум, то имеем полный факторный эксперимент типа 2^2 .

Нетрудно написать все сочетания уровней в эксперименте с двумя факторами. Напомним, что в планировании эксперимента используются кодированные значения факторов: +1 и -1 (часто для простоты записи единицы опускают). Условия эксперимента можно записать в виде таблицы, где строки соответствуют различным опытам, а столбцы — значениям факторов. Будем называть такие таблицы **матрицами планирования эксперимента**.

Матрица планирования для двух факторов приведена в табл. 5.1.

Таблица 5.1

Матрица планирования эксперимента 2^2

Номер опыта	x_1	x_2	y	Номер опыта	x_1	x_2	y
1	-1	-1	y_1	3	-1	+1	y_3
2	+1	-1	y_2	4	+1	+1	y_4

Каждый столбец в матрице планирования называют вектор-столбцом, а каждую строку — вектор-строкой. Таким образом, в табл. 5.1 мы имеем два вектора-столбца независимых переменных и один вектор-столбец параметра оптимизации. То, что записано в этой таблице в алгебраической форме, можно изобразить геометрически.

Найдем в области определения факторов точку, соответствующую основному уровню, и проведем через нее новые

оси координат, параллельные осям натуральных значений факторов. Далее, выберем масштабы по новым осям так, чтобы интервал варьирования для каждого фактора равнялся единице. Тогда условия проведения опытов будут соответствовать вершинам квадрата, центром которого является основной уровень, а каждая сторона параллельна одной из осей координат и равна двум интервалам (рис. 5.1).

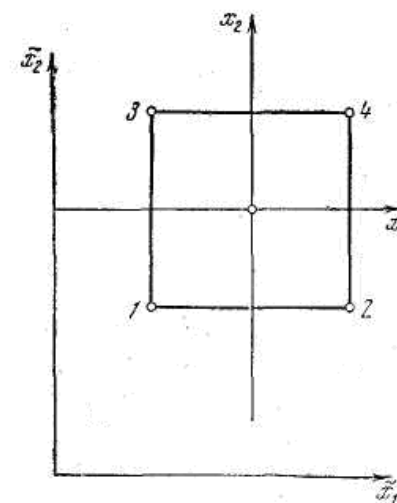


Рис. 5.1. Геометрическая интерпретация полного факторного эксперимента 2^2

Номера вершин квадрата соответствуют номерам опытов в матрице планирования. Площадь, ограниченная квадратом, называется **областью эксперимента**. Иногда удобнее считать областью эксперимента **площадь, ограниченную окружностью, описывающей квадрат**. В задачах интерполяции область эксперимента есть область предсказываемых значений y .

Запись матрицы планирования, особенно для многих факторов, громоздка. Для ее сокращения удобно ввести условные буквенные обозначения строк.

Это осуществляют следующим образом. Порядковый номер фактора ставится в соответствие строчной букве латинского алфавита: x_1 — a , x_2 — b , ... и т. д. Если теперь для строки матрицы планирования выписать латинские буквы только для факторов, находящихся на верхних уровнях, то условия опыта будут заданы однозначно. Опыт со всеми факторами на нижних уровнях условимся обозначать (1).

Матрица планирования вместе с принятыми буквенными обозначениями приведена в табл. 5.2.

Таблица 5.2

Матрица планирования эксперимента 2^2

Номер опыта	x_1	x_2	Буквенные обозначения строк	y
1	-1	-1	(I)	y_1
2	+1	-1	a	y_2
3	-1	+1	b	y_3
4	+1	+1	ab	y_4

Теперь вместо полной записи матрицы планирования можно пользоваться только буквенными обозначениями. Ниже приведена буквенная запись еще одного плана: c, b, a, abc, (I), bc, ac, ab. Матрица планирования приведена в табл. 5.3.

Таблица 5.3

Матрица планирования эксперимента 2^3

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	Буквенные обозначения строк	y
1	-1	-1	+1	c	y_1
2	-1	+1	-1	b	y_2
3	+1	-1	-1	a	y_3
4	+1	+1	+1	abc	y_4
5	-1	-1	-1	(I)	y_5
6	-1	+1	+1	bc	y_6
7	+1	-1	+1	ac	y_7
8	+1	+1	-1	ab	y_8

Таким образом мы построили полный факторный эксперимент 2^3 . Он имеет восемь опытов и включает все возможные комбинации уровней трех факторов.

Если для двух факторов все возможные комбинации уровней легко найти прямым перебором (или просто запомнить), то с ростом числа факторов возникает необходимость в некотором приеме построения матриц. Из многих возможных обычно используется три приема, основанных на переходе от матриц меньшей размерности к матрицам большей размерности.

Рассмотрим *первый*. При добавлении нового фактора каждая комбинация уровней исходного плана встречается дважды: в сочетании с нижним и верхним уровнями нового фактора. Отсюда естественно появляется прием: записать исходный план для одного уровня нового фактора, а затем повторить его для другого уровня. Вот как это выглядит при переходе от эксперимента 2^2 к 2^3 (табл. 5.4):

Таблица 5.4

Построение матрицы планирования эксперимента 2^3

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	y	Номер опыта	x_1	x_2	x_3	y
1	-	-	+	y_1	5	-	-	-	y_5
2	-	+	+	y_2	6	-	+	-	y_6
3	+	-	+	y_3	7	+	-	-	y_7
4	+	+	+	y_4	8	+	+	-	y_8

Этот прием распространяется на построение матриц любой размерности.

Рассмотрим *второй* прием. Для этого воспользуемся правилом перемножения столбцов матрицы. При построчном перемножении двух столбцов матрицы произведение единиц с одноименными знаками дает +1, а с разноименными — 1. Воспользовавшись этим правилом, получим для случая, который мы рассматриваем, вектор-столбец произведения x_1x_2 в исходном плане. Далее повторим еще раз исходный план, а у столбца произведений знаки поменяем на обратные.

Этот прием тоже можно перенести на построение матриц любой размерности, однако он сложнее, чем первый.

Третий прием основан на правиле чередования знаков. В первом столбце знаки меняются поочередно, во втором столбце они чередуются через два, в третьем — через 4, в четвертом — через 8 и т. д. по степеням двойки. Если в табл. 5.4 поменять местами столбцы для x_1 и x_2 , то получится нужная матрица.

По аналогии с полным факторным экспериментом 2^2 можно дать геометрическую интерпретацию полного факторного эксперимента 2^3 .

Геометрической интерпретацией полного факторного эксперимента 2^3 служит куб, координаты вершин которого задают условия опытов.

Если поместить центр куба в точку основного уровня факторов, а масштабы по осям выбрать так, чтобы интервал варьирования равнялся

единице, то получится куб, изображенный на рис. 5.2. Куб задает область эксперимента, а центр куба является ее центром.

К сожалению, мы не умеем рисовать картинки для числа факторов $k > 3$. Но фигура, задающая область эксперимента в многомерном пространстве, является некоторым аналогом куба. Будем называть эту фигуру **гиперкубом**.

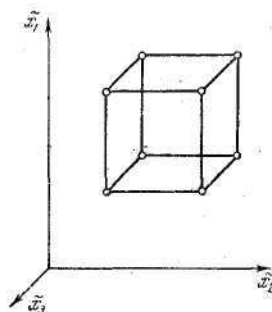


Рис. 5.2. Геометрическая интерпретация полного факторного эксперимента 2^3

5.1. Свойства полного факторного эксперимента типа 2^k

Мы строили матрицы планирования полных факторных экспериментов с факторами на двух уровнях. Теперь выясним, какими общими свойствами эти матрицы обладают независимо от числа факторов. Говоря о свойствах матриц, мы имеем в виду те из них, которые определяют качество модели. **Эксперимент планируется для того, чтобы получить модель, обладающую некоторыми оптимальными свойствами.** Это значит, что оценки коэффициентов модели должны быть наилучшими и что точность предсказания параметра оптимизации не должна зависеть от направления в факторном пространстве, ибо заранее неясно, куда предстоит двигаться в поисках оптимума.

Два свойства следуют непосредственно из построения матрицы.

Первое из них — **симметричность относительно центра эксперимента** — формулируется следующим образом: **алгебраическая сумма элементов вектор-столбца каждого фактора равна нулю**, или

$$\sum_{i=1}^N x_{ji} = 0,$$

где j — номер фактора, N — число опытов, $j = 1, 2, \dots, k$.

Второе свойство — так называемое **условие нормировки** — формулируется следующим образом: **сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу опытов**, или

$$\sum_{i=1}^N x_{ji}^2 = N.$$

Это следствие того, что значения факторов в матрице задаются +1 и -1.

Мы рассмотрели свойства отдельных столбцов матрицы планирования. Теперь остановимся на свойстве совокупности столбцов.

Сумма почленных произведений любых двух вектор-столбцов матрицы равна нулю, или

$$\sum_{i=1}^N x_{ji} x_{ui} = 0, \quad j \neq u, \quad j, u = 0, 1, 2, \dots, k.$$

Это **третье** свойство называется **ортогональностью матрицы планирования**.

Последнее, **четвертое** свойство называется **ротатабельностью**, т. е. **точки в матрице планирования подбираются так, что точность предсказания значений параметра оптимизации одинакова на равных расстояниях от центра эксперимента и не зависит от направления**.

Даны две матрицы планирования:

	x_1	x_2		x_1	x_2
	-	-		-	+
a)	+	-	б)	+	-
	-	+		-	+
	+	+		+	-

Осуществим проверку, как выполняются все три свойства для каждой из матриц.

Первое свойство

$$\sum_{i=1}^N x_{ji} = 0$$

выполняется для всех столбцов обеих матриц. Действительно, для первого столбца матрицы а) имеем

$$(-1) + (+1) + (-1) + (+1) = 0.$$

Аналогичный результат получается для всех других столбцов.

Второе свойство

$$\sum_{i=1}^N x_{ji}^2 = N$$

— также выполняется для обеих матриц.

Например, для того же столбца имеем

$$(-1)^2 + (+1)^2 + (-1)^2 + (+1)^2 = 4.$$

С третьим свойством, однако, дело обстоит иначе. Если для матрицы а) формула

$$\sum_{i=1}^N x_{ji}x_{ui} = 0, \quad j \neq u$$

выполняется, то в случае б) это не так. Действительно

$$(-1)(+1) + (+1)(-1) + (-1)(+1) + (+1)(-1) = -4 \neq 0.$$

5.2. Полный факторный эксперимент и математическая модель.

Вернемся к матрице 2² (табл. 5.2). Для движения к точке оптимума нам нужна линейная модель $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$.

Наша цель — найти по результатам эксперимента значения неизвестных коэффициентов модели.

До сих пор, говоря о линейной модели, мы не останавливались на важном вопросе о статистической оценке ее коэффициентов. Теперь необходимо сделать ряд замечаний по этому поводу.

Можно утверждать, что эксперимент проводится для проверки гипотезы о том, что линейная модель

$$\eta = \beta_0 + \beta_1x_1 + \beta_2x_2$$

адекватна. Греческие буквы использованы для обозначения «истинных» генеральных значений соответствующих неизвестных.

Эксперимент, содержащий конечное число опытов, позволяет только получить выборочные оценки для коэффициентов уравнения

$$y = b_0 + b_1x_1 + \dots + b_kx_k.$$

Их точность и надежность зависят от свойств выборки и нуждаются в статистической проверке. Осуществим вычисление оценок коэффициентов. Их можно вычислить, как мы знаем, по простой формуле

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^N x_{ji}y_i}{N}, \quad j = 0, 1, \dots, k,$$

Вспользуемся этой формулой для подсчета коэффициентов b_1 и b_2

$$b_1 = \frac{(-1)y_1 + (+1)y_2 + (-1)y_3 + (+1)y_4}{4},$$

$$b_2 = \frac{(-1)y_1 + (-1)y_2 + (+1)y_3 + (+1)y_4}{4}.$$

Видим, что благодаря кодированию факторов расчет коэффициентов превратился в простую арифметическую процедуру. Для подсчета коэффициента b_1 используется вектор-столбец x_1 , а для b_2 — столбец x_2 . Остается неясным, как найти b_0 . Если наше уравнение

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$$

справедливо, то оно верно и для средних арифметических значений переменных:

$$\bar{y} = b_0 + b_1\bar{x}_1 + b_2\bar{x}_2.$$

Но в силу свойства симметрии $x_1 = x_2 = 0$. Следовательно, $\bar{y} = b_0$. Мы показали, что b_0 есть среднее арифметическое значение параметра оптимизации. Чтобы его получить, необходимо сложить все y , и разделить на число опытов. Чтобы привести эту процедуру в соответствие с формулой для вычисления коэффициентов, в матрицу планирования удобно ввести вектор-столбец фиктивной переменной x_0 , которая принимает во всех опытах значение +1. Это было уже учтено в записи формулы, где j принимало значения от 0 до k .

Теперь у нас есть все необходимое, чтобы найти неизвестные коэффициенты линейной модели

$$y = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2.$$

Коэффициенты при независимых переменных указывают на силу влияния факторов. **Чем больше численная величина коэффициента, тем большее влияние оказывает фактор.** Если коэффициент имеет знак **плюс**, то с увеличением значения фактора параметр оптимизации **увеличивается**, а если **минус**, то **уменьшается**. Величина коэффициента соответствует вкладу данного фактора в величину параметра оптимизации при переходе фактора с нулевого уровня на верхний или нижний. Иногда удобно оценивать вклад фактора при переходе от нижнего к верхнему уровню. Вклад, определенный таким образом, называется **эффектом фактора** (иногда его называют **основным или главным эффектом**). Он численно равен удвоенному коэффициенту. Для качественных факторов, варьируемых на двух уровнях, основной уровень не имеет физического смысла. Поэтому понятие «эффект фактора» является здесь естественным.

Планируя эксперимент, на первом этапе мы стремимся получить линейную модель. Однако у нас нет гарантии, что в выбранных

интервалах варьирования процесс описывается линейной моделью. Существуют способы проверки пригодности линейной модели (*проверка адекватности*).

А если модель нелинейна, как количественно оценить нелинейность, пользуясь полным факторным экспериментом?

Один из часто встречающихся видов нелинейности связан с тем, что эффект одного фактора зависит от уровня, на котором находится другой фактор. В этом случае говорят, что *имеет место эффект взаимодействия двух факторов*. Полный факторный эксперимент позволяет количественно оценивать эффекты взаимодействия. Для этого надо, пользуясь правилом перемножения столбцов, получить столбец произведения двух факторов. При вычислении коэффициента, соответствующего эффекту взаимодействия, с новым вектор-столбцом можно обращаться так же, как с вектор-столбцом любого фактора. Для полного факторного эксперимента 2^2 матрица планирования с учетом эффекта взаимодействия представлена в табл. 5.5. Очень важно, что при добавлении столбцов эффектов взаимодействий все рассмотренные свойства матриц планирования сохраняются.

Таблица 5.5

Матрица планирования эксперимента 2^2 с эффектом взаимодействия

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y	Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	+1	+1	+1	+1	y_1	3	+1	-1	-1	+1	y_3
2	+1	-1	+1	-1	y_2	4	+1	+1	-1	-1	y_4

Теперь модель выглядит следующим образом:

$$y = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2.$$

Коэффициент b_{12} вычисляется обычным путем

$$b_{12} = \frac{(+1)y_1 + (-1)y_3 + (+1)y_2 + (-1)y_4}{4}.$$

Столбцы x_1 и x_2 задают планирование — по ним непосредственно определяются условия опытов, а столбцы x_0 и x_1x_2 служат только для расчета. Следует обратить внимание на то, что при оптимизации мы стремимся сделать эффекты взаимодействия возможно меньшими. В задачах интерполяции, напротив, их выявление часто важно. Покажем на примере еще один способ расчета коэффициентов, известный под названием метода Йетса. Операции по расчету приведены в табл. 5.6.

Таблица 5.6

Расчет коэффициентов регрессии по методу Йетса

1	2	3	1	2	3
y_1	$y_1 + y_2$	$y_1 + y_2 + y_3 + y_4$	y_3	$y_2 - y_1$	$y_3 + y_4 - y_1 - y_2$
y_2	$y_3 + y_4$	$y_2 - y_1 + y_4 - y_3$	y_4	$y_4 - y_3$	$y_4 - y_3 - y_2 + y_1$

Слева в этой таблице выписан вектор-столбец значений параметра оптимизаций. Первая операция (2-й столбец) состоит в попарном сложении и вычитании этих значений, причем верхнее число вычитается из нижнего. Вторая операция (3-й столбец) состоит в том же действии, но уже с числами второго столбца.

Если теперь числа, оказавшиеся в третьем столбце, разделить на число опытов, то получим значения коэффициентов. Операции сложения и вычитания повторяются столько раз, сколько имеется факторов.

Рассмотрим пример.

Пример 4. В табл. 5.7 приводятся результаты эксперимента, а под ней расчет коэффициентов.

Таблица 5.7

Расчетная матрица и результаты *

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	Буквенные обозначения строк	y
1	+1	-1	-1	+1	(I)	95
2	+1	+1	-1	-1	a	90
3	+1	-1	+1	-1	b	85
4	+1	+1	+1	+1	ab	82

* См. пример 3.

95	185	352	$b_0 = 88,0$
90	167	-8	$b_1 = -2,0$
85	-5	-18	$b_2 = -4,5$
82	-3	2	$b_{12} = 0,5$

Следует обратить внимание на то, что порядок коэффициентов в последнем столбце соответствует порядку буквенных обозначений матрицы планирования. Так, строке (I) соответствует b_0 , строке (a) — b_1 и т. д. Порядок буквенных обозначений зависит от порядка опытов, который должен быть фиксированным.

С ростом числа факторов число возможных взаимодействий быстро растет. Мы рассмотрели самый простой случай, когда имелось

одно взаимодействие. Обратимся теперь к полному факторному эксперименту 2^3 .

Матрица планирования 2^3 с учетом всех возможных взаимодействий приведена в табл. 5.8.

Таблица 5.8

Полный факторный эксперимент 2^3

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	y_1
2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	y_2
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	y_3
4	+1	+1	+1	-1	+1	+1	+1	+1	y_4
5	+1	-1	-1	+1	+1	+1	+1	-1	y_5
6	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	y_6
7	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	y_7
8	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	y_8

При построении столбца эффекта взаимодействия $x_1x_2x_3$ возникают некоторые затруднения. Он получается перемножением всех трех столбцов и называется эффектом взаимодействия второго порядка. Эффект взаимодействия двух факторов называется эффектом взаимодействия первого порядка. Вообще **эффект взаимодействия максимального порядка в полном факторном эксперименте имеет порядок, на единицу меньший числа факторов**. Довольно часто применяются синонимы: парные эффекты взаимодействия (x_1x_2 , x_2x_3 , ...), тройные ($x_1x_2x_3$, $x_2x_3x_4$, ...) и т. д.

Полное число всех возможных эффектов, включая b_0 , линейные эффекты и взаимодействия всех порядков, равно числу опытов полного факторного эксперимента. Чтобы найти число возможных взаимодействий некоторого порядка, можно воспользоваться обычной формулой числа сочетаний

$$C_k^m = \frac{k!}{m!(k-m)!},$$

где k — число факторов, m — число элементов во взаимодействии. Так, для плана 2^4 число парных взаимодействий равно шести

$$C_2^4 = \frac{4!}{2!2!} = 6.$$

Поясним физический смысл эффекта взаимодействия следующим примером. Пусть на некоторый химический процесс влияют два фактора: температура и время реакции.

В области низких температур увеличение времени увеличивает выход продукта. При переходе в область высоких температур эта закономерность нарушается. Здесь, напротив, необходимо уменьшать время реакции. Это и есть проявление эффекта взаимодействия.

Ортогональность матрицы планирования позволяет получить независимые друг от друга оценки коэффициентов. Это означает, что величина любого коэффициента не зависит от того, какие величины имеют другие коэффициенты.

Однако *сформулированные выше утверждения справедливы лишь в том случае, если модель включает только линейные эффекты и эффекты взаимодействия*. Между тем существенными могут оказаться коэффициенты при квадратах факторов, их кубах и т. п. Так, для случая существенных квадратичных членов в двухфакторном эксперименте модель можно записать как:

$$y = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2.$$

Какую информацию о квадратичных членах можно извлечь из полного факторного эксперимента?

Попытка построения вектор-столбцов для x_1^2 и x_2^2 приводит к получению единичных столбцов, совпадающих друг с другом и со столбцом x_0 . Так как эти столбцы неразличимы, то нельзя доказать, за счет чего получилась величина b_0 . Она включает значение свободного члена и вклады квадратичных членов. В этом случае говорят, что имеет место смешанная оценка. Это символически записывается следующим образом:

$$b_0 \rightarrow \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_{jj},$$

где b_0 — вычисленный нами коэффициент, а греческими буквами, как принято в статистике, обозначены неизвестные истинные значения свободного члена (β_0) и квадратичных коэффициентов (β_{jj}). Если бы мы сделали сколь угодно много опытов, то в пределе получили бы истинные значения коэффициентов. На практике реализуются лишь малые выборки, по которым вычисляются оценки истинных коэффициентов.

По отношению к квадратичной модели для двух факторов получается такая система смешивания:

$$b_0 \rightarrow \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_{jj}, \quad b_2 \rightarrow \beta_2, \quad b_1 \rightarrow \beta_1, \quad b_{12} \rightarrow \beta_{12}.$$

Следовательно, оценки всех коэффициентов, кроме b_0 , не смешаны.

Число опытов в полном факторном эксперименте превышает число коэффициентов линейной модели, причем тем больше, чем больше факторов. Разность между числом опытов и числом коэффициентов во многих случаях оказывается очень велика, и возникает естественное желание сократить число необходимых опытов.

Подведем некоторый итог сказанному.

Первой серии опытов предшествует этап неформализованных решений, направленных на выбор локальной области факторного пространства. При этом оцениваются границы областей определения факторов, задаваемые либо принципиальными ограничениями, либо технико-экономическими соображениями, либо конкретными условиями проведения процесса. Установление области связано с тщательным анализом априорной информации об изменении параметра оптимизации и о кривизне поверхности отклика.

Локальная область проведения эксперимента выбирается в два этапа: определение основного уровня и интервалов варьирования. Основной (нулевой) уровень — многомерная точка в факторном пространстве, задаваемая комбинацией уровней факторов. Построение плана эксперимента сводится к выбору экспериментальных точек, симметричных относительно основного уровня. При установлении основного уровня приходится рассматривать различные ситуации. Ситуации задаются информацией о наилучших точках и определяют решения.

Следующий этап — выбор интервалов варьирования факторов. Для каждого фактора определяются два уровня, на которых он варьируется в эксперименте. Уровни факторов изображаются двумя точками на координатной оси, симметричными относительно основного уровня. Один из уровней — верхний, другой — нижний. Интервалом варьирования факторов называется некоторое число (свое для каждого фактора), прибавление которого к основному уровню дает верхний, а вычитание — нижний уровень.

Для упрощения записи условий эксперимента и обработки экспериментальных данных масштабы по осям задают так, чтобы верхний уровень соответствовал +1, нижний — -1, основной — нулю.

На выбор интервалов варьирования накладываются ограничения снизу (он не может быть меньше ошибки фиксирования уровня фактора) и сверху (верхний или нижний уровни не должны выходить за область определения).

В задачах оптимизации выбирают подобласть, которая давала бы возможность реализовать шаговую процедуру движения к оптимуму. В

задачах интерполяции интервал варьирования охватывает всю описываемую область.

При определении интервала варьирования используется информация о точности, с которой фиксируются значения факторов, о кривизне поверхности отклика и о диапазоне изменения параметра оптимизации. Для принятых градаций этих признаков существует 27 различных ситуаций. Низкая точность фиксирования факторов определяет типичное решение — широкий интервал варьирования. Для средней точности характерен выбор среднего интервала. Высокая точность обычно приводит либо к узкому; либо к среднему интервалам.

Эксперимент, в котором реализуются все возможные сочетания уровней, называется полным факторным экспериментом. Если число уровней равно двум, то это полный факторный эксперимент типа 2^k . Условия эксперимента представляют в виде таблицы — матрицы планирования, где строки соответствуют различным опытам, а столбцы — значениям факторов. Геометрическая интерпретация полных факторных планов: план 2^2 задается координатами вершин квадрата, план 2^3 — координатами вершин куба, при $k > 3$ — координатами вершин гиперкуба.

Полный факторный эксперимент типа 2^k обладает свойствами симметричности, нормировки, ортогональности, ротатабельности (для линейной модели).

Коэффициенты, вычисленные по результатам эксперимента, указывают на силу влияния факторов. Эффект фактора численно равен удвоенному коэффициенту. В тех случаях, когда эффект одного фактора зависит от уровня, на котором находится другой фактор, говорят о наличии эффекта взаимодействия двух факторов. Для его количественной оценки получают столбец произведений этих факторов и обращаются с ним как с вектор-столбцом любого фактора.

Из полного факторного эксперимента нельзя извлечь информацию о квадратичных членах. Вектор-столбцы для квадратичных членов совпадают друг с другом и со столбцом x_0 . Величина свободного члена b_0 включает вклады квадратичных членов, получается смешанная оценка. Оценки остальных коэффициентов не смешаны.

В полном факторном эксперименте разность между числом опытов и числом коэффициентов велика. Возникает проблема уменьшения числа опытов.

Рассмотрим ряд примеров планирования многофакторного эксперимента, предложенные К.Денцелом.

5.3. Двухфакторный эксперимент с двумя уровнями для каждого фактора

Изучение эффектов варьирования одного фактора обычно только прелюдия к исследованию эффектов варьирования множества факторов. Некоторого обобщения можно достичь, повторяя вариации единственного фактора, если при этом уровни всех остальных факторов остаются фиксированными. Такая практика повсеместно оправдывается, поскольку, как говорят, «с чего-то нужно начинать».

Исследователи, сталкивающиеся с научными задачами, накопили значительный опыт успешного выбора и дальнейшего тщательного изучения наиболее важного фактора. Однако часто у них возникает потребность в изучении совместного воздействия двух или более независимых переменных или по крайней мере отклика на вариации одного фактора при более чем одном наборе условий. Если один из двух катализаторов определенно оказался лучше другого для крекинга некоторого сорта сырой нефти, то экспериментаторы захотят узнать, а не лучше ли он также и для крекинга другого сырья, и если да, то в какой степени. В этом случае они сталкиваются с простейшим двухфакторным экспериментом типа 2^2 .

Часто различают факторы с качественными уровнями, подобные двум только что упоминавшимся, и количественные факторы (такие, как давление, температура, концентрация), но в данный момент для нас это различие несущественно.

Примечание. При изложении материала этого раздела и некоторых других нами будут использоваться обозначения в формулах несколько отличные от ранее принятых. Объяснения к этим обозначениям будут приводиться в тексте по мере их (обозначений) появления.

5.3.1. Факторное представление

Для того чтобы понять основные идеи, предположим, что варьировались два фактора A и B и были получены следующие результаты (отклики y):

		B	
		0	1
A	0	66	82
	1	44	60

или в общем виде

		B	
		0	1
A	0	y_{11}	y_{12}
	1	y_{21}	y_{22}

Данные, приведенные сверху, представляют собой идеальный случай. Переход A с нижнего уровня на верхний привел к одинаковым изменениям отклика ($44-60=60-82=22$) на *обоих* уровнях B . Переход B с нижнего уровня на верхний также привел к одинаковым изменениям отклика (+16) на *обоих* уровнях A . Можно говорить, следовательно, об **аддитивности** эффектов факторов A и B . В общем виде эту ситуацию можно представить, записав

$$Y_{ij} = b_0 + b_1 x_{1i} + b_2 x_{2j}, \tag{5.1}$$

- где $x_{11}=0$ соответствует A на нижнем уровне;
- $x_{12}=1$ соответствует A на верхнем уровне;
- $x_{21}=0$ соответствует B на нижнем уровне;
- $x_{22}=1$ соответствует B на верхнем уровне;
- i указывает уровень A , $i=1, 2$;
- j указывает уровень B , $j=1, 2$;
- b_0 равен Y_{11} , т. е. величине выхода на нижних уровнях A и B ;
- b_1 — приращение Y , вызванное изменением уровня A , т. е. эффект варьирования A ;
- b_2 — приращение Y , вызванное изменением уровня B , т. е. эффект варьирования B .

Для конкретных данных, приведенных выше, уравнение принимает вид

$$Y_{ij} = 66 - 22x_{1i} + 16x_{2j}.$$

Для обозначения рассчитанных по модели, предсказанных или регрессионных величин будем использовать прописную букву Y , а для наблюдаемых значений — строчную букву y . Переменные, подобные x_1 и x_2 в уравнении (5.1), которые принимают только два значения (в данном случае 0 и 1), называются **индикаторными** (или **кодированными**).

Обычно используют, как мы знаем, симметричные относительно нуля значения переменных, полагая $x_1 = -1$ на нижнем уровне A и $x_1 = +1$ на верхнем уровне A . (Аналогично поступаем для x_2 .) Эффекты при этом оцениваются через отклонения от общего среднего, которое в наших примерах будем обозначать $(y..)$, всех результатов.

Половинные эффекты будем обозначать теми же буквами, что и соответствующие факторы. Крышечки показывают, что это не истинные значения, а только оценки. В этом случае аппроксимирующее уравнение записывается как

$$Y_{ij} = y_{..} + \hat{A}x_{1i} + \hat{B}x_{2j}, \quad (5.2)$$

для приведенных ранее данных

$$Y_{ij} = 63 - 11x_{1i} + 8x_{2j}. \quad (5.3)$$

Все три константы в (5.3) вычисляются следующим образом:

$$y_{..} = \frac{1}{4} [y_{11} + y_{21} + y_{12} + y_{22}] = \frac{1}{4} [66 + 44 + 82 + 60] = 63;$$

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \frac{1}{4} [(y_{22} + y_{21}) - (y_{12} + y_{11})]^{1)} = \\ &= \frac{1}{4} [(60 + 44) - (82 + 66)] = \frac{1}{4} (104 - 148) = -\frac{44}{4} = -11; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{B} &= \frac{1}{4} [(y_{12} + y_{22}) - (y_{11} + y_{21})]^{1)} = \\ &= \frac{1}{4} [(82 + 60) - (66 + 44)] = \frac{1}{4} (142 - 110) = \frac{32}{4} = 8. \end{aligned}$$

В более компактной табличной форме записи имеем

		B		Среднее	Эффект A
		0	1	по строке	
A	0	66	82	74	+11
	1	44	60	52	-11
Среднее по столбцу		55	71	63	
Эффект B		-8 ¹⁾	+8		

¹⁾ $B = 55 - 63 = -8$.

¹⁾ Эти выражения представляют собой первые примеры контрастов, т. е. линейных функций переменных (здесь это y_1, y_2, y_3, y_4) с коэффициентами, сумма которых равна нулю. В данном случае $1 + 1 - 1 - 1 = 0$. Все эффекты оцениваются через контрасты.

Соотношение (5.3) можно записать третьим способом, который используется, если каждый фактор варьируется более чем на двух уровнях:

$$Y_{ij} = y_{..} + \hat{\alpha}_i + \hat{\beta}_j, \quad (5.4)$$

где индекс i уровней фактора A , а также индекс j уровней фактора B могут принимать значения $1, 2, \dots$. Предположим теперь, что был реализован план 2^2 и получены следующие результаты:

		B		$\hat{\alpha}_i$
		0	1	
A	0	67	81	+11
	1	43	61	-11
		$\hat{\beta}_j$	-8	+8

Заметим, что $y_{..}$, \hat{A} и \hat{B} для этих данных и для предыдущих совпадают. Но теперь значения в ячейках таблицы отличаются от приведенных выше на ± 1 . Можно представить наблюдения в виде четырех составляющих следующим образом:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 67 & 81 \\ 43 & 61 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 63 & 63 \\ 63 & 63 \end{bmatrix} - 11 \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ +1 & +1 \end{bmatrix} + \\ &+ 8 \begin{bmatrix} -1 & +1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix} + 1 \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$y_{ij} = y_{..} + \hat{A}x_{1i} + \hat{B}x_{2j} + \hat{AB}x_{1i}x_{2j}. \quad (5.6)$$

Следовательно, эффекты \hat{A} и \hat{B} не дают точного представления о четырех наблюдаемых значениях y . Если при этом $\sigma(y)$ равно приблизительно 1, то расхождение обычно объясняют ошибками.

Пусть $\sigma(y)$ равно 0,1; тогда соответствие между моделью и наблюдениями оказывается плохим. При этом говорят, что факторы A и B взаимодействуют, их нельзя более считать в точности аддитивными. Однако можно добавить в уравнение четвертый член, который, как правило, должен быть второго порядка, и не может иметь вид x_1^2 или x_2^2 (они не имеют здесь смысла). Следовательно, этим членом должен быть Sx_1x_2 . Новую константу целесообразно обозначить через \hat{AB} ,

тогда новый член в уравнении будет иметь вид $\hat{AB}x_{1i}x_{2j}$. Этот член называется двухфакторным (парным) взаимодействием. В рассматриваемом примере $\hat{AB} = 1$. Эту величину можно вычислить непосредственно по данным, используя матрицу в конце формулы (5.5):

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \widehat{AB} &= \frac{1}{4} (y_{11} - y_{21} - y_{12} + y_{22}) = \\ &= \frac{1}{4} [(y_{22} - y_{12}) - (y_{21} - y_{11})], \end{aligned}$$

при этом вторая форма записи определяет \widehat{AB} через разность между эффектами A на верхнем и нижнем уровнях B . Название «двухфакторное (парное) взаимодействие» иногда будет использоваться далее в сокращенной форме 2 ф. в. Выражение (5.4) принимает теперь вид

$$Y_{ij} = y_{..} + \hat{\alpha}_i + \hat{\beta}_j + \hat{\gamma}_{ij}, \quad (5.7)$$

где первые три члена совпадают с соответствующими членами

(5.4). Вообще говоря, эффект взаимодействия $\hat{\gamma}_{ij}$ широко используется, но вряд ли он имеет смысл в плане 2^2 , поскольку при четырех комбинациях i, j для него остается только одна степень свободы (с. с.)

Введем еще два способа описания возможных четырех вариантов условий эксперимента в плане 2^2 и представим их в табл. 5.9.

Таблица 5.9

Четыре способа описания вариантов условий эксперимента в факторном плане 2×2 , или 2^{2+0}

Номер опыта	Способы описания						Отклик
	прописными буквами	цифрами		симметричными координатами		строчными буквами	
		A	B	x_1	x_2		
1	A_0B_0	0	0	-1	-1	(1)	y_1
2	A_1B_0	1	0	+1	-1	a	y_2
3	A_0B_1	0	1	-1	+1	b	y_3
4	A_1B_1	1	1	+1	+1	ab	y_4

Четыре формы представления планов — прописными буквами, цифрами, симметричными координатами и строчными буквами — служат для описания экспериментальных условий, а не откликов. При описании прописными буквами уровни факторов обозначаются индексами; в цифровой форме используется пара цифр 00, 01 и т. д., являющихся индексами прописных букв, при описании симметричными координатами уровнями x_1 и x_2 могут быть +1 или -1.

Описание строчными буквами является наиболее компактным, поскольку при этом отсутствие соответствующей буквы указывает на нижний уровень фактора, а ее наличие — на верхний уровень.

Возвращаясь к нашему конкретному примеру, заметим, что аппроксимирующее уравнение, построенное по приведенным четырем откликам, в факторном представлении будет иметь вид

$$Y_{ij} = 63 - 11x_{1i} + 8x_{2j} + 1,0x_{1i}x_{2j}. \quad (5.8)$$

5.3.2. Алгоритм Йетса вычисления эффектов в факторном эксперименте типа 2^2

Начнем с простого случая 2^1 , иначе говоря, *одно*-факторного эксперимента с фактором на двух уровнях, и рассмотрим табл. 5.10. Условия испытаний обозначим через (1) и a , а результаты через y_1 и y_2 . В столбцах T и (A) показано, как нужно обрабатывать наблюдения для получения удвоенного среднего и удвоенного эффекта A .

Таблица 5.10

Таблица знаков и алгоритм Йетса для плана 2^1

Обозначение опыта	Наблюдение	$T=2y$	$(A)=2\bar{A}$	Наблюдение	Столбец 1	Название эффекта
(1)	y_1	+1	-1	y_1	$y_2 + y_1$	T
a	y_2	+1	+1	y_2	$y_2 - y_1$	(A)

Сначала пара наблюдений складывается, а затем y_1 вычитается из y_2 . Для получения констант уравнения разделим полученные значения на 2^1 . Аппроксимирующее уравнение будет иметь вид

$$Y = y_{..} + \bar{A}x_1,$$

где x_i индикаторная переменная, принимающая значение -1 для A на нижнем уровне и +1 для A на верхнем уровне. Индекс i здесь опущен. В случае плана 2^2 мы также оперируем с парами чисел. Из табл. 5.11 видно, что попарное сложение результатов наблюдений исключает эффект фактора A .

Таблица 5.11

Первая стадия вычисления факторных эффектов для плана 2^2 с помощью алгоритма Йетса

Обозначение опыта	Столбец 1	Название суммы или разности
(1)	$a+(1)$	Сумма при B на нижнем уровне
a	$ab+b$	Сумма при B на верхнем уровне
b	$a-(1)$	Частный эффект A при B на нижнем уровне равняется A_1
ab	$ab-b$	Частный эффект A при B на верхнем уровне равняется A_2

Эти суммы приведены в первых двух строках столбца 1. Разности, записанные в следующих двух строках, позволяют оценить частные эффекты A на нижнем и верхнем уровнях B . Из третьего столбца видно, как должны быть скомбинированы элементы столбца 1 для получения искомого оценок (умноженных на 2^2). Складывая попарно элементы столбца 1, получаем T (общую сумму) и (A) —контраст-сумму, равную $4\hat{A}$.

Они приведены в первых двух строках столбца 2 табл. 5.12.

Таблица 5.12

Полная схема вычисления факторных эффектов в плане 2^2 с помощью алгоритма Йетса

Обозначение опыта	Столбец 1	Столбец 2	Название эффекта
(1)	$a+(1)$	$ab+b+a+(1)$	$T=4y_{..}$
a	$ab+b$	$ab-b+a-(1)$	$(A)=4\hat{A}^1$
b	$a-(1)$	$ab+b-a-(1)$	$(B)=4\hat{B}$
ab	$ab-b$	$ab-b-a+(1)$	$(AB)=4\hat{AB}$

¹ Символ (A) будет далее использоваться для обозначения суммарного эффекта фактора A . Как указывалось в тексте, он называется контраст-суммой и равен $2^n A$.

Также видно, что разность между суммами при B на верхнем и нижнем уровнях определяет суммарный эффект $B(=4\hat{B})$, а разность двух значений частных эффектов A дает $4\hat{AB}$.

Такая подробная запись для рассматриваемого простого случая может показаться излишней, но при $n=3$ и более этот алгоритм исключительно компактен. Примеры вычислений при $n=3$ будут даны ниже. В табл. 5.13 приведены конкретные данные, на основе которых проведены все вычисления согласно табл. 5.12. В последнем столбце содержатся данные, которые можно использовать для упражнения. [В этой и во многих последующих таблицах через (0), (1), (2) и т. д. обозначены столбцы 0, 1, 2 и т. д.]

Таблица 5.13

Пример вычислений для плана 2^2

Обозначение опыта	(0)	(1)	(2)	(3)	(4)	Наблюдения (упражнение)
	наблюдения			(2) : 4	название эффекта	
(1)	67	110	252	63	$y_{..}$	11
a	43	142	-44	-11	A	11
b	81	-24	32	+8	B	35
ab	61	-20	4	+1	AB	51

Применяя обратный алгоритм Йетса к множеству эффектов и полагая $AB=0$, можно определить, насколько хорошо уравнение без члена взаимодействия аппроксимирует экспериментальные данные. Наиболее просто это осуществляется путем записи эффектов в обратном порядке, выполнения того же набора сложений и вычитаний и считыванием предсказанных значений в порядке, обратном обычному. Этот алгоритм приведен в табл. 5.14.

Таблица 5.14

Обратный алгоритм Йетса вычисления предсказанных значений по эффектам

Эффект	0	(1)	(2)=Y	Обозначение опыта	y	d _y =y-Y
\widehat{AB}	0	8	60	\widehat{ab}	61	1
\widehat{B}	8	52	82	\widehat{b}	81	-1
\widehat{A}	-11	8	44	\widehat{a}	43	-1
$y_{..}$	63	74	66	$\widehat{(1)}$	67	1

Остатки $d_y=y-Y$ должны совпадать и по величине, и по знаку с (\widehat{AB}) , поскольку три параметра оцениваются по четырем наблюдениям. Известно, что введение члена взаимодействия в аппроксимирующее уравнение в этом случае даст точную аппроксимацию. Поэтому четыре остатка имеют только одну степень свободы и каждый из них по отдельности не измеряет неточность аппроксимации аддитивной моделью.

5.3.3. Интерпретация факторных экспериментов при наличии взаимодействий

Анализируя факторное представление плана 2^2 в виде (5.8), можно предположить, что последний член, имеющий значительно меньший коэффициент по сравнению с любым из предшествующих, следует отбросить. Другими словами, уравнение, включающее только аддитивные линейные эффекты, представляет все наблюдения с остатками ± 1 . Еще раз следует подчеркнуть, что два частных эффекта $A: A_1$ и $A_2, -24$ и -20 , в некоторых ситуациях могут значительно отличаться друг от друга. Если средняя случайная ошибка наблюдений равна 0,1 и экспериментатор имеет физическую модель, предполагающую аддитивность эффектов A во всей области изменения фактора B , то полученных результатов достаточно, чтобы эту модель забраковать.

Рассмотренный пример слишком прост и искусственен, чтобы он был интересен в дальнейшем. Но, с другой стороны, он достаточно нагляден, чтобы предостеречь от ошибок. Многие экспериментаторы, использующие описания с линейными эффектами и взаимодействиями, не понимают, что незначительное на первый взгляд взаимодействие может иметь самые серьезные последствия.

Обозначив отношение двух оценок частных эффектов $\widehat{A}_1/\widehat{A}_2$ через r , а отношение оценки эффекта взаимодействия к среднему линейному эффекту \widehat{AB}/\widehat{A} через f , будем иметь

$$r = \frac{1-f}{1+f}$$

или, если

$$f = \frac{p}{q}, \text{ то } r = \frac{q-p}{q+p}.$$

(Эта формула остается справедливой независимо от того, какое отношение понимается под r , а какое под f .) Очевидно, что если $f=1/2$, то $r=1/3$. Следовательно, если при этом A значимым, а AB нет, то это значит игнорировать тот факт, вытекающий из имеющихся данных, что на самом деле частный эффект A_1 составляет лишь $1/3 A_2$.

Если взаимодействие равно по величине линейному эффекту, то $f=1$ и $r=0$. Это означает, что A не имеет эффекта на одном уровне B , а весь его эффект (т. е. удвоенное среднее A) проявляется на другом уровне B .

Если двухфакторное взаимодействие (между двумя двухуровневыми факторами) близко по величине к обоим главным эффектам, то можно предложить следующий способ интерпретации имеющейся ситуации. Предположим, что $-A=B=AB=1$. Тогда, пользуясь обратным алгоритмом Йетса, находим средние отклики:

$$A \begin{matrix} & B \\ \begin{matrix} 1 & 1 \\ -3 & 1 \end{matrix} \end{matrix} \text{ со средним } 0$$

или

$$A \begin{matrix} & B \\ \begin{matrix} 21 & 21 \\ 17 & 21 \end{matrix} \end{matrix} \text{ со средним } 20.$$

Здесь только один контраст $[(1)+b+ab-3a]$ (а не три). (Напомним, что контраст представляет собой линейную функцию некоторых переменных, обычно откликов y_i , вида $\sum_i c_i y_i$, где $\sum_i c_i = 0$, а c_i — известные константы).

Эту ситуацию можно описать так: «Условие a неблагоприятно (или благоприятно), а три другие комбинации уровней A и B дают

равноценные результаты». Подобная ситуация возникла в классическом эксперименте 2^5 Йетса для бобовых культур. В его обозначениях — $S = K = SK$ и все три эффекта были значимыми. Может оказаться, что все три эффекта по отдельности незначимы, а приведенный выше контраст тем не менее мог бы быть значительным.

Сделаем некоторые выводы.

Если обнаруживаются взаимодействия, приближающиеся по величине к одному или более главным эффектам составляющих их факторов, следует проверить совместное воздействие эффектов и 2 ф. в., используя обратный алгоритм Йетса. Иногда оказывается, что отклики в точках, расположенных в некоторой части факторного пространства, очень большие (или очень маленькие), тогда как значения откликов в других точках неразличимы. Общее правило таково: *если взаимодействие составляет $1/3$ или более главного эффекта, не следует выражать результаты с помощью главных эффектов и взаимодействий*. С точки зрения статистических моделей взаимодействия свидетельствуют только о том, что аддитивная модель не работает. Работоспособную же модель можно иногда найти, возвращаясь к анализу данных или значений, получаемых с помощью построенной модели. Взаимодействия при этом отражают только неточность аппроксимации; они не что иное, как остатки при описании аддитивной моделью. Не всегда можно уверенно сказать, как нужно поступать в случае плана 2^2 , поскольку взаимодействие проявляется здесь во всех четырех ячейках плана.

5.4. Двухфакторный эксперимент с тремя уровнями для каждого фактора

Следующий шаг в направлении расширения представления о многофакторных планах приводит к плану 3×3 , т. е. 3^2 . Это дает возможность обсудить еще некоторые аспекты экспериментирования и интерпретации результатов экспериментов. (План 3×2 слишком близок к 2^2 , поэтому специально рассматривать его не будем.)

План 2^2 используется при линейной аппроксимации, хорошо знакомой прикладникам-математикам, физикам и инженерам, которые привыкли использовать линейные модели для описания различных функций. План типа 3^2 служит для построения *моделей второго порядка*. Во многих случаях, если даже три уровня фактора не являются точками упорядоченного континуума, исследователю необходимо изучать одновременно все три уровня. Например, есть три основных источника бобов кофе и (по крайней мере) три способа их приготовления, и любое ограничение числа уровней варьирования

приводит к задержке того момента, когда можно было бы говорить о полезных результатах.

Специалист-статистик, вероятно, порекомендует в случае применения плана 3^2 дублировать его, и по возможности большее число раз, чтобы получить несмещенный и достаточно мощный критерий значимости. Если данные можно собрать быстро или предполагается их использование при принятии весьма важного решения, то экспериментатор это требование удовлетворяет. Во многих случаях, однако, такие рекомендации неосуществимы. Так, национальные данные по загрязнению воздуха собирались в течение трех лет; они группируются по мелким, средним и крупным районам и образуют, следовательно, эксперимент 3^2 без повторений. Ниже приведены примеры тщательно рандомизированных многократно повторяемых серий по 9 опытов и показана их практическая целесообразность. Для каждого случая описаны способы получения достоверных выводов.

5.4.1. Пример, когда уровни обоих факторов выражаются численно

Факторы, которые выражаются численно, называются непрерывными (при этом подразумевается, что их уровни непрерывны) или количественными. Примерами непрерывных факторов в технике являются температуры, давления, концентрации ингредиентов, если они могут изменяться независимо. Такие факторы обычно устанавливаются на уровнях, симметричных по отношению к среднему. Предположим, что поверхность отклика над плоскостью x_1 — x_2 квадратичная и описывается аналитическим выражением вида

$$\eta = \mu + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2. \quad (5.9)$$

Введем еще одно слагаемое, соответствующее случайной ошибке, которая предполагается нормальной с нулевым средним и дисперсией σ^2 , т. е. $N(0, \sigma^2)$, причем ошибки различных наблюдений предполагаются некоррелированными. Для наблюдаемых значений y_{ijk} получаем

$$y_{ijk} = \eta_{ij} + e_{ijk}, \quad (5.10)$$

где $i=1, 2, 3$ соответствует уровням x_1 , j — уровням x_2 , а k — индекс повторного наблюдения на уровнях x_{1i} , x_{2j} . Очевидно, что в данном случае требуется оценить шесть параметров. Для проверки качества модели остается тогда только три степени свободы.

Полное уравнение второго порядка является моделью, которая вряд ли может быть получена на основе знания физики явления. 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 недостатка при использовании плана 3^2 для оценки коэффициентов полного квадратичного уравнения. Наиболее серьезный из них может быть пояснен с помощью трех искусственных планов типа 3^2 , представленных на рис. 5.3.

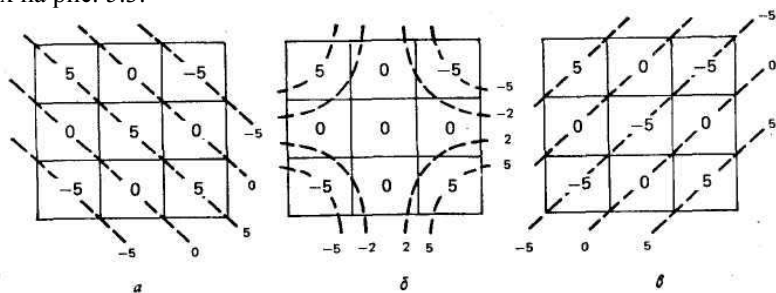


Рис. 5.3. Три примера планов 3^2 , когда независимые переменные непрерывны.

Цифры в ячейках указывают значения откликов. Во всех трех случаях члены $\beta_{12}x_1x_2$ 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. Для знающего алгебру очевидно, что рис. 5.3, а соответствует большим отрицательным значениям β_{11} и β_{22} , а 5.3, в — большим положительным значениям тех же коэффициентов. Для рис. 5.3, б 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. Контуры 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.

Идея рототабельности планов второго порядка изложена ранее и здесь она не будет обсуждаться. Мы возвращаемся, таким образом, к планам 3^2 .

Чтобы вывести выражения для оценок коэффициентов уравнения (5.9), достаточно знания элементарной аналитической геометрии. Сначала рассмотрим одномерный случай

$$Y = a + bx + cx^2 \quad (5.11)$$

с симметричными уровнями независимой переменной x , показанными на рис. 5.3.

В данном случае нет необходимости пользоваться методом наименьших квадратов; достаточно подставить три наблюдаемых значения y_1 , y_2 и y_3 в уравнение (5.11) и вычислить три искомые оценки:

$$\begin{aligned} a &= y_2, & b &= \frac{1}{2}(y_3 - y_1), \\ c &= \frac{1}{2}(y_1 - 2y_2 + y_3) = \frac{1}{2}(y_1 + y_3) - y_2 = \\ &= \frac{1}{2}[(y_1 - y_2) - (y_2 - y_3)]. \end{aligned} \quad (5.12)$$

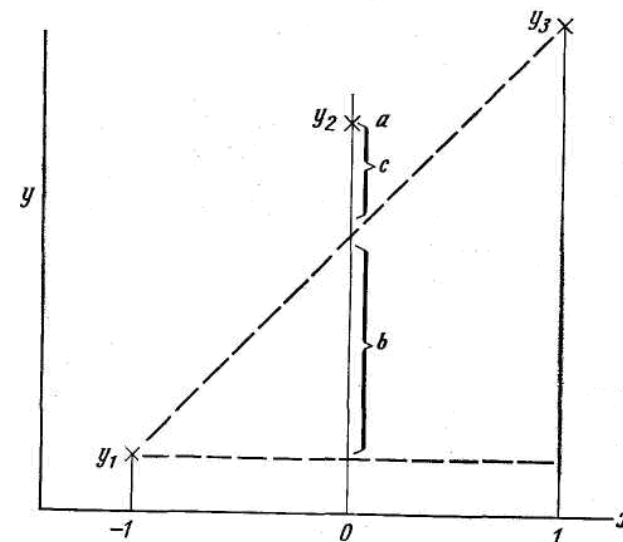


Рис. 5.4. Геометрическая интерпретация коэффициентов уравнения $Y = a + bx + cx^2$ при $x = -1, 0, +1$.

Линейный коэффициент b равен угловому коэффициенту прямой, проходящей через пару крайних точек. Квадратичный коэффициент c получается вычитанием y_2 из среднего y_1 и y_3 . Его можно также выразить как разность угловых коэффициентов прямых $y_2 - y_3$ и $y_1 - y_2$. В третьем способе записи этой оценки, показанном в (5.12), используется простейшая линейная комбинация откликов с коэффициентами 1, -2, +1.

Выражения (5.12) применимы к средним по строкам (по x_2) и столбцам (по x_1), а все четыре оценки b_1, b_2, b_{11}, b_{22} истинных коэффициентов $\beta_1, \beta_2, \beta_{11}, \beta_{22}$ ортогональны. Следуя Йетсу, вместо b_1, b_2, \dots будем использовать символы A_L, B_L, A_Q, B_Q (индексы L и Q используются для коэффициентов при линейных и квадратичных членах соответственно).

Заметим, что член $b_{12}x_1x_2$ будет давать эффект, если x_1 и x_2 не равны нулю, и, таким образом, выражение для b_{12} имеет тот же вид, что и в случае плана 2^2 , причем для оценки должны использоваться только четыре угловые точки плана 3^2 . Непосредственная проверка показывает, что оценка

$$b_{12} = \frac{1}{4} (y_9 - y_7 - y_3 + y_1)$$

ортогональна ко всем остальным.

Сведем в табл. 5.15 оценки шести эффектов [β в формуле (5.9)], пять из которых являются контрастами. Прописные буквы $\hat{A}_L, \dots, \hat{A}_L \hat{B}_L$ идентичны по значению соответствующим b . Делителями служат суммы квадратов множителей, приведенных в столбцах. Вся таблица, таким образом, является кодированной матрицей преобразований для эксперимента 3^2 .

Таблица 5.15

Оценки эффектов шести параметров по результатам реализации плана 3^2

$A \equiv x_1,$	$B \equiv x_2$	Наблюдения	b_0	$\hat{A}_L \equiv b_1$	$\hat{B}_L \equiv b_2$	$\hat{A}_Q \equiv b_{11}$	$\hat{B}_Q \equiv b_{22}$	$\hat{A}_L \hat{B}_L \equiv b_{12}$	Ячейка (3,3)
-1	-1	y_1	1	-1	-1	1	1	1	1
0	-1	y_2	1	0	-1	-2	1	0	1
1	-1	y_3	1	1	-1	1	1	-1	-2
-1	0	y_4	1	-1	0	1	-2	0	1
0	0	y_5	1	0	0	-2	-2	0	1
1	0	y_6	1	1	0	1	-2	0	-2
-1	1	y_7	1	-1	1	1	1	-1	-2
0	1	y_8	1	0	1	-2	1	0	-2
1	1	y_9	1	1	1	1	1	1	4
Делитель:			9	6	6	18	18	4	36

Нетрудно убедиться, что все шесть векторов ортогональны [столбец «Ячейка (3.3)» будет пояснен в разд. 5.4.3]. Можно вычислить сумму квадратов для любого столбца. Каждая из них будет квадратом одного числа (скалярного произведения вектора коэффициентов на вектор y), деленным на соответствующий делитель. Эти величины используются в схеме дисперсионного анализа, приведенной в табл. 5.17. Целесообразнее показать разбиение на частные суммы квадратов арифметически, а не алгебраически.

При использовании полного квадратичного уравнения для суммы квадратов погрешностей аппроксимации имеем три степени свободы. Предпочтительнее использовать их для оценки еще трех параметров. Эти классические параметры, впервые приведенные Йетсом, соответствуют трем дополнительным членам в аппроксимирующем уравнении

Они были выбраны потому, что оценки для них ортогональны ко всем предыдущим и друг к другу.

Если три уровня каждого фактора отделены друг от друга равными интервалами, то можно обобщить алгоритм Йетса на планы 3^2 и $3^m, m > 2$.

5.4.2. Стандартные вычисления в планах 3^2

Сначала рассмотрим операции, которые должны предшествовать вычислению суммы квадратов для взаимодействий. Необходимо следовать правилу: **не следует интерпретировать суммы квадратов величин, слагаемые которых неизвестны**. Отказ от этого правила может привести (и неоднократно приводил) к пропуску разумного информативного разбиения. Примером подобной ситуации может

служить случай, когда почти вся сумма квадратов оказывается сосредоточенной в одном контрасте или слагаемом.

Поскольку арифметические операции просты, а их алгебраические эквиваленты трудоемки, начнем с классического примера Кохрена и Кокса, стандартные вычисления для которого приведены в таблице 5.16. Упростим вычисления, вычтя среднее (353) из каждого значения в табл. 5.16. Затем вычислим средние по строкам и средние отклонения в столбцах, найдем расчетные значения откликов по аддитивной модели, остатки и, следовательно, оценки взаимодействий (табл. 5.16).

Строки в данном примере соответствуют трем отделенным друг от друга равными интервалами уровням фосфорного удобрения, а столбцы — трем уровням азота, также отделенным равными интервалами. Откликами служат суммарные количества всходов салата на 12 участках.

Таблица 5.16

Стандартные вычисления для эксперимента 3² Кохрена и Кокса с выращиванием салата

Данные			Данные -353			Σ _R	Средние по строкам
449	413	326	96	60	-27	129	43
409	358	291	56	5	-62	-1	0
341	278	312	-12	-75	-41	-128	-43
Σ_c : 140			-10	-130	0		

Средние отклонения в столбцах:

Расчетные значения			Первичные остатки		
90	40	0	6	20	-27
47	-3	-43	9	8	-19
4	-46	-86	-16	-29	45

SS остатков = 4793; SS [ячейки (3,3)] = $\frac{9}{4}(45)^2=4556$; MS остатков = 1198.

Максимальный нормированный остаток

$(MNR)^{1)} = 45/4793^{1/2} = 0,650$; $MNR(0,05; 3 \times 3) = 0,648$.

$y^0(3,3) = (-27-62)/2 + (-12-75)/2 - (96+60+56+5)/4 = -142,2$.

Скорректированные данные			Σ _R	Средние по строкам	Вторичные остатки		
96	60	-27	129	43	-5	9	-4
56	5	-62	-1	0	-2	-3	4
-12	-75	-142	-229	-76	6	-7	0
Σ_c : 140			-10	-231	-101	Новая SS остатков = 235	
$\Sigma + 34$: 174			24	-197	1	Новый MS остатков = $235/3 = 78,8$	
Средние отклонения в столбцах:			58	8	-66		

5.4.3. Одноячеечное взаимодействие

При анализе девяти остатков (первичные остатки) в табл. 5.15 выделим наибольший из них, содержащийся в ячейке (3,3). Для суждения о величинах остатков необходимо иметь объективный критерий. Ответ на этот вопрос находим у Стефанской. Введенный ею максимальный нормированный остаток $z^{(0)}$ легко вычисляется; это отношение максимального остатка к корню квадратному из суммы квадратов всех остатков. Критические значения максимального нормированного остатка (MNR) для уровня значимости $\alpha=0,01$ и $\alpha=0,05$ приведены в табл. 5.17 и 5.18.

Для рассматриваемого случая уровень значимости приблизительно равен 0,05.

Таблица 5.17

Таблица Стефанской 6.1: критические значения MNR для уровня значимости $\alpha=0,01$

	R							
C		3	4	5	6	7	8	9
3		0,660	0,675	0,664	0,646	0,626	0,606	0,587
4			0,665	0,640	0,613	0,588	0,565	0,544
5				0,608	0,578	0,551	0,527	0,506
6					0,546	0,519	0,495	0,475
7						0,492	0,469	0,449
8							0,446	0,426
9								0,407

Таблица 5.18

Таблица Стефанской 6.2: критические значения MNR для уровня значимости $\alpha=0,05$

	R							
C		3	4	5	6	7	8	9
3		0,648	0,645	0,624	0,600	0,577	0,555	0,535
4			0,621	0,590	0,561	0,535	0,513	0,493
5				0,555	0,525	0,499	0,477	0,457
6					0,495	0,469	0,447	0,428
7						0,444	0,423	0,405
8							0,402	0,385
9								0,368

Если бы это были технические данные, можно было бы попытаться выяснить у экспериментатора, мог ли быть каким-либо образом отклик 312 (в закодированном виде — 41 в табл. 5.16) зарегистрирован с ошибкой на 100. Но вряд ли это можно сделать по отношению к старым данным в какой-либо другой области. Попробуем поэтому исключить возмущающее воздействие этой величины и посмотрим, что при этом произойдет. Заменим выделяющееся значение другим y^0 , вычисляемым так, чтобы получился нулевой остаток, а затем проведем все вычисления заново. Это сделано в нижней части табл. 4.16. Как видно, остатки существенно уменьшились. Величина y^0 вычислена по формуле

$$y_{ij}^0 = y_{i\cdot} + y_{\cdot j} - y_{\cdot\cdot} \quad (5.13)$$

где $y_{i\cdot}$ — среднее по всем значениям, кроме j , в строке i ;
 $y_{\cdot j}$ — среднее по всем значениям, кроме i , в столбце j ;

y'_{\cdot} — среднее по всем значениям таблицы, кроме элементов строки i и столбца j .

Элементарная проверка любого остатка в эксперименте 3^2 обеспечивается тождеством

$$d_{ij} = \frac{1}{3} (y_{ij} - \Sigma y_{i\cdot j} - \Sigma y_{i\cdot j'}) \quad (5.14)$$

при условии, что

$$\Sigma \Sigma y_{ij} = 0, \quad \text{Var}(d_{ij}) = \frac{4}{9} \sigma^2.$$

В данном случае

$$d_{33} = \frac{1}{3} [-41 - (-27 - 62 - 12 - 75)] = 45,0.$$

Таблица 5.19

Два варианта дисперсионного анализа для эксперимента 3×3 из табл. 5.16

Источник изменчивости	Нескорректированные данные			Скорректировано значение в одной ячейке [(3,3)]		
	степени свободы	сумма квадратов	средний квадрат	степени свободы	сумма квадратов	средний квадрат
Фосфат F	2	11008,67				
P_L	1	11008,17		1	21360,67	
P_Q	1	0,50		1	533,56	
Азот N	2	12200,00				
N_L	1	12150,00		1	22940,17	
N_Q	1	50,00		1	280,06	
взаимодействие $P_L N_L$	1	2209,0				
Остаток	3	4791,33	1198,00	3	235,10	78,4
Сумма	8	28000,00		7	45349,56	

Суммы квадратов SS у нас в 12 раз больше, чем у Кохрена и Кокса, так как мы не учитывали, что каждый отклик является суммой 12 наблюдений. Средний квадрат остатков RMS с учетом этого обстоятельства равен $78,7/12 = 6,56$.

Таким образом, мы имеем пример *однойячеечного взаимодействия*. Такие взаимодействия являются наиболее общие из всех видов неаддитивностей, а для факторов с качественными уровнями они наиболее часто проявляются в угловых ячейках. Можно довольно просто получить коэффициенты для однойячеечного контраста, записав единственное возмущение в одну из ячеек, а затем проведя вычисления в соответствии с табл. 5.16. Для получения результатов, выраженных минимальными целыми числами, поместим 9 в одну из ячеек. Тогда будем иметь

			Σ Средние по стро- кам	Остатки			
9	0	0	9	3	4	-2	-2
0	0	0	0	0	-2	1	1
0	0	0	0	0	-2	1	1
Σ: 9			0	0			
Σ -3: 6			-3	-3			
Средние отклоне- ния в столбцах:			2	-1	-1		

Мы использовали ячейку (1, 1), но та же самая картина может быть получена при любой другой ячейке. Простейший способ запоминания схемы остатков состоит в том, чтобы поместить 4 в возмущающую ячейку, а затем заполнить остальные так, чтобы суммы по строкам и столбцам были равны нулю.

Можно проверить, что эта схема и любая другая, отличающаяся от нее постоянным множителем, может быть получена из каждой таблицы 3×3 аддитивных данных, когда возмущению подвержено одно из значений. Ниже приводится модельный пример. Отметим, что если данные содержат случайную ошибку, то схема становится менее очевидной. Например,

28 36 47
58 48 59
85 75 86

Хотя только что выведенный контраст для одноячеечного взаимодействия верен и может быть применен к исходным данным, есть один момент, на который следует обратить внимание при его применении к остаткам. Обозначив остатки как

p q r
s t u
v w x

заметим, что $-2q-2r=2p$, $-2s-2v=2p$ и $(t+u)+(w+x) = -s-v=p$. Итак, наш контраст тождественно равен $9p!$ Соответствующая SS равна $(9p)^2/36=9/4p^2$. В нашем случае SS [для взаимодействия в ячейке (3.3)] равна $9/4 (45^2)=4556$, т. е. SS имеет точно такое же значение, как если бы она была найдена вычитанием SS новых остатков из SS

исходных, $4793-237=4556$. Вычисление вторичных остатков выявляет больше деталей, но при этом остается только три степени свободы.

Теперь ясен простейший способ вычисления скорректированных значений y_{ij}^0 , а поскольку первичные остатки были вычислены, то и всех вторичных остатков. Для плана $3^2 y_{ij}^0 = y_{ij} - 9/4 d_{ij}$. В данном случае $y_{3,3}^0 = -41 - (9/4) \cdot 45 \approx -142$.

Схема разностей между вторичными и первичными остатками полностью противоположна обычной схеме остатков

-1 -1 2
-1 -1 2
2 2 -4

и, следовательно, каждый коэффициент корректируется на $45/4=11,25$. Таким образом, новое значение $d_{11} = 6 - 11,25 = -5,25$.

Недостатки стандартного представления взаимодействий в виде

$$\eta_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij}, \quad (5.15)$$

в наибольшей степени проявляются в плане 3^2 . Величина γ_{ij} определяется вычитанием главных эффектов из η_{ij} , но, как поясняет приведенная выше таблица с единственной девяткой, если один элемент компенсируется за счет остальных элементов таблицы, то все существенные главные эффекты и среднее смещаются, а оставшаяся часть возмущения распределяется по всей таблице.

Таким образом, оценки $\hat{\gamma}_{ij}$ не отражают ничего реального и в лучшем случае наибольшая из них может использоваться для определения истинного расхождения, которое равно $9/4 \cdot 45 = 101,25$. В общем случае в таблице $R \times C$ этот корректирующий фактор будет равен $RC/(R-1)(C-1)$. Если это расхождение в действительности является ошибкой, а не устойчивым взаимодействием, то экспериментатор оказывается в неблагоприятной ситуации, получая при этом смещенные главные эффекты и ложное двухфакторное взаимодействие.

5.4.4. Простой способ вычисления и интерпретации взаимодействий $A_L B_Q, A_Q B_L$ и $A_Q B_Q$

Если исследователь имеет результаты эксперимента 3^2 (где A и B непрерывные факторы) и хорошую оценку σ , то, возможно, он захочет получить в явном виде три коэффициента при взаимодействиях высшего порядка b_{122}, b_{112} и b_{1122} (соответственно $A_L B_Q$ и т. д.). Существует два способа их вычисления, которые проще первоначально предположенного Йетсом и показанного в верхней части табл. 5.20.

Таблица 5.20

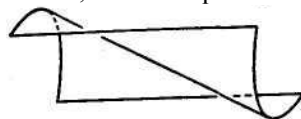
Вычисление $A_L B_L, A_L B_Q$ и т. д. по остаткам в эксперименте 3^2

	p	q	r	s	t	u	v	w	x
$12A_Q B_L$	-1		1	2		-2	-1		1
$12A_L B_Q$	-1	2	-1				1	-2	1
$36A_Q B_Q$	1	-2	1	-2	4	-2	1	-2	1
$4A_L B_L$	1		-1				-1		1
$4A_Q B_L$	-1		-1				1		1
$4A_L B_Q$	-1		1				-1		1
$4A_Q B_Q$	1		1				1		1
$4A_L B_L$	1		-1				-1		1
$1A_Q B_L$		1						-1	
$4A_L B_Q$				1		-1			
$4A_Q B_Q$					1				

Так как для девяти остатков здесь имеется только четыре степени свободы, выберем из них четыре, а именно p, r, v, x , и представим четыре оценки параметров обычными контрастами плана 2^2 и их суммой. В силу ограничений на девять остатков типа $q = -p - r$ и т. д. нет необходимости использовать при вычислениях все девять. Далее, как видно из нижней части таблицы, $-p - r$ можно заменить на q и т. д. и, таким образом, представить, например, $4A_L B_Q$ через $(s - u)$, а $4A_Q B_Q$ через t . Размышления приводят к выводу, что эти величины имеют смысл использовать как факторы точности аппроксимации. Рассмотрим, например, $4A_L B_Q$. Эта величина будет большой, если четыре угловых остатка имеют следующие знаки:

$$\begin{matrix} -p & +r \\ (+s) & (-u) \\ -v & +x \end{matrix}$$

Такая ситуация может быть, если поверхность отклика имеет вид



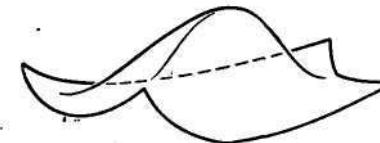
так как тогда, если p и v отрицательны, остаток s должен быть большим и положительным, а остаток u — большим и отрицательным. Таким образом, отклонение отклика от аппроксимирующей квадратичной поверхности на нижнем уровне B противоположно по знаку отклонению от нее на его верхнем уровне.

Обычный (Йетса) контраст $A_Q B_Q$ задается коэффициентами

$$\begin{matrix} -1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \end{matrix}$$

1 -2 1

и по аналогии с ранее упомянутым одноячеечным взаимодействием равен $9t$ (t — остаток центрального элемента). Это указывает на отклонение от аддитивности следующего вида:



Простой способ записи ортогональных контрастов L и Q и SS существует и для случая, когда трехуровневый фактор непрерывен, но уровни расположены неравномерно. Можно было бы обозначить три уровня фактора через u, v и w (они ничего общего не имеют с остатками u, v, w), но лучше привести их к уровням $0, 1$ и d , где $d > 1$ и неограничено. Приведем формулы для обоих способов обозначений:

Уровни ₁	L_1	Q_1	Уровни ₂ ¹⁾	L_2	Q_2
u	$2u - v - w$	$v - w$	0	$-1 - d$	$1 - d$
v	$-u + 2v - w$	$w - u$	1	$2 - d$	d
w	$-u - v + 2w$	$u - v$	d	$-1 + 2d$	-1
Делители для SS			$6(1 - d + d^2) \quad 2(1 - d + d^2)$		

¹⁾ Точный эквивалент столбца «Уровни₁», так как, вычитая u из уровней₁, получаем $0, v - u$ и $w - u$; деление же на $v - u$ дает $0, 1$ и $(w - u)/(v - u)$. Полагаем последнее отношение равным d .

Правило таково: каждый член в Q_2 является циклической разностью двух других уровней. При четырех неравномерно расположенных уровнях получить сравнительно простую формулу затруднительно.

5.4.5. Критерий Тьюки мультипликативной неаддитивности

Шеффе предложил взаимодействия при наличии $(R - 1)(C - 1)$ степеней свободы (в данном случае четырех) представить как

$$\gamma_{ij} = G\alpha_i\beta_j,$$

где G — константа и, следовательно, единственная степень свободы для взаимодействия. Шеффе показывает, что если взаимодействие γ_{ij} может быть описано полиномом второго порядка от главных эффектов, то оно должно определяться только что приведенным выражением. Тьюки установил, что G может быть оценено как

$$\hat{G} = \frac{\sum \hat{\alpha}_i \hat{\beta}_j y_{ij}}{\sum \hat{\alpha}_i^2 \sum \hat{\beta}_j^2} = \frac{P}{Q},$$

а

$$SS(G) = P^2/Q.$$

Снедекор предложил простой способ вычисления этих величин. Повторим вычисления для обсуждаемого плана 3^2 в табл. 5.21.

Таблица 5.21

Тест Тьюки устранимой неаддитивности.

Данные			Сред- Откло- Σ ние по ня R строкам d _i			p _i	d _i p _i	p _i - \bar{p} ¹⁾
449	413	326	1188	396	43	5397	232071	1377
409	358	291	1058	353	0	5227	0	1207
341	278	312	931	310	-43 ²⁾	1436	-61748	-2584
Σ: 1199 1049 929			3177	0		12060	170323	
Средние по столбцам: 400 350 310			353			4020		
Средние отклонения в столбцах d _j : 46 -3 -43 ²⁾			0					

$p_i = \sum X_{ij}d_j$; $p_i = (449 \times 46) - (413 \times 3) - (326 \times 43) = 5397$
 $\sum \hat{\alpha}_i \hat{\beta}_j y_{ij} = P = \sum d_i p_i = 170323$; $\sum d_i^2 = 3698$; $\sum d_j^2 = 3974$
 SS (неаддитивности) = $P^2 / \sum d_i^2 \sum d_j^2 = 1974$; $G = P/Q = 0,01159$
 SS (проверки) = SS (остаточная) - SS (неаддитивности) = $4791 - 1940 = 2817$
 MS (проверки) = $2817/3 = 939$; F -отношение (неаддитивности) = $1940/939 = 2,07$, незначимо.
¹⁾ $Var(p_i - \bar{p}) = \frac{2}{3} \sum d_j^2$; MS (проверки) = $\frac{2}{3} \times 3974 \times 939 = 2,488 \times 10^6$; $s(p_i - \bar{p}) = 1577$.
²⁾ Приводит к $\sum d_i = \sum d_j = 0$.

В результате получим, что критерий не достигает величины, соответствующей уровню значимости 0,05. Следует заметить,

что вместо y_{ij} может быть использовано \hat{y}_{ij} . Полученная оценка суммы квадратов ошибок для проверки неаддитивности равна 2817, что значительно превышает число 235, найденное после коррекции $y_{3,3}$.

Взаимодействие \hat{y}_{ij} оцениваемое через $G \hat{\alpha}_i \hat{\beta}_j$, недостаточно для устранения большей части остаточной суммы квадратов SS , что было бы в случае строгого выполнения соотношения и когда $\hat{\alpha}_i$ и $\hat{\beta}_j$ достаточно велики, чтобы обеспечить точную оценку γ_{ij}

5.4.6. Критерий «глазного яблока» для взаимодействия

Если модель аддитивна, то разности между наблюдениями соседних строк должны быть почти одинаковыми. Для выявления единственного неаддитивного элемента обычно достаточно выписать эти разности,

как это и сделано для рассматриваемых данных. Поступая таким образом, даже для необработанных данных получаем

			Построчные разности		
449	413	326	40	55	35
409	358	291	68	80	-21
341	278	312			

Даже без знания σ очевидно, что последняя разность $y_{2,3} - y_{3,3}$ намного отличается от соседних: 68 и 80. Почти точное совпадение трех разностей элементов строк 1 и 2 показывает, что причиной возмущения является $y_{3,3}$, а не $y_{2,3}$. Это говорит о том, что если этот критерий не удовлетворяется, то и объективные критерии тоже не удовлетворяются. Наоборот, встречаются случаи, когда можно выявить наиболее выделяющийся элемент с помощью схемы построчных разностей, но нельзя доказать наличие истинного рассогласования по методу максимального нормированного остатка (MNQ).

В данных табл. 5.16 содержится единственное нарушение аддитивности. Если исключить подозрение о том, что значение в (3,3) — опечатка с ошибкой на 100, то нарушение аддитивности выражается в том, что неблагоприятные эффекты увеличения фосфора и азота на всходы салата не столь уж и велики при экстремальных условиях (наибольшие P и N), как можно было бы ожидать при других данных. Это вряд ли может иметь значение с сельскохозяйственной точки зрения, поскольку и так очевиден вывод о том, что наиболее предпочтительны минимальные количества фосфора и азота. Вероятно, что если для данной разновидности салата необходимо удобрение, его следует вносить после появления всходов.

5.4.7. Эксперимент 3^2 без повторений при исследовании загрязнения воздуха

В следующем примере приводится таблица индексов экстремальных значений, которые являются мерами наихудших состояний воздуха, наблюдавшихся в течение трех лет (столбцы) по районам трех размеров: $<10^5$, $<4 \times 10^5$ и $>4 \times 10^5$ (строки). В табл. 5.22 приведены эти значения, умноженные на 100, и даны результаты обычных вычислений. Достаточно удовлетворительное разделение, отраженное в таблице дисперсионного анализа, с высоко значимыми эффектами и строк и столбцов по сравнению с оценкой ошибки с четырьмя степенями свободы подсказывает, что на этом можно и остановиться. Но все еще остается некоторая возможность довольно своеобразного улучшения. Мы применили (здесь это не воспроизводится) критерий для устранимой неаддитивности с одной степенью свободы. Значение

F -критерия для него равно 6,94, тогда как $F(0,05) = 110,1$, а $F(0,1) = 5,5$. Однако, поскольку обнаружился положительный тренд p_i от α_i мы воспользовались извлечением квадратного корня из каждого индекса экстремальных значений и еще раз провели стандартные вычисления. В результате были получены значения F , равные 379 и 299, и уровень значимости менее 0,0005.

Таблица 5.22

100×индексы экстремальных значений загрязнения воздуха для районов трех размеров

Города	1968	1969	1970	Средние отклонения по строкам	Остатки		
Малые	1035	768	641	96	-12	13	-2
Средние	661	410	334	-251	39	2	38
Большие	1156	799	666	155	50	-15	-36

Средние отклонения по столбцам: 232 -60 -172 719=y..

$MNR = 50/7306^{1/2} = 0,585$, $z^0(0,2; 3 \times 3) = 0,620$, поэтому $P > 0,2$

Дисперсионный анализ

Источник	Степени свободы	Суммы квадратов	Средние квадраты	F	P
Размеры (R)	2	287723	143861	79	< 0,001
Годы (C)	2	260560	130280	71	< 0,001
Остатки	4	7306	1827	$s = 42,8$; в натуральном масштабе 0,43	

Коэффициент вариации = $= 43/719 = 6\%$

Поскольку коэффициент вариации преобразованной переменной равен 1,46%, то эквивалентный коэффициент вариации обратно преобразованного индекса экстремальных значений был бы на уровне 3%.

Индексы экстремальных значений — корни квадратные из сумм квадратов концентраций трех загрязнителей.

5.4.8. Эксперимент 3^2 с дискретными факторами

Рассмотрим пример одного эксперимента 3^2 Кохрена и Кокса, описанный в литературе. Эксперимент повторялся четыре раза, и поэтому оценка ошибки возможна с 24 степенями свободы. В табл. 5.23 приводятся девять средних результатов; внизу дана таблица остатков для обычной аддитивной модели.

Наибольший остаток оказался в ячейке (1,3), но мы не будем судить о его величине по максимальному нормированному остатку, так как располагаем хорошей оценкой σ . Поэтому используем критерий Стьюдента t' , который учитывает число степеней свободы ошибки и количество чисел, среди которых $d_{1,3}$ является максимальным. Поскольку дисперсия остатков в плане 3^2 равна $4/9\sigma^2$, оценка $s(d_{1,3}) = 2/3 \cdot 2,58 = 1,72$ и $t' = 5,9/1,72 = 3,43$. Табличное значение критерия для уровня значимости 0,01 равно 3,22, поэтому следует признать наличие чрезмерного d_{ij} .

Таблица 5.23

Сокращенные вычисления для эксперимента 3^2 Кохрена и Кокса на компосте

Данные			(Данные - 70,5) × 10		
53,6	56,8	67,0	-169	-137	-35
80,8	82,3	80,5	103	118	100
74,3	69,1	70,0	38	-14	-5

Первичные остатки SS (остатков)/100 = 97,02
 $s(d_{ij}) = \frac{2}{3} s(y) = \frac{2}{3} \times 2,58^{1/2} = 1,72$
 Максимальное относительное отклонение = $= 5,9/1,72 = 3,43$
 $t'(0,01; 9; 24) = 3,22; P < 0,01$

Критерий Тьюки с одной степенью свободы для неаддитивности дает $F = 4,4$; незначимо
 $SS(d_{1,3}) = 9/4 \times 5,9^2 = 78,3$
 Остаточная SS (для остатков) = $97,0 - 78,3 = 18,7$

¹⁾ Остаточный MS = $18,7/3 = 6,2$; MS ошибки с 24 с. с. = 6,56.

Что касается предыдущего примера, то SS для одного остатка легче вычислять как $(9/400)59^2 = 78,3$, чем получать контраст с коэффициентом четыре в ячейке (1,3), симметрично сбалансированный по восьми остальным ячейкам.

5.4.9. Эксперимент 3^2 с одним непрерывным и одним дискретным факторами

Данные, используемые в этом примере, снова заимствованы у Кохрена и Кокса. Первый абзац их общего замечания об интерпретации дисперсионного анализа приводится полностью.

«Выделение из сопоставляемых данных главных эффектов и эффектов взаимодействий является удобным и мощным методом анализа в тех случаях, когда взаимодействия малы по сравнению с главными эффектами. Если взаимодействия значительны, такой

анализ необходимо дополнить тщательным выяснением природы взаимодействий. Вполне возможно, что анализ с разделением на главные эффекты и взаимодействия не подойдет для имеющихся данных. В то же время иногда факторный метод анализа применяется механически без учета его пригодности, и при этом слишком большие надежды возлагаются только на начальный дисперсионный анализ, на основании которого делаются все выводы».

Эксперимент состоял в выявлении отклика на использование трех уровней количества азотного удобрения (150, 210 и 270 фунтов/акр) при выращивании трех разновидностей сахарного тростника. План 3² дублировался четыре раза, и средний квадрат ошибки с 24 степенями свободы оказался равным 43,91. Коэффициент вариации соответственно был около 5%.

Построчные разности, приведенные в табл. 5.24, показывают, что v_1 и v_2 изменяются почти одинаково, а характер изменения v_3 совершенно иной. Простейший график уровня N в зависимости от \bar{y} для каждой разновидности сахарного тростника приводит к тому же выводу.

Таблица 5.24

Данные эксперимента 3² Кохрена и Кокса с сахарным тростником

	n_1	n_2	n_3	Построчные разности		
v_1	266,1	275,9	303,8	20,3	25,7	22,1
v_2	245,8	250,2	281,7	-28,6	-7,9	50,1
v_3	274,4	258,1	231,6			

Таким образом, следует отказаться от дисперсионного анализа всех трех разновидностей, так как очевидно, что при этом будет выявлено большое взаимодействие $V \times N$, обусловленное v_3 . Во многих случаях можно частично интерпретировать данные еще до начала обычного дисперсионного анализа. Проанализируем сначала v_1 и v_2 без v_3 . Результаты этого анализа приведены в табл. 5.25. Три средних для v_3 рассматриваются отдельно, хотя для проверки значимости используются характеристики ошибки, полученные по всем данным.

Таблица 5.25

Вычисления и дисперсионный анализ для эксперимента 3² с сахарным тростником

Данные -270,6				\sum_R	Данные для v_3	
v_1	-4,5	5,3	33,2	34,0	n_1	19,7
v_2	-24,8	-20,4	11,1	-34,1	n_2	3,4
					n_3	-23,1
Σ_c	-29,3	-15,1	44,3	-0,1		
$v_1 - v_2$	20,3	25,7	22,1	68,1		
Разности	-22,7	3,0	-0,6			

$$SS(v_1 - v_2) = (34,1 + 34,0)^2 / 6 \times 4 = 193,32$$

$$SS[(N)v_1, v_2] = 3048,99 / 2 \times 4 = 381,12$$

$$SS[v_1, v_2 \times N] = (2,4^2 + 3,0^2 + 0,6^2) / 8 = 15,12 / 8 = 1,89$$

$$SS(v_3) = 233,31$$

$$SS(v_3, \text{лин}) = (19,7 + 23,1)^2 / 2 \times 4 = 228,98$$

Дисперсионный анализ

Источник	Степени свободы	Суммы квадратов	Средние квадраты	F	P
$v_1 - v_2$	1	193,32	193,3	4,4	0,05
$N_L(v_1, v_2)$	1	338,56	338,6	7,7	0,05
$N_Q(v_1, v_2)$	1	42,5	42,5	1,0	0,5
$(v_1 - v_2) \times N$	2	1,89	0,945	0,0215	0,9995
$v_3 \times N$, лин	1	228,98	229,0	5,22	0,05
$v_3 \times N$, квадр.	1	4,33	4,3	0,999	0,9995
Ошибка	24		43,91		

Тогда выявляется следующее:

1. Разность между v_1 и v_2 значительная: $68,1/12 = 5,67$ тонн на участок.
2. Урожай растет линейно с увеличением N для разновидностей 1 и 2.
3. Урожай уменьшается линейно с увеличением N для v_3 .

Можно заметить, что если перейти к обычным вычислениям, не принимая во внимание резко отличающуюся разновидность сахарного тростника, то никакого вреда, кроме потери времени, не будет. Округленные остатки таковы:

	n_1	n_2	n_3
v_1	-13	-2	15
v_2	-10	-5	15
v_3	23	7	-30

Эти результаты показывают, что разновидности v_1 и v_2 очень близки друг к другу, а v_3 отличается от них.

В заключение можно сделать некоторые выводы.

Проведенный анализ таблиц данных размера 3×3 отличается от известных способов в основном подробной интерпретацией взаимодействий (неаддитивность эффектов строк и столбцов, остатки, \hat{Y}_{ij}).

Упрощение вычислений линейно-квадратичных и квадратично-квадратичных членов взаимодействий придало анализу новое значение.

Часто взаимодействия появляются или в одной ячейке, или в одной строке (столбце).

Численные методы дисперсионного анализа остаются пригодными, но используются несколько другие схемы разложения сумм квадратов.

5.5. Трехфакторный эксперимент без повторений с факторами на двух уровнях

Экспериментатор, впервые услышавший о факторном эксперименте, может решить, что он должен начинать с простейших, легко реализуемых планов. Но если он поступит так, то момент, когда он сможет ощутить преимущества таких экспериментов, отодвигается в будущее. Планы с 16 опытами обычно более чем вдвое информативнее из расчета *на один опыт*, чем планы с 8 опытами. Наша рекомендация экспериментатору, рассматривающему план 2^3 , состоит в следующем: если у вас действительно есть три и только три фактора, которые имеет смысл варьировать, если время и деньги так ограничены, что 8 опытов поглотят большую их часть, если вы действительно уверены, что заинтересованы в выявлении только различий, превышающих удвоенное стандартное отклонение, если вы считаете, что можно выбрать уровни факторов так, чтобы все 8 комбинаций были реализуемы, то **2^3 именно тот план, который следует использовать.**

5.5.1. Пример применения плана 2^3

Данные, приведенные в табл. 5.26, получены на начальных стадиях изучения эффектов трех факторов — времени смешивания A , температуры B и давления C — на время затвердевания определенного типа цемента. Откликом было время в минутах, требуемое для достижения некоторой степени прочности. Точное указание уровней

каждого фактора и название изучаемого типа цемента, что важно для экспериментатора, для нас в данном случае значения не имеют. Стандартное отклонение ошибки одиночных опытов было известно и составляло ~ 12 мин. Опыты выполнялись в случайном порядке, но в табл. 5.26 представлены в обычном.

Таблица 5.26

Данные эксперимента 2^3 без повторений в обычной последовательности; стандартное отклонение ошибки равно 12

(1)	297
a	300
b	106
ab	131
c	177
ac	178
bc	76
abc	109

Очевидно, что *частные* эффекты A малы, но не одинаковы. Они таковы: $300 - 297 = 3$; $131 - 106 = 25$; $178 - 1,77 = 1$; $109 - 76 = 33$. Их стандартная ошибка равна приблизительно $12\sqrt{2}$, или 17.

Далее, все результаты на верхнем уровне B оказались намного меньшими, чем на нижнем уровне. А именно:

$$\begin{aligned} b - (1) &= -191, \\ ab - a &= -169, \\ bc - c &= -101, \\ abc - ac &= -69. \end{aligned}$$

Очевидно, что все эти разности существенны, однако они плохо согласуются друг с другом.

Наконец, рассмотрев частные эффекты C , находим: -120 , -122 , -30 и -22 . Разности, обусловленные фактором C , велики на нижнем уровне B и малы на верхнем. Сразу понятно, что если эффекты B на нижнем уровне C больше, чем на верхнем, то эффекты C на нижнем уровне B должны быть больше, чем на верхнем.

Таблица знаков Йетса

В табл. 5.12 показаны четыре варианта комбинаций результатов эксперимента типа 2^2 , служащие для получения четырех (регрессионных) коэффициентов факторного представления, а в табл. 5.13 приведены необходимые вычисления. И таблица знаков, и вычислительный метод предложены Йетсом. Теперь обобщим таблицу

знаков и соответствующую вычислительную процедуру на эксперименты типа 2^3 .

В верхнем левом углу табл. 5.27 расположена матрица плана 2^2 , состоящая из четырех частей: трех вида $++$ и одной в верхнем правом углу с противоположными знаками. Таблица знаков плана 2^3 будет состоять из восьми столбцов.

Таблица 5.27.

Матрица знаков факторов для плана 2^3

Обозначение опыта	Наблюдение	T	A	B	AB	C	AC	BC	ABC
(1)	y_1	+	-	-	+	-	+	+	-
a	y_2	+	+	-	-	-	-	+	+
b	y_3	+	-	+	-	-	+	-	+
ab	y_4	+	+	+	+	-	-	-	-
c	y_5	+	-	-	+	+	-	-	+
ac	y_6	+	+	-	-	+	+	-	-
bc	y_7	+	-	+	-	+	-	+	-
abc	y_8	+	+	+	+	+	+	+	+

Восемь параметров соответствуют обозначениям столбцов таблицы. Знаки в таблице можно записать по схеме, аналогичной для 2^2 , т. е. прибавить еще три части — две, полностью повторяющие матрицу плана 2^2 , а третью — с противоположными знаками. Штриховые линии в табл. 5.27 отделяют матрицы планов 2^1 и 2^2 . В этой таблице опущены единицы и оставлены только знаки. В табл. 5.27 содержится матрица, которая показывает, как обрабатывать восемь откликов для получения их суммы T и семи контраст-сумм $(A), \dots, (ABC)$. Если последние разделить на 4, то получим эффекты и взаимодействия в соответствии с их обычным определением; деление на 8 дает регрессионные коэффициенты факторного представления. Известно, что каждый результат выражается суммой смещений в обе стороны от базового среднего уровня, возникающих при различных комбинациях уровней факторов. Каждый столбец табл. 5.27 состоит из элементов восьми-мерного вектора. Все столбцы попарно ортогональны. Два вектора столбца ортогональны, если сумма произведений их элементов равна 0.

5.5.2. Алгоритм Йетса для эксперимента 2^3

Результаты реализации плана 2^3 могут быть использованы для получения всех восьми эффектов распространением алгоритма Йетса из разд. 5.3.2. для плана 2^2 на планы типа 2^3 . Такое обобщение приводится в табл. 5.28.

Таблица 5.28

Результаты вычислений по алгоритму Йетса для плана 2^3

Обозначение опыта	(0)	(1)	(2)	(3)	(3)/3	Название
(1)	297	597	834	1374	172	Среднее
a	300	237	540	62	8	A Время смешивания
b	106	355	28	-530	-66	B Температура
ab	131	185	34	54	7	AB
c	177	3	-360	-294	-37	C Давление
ac	178	25	-170	6	1	AC
bc	76	1	22	190	24	BC
abc	109	33	32	10	1	ABC

Алгоритм работает для любого набора данных типа 2^p . Отметим, что при вычислениях редко требуются три цифры и почти не используются четыре.

Общепринято, определив среднее на глаз (скажем, 170), вычитать его из каждого из восьми наблюдений, а затем уже производить вычисления. Можно убедиться, что округление чисел до ближайшего десятка перед началом вычислений приводит практически к тем же результатам. Однако, не всегда безопасно округлять числа с точностью до некоторой существенной части стандартного отклонения. Рекомендуется производить округление не более чем до $1/4$ стандартного отклонения. Это правило приемлемо при обработке любых массивов данных, но оно становится слишком жестким по мере увеличения $N=2^p$.

5.5.3. Предварительная интерпретация результатов эксперимента 2^3

Зная, что стандартное отклонение ошибки одного опыта равно 12 и оценивая стандартную ошибку контраст-сумм столбца (3) табл. 5.28, получаем $12\sqrt{8}$, или 34. Стандартная же ошибка регрессионных коэффициентов следующего столбца равна $12/\sqrt{8}=4,2$. Поверхностный анализ величин семи эффектов показывает, что B, C и BC достаточно реальные.

Эти выводы подтверждают предварительный анализ данных. Слева в табл. 5.29 приведено восемь наблюдаемых значений, сгруппированных в двумерную таблицу $B \times C$. Справа те же данные показаны усредненными попарно.

Таблица 5.29.

Таблица $B \times C$ данных эксперимента 2^3

	- B b			- B b		
C	297	106	C	298	118	
	300	131				
	177	76				
	178	109				

Очевидно, что влияние повышения температуры B на уменьшение времени переходного процесса при низком давлении (нижний уровень C) намного больше, чем при высоком.

5.5.4. Обратный алгоритм Йетса

Предсказанные значения можно найти с помощью обратного алгоритма Йетса, описанного в разд. 5.3.2. Хотя в данном случае применение этого алгоритма не дает никакого выигрыша, в табл. 5.30 приведена последовательность всех действий с целью иллюстрации вычислений.

Таблица 5.30

Применение обратного алгоритма Йетса к реальным эффектам для получения предсказанных значений

	(0)	(1)	(2)	(2)/8=Y	Обозначение опыта	y
(BC)	190	-104	740	92	\hat{bc}	76; 109
(C)	-294	844	1420	178	\hat{c}	177; 178
(B)	-530	-484	948	118	\hat{b}	131; 106
T	1374	1904	2388	298	$(1)\hat{}$	297; 300

5.5.5. Интерпретация в случае, когда один фактор дискретный

Если бы фактор B был дискретным, а C — непрерывной переменной, то не было бы смысла говорить о приведенном ниже аппроксимирующем уравнении, коэффициенты которого определяются последним столбцом табл. 5.28:

$$Y = 172 - 66x_2 - 37x_3 + 24x_2x_3, \quad (5.16)$$

где

$$x_2 = \begin{cases} -1 & \text{для } B \text{ на нижнем уровне,} \\ +1 & \text{для } B \text{ на верхнем уровне,} \end{cases}$$

$$x_3 = \begin{cases} -1 & \text{для } C \text{ на нижнем уровне,} \\ +1 & \text{для } C \text{ на верхнем уровне.} \end{cases}$$

Поскольку при дискретном B член взаимодействия не имеет обычной интерпретации, правильнее привести пару линейных уравнений для разных уровней B :

$$Y_{B-} = 238 - 61x_3, \quad (5.17)$$

$$Y_{B+} = 106 - 13x_3. \quad (5.18)$$

Каждое из этих уравнений выводится из соответствующей половины эксперимента 2^3 , если в уравнении (5.16) положить $x_2 = -1$ или $x_2 = +1$.

Экспериментатор чувствовал, что фактор A должен иметь некоторый эффект. Видимо, в этом есть смысл. Прделав требуемые вычисления, можно заметить, что эффект A почти такой же, как и эффект C на верхнем уровне B . Этого, однако, нельзя сказать о нижнем уровне B . Такая ситуация показана на рис. 5.5.

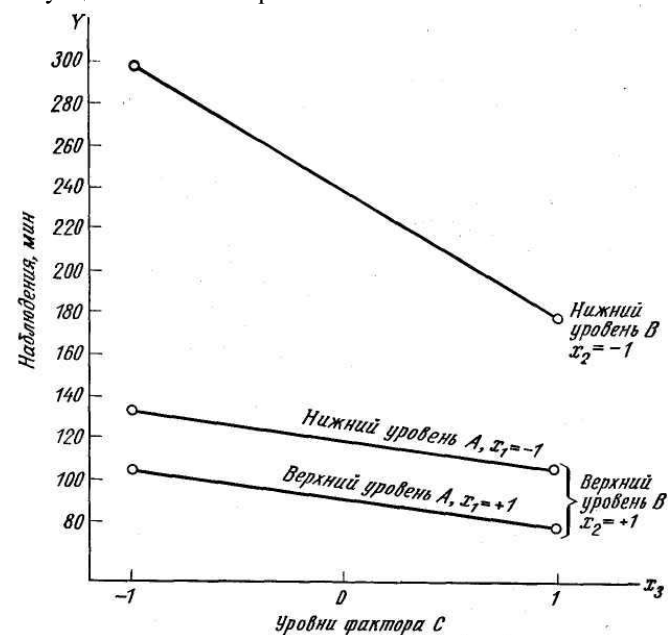


Рис. 5.5. Зависимость Y от x_3 при дискретном B .

При записи уравнений (5.17) и (5.18) исходят из предпосылки, противоречащей действительности, а именно что B является дискретным фактором. Вернемся поэтому к реальной ситуации.

5.5.6. Интерпретация в случае, когда все факторы непрерывные

Если все факторы непрерывные, применяется известный аппарат квадратичных функций. До сих пор мы в известной мере намеренно пренебрегали тем фактом, что в этом эксперименте в действительности осуществляется и *девятое* наблюдение. Оно проводится в *центре* плана или, иначе говоря, в середине диапазонов изменения каждого из трех факторов. Наблюденный отклик был $y_9=168$. Это практически совпадает со средним всех наблюдений, равным 172.

Предположим, что мы попытались описать наблюдения в пяти точках в пространстве (x_2, x_3) (поскольку x_1 по-видимому, имеет очень маленький коэффициент) полной квадратичной функцией. Тогда имели бы

$$Y = b_0 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2. \quad (5.19)$$

Мы бы сразу обнаружили, что не все шесть коэффициентов могут быть оценены. Можно, однако, оценить первые четыре, не используя даже пятую наблюдаемую точку. Можно также оценить $(b_{22} + b_{33})$ через $(y_9 - \bar{y})$, где \bar{y} — среднее первых восьми наблюдений. Оценка равна $(168 - 172) = -4$. Ее стандартная ошибка $(1 + 1/8)^{1/2}\sigma = 1,06\sigma$, или около 12,7.

Только во вводном примере мы можем заключить, что эта величина незначимо отличается от нуля, поскольку она равна $1/3$ своей стандартной ошибки. Более серьезное утверждение относительно истинной величины суммы двух квадратичных коэффициентов состояло бы в том, что с вероятностью 0,95 она лежит в интервале от $(-4 + 25,4) = +21,4$ до $(-4 - 25,4) = -29,4$. Но здесь следует придерживаться другой точки зрения и идти еще дальше по пути упрощения, предполагая, что, поскольку сумма оказывается незначимой, оба слагаемых равны 0. Это делается для получения наиболее простой поверхности отклика.

Таким образом, следует принять для описания данных уравнение

$$Y = 172 - 66x_2 - 37x_3 + 24x_2x_3, \quad (5.20)$$

которое совпадает с (5.16), но имеет другой смысл. Здесь x_2 и x_3 — непрерывные переменные, а уравнение представляет непрерывную поверхность отклика.

На рис. 5.6 показано несколько линий равного уровня поверхности отклика.

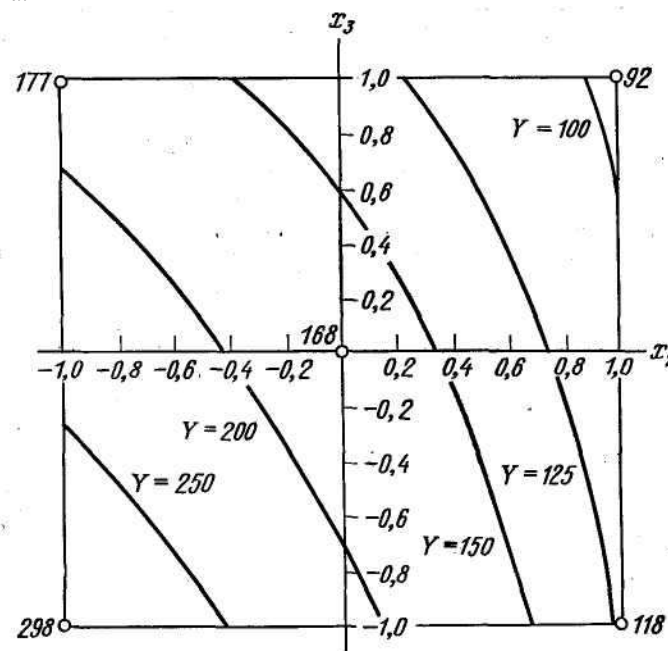


Рис. 5.6. Линии равных значений Y , когда x_2 и x_3 непрерывные. $Y = 172 - 66x_2 - 37x_3 + 24x_2x_3$. Кружочками обведены точки плана.

Их легко построить, решая уравнение относительно x_2 , если Y принимает фиксированные значения, а затем подсчитывая x_2 для ряда значений x_3 согласно выражению

$$x_2 = \frac{172 - 37x_3 - Y}{66 - 24x_3}$$

Когда рассчитываемые таким образом значения x_2 становятся слишком удаленными от интересующей нас области, целесообразно перейти к уравнению для x_3 :

$$x_3 = \frac{172 - 66x_2 - Y}{37 - 24x_2}$$

5.5.7. Линии равных значений стандартной ошибки $\sigma(Y)$

Хотя на рис. 5.6 построены линии равного уровня Y , это еще не означает, что известны истинные линии уровня Y . Вместе с приведенными кривыми необходимо использовать линии равных значений $\sigma(Y)$, которые показаны на рис. 5.7.

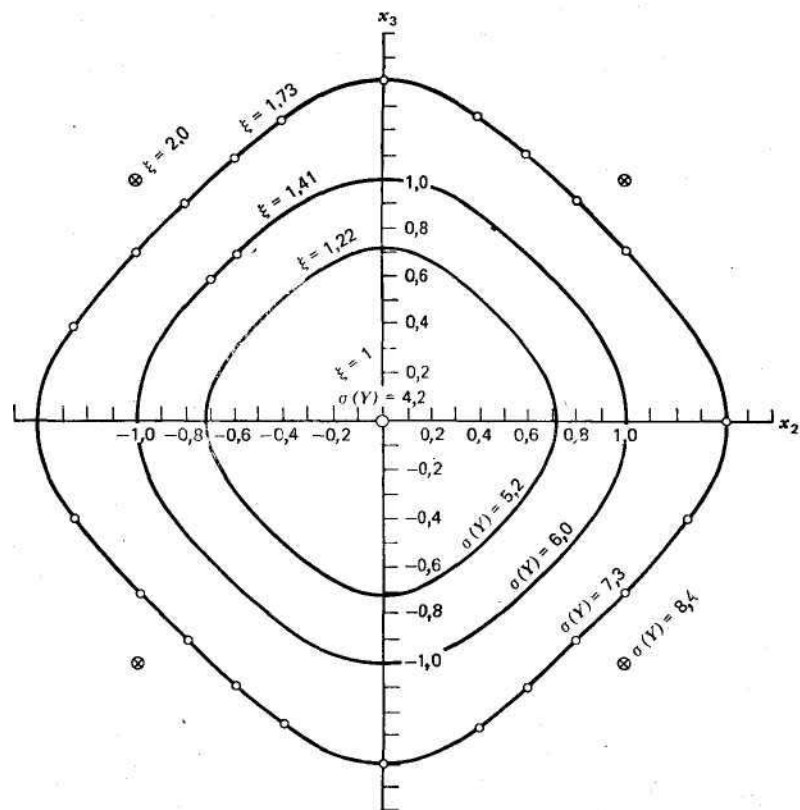


Рис. 5.7. $\sigma(Y) = \xi\sigma_y/N$ как функция x_2 и x_3 .

Поскольку все четыре коэффициента в (5.20) имеют одинаковые дисперсии σ^2/N и некоррелированы (ортогональны), то уравнение для дисперсии оцениваемой величины Y имеет вид

$$\text{Var}(Y) = \frac{\sigma^2}{N} (1 + x_2^2 + x_3^2 + x_2^2 x_3^2) = \frac{\sigma^2}{N} \xi^2. \quad (5.21)$$

Здесь все x_i представлены в кодированном виде (т. е. в диапазоне ± 1), а ξ — множитель при σ/\sqrt{N} , значения которого приведены на рис. 5.7.

Построенные контуры могут быть использованы при анализе любого эксперимента, проводимого по плану 2^3 .

Более подробно см. в разделе 5.5.12.

Частный случай уравнения (5.21) для вычисления дисперсии в точках плана $2^p=N$ имеет вид

$$\text{Var}(Y \text{ в точках плана}) = \frac{k\sigma^2}{N}, \quad (5.22)$$

где k — число коэффициентов, включая b_0 или \bar{y} .

Следует отметить, что внутри области планирования стандартная ошибка Y наибольшая в точках плана и минимальна в его центре.

Некоторые исследователи могут использовать рис. 5.8, где линии уровня Y рис. 5.6 наложены на штриховые линии равного уровня $\sigma(Y)$ рис. 5.7.

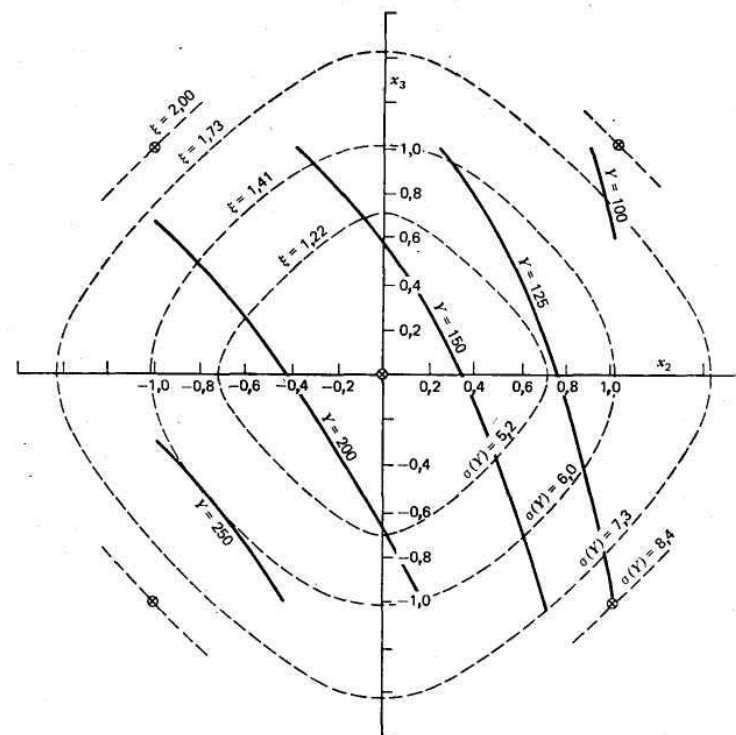


Рис. 5.8. Контуры равных значений Y и $\sigma(Y)$.

5.5.8. Способ проверки вычислений по алгоритму Йетса для эксперимента 2^p

Ниже приводится способ проверки вычислений для эксперимента 2^3 . Этот способ проще, но менее строг, чем метод, предложенный Йетсом:

1. Суммируем наблюдения в столбце 0, образуя следующие частные суммы:

S_8 = последнее наблюдение, abc ;

$S_4 = abc + ab$, т. е. сумма наблюдений с номерами, кратными четырем;

$S_2 = abc + ab + ac + a$, т. е. сумма наблюдений с номерами, кратными двум;

S_1 — сумма всех наблюдений.

2. После получения столбца A при расчетах по методу Йетса суммируем элементы верхней половины. Результат должен совпадать с S_1 . Продолжаем суммирование до получения полной суммы по столбцу. Она должна быть равна $2S_2$.

3. После получения столбца 2 суммируем его элементы, начиная сверху. Сумма первых двух элементов должна быть равна S_1 ; сумма первых четырех — $2S_2$. Сумма всех восьми должна составлять $4S_4$.

4. После получения столбца 3 суммируем его элементы, заметив следующее:

а) первый элемент равен S_1 ;

б) сумма первых двух элементов равна $2S_2$;

в) сумма первых четырех равна $4S_4$;

г) сумма всех восьми равна $8S_8$.

Эта проверка выявляет единичную ошибку, хотя, возможны компенсирующие друг друга ошибки. Обобщение на эксперименты с большими степенями 2 (т. е. на 2^p , где $p > 3$) очевидно.

5.5.9. Интерпретация эксперимента 2^3

Следует признать, что основные цели постановки этих девяти опытов заключались в том, чтобы: а) убедиться, что оборудование работает, и б) выявить, как велики могут быть отклики. Достигнув этих целей, экспериментатор может двигаться дальше, выполняя программу эксперимента, которая потребует испытаний цемента нескольких типов.

Экспериментатор знал, что полученное уравнение не является точным, поскольку иначе это привело бы к тому, что Y — время затвердевания, увеличивалось бы при уменьшении x_2 и x_3 .

Сравнив наблюдаемые значения y с предсказанными при условии, что значимыми эффектами являются B , C и BC (см. табл. 5.30),

обнаружим, что получена достаточно хорошая аппроксимация. В самом деле, средний квадрат ошибки аппроксимации равен 216 с четырьмя степенями свободы. [В данном случае эту величину проще всего вычислить, используя квадраты разностей наблюдений в каждой ячейке табл. 5.19, т. е. как $(3^2 + 25^2 + 1^2 + 33^2)/2 \times 4$]. Это не намного больше дисперсии ошибок наблюдений, равной $\sigma^2 = 12^2 = 144$.

Если принять во внимание еще два следующим по порядку малости члена A и AB , то средний квадрат остатков уменьшится до 8,5. Эта величина находится с помощью двух контрастов, не используемых в последнем уравнении, а именно AC и ABC , которые следует взять из столбца 3 табл. 5.28. Таким образом, $(6^2 + 10^2)/8 \times 2 = 8,5$. Этот результат приводит к мысли о «переаппроксимации», но ничего нельзя доказать при таком малом количестве опытов, когда только две степени свободы были оставлены для суждения о качестве аппроксимации.

Можно рекомендовать как упражнение рассчитать предсказанные значения по уравнению, включающему 6 членов: A , B , AB , C , BC и свободный член, используя обратный метод Йетса. Сравните затем предсказанные значения с наблюдаемыми и решите, лучше ли новое уравнение. Вы заметите, что аппроксимация только с B , C и BC несколько искажает картину наблюдений, так как значения на верхнем уровне B описываются хуже, чем на нижнем. Уравнение же с шестью членами соответствует почти идеальной аппроксимации.

Отметим, что для малых факторных планов типична неопределенность детальной интерпретации данных. Довольно значительная часть найденных эффектов попадает в сомнительную область; \hat{A} и \hat{AB} превышают их ожидаемые стандартные ошибки, но меньше их удвоенных значений. Ясно, что объем выборки недостаточен для получения надежных выводов. При рассмотрении планов больших размеров выявление малых или противоречивых моделей будет одним из основных вопросов.

5.5.10. Одно anomальное наблюдение в эксперименте 2^{3+0}

Искусственные данные, в столбце (0) части a табл. 5.31, порождают эффекты, представленные в соседнем столбце (3). При беглом анализе данных оказывается, что факторы A , B и C влиятельны и аддитивны. Более тщательный анализ показывает, что все четыре члена взаимодействия, хотя и малы по сравнению с главными эффектами, имеют одинаковые величины. Только небрежный экспериментатор объединит четыре значения по 50 и назовет результат несмещенной оценкой случайной ошибки.

Таблица 5.31

Схема эффектов с учетом значимости

Часть а Обозначение опыта						Часть б Обратный алгоритм Йетса					
(0)	(3)	(4)	(5)	(6)	(6)/8						
(1)	158	1650	+	1600	200	ABC	+1	2	0	0	abc
a	132	-254	+	-304	-38	BC	+1	-2	0	0	bc
b	212	166	-	216	27	AC	-1	-2	0	0	ac
ab	136	-50	-	0	0	C	-1	2	0	0	c
c	264	374	-	424	53	AB	-1	0	-4	0	ab
ac	188	-50	-	0	0	B	-1	0	4	0	b
bc	318	50	+	0	0	A	+1	-2	0	0	a
abc	242	50	+	0	0	T	+1	0	0	0	(1)

В столбце (4) выделены знаки этих четырех величин. Если имеется большая ошибка в одном наблюдении, то она войдет в каждую сумму контрастов и будет воздействовать на них в одинаковой степени. Анализ строк таблицы знаков (табл. 5.27) показывает, что возможны только восемь схем возмущений и лишь одна из них совпадает со схемой знаков в столбце (4) табл. 5.31. Полная схема приведена в столбце (5). Вместо табл. 5.27 можно воспользоваться обратным алгоритмом Йетса, как это сделано в части б табл. 5.31, для обнаружения того факта, что только опыт a мог бы быть ответственным за возмущение и что выход в этом опыте следует уменьшить на +50. Можно скорректировать столбец эффектов непосредственно, не повторяя всех вычислений, путем прибавления или вычитания 50 к каждому из его элементов со знаками, противоположными знакам в столбце (5). Таким образом получаются скорректированные контраст-суммы, показанные в столбце (6) части а.

Теперь наш вывод о величине случайной ошибки совершенно иной. Кроме того, каждый из эффектов увеличился. Конечно, в случае с реальными данными закономерность, вносимая аномальным наблюдением, не будет столь очевидной, поскольку она в какой-то мере маскируется случайной ошибкой.

Платой за некоторое прояснение ситуации является как бы полная потеря одного наблюдения. Хотя из табл. 5.31 этого не видно, на самом деле все эффекты оцениваются теперь с удвоенной дисперсией по сравнению с немодифицированным множеством данных.

Так как мы не можем надеяться оценить все восемь параметров по семи наблюдениям, то естественно отказаться от ABC. Это

эквивалентно оцениванию каждого из оставшихся эффектов совместно с эффектом ABC. Можно выделить каждый из этих эффектов из суммы с ABC с помощью обратного алгоритма Йетса, выясняя, например, какая комбинация наблюдений оценивает A—ABC. Можно сформулировать простое правило: для каждой оценки требуется набор из четырех наблюдений, отличный от других. Наборы для оценки главных эффектов расположены на паре диагонально противоположных ребер, не содержащих аномальное значение, а для оценки двухфакторных взаимодействий — на грани, у которой изменяются две компоненты, но аномальное значение всегда отсутствует. Так, для оценки фактора A при исключаемом наблюдении (1) используем четыре точки в диагональном прямоугольнике, показанные на рис. 5.9, a: ab, b, ac, c.

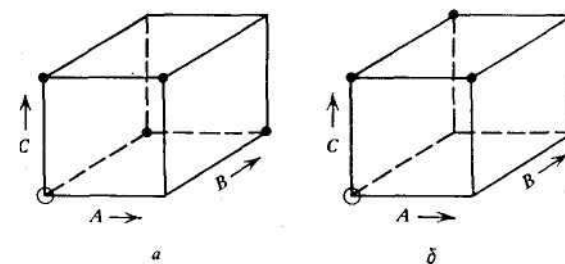


Рис. 5.9. Точки плана для оценивания A (слева) и AB (справа) в эксперименте 2³-1.

Для оценки двухфакторного взаимодействия AB следует выбрать точки, отмеченные на рис. 5.9, б. Легко проверяется утверждение о том, что контраст (abc — bc) — (ac — c) имеет математическое ожидание 4(AB+ABC).

5.5.11. Разбиение эксперимента 2³ на блоки

Преимущество разбиения на блоки состоит в возможности увеличения точности, если в блоки объединяют те наборы экспериментального материала, которые более однородны, чем вся выборка в целом. Во многих случаях два комплекта по четыре наблюдения легче получить, чем один из восьми, а две малые партии сырья более однородны, чем одна большая. Однако существует другая сторона разбиения на блоки, которая требует более пристального внимания.

Если бы даже все восемь опытов могли бы быть осуществлены на одной партии сырья, есть серьезный довод, чтобы это *не делать*. Мы всегда пытаемся получить выводы, имеющие широкое применение. Если взять все данные из одной партии сырья и предположить, что выводы должны быть применимы ко всем партиям, то такая экстраполяция будет совершенно необоснованной. Результаты будут точнее, а выводы обоснованнее, если запланировать получение половины данных на одной партии, а второй — на партии, как можно сильнее отличающейся от первой.

Конечно, что-то должно быть принесено в жертву, если необходимо устранить влияние на результаты различных партий сырья. Обычно считается наиболее надежным смешать взаимодействие ABC с эффектами партий, выполняя на одной партии опыты, в которых ABC имеет знак плюс. Это равносильно реализации опытов (1), ab , ac и bc на одной партии, а a , b , c и abc — на другой. Такие множества опытов иногда называются *четными и нечетными блоками* по числу букв в обозначении каждого опыта.

При этом блоки необходимо реализовать в случайном порядке и что наборы из четырех опытов внутри каждого блока должны быть также объективно и по отдельности рандомизированы. Таблицы Мозеса и Окфорда обеспечивают удобный способ выполнения этих операций.

Для таких небольших наборов данных, как, например, в планах 2^3 , существует не так уж много вариантов разбиения на блоки, и многие из них неприемлемы в силу их чувствительности к любым линейным или простым нелинейным дрейфам во времени. Некоторые методы, позволяющие избежать этих трудностей будут изложены позже.

Если составляются блоки по два опыта, то трудно ожидать, что эксперимент 2^3 без повторений даст много информации о взаимодействиях. Контрасты взаимодействий будут смешаны с блоковыми эффектами и, таким образом, первое множество из четырех блоков будет измерять только главные эффекты с внутриблоковой точностью, тогда как двухфакторные взаимодействия будут измеряться с межблоковой дисперсией. Четыре блока, каждый из которых содержит пару точек на концах главных диагоналей куба, таковы:

I	(1), abc
II	a , bc
III	b , ac
IV	c , ab

Оценки трех главных эффектов, не смешанных с любыми двухфакторными взаимодействиями, но, возможно, смешанных с ABC , могут быть получены с эффективностью $2/3$ после реализации любых

трех из этих блоков. Если необходимо оценить три двухфакторных взаимодействия с внутриблоковой дисперсией, то требуется иной способ разбиения на блоки. Подробнее об этом будет сказано в другом разделе.

5.5.12. Дисперсия линейных функций некоррелированных случайных переменных

Большинству читателей знакомы вопросы, изложенные в данном приложении. Тем же, кто ранее не сталкивался с этими вопросами, необходимо хорошо разобраться в них для восприятия материала этого и последующих разделов.

Предположим, что y — случайная величина с математическим ожиданием μ и дисперсией σ_y^2 . Дисперсия случайной величины определяется как математическое ожидание квадрата ее отклонения от математического ожидания. Итак,

$$E\{y\} \equiv \mu, \quad E\{(y-\mu)^2\} \equiv \sigma_y^2.$$

Рассмотрим простую линейную функцию от y : $z = a + cy$, где a и c — известные константы, и запишем выражения для математического ожидания z и квадрата отклонения z от математического ожидания:

$$\begin{aligned} E\{z\} &= E\{(a+cy)\} = \\ &= E\{a\} + E\{cy\} = \\ &\quad (\text{так как } E\{\ } \text{ — линейный оператор}) \\ &= E\{a\} + cE\{y\} = \\ &\quad (\text{так как } E\{\ } \text{ — линейный оператор}) \\ &= a + c\mu; \\ \text{Var}(z) &= E\{(z - E\{z\})^2\} = \\ &= E\{(a+cy - a - c\mu)^2\} = \\ &= E\{[c(y-\mu)]^2\} = \\ &= c^2 E\{(y-\mu)^2\} = \\ &\quad (\text{так как } E\{\ } \text{ — линейный оператор}) \\ &= c^2 \sigma_y^2. \end{aligned}$$

Окончательно можно записать

$$\text{Var}(a+cy) = c^2 \sigma_y^2.$$

Обобщим это выражение на дисперсию взвешенной суммы n некоррелированных случайных величин y_i , которые могут иметь различные математические ожидания, различные дисперсии σ_i^2 и различные веса c_i :

$$\text{Var} \sum_{i=1}^n c_i y_i = \sum_{i=1}^n c_i^2 \sigma_i^2.$$

Если все весовые коэффициенты c_i положить равными 1, то

$$\text{Var} \sum_{i=1}^n y_i = \sum_{i=1}^n \sigma_i^2.$$

Иначе говоря, дисперсия суммы некоррелированных случайных величин равна сумме дисперсий.

Если веса равны $1/n$ и $\sigma_i^2 = \sigma_y^2$ (постоянна), то

$$\begin{aligned} \text{Var} \sum_{i=1}^n c_i y_i &= \text{Var} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i = \\ &= \text{Var} \bar{y} = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sigma_i^2 = \frac{1}{n} \sigma_y^2. \end{aligned}$$

Уравнение

$$\text{Var} \bar{y} = \frac{1}{n} \sigma_y^2$$

для некоррелированных или независимых y с одинаковыми дисперсиями является, по-видимому, наиболее важным уравнением в статистике.

Возможно, что следующим по важности является уравнение

$$\text{Var} \sum_{i=1}^n c_i y_i = \sigma_y^2 \sum_{i=1}^n c_i^2, \tag{5.23}$$

которое справедливо, когда все y_i некоррелированы и имеют одинаковые дисперсии, но необязательно одинаковые генеральные средние.

Применяя выражение (5.23) к общему уравнению типа (5.20), т. е. к

$$Y = \bar{y} + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2,$$

и учитывая, что b и \bar{y} — случайные величины, некоррелированные (ортогональные) с одинаковой дисперсией σ^2/N , а значения x фиксированы, получаем

$$\begin{aligned} \text{Var} Y &= \text{Var} \bar{y} + x_1^2 \text{Var} b_1 + x_2^2 \text{Var} b_2 + x_1^2 x_2^2 \text{Var} b_{12} = \\ &= \frac{\sigma^2}{N} (1 + x_1^2 + x_2^2 + x_1^2 x_2^2), \end{aligned}$$

что совпадает с (5.21).

5.6. Алгоритмы полного факторного эксперимента (ПФЭ) первого порядка

Как мы знаем, факторный эксперимент первого порядка предполагает такое проведение исследований, которое позволяет некоторым оптимальным образом получить информацию об объекте, оформить ее в виде полиномиальной линейной модели и провести ее статистический анализ. Полученная математическая модель обычно служит целям экстраполяции (в небольших пределах), оптимизации (поиска локального оптимума) и может использоваться для интерполяции.

Оптимальное расположение точек в факторном пространстве и линейное преобразование координат позволяет преодолеть недостатки классического регрессионного анализа. Одновременное варьирование всех факторов позволяет получить коэффициенты математической модели с меньшей ошибкой, не увеличивая, а чаще уменьшая число опытов.

ПФЭ фактически представляют собой применение классических методов наименьших квадратов и регрессионного анализа (МНК и дисперсионный статистический анализ), проводимых по определенному плану.

5.6.1. Алгоритм полного факторного эксперимента на двух уровнях с равным числом параллельных опытов.

Исходные данные. Ставится задача определения локального оптимума на объекте исследования, для этого предполагается использовать математическую модель, полученную с помощью полного факторного эксперимента. Выбирают факторы и выходную переменную, задают области определения факторов и выходной переменной

$$\begin{aligned} y_{\min} &\leq y \leq y_{\max}; \\ X_{1 \min} &\leq X_1 \leq X_{1 \max}; \\ X_{2 \min} &\leq X_2 \leq X_{2 \max}; \end{aligned} \tag{5.24}$$

Кодирование. В области определения факторов выбирается точка $X_{i0}, i = \overline{1, n}$ (нулевой уровень факторов), которая в предварительных исследованиях была признана наилучшей с точки зрения оптимума y . Задается интервал варьирования факторов ΔX_i . Определяются верхние и нижние уровни факторов:

$$\begin{aligned} X_{iB} &= X_{i0} + \Delta X_i; \\ X_{iB} &= X_{i0} - \Delta X_i \end{aligned} \quad (5.25)$$

При условии, что $(X_{iB} \div X_{iB}) < (X_{imin} \div X_{imax})$.

Кодируются факторы (переход к новой безразмерной системе координат x_1, x_2, \dots, x_n):

$$\begin{aligned} x_{iB} &= \frac{X_{iB} - X_{i0}}{\Delta X_i}; \\ x_{iB} &= \frac{X_{iB} - X_{i0}}{\Delta X_i}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

В новой системе координат факторы принимают значения +1 и -1.

План эксперимента. План проведения эксперимента (матрица планирования) записывается в виде табл. 5.32.

Таблица 5.32.

План эксперимента

Номер опыта	x_0	План				Выходная переменная				\bar{y}
		x_1	x_2	...	x_n	y_{u1}	y_{u2}	...	y_{um}	
1	+1	+1	+1	...	+1	y_{11}	y_{12}	...	y_{1m}	\bar{y}_1
2	+1	-1	+1	...	+1	y_{21}	y_{22}	...	y_{2m}	\bar{y}_2
...
N	+1	-1	-1	...	-1	y_{N1}	y_{N2}	...	y_{Nm}	\bar{y}_N

В приведенном плане x_0 — фиктивная переменная, равная единице; здесь также проводятся параллельные опыты — их число равно m в каждой строке матрицы планирования.

Предложенный план эксперимента обладает *ортгоналностью*:

$$\sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} = 0, \quad i \neq j, \quad i, j = 0, 1, \dots, n, \quad (5.27)$$

что соответствует следующему следствию.

Следствие. Если дисперсионная матрица диагональная, то коэффициенты уравнения регрессии будут определяться независимо друг от друга

$$\begin{aligned} (X^T X)^{-1} &= \begin{bmatrix} c_{00} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_{11} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & c_{nn} \end{bmatrix}, \\ b_i &= c_{ii} \sum_{u=1}^N x_{iu} y_u, \end{aligned} \quad (5.28)$$

где

$$c_{ii} = 1 / \sum_{u=1}^N x_{iu}^2. \quad (5.29)$$

В этом случае исключение или добавление строк или столбцов в матрице нормальных уравнений не изменяет остальных коэффициентов.

А также вытекающему из него преимуществу независимого определения коэффициентов [см. (5.28) и (5.29)].

Как следствие (5.27) план эксперимента обладает *симметричностью*

$$\sum_{u=1}^N x_{iu} = 0, \quad (5.30)$$

и *нормировкой*

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = N. \quad (5.31)$$

Ортогональные планы ПФЭ (для линейных моделей) обладают также *ротатабельностью*. Последнее предполагает равенство и минимальность дисперсий предсказанных значений выходной переменной для всех точек факторного пространства. По закону накопления ошибок для дисперсии предсказанных уравнением регрессии значений выходной переменной можно записать:

$$s_y^2 = s_{b_0}^2 + s_{b_1}^2 x_1^2 + \dots + s_{b_n}^2 x_n^2. \quad (5.32)$$

Из условий

$$M[(y_i - m_{y_i})(y_j - m_{y_j})] = 0;$$

$$\sigma_{y_1}^2 = \sigma_{y_2}^2 = \dots = \sigma_{y_N}^2 = \sigma_0^2.$$

вытекает, что дисперсии коэффициентов регрессии равны между собой, тогда

$$\hat{s}_y^2 = s_{b_i}^2 \left(1 + \sum_{i=1}^n x_i^2\right), \quad (5.33)$$

или с учетом того, что

$$\sum_{i=1}^n x_i^2 = \rho^2$$

(ρ — радиус сферы)

$$\hat{s}_y^2 = s_{b_i}^2 (1 + \rho^2). \quad (5.34)$$

Отсюда ясно, что дисперсия предсказанного значения выходной переменной зависит только от радиуса сферы. Это свойство ротатабельности эквивалентно независимости дисперсии выходной переменной от вращения координат в центре плана и оправдано при поиске оптимума градиентными методами. Интуитивно понятно, что исследователю удобно иметь дело с такой информацией, содержащейся в уравнении регрессии, которая равномерно «размазана» по сфере радиусом ρ . Действительно, такое положение можно признать разумным, ибо с помощью уравнения регрессии будут предприниматься попытки предсказать положение еще неизвестных участков факторного пространства. Равноценность этих участков в смысле ошибки предсказания, по-видимому, является необходимой.

Расчет коэффициентов уравнения регрессии. Исходя из (5.28), (5.29) и (5.31) коэффициенты рассчитываются по уравнению

$$b_i = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu} \bar{y}_u, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n, \quad (5.35)$$

где

$$\bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m y_{uk}, \quad (5.36)$$

и окончательно

$$b_i = \frac{1}{Nm} \sum_{u=1}^N \sum_{k=1}^m x_{iu} y_{uk}, \quad (5.37)$$

где N — число строк матрицы планирования (число разных условий опыта); m — число параллельных опытов на каждой строке матрицы.

Построчные дисперсии по параллельным опытам на каждой строке матрицы рассчитываются по уравнению

$$s_u^2 = \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \bar{y}_u)^2 / f_u, \quad (5.38)$$

где

$$f_u = m_u - 1. \quad (5.39)$$

Проверка однородности дисперсий осуществляется по уравнениям (5.34) и (5.35) при условии $m_i = m$, $p = N$; индекс i заменяется индексом u .

Принятие решений. Если не выполняется условие (5.35), то гипотеза об однородности дисперсий отвергается и одними из решений являются увеличение числа параллельных опытов, изменение метода контроля выходной переменной, масштабирование выходной переменной.

Расчет ошибки опыта производится усреднением построчных дисперсий

$$s_0^2 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N s_u^2 = \frac{1}{N(m-1)} \sum_{u=1}^N \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \bar{y}_u)^2 \quad (5.40)$$

для числа степеней свободы

$$f_0 = N(m-1). \quad (5.41)$$

Оценка значимости коэффициентов регрессии производится расчетом t -критерия Стьюдента по формуле

$$t_{ip} = \frac{|b_i|}{s_{b_i}}, \quad (5.42)$$

расчетом дисперсий коэффициентов по формуле

$$s_{b_i}^2 = c_{ii} s_0^2 = \frac{s_0^2}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2}. \quad (5.43)$$

с учетом (5.31) и оценкой по условию $t_{ip} > t_\tau (f_0 = N_0 - 1, q = 0,05)$:

$$s_{b_i}^2 = \frac{s_0^2}{Nm}. \quad (5.44)$$

Принятие решений. Если для какого-то коэффициента условие $t_{ip} > t_\tau (f_0 = N_0 - 1, q = 0,05)$ не выполняется, то соответствующий фактор можно признать незначимым и исключить его из уравнения. Однако рекомендуется помнить, что скорее всего полученная незначимость фактора является следствием неудачно выбранного (малого) интервала варьирования. Отсюда ясно, что более правильным является решение повторить эксперимент, расширив интервал

варьирования для исследуемого фактора. Конечно, при этом число опытов, а значит и длительность эксперимента, возрастают. Иногда половину опытов сохраняют тем, что интервал варьирования расширяют только в одну сторону, другой же (верхний или нижний) уровень остается прежним.

Если фактор остался незначимым после повторения эксперимента и всех необходимых расчетов, то его (или их) отбрасывают и переходят к анализу адекватности уравнения.

Проверка адекватности уравнения регрессии осуществляется по формулам

$$S_{\text{ост}} = \sum_{u=1}^N (y_u - \hat{y}_u)^2, \tag{5.45}$$

$$s_{\text{ад}}^2 = \frac{S_{\text{ост}}}{f_{\text{ад}}}; \tag{5.46}$$

$$F_p = \frac{s_{\text{ад}}^2}{s_0^2}. \tag{5.47}$$

с учетом параллельных опытов:

$$s_{\text{ад}}^2 = \frac{m}{N-l} \sum_{u=1}^N (y_u - \hat{y}_u)^2. \tag{5.48}$$

Поиск F_T производится для степеней свободы $f_{\text{ад}}$

$$f_{\text{ад}} = N - l, \tag{5.49}$$

и f_0 (5.41)

Принятие решений. При выполнении условия

$$F_p < F_T(f_{\text{ад}} = N - l, f_0 = N_0 - 1, q = 0,05) \tag{5.50}$$

т. е. при неадекватной линейной модели, наиболее часто принимают решение об уменьшении интервалов варьирования факторов и повторении эксперимента. Такое решение хотя и уменьшает кривизну поверхности отклика, однако может привести к появлению незначимых коэффициентов. Очень эффективно включать в план эксперимента новый фактор из числа отсеянных ранее. Если условие (5.50) выполняется, то адекватный линейный полином можно использовать для решения различных задач.

5.6.2. Алгоритм ПФЭ с параллельными опытами в одной точке факторного пространства.

Исходные данные не отличаются от алгоритма ПФЭ с одинаковым числом параллельных опытов (см. 5.6.1); так же проводится и кодирование.

План эксперимента строится с учетом априорной информации о хорошей воспроизводимости опытов, что не требует проверки однородности построчных дисперсий. Тогда для расчета ошибки опыта достаточно провести m параллельных опытов (см. 5.6.1); так же проводится и пространство (без потери общности они могут быть поставленными в центре плана с координатами $X = \{0,0,\dots,0\}$, табл. 5.33).

Расчет ошибки опыта производится по формуле

$$s_0^2 = \sum_{k=1}^{N_0} (y_{0k} - \bar{y}_0)^2 / f_0, \tag{5.51}$$

где

$$f_0 = N_0 - 1. \tag{5.52}$$

За исключением этапа проверки однородности дисперсий, все остальные этапы данного алгоритма совпадают с алгоритмом 5.6. 1.

Таблица 5.33.

План эксперимента						
Номер опыта	x_0	План				Выходная переменная
		x_1	x_2	\dots	x_n	
1	+1	+1	+1	\dots	+1	y_1
2	+1	-1	+1	\dots	+1	y_2
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
N	+1	-1	-1	\dots	-1	y_N
$N+1$	+1	0	0	\dots	0	y_{01}
$N+2$	+1	0	0	\dots	0	y_{02}
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
$N+N_0$	1	0	0	\dots	0	y_{0N_0}

5.6.3. Алгоритм ПФЭ при неравном числе параллельных опытов.

Введение. На практике приходится сталкиваться с такими ситуациями, которые не позволяют при реализации эксперимента выдержать одинаковое число параллельных опытов по каждой строке матрицы планирования. Это происходит либо из-за случайных грубых нарушений условий эксперимента, когда измерение признается неудачным, а повторить его по каким-либо причинам не удастся, либо вследствие неуверенности экспериментатора в «чистоте» опыта.

Последовательность обработки результатов эксперимента при неравном количестве параллельных опытов не нарушается, однако алгоритмы расчета меняются вследствие нарушения ортогональности матрицы планирования. Это приводит к изменению расчетных формул для коэффициентов регрессии и их ошибок, а также для дисперсии адекватности.

Исходные данные не отличаются от исходных данных алгоритма 5.6.1.

План эксперимента соответствует приведенному в табл. 5.32, однако в каждой строке число параллельных опытов m_u может быть иным.

Расчет коэффициентов уравнения регрессии. Вследствие неортогональности матрицы планирования расчет коэффициентов регрессии осуществляется по методу наименьших квадратов. Лучше всего использовать матричную форму записи и стандартные программы ЭВМ — обращение матриц, транспонирование, расчет детерминанта матриц и т. д.

Расчет ошибки опыта. Рассчитываются построчные дисперсии по формулам (5.38) и (5.39).

При усреднении построчных дисперсий пользуются средневзвешенными значениями дисперсий, взятыми с учетом числа степеней свободы f_u для u -ой строки матрицы планирования:

$$s_0^2 = \frac{s_1^2 f_1 + s_2^2 f_2 + \dots + s_N^2 f_N}{f_1 + f_2 + \dots + f_N} = \frac{\sum_{u=1}^N f_u s_u^2}{\sum_{u=1}^N f_u} \quad (5.53)$$

Проверка однородности дисперсий. При неравном числе параллельных опытов для проверки однородности дисперсий используется критерий Бартлета. Для этого рассчитывается величина A_p :

$$A_p = \frac{1}{c} (f_0 \lg s_0^2 - \sum_{u=1}^N f_u \lg s_u^2); \quad (5.54)$$

$$c = 0,4343 \left[1 + \frac{1}{3(N-1)} \left(\sum_{u=1}^N \frac{1}{f_u} - \frac{1}{f_0} \right) \right], \quad (5.55)$$

$$f_0 = \sum_{u=1}^N f_u, \quad (5.56)$$

где f_0 — число степеней свободы; N — число сравниваемых дисперсий (здесь их число равно числу строк матриц).

Принятие решений. Бартлет доказал, что рассчитанная величина A_p приближается к χ^2 -распределению с $N - 1$ степенями свободы. Тогда, если выполняется неравенство

$$A_p = \chi_p^2 < \chi_{\tau}^2, \quad (f_0, q = 0,05), \quad (5.57)$$

то дисперсии признаются однородными.

Критерий Бартлета базируется на нормальном распределении случайной величины y_u . Поэтому проверка нормальности закона распределения y_u весьма желательна.

Учитывая сложность применения критерия Бартлета при неодинаковом числе параллельных опытов, практически удобно использовать критерий Фишера. Для этого составляется отношение максимальной построчной дисперсии к минимальной:

$$F_p = \frac{s_{u \max}^2}{s_{u \min}^2}. \quad (5.58)$$

Очевидно, что если выполняется условие

$$F_p < F_{\tau} \quad (5.59)$$

При $f_{u \max} = m_{u \max} - 1$, $f_{u \min} = m_{u \min} - 1$ и заданном уровне значимости q (т. е. максимальная и минимальная дисперсии отличаются незначимо), то и остальные дисперсии будут отличаться незначимо. Таким образом, гипотезу об однородности дисперсий можно признать правомерной при выполнении условия (5.59).

Проверка значимости коэффициентов регрессии не отличается от произведенной выше при равном числе параллельных опытов. Следует отметить, что смысл проверки несколько меняется вследствие неортогональности матрицы планирования, что приводит к появлению недиагональных элементов в матрице $(X^T X)^{-1}$. Однако по значениям они обычно невелики и поэтому критерий Стьюдента можно использовать как средство ранжирования коэффициентов регрессии в соответствии с формулами (5.42),

$$t_{ip} > t_{\tau} (f_0 = N_0 - 1, q = 0,05) \quad (5.60)$$

числом степеней свободы f_0 (5.56) и заданным уровнем значимости.

Принятие решений не отличается от предыдущих алгоритмов.

Проверка адекватности уравнения регрессии. Расчет дисперсии адекватности осуществляется по формуле

$$s_{ад}^2 = \frac{1}{N-l} \sum_{u=1}^N m_u (y_u - \hat{y}_u)^2. \quad (5.61)$$

Физический смысл формулы таков: различию между экспериментальным и расчетным значениями выходной переменной придается тем больший вес, чем большее число опытов реализуется. Здесь m_u фактически является весовым коэффициентом. Для проверки адекватности используется критерий Фишера в соответствии с (5.47) и (5.50).

Принятие решений не отличается от предыдущих алгоритмов.

5.6.4. Алгоритм ПФЭ с расчетом коэффициентов взаимодействий факторов.

Ранее уже упоминалось, что цель ПФЭ — получение адекватной линейной модели, которую предполагается использовать для оптимизации объекта исследования. В задачах интерполяции же математическая модель должна адекватно описывать объект в области эксперимента и потому может быть нелинейной. Планы ПФЭ, с одной стороны, позволяют достаточно просто рассчитать коэффициенты при взаимодействиях факторов и, если они значимы, использовать полученную модель для интерполяционных целей. С другой стороны, значимость коэффициентов при взаимодействиях факторов сразу же позволяет сделать вывод о неадекватности линейной модели.

Исходные данные в отличие от 5.6.1 пополняются условием необходимости расчета коэффициентов при взаимодействиях факторов, т. е. ищется модель в виде

$$\hat{y} = b_0 x_0 + b_1 x_1 + \dots + b_n x_n + b_{12} x_1 x_2 + \dots + b_{ij} x_i x_j + \dots = \sum_{u=0}^n b_u x_u + \sum_{i \neq j} b_{ij} x_i x_j. \quad (5.62)$$

План эксперимента дополняется расчетными столбцами $x_i x_j$. Например, план ПФЭ 2^3 приведен в табл. 5.34.

Таблица 5.34.

Номер опыта	x_0	План						Выходная переменная
		реализуемый			расчетный			
		x_1	x_2	x_3	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$x_2 x_3$	
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_1
2	-1	+1	+1	+1	-1	-1	+1	y_2
3	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	y_3
4	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	y_4
5	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	y_5
6	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	y_6
7	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	y_7
8	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	y_8

Расчет коэффициентов проводится по уравнению

$$b_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} y_u, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad i \neq j. \quad (5.63)$$

Остальные этапы не отличаются от приведенных в алгоритме 5.6.1.

Замечание 1. В задачах оптимизации необходимо, чтобы все b_{ij} были незначимы, а в задачах интерполяции наоборот — значимы (хотя бы некоторые). Поэтому для задач оптимизации всегда проводят расчет b_{ij} и используют их для проверки адекватности модели.

Замечание 2. Существует еще одна проверка нелинейности модели оценкой гипотезы о равенстве нулю суммы коэффициентов при квадратичных членах. С этой целью в центре плана ставят несколько опытов, определяют среднее \bar{y}_0 и вычисляют разность $(b_0 - \bar{y}_0)$, которая и является оценкой суммы коэффициентов при квадратичных членах.

Действительно, свободный член b_0 , который рассчитывают по уравнению:

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{0u} y_u = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N y_u = \bar{y}, \quad (5.64)$$

является совместной оценкой β_0 и $\sum_{i=1}^n \beta_{ii}$:

$$b_0 \rightarrow \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_{ii}, \quad (5.65)$$

где β_0 — свободный член уравнения регрессии по генеральной совокупности экспериментальных данных; β_{ij} — коэффициенты при x_i^2 , также по генеральной совокупности.

Это положение вытекает из идентичности столбцов матрицы планирования при x_0 и x_i^2 (они все равны +1).

Тогда разность $(\bar{y} - \bar{y}_0) \rightarrow \sum \beta_{ii}$ может в какой-то мере служить оценкой кривизны поверхности отклика выходной переменной. Значимость этой разницы проверяют по условию:

$$t_p = \frac{(b_0 - \bar{y}_0) \sqrt{N}}{s_0} > t_{\tau}, \tag{5.66}$$

где s_0 — среднее квадратичное отклонение ошибок опыта; N — число опытов; t_{τ} — табличное значение критерия Стьюдента для числа степеней свободы дисперсии s_0^2 и уровня значимости q .

Выполнение условия (5.66) свидетельствует о значимости квадратичных членов, и требуется их введение в интерполяционное уравнение или уменьшение интервалов варьирования факторов для получения адекватной линейной модели.

5.7. Факторный эксперимент второго порядка

Задачей факторного эксперимента второго порядка является проведение оптимального плана исследований, получение нелинейной модели и ее статистический анализ. Модель применяется для поиска координаты оптимума и может использоваться для целей интерполяции и экстраполяции.

Обычно факторный эксперимент второго порядка используется для описания существенно нелинейных объектов полиномом

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^n b_{1i} x_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n b_{1j} x_i x_j + \sum_{i=1}^n b_{2i} x_i^2. \tag{5.67}$$

Пояснение. Построить планы, по которым можно получить модель в виде (5.67) с помощью ранее рассмотренных алгоритмов не удастся хотя бы потому, что условие ортогональности в столбцах матрицы не выполняется (сумма элементов столбцов не равна нулю). Также требуется поставить большое число опытов. Очевидно, что планирование на трех уровнях 3^n неэкономично и потому предложено дополнить план ПФЭ 2^n определенными точками факторного пространства так, чтобы выполнялось условие ортогональности или ротатабельности, но при этом число опытов таких планов было меньшим, чем ПФЭ 3^n :

$$N = 2^n + 2n + N_0 < 3^n, \tag{5.68}$$

где каждое слагаемое определяет число опытов ПФЭ 2^n , число «звездных» и число нулевых опытов (в центре плана). Из формулы (5.68) вытекает, что предлагаемые планы (при $n > 2$) экономичнее планов на трех уровнях (обычно $N_0 = 1$).

Большим преимуществом таких планов является то, что их можно получать из планов 2^n . Для построения используется план 2^n , линейная модель по которому при поиске области оптимума оказалась неадекватной. Все проведенные эксперименты остаются, а план пополняется определенным количеством специально подобранных «звездных» точек.

Организованные таким образом планы называются центральными и композиционными. Общий вид плана приведен в табл. 5.35.

Таблица 5.35.

План эксперимента

Номер опыта	x_0	План					Выходная переменная
		x_1	x_2	$x_1 x_2$	x_1^2	x_2^2	
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_1
2	+1	+1	-1	-1	+1	+1	y_2
3	+1	-1	+1	-1	+1	+1	y_3
4	+1	-1	-1	+1	+1	+1	y_4
5	+1	+ α	0	0	α^2	0	y_5
6	+1	- α	0	0	α^2	0	y_6
7	+1	0	+ α	0	0	α^2	y_7
8	+1	0	- α	0	0	α^2	y_8
9	+1	0	0	0	0	0	y_9

Выбор плеча «звездных» точек и числа нулевых точек зависит от критерия оптимальности плана. На практике широко применяются ортогональные и ротатабельные планы второго порядка.

5.7.1. Алгоритм ортогонального плана второго порядка (ЦКОП).

Исходные данные. Имеется план ПФЭ 2^n . Математическая модель, полученная по этому плану, неадекватная. Условия (5.24) остаются прежними.

Кодирование. Для получения ортогональных планов второго порядка необходимо провести некоторое преобразование столбцов квадратичных переменных и столбца x_0 . Это вызвано

неортогональностью указанных столбцов матрицы планирования (см. табл. 5.35), поскольку

$$\sum_{u=1}^N x_{0u}x_{iu}^2 \neq 0; \tag{5.69}$$

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2x_{ju}^2 \neq 0. \tag{5.70}$$

Неравенства справедливы, поскольку значения в столбцах x_0 и x_i^2 всегда положительны. Заметим, что в ортогональных планах на количество нулевых точек обычно не накладывают никаких условий, поэтому N_0 принимают равным единице.

Для ортогональности исходного плана введем преобразование

$$x'_i = x_i^2 - \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = x_i^2 - \bar{x}_i^2, \tag{5.71}$$

тогда

$$\sum_{u=1}^N x_{0u}x'_{iu} = \sum_{u=1}^N x_{0u}x_{iu}^2 - \sum_{u=1}^N x_{0u}x_i^2 = 0.$$

Если приравнять недиагональный элемент ковариационной матрицы $(X^T X)^{-1}$ нулю и решить его относительно α , то можно найти его значение, организующее ортогональность столбцов x_i^2 (значения α для различных n приведены в табл. 5.36).

Таблица 5.36.

Наименование элементов плана	Число независимых факторов			
	2	3	4	5
Ядро плана	2^2	2^3	2^4	2^{5-1}
α	1,00	1,215	1,414	1,547

План эксперимента. Ортогональная матрица композиционного плана для $n=2$ приведена в табл. 5.37. Значения x'_i находятся по формуле (5.71)

$$1 - 6/9 = 1/3, \text{ или } 0 - 6/9 = -2/3.$$

Таблица 5.37.

Номер опыта	x_0	План		Расчетная матрица			Выходная переменная
		x_1	x_2	$x_1 x_2$	x'_1	x'_2	
1	+1	+1	+1	1/3	1/3	1/3	y_1
2	+1	+1	-1	1/3	1/3	1/3	y_2
3	+1	-1	+1	1/3	1/3	1/3	y_3
4	+1	-1	-1	1/3	1/3	1/3	y_4
5	+1	0	+1	1/3	1/3	-2/3	y_5
6	+1	0	-1	1/3	1/3	-2/3	y_6
7	+1	+1	0	-2/3	-2/3	1/3	y_7
8	+1	-1	0	-2/3	-2/3	1/3	y_8
9	+1	0	0	-2/3	-2/3	-2/3	y_9

Ортогональная матрица композиционного плана для $n = 3$ приведена в табл. 5.38. Значения x'_i находят по формуле (5.71)

$$1 - 10,94/15 = 1 - 0,73, \text{ или } 0 - 0,73 = -0,73.$$

Расчет коэффициентов регрессии осуществляется в соответствии с методом наименьших квадратов. Коэффициенты и их дисперсии можно также рассчитывать по формулам

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N y_u; \tag{5.72}$$

$$b_i = \frac{\sum_{u=1}^N x_{iu}y_u}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2}; \tag{5.73}$$

$$b_{ij} = \frac{\sum_{u=1}^N x_{iu}x_{ju}y_u}{\sum_{u=1}^N (x_{iu}x_{ju})^2}; \tag{5.74}$$

$$b_{ii} = \frac{\sum_{u=1}^N x'_{iu}y_u}{\sum_{u=1}^N (x'_{iu})^2}; \tag{5.75}$$

$$s_{b_0}^2 = \frac{s_0^2}{N}; \tag{5.76}$$

$$s_{b_i}^2 = \frac{s_0^2}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2}; \quad (5.77)$$

$$s_{b_{ij}}^2 = \frac{s_0^2}{\sum_{u=1}^N (x_{iu}x_{ju})^2}; \quad (5.78)$$

$$s_{b_{ii}}^2 = \frac{s_0^2}{\sum_{u=1}^N (x'_{iu})^2}; \quad (5.79)$$

где s_0^2 — ошибка опыта, известная по полному факторному эксперименту.

Дисперсия величины b_0 оценивается по уравнению

$$s_{b_0}^2 = s_{b_0}^2 + (x_1^2) s_{b_{11}}^2 + \dots + (x_n^2) s_{b_{nn}}^2. \quad (5.80)$$

Оценка значимости коэффициентов проводится по критерию Стьюдента (см. (5.42), а решения принимаются в соответствии с (5.60). Благодаря ортогональности плана после отбрасывания незначимых коэффициентов оставшиеся не пересчитываются. Проверка адекватности уравнения регрессии осуществляется расчетом $S_{ост}$ сначала по формуле (5.45) и далее по формулам $f_{ад}=N-1$, (5.46), (5.47).

Значение \hat{y}_u определяется по уравнению

$$\hat{y} = b'_0 + b_1x_1 + \dots + b_nx_n + b_{12}x_1x_2 + \dots + b_{n-1,n}x_{n-1}x_n + b_{11}(x_1^2 - \bar{x}_1^2) + \dots + b_{nn}(x_n^2 - \bar{x}_n^2), \quad (5.81)$$

или

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + \dots + b_nx_n + b_{12}x_1x_2 + \dots + b_{n-1,n}x_{n-1}x_n + b_{11}x_1^2 + \dots + b_{nn}x_n^2. \quad (5.82)$$

Переход от (5.81) к (5.82) осуществляется расчетом величины свободного члена по уравнению

$$b_0 = b'_0 - b_{11}\bar{x}_1^2 - \dots - b_{nn}\bar{x}_n^2, \quad (5.83)$$

где $\bar{x}_i^2 = x_i^2 - x'_i$.

Принятие решения осуществляется в соответствии с формулой:

$$F_p < F_T(f_{ад}=N-1, f_0=N_0-1, q=0,05)$$

Таблица 5.38.

		План эксперимента															
		y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7	y_8	y_9	y_{10}	y_{11}	y_{12}	y_{13}	y_{14}	y_{15}	
Выходная переменная	x_2x_3	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	0	0	0	0	0	0	0	
	x_1x_3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	0	0	0	0	0	0	0	
	x_1x_2	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	0	0	0	0	0	0	0	
	x'_3	0,27	0,27	0,27	0,27	0,27	0,27	0,27	0,27	-0,73	-0,73	-0,73	-0,73	0,746	0,746	-0,73	
	x'_2	0,27	0,27	0,27	0,27	0,27	0,27	0,27	0,27	-0,73	-0,73	-0,746	-0,746	-0,73	-0,73	-0,73	
	x'_1	0,27	0,27	0,27	0,27	0,27	0,27	0,27	0,27	0,746	0,746	-0,73	-0,73	-0,73	-0,73	-0,73	
	План	x_3	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	0	0	0	0	1,215	-1,215	0
		x_2	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	0	0	1,215	-1,215	0	0	0
		x_1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	1,215	-1,215	0	0	0	0	0
	x_0	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	
	Номер опыта	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	

5.7.2. Алгоритм ротатабельности плана второго порядка (ЦКРП).

Исходные данные те же, что и в алгоритме ЦКОП 5.7.1.

Кодирование и основы построения плана. Построение ротатабельности планов второго порядка — сложная математическая задача, требующая доказательства нескольких теорем. Воспользуемся результатами исследований, где предлагается условия ротатабельности задавать уравнениями

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = N\lambda_2, \quad i = 1, 2, \dots, n;$$

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^4 = 3 \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}^2 = 3N\lambda_4$$

$$(i \neq j, \quad i, j = 1, 2, \dots, n), \tag{5.84}$$

где n — число факторов; N — число опытов; λ_2 и λ_4 — некоторые константы, связанные неравенством

$$\frac{\lambda_4}{\lambda_2} > \frac{n}{n+2}, \tag{5.85}$$

которое является условием невырожденности информационной матрицы $(X^T X)$.

Если ввести несколько точек на сфере с нулевым радиусом, т. е. несколько точек в центре плана N_0 , то можно рассчитать параметр

$$\lambda_4 = \frac{n(N_0 + N_1)}{(n+2)N_1}, \tag{5.86}$$

где $N_1 = N - N_0$, и усилить неравенство (5.85), поскольку

$$\lambda_4 > \frac{n}{n+2}. \tag{5.87}$$

«Звездные» точки ротатабельности планов строят на осях координат факторов с величиной звездного плеча α , рассчитанного по формуле

$$\alpha = 2^{n/4}, \tag{5.87}$$

а для дробного факторного эксперимента

$$\alpha = 2^{\frac{n-p}{2}}, \tag{5.88}$$

где n — число факторов; p — определяет дробность реплики ($p=1$ — полуреплика, $p=2$ — четверть реплики и т.д.).

Выбор α , числа «звездных» и числа нулевых точек удобно делать по табл. 5.39.

Таблица 5.39.

Наименование элементов плана	ДФЭ 2^n				ДФЭ 2^{n-p}
	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$	$n=5$
Число опытов в ядре матрицы	$2^2=4$	$2^3=6$	$2^4=16$	$2^5=32$	$2^{5-1}=16$
Число «звездных» точек	4	6	8	10	10
Число нулевых точек	5	6	7	10	6
Значение α	1,414	1,682	2,000	2,378	2,000

План эксперимента совпадает с ЦКОП, но при других значениях параметров α , N_0 (см. табл. 5.35).

Расчет коэффициентов регрессии. Обработка результатов реализации планов второго порядка требует в целом значительной вычислительной работы и лучше всего ее проводить на ЭВМ по формуле, которая представляет собой систему нормальных уравнений и имеет вид

$$(X^T X) B = X^T Y,$$

а ее решение

$$(X^T X)^{-1} (X^T X) B = (X^T X)^{-1} X^T Y;$$

$$E B = (X^T X)^{-1} X^T Y;$$

$$B = (X^T X)^{-1} X^T Y,$$

где E — единичная матрица; $(X^T X)^{-1}$ — обратная матрица (дисперсионная), находится стандартными методами.

Специфический характер матрицы $(X^T X)$ для ЦКРП позволяет получить общие формулы для расчета коэффициентов. Основная задача вычислительной машины в этом случае — выдача на печать следующих элементов обращенной матрицы:

$$\sum_{u=1}^N y_u = (0y), \quad \sum_{u=1}^N x_{iu} y_u = (iy);$$

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 y_u = (i iy), \quad \sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} y_u = (ij y). \tag{5.90}$$

Если обозначить

$$\frac{1}{2\lambda_4[(n+2)\lambda_4 - n]} = A; \quad \frac{N}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2} = C, \quad (5.91)$$

то с учетом (5.86), (5.90) и (5.91) коэффициенты регрессии можно определить по формулам

$$b_0 = \frac{A}{N} [2\lambda_4^2 (n+2)(0y) - 2\lambda_4 C \sum_{i=1}^N (iy)]; \quad (5.92)$$

$$b_i = \frac{C}{N} (iy); \quad (5.93)$$

$$b_{ii} = \frac{A}{N} \{C^2[(n+2)\lambda_4 - n](iyy) + C^2(1 - \lambda_4)\} \sum_{i=1}^n (iyy); \quad (5.94)$$

$$b_{ij} = \frac{C^2}{N\lambda_4} (ijy). \quad (5.95)$$

Для $n = 3$ приведенные формулы имеют вид

$$b_0 = 0,1633(0y) - 0,05679 (iyy); \quad (5.96)$$

$$b_i = 0,07322(iy); \quad (5.97)$$

$$b_{ii} = 0,0625 (iyy) + 0,06889(iiy) - 0,05679(0y); \quad (5.98)$$

$$b_{ij} = 0,125 (ijy). \quad (5.99)$$

Оценка значимости коэффициентов регрессии. Дисперсии для коэффициентов регрессии рассчитываются по формулам

$$s_{b_0}^2 = \frac{2A\lambda_4(n+2)s_0^2}{N}; \quad (5.100)$$

$$s_{b_i}^2 = \frac{Cs_0^2}{N}; \quad (5.101)$$

$$s_{b_{ii}}^2 = \frac{A[(n+1)\lambda_4 - (n-1)]C^2s_0^2}{N}; \quad (5.102)$$

$$s_{b_{ij}}^2 = \frac{C^2s_0^2}{N\lambda_4}; \quad (5.103)$$

где s_0^2 — дисперсия опыта.

Оценка значимости коэффициентов регрессии проводится так же, как и в ЦКОП.

Принятие решений. Если незначимым оказался один из квадратичных эффектов, то после его исключения уравнение регрессии необходимо посчитать заново (это связано с неортогональностью

квадратичных столбцов матрицы планирования). Остальные незначимые коэффициенты упускаются без пересчета уравнения.

Проверка адекватности уравнения регрессии. Преобразования ротатбельного плана несколько изменили формулы расчета дисперсий.

Так, сумму квадратов отклонений в центре плана можно подсчитать по формуле

$$S_0 = \sum_{k=1}^{N_0} (y_{0k} - \bar{y}_0), \quad f_0 = N_0 - 1, \quad (5.104)$$

где f_0 — число степеней свободы этой суммы; $k=1,2,\dots,N_0$.

Дисперсия опыта получается делением суммы (5.104) на f_0 :

$$s_0^2 = S_0/f_0 - 1. \quad (5.105)$$

Остаточная сумма квадратов вычисляется так:

$$S_{ост} = \sum_{u=1}^N (y_u - \bar{y}_u)^2, \quad f_{ост} = N - \frac{(n+2)(n+1)}{2}, \quad (5.106)$$

или

$$S_{ост} = (yy) - b_0(0y) + \sum_{i=1}^n b_i(iy) + \sum_{i<j} b_{ij}(ijy). \quad (5.107)$$

Сумма квадратов $S_{ад}$, оценивающая адекватность модели, подсчитывается по формуле

$$S_{ад} = S_{ост} - S_0, \quad f_{ад} = N - \frac{(n+2)(n+1)}{2} (N_0 + 1). \quad (5.108)$$

Расчетное значение критерия Фишера, как и ранее, формируют как отношение дисперсии адекватности к дисперсии опыта (5.44) и (5.45) и сравнивают с табличными значениями F_T для степеней свободы $f_{ад}$ и f_0 по известным равенствам (см. $F_p < F_T(f_{ад}=N-1, f_0=N_0-1, q=0,05)$).

Принятие решений. Если условие

$$F_p < F_T(f_{ад}=N-1, f_0=N_0-1, q=0,05)$$

не выполняется, то нелинейная модель, полученная по плану ЦКРП, неадекватна. В этом случае требуется изменения порядка полинома (переход к полиному третьего порядка), добавление факторов в уравнение регрессии или тщательного анализа ошибок в эксперименте (получающихся, например, вследствие временного дрейфа).

5.8. Большие двумерные таблицы

Рассмотрим двумерные таблицы размера большего, чем 3×3 (последние рассматривались ранее). При этом становятся

оправданными некоторые новые способы анализа, вытекающие из более высокой стоимости получения таких данных и более детального характера информации, которую они содержат. В качестве примеров будем рассматривать наборы данных размера от 3×5 до 33×31.

Обычное факторное представление, допускающее неаддитивность параметров, меньше подходит для больших массивов данных. Взаимодействия здесь почти всегда локализируются; нерегулярность не распространяется на всю таблицу. Большие взаимодействия чаще всего появляются в отдельных ячейках или отдельных строках (столбцах), реже в нескольких строках или столбцах. Примеров широкого распространения взаимодействий по всей таблице на практике не встречается.

В работе будет приведено объяснение, почему в таблицах большого размера поведение обычных остатков почти совпадает с поведением несмещенных оценок истинных взаимодействий и будут внесены предложения отделять взаимодействия от случайной ошибки даже для недублируемых данных. Когда план имеет размер порядка 8×5, становится возможным извлечь информацию относительно вида распределения ошибки. Появляется также возможность определить неоднородность ошибок в пределах одной строки.

Большие, многократно дублированные планы R×C редко используются в промышленных и физических исследованиях, так как экспериментаторы, вероятно, обнаружили, что для надежной интерпретации результатов им не требуется повторения плана. И хотя понятно, что нерандомизированные данные нельзя надежно интерпретировать, остается еще достаточно много градаций между полной надежностью и бесполезностью.

В некоторых больших двумерных таблицах факторы имеют количественные и даже равноотстоящие уровни, но в большинстве случаев факторы качественные, обычно неупорядоченные. Сконцентрируем внимание на случае планов R×C с неупорядоченными дискретными уровнями факторов.

Для реализации больших планов R×C в полном объеме требуются значительные затраты. С другой стороны, опыт показывает, что обычно доминируют главные эффекты и лишь изредка обнаруживаются взаимодействия в ячейках или строках. Такая ситуация наводит на мысль об использовании некоторых видов дробных реплик. Этому вопросу посвящен следующий раздел.

5.8.1. План Йетса 7×4

Данные относятся к сравнению четырех разновидностей хлопка (с помощью латинских квадратов 4×4) в семи центрах производства. В

силу приблизительной пропорциональности средних стандартным ошибкам в качестве откликов использовались логарифмы урожайности.

Йетс отмечал, что если обнаруживается множество значимых взаимодействий, существует вероятность, что их значимость может быть полностью отнесена на счет единственного выделяющегося наблюдения. Он приводит контраст $D = (A+B+C)/3$ для каждого центра и отмечает, что он значимо выделяется для центра 4. До составления этого контраста необходимо обнаружить одноячеечное взаимодействие. В табл. 5.40 приводится оценивание остатков. В ее нижней части приводится схема взаимодействия единственного выделяющегося возмущения в обычной таблице R×C.

Таблица 5.40

Урожай четырех сортов хлопка в семи центрах. Значения y в таблице связаны с y' Йетса следующим образом: $y = 100 \times (y' - 0,49)$

Часть а		Данные	Суммы	Средние	Остатки	
		-30 -39 -34 -24	-127	-31,8	+1,8	-4,5 2,8
		4 5 -4 10	15	3,8	0,2	3,9 -2,8 -1,6
		-20 -21 -25 -13	-79	-19,8	-0,2	1,5 -2,0 -1,0
		53 47 49 76	+225	56,2	-3,2	-6,5 -2,2 12,0
		-33 -31 -34 -26	-124	-31,0	-2,0	2,7 2,0 -2,8
		8 6 0 14	28	7,0	1,0	1,7 -2,0 -0,8
		16 12 11 16	55	13,8	2,2	0,9 2,2 -5,6
Суммы:		-2 -21 -37 53	-7			MS остатков = 335/18 = 18,6
Суммы + 2:		0 -19 -35 55	1			SS (4,4) = 12 ² ×28/18 = 224
Средние отклонения:		0 -2,7 -5,0 7,8				MS для разности = 111/17 = 6,53
						MNR = 12/335 ^{1/2} = 0,656
						P << 0,01.

Часть б. Воздействие возмущения RC в ячейке (1,1) на элементы таблицы R×C; $r = R - 1; c = C - 1$. Остатки таковы:							
rc	-r	-r	-r	-r	...	-r	
-c	1	1	1	1	...	1	
-c	1	1	1	1	...	1	
-c	1	1	1	1	...	1	
-c	1	1	1	1	...	1	

Из табл. 5.40 (часть б) следует, что максимальный остаток d_{ij} приводит к оценке возмущения $(RC/rc)d_{ij}$. Из данных табл. 5.40 (часть а) видно, что величина $(28/18)12^2 = 224$ довольно значительно отличается от первоначальной величины 335. Разность 111 с 17 степенями свободы дает остаточную сумму квадратов в натуральном масштабе 0,000658, меньшую найденного Йетсом среднего квадрата ошибки 0,000869. Итак, снова обнаружена единственная ячейка с отклонением от нормы, ответственная за видимое взаимодействие.

5.8.2. План Дэвиса 5×3×4

Это трехфакторный план с дискретными факторами A, B, C без повторений, из которого выбрана таблица $A \times C$ размера 5×4 (табл. 5.41), чтобы обратить внимание на одно обстоятельство.

Таблица 5.41

Взаимодействие AC из эксперимента Дэвиса $5 \times 3 \times 4$.

(Данные получены вычитанием из первоначальных значений 954 и округлением до десятков)

Часть а	Закодированные данные				Суммы	Средние	Остатки			
	C_1	C_2	C_3	C_4						
A_1	46	39	13	51	149	37	-3	10	-3	-3
A_2	29	-21	-36	33	5	1	16	-14	-16	15
A_3	24	23	0	31	78	19	-7	12	2	-5
A_4	-3	-31	-29	-1	-64	-16	1	-7	8	-2
A_5	-34	-47	-49	-28	-158	-39	-7	0	11	-6
Суммы:	62	-37	-101	86	10					
Суммы - 2:	60	-39	-103	84	2					
Средние отклонения:	12	-8	-21	17						

$$SS(AC) = 1606/3 = 535$$

$$MS(AC) = 535/12 = 45$$

Часть б. С удаленной строкой A_2

$$SS[(AC) - A_2] = 406/3 = 135$$

$$MS = 135/9 = 15$$

В натуральных единицах = 1500

Остатки			
1	6	-7	1
-4	7	-3	1
5	-11	4	2
-3	-4	7	-2

Четыре наибольших остатка для этой таблицы находятся в строке A_2 (качество наполнителя). Для суждения об однородности остатков в сомнительных случаях необходим критерий, но данный случай затруднительно отнести к сомнительным. Качество наполнителя 2 приводит к сопротивлению износу для четырех типов резины (фактор C), отличающимся от сопротивлений при других наполнителях. Исключим строку 2 и проведем вычисления в нижней части табл. 5.41. Сравнивая результат с первоначальным средним квадратом (ABC), равным 320 (3,20 в кодированном виде), мы видим, что все еще остается некоторое взаимодействие $A \times C$. Только $2/3$ взаимодействия AC приходится на строку A_2 .

Дэвиса говорит, что в общем случае сумму квадратов взаимодействий неудобно вычислять непосредственно, и обычно она

находится вычитанием из общей суммы квадратов, но будем считать более удобным и более наглядным вычисление взаимодействий поэлементно и получение суммы квадратов взаимодействий непосредственным возведением в квадрат и суммированием остатков. Экспериментатор, привыкший к получению результатов на настольных компьютерах и ЭВМ с большим числом разрядов, возможно, будет недоволен таким грубым округлением. Следует напомнить, что большая точность требуется, если суммы квадратов вычисляются вычитанием. В указанном выше способе ни одна из них подобным образом не вычисляется.

Проиллюстрируем вычисление трехфакторного взаимодействия ABC , хотя это и не совсем относится к тематике данного раздела. Такое взаимодействие можно представить как $(AB)C$, $(AC)B$ или $(BC)A$. Поскольку B имеет наименьшее число уровней, вычисления слегка упрощаются при выборе второй альтернативы. Тогда необходимо построить таблицу AC для каждого уровня B и найти три набора остатков. Их поэлементные отклонения от среднего дают 60 компонент трехфакторного взаимодействия. В табл. 5.42 они представлены в том же порядке, что и исходные данные.

Таблица 5.42

Компоненты взаимодействия ABC в эксперименте $5 \times 3 \times 4$ Дэвиса

	C_1			C_2			C_3			C_4		
	B_1	B_2	B_3	B_1	B_2	B_3	B_1	B_2	B_3	B_1	B_2	B_3
A_1	-10	10	-1	3	-15	13	18	-6	-13	-10	12	0
A_2	-12	4	4	14	4	-19	6	-13	3	-11	2	8
A_3	-4	11	0	-15	0	13	19	-4	-17	1	-7	6
A_4	19	-27	7	-7	7	1	-25	25	0	14	-5	-6
A_5	8	3	-11	3	3	-6	-18	-6	22	9	-3	-5

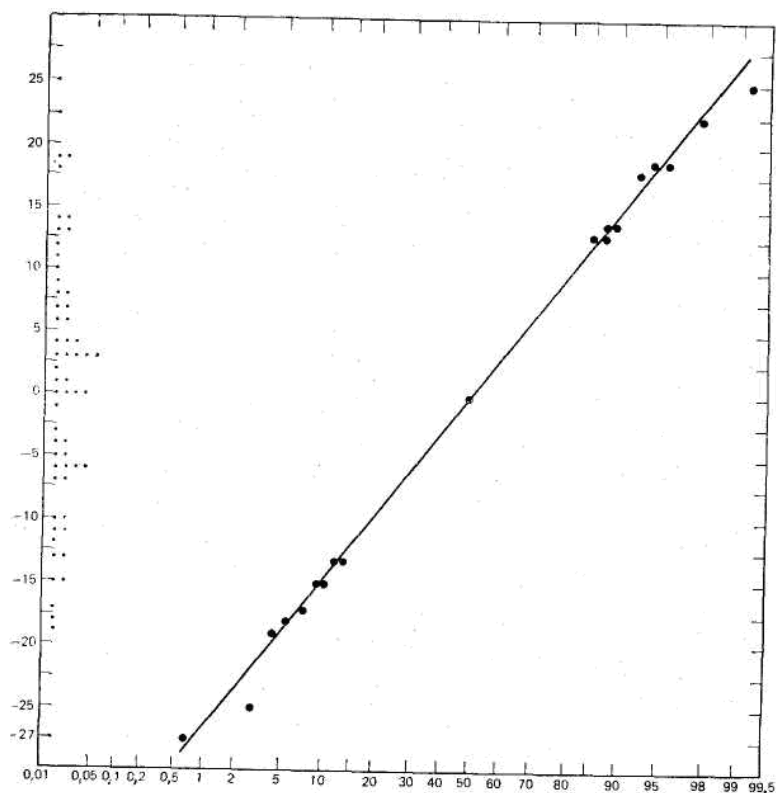


Рис. 5.9. Эмпирическое кумулятивное распределение 60 компонент ABC из эксперимента 5×3×4 Дэвиса.

$$\epsilon = 11,5\sqrt{59/24} = 18. \text{ См. табл. 5.42.}$$

При этом ничего существенного не выявляется до тех пор, пока мы не хватаемся за спасительную соломинку в виде трех наибольших компонент (−27, −25 и +25) в строке A₄. Таблица приводится так, что читатель, возможно, в первый раз увидит все составляющие трехфакторного взаимодействия.

На рис. 5.9 в полулогарифмическом масштабе показаны 16 крайних компонент остатков и 30-я компонента. Наблюдаемое $s=11,5$ является корнем квадратным из среднего квадрата 60 величин, но так как оценивалось 36 констант (1+4+2+3+8+12+6=36 степеней свободы соответственно для среднего, A, B, C, AB, AC, BC), то остается только 24 степени свободы. Умножением на $(59/24)^{1/2} = 1,569$ проведем грубую

коррекцию. В результате получаем $\epsilon=18,05$, что почти совпадает с величиной 17,9, найденной Дэвисом.

5.8.3. План Шеффе 8×5

Набор данных размером 8×5, полученный из эксперимента Андерсона и Банкрофта с рандомизированными блоками для восьми сортов овса, достаточен для выявления вида распределения ошибки. Остатки, показанные в табл. 5.43 (часть б), нанесены на рис. 5.10 на «арифметическую нормальную сетку».

Таблица 5.43

Эксперимент 8×5 Андерсона и Банкрофта.
(Все данные уменьшены на 354)

Часть а Сорт	Блоки					ΣR	$\Sigma R/5$	Часть б Остатки				
	I	II	III	IV	V			I	II	III	IV	V
1	-58	3	-14	-23	-6	-98	-20	-67	20	-23	10	62
2	48	36	77	-14	-34	113	23	-4	10	25	-24	-9
3	83	-20	72	-34	-58	43	9	45	-32	34	-30	-21
4	-51	-35	-44	-94	-112	-336	-67	-13	29	-6	-14	3
5	115	51	88	133	40	427	85	1	-37	-26	61	3
6	-9	-12	4	-54	-46	-117	-23	-15	8	-2	-18	25
7	-30	-15	3	-2	-134	-178	-36	-23	18	10	47	-50
8	134	20	47	-16	-34	151	30	75	-13	-12	-33	-16
$\Sigma:$	232	28	233	-104	-384	5		Ост. $MS_{11} = 37514/28 = 1340$				
Σc	-1	231	27	232	-105	-385	0	$s_{11} = 36,6$. См. рис. 8.2				
$\Sigma/8:$	29	3	29	-13	-48							

Часть в Сорт	Остатки, блок I удален					Часть г Сорт	Остатки, упорядоченные по $\hat{\alpha}_i$ и $\hat{\beta}_j$				
	II	III	IV	V	III		I	II	IV	V	
1	3	-42	-7	46		5	-26	1	-37	61	3
2	10	23	-24	-8		8	-12	75	-13	-33	-16
3	-20	44	-18	-6		2	25	-4	10	-24	-9
4	26	-11	-17	1		3	34	45	-32	-30	-21
5	-39	-16	59	-2		1	-23	-67	20	10	62
6	5	-7	-21	23		6	-2	-15	8	-18	25
7	12	2	41	-55		7	10	-23	18	47	-50
8	6	5	-14	4		4	-6	-13	29	-14	3
Ост. $MS_{21} = 20423/21 = 972,5$											
$s_{21} = 31,2$											

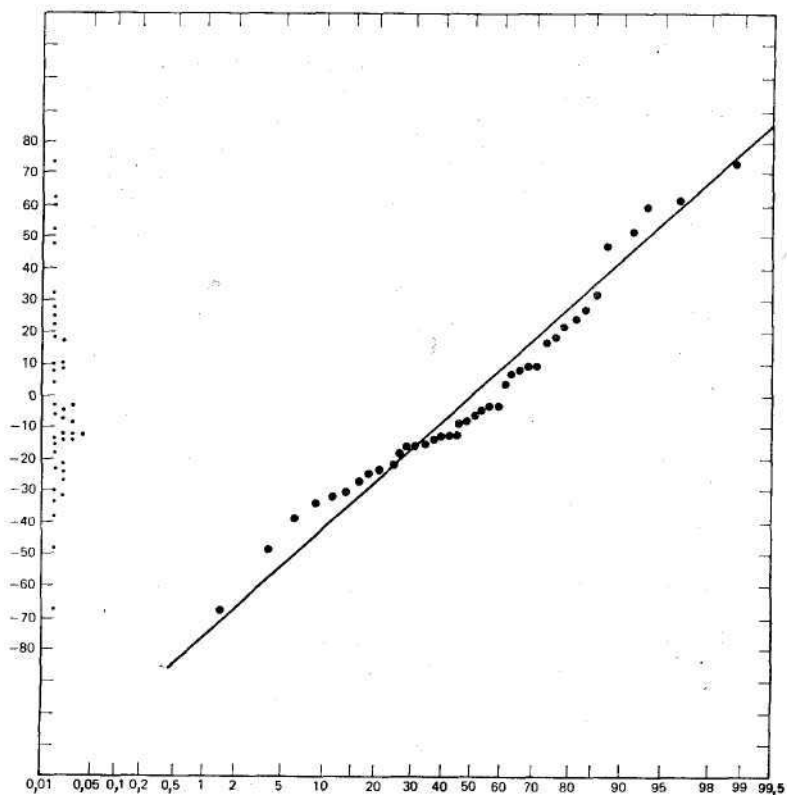


Рис. 5.10. Эмпирическое кумулятивное распределение 40 остатков Шеффе. $\hat{\sigma} = 33 \sqrt{39/28} = 39$. См. табл. 5.43.

Осуществляется это в два приема. Во-первых, сетка градуируется, в данном случае от -80 до $+80$. Затем каждый остаток из таблицы остатков изображается точкой у левого края сетки. При этом нет необходимости поиска наибольшего остатка, затем следующего по величине и т. д. После выполнения описанной процедуры подсчитывается число точек, чтобы убедиться, что ни один из остатков не потерян.

Далее для каждой точки вычисляется процентная вероятность по формуле

$$P' = 100 \frac{i - 1/2}{N} \text{ для точки } i$$

Эти значения с достаточной точностью можно получить на логарифмической линейке, а затем для каждого рассчитанного значения нанести на график две точки (по одной на каждом конце кумулятивного распределения). Прямая линия проводится на глаз через эти точки и должна проходить через точку $(0; 50\%)$. Данным вблизи точек 16 и 84% должен быть придан несколько больший (по вертикали) вес при решении вопроса об угловом коэффициенте прямой. Стандартное отклонение ошибки наиболее просто оценивается как половина разности на шкале остатков между точками 16 и 84%. Так как $N=RC$ остатков имеют только $(R-1)(C-1)$ степеней свободы, то неплохая оценка стандартного отклонения получается умножением графического значения на $[RC/(R-1)(C-1)]^{1/2}$.

Такая коррекция, конечно, грубая, но это не очень существенно для таблиц $R \times C$ размера больше 5×5 . Известно, что коэффициент корреляции между парами остатков в одной строке (столбце) равен $-1/(C-1)[-1/(R-1)]$, а в разных строках и столбцах равен $-1/(R-1)(C-1)$. Несоответствие между ними становится меньше при больших значениях R и C .

В табл. 5.43 (часть б) показаны остатки для обычной аддитивной модели. Можно предположить, что возмущение в блоке I больше, чем в четырех других. Выполнив аналогичные вычисления только для блоков II, III, IV и V, получаем остатки и суммарные статистики, показанные в части в. График новых остатков выглядит лучше, но это мнение несколько субъективно.

Естественно рассмотреть использование G -теста Тьюки (см. разд. 5.4.5), но это делать не нужно, если просто преобразовать таблицу. В части г приведена схема 8×5 остатков, которая преобразована путем размещения строк и столбцов в порядке убывания средних. Согласно Шеффе, статистика Тьюки может быть записана в виде

$$G = \frac{\sum_i \sum_j \hat{\alpha}_i \hat{\beta}_j \hat{\gamma}_{ij}}{\sum_i \hat{\alpha}_i^2 \sum_j \hat{\beta}_j^2}$$

В части г имеет место максимальная положительная корреляция между $\hat{\alpha}_i$ и $\hat{\beta}_j$. Если G велико, то $\hat{\gamma}_{ij}$ должна иметь вид контраста парного взаимодействия типа «линейный \times линейный». Это означает,

что в диагонально расположенных квадрантах должны преобладать остатки с одинаковыми знаками, а наибольшие остатки находятся вблизи углов. Поскольку в части г такая схема не обнаруживается, дальнейшая детальная проверка не проводилась. Можно прийти к выводу, что эти данные удовлетворительны в том смысле, что стандартные предпосылки (нормальность, некоррелируемость, постоянство дисперсии наблюдений, аддитивность эффектов строк и столбцов) в блоках II—V выполняются. В блоке I есть два аномальных наблюдения (сорта 1 и 8).

5.8.4. План Фишера 6×5×2 на ячмене

Данные приводятся Фишером как практический пример. Показаны суммарные урожаи пяти разновидностей ячменя за два последовательных года в шести районах шт. Миннесота. Таблицу данных можно рассматривать как две схемы 6×5: суммарных данных за два года и разностей между урожаями за эти годы. Первоначальные данные приводились с точностью до одного десятичного знака после запятой; в части а табл. 5.44 они округляются до ближайших целых.

Из каждой величины было вычтено приблизительное среднее, равное 101.

В частях б и в табл. 5.44 показаны суммы и разности урожаев за два года. Рассмотрим сначала разности и соответствующую таблицу остатков. Наибольший остаток в пятой строке и третьем столбце значим с уровнем значимости 0,05 по критерию максимального нормированного остатка. (Приведенные остатки это удвоенные компоненты \mathcal{E}_{ijk} трехфакторного взаимодействия.) Соответствующая разность в части в составляет —28, тогда как другие элементы той же строки равны 32, 39, 27 и 24. Сумма соответствующих двух элементов (см. часть б) равна 36 и близка к среднему остальных элементов той же строки. Видимо две записи по ошибке поменяли местами. Если это так, то средний квадрат ошибки должен быть скорректирован и равен теперь 89 вместо 143. Такая коррекция имеет серьезные последствия для суждения о главных эффектах и двухфакторных взаимодействиях. Еще одно серьезное изменение могло бы быть в общей годовой разности, но она не является сейчас (и не была раньше) важным параметром.

Таблица 5.44

Урожай пяти сортов ячменя за два года в шести районах; данные Иммера и др. заимствованы у Фишера, округлены до 1 и преобразованы вычитанием 101

Часть а		Сорт				
Район	Год	M	S	V	T	P
1	1	-20	4	19	9	-3
	2	-20	-19	-21	-14	-17
2	1	46	41	50	91	45
	2	-1	15	11	47	7
3	1	-19	-24	-23	30	-11
	2	2	4	16	39	29
4	1	19	20	23	40	24
	2	-2	-39	-5	25	-25
5	1	-2	-12	-32	-12	3
	2	-35	-51	-4	-39	-21
6	1	-14	-24	-22	1	-5
	2	-33	-34	-34	-9	-7

Часть б		Суммы за два года					Средние	Остатки			
Район	Сорт										
	M	S	V	T	P						
1	-40	-15	-2	-5	-20	-16	-11	21	18	-24	-7
2	45	56	61	138	52	70	-12	6	-5	33	-21
3	-17	-20	-7	69	18	9	-13	-9	-12	25	6
4	17	-19	18	65	-1	16	14	-15	16	14	-20
5	-37	-63	-36	-51	-18	-41	17	2	9	-45	+20
6	-47	-58	-56	-8	-12	-36	2	-2	-16	-7	21
Средние отклонения:	-13	-20	-4	35	3						

Часть в	Разности урожаев по годам (1931 — 1932)					Средние					Остатки							
Район																		
1	0	23	39	23	14	20	-20	-3	26	1	-5							
2	46	26	39	44	38	39	7	-19	7	3	0							
3	-21	-28	-38	-9	-40	-27	6	-7	-4	16	-12							
4	21	59	28	15	49	35	-14	18	0	-22	15							
5	32	39	-28	27	24	19	13	14	-40	6	6							
6	19	10	12	10	2	11	8	-7	8	-3	-8							
Средние отклонения:	0	6	-7	2	-1													

Возвращаясь к части б, можно заметить, что четыре наибольших ϵ_{ij} относятся к разновидности 4 (Треби), которая дает наибольший средний урожай. Остаточный средний квадрат для шести районов по четырем разновидностям равен 109, что незначительно превышает скорректированный средний квадрат ошибки (89).

Возникает желание попытаться применить к этим данным критерии Тьюки мультипликативной неаддитивности (называемый ниже G-критерием). Результаты вычислений, приведенные в табл. 5.45, представляют интерес, так как они подтверждают соображение о том, что если даже критерий оказывается значимым, могут быть причины не принимать вытекающие из этого выводы.

Преобразуем таблицу остатков (ϵ_{ij}) части а табл. 5.44, располагая строки и столбцы в порядке убывания средних значений. Результаты приведены в части а табл. 5.45. Мы действительно обнаруживаем наибольший положительный остаток в ячейке (1, 1), а наибольший отрицательный — в ячейке (5,1); совпадение для других элементов не столь удивительное. Поскольку F-критерий для G значим, переходим к вычислению \tilde{G} и результирующих остатков $\tilde{\gamma}_{ij} = \tilde{G} \alpha_i \beta_j$. Они приведены в части б. Совпадение этих дважды упорядоченных остатков с контрастами парных взаимодействий достаточно хорошее. Вычитая предсказанные остатки части б из соответствующих остатков части а, приходим к остаткам остатков части в.

Таблица 5.45

G-тест Тьюки для остатков части б табл. 5.44, расположенных в порядке убывания средних по столбцам и строкам

Часть а		Сорт					Средние	$\hat{\alpha}_i$	p_i
Район		4	5	3	1	2			
2		33	-21	-5	-12	6	136	35	553
4		14	-21	6	14	-15	109	8	236
3		25	6	-12	-13	-9	105	4	642
1		-24	-7	18	-11	21	93	-8	-591
6		-45	20	9	17	-2	83	-18	-842
5		-7	21	-16	2	-2	80	-21	-39
Средние отклонения ($\hat{\beta}_j$):		17	2	-2	-7	-10			

$p_i = \sum_j y_{ij} \hat{\beta}_j$, $P = \sum_i \alpha_i p_i = 44514$, $\sum \alpha_i^2 = 2134$, $\sum \hat{\beta}_j^2 = 446$
 SS (неаддитивности) = $44514^2 / (2134 \times 446) = 2082$
 F (неаддитивности) = $2082 / (2 \times 143) = 7,28$; $P_F \leq 0,025$
 $\tilde{G} = 44514 / (2134 \times 446) = 0,0468$.

Часть б					Часть в				
Остатки, предсказанные по \tilde{G} $\tilde{\gamma}_{ij} = \tilde{G} \hat{\alpha}_i \hat{\beta}_j$					Остатки остатков $\tilde{\gamma}_{ij} - \tilde{\gamma}_{ij}$				
28	3	-3	-11	-16	5	-24	-2	-1	10
6	1	-1	-2	-4	8	-22	7	16	-11
3	0	0	-1	-1	22	6	-12	-12	-8
-6	-1	1	2	4	-18	-6	17	-13	17
-14	-2	2	6	8	-31	22	7	11	-10
-17	-7	2	7	10	10	23	-18	-5	-12

Заметим, что некоторые из первоначальных остатков значительно уменьшились, некоторые не изменились и даже есть такие, которые увеличились. Очевидно, что почти все уменьшение остаточной суммы квадратов, полученное в результате приведенных преобразований, произошло за счет двух остатков разновидности 4 (расположенных теперь в столбце 1), замеченных ранее (+33 и -45). Следует отметить также, что все остатки для района 5 (последняя строка) увеличились.

Не стоит придавать слишком большой вес значимости G-критерия в этом случае, поскольку он так сильно зависит только от пары остатков.

Представляется, что данные из района 5 менее надежны, чем остальные. По-видимому, два значения (для разновидности 3) были перепутаны, наибольший остаток части б табл. 5.44 (для Треби) находится именно здесь. Эта разновидность дает самый низкий общий

урожай. Поэтому все данные по этому району мы выбрасываем и проводим весь анализ заново. Здесь мы не будем воспроизводить все вычисления. В результате все еще остаются существенные различия по разновидностям, районам и даже годам. Годичные различия оказываются существенными для четырех районов, но в районе 2 знак разностей меняется. Больших парных взаимодействий типа место — разновидность не остается. Стандартное отклонение ошибки (трехфакторные взаимодействия) уменьшилось до 10 по сравнению с 12, вычисленным на основании полного комплекта данных.

Таблица 5.46

5.8.5. План Фистера 33×31

[светопрочность (y) 33 видов красок (A), смешиваемых с 31 растворителем (B)]

Результаты представлены в виде баллов от 1 до 8, соответствующих светопрочностям от очень плохой до очень хорошей, причем для отражения промежуточных значений иногда использовались знаки + или —. В табл. 5.46 эти знаки опущены. Маловероятно, что случайная ошибка этих наблюдений имела нормальное распределение с постоянной дисперсией или что наблюдения были рандомизированы или выполнялись при других статистически независимых условиях. Кодовые буквы в заглавии каждого столбца, отражавшие в публикации Фистера растворители, являются принятыми обозначениями, связанными с химическим составом. Все растворители, содержащие в кодах букву G, химически связаны, а растворители, содержащие LG, связаны еще сильнее. Поскольку элементы строк и столбцов являются дискретными, а не упорядоченными или непрерывными, то любое преобразование строк или столбцов не приводит к потере информации. Мы увидим далее, что преобразование таблицы путем расположения строк и столбцов в порядке убывания средних вносит ясность и облегчает вычисления. В табл. 5.47 приведены преобразованные данные. Ожидаемый и очевидный результат этого преобразования состоит в том, что большинство чисел окружено числами такого же порядка. Выделяющиеся числа, если они есть, свидетельствуют о неаддитивности. Упорядоченная таблица окаймляется средними по строкам и средними отклонениями в столбцах, поэтому предсказанные значения и остатки вычисляются очень легко. Например, среднее по строке 1 равно 6,2, а среднее отклонение в столбце 1 составляет 1,2, поэтому предсказанное значение для элемента (1, 1) равно 7,4. Остаток тогда равен (5—7,4) =—2,4. Много это или мало? Можно принять консервативную точку зрения и вычислить корень квадратный из среднего квадрата остатков для всей таблицы, включив сначала в рассмотрение все взаимодействия.

Светопрочность 33 красок×31 растворитель; (1 — очень плохая, ..., 8 очень хорошая)

Краска	Растворители																															Γ	Rate
	AN	BG	BO	BR	BS	CL	D	DB	E	G	GR	ITR	KB	LB	LC	LG	L3G	L4G	LT	MCA	MX	OL	P	RL	RP	RT	SG	SW	TR	R			
1	5	4	5	5	4	4	3	5	4	5	3	5	5	6	5	5	6	4	6	4	6	4	6	4	6	6	4	5	5	5	5	158	
2	5	4	6	5	4	4	6	5	4	3	6	3	5	6	6	7	5	5	6	6	3	5	5	6	6	6	5	4	7	5	139		
3	5	4	7	6	4	4	6	5	4	4	4	4	5	5	5	4	1	6	3	4	7	6	6	6	6	6	4	7	5	163			
4	5	4	6	5	4	4	6	4	5	4	5	4	6	6	6	6	6	7	6	6	7	7	7	6	6	6	5	4	7	5	138		
5	6	4	6	5	4	4	6	5	4	3	6	3	6	6	6	6	4	7	6	6	4	7	6	6	6	6	6	5	4	7	5	174	
6	4	4	6	6	5	4	4	3	6	3	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5	4	149		
7	5	4	7	6	5	4	6	6	5	7	3	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5	4	179		
8	5	4	5	5	4	4	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	147		
9	4	3	5	5	4	3	4	5	6	3	4	3	6	5	7	6	7	4	3	6	4	6	5	6	5	4	5	5	5	5	151		
10	6	6	7	7	6	6	6	6	6	4	4	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	163		
11	5	4	6	6	6	4	5	5	7	4	4	6	6	7	6	4	5	6	5	6	5	6	5	6	5	6	5	6	5	5	193		
12	5	4	6	6	6	4	7	6	6	4	4	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	161		
13	6	4	6	6	6	4	7	6	6	4	4	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	163		
14	6	4	6	6	5	4	7	5	4	4	4	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	169		
15	3	3	5	4	3	3	4	6	6	4	3	7	5	6	4	5	5	1	7	3	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	142		
16	4	3	6	5	4	3	4	5	6	4	5	3	7	6	5	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	159		
17	4	4	6	6	5	4	5	5	6	5	4	6	5	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	168		
18	5	4	4	6	6	5	4	5	6	2	5	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	153		
19	5	4	6	6	5	4	6	5	7	4	4	6	6	7	6	4	5	7	4	4	4	6	4	6	5	6	6	6	6	6	165		
20	4	3	4	4	4	3	4	5	6	3	4	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	145		
21	4	1	5	4	4	4	5	4	3	4	2	5	4	3	4	5	4	3	5	4	3	4	6	5	5	4	4	4	4	4	124		
22	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	151		
23	5	4	6	6	5	4	5	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	139		
24	5	4	6	6	5	4	5	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	165		
25	6	4	6	6	5	4	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	127		
26	5	4	5	4	3	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	118		
27	5	4	7	6	5	4	5	3	5	3	5	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	136		
28	5	3	5	5	2	5	6	5	6	5	2	4	5	6	5	6	4	1	4	6	3	5	5	5	5	5	5	5	5	5	146		
29	5	4	5	5	2	5	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	22		
30	6	6	6	5	2	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	148		
31	3	5	4	3	3	5	4	3	4	3	4	3	4	3	4	3	1	1	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	103		
32	5	4	6	6	5	4	5	5	6	6	5	4	5	5	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	138		
33	5	4	6	6	5	4	5	5	6	6	5	4	5	5	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	155		
Σ	160	132	179	172	133	141	175	168	179	120	124	114	186	165	200	177	122	120	144	192	131	179	180	183	181	177	167	176	197	163	168	5014	
Рез-т																																5014	
Строчка	21	25	8	15	24	23	14	16	9	27	28	31	4	19	1	11	29	30	22	3	26	10	7	5	6	12	18	13	2	20	17		

Таблица 5.48

Данные по краскам и растворителям, расположенные в порядке убывания средних светопроцентностей; выделяющиеся значения обведены кружочками; шесть наибольших значений помечены звездочками

Пань	Краска	Растворители																																	Среднее \bar{x}
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31			
1	10	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6,2
2	9	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,8
3	8	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,6
4	7	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,4
5	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,4
6	11	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,3
7	19	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,3
8	24	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,3
9	3	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,3
10	13	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,2
11	12	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,1
12	2	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,1
13	16	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,1
14	25	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,1
15	1	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,1
16	33	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,1
17	18	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,1
18	7	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,1
19	21	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
20	4	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
21	8	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
22	29	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
23	30	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
24	20	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
25	15	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
26	28	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
27	23	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
28	4	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
29	22	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
30	26	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
31	31	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
32	27	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0
33	31	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	5,0

Мы обнаружили 31 такую величину. На рис. 5.11 эти остатки показаны в виде зачерненных кружочков на нормальной сетке.

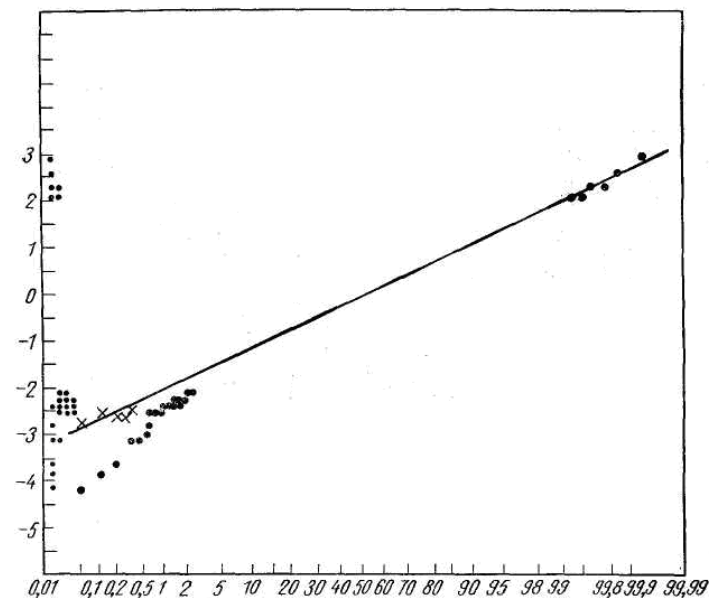


Рис. 5.11. Эмпирическое кумулятивное распределение остатков из таблицы 33×31 Фистера. См. табл. 5.48. × — после удаления шести точек.

Прямая, проходящая через шесть верхних точек и точку (50%, 0), позволяет предположить, что лишь очень немногие из отрицательных остатков плохо согласуются с нормальным распределением.

Таблица 5.49

Дисперсионный анализ данных плана 33×31 таблицы 5.47

Источник	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат	F
Столбец: краска	32	337	10,5	12,8
Строка: растворитель	30	571	19,0	23,2
R×C: остаток	960	788	0,82	
Сумма	1022	1696		

Если шесть из этих точек (меньших, чем —3) удалить, то остальные точки, обведенные кружочками, переместятся и будут лежать выше прямой. Таким образом, можно полагать, что у нас приблизительно нормальное распределение ошибок, справедливое для всех 1023 точек, за исключением шести значительно выделяющихся. Получаемое эмпирическое кумулятивное распределение позволяет исключить эти шесть точек. Однако есть основания полагать, что взаимодействия содержатся в большем числе ячеек.

Если теперь более внимательно проанализировать табл. 5.48, сосредоточившись на обведенных кружочками элементах, то можно заметить, что все они, кроме (1, 1), располагаются в строках или столбцах, где есть еще по крайней мере один такой элемент.

Тогда поставим вопрос: какова бы была вероятность взаимосвязей между наблюдаемыми строками и столбцами, если бы отмеченные наибольшие остатки (31) были рассеяны по таблице случайным образом? Крайний правый столбец n_i и значения n_j в самом низу табл. 5.48 дают представление об этих взаимосвязях. В табл. 5.50 указано количество строк N_i и столбцов N_j , содержащих один, два и т. д. больших остатков.

Таблица 5.50

Количество строк N_i и столбцов N_j , содержащих $i, j = 0, 1, 2, \dots, 7$ остатков, а также значения математических ожиданий и компонент χ^2

i, j	N_i	$E\{N_i\}$	χ_i^2	N_j	$E\{N_j\}$	χ_j^2
0	11	11,94	0,074	21	11,22	8,52
1	12	11,57	0,016	2	11,59	7,94
2	5	5,42	0,033	3	5,79	1,34
3	3	3	2,07	2	5	2,39
4	0					
5	0					
6	0					
7	0					
Суммы	31	31,00	0,541	31	31,00	20,65

Математические ожидания N_i и N_j были вычислены из разложения бинома $(p+q)^n$, где $n=33$ для строк и $n=31$ для столбцов, $p=(1023-31)/1023=32/33=0,96$ и $q/p=1/32$ для строк и столбцов. (Вычисления на основе гипергеометрического распределения дают

настолько близкие результаты, что здесь они не приводятся.) Все члены разложения, кроме первого, равного $p^n=A_0$, вычисляются по формуле

$$A_i = A_{i-1} \frac{n-i+1}{i} \frac{q}{p}, \quad i=1, 2, \dots, 7.$$

Для строк (типов красок) математические ожидания в предположении независимости событий совпадают с наблюдениями очень хорошо ($P=0,90$). Среди столбцов (т. е. типов растворителей) выделяются два с пятью (столбцы 22 и 28 в табл. 5.48) и один с семью элементами (столбец 30), что свидетельствует о большом количестве взаимодействий. Но большинство столбцов не содержат выделяющихся остатков и совсем немногие имеют один большой остаток. Уровень значимости здесь ниже 0,0005.

Если бы мы имели на то основание, то заменили бы 31 наибольший остаток их оценками, равными средним по строкам и столбцам, и заново провели бы дисперсионный и графический анализ. При этом сумма квадратов остатков уменьшилась бы почти на 205 и стала бы равной 583 с $(960-31)=929$ степенями свободы. Средний квадрат остатков стал бы тогда равным 0,628, а стандартное отклонение ошибки составило бы 0,79. Но мы не имеем оснований для такой замены.

Еще одним субъективным свидетельством того, что обведенные кружочками значения в табл. 5.48 взаимосвязаны, является то, что все столбцы с двумя или более такими значениями имеют в своих обозначениях букву G, а три столбца (22, 29 и 30) с пятью или более такими значениями — буквы LG. Эти растворители химически взаимосвязаны, что и определяет, видимо, такое положение. Нет сомнения, что все эти связанные агенты не могут действовать аддитивно на светопрочность при заданном типе краски. С точки зрения изготовителя растворителей целесообразно сделать следующее:

1. Проверить данные для растворителей LG и L3G и красок 29, 30, 26 и 28 (в строках 22, 23, 26 и 27) с неблагоприятными взаимодействиями. Особое внимание следует обратить на шесть комбинаций со звездочками.
2. Довести до пользователей, что G, LG и L3G дают необычно хорошие результаты (положительные взаимодействия) с соответствующими красками.

Можно резко возразить статистику, если бы он стал говорить о среднем квадрате взаимодействия ($R \times C$) как о случайной ошибке. Это не так. Следует также предостеречь и тех, кто считает, что средний квадрат отражает совместное воздействие случайной ошибки и

взаимодействия. В принципе это верно, но можно и, следовательно, необходимо выражать мысль точнее. Можно даже ответить на вопрос: обусловлено ли взаимодействие AB фактором A или B ? Распространено суждение, что двухфакторные взаимодействия симметричны и поэтому следующие два утверждения эквивалентны: «фактор A воздействует по-разному на разных уровнях B », «фактор B воздействует по-разному на разных уровнях A ». В рассматриваемом последнем примере взаимодействие почти полностью обусловлено растворителями, а не видами красок. Понятно, что растворители действуют неаддитивно только с некоторыми красками, но лишь три из них L4G, LG и L3G практически ответственны за взаимодействие. Что касается красок, то никаких неприятностей они не приносят. Очевидно, что наблюдаемое взаимодействие несимметрично по A и B .

Почти такие же рассуждения справедливы и в большинстве других случаев, когда неаддитивность проявляется более чем в одном элементе. В табл. 5.41 все взаимодействия относились к строке 2. В табл. 5.43 они были в разновидности 1 блока I. В табл. 5.44 взаимодействие целиком определялось *одной* разновидностью. Не встречалось случая *отсутствия* связей между строками и столбцами в смысле двухфакторных взаимодействий в таблицах размера больше 4×4 .

5.8.6. Обобщение на анализ сбалансированных данных

В этом разделе мало говорилось о статистическом планировании экспериментов. Можно считать само собой разумеющимся, что любое большое сбалансированное множество данных, собранных аккуратным экспериментатором, по праву заслуживает изучения. Статистик-теоретик может утверждать, что это бесполезно (особенно для данных разд. 5.8.5), так как никаких надежных выводов на основе таких данных сделать нельзя. Он возможно еще добавит, что все так называемые тесты значимости не имеют смысла, а все оценки смещены, так как данные собраны без рандомизации условий, вероятно, группами по строкам или столбцам, разными химиками, на одной партии красок или взаимосвязанных агентов.

Но видимо следует не так скептический полагаться на разум и добросовестность собирающих данные. В самом деле, все взаимодействия, которые обнаружены, могли появиться из-за плохой рандомизации, беспечности экспериментатора или плохой регистрации, не предусмотренных изменений методов или замен персонала. Но относительно малое число больших отклонений и относительно малая величина $s=0,91$, включающая все взаимодействия,

позволяют полагать, что не было пропущено больших взаимодействий и что эффекты строк и столбцов достаточно велики, чтобы считать их реальными. Видимо с большой достоверностью можно сказать, что все эффекты растворителей и типов красок на светопрочность практически аддитивны.

По данному исследованию можно рекомендовать, чтобы по крайней мере шесть строк (которые, видимо, были реализованы последовательно) были повторены в случайном порядке. Кроме того, те отдельные ячейки, остатки для которых превышают 2,5, следовало бы также повторить с заменой обслуживающего персонала, партий материалов и тех условий, которые химик счел бы желательным изменить.

Если среднее по строке будет отличаться от прежнего, скажем на 0,6 или более [мы ожидаем, что s (среднего по строке) будет равно $0,91/31^{1/2}=0,163$], можно настаивать на дальнейшем дублировании строки. Более того, можно обосновать перед химиком свою позицию имеющимся опытом, а не только ссылками на статистическую теорию. (Эти рекомендации, которые называют частичным дублированием, обсуждаются в разд. 5.8.7.)

Можно попытаться провести какие-то дополнительные проверки на тех же данных. Например, можно было бы округлить остатки до десятков, записать в таблицу типа 5.47 и исследовать их однородность, исключив предварительно результаты, обведенные кружочками в табл. 5.48. Оставим это для упражнения. Конечно, можно задать вопрос: «Когда же следует прекращать анализ данных?». Ответ на этот вопрос однозначен: «Только тогда, когда время, деньги и ресурсы исчерпаны».

Основная цель этого раздела — дать примеры анализа уже имеющихся данных. Можно было бы проследить некоторую систематизированную программу, но в данный момент упор должен быть сделан на поэтапное исследование с применением обычных способов и любых других, которые исследователь счел бы полезными.

5.8.7. Частичное дублирование двумерных таблиц

Сбалансированные (или частично сбалансированные) непоблочные планы для сравнения v разновидностей в b блоках с k опытами в блоке можно записывать в виде двумерных таблиц, используя блоки в качестве столбцов, а варианты в качестве строк. Можно получить некоторое представление о требуемой величине k для заданной таблицы $R \times C$ (т. е. $v \times b$), полагая, что необходимо по крайней мере $R+C-1$ степеней свободы для выделения параметров строк и столбцов и, по-видимому, столько же (но не менее половины) для

оценки ошибки, в которую мы пока включим и взаимодействия. Тогда необходимо не менее $3(R+C)/2$ наблюдений. Если $R=C$, то эта величина должна быть порядка $3R$ и, следовательно, планы с $k=3$ являются минимальными. Лучше, конечно, если $k=4$.

Частичное дублирование можно использовать двумя различными способами. Оно может обеспечить очень рациональный выбор части таблицы $R \times C$ в случаях, когда достаточен грубый отбор параметров строк и столбцов. В таких же ситуациях, как в разд. 5.8.5, где требуется более тщательный отбор, поскольку результаты предполагается использовать длительное время, малая часть полной таблицы $R \times C$ должна быть дополнена до полного дублирования для получения хорошо рассеянной ошибки повторения.

Было бы естественно при планировании экспериментов с создателями найти дополнительное множество, например 36 вариантов в 36 блоках по три (или по четыре) опыта в блоке. Клетворси приводит частично сбалансированный неполноблочный план (PBIB)LS68, который должен выделять пять элементов в каждой строке и в каждом столбце двумерной таблицы 36×36 . Если бы не существовало плана требуемого размера, следовало бы рассеять множество необходимого размера (примерно $3R$) по всей сетке. Эти наблюдения использовались бы в первую очередь для получения оценки ошибки. Выигрыш от включения их в оценки параметров строк и столбцов несущественный.

Для двумерных таблиц меньшего размера с b и v порядка 5—10 значительное число сбалансированных неполноблочных планов (BIB или PBIB) с $k=3,4$ обеспечивают получение приемлемых решений. Оценка параметров строк и столбцов и остатков для всех наблюдаемых элементов намного легче осуществляется на ЭВМ, чем на ручном калькуляторе, но для планов указанных выше размеров вычислительные формулы простые.

Описанные выше операции нельзя рассматривать как неизменные правила; они являются отражением опытов ряда авторов в области анализа данных, на основании которых можно сделать некоторое выводы.

1. Если массив $R \times C$ дублировался, изучите способ дублирования и исследуйте эмпирическое распределение случайной ошибки. Если выявляется, что ошибка гауссовская приблизительно или с точностью до нескольких точек, сделайте и зафиксируйте необходимые исправления и оцените σ исходя из исправленного набора.

2. Если строки и столбцы априорно не упорядочены, вычислите суммы по строкам и столбцам и преобразуйте таблицу, располагая

строки и столбцы в порядке убывания сумм. Это поможет обнаружить локализованное взаимодействие и применить G -критерий Тьюки.

3. Вычислите, сведите в таблицу и исследуйте \mathcal{F}_{ij} (остатки). Сведите в таблицу построчные разности, если строки длиннее столбцов, и просмотрите, выделяются ли при этом те же самые элементы, что и при анализе \mathcal{F}_{ij} . Иногда этот прием позволяет обнаружить новые особенности.

4. Если наибольшие \mathcal{F}_{ij} сосредоточены в нескольких строках и столбцах, составляющих только небольшую часть $R \times C$, то их следует пересмотреть и получить более устойчивые и информативные \mathcal{C}_i и \mathcal{R}_j из оставшихся данных. Следует, конечно, выделить все большие остатки, предпочтительно после попытки оценить реальные отклонения от аддитивности. Дисперсионный анализ полезен в том случае, если полная сумма квадратов разделяется на локализуемые взаимодействия и части, соответствующие существенным разностям строк и столбцов. Бесполезно пытаться рассеять возмущения по суммам квадратов строк, столбцов и взаимодействий без достаточного основания.

Наиболее удовлетворительным разделением является такое, при котором практически вся сумма квадратов взаимодействий попадает в несколько ячеек (или в одну), а остаток совпадает с ожидаемой величиной, вызванной только случайной ошибкой.

5. Чем больше внимания уделяет экспериментатор получению выборки из желаемой генеральной совокупности, тем более достоверны его выводы. Когда гарантирована объективная рандомизация, можно быть уверенным в распределении суммы квадратов между эффектами и случайной ошибкой. Но и нерандомизированные данные часто заслуживают изучения, хотя бы для подтверждения сомнений. Результатом такого изучения может быть только то, что экспериментатор пометит несколько значений, которые он должен будет повторять, или обнаружит нежелательные тренды, неразрывно связанные с желаемыми эффектами.

6. Значительная часть больших таблиц $R \times C$ содержит возмущения, являющиеся результатом технических ошибок или ошибок регистрации. Все другие таблицы содержат возмущения лишь в нескольких строках или в нескольких столбцах (обычно в чем-то одном). На все это необходимо обратить внимание экспериментатора.

7. Если в эксперименте имеет смысл реализовывать строки и столбцы последовательно, то следует просить экспериментатора повторить несколько строк, лучше те, которые имеют наибольшие и наименьшие средние, и некоторое небольшое случайное подмножество. Даже если этого сделать нельзя, тщательно выполненные опыты заслуживают изучения. Данные могут вскрыть внутренние связи и представлять научный интерес.

6. Дробный факторный эксперимент

Прежде чем рассмотреть методы минимизации числа опытов, к которым относится дробный факторный эксперимент, изложим принципы разбиения факторных планов на блоки.

6.1. Разбиение факторных планов на блоки

До сих пор речь шла о факторных экспериментах, а теперь более подробно рассмотрим способы их разбиения на части. Исследователи, конечно, уже знают, что совсем необязательно, чтобы все факторы имели лишь два или три уровня и что в задаче может быть больше двух факторов, причем с тремя и более уровнями.

Факторные эксперименты применяются в исследованиях с очень давно, хотя при этом не употреблялось название, данное им Фишером. В них не проводилась рандомизация и не использовались факторное представление, а также такие общие понятия, как главные эффекты и взаимодействия. Экспериментальные данные обычно рассматривались как множество точек, а все факторы считались непрерывно варьируемыми.

Полный факторный план с n_A уровнями фактора A и т. д. требует $N_T = n_A n_B n_C \dots$ измерений отклика. Это число может оказаться слишком большим или по крайней мере настолько большим, что возникают сомнения в стабильности системы в течение такого длительного времени или такой обширной области. Вполне естественно попытаться найти такие части полного факторного плана, которые позволят получить лучшие результаты благодаря большей однородности условий опытов в отдельных частях.

Части полного факторного эксперимента называют *блоками*.

В качестве классического примера разбиения на блоки можно указать на сельскохозяйственные эксперименты, когда при изучении урожайности все опытное поле делится на несколько частей. При этом подразумевается, что части более однородны, чем все поле. В промышленных исследованиях размеры блоков часто обуславливаются объемами имеющихся партий сырья. При разбиении на блоки в

ошибку результатов исследования не войдет составляющая, определяемая различиями между партиями сырья. Следовательно, эффекты, которые могут быть найдены *в рамках отдельных блоков*, окажутся возможным оценить с большей точностью.

Принцип разбиения на блоки для повышения однородности условий используется не только в факторных планах. Любой набор опытов или условий эксперимента, реализованный на одной партии сырья, при одной и той же настройке лабораторной установки или в течение одного дня, может представлять собой блок эксперимента. Блок называют *рандомизированным*, если последовательность опытов выбирается случайным образом. Наибольшая достоверность выводов о наличии систематических различий в значениях откликов для разных условий опытов обеспечивается в случае подтверждения таких различий при повторении рандомизированных блоков.

Поскольку перебор всего множества возможных условий опытов в каждом блоке чаще всего оказывается невыполнимым, особое внимание необходимо уделить выбору таких подмножеств из этого множества, которые приводят к наибольшей точности при сравнении эффектов опытов. Наилучшим было бы такое деление на подмножества, чтобы в них каждый опыт встречался в сочетании с другим опытом одно и то же число раз. Такие подмножества называют *сбалансированными неполными блоками* (balanced incomplete blocks), или сокращенно ВІВ-схемами. Они являются наилучшими в том смысле, что с их помощью удастся получить максимальную точность, отнесенную к одному наблюдению, т. е. наибольшую эффективность. Однако, несмотря на большие усилия и изобретательность при разработке таких планов, полный баланс в них часто может быть достигнут лишь при недопустимо большом числе наблюдений.

Это вынуждает исследователя прибегать к некоторым компромиссам, с тем чтобы смягчить требование о равном представительстве всех пар опытов в блоках. Такие компромиссные планы называют *частично сбалансированными неполными блоками* (partially balanced incomplete blocks), или кратко РВІВ-схемами. Если каждая пара опытов встречается совместно *либо* λ_1 , *либо* λ_2 раз, то такие планы называют РВІВ-схемами *с двумя ассоциированными классами*.

6.1.1. Простейшее разбиение на блоки (план 2^2 с блоками по два опыта)

В практике исследований может встретиться ситуация, в которой естественные блоки позволяют провести только два опыта (например,

изучаются козлята-близнецы или очень малые партии некоторого дорогого сырья) и рассматриваются лишь два двухуровневых фактора.

Будем обозначать факторы через A и B , а четыре возможные комбинации условий экспериментов, как (1), a , b и ab . Сначала попытаемся объединить в первом блоке наблюдения (1) и a и обратим внимание на математические ожидания разности и суммы двух наблюдений. Непосредственной проверкой можно убедиться, что

$$E\{(1)\} = A - B + AB + \text{Среднее значение для блока I,}$$

$$E\{a\} = A - B - AB + \text{Среднее значение для блока I.}$$

Эти же результаты получаются при использовании алгоритма Йетса. Из приведенных выражений следует, что

$$E\{a - (1)\} = 2A - 2AB,$$

$$E\{a + (1)\} = -2B + 2 \text{ (Среднее значение для блока I).}$$

Итак, блоковая разность является оценкой величины $2(A - AB)$, а блоковая сумма — величины 2 (Среднее значение для блока $I - B$). Пользуясь терминологией теории разбиения на блоки, можно сказать, что AB смешано с A , а B смешано со средним значением.

Всего имеется шесть возможных пар из четырех комбинаций условий опытов. Эти пары, обозначенные как I, II, ... VI, показаны в виде диаграммы на рис. 6.1.

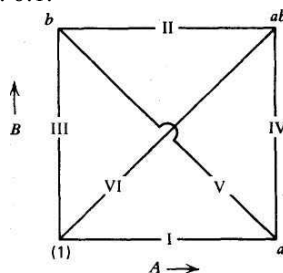


Рис. 6.1. Шесть возможных блоков по два опыта из плана 2^2 .

Математические ожидания шести блоковых разностей приведены в табл. 6.1. Тот факт, что необходимо реализовать по крайней мере три блока по два элемента в каждом для получения даже самых грубых оценок A , B и AB , вовсе не является странным. Экспериментаторы лишь в редких случаях будут рассматривать план 2^2 , если их не интересует парное взаимодействие AB . При этом блоки V и VI оказываются наименее полезными, поскольку их внутренние сравнения не содержат AB . Если же реализованы первые четыре блока, то, как можно видеть (а также проверить путем вычислений), взаимодействие AB оценивается с дисперсией, равной половине дисперсии оценок A и B . Наконец, если реализованы шесть блоков, то все три параметра оцениваются с одинаковой точностью.

Таблица 6.1

Математические ожидания и оценки по блоковым разностям для плана $2^2//2$

Номер разности	Блоковые разности	$1/2$ матем. ожидания	Оценки по блоковым разностям
I_d	$a - (1)$	$A - AB$	$I_d + II_d = 2A_1^{1)}$
II_d	$ab - b$	$A + AB$	$II_d - I_d = 2AB_1$
III_d	$b - (1)$	$B - AB$	$III_d + IV_d = 2B_1$
IV_d	$ab - a$	$B + AB$	$IV_d - III_d = 2AB_2^{2)}$
V_d	$a - b$	$A - B$	$V_d + VI_d = 2A_2$
VI_d	$ab - (1)$	$A + B$	$VI_d - V_d = 2B_2$

¹⁾ A_1 означает «первая оценка A ».

²⁾ AB_2 означает «вторая оценка AB ».

Даже без вычислений должно быть ясно, что каждый из трех эффектов оценивается с эффективностью $2/3$, поскольку при этом используется лишь четыре из шести блоковых разностей.

Итак, в конечном счете имеется шесть блоковых разностей, и поэтому следует найти и использовать три степени свободы, еще не израсходованные при оценивании трех параметров. Эти три степени свободы применяются для измерения случайной ошибки (удвоенной), действующей внутри блоков: такими мерами будут $A_1 - A_2$, $B_1 - B_2$ и $AB_1 - AB_2$. Внутриблоковую дисперсию будем обозначать символом σ^2_0 . Математические ожидания удвоенных средних значений для шести блоков приведены в табл. 6.2.

Таблица 6.2

Математические ожидания и оценки по блоковым суммам плана $2^2//2$

Номер суммы	Блоковая сумма	$1/2$ матем. ожидания	Оценки по блоковым суммам
I_s	$(1) + a$	$M^{1)} - B + I_1^{2)}$	$I_s + II_s = 2M + I_1 + I_2$
II_s	$b + ab$	$M + B + I_2$	$II_s - I_s = 2B - I_1 + I_2$
III_s	$(1) + b$	$M - A + I_3$	$III_s + IV_s = 2M + I_3 + I_4$
IV_s	$a + ab$	$M + A + I_4$	$IV_s - III_s = 2A - I_3 + I_4$
V_s	$a + b$	$M - AB + I_5$	$V_s + VI_s = 2M + I_5 + I_6$
VI_s	$(1) + ab$	$M + AB + I_6$	$VI_s - V_s = 2AB - I_5 + I_6$

¹⁾ M представляет собой общее среднее значение для всех шести блоков.

²⁾ См. определение I_i в тексте.

Новыми символами l_i , $i=1, 2, \dots, 6$, здесь обозначены отклонения блоковых средних значений от общего среднего M . Если изучаемые блоки могут рассматриваться как случайная выборка из генеральной совокупности блоков, то l_i могут быть использованы для оценивания дисперсии такой совокупности, которую обозначим через σ^2_1 . Эта величина может оказаться полезной для суждения об эффективности разбиения на блоки. Так, если σ^2_1/σ^2_0 велико, разбиение было до некоторой степени эффективным.

Чтобы получить ощутимый выигрыш в точности, это отношение должно быть больше 3.

Оценки значений l_i можно вычислить путем коррекции каждой блоковой суммы на величины эффектов, указанных в табл. 6.1 и 6.2. В результате получается шесть оценок $(M+l_i)$. Отклонения этих оценок от их среднего (которое оценивает M) как раз и будут искомыми значениями.

Очевидно, что в этих рассуждениях предполагалось, что l_i и M аддитивно входят в математические ожидания для блоков (табл. 6.2), и, следовательно, считались равными нулю любые взаимодействия между условиями блоков и условиями опытов. Если это предположение не выполняется, указанные взаимодействия проявятся в трех разностях эффектов: (A_1-A_2) и др. Если все эти разности малы (по сравнению с A , B , AB), то на данном этапе на них можно не обращать внимания. Такой план определенно лучше абсолютно минимального плана, состоящего из блоков I, II и III, для оценивания A , B и AB . Однако «благопристойность еще не гарантирует полезность». Из этого раздела следует запомнить основные принципы и способы вычислений.

Изучая содержание табл. 6.1 и 6.2, можно поставить вопрос: «Что же смешано с внутриблоковыми разностями?» Из таблиц видно, что для блоков I и II эффект B смешан с разностью блоковых сумм, а A и AB могут быть оценены с дисперсией $\sigma^2_0/2$. Таким образом, мы идем здесь на преднамеренную потерю B ради лучшего оценивания A и AB . Напротив, в блоках III и IV мы теряем A , но зато получаем оценки B и AB .

6.1.2. План 2^3 с разбиением на блоки по четыре и два опыта

План 2^3 с разбиением на два блока по четыре опыта

Сначала рассмотрим такую экспериментальную ситуацию, в которой из-за смешивания допускается потеря информации о параметрах, не представляющих большого интереса. Тройное

взаимодействие ABC оценивается контрастом по восьми значениям отклика плана 2^3 . Если объединить четыре опыта, для которых получается $+ABC$, в один блок, а четыре оставшихся — в другой, взаимодействие ABC окажется смешанным с межблоковой разностью. Однако при этом можно оценить остальные шесть параметров (три главных эффекта и три парных взаимодействия) с наибольшей эффективностью и минимальной дисперсией. Таким образом, имеем следующее разбиение на блоки:

Блок I	Блок II
(1)	a
ab	b
ac	c
bc	abc

Такое разбиение легко запоминается, поскольку все четные опыты попадают в один блок. Симметрия полученных блоков очень легко иллюстрируется графически (рис. 6.2).

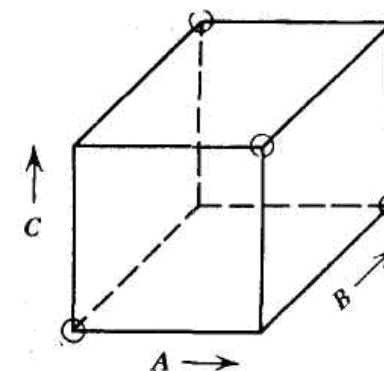


Рис. 6.2. Разбиение плана 2^3 на два блока по 4 опыта. Взаимодействие ABC смешивается с межблоковой разностью.

Вершины, относящиеся к блоку I, на этом рисунке обведены кружками. Эти вершины расположены на четырехугольнике, по две на верхнем и нижнем уровнях каждого фактора. Отметим еще раз, что каждый из трех очевидных контрастов (например, разность между двумя результатами на верхнем уровне фактора A и двумя — на его нижнем уровне) находится с помощью стандартной процедуры Йетса для плана 2^3 . При этом задаются значения ± 1 для каждой из четырех

комбинаций условий опытов при включении ее в искомый контраст. Так, для контраста A получаем:

Обозначение опыта	(0)	(1)	(2)	(3)
(1)	-1	-1	0	0
a		1	0	4 (A)
b		1	2	0
ab	+1	-1	2	0
c		1	2	0
ac	+1	1	-2	0
bc	-1	1	0	-4 (BC)
abc		1	0	0

Отсюда следует, что для контраста A , обозначаемого как (A), математическое ожидание равно $4(A-BC)$, и оно оценивается с внутриблоковой точностью. Два других очевидных контраста измеряют $4(B-AC)$ и $4(C-AB)$. Другой блок позволяет оценить $A(A+BC)$ и т. д. Поэтому можно оценить все шесть параметров с наибольшей точностью, а именно с дисперсией $\sigma^2_0/8$. Все шесть эффектов могут быть получены с помощью одного расчета по схеме Йетса, в котором игнорируется результат для ABC , поскольку он представляет собой сумму этого взаимодействия и межблоковой разности.

План 2^3 с разбиением на блоки по два опыта

В практике исследований часто оказывается необходимым использовать блоки по два опыта. Такие блоки следует обязательно применять тогда, когда известно, что дисперсия по входящим в блоки парам составляет лишь малую долю дисперсии по неблокированным наблюдениям, например, одну треть от нее или даже меньше. При использовании блоков с двумя опытами обычно получается некоторая потеря в эффективности. Однако, как будет показано в дальнейшем, коэффициент эффективности в худшем случае равен $1/3$ (шесть блоков по два опыта для оценивания шести параметров по плану 2^3). Если же для этого плана может быть образовано $8 \div 12$ блоков, то коэффициент эффективности оказывается равным $2/3$.

Кратко остановимся на простом примере, с тем чтобы проиллюстрировать частичное смешивание. Пусть план 2^3 разбит на четыре блока:

I	II	III	IV
(1)	a	b	ab
abc	bc	ac	c

При этом три главных эффекта могут быть оценены с наибольшей эффективностью, поскольку каждый блок дает оценку $A \pm B \pm C$ и можно так скомбинировать четыре блоковые разности, чтобы получить оценки главных эффектов с дисперсией $\sigma^2_0/8$.

Вместе с тем здесь все парные взаимодействия смешиваются с межблоковыми разностями, и поэтому такое разбиение вряд ли можно считать хорошим. Действительно, для тех, кто хочет использовать факторный план, изучение парных взаимодействий наверняка представляет интерес. Неплохим выходом из положения было бы оценивание трех парных взаимодействий по новой совокупности четырех блоков. Однако с помощью обычного метода смешивания это оказывается невозможным. При этом некоторый эффект, например A , смешивается с разностью между первой и второй парами блоков, а другой эффект, например B , — с разностью между парами блоков I+III и II+IV. После этого произведение AB оказывается смешанным с разностью между парами I+IV и II+III, и, следовательно, одно из искомых парных взаимодействий оценить не удастся. Йетс, Кохрен и Кокс, Дэвис и ряд других авторов рекомендовали в таких случаях для получения недостающих парных взаимодействий реализовать новую совокупность из четырех блоков, а после этого еще одну подобную совокупность добавить для достижения баланса, т. е. равной дисперсии всех оценок.

Предполагая, что взаимодействием ABC можно пренебречь, сначала составим *шесть* блоков по два опыта в каждом. С помощью такого плана можно оценить шесть эффектов первого и второго порядков по данным эксперимента 2^3 . Как уже отмечалось, этой цели нельзя достигнуть при использовании одной и той же системы смешивания во всех парах блоков. Поэтому применим различные способы смешивания для разных пар блоков. Допустим, что требуется оценить A и $(AB+AC)$ по блокам I и II, B и $(AB+BC)$ — по блокам III и IV, C и $(AC+BC)$ — по блокам V и VI. Так как по блоку I оцениваются только A и $(AB+AC)$, то B , C и BC могут быть смешаны с блоковым средним, и поэтому этот блок должен состоять из (1) и a . По блоку II необходимо оценить те же два параметра, но один из них должен иметь обратный знак, и поэтому этот блок состоит из bc и abc . Аналогично по блокам III и IV требуется оценить B и сумму соответствующих парных взаимодействий, и поэтому A , C и AC могут смешиваться со средними значениями для

этих блоков. Ниже подробно рассматриваются блоки I и II; весь же план и значения коэффициентов эффективности приведены в табл. 6.3.

Таблица 6.3

План 2³ с разбиением на шесть блоков по два опыта

I	II	III	IV	V	VI
(1) a	bc abc	(1) b	ac abc	(1) c	ab abc
Оцениваемые эффекты: A (AB+AC) = z ₁ /4		B (AB+BC) = z ₂ /4		C (AC+BC) = z ₃ /4	
Эффекты:	A	B	C	AB	AC
Эффективности:	1/3	1/3	1/3	1/2	1/2

Начнем с блокочных разностей для блоков I и II. Имеем

$$E\{a-(1)\} = 2(A-AB-AC),$$

$$E\{abc-bc\} = 2(A+AB+AC).$$

Суммирование и вычитание этих двух уравнений дает в результате

$$E\{(abc-bc) + (a-(1))\} = 4A,$$

$$E\{(abc-bc) - (a-(1))\} = 4(AB+AC) = z_1.$$

Аналогично поступаем с двумя другими парами блоков. В результате для каждой пары получаем оценки главного эффекта и суммы его парных взаимодействий с остальными эффектами. Обозначим эти суммы соответственно через z₂ и z₃. После этого легко можно разделить три парных взаимодействия:

$$8\widehat{AB} = z_1 + z_2 - z_3,$$

$$8\widehat{AC} = z_1 - z_2 + z_3,$$

$$8\widehat{BC} = -z_1 + z_2 + z_3.$$

Дисперсия каждой оценки парного взаимодействия равна 3σ²/16. Минимально возможная дисперсия, достижимая при оценивании парных взаимодействий по шести блокам, равна 3σ²/32; она могла бы быть получена, если бы эти блоки составлялись подобно тому, как показано на рис. 6.1. Поэтому коэффициенты эффективности для трех парных взаимодействий равны 1/2. Такие коэффициенты вряд ли можно считать очень хорошими, но все же наш план позволяет оценить шесть эффектов, и поэтому можно говорить, что он с наибольшей эффективностью использует степени свободы. Этот план является насыщенным относительно внутриблоковых оценок. Отметим, что

эффективность повышается в тех случаях, когда оказывается возможным выполнить восемь или более блоков.

План 2³ с разбиением на 8 и 12 блоков по два опыта

Первые две строки табл. 6.4 поясняют способ образования и состав сверхблока, включающего четыре блока по два опыта.

Таблица 6.4.

План 2³ с разбиением на 8 и 12 блоков по два опыта

Системы смешивания (сверхблоки)	Оцениваемые параметры	Комбинации условий опытов
±A±BC±ABC	B, C, AB, AC	(1) a b ab bc abc c ac
±B±AC±ABC	A, C, AB, BC	(1) a b ab ac c abc bc
±C±AB±ABC	A, B, AC, BC	(1) a c ac ab b abc bc
Эффект:	A B C AB AC BC	Средняя эффективность
Эффективность (8 блоков):	1/2 1/2 1 1 1/2 1/2	2/3
Эффективность (12 блоков):	2/3 2/3 2/3 2/3 2/3 2/3	2/3

С его помощью можно получить четыре полезные оценки — максимально возможное число оценок для четырех блоков по два опыта. В следующих двух строках указана новая совокупность четырех блоков по два опыта, с их помощью удастся уже оценить все шесть искомых параметров с коэффициентами эффективности, приведенными в нижней части таблицы. Если же к этим двум совокупностям может быть добавлена третья, коэффициенты эффективности всех шести параметров выравниваются, хотя величина среднего коэффициента при этом не изменится.

В каждой из совокупностей по четыре блока есть основной блок, содержащий опыт (1) и один из остальных опытов. Три других блока получаются из основного блока путем умножения условий его опытов на условия любого допустимого опыта, еще не включенного в ранее образованные блоки. Основной блок всегда задается исходя из системы смешивания. При этом надо придерживаться следующего правила: обозначения опытов основного блока должны иметь четное число одинаковых букв с каждым членом системы смешивания (0 считается четным числом). Точнее говоря, все эффекты с нечетным числом букв должны быть смешаны со средним значением основного блока со знаком минус, а все эффекты с четным числом букв — со знаком плюс.

Выигрыш в оценивании по этим малым конструкциям достигается за счет двух изменений, вносимых в стандартные планы. Во-первых,

взаимодействие ABC помещается в систему смешивания, а не в число оцениваемых эффектов, поскольку его эффект полагается равным 0 или по крайней мере пренебрежимо малым. Во-вторых, вместо того чтобы использовать блоки, позволяющие оценить только главные эффекты, здесь выбираются комбинации, которые дают возможность также оценить парные взаимодействия. Вряд ли имеет смысл использовать дополнительные пары [такие, как (1) и abc], которые уже не могут дать внутриблоковой информации о парных взаимодействиях.

6.1.3. План 2^4 с разбиением на блоки по два, четыре и восемь опытов

План 2^4 с разбиением на 16 блоков по два опыта

Теперь оценим 10 параметров (четыре главных эффекта и шесть парных взаимодействий). После подробного изучения этого случая можно сказать, что такая задача не может быть решена с помощью двух сверхблоков по восемь блоков в каждом. Однако при использовании четырех сверхблоков с четырьмя блоками в каждом, причем с различными системами смешивания для каждого сверхблока, оказывается возможным получить коэффициент эффективности, равный $1/2$, для всех главных эффектов и для четырех парных взаимодействий. Остальные два парных взаимодействия могут быть оценены с полной эффективностью.

В табл. 6.5 приведены четыре сверхблока, параметры, оцениваемые в каждом из них, и условия опытов для каждого блока. Легко заметить, что оценка $(AC+BD)$ из блока I может быть скомбинирована с оценкой $(AC-BD)$ из блока II для того, чтобы разделить оценки этих двух взаимодействий. Аналогичные операции могут быть проведены и над всеми остальными парами.

Таблица 6.5

Состав сверхблоков и блоков по два опыта для плана 2^4

Сверхблок:	I	II	III	IV
Оцениваемые эффекты:	A B	A C	B D	C D
	$(AC+BD)$ $(AD+BC)$	$(AC-BD)$ $(AD-BC)$	$(AB+CD)$ $(AD+BC)$	$(AB-CD)$ $(AD-BC)$
Состав:	(1), ab ac, bc ad, bd $cd, abcd$	a, c b, abc d, acd abd, bcd	(1), bd ab, ad $ac, abcd$ bc, cd	a, acd b, bcd c, d abc, abd
Число букв:	Четное	Нечетное	Четное	Нечетное
Способ обозначения:	$A, B \rightarrow ab$	$A, C \rightarrow a, c = \{(1), ac\} \times a$	$B, D \rightarrow bd$	$C, D \rightarrow c, d = \{(1), cd\} \times c$

Напомним о задаче с двумя взвешиваниями, когда при измерении суммы и разности двух весов (P и Q) дисперсия оценок двух весов оказывается вдвое меньше, чем при раздельном взвешивании. В задаче, изучаемой в данном разделе, также находятся суммы и разности, поэтому этот прием также можно назвать $(P-Q)$ -принципом. В дальнейшем $(P-Q)$ -принцип неоднократно используется. Выберем совокупность четырех блоков по два опыта (сверхблок I), с помощью которой можно получить четыре оценки. Этого не удастся добиться для $(A-B)$ и $(C-D)$ одновременно, поэтому выберем их для оценивания $A, B, (AC+BD)$ и $(AD+BC)$. Каждый из четырех блоков по два опыта должен при этом иметь эти четыре параметра в математическом ожидании своего единственного контраста, но они должны входить в математические ожидания с разными знаками, чтобы можно было раздельно оценить четыре искомые комбинации. Здесь опять применяется $(P-Q)$ -принцип, но теперь его уже следовало бы назвать $(P-Q-R-S)$ -принципом, представляющим обобщение $(P-Q)$ -принципа на случай измерения четырех весов.

Поскольку $A, B, (AC+BD)$ и $(AD+BC)$ должны войти в математическое ожидание блокового контраста, параметры C, D, AB (и их произведения) смешиваются с блоковым средним значением. При конструировании основного блока всегда следует брать нечетные параметры со знаком минус. Система смешивания для рассматриваемого блока задается следующим выражением:

$$I - \underline{C} - \underline{D} + \underline{CD} + \underline{AB} - \underline{ABC} - \underline{ABD} + \underline{ABCD},$$

где три подчеркнутых члена взяты в качестве генераторов сверхблока. Чтобы убедиться в том, что искомые параметры входят в блоковую разность, умножим каждый член системы смешивания на один из эффектов, например на A . В результате получим

$$A - AC - AD + ACD + B - BC - BD + BCD = \\ = A + B - (AC + BD) - (AD + BC) + ACD + BCD,$$

а это как раз и означает, что все в порядке.

Для автоматического нахождения соответствующих комбинаций условий опытов можно применить обратный алгоритм Йетса (на множестве нулей и единиц) либо к членам системы смешивания, либо к строке выбранных эффектов. В результате получим (1) и ab . Заметим, что обозначения этих опытов имеют четное число одинаковых букв с каждым членом системы смешивания. Легко можно проверить, что достаточно контролировать на четность лишь три генератора. Необходимо сделать так, чтобы от одного блока к другому изменялись знаки двух генераторов. Тогда в сверхблоке только $ABCD$ окажется

смешанным со средним значением сверхблока (а также с суммой всех межблоковых разностей). Приведем последовательность знаков для каждого из четырех блоков по два опыта:

<i>I</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>CD</i>	<i>AB</i>	<i>ABC</i>	<i>ABD</i>	<i>ABCD</i>	Условия опытов	
+	-	-	+	+	-	-	+	(1)	<i>ab</i>
+	+	-	-	-	-	+	+	<i>ac</i>	<i>bc</i>
+	-	+	-	-	+	-	+	<i>ad</i>	<i>bd</i>
+	+	+	+	+	+	+	+	<i>cd</i>	<i>abcd</i>

Сверхблок II образуется для оценивания другой совокупности четырех целевых параметров, включающей (*AC—BD*) и (*AD—BC*), так что опять может использоваться (*P—Q*)-принцип. Аналогично составляются сверхблоки III и IV. Цена, которую пришлось заплатить за такое довольно-таки нерегулярное разбиение на блоки, сначала может показаться излишне высокой. При оценивании 8 из 10 искомых параметров с наибольшей эффективностью требуется лишь половина имеющихся данных. Все данные используются только при оценивании *AD* и *BC*. Таким образом, если вспомнить ранее применявшуюся терминологию, этот план обладает эффективностью 50% для всех параметров, кроме двух. Мы допустили такую неэффективность, с тем чтобы иметь возможность оценить все 10 параметров по 16 блокам с двумя опытами в каждом. Стандартные сбалансированные методы потребовали бы для достижения такого результата вдвое большего числа блоков.

План 2⁴//4×4, или четыре блока по четыре опыта

Выберем два параметра, предпочтительно взаимодействия высокого порядка, а также их произведение, которые можно считать пренебрежимо малыми. Применить *ABCD* в качестве одного из параметров разделения на блоки нельзя, так как произведение *ABCD* и любого другого по предположению пренебрежимо малого параметра будет либо главным эффектом, либо парным взаимодействием. Если же выбрать два каких-либо трехфакторных взаимодействия, то их произведение является парным взаимодействием, и, следовательно, это парное взаимодействие будет потеряно. Именно такой выбор был рекомендован Кохреном и Коксом, Дэвисом. Для достижения в некотором роде баланса эти авторы предлагают шестикратное повторение плана 2⁴, каждый раз с новым типом смешивания и потерей разных парных взаимодействий. Такие планы удается осуществить в сельскохозяйственных экспериментах, когда для достижения

необходимой точности требуется проведение 96 опытов. Но иногда может оказаться достаточным дважды реализовать план 2⁴ с потерей в каждом случае одного парного взаимодействия. При этом получается полная эффективность оценок всех параметров, кроме двух, используемых при разбиении на блоки. Эти два параметра оцениваются с коэффициентом эффективности, равным 1/2.

Таблица 6.6

План 2⁴ с разбиением на четыре блока по четыре опыта (оцениваются все парные взаимодействия)

	<i>I</i>	<i>II</i>	<i>III</i>	<i>IV</i>
(1)	<i>abd</i>	<i>a</i>	<i>abc</i>	
<i>ab</i>	<i>ac</i>	<i>abcd</i>	<i>ad</i>	
<i>acd</i>	<i>bc</i>	<i>bd</i>	<i>b</i>	
<i>bcd</i>	<i>d</i>	<i>c</i>	<i>cd</i>	

В табл. 6.6 показана схема разбиения на блоки для однократной реализации плана 2⁴. Эта схема обеспечивает оценивание 10 главных эффектов и парных взаимодействий, причем 8 из них с полной эффективностью, а также оценивание *BD* и *CD* с эффективностью 1/2. Четырьмя определяющими контрастами (термин «определяющий контраст» обозначает сумму членов в системе смешивания, т. е. всю совокупность параметров, смешанных со средним одного из блоков. Характер смешивания оценок любого эффекта может быть выявлен путем умножения определяющего контраста на этот эффект) здесь являются следующие:

- I. $I - ABC - ABD + CD$
- II. $I - ABC + ABD - CD$
- III. $I + ABC - ACD - BD$
- IV. $I + ABC + ACD + BD$

Необходимо иметь в виду, что, хотя в данном случае однократное вычисление с помощью алгоритма Йетса по 16 результатам и дает правильные оценки восьми искомых параметров, для получения *BD* и *CD* потребуются дополнительные расчеты с использованием лишь той половины данных, для которой оценка соответствующего эффекта не смешивается с оценками других эффектов.

В каждом блоке имеется 3 степени свободы и, следовательно, всего их 12 в четырех блоках, а поэтому остается 2 степени свободы для

оценки ошибки. Оценку дисперсии ошибки получают путем вычисления взаимодействий BCD и $ABCD$. Отметим, что эти взаимодействия оцениваются с полной эффективностью.

План $2^4/8 \times 2$

Здесь не остается ничего другого, как выбрать для смешивания взаимодействие $ABCD$. При этом план 2^4 разбивается на четную и нечетную половины. Следует отметить, что четыре главных эффекта (каждый совместно с дополнительным тройным взаимодействием) могут быть оценены по каждому блоку.

6.1.4. Разбиение на блоки плана 2^5

Если предполагается реализовать два блока по 16 опытов, то, очевидно, в качестве «теряемого» параметра следует взять взаимодействие $ABCDE$. Для плана, состоящего из четырех блоков по восемь опытов, необходимо выбрать в качестве таких параметров любые два трехфакторных взаимодействия с одной общей буквой, поскольку их произведением в этом случае будет взаимодействие четырех факторов. Если экспериментатор подозревает, что какие-то определенные парные взаимодействия могут оказаться большими, буквы, входящие в эти взаимодействия, должны быть разнесены в два выбираемых трехфакторных взаимодействия.

План 2^5 может быть разбит также на блоки по четыре и даже по два опыта, но такие разбиения здесь рассматриваться не будут. Чтобы понять, каким правилам необходимо следовать в этих случаях и на что надо обращать внимание, вполне достаточно сказанного выше о разбиениях на блоки планов 2^3 и 2^4 .

6.1.5. Разбиение плана 3^2 на блоки по два и три опыта

Здесь будут рассмотрены рекомендации использования результатов, когда разбиение на блоки по три опыта вытекает из естественных требований.

Разложение взаимодействий на ортогональные компоненты, впервые предложенное Йетсом, рассматривается как не поддающееся интерпретации. Ниже приводится опровержение этого мнения.

Компонента I взаимодействия с двумя степенями свободы определяется через три диагональные суммы наблюдений в плане 3^2 . Обозначим девять результатов наблюдений следующим образом:

	b_0	b_1	b_2
a_0	1	4	7
a_1	2	5	8
a_2	3	6	9

Тогда получим такие определения компонент взаимодействий:

$$I_1 = 1 + 5 + 9, \quad J_1 = 1 + 6 + 8,$$

$$I_2 = 2 + 6 + 7, \quad J_2 = 2 + 4 + 9,$$

$$I_3 = 3 + 4 + 8, \quad J_3 = 3 + 5 + 7.$$

Йетс разбивает сумму квадратов взаимодействий на две пары компонент с двумя степенями свободы каждая. Одна пара компонент определяется через I , другая — через J . Вместе с тем Йетс не привел ортогональные контрасты, соответствующие отдельным степеням свободы.

При рассмотрении этих двух естественных контрастов введем следующие обозначения:

$$U_1 = 2I_1 - I_2 - I_3 \quad \text{и} \quad V_1 = 2J_3 - J_1 - J_2;$$

$$U_2 = I_2 - I_3 \quad \text{и} \quad V_2 = J_1 - J_2.$$

U_i и $V_i (i=1, 2)$ не содержат главных эффектов и общего среднего. Поэтому они являются функциями исключительно парных взаимодействий, т. е. величин $\hat{\gamma}_{ij}$ в факторном представлении.

Используя $\hat{\gamma}_{ij}$ или остатки в плане 3^2 вместо наблюдений, можно составить список *множителей* каждого из остатков в виде стандартного массива 3×3 для представления всех U и V .

$$U_1 = \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 3 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad U_2 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$V_1 = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & -1 \\ 2 & -1 & -1 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 3 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad V_2 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

Отсюда следует, что

$$U_1 + V_1 = (A_Q B_Q), \quad U_1 - V_1 = 3(A_L B_L);$$

$$U_2 - V_2 = (A_Q B_L), \quad U_2 + V_2 = (A_L B_Q),$$

где скобками выделен стандартный целый контраст для остатков. Теперь можно пояснить, что представляют собой компоненты I и J .

$U_1 (= 2I_1 - I_2 - I_3)$ — контраст с единственной степенью свободы, который реагирует на диагональный гребень (или овраг) функции отклика в направлении \setminus . $V_1 (= 2J_3 - J_1 - J_2)$ становится большим лишь в случае, когда диагональный гребень (овраг) проходит в другом

направлении J . U_2 и V_2 — просто ортогональные остатки, характеризующие неточность представления того или другого гребня. Если бы и U_1 и V_1 оказались большими, предпочтительно представить их сумму как A_0B_0 .

Распространение полученных результатов на планы 3^3 и т. д. предлагается выполнить самостоятельно.

Как обычно, желательно достичь разумного компромисса между числом блоков, требуемых для точного баланса (т. е. для обеспечения равных дисперсий всех оценок), и числом оцениваемых параметров. При рассмотрении плана 3^2 на основании внутри-блоковых сравнений должны быть оценены восемь параметров. Если возможно выполнение всех 36 блоков по два опыта ($9 \times 8 / 2 = 36$), то удастся достичь точного баланса. Желательно обеспечить хорошие сравнения строк и столбцов, поэтому начнем с 12 пар, которые сравнивают каждый элемент (ячейку) плана с его ближайшими соседями. Эти пары дадут хорошие оценки сравнений строки (или столбца) 1 со строкой (или столбцом) 2 и строки (или столбца) 2 со строкой (или столбцом) 3. Пронумеровав элементы (ячейки) следующим образом:

1	2	3
4	5	6
7	8	9

образуем блоки: 12, 23, 36, 25, 14, 45, 56, 69, 58, 47, 78, 89. Получаемые из них 12 разностей можно использовать для оценивания разностей столбцов и строк, а также параметров взаимодействий. Для внутриблоковой ошибки останется четыре степени свободы. Если это число недостаточно велико, его можно увеличить, рассматривая сравнения строки (и столбца) 1 со строкой (и столбцом) 3. Следовательно, при этом будут добавлены блоки 17, 28, 39, 13, 46, 79. В результате число степеней свободы для ошибки увеличится на шесть, а также значительно повысится эффективность и точность всех оценок.

Перейдем к дробному факторному эксперименту

Как мы знаем, количество опытов в полном факторном эксперименте значительно превосходит число определяемых коэффициентов линейной модели. Другими словами, полный факторный эксперимент обладает большой избыточностью опытов. Желательно сократить их число за счет той информации, которая не очень существенна при построении линейных моделей. При этом нужно стремиться к тому, чтобы матрица планирования не лишилась своих оптимальных свойств. Будем осуществлять поиск путей минимизации числа опытов.

6.2. Минимизация числа опытов

Начнем с самого простого — полного факторного эксперимента 2^2 . Напишем еще раз известную матрицу (табл. 6.7).

Таблица 6.7

Полный факторный эксперимент 2^2

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	(x_3) x_1x_2	y	Номер опыта	x_0	x_1	x_2	(x_3) x_1x_2	y
	1	+	-	-	+		y_1	3	+	-	+
2	+	+	-	-	y_2	4	+	+	+	+	y_4

Пользуясь таким планированием, можно вычислить четыре коэффициента и представить результаты эксперимента в виде неполного квадратного уравнения

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2.$$

Если имеются основания считать, что в выбранных интервалах варьирования процесс может быть описан линейной моделью, то достаточно определить три коэффициента: b_0 , b_1 и b_2 . Остается одна степень свободы. Используем ее для минимизации числа опытов. При линейном приближении $b_{12} \rightarrow 0$ и вектор-столбец x_1x_2 можно использовать для нового фактора x_3 . Поставим этот фактор в скобках над взаимодействием x_1x_2 и посмотрим, каковы будут оценки коэффициентов. Здесь уже не будет тех отдельных оценок, которые мы имели в полном факторном эксперименте 2^k . Оценки смещаются следующим образом:

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}; \quad b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13}; \quad b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}.$$

Так как мы постулируем линейную модель, то, следовательно, все парные взаимодействия незначимы. Главное, мы нашли средство минимизировать число опытов: вместо восьми опытов для изучения трех факторов можно поставить четыре. При этом матрица планирования не теряет своих оптимальных свойств (ортогональность, ротатабельность и т. п.). Найденное правило можно сформулировать так:

чтобы сократить число опытов, нужно новому фактору присвоить вектор-столбец матрицы, принадлежащий взаимодействию, которым можно пренебречь.

Тогда значение нового фактора в условиях опытов определяется знаками этого столбца.

Рассмотрим три матрицы, приведенные ниже. Эти матрицы предлагаются взамен полного факторного эксперимента 2^3 , требующего, как мы знаем, восьми опытов. Каким из них можно воспользоваться?

Матрица № 1						Матрица № 2					
№	x_0	x_1	x_2	x_3	y	№	x_0	x_1	x_2	x_3	y
1	+	-	-	+	y_1	1	+	-	-	+	y_1
2	+	+	+	-	y_2	2	+	+	+	+	y_2
3	+	-	+	-	y_3	3	+	-	+	-	y_3
4	+	+	-	+	y_4						

Матрица № 3					
№	x_0	x_1	x_2	x_3	y
1	+	-	-	+	y_1
2	+	+	+	+	y_2
3	+	-	+	-	y_3
4	+	+	-	-	y_4

Проверим свойства матрицы № 1. Каждый вектор-столбец матрицы, кроме первого, содержит равное число +1 и -1. Это означает, что выполняется условие:

$$\sum_{j=1}^3 x_{ji} = 0.$$

Теперь перемножим каждую пару вектор-столбцов и посмотрим, будет ли сумма произведений равна 0.

$$\sum_{i=1}^4 x_{2i}x_{3i} = -4,$$

Как мы видим, это условие не выполняется т. е. совершена какая-то ошибка в выборе матрицы. Найдем ее. Вектор-столбцы для x_1 и x_2 не вызывают сомнения. Ведь эта часть матрицы — полный факторный эксперимент 2^2 . Посмотрим, как построен вектор-столбец для x_3 . Элементы этого столбца обратны по знаку элементам соседнего столбца x_2 . Два этих столбца оказались взаимосвязанными: $x_3 = -x_2$.

При этом $b_3 \rightarrow \beta_3 - \beta_2$ и $b_2 \rightarrow \beta_2 - \beta_3$. В таком планировании не могут быть отдельно оценены основные эффекты. Значит, мы потеряли информацию о двух линейных коэффициентах нашей модели. Таким планированием воспользоваться невозможно.

Матрица № 2 содержит всего три опыта. Три опыта недостаточны для оценки четырех коэффициентов: b_0, b_1, b_2 и b_3 . Кроме того, ни одно из свойств, присущих полному факторному эксперименту, здесь не

выполняется, за исключением нормировки. Матрица № 3 сохраняет все свойства полного факторного эксперимента. Она дает возможность оценить свободный член b_0 и три коэффициента при линейных членах, потому что для x_3 использован вектор-столбец x_1x_2 полного факторного эксперимента 2^2 .

Если мы в дополнение к столбцам матрицы № 3 вычислим еще столбцы для произведений x_1x_3 и x_2x_3 , то увидим, что элементы столбца x_1x_3 совпадут с элементами столбца x_2 , а элементы столбца x_2x_3 — с элементами столбца x_1 . Найденные нами коэффициенты будут оценками для совместных эффектов

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}; \quad b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13}; \quad b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}.$$

Такое планирование нас вполне устраивает. Мы смешали эффекты взаимодействия с основными эффектами. (Но все основные эффекты оцениваются раздельно друг от друга.) Так как постулируется линейная модель, то предполагается, что эффекты взаимодействия близки к нулю, и поэтому $b_1 \approx \beta_1, b_2 \approx \beta_2, b_3 \approx \beta_3$.

Мы рассмотрели самый простой случай: матрицу из четырех опытов для трехфакторного планирования. С увеличением числа факторов вопрос о минимизации числа опытов превращается в довольно сложную задачу. Рассмотрим ее детально. При этом нам не обойтись без новых определений и понятий.

6.3. Дробная реплика

Поставив четыре опыта для оценки влияния трех факторов, мы воспользовались половиной полного факторного эксперимента 2^3 , или «полуреplikой». Если бы мы x_3 приравняли к $-x_1x_2$, то получили бы вторую половину матрицы 2^3 . В этом случае:

$$b_1 \rightarrow \beta_1 - \beta_{23}; \quad b_2 \rightarrow \beta_2 - \beta_{13}; \quad b_3 \rightarrow \beta_3 - \beta_{12}.$$

При реализации обеих полуреplik можно получить раздельные оценки для линейных эффектов и эффектов взаимодействия, как и в полном факторном эксперименте 2^3 .

Объединение этих двух полуреplik и есть полный факторный эксперимент 2^3 .

Матрица из восьми опытов для четырехфакторного планирования будет полуреplikой от полного факторного эксперимента 2^4 , а для пятифакторного планирования — четверть-реплика от 2^5 . В последнем случае два линейных эффекта приравниваются к эффектам взаимодействия. Для обозначения дробных реplik, в которых p линейных эффектов приравнены к эффектам взаимодействия, удобно пользоваться условным обозначением 2^{k-p} . Так, полуреплика от 2^6 запишется в виде 2^{6-1} , а четверть-реплика от 2^5 — в виде 2^{5-2} .

Условные обозначения дробных реплик и количество опытов приведены в табл. 6.8.

Таблица 6.8

Условия обозначения дробных реплик и число опытов

Число факторов	Дробная реплика	Условное обозначение	Число опытов	
			для дробной реплики	для полного факторного эксперимента
3	1/2-реплика от 2 ³	2 ³⁻¹	4	8
4	1/2-реплика от 2 ⁴	2 ⁴⁻¹	8	16
5	1/4-реплика от 2 ⁵	2 ⁵⁻²	8	32
6	1/8-реплика от 2 ⁶	2 ⁶⁻³	8	64
7	1/16-реплика от 2 ⁷	2 ⁷⁻⁴	8	128
5	1/2-реплика от 2 ⁵	2 ⁵⁻¹	16	32
6	1/4-реплика от 2 ⁶	2 ⁶⁻²	16	64
7	1/8-реплика от 2 ⁷	2 ⁷⁻³	16	128
8	1/16-реплика от 2 ⁸	2 ⁸⁻⁴	16	256
9	1/32-реплика от 2 ⁹	2 ⁹⁻⁵	16	512
10	1/64-реплика от 2 ¹⁰	2 ¹⁰⁻⁶	16	1024
11	1/128-реплика от 2 ¹¹	2 ¹¹⁻⁷	16	2048
12	1/256-реплика от 2 ¹²	2 ¹²⁻⁸	16	4096
13	1/512-реплика от 2 ¹³	2 ¹³⁻⁹	16	8192
14	1/1024-реплика от 2 ¹⁴	2 ¹⁴⁻¹⁰	16	16384
15	1/2048-реплика от 2 ¹⁵	2 ¹⁵⁻¹¹	16	32768

Дробная реплика — это просто блок полного факторного плана. Выбранное множество эффектов взаимодействия, влиянием которых, как предполагается, можно пренебречь, смешивается с оценкой среднего. Это множество вместе с тождеством I образует систему смешивания.

При использовании дробных реплик все эффекты получают смещение, вызываемое элементами системы смешивания. Следовательно, важно сделать так, чтобы представляющие интерес эффекты смешивались с эффектами таких взаимодействий, которые легко учитываются или ими можно уверенно пренебречь.

Укажем две причины, по которым предлагается пользоваться дробными, а не полными факторными планами:

1. Эффекты факторов, представляющих первостепенный интерес, могут быть изучены в более общих условиях, чем это возможно в других случаях.

2. Уменьшается число опытов, необходимых для исследования заданного числа главных эффектов и эффектов парных взаимодействий.

Принципиальными недостатками дробных реплик являются следующие:

1. Может остаться слишком мало степеней свободы для выявления разнообразных возможных случаев недостаточно высокого качества описания.

2. Более высокая по сравнению с полными планами уязвимость по отношению к обычным опасностям экспериментирования: ошибочным данным, перепутанным наблюдениям, нереализуемым или недопустимым условиям опытов.

После обсуждения выгод и риска, связанных с применением дробных реплик, укажем, что разумного компромисса можно достичь, проявляя осторожность, принимая в качестве реальных только относительно большие эффекты и резервируя около половины имеющихся в распоряжении степеней свободы для изучения полученных данных.

6.3.1. Дробные части планов 2^k

Каждый факторный эксперимент типа 2^k является дробной частью большего факторного эксперимента типа 2^K (K>k), в котором некоторые факторы не варьируются, а преднамеренно поддерживаются постоянными, причем, возможно, не на их наилучшем уровне. Таким образом, некоторый эксперимент 2² является половиной эксперимента 2³, в котором третий фактор представляет собой некоторое условие, постоянно выполняемое во время всех четырех опытов эксперимента 2². Одна из половин может быть лучше другой — эти случаи будут рассмотрены ниже. Каждый эксперимент 2² является также четвертьрепликой плана 2⁴, т. е. экспериментом типа 2⁴⁻².

Другими словами, в каждой экспериментальной ситуации обычно имеется больше, чем k факторов. Вполне естественно, что выбор факторов, доступных для варьирования и заслуживающих изучения, производится на основе мнения экспериментатора. Однако экспериментатор должен сознавать, что некоторые факторы, которые он не включил в эксперимент, также могут варьироваться и их эффекты можно оценить при небольшом увеличении (а иногда и вообще без увеличения) числа требуемых опытов.

В других случаях имеется возможность повысить обоснованность выводов об эффектах k существенных факторов за счет варьирования некоторых других факторов, которые, вероятно, не дают эффектов. Неизвестно, действительно ли последние факторы не оказывают влияния на результаты; можно лишь надеяться, что это так. Если полученные данные подтвердят, что этими факторами можно

пренебречь, то экспериментатор окажется в выигрыше. С другой стороны, если один или несколько из них все-таки влияет на результаты, то будет установлен факт, который является не менее важным для исследователя.

Конечно, остаются открытыми многие вопросы, возникающие при решении задач с варьированием большого числа факторов. Например, надо ли стараться тщательнее изучить более ограниченную систему или, наоборот, стремиться получить менее точную информацию о более широком множестве условий, связанных с изменением большего количества факторов?

6.3.2. Некоторые простейшие дробные реплики

Единственный опыт

Единственный опыт проводится на нижних уровнях трех факторов. (Введение тех или других названий для уровней факторов в общем случае произвольно.) Обозначим условия этого опыта символом (1). Ради строгости изложения следовало бы обозначить выход — отклик системы в опыте при условиях (1) — некоторым другим символом, например $y_{(i)}$. Однако, если это не приводит к неоднозначности толкования, более удобным оказывается обозначать отклик также символом (1).

Факторное представление результата (1) показывает лишь, как его математическое ожидание связано с математическим ожиданием среднего значения отклика по полному факторному эксперименту. Таким образом, если три фактора установлены на их нижних уровнях, можно записать

$$E\{(1)\} = M - A - B + AB - C + AC + BC - ABC, \quad (6.2)$$

т. е. точно так же, как показано в первой строке табл. 5.27. Очевидно, что математическое ожидание результата опыта (1) будет смещено по отношению к M вследствие действия тех из семи факторных эффектов, которые отличны от нуля.

Хотя этот эксперимент был назван простейшим, он дает представление о наиболее общих чертах всех других тестов или экспериментов. Опыт при определенных условиях проводится главным образом для того, чтобы узнать, не появится ли при этом интересный или приемлемый выход. Если экспериментатор рассчитывает получить некоторую величину на выходе и не получает ее, то это часто оказывается решающим результатом. Даже очень малое значение отклика является информативным. В этом случае экспериментатор

имеет возможность в следующем опыте задать условия, как можно более отличающиеся от тех, которые устанавливались в первом опыте.

Два опыта

Предположим, что теперь экспериментатор проводит опыт abc . Он изменил уровни всех трех факторов, полагая, что все они влияют на отклик в одном и том же направлении. Из данных последней строки табл. 5.27 видно, как факторные эффекты участвуют в этом опыте. Математическое ожидание *разности* двух откликов равно следующему значению:

$$E\{abc - (1)\} = 2(A + B + C + ABC).$$

Здесь смешаны лишь четыре эффекта. Прделана только четверть от 2^3 опытов, которые требовались для получения оценок всех восьми факторных эффектов раздельно друг от друга. Можно назвать два проведенных опыта четвертьрепликой эксперимента 2^3 и обозначить ее как 2^{3-2} .

6.3.3. Полуреплика 2^{3-1}

До проведения четырех опытов невозможно получить оценки главных эффектов факторов A , B и C . Ответим сначала на простой вопрос: «Как следует выбрать эти четыре опыта из полного факторного эксперимента 2^3 ?» Интуиция подсказывает, что они должны по возможности лучше покрывать кубическую область планирования. Это приводит к одному из двух взаимнодополняющих блоков, рассмотренных в разд. 6.1.2 (они изображены на рис. 6.2). Как указывалось в этом разделе, ABC смешано с межблоковой разностью. Следует отметить, что среднее значение *нечетного* блока смешано с $+ABC$, а четного блока — с $-ABC$. Если это положение читателю не очевидно, то ему следует *либо* обратиться к табл. 5.27 (из нее видно, что во все нечетные комбинации условий опытов ABC входит с плюсом, а во все четные — с минусом), *либо* выполнить расчеты с помощью описанного выше метода Йетса, используя $+1$ для четырех четных комбинаций и -1 для остальных. Наконец, можно выполнить эти расчеты на множестве комбинаций с $+1$ в четных позициях, с тем чтобы установить, что и общее среднее, и $-ABC$ получаются при усреднении по четырем опытам.

Так же, как и в разделе 6.1, здесь можно умножить определяющий контраст на некоторый эффект, чтобы выявить все факторные эффекты, смешанные с этим эффектом. Так, для блока I получим следующие результаты:

$$E\{\bar{y}\} = I - ABC,$$

$$E\{(A)\} = 4(A - BC),$$

$$E\{(B)\} = 4(B - AC),$$

$$E\{(C)\} = 4(C - AB),$$

где \bar{y} — блочное среднее, (A) — контраст $ab+ac-(1)-bc$ и т. д.

В табл. 6.9 слева дана стандартная матрица преобразования для эксперимента 2^2 .

Таблица 6.9

Образование плана 2^{3-1} путем смешивания $\pm AB$ с C

Обозначение опыта	T	A	B	AB	C ₁ +	C ₂ -
(1)	+	-	-	+	c	(1)
a	+	+	-	-	a	ac
b	+	-	+	-	b	bc
ab	+	+	+	+	abc	ab

Мы хотим оценить A и B , но встает вопрос, действительно ли нам необходимо оценивать AB ? Если нет, то контраст AB может быть использован для оценки эффекта C . Мы поставлены перед выбором: можно установить C на верхнем уровне в первом и четвертом опытах, как это сделано в столбце для C_1 либо можно установить C на верхнем уровне в двух других опытах, как в столбце для C_2 .

В результате получим множество $AB=C$ для C_1 и $AB=-C$ для C_2 . Точнее говоря, контраст AB используется для оценки $(C+AB)$ в C_1 или $(C-AB)$ в C_2 .

6.3.4. Полуриплика 2^{4-1}

Эксперимент 2^{4-1} содержит 2^3 , или восемь, опытов. Поэтому отождествим контраст $-ABC$ эксперимента 2^3 с новым фактором D . При этом получим следующие комбинации условий и смешанные эффекты:

Комбинации условий	Смешанные эффекты	Комбинации условий	Смешанные эффекты
(1)	$I + ABCD$	c d	$C + ABD$
a d	$A + BCD$	ac	$AC + BD$
b d	$B + ACD$	bc	$BC + AD$
ab	$AB + CD$	abc d	$ABC + D$

Такая система смешивания имеет принципиальное преимущество перед системами, которые рассматривались раньше. Оценки главных эффектов здесь не смещаются за счет эффектов парных взаимодействий. Правда, последние оказываются попарно смешанными между собой.

Бокс и Хантер предложили планы такого вида называть четырехбуквенными, или планами с разрешающей способностью IV. Планы, приводящие к смешиванию главных эффектов с эффектами парных взаимодействий (например, планы 2^{3-1} , рассмотренные в разд. 6.2.3), называются либо трехбуквенными планами, либо планами с разрешающей способностью III, либо планами главных эффектов.

Приведем теперь пример, для которого исходные данные и результаты стандартных расчетов (столбец 3 в табл. 6.10) предложены Дэвисом. Известно, что дисперсия ошибки приблизительно равна 4,0. С помощью обратного алгоритма Йетса находим оценки отклика Y_1 и остатки d_1 , используя значения \bar{y} , (A) и (B) , указанные в табл. 6.10, часть б.

Таблица 6.10

Часть а. Результаты применения прямого алгоритма Йетса к данным эксперимента Дэвиса по плану 2^{4-1}

Обозначение опыта	y	(3)	Смешивания эффектов	$Y_1(\bar{y}, A, B)$	d_1	С учетом $\widehat{AC}=1,5$	d_2
(1)	107	952 ¹⁾	T	107	0	-	+1,5
ad	114	42 ¹⁾	A	117	-3	+	-1,5
bd	122	56 ¹⁾	B	121	+1	-	-0,5
ab	130	-2	AB + CD	131	-1	+	+0,5
cd	106	6	C	107	-1	+	+0,5
ac	121	12	AC + BD	117	+4	-	+2,5
bc	120	-6	BC + AD	121	-1	+	+0,5
abcd	132	-4	ABC + D	131	+1	-	-0,5

Часть б. Результаты применения обратного алгоритма Йетса к T, (A), (B)

Таблица 6.11

Обозначение опыта	Эффекты	(1)	(2)	(2)/8=Y ₁	d ₁
(AB)	0	56	1050	131	-1, -1
(B)	56	994	966	121	+1, -1
(A)	42	56	938	117	-3, +4
T	952	910	854	107	0, -1

Для d₁ остаточный средний квадрат MS₁=30/5=6,0.
 Для d₂ остаточный средний квадрат MS₂=12/4=3,0.

¹⁾ Считается значимым.

Эти результаты служат основанием для следующего простого и непосредственного вывода: средний квадрат остатков MS₁, равный 6,0 и имеющий пять степеней свободы, соизмерим с известной дисперсией ошибки, равной 4,0.

Два наибольших остатка (-3 и +4) получены при одних и тех же условиях эксперимента (при условиях a, поскольку эффекты C и D незначимы). Так как истинное стандартное отклонение полагается равным 2,0, то стандартизированный размах этой пары остатков равен 7,0/2,0, или 3,5, что приводит к значению P=0,025.

Заметим, что знаки упорядоченных остатков (за исключением первого, который равен нулю) совпадают со знаком -AC. Поскольку AC равно 12/8, или 1,5, можно скорректировать на эту величину полученные значения Y, а следовательно, и остатки d₁. В результате получим новые остатки d₂ значения которых приведены в таблице. Средний квадрат MS₂ для новых остатков равен 12/4, или 3, поэтому нет оснований считать, что мы переусердствовали с подгонкой модели.

Эффекты A и B существуют и являются аддитивными. Взаимодействие AC имеет место, является положительным и не превышает 2×1,5, т. е. 3.

Замечание к выбору полуреplik I±ABCD

Между полурепликами I+ABCD и I-ABCD существует очевидная асимметрия. Пусть, например, все четыре главных эффекта существуют, их величины являются достаточно большими и имеют приблизительно одинаковый порядок. Если знак одного из эффектов противоположен знакам трех остальных эффектов, случайные возмущения отсутствуют и используется полуреплика I+ABCD, то экспериментальные данные будут подобны приведенным в табл.6.11, часть а.

Данные, полученные для двух полуреplik

I±ABCD: |A| = |B| = |C| = |D|

Часть а. I+ABCD				Часть б. I-ABCD											
D+ABC	1	1	2	2	abcd	-D+ABC	-1	-1	0	0					
BC		1	0	-2	bc	BC		1	0	0					
AC			-1	0	2	ac	AC			-1	2	4			
C			1	1	-2	2	C			1	1	-2	0		
AB				-1	0	-2	ab	AB				1	2	0	
B				-1	1	2	-2	bd	B			-1	1	2	-4
A				1	-1	2	2	ad	A			1	-1	0	0
T				-1	0	-2	(1)	T				-1	0	0	

Если бы в той же самой экспериментальной ситуации использовалась другая полуреплика, мы получили бы результаты, приведенные в табл. 6.11, часть б. При этом шесть экспериментальных значений находятся на среднем уровне, одно — значительно превышает этот уровень и одно — настолько же меньше его. Такие результаты с математической точки зрения вполне приемлемы и приведут к правильным оценкам всех четырех эффектов, но при условии, что экспериментальные данные являются корректными. Для скептически настроенного экспериментатора или интерпретатора данных тот факт, что все значения, кроме двух, оказываются приблизительно одинаковыми, может послужить основанием для исправления этих двух данных или по крайней мере для сомнений в их корректности. Это привело бы к серьезным последствиям, поскольку эффектов не удалось бы найти совсем. В то же время исправление двух результатов наблюдений из табл. 6.11, часть а, не приводит к потере всех эффектов.

Если экспериментатор знает или предполагает знаки эффектов, он может применить обратный алгоритм Йетса для того, чтобы получить ожидаемую картину результатов, подобно тому как это сделано в табл. 6.11, части а, б. Если это необходимо, он может изменить названия уровней одного из факторов и тем самым обеспечить возможность наблюдения некоторых эффектов не в двух из восьми, а в каждом опыте.

До сих пор у нас не было оснований для недовольства дробными репликами планов 2^p. Однако это объясняется тем, что эти малые планы еще не подвергались достаточно серьезным испытаниям. Такие испытания будут проведены в следующей разделе.

Исследователь должен понимать, что малые дробные планы 2^{3-1} и 2^{4-1} излишне насыщены и слишком неточны для большинства практических применений.

6.4. Выбор полуреплик. Генерирующие соотношения и определяющие контрасты

При построении полуреплики 2^{3-1} существует всего две возможности: приравнять x_3 к $+x_1x_2$ или к $-x_1x_2$. Поэтому есть только две полуреплики 2^{3-1} (табл. 6.12).

Таблица 6.12

Две полуреплики 2^{3-1}

Номер опыта	I. $x_3 = x_1x_2$				Номер опыта	II. $x_3 = -x_1x_2$			
	x_1	x_2	x_3	$x_1x_2x_3$		x_1	x_2	x_3	$x_1x_2x_3$
1	+	+	+	+	1	+	+	-	-
2	-	-	+	+	2	-	-	-	-
3	+	-	-	+	3	+	-	+	-
4	-	+	-	+	4	-	+	+	-

Для произведения трех столбцов матрицы I выполняется соотношение: $+1 = x_1x_2x_3$, а матрицы II: $-1 = x_1x_2x_3$. Как видно, все знаки столбцов произведений одинаковы и в первом случае равны плюс единице, а во втором — минус единице.

Символическое обозначение произведения столбцов, равного +1 или -1, называется *определяющим контрастом*. Контраст помогает определять смешанные эффекты. Для того чтобы определить, какой эффект смешан с данным, нужно помножить обе части определяющего контраста на столбец, соответствующий данному эффекту. Так, если $1 = x_1x_2x_3$, то для x_1 имеем

$$x_1 = x_1^2x_2x_3 = x_2x_3,$$

так как всегда $x_2=1$.

Для x_2 находим

$$x_2 = x_1x_2^2x_3 = x_1x_3,$$

для x_3

$$x_3 = x_1x_2x_3^2 = x_1x_2.$$

Это значит, что коэффициенты линейного уравнения будут оценками

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}, \quad b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13}, \quad b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}.$$

Соотношение, показывающее, с каким из эффектов смешан данный эффект, называется *генерирующим соотношением*.

Полуреплики, в которых основные эффекты смешаны с двухфакторными взаимодействиями, носят название планов с разрешающей способностью III (по наибольшему числу факторов в определяющем контрасте). Такие планы принято обозначать: 2^{3-1}_{III} .

При выборе полуреплики 2^{4-1} возможно восемь решений:

- 1) $x_4 = x_1x_2$, 4) $x_4 = -x_2x_3$, 7) $x_4 = x_1x_2x_3$,
- 2) $x_4 = -x_1x_2$, 5) $x_4 = x_1x_3$, 8) $x_4 = -x_1x_2x_3$,
- 3) $x_4 = x_2x_3$, 6) $x_4 = -x_1x_3$,

Разрешающая способность этих полуреплик различна. Так, реплики 1—6 имеют по три фактора в определяющем контрасте, а 7—8 по четыре. Реплики 7 и 8 имеют максимальную разрешающую способность и называются *главными*. Разрешающая способность задается системой смешивания данной реплики. Она будет максимальной, если линейные эффекты смешаны с эффектами взаимодействия наибольшего возможного порядка.

При отсутствии априорной информации об эффектах взаимодействия экспериментатор стремится выбрать реплику с наибольшей разрешающей способностью, так как тройные взаимодействия обычно менее важны, чем парные. Если существует информация об эффектах взаимодействия, то она должна использоваться при выборе реплики.

Реплики, в которых нет ни одного главного эффекта, смешанного с другим главным эффектом или парным взаимодействием, а все парные взаимодействия смешаны друг с другом, носят название планов с разрешающей способностью IV (по наибольшему числу факторов в определяющем контрасте). Они имеют обозначение 2^{4-1}_{IV} . Полуреплика, заданная определяющим контрастом $1 = x_1x_2x_3x_4$ имеет только четные комбинации букв в каждой строке. Ее можно записать следующим образом, считая строку (1) четной:

$$(1), \quad ad, \quad bd, \quad ab, \quad ac, \quad cd, \quad bc, \quad abcd.$$

А полуреплика, заданная $1 = -x_1x_2x_3x_4$, имеет только нечетные комбинации

$$a, \quad b, \quad c, \quad d, \quad abd, \quad acd, \quad abc, \quad bcd.$$

Такие полуреплики называют *главными полурепликами*, так как они обладают наибольшей разрешающей способностью.

Пусть выбраны полуреплики, заданные определяющими контрастами $1 = x_1x_2x_3x_4$ и $1 = -x_1x_2x_3x_4$. Совместные оценки здесь определяются соотношениями:

$$\begin{array}{lll}
 x_1 = x_2x_3x_4, & x_1x_3 = x_3x_4, & x_3 = -x_1x_2x_4, \\
 x_2 = x_1x_3x_4, & x_1x_4 = x_2x_3, & x_4 = -x_1x_2x_3, \\
 x_3 = x_1x_2x_4, & & x_1x_2 = -x_3x_4, \\
 x_4 = x_1x_2x_3, & x_1 = -x_2x_3x_4, & x_1x_3 = -x_2x_4, \\
 x_1x_2 = x_3x_4, & x_2 = -x_1x_3x_4, & x_1x_4 = -x_2x_3.
 \end{array}$$

Такой тип смешивания даст возможность оценивать линейные эффекты совместно с эффектами взаимодействий второго порядка, а взаимодействия первого порядка — совместно друг с другом.

Если полуреплики заданы генерирующими соотношениями $x_4 = x_1x_2$ и $x_4 = -x_1x_3$, то в этом случае определяющими контрастами являются $I = x_1x_2x_3$ и $I = -x_1x_2x_3$, следовательно, мы получаем планы с разрешающей способностью III и некоторые основные эффекты смешиваем с парными взаимодействиями:

$$\begin{array}{lll}
 x_1 = x_2x_4, & x_2x_3 = x_1x_3x_4, & x_3 = -x_1x_2x_3x_4, \\
 x_2 = x_1x_4, & x_3x_4 = x_1x_2x_3, & x_4 = -x_1x_2, \\
 x_3 = x_1x_2x_3x_4, & & x_1x_3 = -x_2x_3x_4, \\
 x_4 = x_1x_2, & x_1 = -x_2x_4, & x_2x_3 = -x_1x_3x_4, \\
 x_1x_3 = x_2x_3x_4, & x_2 = -x_1x_4, & x_3x_4 = -x_1x_2x_3.
 \end{array}$$

Разрешающая способность этих полуреплик ниже, чем у планов с разрешающей способностью IV, с помощью которых линейные эффекты определяются независимо от парных взаимодействий.

Эти полуреплики имеют в каждой строке как четные, так и нечетные комбинации букв. Такие полуреплики не являются главными. Разумен выбор такой полуреплики, если имеется априорная информация о большей значимости тройных взаимодействий по сравнению с парными или о незначимости трех парных взаимодействий x_2x_4 , x_1x_4 , x_1x_2 .

Как видно, выбор дробной реплики требует много труда. Применяя дробное планирование, нужно точно знать систему смешивания, четко представлять, какую информацию приходится терять.

Теперь рассмотрим пример полуреплики 2^{4-1}_{IV} .

Пример 1. Этот пример относится к планированию эксперимента для отыскания оптимальных условий получения нового полимерного серусодержащего антиоксиданта, синтезированного превращением высокомолекулярного полистирола с серой. Задача состояла в получении стабилизатора, введение которого в изотактический полипропилен увеличивало бы период индукции, не ухудшая физико-

механических свойств полимера. В качестве факторов рассматривались переменные, показанные в табл. 6.13.

Матрица планирования представляла собой полуреплику от 2^4 , заданную генерирующим соотношением $x_4 = x_1x_2x_3$. Определяющим контрастом является $I = x_1x_2x_3x_4$. Умножая определяющий контраст последовательно на x_1 , x_2 , x_3 и x_4 , определяем совместно оценки линейных эффектов и взаимодействий

$$\begin{array}{lll}
 b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{234}, & b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{124}, & b_{12} \rightarrow \beta_{12} + \beta_{34}, \\
 b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{134}, & b_4 \rightarrow \beta_4 + \beta_{123}, & b_{13} \rightarrow \beta_{13} + \beta_{24}, \\
 & & b_{23} \rightarrow \beta_{23} + \beta_{14}.
 \end{array}$$

Таблица 6.13

Уровни факторов и интервалы варьирования

Факторы	Уровни факторов			Интервал варьирования
	-1	0	+1	
\bar{x}_1 — температура реакционной среды, °С	200	220	240	20
\bar{x}_2 — дозировка серы в исходной смеси, вес. ч.	3	6	9	3
\bar{x}_3 — время реакции, мин.	40	100	160	60
\bar{x}_4 — дозировка антиоксиданта в полипропилене, вес. ч.	1	2	3	1

Матрица планирования, результаты эксперимента и коэффициенты регрессии показаны в табл. 6.14.

Таблица 6.14

Матрица планирования 2^{4-1}_{IV}

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	$x_1x_2 = x_3x_4$	$x_1x_3 = x_2x_4$	$x_1x_4 = x_2x_3$	y
1	+	+	+	-	-	+	-	-	10
2	+	-	-	-	-	+	+	+	9
3	+	+	-	-	+	-	-	+	15
4	+	-	+	-	+	-	+	-	25
5	+	+	+	+	+	+	+	+	26
6	+	-	-	+	+	+	-	-	14
7	+	+	-	+	-	-	+	-	5
8	+	-	+	+	-	-	-	+	20
Коэффициент b_i	15,50	-1,50	4,75	0,75	4,50	-0,75	0,75	2,0	

Анализ результатов и поиск оптимальных условий приводятся в последующих разделах.

Рассмотрим теперь полуреплику 2^{5-1} .

При выборе полуреплики 2^{5-1} в распоряжении экспериментатора имеется множество вариантов. Так, x_5 можно приравнять к одному из шести парных взаимодействий. В этом случае получим полуреплику с разрешающей способностью III. Очевидно, это будет не лучший выбор полуреплики. Далее, x_5 можно приравнять к одному из четырех тройных взаимодействий. Тогда получим план с разрешающей способностью IV, и все линейные эффекты будут смешаны с тройными взаимодействиями. И, наконец, полуреплика может быть задана генерирующими соотношениями $x_5 = x_1x_2x_3x_4$ или $x_5 = -x_1x_2x_3x_4$. Определяющими контрастами в этом случае будут $I = x_1x_2x_3x_4x_5$ и $I = -x_1x_2x_3x_4x_5$. Такие реплики носят название планов с разрешающей способностью V и обозначаются 2^{5-1}_V .

Пусть имеется пять факторов и для них нужно выбрать полуреплику с наибольшей разрешающей способностью,

Для полуреплики, заданной генерирующим соотношением $x_5 = x_1x_3x_4$, $I = x_1x_3x_4x_5$, следовательно,

$$\begin{aligned} b_1 &\rightarrow \beta_1 + \beta_{345}, & b_{14} &\rightarrow \beta_{14} + \beta_{35}, & b_{35} &\rightarrow \beta_{35} + \beta_{14}, \\ b_2 &\rightarrow \beta_2 + \beta_{12345}, & b_{15} &\rightarrow \beta_{15} + \beta_{34}, & b_{45} &\rightarrow \beta_{45} + \beta_{13}, \\ b_3 &\rightarrow \beta_3 + \beta_{145}, & b_{23} &\rightarrow \beta_{23} + \beta_{1245}, & b_{123} &\rightarrow \beta_{123} + \beta_{245}, \\ b_4 &\rightarrow \beta_4 + \beta_{135}, & b_{24} &\rightarrow \beta_{24} + \beta_{1235}, & b_{124} &\rightarrow \beta_{124} + \beta_{235}, \\ b_5 &\rightarrow \beta_5 + \beta_{134}, & b_{25} &\rightarrow \beta_{25} + \beta_{1234}, & b_{125} &\rightarrow \beta_{125} + \beta_{234}, \\ b_{12} &\rightarrow \beta_{12} + \beta_{2345}, & b_{34} &\rightarrow \beta_{34} + \beta_{15}, & b_{134} &\rightarrow \beta_{134} + \beta_5 \text{ и т. д.} \\ b_{13} &\rightarrow \beta_{13} + \beta_{45}, \end{aligned}$$

Смешивание основных эффектов с тройными взаимодействиями, когда существуют эффекты взаимодействия более высокого порядка, нельзя признать наилучшим, если нет специальных соображений.

Если выбрана полуреплика, заданная генерирующим соотношением $x_5 = x_1x_3x_4$ и, следовательно, определяющим контрастом $I = x_1x_3x_4x_5$, то коэффициенты определяют такие смешанные оценки:

$$\begin{aligned} b_1 &\rightarrow \beta_1 + \beta_{2345}, & b_5 &\rightarrow \beta_5 + \beta_{1234}, & b_{14} &\rightarrow \beta_{14} + \beta_{235}, \\ b_2 &\rightarrow \beta_2 + \beta_{1345}, & b_{12} &\rightarrow \beta_{12} + \beta_{345}, & b_{15} &\rightarrow \beta_{15} + \beta_{234}, \\ b_3 &\rightarrow \beta_3 + \beta_{1245}, & b_{13} &\rightarrow \beta_{13} + \beta_{245}, & b_{23} &\rightarrow \beta_{23} + \beta_{145} \text{ и т. д.} \\ b_4 &\rightarrow \beta_4 + \beta_{1235}, \end{aligned}$$

Получили полуреплику с разрешающей способностью V. В таких планах линейные эффекты смешаны со взаимодействиями третьего порядка, а взаимодействия первого порядка — с взаимодействиями второго порядка. Эта полуреплика имеет преимущества по сравнению с ранее рассмотренной репликой.

Возможны двадцать два решения при выборе плана 2^{5-1} :

- | | | |
|----------------------|--------------------------|-----------------------------|
| 1) $x_5 = x_1x_2$, | 9) $x_5 = x_2x_4$, | 16) $x_5 = -x_1x_3x_4$, |
| 2) $x_5 = -x_1x_2$, | 10) $x_5 = -x_2x_4$, | 17) $x_5 = x_1x_2x_4$, |
| 3) $x_5 = x_1x_3$, | 11) $x_5 = x_3x_4$, | 18) $x_5 = -x_1x_2x_4$, |
| 4) $x_5 = -x_1x_3$, | 12) $x_5 = -x_3x_4$, | 19) $x_5 = x_2x_3x_4$, |
| 5) $x_5 = x_1x_4$, | 13) $x_5 = x_1x_2x_3$, | 20) $x_5 = -x_2x_3x_4$, |
| 6) $x_5 = -x_1x_4$, | 14) $x_5 = -x_1x_2x_3$, | 21) $x_5 = x_1x_2x_3x_4$, |
| 7) $x_5 = x_2x_3$, | 15) $x_5 = x_1x_3x_4$, | 22) $x_5 = -x_1x_2x_3x_4$, |
| 8) $x_5 = -x_2x_3$, | | |

Мы не станем рассматривать выбор полуреплик 2^{6-1} , 2^{7-1} и т. д. Такими полурепликами редко пользуются на практике. Ведь полуреплика 2^{6-1} требует 32 опыта, а для экспериментатора выгодны планы 2^{6-2} или 2^{6-3} , требующие соответственно 16 и 8 опытов. Поэтому с ростом числа факторов возрастает дробность применяемых реплик.

Заметим, что при построении главных полуреплик в определяющий контраст надо включать наибольшее число факторов.

Построение 1/4-реплик мы рассмотрим в следующем разделе.

6.5. Выбор 1/4-реплик. Обобщающий определяющий контраст

При исследовании влияния пяти факторов можно поставить не 16 опытов, как в предыдущем примере, а только 8, т. е. воспользоваться репликой 2^{5-2} . Здесь возможны двенадцать решений, если x_4 приравнять парному взаимодействию, а x_5 — тройному:

- 1) $x_4 = x_1x_2, x_5 = x_1x_2x_3,$
- 2) $x_4 = x_1x_2, x_5 = -x_1x_2x_3,$
- 3) $x_4 = -x_1x_2, x_5 = x_1x_2x_3,$
- 4) $x_4 = -x_1x_2, x_5 = -x_1x_2x_3,$
- 5) $x_4 = x_1x_3, x_5 = x_1x_2x_3,$
- 6) $x_4 = x_1x_3, x_5 = -x_1x_2x_3,$
- 7) $x_4 = -x_1x_3, x_5 = x_1x_2x_3,$
- 8) $x_4 = -x_1x_3, x_5 = -x_1x_2x_3,$
- 9) $x_4 = x_2x_3, x_5 = x_1x_2x_3,$
- 10) $x_4 = x_2x_3, x_5 = -x_1x_2x_3,$
- 11) $x_4 = -x_2x_3, x_5 = x_1x_2x_3,$
- 12) $x_4 = -x_2x_3, x_5 = -x_1x_2x_3.$

Допустим, выбран пятый вариант: $x_4 = x_1x_3$ и $x_5 = x_1x_2x_3$. Тогда определяющими контрастами являются: $1 = x_1x_3x_4$ и $1 = x_1x_2x_3x_5$.

Если перемножить эти определяющие контрасты, то получится третье соотношение, задающее элементы столбца $1 = x_2x_4x_5$. Чтобы полностью охарактеризовать разрешающую способность реплики, необходимо записать обобщающий определяющий контраст $1 = x_1x_3x_4 = x_2x_4x_5 = x_1x_2x_3x_5$.

Система смешивания определяется умножением обобщающего определяющего контраста последовательно на x_1, x_2, x_3 и т. д.

$$\begin{aligned} x_1 &= x_3x_4 = x_1x_2x_4x_5 = x_2x_3x_5, \\ x_2 &= x_1x_2x_3x_4 = x_4x_5 = x_1x_3x_5, \\ x_3 &= x_1x_4 = x_2x_3x_4x_5 = x_1x_2x_5, \\ x_4 &= x_1x_3 = x_2x_5 = x_1x_2x_3x_4x_5, \\ x_5 &= x_1x_3x_4x_5 = x_2x_4 = x_1x_2x_3, \\ x_1x_2 &= x_2x_3x_4 = x_1x_4x_5 = x_3x_5, \\ x_1x_3 &= x_3x_4x_5 = x_1x_2x_4 = x_2x_3. \end{aligned}$$

Получается довольно сложная система смешивания линейных эффектов с эффектами взаимодействия первого, второго, третьего и четвертого порядков. Если, например, коэффициенты

$$b_{12} \rightarrow \beta_{12} + \beta_{234} + \beta_{145} + \beta_{35} \quad \text{и} \quad b_{15} \rightarrow \beta_{15} + \beta_{345} + \beta_{124} + \beta_{23}$$

отличаются от нуля, то возникают сомнения, можно ли пренебрегать другими парными взаимодействиями, с которыми смешаны линейные эффекты. Тогда следует поставить вторую серию опытов, выбрав нужным образом другую 1/4-реплику.

При этом можно воспользоваться методом «перевала». Смысл этого метода заключается в том, что вторая четверть-реплика получается из

первой путем изменения всех знаков матрицы на обратные. Тогда в обобщающем определяющем контрасте тройные произведения имеют знак, противоположный их знаку в первой четверть-реплике. Тройные произведения определяют парные взаимодействия в совместных оценках для линейных эффектов. Усредняя результаты обеих четверть-реplik, можно получить линейные эффекты, не смешанные с парными взаимодействиями.

Пример 2. Для дополнения 1/4-реплики, заданной определяющими контрастами $1 = x_1x_3x_4$ и $1 = x_1x_2x_3x_5$, можно использовать реплику, заданную генерирующими соотношениями $x_4 = -x_1x_3$ и $x_5 = -x_1x_2x_3$; реплику, заданную генерирующими соотношениями $x_4 = -x_1x_3$ и $x_5 = -x_1x_2x_3$; реплику, заданную генерирующими соотношениями $x_4 = x_1x_3$ и $x_5 = -x_1x_2x_3$.

В случае $x_4 = -x_1x_2$ и $x_5 = -x_1x_2x_3$ обобщающий определяющий контраст запишется в виде $1 = -x_1x_2x_4 = -x_1x_2x_3x_5 = +x_3x_4x_5$.

Посмотрим, какой будет система смешивания

$$\begin{aligned} x_1 &= -x_2x_4 = -x_2x_3x_5 = +x_1x_3x_4x_5, \\ x_2 &= -x_1x_4 = -x_1x_3x_5 = +x_2x_3x_4x_5, \\ x_3 &= -x_1x_2x_3x_4 = -x_1x_2x_5 = +x_4x_5, \\ x_4 &= -x_1x_2 = -x_1x_2x_3x_4x_5 = +x_3x_5, \\ x_5 &= -x_1x_2x_4x_5 = -x_1x_2x_3 = +x_3x_4. \end{aligned}$$

Сложим две четверть-реплики

$$\begin{aligned} x_1 &= -x_2x_4 = x_3x_4 = +x_1x_3x_4x_5 \Rightarrow x_1x_2x_4x_5, \\ x_2 &= -x_1x_4 = x_4x_5 = +x_2x_3x_4x_5 = x_1x_2x_3x_4 \quad \text{и т. д.} \end{aligned}$$

Ясно, что дополнение первой 1/4-реплики второй не привело к улучшению ситуации, а, напротив, осложнило ее, так как линейные эффекты смешиваются с двумя парными взаимодействиями и уничтожаются тройные взаимодействия.

Если исследовать 1/4-реплику, заданную генерирующими соотношениями $x_4 = -x_1x_3$ и $x_5 = -x_1x_2x_3$, то обобщающим контрастом в этом случае является

$$1 = -x_1x_3x_4 = x_1x_2x_3x_5 = -x_2x_4x_5.$$

Система смешивания будет

$$\begin{aligned} x_1 &= -x_3x_4 = x_2x_3x_5 = -x_1x_2x_4x_5, \\ x_2 &= -x_1x_2x_3x_4 = x_1x_3x_5 = -x_4x_5, \\ x_3 &= -x_1x_4 = x_1x_2x_5 = -x_2x_3x_4x_5, \\ x_4 &= -x_1x_3 = x_1x_2x_3x_4x_5 = -x_2x_5, \\ x_5 &= -x_1x_3x_4x_5 = x_1x_2x_3 = -x_2x_4, \\ x_1x_2 &= -x_2x_3x_4 = x_3x_5 = -x_1x_4x_5, \\ x_1x_5 &= -x_3x_4x_5 = x_2x_3 = -x_1x_2x_4. \end{aligned}$$

При сложении двух 1/4-реплик получаем:

$$\begin{aligned} b_1 &\rightarrow \beta_1 + \beta_{235}, & b_4 &\rightarrow \beta_4 + \beta_{12345}, & b_{12} &\rightarrow \beta_{12} + \beta_{35}, \\ b_2 &\rightarrow \beta_2 + \beta_{135}, & b_5 &\rightarrow \beta_5 + \beta_{123}, & b_{15} &\rightarrow \beta_{15} + \beta_{23} \text{ и т. д.} \\ b_3 &\rightarrow \beta_3 + \beta_{125}, \end{aligned}$$

Мы получили план с разрешающей способностью IV и освободили линейные эффекты от смешивания с парными взаимодействиями.

В случае 1/4-реплики, заданной генерирующими соотношениями $x_4 = x_1x_3$ и $x_5 = -x_1x_2x_3$ и обобщающим определяющим контрастом

$$I = x_1x_3x_4 = -x_1x_2x_3x_5 = -x_2x_4x_5,$$

получается следующая система смешивания:

$$\begin{aligned} x_1 &= x_3x_4 = -x_2x_3x_5 = -x_1x_2x_4x_5, \\ x_2 &= x_1x_2x_3x_4 = -x_1x_3x_5 = -x_4x_5, \\ x_3 &= x_1x_4 = -x_1x_2x_5 = -x_2x_3x_4x_5, \\ x_4 &= x_1x_3 = -x_1x_2x_3x_4x_5 = -x_2x_5, \\ x_5 &= x_1x_3x_4x_5 = -x_1x_2x_3 = -x_2x_4, \\ x_1x_2 &= x_2x_3x_4 = -x_3x_5 = -x_1x_4x_5, \\ x_1x_5 &= x_3x_4x_5 = -x_2x_3 = -x_1x_2x_4. \end{aligned}$$

При сложении двух 1/4-реплик получаем

$$\begin{aligned} b_1 &\rightarrow \beta_1 + \beta_{34}, & b_4 &\rightarrow \beta_4 + \beta_{13}, & b_{12} &\rightarrow \beta_{12} + \beta_{234}, \\ b_2 &\rightarrow \beta_2 + \beta_{1234}, & b_5 &\rightarrow \beta_5 + \beta_{1345}, & b_{15} &\rightarrow \beta_{15} + \beta_{345} \text{ и т. д.} \\ b_3 &\rightarrow \beta_3 + \beta_{14}, \end{aligned}$$

Итак, линейные эффекты освобождаются от совместных оценок с тройными эффектами взаимодействий и в некоторых случаях — с парными. Такое планирование целесообразно применить в том случае, если ставится задача освободить все линейные эффекты от взаимодействий второго порядка и два линейных эффекта (в данном случае b_2 и b_5) — от взаимодействий первого порядка.

Таким образом, для дополнения 1/4-реплики до 1/2-реплики, если есть подозрения, что эффекты взаимодействия первого порядка отличаются от нуля, нужно взять вторую четверть-реплику с обобщающим контрастом, в котором два тройных произведения имеют

отрицательный знак, так как тройные произведения определяют парные взаимодействия в совместных оценках для линейных эффектов.

Однако можно представить себе и такой случай, когда целесообразно освободить линейные эффекты от эффектов взаимодействия второго порядка и только часть из линейных эффектов (например, b_2 и b_5) от парных взаимодействий. Тогда нужно выбрать 1/4-реплику таким образом, чтобы в обобщающем определяющем контрасте произведение четырех членов имело отрицательный знак, так как это произведение определяет тройные взаимодействия в совместных оценках для линейных эффектов.

Теперь рассмотрим пример реплики 2^{5-2} .

Пример 3. Применение плана 2^{5-2} относится к оптимизации процесса получения одного производного пиперазина по схеме В. Было решено при планировании эксперимента варьировать пятью факторами, представленными в табл. 6.15.

Параметром оптимизации служил выход реакции в процентах.

Таблица 6.15

Уровни факторов и интервалы варьирования

Факторы	Уровни факторов			Интервал варьирования
	-1	0	+1	
\tilde{x}_1 — соотношение между NaOH и веществом <i>a</i>	1 : 1	1,25 : 1	1,5 : 1	0,25*
\tilde{x}_2 — соотношение между веществом <i>c</i> и веществом <i>a</i>	1 : 1	1,25 : 1	1,5 : 1	0,25*
\tilde{x}_3 — время выдержки, час	3	4	5	1
\tilde{x}_4 — температура, °C	20	25	30	5
\tilde{x}_5 — время прилива вещества, мин	20	40	60	20

* Этот интервал относится к первому члену пропорции.

В табл. 6.16 приведена матрица планирования эксперимента.

В данном случае при планировании использована 1/4-реплика от полного факторного эксперимента 2^5 . При этом ставится 8 опытов вместо 32. Матрица задана генерирующими соотношениями

$$x_4 = x_1x_2x_3, \quad x_5 = -x_1x_2 \text{ и имеет обобщающий контраст}$$

$$I = x_1x_2x_3x_4 = -x_1x_2x_5 = -x_3x_4x_5.$$

Выбрано генерирующее соотношение $x_5 = -x_1x_2$, поскольку взаимодействия x_1x_3 и x_2x_3 предполагались существенными.

Совместные оценки такой 1/4-реплики

$$\begin{aligned} b_1 &\rightarrow \beta_1 - \beta_{25} + \beta_{234} - \beta_{1345}, & b_5 &\rightarrow \beta_5 - \beta_{12} - \beta_{34} + \beta_{12345}, \\ b_2 &\rightarrow \beta_2 - \beta_{15} + \beta_{134} - \beta_{2345}, & b_{13} &\rightarrow \beta_{13} + \beta_{24} - \beta_{235} - \beta_{145}, \\ b_3 &\rightarrow \beta_3 - \beta_{45} + \beta_{124} - \beta_{1235}, & b_{14} &\rightarrow \beta_{14} + \beta_{23} - \beta_{245} - \beta_{135}, \\ b_4 &\rightarrow \beta_4 - \beta_{35} + \beta_{123} - \beta_{1245}, \end{aligned}$$

Таблица 6.16

Матрица планирования 2⁵⁻²

Номер опыта	x ₀	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄	x ₅	y
1	+	-	-	-	-	-	50,0
2	+	+	+	-	-	-	57,2
3	+	-	-	+	+	-	48,1
4	+	+	-	+	-	+	46,0
5	+	-	+	+	-	+	64,8
6	+	+	-	-	+	+	45,3
7	+	-	+	-	+	-	54,8
8	+	+	+	+	+	-	53,0
b _j	52,400	-2,025	5,050	0,575	-2,100	0,325	

Была намечена вторая серия опытов для случая, если поиск оптимальных условий окажется неэффективным. Обобщающий определяющий контраст второй 1/4-реплики имеет вид $1 = x_1 x_2 x_3 x_4 = x_1 x_2 x_5 = x_3 x_4 x_5$. Он был выбран так, чтобы знаки тройных произведений оказались противоположными знакам тех же произведений в первой четверть-реплике.

6.6. Реплики большой дробности

При выборе 1/8-реплики 2⁶⁻³ можно воспользоваться вектор-столбцами трех взаимодействий, например, так:

- 1) $x_4 = x_1 x_2, \quad x_5 = x_1 x_3, \quad x_6 = x_2 x_3;$
- 2) $x_4 = x_1 x_3, \quad x_5 = x_2 x_3, \quad x_6 = x_1 x_2 x_3;$
- 3) $x_4 = x_1 x_2, \quad x_5 = x_2 x_3, \quad x_6 = x_1 x_2 x_3;$
- 4) $x_4 = x_1 x_2, \quad x_5 = x_1 x_3, \quad x_6 = x_1 x_2 x_3.$

Для каждого из этих решений можно сделать шесть перестановок.

Итого получается 24 возможности выбора 1/8-реплики. Это при условии, что мы всюду выбираем положительные генерирующие соотношения. Из четырех приведенных выше решений наименее удачно первое, поскольку все линейные эффекты смешиваются с парными взаимодействиями. Если априорно известно, что из всех взаимодействий наиболее существенно $x_1 x_2$, то нужно выбрать второе решение, если $x_1 x_3$ — третье, а если $x_2 x_3$ — четвертое.

Допустим, мы избрали четвертое решение, предполагая, что из факторов x_4, x_5, x_6 наиболее существенным является x_4 . Приравняем x_4 тройному взаимодействию и запишем генерирующие соотношения

$$x_4 = x_1 x_2 x_3, \quad x_5 = x_1 x_2, \quad x_6 = x_1 x_3.$$

Ограничимся парными и тройными взаимодействиями.

Для 1/8-реплики с генерирующими соотношениями

$$x_4 = x_1 x_2 x_3, \quad x_5 = x_1 x_2, \quad x_6 = x_1 x_3$$

имеем следующие определяющие контрасты:

$$1 = x_1 x_2 x_3 x_4, \quad 1 = x_1 x_2 x_5, \quad 1 = x_1 x_3 x_6.$$

Если попарно перемножить эти определяющие контрасты, то получим

$$1 = x_3 x_4 x_5; \quad 1 = x_2 x_4 x_6; \quad 1 = x_2 x_3 x_5 x_6.$$

Произведение трех определяющих контрастов равно

$$1 = x_1 x_4 x_5 x_6.$$

Чтобы полностью охарактеризовать разрешающую способность данной 1/8-реплики, запишем обобщающий определяющий контраст

$$1 = x_1 x_2 x_3 x_4 = x_1 x_2 x_5 = x_1 x_3 x_6 = x_3 x_4 x_5 = x_2 x_4 x_6 = x_2 x_3 x_5 x_6 = x_1 x_4 x_5 x_6.$$

Получается следующая система смешивания:

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{25} + \beta_{36} + \beta_{234} + \beta_{456}, \quad b_4 \rightarrow \beta_4 + \beta_{35} + \beta_{26} + \beta_{123} + \beta_{156},$$

$$b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{15} + \beta_{46} + \beta_{134} + \beta_{356}, \quad b_5 \rightarrow \beta_5 + \beta_{12} + \beta_{34} + \beta_{236} + \beta_{146},$$

$$b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{16} + \beta_{45} + \beta_{124} + \beta_{256}, \quad b_6 \rightarrow \beta_6 + \beta_{13} + \beta_{24} + \beta_{235} + \beta_{145}.$$

Рассмотрим пример 1/16-реплики от 2⁷.

Пример 4. Этот пример относится к планированию эксперимента при оптимизации процесса получения производного пиперазина по способу А. Изучалось влияние на выход продукта семи факторов, приведенных в табл. 6.17.

Таблица 6.17

Уровни факторов и интервалы варьирования

Факторы	Уровни факторов			Интервал варьирования
	-1	0	+1	
\bar{x}_1 — количество NaOH, вносимого в реакционную массу до прилива вещества а, г/мол	0,0075	0,0180	0,0285	0,0105
\bar{x}_2 — способ поддержания pH (вид раствора)	18%-ный раствор NaOH в метаноле	—	40%-ный водный раствор NaOH	—
\bar{x}_3 — время прилива вещества а и раствора NaOH, час	3	4,5	6	1,5
\bar{x}_4 — время выдержки, час	1	2	3	1,0
\bar{x}_5 — температура, °С	20	25	30	5,0
\bar{x}_6 — весовое соотношение вещества b и метанола, г/г	1 : 3	1 : 3,5	1 : 4	0,5 *
\bar{x}_7 — молярное соотношение веществ а и b	1 : 1	1 : 1,1	1 : 1,2	0,1 *

* Этот интервал относится ко второму члену пропорции.

Использовалась 1/16 часть от полного факторного эксперимента 2⁷. Это дает возможность сократить число опытов до 8 вместо 128.

В табл. 6.18 приведена матрица планирования и соответствующие коэффициенты линейного уравнения.

Реплика задана генерирующими соотношениями

$$x_4 = x_1x_2; \quad x_5 = x_1x_3; \quad x_6 = x_2x_3; \quad x_7 = x_1x_2x_3.$$

Для них имеем следующие определяющие контрасты:

$$1 = x_1x_2x_4; \quad 1 = x_1x_3x_5; \quad 1 = x_2x_3x_6; \quad 1 = x_1x_2x_3x_7.$$

Обобщающий определяющий контраст

$$\begin{aligned} 1 &= x_1x_2x_4 = x_1x_3x_5 = x_2x_3x_6 = x_1x_2x_3x_7 = x_2x_3x_4x_5 = x_1x_3x_4x_6 = x_2x_4x_7 = \\ &= x_1x_2x_5x_6 = x_2x_5x_7 = x_1x_6x_7 = x_4x_6x_8 = x_1x_4x_5x_7 = x_2x_4x_6x_7 = \\ &= x_3x_5x_6x_7 = x_1x_2x_3x_4x_5x_6x_7. \end{aligned}$$

Такой обобщающий определяющий контраст получен в результате попарного перемножения исходных контрастов, затем — умножения по три и по четыре.

Таблица 6.18

Матрица планирования 2^{7-4} и коэффициенты

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	y
1	+	+	+	+	+	+	+	+	19,3
2	+	+	-	-	+	-	+	+	23,8
3	+	-	-	+	-	-	-	+	31,3
4	+	-	+	-	+	-	-	+	12,8
5	+	-	-	-	+	+	+	-	32,0
6	+	+	+	+	-	-	+	-	14,0
7	+	+	+	-	+	-	-	-	25,0
8	+	+	+	+	+	+	-	-	30,5
b_j	+23,5875	+1,0625	-5,8125	+0,1875	+3,3125	+0,0625	-1,3125	-1,7875	

Если всеми коэффициентами взаимодействия, начиная с тройных, можно пренебречь, то коэффициенты будут совместными оценками:

$$\begin{aligned} b_1 &\rightarrow \beta_1 + \beta_{24} + \beta_{35} + \beta_{67}, & b_5 &\rightarrow \beta_5 + \beta_{13} + \beta_{46} + \beta_{27}, \\ b_2 &\rightarrow \beta_2 + \beta_{14} + \beta_{36} + \beta_{57}, & b_6 &\rightarrow \beta_6 + \beta_{23} + \beta_{45} + \beta_{17}, \\ b_3 &\rightarrow \beta_3 + \beta_{15} + \beta_{26} + \beta_{47}, & b_7 &\rightarrow \beta_7 + \beta_{34} + \beta_{25} + \beta_{16}, \\ b_4 &\rightarrow \beta_4 + \beta_{12} + \beta_{56} + \beta_{37}, \end{aligned}$$

Разрешающая способность такой реплики чрезвычайно мала, так как каждый линейный эффект определяется совместно с тремя парными взаимодействиями. Такой репликой можно пользоваться только в том случае, если все парные взаимодействия равны нулю. В большинстве случаев, начиная исследование процесса, трудно априорно предсказать, будут эффекты взаимодействия или нет. Поэтому экспериментатор должен наметить план дальнейших опытов для случая, если парные эффекты значимы и поиск оптимальных условий будет неэффективным. В нашем примере нужно реализовать специальным образом выбранную вторую реплику 2^{7-4} (метод перевала).

Матрицу планирования для этой реплики можно получить из первой реплики, изменив в ней все знаки на обратные. Такая реплика задается генерирующими соотношениями

$$x_4 = -x_1x_2; \quad x_5 = -x_1x_3; \quad x_6 = -x_2x_3; \quad x_7 = +x_1x_2x_3.$$

В обобщающем определяющем контрасте все тройные произведения оказываются со знаком минус, и поэтому в совместных оценках для линейных эффектов не будет парных взаимодействий со знаком плюс. Усредняя результаты вычислений для таких двух реплик, можно получить отдельные оценки для всех линейных эффектов.

Мы последовательно рассмотрели реплики различной дробности: 1/2-реплику от 2^3 , 1/2-реплику от 2^4 , 1/4-реплику от 2^5 , 1/8-реплику от 2^6 и 1/16-реплику от 2^7 . В первом случае необходимы четыре опыта. Во всех прочих случаях экспериментатор ставит восемь опытов. С ростом числа факторов увеличивается дробность реплик и усложняется система смешивания. Предельное число факторов для восьми опытов — семь. В этом случае оценивается восемь коэффициентов линейного уравнения

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_5x_5 + b_6x_6 + b_7x_7;$$

число степеней свободы равно нулю. При числе факторов от 8 до 15 приходится ставить 16 опытов. С ростом числа факторов дробность реплик растет следующим образом: 1/32-реплика от 2^9 , 1/64-реплика от 2^{10} , 1/128-реплика от 2^{11} , 1/256-реплика от 2^{12} , 1/512-реплика от 2^{13} , 1/1024-реплика от 2^{14} и 1/2048-реплика от 2^{15} . Предельное число факторов для 16 опытов — пятнадцать. План с предельным числом факторов для данного числа опытов и заданной модели называется **насыщенным**. В этом случае число опытов равно числу оцениваемых коэффициентов. Все рекомендации для выбора системы смешивания аналогичны приведенным выше. Можно, далее, рассматривать построение дробных планов для числа факторов от 16 до 31 (при этом необходимо ставить 32 опыта), для числа факторов от 32 до 63 (здесь необходимы 64 опыта) и т. д. Однако для решения столь сложных задач рекомендуется применять методы отбора факторов, например метод случайного баланса. Поэтому в «Ограничениях» мы и отметили, что будем рассматривать задачи с числом факторов от 2 до 15.

В качестве последнего примера рассмотрим применение плана 2^{15-11} .

Пример 5. Изучалось влияние следующих 15 факторов на скорость хлорирования титановых шлаков в расплаве. Пусть \tilde{x}_1 — расход хлора; \tilde{x}_2 — температура; \tilde{x}_3 — концентрация углерода в расплаве; \tilde{x}_4 — концентрация TiO_2 в расплаве; \tilde{x}_5 — \tilde{x}_{11} — компоненты, определяющие состав шлака; \tilde{x}_{12} — \tilde{x}_{15} — компоненты расплава.

6.7.1. Простейшие дополнения дробных планов 2^{3-1}_{III} и 2^{4-1}_{IV}

Впервые вопросы дополнения планов 2^{p-q} для разделения смешанных эффектов были рассмотрены Дэвисом и Хэйем. Эти авторы считали необходимым включать в план совокупность опытов не меньшую, чем исходная совокупность. Планы, описываемые ниже, как правило, имеют меньшие размеры, хотя в некоторых случаях дополняющее множество может содержать такое же или даже большее число опытов.

Совершенно очевидно, что план 2^{3-1} с определяющим контрастом $I-ABC$ позволяет найти три контраста (A), (B) и (C). Их математические ожидания равны соответственно $(A-BC)$, $(B-AC)$ и $(C-AB)$. Каждый главный эффект смешивается с эффектом взаимодействия двух остальных факторов, взятым с противоположным знаком. В математическое ожидание каждого опыта в *другой* полуреплике 2^{3-1} с определяющим контрастом $I+ABC$ будут входить с соответствующими знаками главные эффекты и дополняющие их эффекты парных взаимодействий. Например, для опыта a имеем

$$E\{a\} = \mu + A - B - C - AB - AC + BC (+ABC).$$

Если после реализации начального плана 2^{3-1} окажется, что большим является только контраст A , необходимо будет устранить неоднозначность толкования лишь двух эффектов. Тогда, положив B, C, AB, AC приближенно равными нулю, можно записать

$$E\{a\} = \mu + A + BC.$$

Если провести только опыт a из второй полуреплики и использовать оценку для μ , полученную по первой полуреплике, то можно найти оценку $A+BC$:

$$\widehat{A+BC} = a - \hat{\mu}.$$

Ниже приводятся подробные расчеты по пяти откликам из-за их довольно неожиданного исхода. Вычислим величину

$$4(\widehat{A+BC}),$$

как это делалось выше, затем вспомним оценку

$$4(\widehat{A-BC}),$$

полученную по исходной полуреплике, и, наконец, проведем суммирование и вычитание:

Шаг		(1)	ab	ac	bc	a
1.	$-4\hat{\mu}$	-1	-1	-1	-1	4
2.	$4\hat{a}$					
3. = 1.+2.	$4(\widehat{A+BC})$	-1	-1	-1	-1	+4
4.	$4(\widehat{A-BC})$	-1	+1	+1	-1	
5. = $1/2(3.+4.)$	$4\hat{A}$	-1			-1	+2
6. = $1/2(3.-4.)$	$4\widehat{BC}$		-1	-1		+2

На основании шагов 5 и 6 можно сделать очевидный вывод, что

$$\hat{A} = 1/4(-I) - bc + 2(a); \text{Var}(\hat{A}) = 6/16\sigma^2 = 3/8 \text{ (при } \sigma^2 = 1).$$

Поскольку минимальная дисперсия для пяти наблюдений равна $1/4(1/3+1/2) = 5/24$, то, следовательно, мы добились эффективности $5/9$. (Везде в этом разделе σ^2 полагается равной 1.)

Получили неожиданный результат: оказывается, что для получения несмешанных оценок требуется только три из пяти наблюдений! При этом эффективность каждой оценки равна $5/9$, и она основывается на всех пяти наблюдениях. Это немного напоминает сверхэффективность оценок.

Добавление единственного опыта к плану 2^{3-1} дает надежные результаты лишь при безусловной стабильности системы, т. е. при отсутствии дрейфа во времени. Минимальный блок плана, необходимый для отделения A от $-BC$, будет содержать два опыта. Для оценивания допускается использование лишь внутриблокового контраста. Хотя искомую пару опытов можно найти простым перебором, для лучшего понимания свойств планов предпочтем получить ее формальным путем. Поскольку нужен контраст, включающий $A+BC$, выберем систему смешивания, содержащую только *остальные* эффекты. Мы должны включить сюда $+ABC$, так как планируемые опыты принадлежат полуреплике 2^{3-1} с определяющим контрастом $I+ABC$. В эту же систему смешивания добавим $-AC$, а следовательно, придется включить и произведение $+ABC \times -AC = -B$. Соответствующие опыты можно найти с помощью обратного алгоритма Йетса. При этом в позициях, соответствующих четырем элементам системы смешивания, задаются значения 1, -1, -1, 1. Получаемая таким способом пара опытов a, c не является единственной, удовлетворяющей нашим требованиям. Если бы мы выбрали систему $I+ABC-BC-A$, в итоге была бы получена пара опытов b, c .

Возвращаясь к паре a, c , заметим, что контраст $(a-c)$ имеет математическое ожидание $2(A-C-AB+BC)=2(A+BC)$, так как мы решили, что эффектами C и AB можно пренебречь. Теперь уже не нужно корректировать μ и потому можно применить $(P-Q)$ -принцип для объединения оценки $(A+BC)$ с оценкой для $A-BC$:

	(1)	ab	ac	bc	a	c
$4(\hat{A}-\hat{BC})$	-1	1	1	-1		
$4(\hat{A}+\hat{BC})$					2	-2
$8\hat{A}$	-1	1	1	-1	2	-2
$8\hat{BC}$	-1	1	1	-1	-2	2

При этом очевидно, что

$$\text{Var}(\hat{A}) = \text{Var}(\hat{BC}) = \frac{3}{16},$$

и, следовательно, эффективность равна $\frac{1}{6} \times \frac{16}{3} = \frac{8}{9}$.

Обратимся к плану 2^{4-1}_{IV} и применим его для простейшего случая взаимного смешивания двух парных взаимодействий. Напомним, что план 2^{4-1}_{IV} с определяющим контрастом $I+ABCD$ приводит к семи ортогональным контрастам: по одному для каждого главного эффекта и три — для трех пар взаимно дополняющих друг друга взаимодействий. Предположим, что контрасты $(AB+CD)$, (A) и (C) получились большими, а (B) , (D) и оставшиеся две суммы взаимодействий — малыми. Для любой комбинации условий опытов, не входящей в начальный план 2^{4-1} , математическое ожидание равно сумме большого числа эффектов. Например,

$E\{a\} = \mu + A - C - AB + CD \pm 11$ членов, которыми можно пренебречь.

Тогда, поскольку выполняется равенство

$$(AB - CD) = \hat{\mu} - \hat{C} + \hat{A} - a,$$

результат этого единственного наблюдения требует трех коррекций. Исходя из плана 2^{4-1} , найдем $8(AB - CD)$ и затем получим

$$8(AB - CD) = 8\hat{\mu} - 8\hat{C} + 8\hat{A} - 8a$$

как результат обработки данных девяти наблюдений.

Дисперсии оценок эффектов парных взаимодействий равны

$$\text{Var}(\hat{AB}) = \text{Var}(\hat{CD}) = \frac{2^4}{64} = \frac{3}{8}; \quad \min \text{Var} (9 \text{ набл.}) = \frac{9}{80}.$$

Следовательно, эффективность равна $\frac{3}{10}$.

	(1)	ab	ac	bc	ad	bd	cd	abcd	a
$8(\hat{AB} + \hat{CD})$	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
$+8\hat{\mu}$	1	1	1	1	1	1	1	1	
$-8\hat{C}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	
$+8\hat{A}$	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	
$-8a$									-8
$16\hat{AB}$	2	4	0	-2	2	0	0	2	-8
$16\hat{CD}$	0	-2	-2	0	-4	-2	2	0	+8
$8\hat{AB}$	1	2	0	-1	1	0	0	1	-4
$8\hat{CD}$	0	-1	-1	0	-2	-1	1	0	+4

Если применить прямой алгоритм Йетса к контрасту AB , то обнаружится, что A и C имеют коэффициенты 0 и лишь коэффициент для AB равен 8. 11 других ненулевых множителей относятся к эффектам, которыми можно пренебречь.

Достигнутую эффективность $\frac{3}{11}$ нельзя назвать блестящей, но, с другой стороны, здесь нет повода для беспокойства. При дополнении одним опытом планов большего размера она будет даже еще меньше. И все же, видимо, следует ее рассматривать скорее как достаточно превышающую 0, чем как недопустимо меньшую 1.

Теперь для того же начального плана выберем два дополняющих опыта. Чтобы избежать коррекций, увеличивающих дисперсии, будем проводить оба эти опыта при одинаковых уровнях факторов A и C . Тогда система смешиваний будет включать $-ABC, +A$ и, например, $-C$. Таким образом, получаем

$$I - ABCD + A - C - AC - BCD - ABD + BD.$$

Теперь искомым контраст будет оценивать

$$B - ACD + AB - BC - ABC - CD - AD + D = AB - CD.$$

Проще всего получить условия двух опытов путем прямого поиска, хотя применение обратного алгоритма Йетса к восьми указанным членам системы смешивания даст тот же самый результат, а именно abd и a .

Если через y_1 обозначить исходный контраст для $8(AB+CD)$ (с дисперсией 8), а через y_2 — новый контраст из пары дополнительных опытов (с дисперсией 2), то получим

$$16\hat{AB} = y_1 + 4y_2; \quad 16\hat{CD} = y_1 - 4y_2.$$

Дисперсия каждой из этих оценок равна $5/32$ и, следовательно, достигнута эффективность 0,64.

Если необходимо получить более точное разделение AB и CD в случае, когда A и C (и только они) велики, не составляет труда выбрать условия *четырёх* дополняющих опытов. Для этого зададим систему смешивания в виде $I-ABCD-AC+BD$ и получим искомое множество дополнительных опытов: a, c, abd, bcd . Поскольку теперь имеется три контраста (по четырем дополняющим опытам), рассмотрим, как можно использовать два лишних контраста, а именно

$$A-C+ABD-BCD \rightarrow A-C \text{ и } B-ABC+D-ACD.$$

Первый из них следует использовать для повышения точности оценивания A и C , а второй — как степень свободы для ошибки. Исходную оценку A обозначим через A_1 . Новая оценка A_2 будет равна оценке ($A \in C$) по новым четырем опытам *плюс* оценка \hat{C}_1 полученная в ходе начального эксперимента. Просуммируем эти две оценки с весами, обратно пропорциональными их дисперсиям.

Дисперсия

$$(\hat{A}_1) = 1/8 \text{ и } \text{Var}(\hat{A}_2) = \text{Var}(A - C)_2 + \text{Var}(\hat{C}_1) = 1/4 + 1/8 = 3/8,$$

откуда следует

$$\hat{A} = \frac{3A_1 + A_2}{4},$$

$$\text{Var}(\hat{A}) = \frac{9\text{Var}(\hat{A}_1) + \text{Var}(\hat{A}_2)}{16} = (9/8 + 3/8)/16 = 3/32.$$

$$\text{Эффективность}(\hat{A}) = 1/12 \times 32/3 = 8/9.$$

Такой же способ используется для улучшения начальной оценки C .

Предположим теперь, что требуется развязать *две* пары смешанных эффектов парных взаимодействий. При этом обнаружится, что одно дополняющее множество из четырех опытов, удовлетворяющее нашим требованиям, приводит все четыре парные взаимодействия в одну систему смешивания, и поэтому оно не может нас удовлетворить. В случае, когда после реализации первой полуреплики большими оказываются две совокупности эффектов парных взаимодействий, не видна удовлетворительная альтернатива полному множеству из 8 опытов, т. е. плану с определяющим контрастом $I-ABCD$.

6.7.2. Дополнение плана 2^{8-4}_{IV}

Разделение одной пары эффектов двухфакторных взаимодействий. Поскольку в этой задаче нет ничего нового по сравнению с ранее рассмотренной, оставляем выбор плана для такого

разделения читателям в качестве самостоятельного упражнения. Здесь удается несколько лучше использовать остающиеся контрасты (при планировании *четырёх* дополняющих опытов), так как оценки A и C получаются теперь уже раздельно друг от друга. Каждый такой контраст используется для уменьшения дисперсии взвешенной оценки главного эффекта.

Разделение четырех элементов совокупности эффектов парных взаимодействий. Если после реализации плана 2^{8-4}_{IV} значительными окажутся четыре главных эффекта, например A, C, E, G и одна совокупность эффектов парных взаимодействий, например $AB+CD+EF+GH$, экспериментатор может захотеть разделить эти четыре эффекта парных взаимодействий. Хотя и можно указать *три* комбинации условий опытов, которые обеспечат раздельное оценивание четырех эффектов парных взаимодействий, их дисперсии оказываются настолько большими, что такой результат вряд ли можно считать приемлемым. Плохая эффективность получается даже при использовании трех пар наблюдений. Наиболее простые пары таких наблюдений следующие: $df-bh$ (для оценивания указанной выше совокупности двухфакторных взаимодействий со знаками $+$ — — $+$), $dh-bf$ (для получения знаков $+$ — $+$ —) и $fh-bd$ (для получения знаков $+$ + — —).

Как видно из обозначений приведенных шести опытов, все они входят в план 2^{4-1}_{IV} с определяющим контрастом $I+BDFH$. Добавим к ним два недостающих опыта, а именно (1) и $bdfh$, для образования полной четной полуреплики для факторов B, D, F и H . При этом необходимо помнить, что на самом деле эти восемь опытов составляют план 2^{8-5} . Для факторов A, C, E и G выбраны нижние уровни, так что все опыты реализуются при одних и тех же уровнях четырех влияющих факторов. Благодаря этому удастся избежать необходимости корректировать главные эффекты. Тогда получается следующая система смешивания для рассмотренных восьми опытов:

$I+BDFH-A-C-E-G+AC+AE+AG+CE+CG+EG+$ Взаимодействия пяти факторов.

Четыре контраста, включающих искомые парные взаимодействия, можно получить путем поочередного умножения их на элементы системы смешивания:

$$y_1 = \underline{AB} - B + BC + BE + BG \pm \text{Взаимодействия трех и более факторов,}$$

$$y_2 = \underline{CD} - D + AD + DE \pm \text{Взаимодействия трех и более факторов,}$$

$$y_3 = \underline{EF} - F + AF + CF \pm \text{Взаимодействия трех и более факторов,}$$

$$y_4 = \underline{GH} - H + AH + EH \pm \text{Взаимодействия трех и более факторов.}$$

Таким образом, четыре искоемых парных взаимодействия отделяются друг от друга с помощью указанного дробного плана для выделения эффектов взаимодействий (interaction extraction fraction — такое название ему дано Бенкенем). Эффекты этих взаимодействий смешиваются лишь с рядом других эффектов, которые предполагаются пренебрежимо малыми. Остальные три контраста плана 2^{8-5} , которые можно обозначить, как $BD+FH$, $BF+DH$ и $BH+DF$, используются при оценивании ошибки.

Несколько меньшую дисперсию оценок эффектов парных взаимодействий можно получить, комбинируя каждую из приведенных выше оценок эффектов парных взаимодействий с оценкой их суммы (обозначим ее через y_5) по начальному плану 2^{8-4} :

$$AB_1 = y_1, \quad \text{Var}(AB_1) = 1/8 = 2/16;$$

$$AB_2 = y_5 - y_2 - y_3 - y_4, \quad \text{Var}(AB_2) = 1/16 + 1/8 + 1/8 + 1/8 = 7/16;$$

$$AB = \frac{7AB_1 + 2AB_2}{9}, \quad \text{Var}(\widehat{AB}) = \frac{49 \times 1/8 + 4 \times 7/16}{81} = 7/72.$$

Эффективность

$$(\widehat{AB}) = 1/24 \times 72/7 = 3/7.$$

Хотя для любых случаев можно вывести алгебраические формулы, можно считать более простым выполнение вычислений подобно тому, как это было сделано выше. При этом везде, где только можно, используется ($P-Q$)-принцип и каждая (ортогональная) оценка взвешивается обратно пропорционально ее дисперсии.

Разделение всех семи эффектов парных взаимодействий, включающих один и тот же фактор. Раздельное оценивание всех эффектов парных взаимодействий, включающих один и тот же фактор, выполняется так же, как и в предыдущем случае. Семь эффектов парных взаимодействий, включающих, например, фактор A , попадают в разные совокупности смешиваний. Поэтому будем искать множество опытов, по которому можно оценить $AB-CD-EF-GH$, а также $AC-BD-EG-FH$ и т. д. вплоть до $AH-BG-CF-DE$. Ясно,

что система смешивания должна включать $-ABCD$, $-ABEF$, $-ABGH$ и $-ACEG$. С другой стороны, очевидно, что требуется еще один генератор, поскольку мы надеемся обойтись только $8=2^{8-5}$ опытами. В качестве этого генератора возьмем $-A$, так что все опыты будут проводиться на нижнем уровне A . Система смешивания включает теперь уже 32 члена и не представляет труда их перечислить. Первые 16 из них записываются как (слева указаны номера генераторов, произведения которых образуют соответствующие члены системы смешивания.)

123	$-ABCDEFGH$	34	$+BCEH$
1	$-ABCD$	24	$+BCFG$
2	$-ABEF$	14	$+BDEG$
3	$-ABGH$	1234	$+BDFH$
4	$-ACEG$	12	$+CDEF$
234	$-ACFH$	13	$+CDGH$
134	$-ADEH$	23	$+EFGH$
124	$-ADFG$		I

Следующие 16 членов представляют собой произведения этих членов на $-A$. Опыты, или комбинации условий, соответствующие данной системе смешивания, имеют обозначения

$bcdefgh$	ceg
bed	cfh
bef	deh
bgh	dfg

Нетрудно видеть, что эти обозначения есть не что иное, как записанные строчными буквами члены первого столбца системы смешивания без буквы a .

Теперь уже можно считать простым упражнением комбинирование каждого из семи контрастов плана 2^{8-5} , скорректированных с учетом найденных больших главных эффектов, с соответствующими контрастами исходного плана 2^{8-4} . Приведем пример. Обозначим через y_3 контраст для эффекта $-B$ плана 2^{8-5} . Тогда

$$E\{y_3\} = -B + AB - (CD + EF + GH).$$

Пусть по плану 2^{8-4} получены

$$y_1 = B_1, \dots$$

$$y_2 = AB + CD + EF + GH.$$

Тогда

$$\frac{AB + (CD + EF + GH) = y_2}{AB - (CD + EF + GH) = y_1 + y_3}$$

$$\widehat{AB} = 1/2 (y_1 + y_2 + y_3)$$

и

$$\text{Var}(\widehat{AB}) = 1/4 (1/16 + 1/16 + 1/8) = 1/16.$$

Эффективность

$$(\widehat{AB}) = 1/24 \times 16 = 2/3.$$

Аналогичные операции с остальными шестью контрастами плана 2^{8-5} приведут к разделению оценок всех эффектов парных взаимодействий, в которых участвует фактор А.

Сделаем некоторые выводы.

В этом разделе известные смешивания в оценках с эффектами парных взаимодействий рассматривались как некоторые поддающиеся учету неоднозначности. Если точность эксперимента достаточно высока и объект исследования наверняка не является дрейфующим, для разделения совокупности смешиваний (суммы или разности эффектов) на один несмещенный эффект и совокупность смешиваний меньшего размера требуется *один* дополнительный опыт. Если можно выполнить *два* новых опыта, удастся устранить дрейф и увеличить вдвое эффективность оценок параметров. *Четыре* дополняющих опыта, из которых ни один не повторяет ранее выполненные, обеспечивают еще большую точность оценивания как тех параметров, эффекты которых необходимо разделить, так и некоторых уже оцененных эффектов.

При неоднозначности оценок весьма вероятно, что потребуется *восемь* или даже большее число опытов. Тщательный выбор дополняющего множества опытов часто позволяет эффективно разделить сразу несколько смешанных эффектов независимо от того, относились они первоначально к одной и той же совокупности или нет. Можно склониться в пользу множеств, допускающих применение (P—Q)-принципа [часто заменяемого расширенным (P—Q—R—S)-принципом], поскольку он обеспечивает наибольшую эффективность всех оценок. Если из-за асимметрии найденных эффектов такой принцип применить не удавалось, можно соединять вместе наилучшие комбинации условий опытов, которые должны были дать возможность получить *некоторые* оценки проявляющихся в них эффектов. Почти во всех случаях такое множество оказывалось новой дробной репликой, а не набором несвязанных пар наблюдений, по одной паре для каждой неоднозначной оценки эффекта.

6.8. Планы, робастые к дрейфам

Для эффективного разбиения факторного эксперимента на блоки надо знать, когда условия эксперимента остаются стабильными и когда

они оказываются неоднородными. Аналогичные сведения необходимо иметь и об объектах исследования, которые дрейфуют, т. е. изменяются во времени, например вследствие старения. Если *форма* кривой дрейфа ориентировочно известна, эти сведения следует использовать при планировании. Вместо того чтобы случайным образом распределять систематический дрейф и получать большую случайную ошибку, можно выделить две степени свободы за счет случайной ошибки для оценивания дрейфа. Преимущества такого подхода были доказаны для объектов с линейным и квадратическим дрейфом и планов типа 2^{p-q} . Видимо, они могут остаться в силе для дрейфов более высокого порядка и факторных планов более общего типа.

Хальду принадлежит следующее высказывание по данному поводу: «Возможность устранения систематических изменений существенно зависит от того, являются ли эти изменения плавными... и появляются ли нерегулярные флуктуации». Далее он признает, что можно в значительной мере устранить влияние дрейфа, «если систематическое изменение является медленным и плавным». Под «плавным» я понимаю «описываемое линейной или квадратической зависимостью от времени», а под «медленным» «существенно превышающее время, требуемое для проведения одного опыта». В последующих разделах это превышение будет составлять от 3 до 32 раз.

Некоторые последовательности опытов из планов 2^p и 2^{p-q} оказываются намного хуже других возможных последовательностей с точки зрения смешивания линейного (L) и квадратического (Q) дрейфов с контрастами факторных эффектов. В частности, два контраста (C и BC в плане 2^3 , D и CD в плане 2^4 , E и DE в плане 2^5) особенно сильно коррелируют с L и Q соответственно. Для B, C, D и E квадраты коэффициентов корреляции с L равны соответственно 0,80, 0,76, 0,75 и 0,75. Для AB, BC, CD и DE квадраты коэффициентов корреляции с Q равны 1,0, 0,80, 0,72 и 0,71. Если для определения уровней факторов выбрать *другие* контрасты, а дрейф включить в контрасты некоторых выделенных парных взаимодействий, становится возможным оценить с высокой эффективностью все главные эффекты и все эффекты парных взаимодействий. При этом случайной составляющей здесь будут флуктуации *около* кривой дрейфа, а не суммарные неконтролируемые изменения, включающие дрейф.

Последовательность уровней факторов в этих планах может оказаться неудобной для экспериментатора. В рамках каждого плана, однако, имеется большое количество вариантов изменений уровней факторов, число которых, например, для плана 2^4 находится в

диапазоне от 5 до 13. Можно считать, что теория планирования не препятствует введению таких обозначений для факторов, чтобы наиболее трудно варьируемые факторы в последовательности опытов возможно большее время находились на одном и том же уровне.

Поскольку большинство оценок здесь находится с эффективностью, близкой к 1,00, некоторые экспериментаторы могут предпочесть применение таких последовательностей опытов даже в тех случаях, когда мало что известно о форме кривой дрейфа. Если оказывается, что дрейф отсутствует, будут потеряны всего лишь две степени свободы. Зато при наличии большого *L*- или *Q*-дрейфа гарантируется существенный выигрыш в точности всех оценок.

6.8.1. Простейшие планы, робастные к дрейфу

Пусть изучается один фактор, варьируемый на двух уровнях в системе, относительно которой известно, что она подвержена линейному дрейфу с длиной периода, равной продолжительности нескольких опытов. Минимально возможный план состоит из трех опытов. Примерами подобных ситуаций являются исследования влияния питания на удои коров и эффекта изменения расхода сырья на избирательность катализатора, медленно стареющего по мере его использования. Обозначим уровни фактора через *A* и *B* (они заменят неудобные обозначения (1) и *a*). При трех опытах в плане имеется шесть возможных последовательностей этих уровней:

- I. *ABA* IV. *BAA*
- II. *BAB* V. *ABB*
- III. *AAB* VI. *BBA*

Две последовательности I и II, очевидно, являются предпочтительными. Непосредственно решая уравнение

$$Y = b_0 + b_1x + d_1t$$

при *x* и *t*, принимающих значения —1 и +1, нетрудно показать, что для последовательностей I и II эффективность оценок равна 1,00, тогда как для остальных четырех последовательностей эффективность оценок *b*₁ и *d*₁ равна 1/2, а эффективность оценки *b*₀ составляет 2/3. Так как в экспериментах изучается несколько коров или партий катализатора, естественно, что последовательности I и II будут чередоваться.

Экспериментаторы, привыкшие к рандомизации опытов, будут настаивать на том, чтобы для одного из каждой пары объектов экспериментирования последовательность I или II выбиралась случайным образом, а на другом объекте применялась оставшаяся из них. Что же, пусть они так и поступают!

Этот мини-план весьма чувствителен к квадратическому дрейфу. Единственным планом из четырех опытов для одного фактора с двумя уровнями, устойчивым к *L*- и *Q*-дрейфам, является план *ABAB*, который ничем не отличается от своего дополнения — плана *VABA*. Наша модель имеет вид

$$Y = b_0 + b_1x + d_1t + d_{11}t^2 \quad (*)$$

Она содержит четыре константы, и поэтому подгонка по четырем опытам (проводимым через равные промежутки времени) не оставляет степеней свободы для оценивания ошибки. Матрица (*X*, *Y*) в этом случае имеет вид

Опыт	Уровень фактора	<i>b</i> ₀	<i>x</i>	<i>t</i>	<i>t</i> ²	<i>y</i>
1	<i>A</i>	1	−1	−3	9	<i>y</i> ₁
2	<i>B</i>	1	1	−1	1	<i>y</i> ₂
3	<i>A</i>	1	−1	1	1	<i>y</i> ₃
4	<i>B</i>	1	1	3	9	<i>y</i> ₄

Путем прямой подстановки этих значений в уравнение (*) находим следующие оценки четырех констант:

$$4b_0 = y_1 + y_2 + y_3 + y_4 \quad \text{Var}(b_0) = 1/4,$$

(такое выражение для вычисления *b*₀ получится лишь в том случае, если последний член в модели (*) имеет вид *du(t*²−5).)

$$8b_1 = -y_1 + 3y_2 - 3y_3 + y_4, \quad \text{Var}(b_1) = 5/16,$$

$$8d_1 = -y_1 - y_2 + y_3 + y_4, \quad \text{Var}(d_1) = 1/16,$$

$$16d_{11} = y_1 + y_2 + y_3 + y_4 \quad \text{Var}(d_{11}) = 1/64$$

Поскольку минимально возможные дисперсии четырех констант равны соответственно 1/4, 1/4, 1/20 и 1/164, то для показателей эффективности оценок имеем 1, 4/5, 4/5 и 16/41. Таким образом, в тех случаях, когда *L*- и *Q*-дрейфы обуславливают хотя бы 25% от неуправляемой изменчивости в результатах опытов, более точная оценка эффекта *A* получается при использовании именно такого плана, а не какого-либо другого. Эти два малых плана не находят широкого применения и используются в основном в иллюстративных целях. Коэффициенты эффективности в случае больших и более реальных планов, приводимых ниже, для всех эффектов, кроме одного в каждом плане, превышают 4/5.

6.8.2. Робастные к дрейфам планы 2²⁺¹//8 и 2⁴⁺⁷//8

Продолжим рассмотрение планов и изучение их свойств, опуская строгие выводы и доказательства. В табл. 6.20, заимствованной из

статьи Дэниела и Вилкоксона, приведен план $2^{2+1}/8$, а также обычные вспомогательные данные, требуемые для применения метода наименьших квадратов: (X) , $(X'X)$, $(X'X)^{-1}$, $B = (X'X)^{-1}X'$, и коэффициенты эффективности для B .

Таблица 6.20

План $2^{2+1}/8$, робастный к L - и Q -дрейфам.

$$Y = b_0 + b_F x_F + b_G x_G + b_{FG} x_F x_G + d_{11} t + d_{11}(t^2 - 5,25)$$

Опыт	Обозначение опыта	$(X) \quad 8 \times 8$							$32(X'X)^{-1}X' = 32B \quad 8 \times 7$							
		x_0	x_F	x_G	$x_F x_G$	x_H	x_J	t	$t^2 - 5,25$	F	\hat{G}	\hat{FG}	H	J	L	Q
1	(1)	1	-1	-1	1	-1	-1	-3,5	7	-3	-3	2	-4	-2	-2	1
2	ij	1	1	1	1	1	1	-2,5	1	5	5	2	4	6	-2	1
3	gh	1	-1	1	-1	1	-1	-1,5	-3	-3	3	-6	4	-6	-2	-1
4	hj	1	1	-1	-1	-1	1	-0,5	-5	5	-5	-6	-4	2	-2	-1
5	ij	1	-1	-1	1	1	1	0,5	-5	-5	-5	6	4	2	2	-1
6	ig	1	1	1	1	-1	-1	1,5	-3	3	3	6	-4	-6	2	-1
7	gj	1	-1	1	-1	-1	1	2,5	1	-5	5	-2	-4	6	2	1
8	jh	1	1	-1	-1	1	-1	3,5	7	3	-3	-2	4	-2	2	1

$(X'X) \quad 7 \times 7$							$128(X'X)^{-1} \quad 7 \times 7$								
8	0	0	0	0	4	0	17	0	-2	0	0	-2	0	0	0
0	8	0	0	0	0	-8	0	17	0	0	-2	0	0	1	0
0	0	8	0	0	-8	0	-2	0	20	0	0	4	0	0	0
0	0	0	8	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0
0	0	0	0	8	0	16	0	-2	0	0	20	0	-2	0	0
4	0	-8	0	0	42	0	-2	0	4	0	0	4	0	4	0
0	-8	0	0	16	0	168	0	1	0	0	-2	0	0	1	1

Эффективности:	$\frac{16}{17}$	$\frac{16}{17}$	$\frac{4}{5}$	1	$\frac{16}{17}$	$\frac{16}{21}$	$\frac{16}{21}$
	F	\hat{G}	\hat{FG}	H	J	L	Q

Эффективность оценки определяется отношением минимально возможной дисперсии (обратная величина соответствующего диагонального элемента матрицы $X'X$) к получаемой дисперсии оценки (сумма квадратов соответствующего столбца матрицы B , деленная на квадрат множителя в обозначении столбца).

Указанные в табл. 6.20 контрасты для F , G , \hat{FG} и d_{11} подтверждают правильность давно уже сделанного предположения о том, что контрасты с неодинаковыми, но целыми коэффициентами становятся более понятными при разложении их на два или более контрастов, каждый из которых содержит одни и те же коэффициенты, различающиеся только знаками.

Действуя подобным образом, получаем

$$b_F = -3, 5, -3, 5, -5, 3, -5, 3 = [-4, 4, -4, 4, -4, 4, -4, 4] \oplus \oplus [1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, -1] = 4(A_0) - (C_0) = 32F - L.$$

В данном случае разложение удается получить без всякого труда, однако в более сложных ситуациях решение можно найти лишь с помощью прямого алгоритма Йетса, если применить его к упорядоченной соответствующим образом совокупности коэффициентов. В качестве более сложного примера можно указать на коэффициент регрессии b_G , который по своим знакам напоминает несколько искаженный (AB_0) . Даже если догадаться, что правильной суммой здесь будет $-10 (AB_0)$ (среднее значение абсолютных величин восьми коэффициентов) и произвести вычитание для получения

$$(X) = -7, 11, 9, -13, -13, 9, 11, -7 \oplus \oplus [10, -10, -10, 10, 10, 10, -10, -10, 10] = = 3, 1, -1, -3, -3, -1, 1, 3,$$

все равно может быть еще далеко не очевидным, что (X) тоже можно записать как $2(AC_0) + (BC_0)$. Для лучшего понимания этого плана важнее отметить, что (X) в представленном выше виде есть просто $80d_{11}$. Таким образом, по-видимому, b_G в точности равен математическому ожиданию факторного контраста [отметим, что g со своими двумя уровнями в плане 2^{2+1} подобен (AB_0)], скорректированному на величину единицы измерения $Q (= d_{11})$, чтобы учесть небольшую корреляцию G с Q .

Отвечая естественным стремлениям экспериментаторов, попытаемся включить в план с восемью опытами два дополнительных фактора, поскольку после оценивания F , G , FG , L и Q в нашем распоряжении остались две степени свободы. Мы должны быть твердо уверены, что два новых фактора, H и J , имеют полностью аддитивные эффекты. Не должно быть ни одного взаимодействия ни с H , ни с J . В табл. 6.21 приведены результаты, аналогичные представленным в табл. 6.20.

Таблица 6.21

План 2⁴//8, робастный к L- и Q-дрейфам.

$$Y = b_0 + b_F x_F + b_G x_G + b_{FG} x_F x_G + b_H x_H + b_J x_J + d_1 t + d_{11} (t^2 - 5,25)$$

Опыт	Обозначение опыта	(X) 8×8							32(X'X) ⁻¹ X' = 32B 8×7							
		x _F	x _G	x _F x _G	x _H	x _J	t	t ² -5,25	F	Ĝ	FĜ	H	J	L	Q	
1	(1)	1	-1	-1	1	-1	-1	-3,5	7	-3	-3	2	-4	-2	-2	1
2	ighj	1	1	1	1	1	1	-2,5	1	5	5	2	4	6	-2	1
3	gh	1	-1	1	-1	1	-1	-1,5	-3	-3	3	-6	4	-6	-2	-1
4	ij	1	1	-1	-1	-1	1	-0,5	-5	5	-5	-6	-4	2	-2	-1
5	hj	1	-1	-1	1	1	1	0,5	-5	-5	-5	6	4	2	2	-1
6	ig	1	1	1	1	-1	-1	1,5	-3	3	3	6	-4	-6	2	-1
7	gj	1	-1	1	-1	-1	1	2,5	1	-5	5	-2	-4	6	2	1
8	ih	1	1	-1	-1	1	-1	3,5	7	3	-3	-2	4	-2	2	1

(X'X) 7×7							128(X'X) ⁻¹ 7×7						
8	0	0	0	0	4	0	17	0	-2	0	0	-2	0
0	8	0	0	0	0	-8	0	17	0	0	-2	0	1
0	0	8	0	0	-8	0	-2	0	20	0	0	4	0
0	0	0	8	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0
0	0	0	0	8	0	16	0	-2	0	0	20	0	-2
4	0	-8	0	0	42	0	-2	0	4	0	0	4	0
0	-8	0	0	16	0	168	0	1	0	0	-2	0	1

Эффективности:	16/17	16/17	4/5	1	16/17	16/21	16/21
	F	Ĝ	FĜ	H	J	L	Q

Здесь наблюдается некоторая потеря эффективности для G, но зато получены эффективные оценки главных эффектов H и J.

Робастные к дрейфу планы типов 2⁴//16, 2⁶⁻²//16, 2⁵//32 и 2¹⁴⁻⁹//32

Поскольку расчеты для планов с 16 и 32 опытами обычно выполняются на ЭВМ, мы не будем приводить подробных выкладок, как в предыдущих разделах, а укажем лишь генераторы для каждого плана:

	2 ⁴ //16	2 ⁶⁻² //16	2 ⁵ //32	2 ¹⁴⁻⁹ //32
1.	abd	abde	abe	abdegilm
2.	acd	acdf	ace	acdfgkln
3.	bcd	bcd	bcde	bcdhjklo
4.	abcd	abcdef	d	efgkjl
5.			abcde	abcdefghijklmno

Последовательное перемножение этих генераторов: 1.×2., 1.×3., 1.×2.×3., 4. и т. д., позволяет получить такой план 2⁴: (1), abd, acd, bc, bcd, ac, ab, d, abcd, c, b, ad, a, bd, cd, abc.

6.9. Планы с группировкой данных

Планы большинства экспериментов не удается представить в виде полностью рандомизированных множеств, рандомизированных блоков или даже хотя бы в виде рандомизированных неполных блоков. Так обстоит дело часто и в тех случаях, когда эксперимент выполняется после консультаций со статистиками. Причиной этого являются соображения удобства реализации плана, ибо не все факторы одинаково легко поддаются варьированию. Вряд ли имеет практический смысл варьировать случайным образом, например, внутреннее устройство установки, работающей при высоком вакууме и требующей откачки и обезгаживания после каждой разборки. Если при этом некоторые условия, например напряжения катодов или температуры эмиттеров, должны варьироваться при одной схеме установки, то, видимо, это следует делать при неизменной конфигурации электродов, без их демонтажа. После этого монтируется новая конструкция и на заново откачанной установке снова производится изменение факторов, легко поддающихся варьированию.

Иногда может оказаться полезным в некоторый момент времени вернуться к начальной конструкции, но испытание конструкции только при одном множестве рабочих условий почти никогда не имеет смысла. Может быть, статистики и не станут возражать против такого плана, однако они примут меры к тому, чтобы анализ полученных данных соответствовал подлинной сущности способа планирования.

Фундаментальное различие между таким *сгруппированным* множеством данных и полностью рандомизированным планом состоит в структуре их ошибок. В полностью рандомизированном плане имеется лишь одна однородная система случайных ошибок. В уравнение модели входит лишь один член, связанный с ошибкой. Об источниках неуправляемой изменчивости не делается никаких ограничивающих предположений. Ошибка может быть обусловлена многими различными физическими причинами, но во всяком случае она в равной мере вносит возмущения в каждое наблюдение. Напротив, при планировании с группировкой имеется по крайней мере два независимых источника случайных возмущений.

Один из них обусловлен *групповыми* свойствами плана и оказывает общее воздействие на каждую группу совместно полученных данных. В рассмотренном выше примере каждой конструкции установки соответствует одно проявление «схемной ошибки». Второе множество случайных воздействий оказывает влияние на каждое наблюдение в отдельности при изменении уровней факторов внутри каждой группы. Эти *внутрисхемные* возмущения предполагаются не зависящими от

межсхемных возмущений. Следовательно, в простейших ситуациях с группировкой имеется два независимых источника случайных изменений. Часто встречаются также и более сложные ситуации.

6.9.1. Группировка с расслоенной выборкой

В качестве самого простого примера ситуации с группировкой можно назвать расслоенную выборку. Данные, приведенные в табл. 6.22, получены Браунли путем отбора четырех образцов в каждой из 22 партий некоторого пластического материала.

Таблица 6.22

Данные эксперимента с группировкой для 22 партий пластического материала

Партия	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
	58	49	45	28	54	47	45	49	43	37	48
	48	41	44	55	49	45	54	47	48	43	52
	47	46	44	50	53	47	50	46	49	47	57
	65	46	44	41	52	47	57	50	47	27	51
Сумма	218	182	177	174	208	186	206	192	187	154	208
W	18	8	1	27	5	2	12	4	6	20	9
Партия	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
	45	55	42	45	41	43	53	41	43	34	50
	43	42	41	43	46	42	44	43	45	34	48
	44	47	46	48	41	38	49	41	44	40	48
	44	52	50	45	30	35	52	35	46	40	48
Сумма	176	196	179	181	158	158	198	160	178	148	194
W	2	13	9	5	16	8	9	8	3	6	2

Уравнение модели, представляющей результаты опытов, может быть записано в следующем виде:

$$y_{i(j)} = \mu + e_i + \varepsilon_{i(j)}, \quad i = 1, \dots, 22;$$

$$(j) = 1, \dots, 4 \text{ для каждого } i. \quad (*)$$

Если выбор партий материала и выбор образцов из них случайны, то

$$E\{e_i\} = E\{\varepsilon_{i(j)}\} = E\{e_i e_i\} = E\{\varepsilon_{i(j)} \varepsilon_{i(j')}\} =$$

$$= E\{e_i \varepsilon_{i(j)}\} = 0.$$

Все случайные ошибки предполагаются несмещенными и некоррелированными. Вместо обычных сомнений экспериментаторов, подозревающих, что они изучают систему в недостаточно широком диапазоне экспериментальных условий, здесь на первый план выдвигаются обычные сомнения статистиков, полагающих, что они

переоценивают случайную внутригрупповую ошибку за счет ошибки разделения на группы. В рассматриваемом случае для оценивания

$$\text{Var}\{\varepsilon_{i(j)}\} = E\{\varepsilon_{i(j)}^2\} = \sigma_0^2$$

имеется $3 \times 22 = 66$ степеней свободы, а для оценивания $\text{Var}(e_i) = E\{e_i^2\} = \sigma_i^2$ — менее 21 степени свободы.

Оценку для σ_0^2 получим из выражения

$$\frac{1}{66} \sum_{i=1}^{22} \sum_{j=1}^4 (y_{i(j)} - \bar{y}_{i.})^2 = A,$$

т. е. из суммы квадратов отклонений от средних значений внутри партий. Средний квадрат отклонения (между партиями)

$$\frac{1}{21} \sum_{i=1}^{22} (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})^2 = B$$

имеет математическое ожидание, равное $(\sigma_i^2 + \sigma_0^2/4)$. Следовательно, величина B должна быть использована совместно с A для получения оценки σ_i^2 .

Мы несколько забежали вперед и затронули стандартные способы оценивания σ_0^2 и σ_i^2 в выборках с группировкой, не сделав необходимых предостережений. Если данные собираются описанным выше образом, т. е. рассматривается одно и то же число образцов из каждой партии, то не составляет труда проверить до сих пор не упоминавшиеся предположения о нормальном распределении и однородности двух множеств случайных эффектов. Для $\varepsilon_{i(j)}$ размаха $y_{i(j)}$ по партиям i должны подчиняться известному распределению размахов четырех элементов, взятых из нормально распределенной совокупности. На рис. 6.3 сплошная кривая соответствует ожидаемому распределению размахов таких четырех элементов.

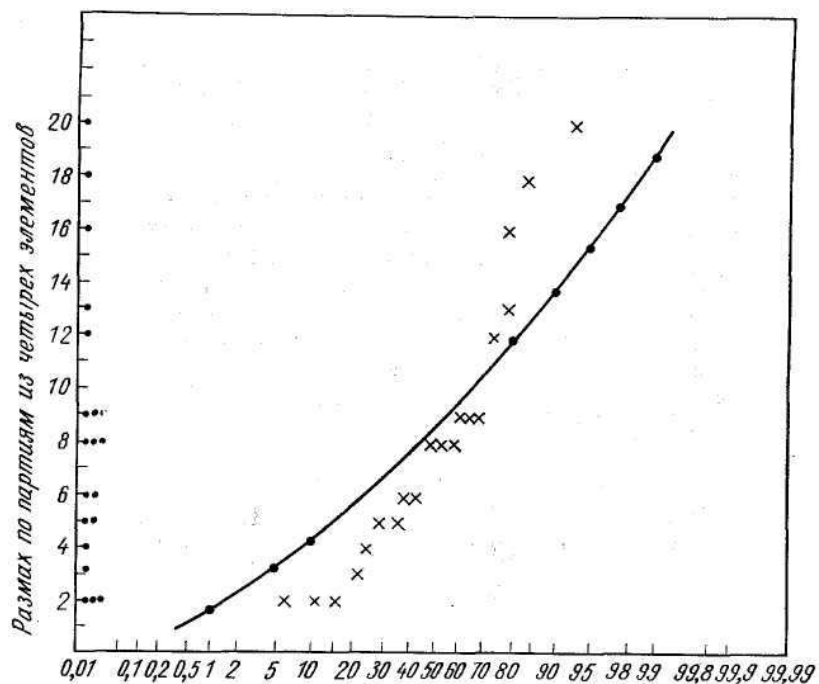


Рис. 6.3. Наблюдаемое и ожидаемое интегральные распределения 22 размахов по множествам из четырех элементов.

Здесь σ_0 взято равным $4,2 = \text{средний размах}/d_2 = 8,68/2,06$, а d_2 найдено по табл. VIII из книги Хальда. Похоже, что здесь имеет место гладкое распределение, отличающееся от нормального, и это отличие нельзя объяснить одним или несколькими аномальными наблюдениями. Можно провести гладкую кривую, представляющую наблюдаемое интегральное распределение 22 размахов, и она лишь один раз пересечет ожидаемую кривую. Таким образом, все большие размахи оказываются слишком большими, а все малые — слишком малыми. Чтобы выяснить, имеется ли какая-либо явная зависимость размаха (а следовательно, и σ_0 или σ_0^2) от среднего значения для партии, обратимся к рис. 6.4а.

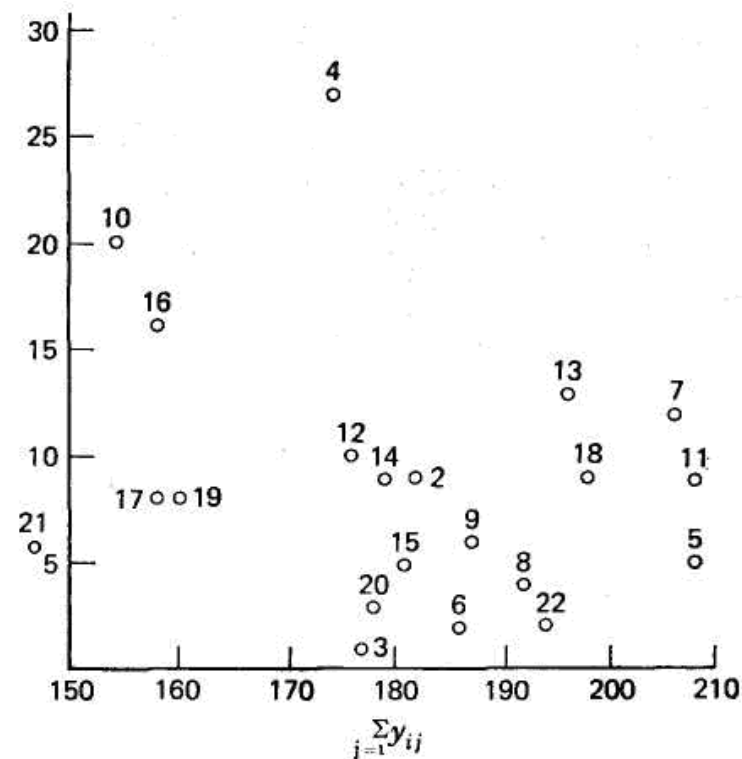


Рис. 6.4а. Зависимость размахов (W_i) измерений 22 партий пластического материала от сумм результатов измерений $\sum y_{ij}$ для каждой партии (табл. 6.22).

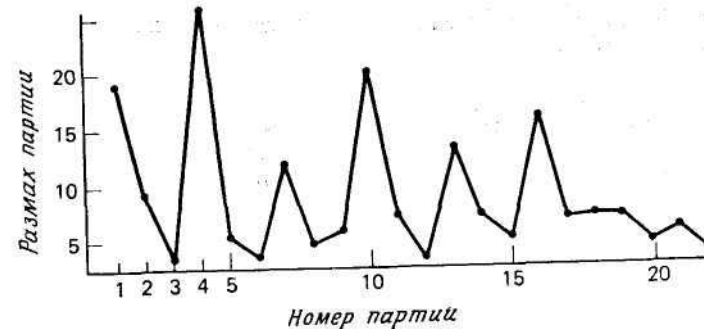


Рис. 6.4.б. Величины размахов, полученные для различных партий материалов

Здесь не усматривается такой зависимости. Поиск (простого) преобразования, приводящего к нормальному распределению, был предпринят с целью получения возможности проверки значимости или даже расчета доверительных интервалов для двух компонент дисперсии. Способы решения этой задачи получены в предположении, что e_j или $\varepsilon_{i(j)}$ независимы и распределены нормально.

Из рис. 6.5 видно, что средние значения (суммы) для партий оказываются почти нормальными.

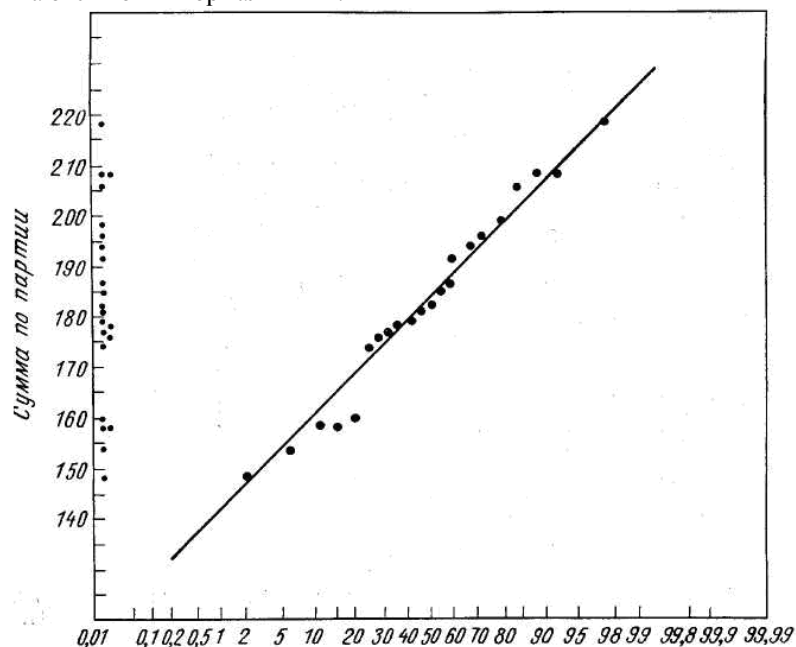


Рис. 6.5. Интегральное распределение сумм измерений по 22 партиям ($S_B = (200-165)/2=17,5$).

Изображая 22 размаха, каждый из которых рассчитывался по четырем выборочным значениям, в порядке их следования (рис. 6.4б), нетрудно заметить в них пульсации. Каждый третий размах оказывается больше двух ему предшествующих. На этом основании можно предположить, что имеет место некоторый процесс *перемешивания* разнородных частей партий. Среднее по всем партиям постоянно, но средние по каждой партии, характеризующие их однородность, быстро меняются с периодом, равным трем. Первые 21 партию были разделены на три множества по семь партий в каждом,

найлены средние размахи для каждого множества (они оказались равными 16,29; 6,57; 4,43), поделены на 2,06 и получены для них стандартные отклонения: 7,91; 3,19; 2,15. После этого была проведена стандартизация каждого множества путем деления его элементов на соответствующее стандартное отклонение и в результате получено множество из 21 трижды стандартизованного размаха, показанное на рис. 6.6.

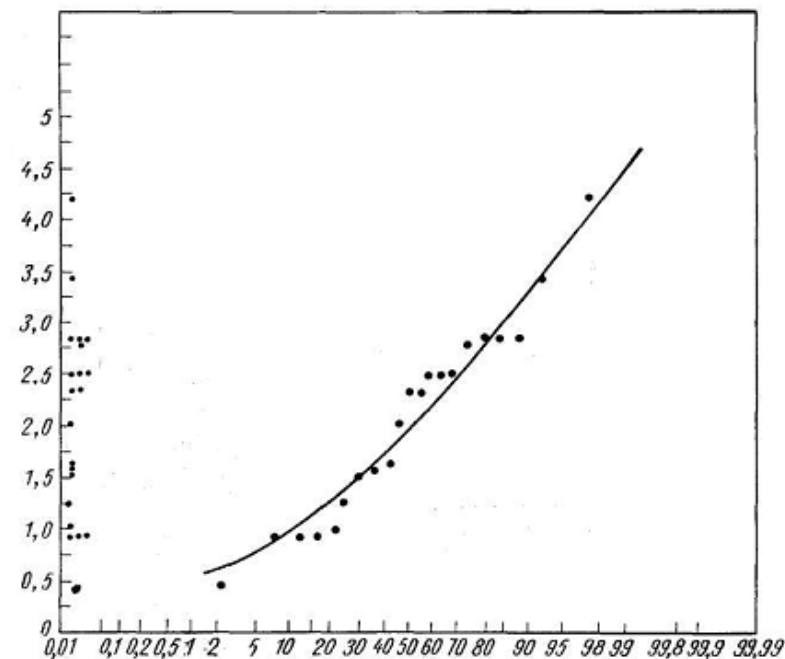


Рис. 6.6. Трижды стандартизованные размахи для 21 партии.

Вызывает некоторую неудовлетворенность «волнистость» интегрального распределения, но все же она не слишком велика, и выделяющиеся размахи теперь ведут себя вполне прилично по сравнению с другими раз-махами. Для выполнения более тщательной и более чувствительной проверки следовало бы взять остатки в *пределах* каждой партии, сгруппировать их в три множества и получить три новых интегральных распределения. Выполним эти расчеты. Сгруппированные остатки представлены в табл. 6.23, а на рис. 6.7, а, б изображены в полулогарифмическом масштабе интегральные распределения для каждого множества из 28 наблюдений. Ошибка в

пределах каждой стадии перемешивания оказывается однородной, почти нормальной и поэтому вполне приемлемой.

Таблица 6.23

Остатки относительно средних значений 21 партии, объединенные в три множества

<i>i</i>	I				<i>i</i>	II				<i>i</i>	III			
1	3,5	-6,5	-7,5	10,5	2	3,5	-4,5	0,5	0,5	3	0,7	-0,2	-0,2	-0,2
4	-15,5	11,5	6,5	-2,5	5	2,0	-3,0	1,0	0	6	0,5	-1,5	0,5	0,5
7	-6,5	2,5	-1,5	5,5	8	1,0	-1,0	-2,0	2,0	9	-3,8	1,2	2,2	0,2
10	-1,5	4,5	8,5	-11,5	11	-4,0	0	5,0	-1,0	12	1,0	-1,0	0	0
13	6,0	-7,0	-2,0	3,0	14	-2,8	-3,8	1,2	5,2	15	-0,2	-0,2	2,8	-0,2
16	1,5	6,5	1,3	-9,5	17	3,5	2,5	-1,5	-4,5	18	3,5	-5,5	-0,5	2,5
19	1,0	3,0	1,0	-5,0	20	-1,5	0,5	-0,5	1,5	21	-3,0	-3,0	3,0	3,0

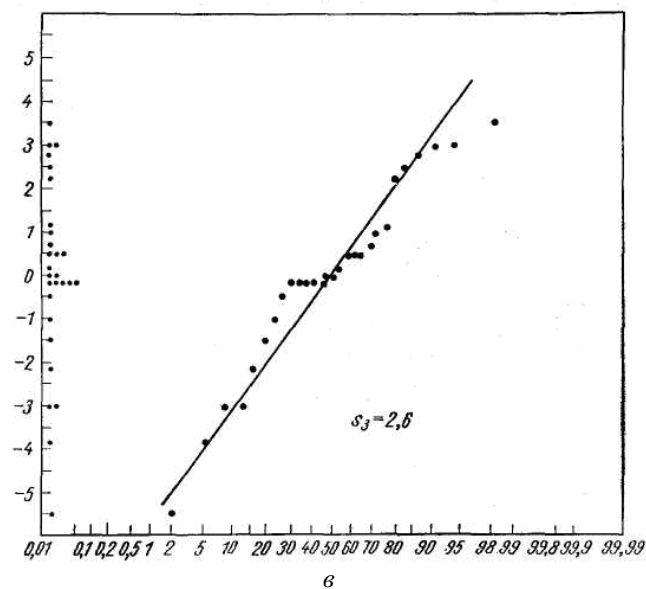
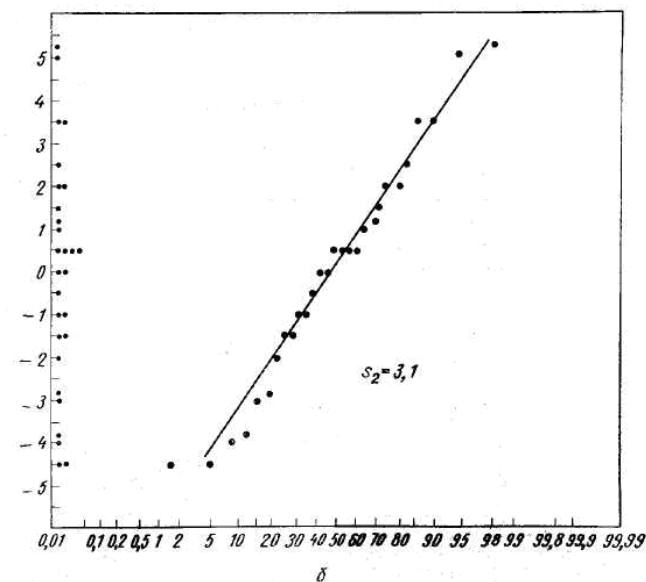
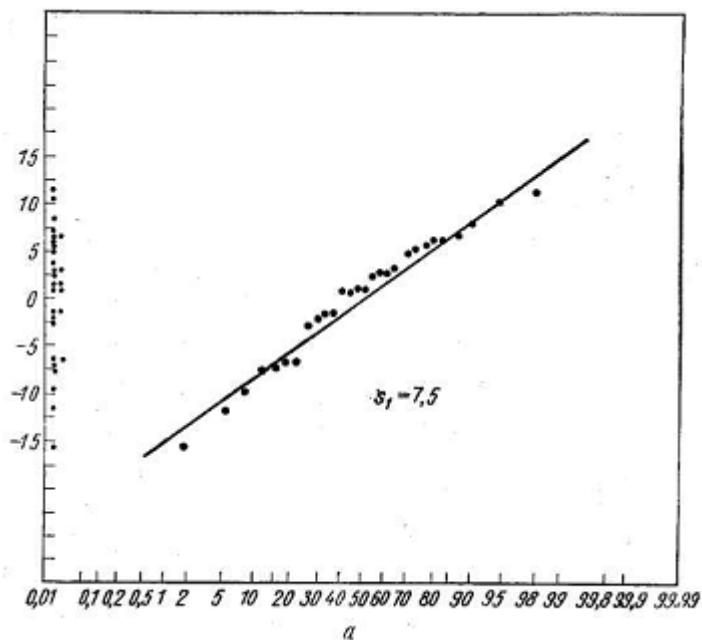


Рис. 6.7. а — интегральное распределение остатков по семи партиям (1, 4, 7, ..., 19), $s_1=7,5$; б — то же самое для семи партий (2, 5, 8, ..., 20), $s_2=3,1$; в — то же самое для семи партий (3, 6, 9, ..., 21), $s_3 = 2,6$.

Однако уравнения модели (*) для каждой стадии будут различными, поскольку для разных стадий соотношения между двумя компонентами дисперсии σ_0^2 и σ_1^2 оказываются существенно неодинаковыми. Теперь можно представить общую сумму квадратов в виде составляющих, соответствующих каждому множеству из семи партий ($TSS_k, k=I, II, III$). При этом следует использовать обычное тождество

$$(y_{ij} - \bar{y}_{..})_k = (y_{ij} - \bar{y}_{i.})_k + (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})_k, \quad k=1, II, III.$$

В результате получим

$$\begin{aligned} TSS_k &= \sum_{i=1}^7 \sum_{j=1}^4 (y_{ij} - \bar{y}_{..})^2 = \sum_i \sum_j (y_{ij} - \bar{y}_{i.})^2 + \\ &+ 4 \sum_{i=1}^7 (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})^2 = SS \text{ (в пределах партий)}_k + \\ &+ 4SS \text{ (между партиями)}_k = SS(W_k) + 4SS(A_k). \end{aligned}$$

Поскольку $E\{MS(B_k)\} = \sigma_{0,k}^2 + 4\sigma_{1,k}^2$, можно вычислить

$$MS(W_k) = \frac{SS(W_k)}{21} \text{ и } MS(A_k) = \frac{SS(A_k)}{6}.$$

Здесь $MS(B_k) = 4MS(A_k)$.

В табл. 6.24 приведены оценки средних квадратов и компонент дисперсии.

Таблица 6.24

Оценки компонент средних квадратов (MS) и дисперсий для трех объединенных множеств

k	$MS(B_k)$	$MS(W_k)$	$\hat{\sigma}_{1,k}^2$	$F = MS(B)/MS(W)$	P	$\hat{Cт. св. B}$	L	U
1	165,29	58,14	26,79	2,84	0,05	2,4	0,07	2,77
2	79,74	9,50	17,56	8,39	0,0005	4,6	0,21	2,27
3	60,50	2,55	14,49	23,73	0,0005	5,5	0,25	2,15

Эквивалентное число степеней свободы для $\hat{\sigma}_1^2$, записанное в таблице как $\hat{Cт. св. B}$, вычисляется по формуле Сэтертвейта. (Эта формула в данном случае может быть записана в виде

$$\hat{Cт. св. B} = \frac{(F-1)^2}{F^2/f_1 + 1/f_2}$$

где F — как обычно, отношение $MS(B)/MS(W)$, f_1 и f_2 — числа степеней свободы для числителя и знаменателя, $\hat{Cт. св. B}$ — приближенное число степеней свободы для $\hat{\sigma}_{B,k}^2$). Эта формула применяется тогда и только тогда, когда F -значение удовлетворяет критерию Гейлора и Хоппера, а именно когда его уровень значимости не превышает 0,025. В данном случае $f_1 = 6, f_2 = 21$ и F -значение при уровне значимости 0,025 равно 3,09, а следовательно, указанному требованию удовлетворяют лишь множества II и III ($k = 2,3$). Эквивалентные числа степеней свободы оказываются равными 4,64 и 5,50, т. е. не намного меньше их максимально возможного значения, равного 6.

Имея данные о $\hat{Cт. св. B}$ и некоторую уверенность в том, что распределение вероятности является нормальным, можно найти доверительные интервалы для $\sigma_{B,k}^2$. Как известно из справочников, чтобы получить 90%—интервалы для $\sigma_{B,k}^2$, необходимо умножить найденные оценки $s_{B,k}$ на $\hat{Cт. св. B} / \chi_{0,95}^2$ и на $\hat{Cт. св. B} / \chi_{0,05}^2$. Эти два значения в данном случае равны 0,75 и 4,75. Полученные доверительные интервалы указывают на то, что составляющие дисперсии, относящиеся к различиям между партиями, известны недостаточно хорошо. На данном этапе этот вывод не является неожиданным. Дисперсия, оцениваемая с числом степеней свободы менее 6, разумеется, будет оценена плохо. Как утверждает Браунли, расчет таких оценок при числе степеней свободы, не превышающем 21, приводит к неприемлемо низкой точности.

Достаточно ясно, какие выводы следует сделать на основании рассмотренного примера. 22 множества по четыре измерения в каждом не были получены на системе с однородной ошибкой. Если разделить их на три совокупности по семь множеств в каждой, ошибка окажется нормальной и почти постоянной в пределах каждой такой совокупности, но в то же время обнаружатся значительные различия в изменчивости результатов для разных множеств. Не следует слишком критически относиться к такому подходу за то, что данные преднамеренно были разделены на множества с заметно различающимися дисперсиями ошибки. Это решение было принято лишь после выявления вполне регулярной периодичности (через три интервала времени) в следующих друг за другом партиях. Похоже, что здесь мы имеем дело с тремя группами, имеющими свои внутригрупповые (другими словами, подвыборочные) нормальные ошибки с

дисперсиями 58,14, 9,50 и 2,55, а не с единым набором данных с усредненной дисперсией 23,39.

Утешающим здесь является то обстоятельство, что в семи партиях с номерами 3, 6, 9, 12, 15, 18, 21 содержится информации о различиях между партиями больше, чем в остальных 14 партиях, или тем более во всем неупорядоченном множестве. Проведенные преобразования отнюдь не испортили имеющиеся данные, и, кроме того, удалось установить, какую часть этих данных стоит сохранять.

Общие выводы здесь имеют методологическую направленность:

1. Вряд ли удастся получить какие-либо объективные сведения о системе, о которой были собраны анализируемые данные, если уклоняться от проверки справедливости предположений, лежащих в основе процедур оценивания и проверки статистических гипотез.

2. Видимо, отсутствуют совершенно универсальные способы изучения данных, подобных рассмотренным выше. Видимо, существуют более эффективные способы анализа. Но каждый раз, при попытке составить совокупность общих правил обработки данных, оказывалось, что эти правила слишком сильно зависят от множества данных, изучавшихся последними. Для работающих со сбалансированными данными можно рекомендовать следующее:

а. Тщательно запишите, что необходимо найти по этим данным. Запишите, как можно добиться желаемого, если все будет хорошо. Запишите предпосылки, которые *должны* выполняться, чтобы обеспечивалась корректность проводимых вами статистических расчетов. Подумайте, какие из этих предпосылок можно было бы проверить по имеющимся данным и какие предпосылки не удастся проверить, но зато их справедливость сможет угадать, гарантировать или опровергнуть экспериментатор, который поставяет данные.

б. Постройте все простейшие графики: последовательность данных во времени, внутренние и внешние средние значения, размахи и интегральные распределения всех подмножеств с более чем 15 степенями свободы (особенно если требуется нормальность распределения).

6.9.2. Планы расщепленных делянок

В предыдущем разделе рассматривалась простая задача с группированными данными. На каждое наблюдение оказывали влияние случайные возмущения двух типов: действующие внутри партий и определяющие изменчивость между партиями. Помимо оценок двух средних квадратических отклонений, относящихся к случайным воздействиям, в этой задаче рассчитывалась оценка еще только *одного*

параметра системы: ее общего среднего значения. Факторы не варьировались, и поэтому это не был эксперимент в полном смысле слова.

Теперь рассмотрим гораздо более распространенный случай, когда *некоторый* фактор (или факторы) принимает разные значения для разных партий (или делянок), тогда как *другой* фактор (или факторы) изменяется *внутри* каждой партии или делянки (термин «делянка» заимствован из сельскохозяйственных экспериментов). Кохреном и Коксом подробно рассмотрены такие эксперименты и приведены практические примеры. Так, при изучении шоколадных пирожных применялись *три рецепта* и *шесть* температур выпекания для каждой из 15 «смесей» или партий. В каждой партии температура выпекания устанавливалась различной для разных частей партии. Таким образом, на эффекты температуры и всех ее взаимодействий оказывали влияние лишь случайные изменения, связанные с разными частями делянки, а эффекты рецептов измерялись с ошибкой целой делянки. Для оценки ошибки целой делянки использовалось взаимодействие «рецепт× повторение партий».

Детальный анализ, подобный проделанному выше для простого случая с группировкой, оставим в качестве упражнения читателям, которые заметят, что около 28% общей суммы квадратов для ошибки целой делянки обусловлено *двумя* пирожными (с номерами 4 и 14 для рецепта 1). Можно заметить также, что если подправить эти данные, средняя квадратическая ошибка целой делянки уменьшается и становится практически незначимой. Тогда опять оказывается невозможным определить точность, с которой оценивается дисперсия для целой делянки. Причина этого в том, что даже *F*-отношение, равное 1,63, для скорректированной ошибки целой делянки слишком мало и формула Сэтертвейта не применима.

Хорошие примеры даны в работах Кокса, Джонсона и Лиона, Федерера и Хикса. Здесь кратко описаны два из них.

Данные, приведенные в работе Кокса, представляют собой *возможное* множество. Они используются только для демонстрации логических основ и способов интерпретации планов расщепленных *элементов* (так их назвал Кокс). Пример расщепленной делянки (split plot) из работы Хикса сопровождается ясным и всесторонним обсуждением, включающим изложение простого способа расчета значений всех средних квадратов и, следовательно, позволяющего выявить эффекты, которые будут значимыми для ошибки каждого типа. Данные приведены в табл. 6.25, а.

Таблица 6.25

а. Данные эксперимента по плану с расщепленными делянками при изучении срока службы элементов электрических цепей

Реплика R	Время обжига B, мин	Температура печи T, град				Среднее значение
		580	600	620	640	
I	5	217	158	229	223	207
	10	233	138	186	227	196
	15	175	152	155	156	158
II	5	188	126	160	201	169
	10	201	130	170	181	170
	15	195	147	161	172	109
III	5	162	122	167	182	158
	10	170	185	181	201	184
	15	213	180	182	199	194

б. Дисперсионный анализ данных эксперимента с расщепленными делянками при исследовании элементов электрических цепей

Источник изменчивости	Число степеней свободы	Сумма квадратов SS	Средний квадрат MS	Математическое ожидание среднего квадрата
R_i	2	1 963	982	$\sigma_e^2 + 12\sigma_R^2$
T_j	3	12 494	4165	$\sigma_e^2 + 3\sigma_{RT}^2 + 9\sigma_T^2$
RT_{ij}	6	1 774	296	$\sigma_e^2 + 3\sigma_{RT}^2$
B_k	2	566	283	$\sigma_e^2 + 4\sigma_{RB}^2 + 12\sigma_B^2$
RB_{ik}	4	7 021	1755	$\sigma_e^2 + 4\sigma_{RB}^2$
TB_{jk}	6	2 601	434	$\sigma_e^2 + \sigma_{RTB}^2 + 3\sigma_{TB}^2$
RTB_{ijk}	12	2 912	243	$\sigma_e^2 + \sigma_{RTB}^2$
Сумма:	35	29 331		

Делянками здесь являются совокупности по три значения, относящиеся к одной температуре в пределах одной реплики. Эти совокупности включают данные, соответствующие трем различным временам выдержки элементов электрических цепей в печах обжига. Таким образом, все взаимодействия, включающие фактор времени обжига, а также его главный эффект измеряются с ошибкой, действующей в пределах делянок. Значение среднего квадрата ошибки (296) между делянками вряд ли удастся отличить от величины среднего квадрата ошибки (243) внутри делянки. Следовательно, основной техникой выигрыш может быть здесь получен за счет простого одновременного обжига в печи трех элементов.

Хотя автор и пишет, что результаты анализа приведены в таблице дисперсионного анализа (табл. 6.25, б), видимо эта таблица лишь показывает, на что следует обратить внимание. Чрезвычайно большой средний квадрат для $R \times B_{ik}$ подсказывает, что необходимо рассмотреть поведение средних значений или сумм элементов для $R \times B$. Эти величины приведены в последнем столбце табл. 6.25, а. Результаты оказываются в значительной мере неожиданными. Эффект возрастающей продолжительности обжига был отрицательным и приближенно линейным в реплике I; он был нулевым в реплике II; наконец, он оказался положительным и почти линейным в реплике III. Это явно противоречит нашим представлениям о поведении объекта при повторении опытов.

6.9.3. Дробные факторные планы типа 2^{p-q} с расщепленными делянками

Простейшим двухуровневым планом с группировкой является план типа 2^2 . Предположим, что изучаются только два двухуровневых фактора и что изменение фактора A затруднено, а фактор B легко поддается варьированию. В этом случае целесообразно представить план 2^2 в виде двух блоков по два опыта:

I	II
(1) a	b
b	ab

Средний эффект B можно оценить с помощью обычного контраста, а разность двух эффектов B, рассчитанных по блокам I и II равна учетверенному эффекту взаимодействия AB. Дисперсия этой разности равна σ_0^2 , т. е. внутриблоковой дисперсии. Эффект A измеряется контрастом, охватывающим оба блока, и, следовательно, его дисперсия равна $\sigma_1^2 + \sigma_0^2$. Для получения оценок двух дисперсий, а также для

достижения большей точности оценивания всех эффектов опыта по такому плану следует повторять несколько раз.

Каждый блок или делянку можно рассматривать как план 2^{2-1} с системой смешивания $I \pm A$. План с расщепленными делянками, следовательно, может быть определен как план, в котором какой-либо главный эффект (или эффекты), в данном случае только A , смешивается со средним значением блока.

При рассмотрении большего числа факторов открывается больше возможностей для построения планов с расщепленными делянками. Так, план типа 2^3 можно представить в виде блоков по четыре опыта с двумя факторами, варьируемыми в пределах делянок. Тогда каждый блок выполняется по плану 2^{3-1} , а один эффект, например A , опять смешивается с блоковым эффектом. Здесь для делянки I системой смешивания является $I-A$, а для делянки II системой смешивания будет $I+A$, т. е. в результате получим следующие блоки:

I	II
(1) a	a
b	ab
c	ac
bc	abc

Очевидно, что B , C и BC оцениваются в пределах делянок; AB , AC и ABC тоже оцениваются с внутриблоковой точностью. Например, эффект взаимодействия AB , которому соответствует контраст

$$(1) - a - b + ab + c - ac - bc + abc,$$

может быть записан следующим образом:

$$(abc + ab - a - ac) - [bc + b - (1) - c] = B_+ - B_- ,$$

где B_+ , B_- — эффекты B при факторе A на верхнем и нижнем уровнях соответственно. Таким образом, эффект AB рассчитывается по контрастам, каждый из которых относится к одной делянке, и, следовательно, он оценивается с дисперсией, равной дисперсии ошибки в пределах делянок. Только эффект A измеряется с дисперсией ошибки целой делянки, т. е. ошибки, действующей при переходе с одной расщепленной делянки на другую.

В другой ситуации при реализации плана 2^3 могут потребоваться блоки по два опыта. При этом C будет обозначать фактор, варьируемый в пределах делянок, а факторы A и B будут изменяться между делянками. Делянке I соответствует план типа 2^{3-2} с системой смешивания

$$I - A - B + AB,$$

откуда следует, что смешанными эффектами в пределах делянок являются

$$C - AC - BC + ABC = E\{c - (1)\}.$$

Четыре расщепленные делянки здесь следующие:

I	II	III	IV
(1) a	b	ab	
c	ac	bc	abc

Эффекты A , B и AB оцениваются с «внешней» дисперсией, а остальные эффекты — с внутриблоковой дисперсией. Здесь опять предполагается, что для получения оценок двух компонент дисперсии план 2^3 реализуется более одного раза.

Рассмотрим теперь план 2^5 , в котором группировка осуществляется по трем факторам. В этом случае имеет смысл использовать такую запись плана: $2^2 \times 2^{(3)}$. Это позволит отделить факторы, относящиеся к целой делянке, от всех остальных и использовать результаты первого примера с делянками, содержащими по четыре комбинации условий опытов. Основной делянкой будет делянка I из числа приведенных ниже:

I	II	III	IV
(1) a	b	ab	
cd	acd	bed	$abcd$
ee	ace	bee	$abce$
de	ade	bde	$abde$

Не представляется возможным рассчитывать на получение отдельных оценок всех эффектов парных взаимодействий, так как здесь берется только половина плана 2^5 . Можно заметить, что CDE смешивается со средним значением всех четырех делянок и поэтому системой смешивания для всего плана здесь будет $I - CDE$. Таким образом, три эффекта парных взаимодействий: CD , CE и DE — оказываются неотделимыми от дополняющих их главных эффектов. Следовательно, эта половина реплики может применяться лишь в том случае, если известно, что эффекты C , D и E являются аддитивными. Чтобы разделить все эффекты взаимодействий, нужно использовать другой дробный план 2^{5-1} с системой смешивания $I + CDE$, в который входят все условия опытов с нечетным числом букв c , d и e . При этом эффекты A , B и AB все равно оцениваются с ошибкой целой делянки.

За удобства реализации расщепленных делянок придется заплатить определенную цену. Должны быть оценены две дисперсии, и числа степеней свободы для расчета этих двух оценок могут быть сделаны равными только для делянок с двумя опытами. На основании многих примеров можно сделать вывод,

что число степеней свободы обычно быстро возрастает при переходе к изучению внутренних компонент. Это хорошо для эффектов расщепленных делянок, но плохо для эффектов целой делянки.

Все рассмотренные здесь аспекты проблемы расщепленных делянок могут послужить введением к весьма полезной работе Аддельмана, воспроизведенной в разделе 6.10. Отметим только некоторые различия в обозначениях. Символы P, Q, R, \dots, W Аддельман использовал для факторов расщепленных делянок. Вместо его символа $PQRS_{0 или 1}$ выше использовался $\pm PQRS$, а его $PQR_{0,1}$ соответствует $+PQR$. Наконец, систему смешивания он называет *тождественным соотношением*.

Приведем пример дробного плана 2^{p-q} с расщепленными делянками, взятый из работы Кемпторна и Тишера (табл. 6.26), хотя в дальнейшем изложение этого примера усложнено в двух направлениях.

Математическое ожидание среднего квадрата
$\sigma_e^2 + 12\sigma_R^2$
$\sigma_e^2 + 3\sigma_{RT}^2 + 9\sigma_T^2$
$\sigma_e^2 + 3\sigma_{RT}^2$
$\sigma_e^2 + 4\sigma_{RB}^2 + 12\sigma_B^2$
$\sigma_e^2 + 4\sigma_{RB}^2$
$\sigma_e^2 + \sigma_{RTVB}^2 + 3\sigma_{TV}^2$
$\sigma_e^2 + \sigma_{RTVB}^2$

Таблица 6.26

Данные эксперимента по плану $8 \times 4^2 \times 2^4$ с 512 опытами
 а. Дисперсионный анализ экспериментальных данных (табл. 2 Кемпторна и Тишера)

Источник изменчивости	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат
Реплики	3	38,71	
Разновидность (A, B, C)	7	1190,19	170,03 ¹⁾
Ошибка A	21	635,23	30,25
Сумма	31	1864,13	
Длительность (D, E)	3	9046,14	3015,38 ¹⁾
Длительность × разновидность	21	1502,80	71,56 ¹⁾
FG	1	116,28	116,28 ¹⁾
HI	1	578,00	578,00 ¹⁾
Ошибка B	70	2787,96	39,83
Сумма	127	15 895,31	
F	1	36,12	36,12
G	1	12,50	12,50
H	1	5189,26	5189,26 ¹⁾
I	1	2601,01	2601,01 ¹⁾
FH	1	0,94	0,94
FI	1	29,07	29,07
GH	1	23,63	23,63
GI	1	1,76	1,76
Разновидность × F	7	51,32	7,33
Разновидность × G	7	146,63	20,95
Разновидность × H	7	418,62	59,80 ²⁾
Разновидность × I	7	722,62	103,23 ¹⁾
Длительность × F	3	61,59	20,53
Длительность × G	3	39,02	13,01
Длительность × H	3	467,82	155,94 ¹⁾
Длительность × I	3	141,98	47,33
Ошибка C	336	7303,68	21,74
Сумма	511	33 142,88	

б. Эффекты разновидностей и длительностей и их взаимодействия (табл. 2 Кемпторна и Тишера)

Разновидности	Длительности				Среднее
	1	2	3	4	
1	2,56	3,59	4,45	5,00	3,90
2	3,19	4,23	4,53	5,10	4,26
3	3,51	5,04	5,17	4,92	4,66
4	3,09	4,34	4,68	5,28	4,35
5	2,78	3,92	5,08	5,01	4,20
6	3,24	3,89	4,97	5,17	4,32
7	3,63	3,50	4,05	3,95	3,78
8	3,08	4,06	4,83	5,07	4,26
Среднее	3,14	4,07	4,72	4,94	4,22

Стандартные ошибки: средних по разновидностям 0,12;
 средних по длительностям 0,09;
 элементов таблицы для взаимодействий 0,26.

Средние эффекты отбеливания, дегидрации и хранения

	F		H	J		
	Температура			Срок хранения, мес		
	отбеливания	дегидрации		3	6	среднее
Нижний уровень	4,26	4,24	70°F	5,30	4,19	4,75
Верхний уровень	4,17	4,19	100°F	3,88	3,49	3,69
				4,59	3,84	

¹⁾ Значим при уровне 0,01.

²⁾ Значим при уровне 0,05.

Во-первых, на самом деле это был план $8 \times 4^2 \times 2^4$ с 512 комбинациями условий опытов, из которых семь степеней свободы для трех псевдофакторов и всех их взаимодействий использовались для представления главных эффектов одного восьмиуровневого фактора, а еще по два псевдофактора использовались для каждого из четырехуровневых факторов. Во-вторых, в действительности расщепленные делянки в плане в свою очередь расщеплены, и поэтому этот план можно назвать планом с расщеплением расщепленных делянок с ошибками трех видов.

Хотя это и не относится непосредственно к вопросам расщепленных делянок в рассматриваемом эксперименте, обратим внимание на одну

деталь. Величина среднего квадрата для парного взаимодействия разновидность — длительность (матрица 8×4 средних значений приведена в табл. 6.26, б) считается значимой. Половина этой величины получается за счет единственного элемента указанной матрицы (7-я строка, 1-й столбец), который равен 3,63. Если бы он был равен 2,63, эффект парного взаимодействия оказался бы незначимым!

Наконец, можно заметить, что суммы квадратов, вычисленные по матрице 8×4 , оказываются в 36 раз меньше используемых Кемпторном в дисперсионном анализе. Была выяснена причина этого явления. Каждая комбинация условий опытов была в действительности суммой шести суждений: по два от каждого из трех экспертов.

Планы с группировкой, в которых одни факторы поддерживаются постоянными, а другие варьируются внутри каждой группы, широко используются в исследованиях. Чем больше размеры изучаемой системы, тем более вероятно, что такие планы окажутся более удобными или даже единственно возможными. Недостаток такого планирования состоит в том, что число повторений в плане факторов, поддерживаемых постоянными внутри каждой группы, мало, и как следствие этого малым оказывается число степеней свободы при оценивании дисперсий эффектов групповых факторов.

Изучение данных, полученных по плану с группировкой (для выявления дефектных экспериментов и для проверки гипотезы о нормальном законе распределения ошибки), более необходимо, чем при других типах планирования. Ключевым здесь является предположение о нормальном распределении остатков, так как обычно мы хотим оценить каждую компоненту дисперсии (путем вычитания одного среднего квадрата из другого).

6.10. Двухуровневые факторные планы с расщепленными делянками

Классический эксперимент с расщепленными делянками состоит из делянок в пределах некоторых блоков и блоков в пределах реплик. Блоки обычно называют целыми делянками, а сами делянки — расщепленными делянками. В большинстве экспериментов с расщепленными делянками целые делянки делятся на некоторое число частей, равное числу условий опытов в расщепленных делянках. На практике часто обнаруживается, что число предполагаемых условий опытов в расщепленных делянках превышает число расщепленных делянок. Предположим, что всего имеется четыре условия опытов с целыми делянками и восемь условий опытов с расщепленными делянками, причем последние — это комбинации условий с тремя двухуровневыми факторами. Как

правило, имеются основания для предположения о том, что эффект взаимодействия трех факторов, относящихся к расщепленной делянке, представляет меньший интерес по сравнению с другими эффектами расщепленной делянки. При этом эффект взаимодействия трех факторов можно смешивать с эффектами целой делянки. Такой способ смешивания известен как смешивание в расщепленных делянках. Примеры таких смешиваний приведены в работах Кемпторна. Если обозначить условия для целых делянок через t_1, t_2, t_3 и t_4 , а факторы из расщепленных делянок — через P, Q и R , то полная реплика плана эксперимента будет включать восемь целых делянок, каждая из которых состоит из четырех расщепленных делянок. Перед рандомизацией этот план будет выглядеть так:

t_1	t_1	t_2	t_2	t_3	t_3	t_4	t_4
000	001	000	001	000	001	000	001
011	010	011	010	011	010	011	010
101	100	101	100	101	100	101	100
110	111	110	111	110	111	110	111

В комбинации условий опытов 000, 011 и т. д. входят уровни факторов P, Q и R соответственно. Обозначим через PQR_0 комбинации условий, для которых сумма уровней факторов P, Q и R равна 0 (по модулю 2), а через PQR_1 комбинации условий, для которых эта сумма равна 1 (также по модулю 2). Тогда план эксперимента можно представить в следующем виде:

t_1	t_1	t_2	t_2	t_3	t_3	t_4	t_4
PQR_0	PQR_1	PQR_0	PQR_1	PQR_0	PQR_1	PQR_0	PQR_1

Очевидно, что эффект взаимодействия PQR смешивается с эффектами целой делянки. Структура дисперсионного анализа результатов такого плана представлена в табл. 6.27.

Если взаимодействия высоких порядков пренебрежимо малы, то взаимодействие $TPQR$ можно использовать для оценивания ошибки целой делянки с тремя степенями свободы. Взаимодействия TPQ, TPR и TQR объединяются для получения оценки ошибки расщепленной делянки с девятью степенями свободы.

Таблица 6.27

Структура дисперсионного анализа результатов реализации факторного плана 2^5 со смешиванием эффектов в расщепленных делянках

Источник изменчивости	Число степеней свободы
Условия целой делянки: T	3
PQR	1
$TPQR$	3
Условия расщепленных делянок: P, Q, R, PQ, PR, QR	6
$TP, TQ, TR, TPQ, TPR, TQR$	18
Сумма	31

Во многих экспериментальных ситуациях условия целой делянки задаются комбинациями двухуровневых факторов. Например, в плане эксперимента рассмотренной выше задачи условиям четырех делянок могли бы соответствовать следующие четыре комбинации уровней факторов A и B целой делянки: 00, 01, 10 и 11. В таком случае три степени свободы для условий T целой делянки могут быть разделены между контрастами, обозначаемыми через A, B и AB .

Следует заметить, что план эксперимента включает полную реплику факторного плана 2^5 , в которой два фактора представляют условия целой делянки, а остальные три фактора — условия расщепленной делянки. План эксперимента с расщепленными делянками может также содержать дробные реплики факторных планов. Рассмотрим, например, ситуацию, когда эффекты двух факторов с двумя уровнями каждый необходимо изучить на целых делянках, а комбинации условий опытов из плана 2^5 должны быть изучены на расщепленных делянках. Обозначим факторы целой делянки через A и B , а факторы расщепленной делянки — через P, Q, R, S и T . Тогда план эксперимента с восемью целыми делянками, каждая из которых расщеплена на восемь делянок, перед рандомизацией может быть представлен в следующем виде:

00	00	01	01	10	10	11	11
$PQRS_0$	$PQRS_0$	$PQRS_1$	$PQRS_1$	$PQRS_1$	$PQRS_1$	$PQRS_0$	$PQRS_0$
PQT_0	PQT_1	PQT_0	PQT_1	PQT_0	PQT_1	PQT_0	PQT_1
RST_0	RST_1	RST_1	RST_0	RST_1	RST_0	RST_0	RST_1

Взаимодействие $PQRS$ смешивается с контрастом AB целой делянки, тогда как PQT и RST смешиваются с репликами целой делянки. Входящие в такой план 64 комбинации условий опытов образуют полуреплику плана 2^7 (т. е. план 2^{7-1}), определяемую тождественным соотношением $I=ABPQRS_0$. Процедура получения комбинаций условий опытов, которые определяются каким-либо тождественным соотношением, разработана Аддельманом.

Дисперсионный анализ результатов приведенного выше плана имеет структуру, показанную в табл. 6.28.

Таблица 6.28

Структура дисперсионного анализа результатов

Источник изменчивости	Ст. св.
$A, B, AB + PQRS$	3
PQT, RST	2
ошибка целой делянки	
$APQT + BRST, ARST + BPQT$	2
$P, Q, R, S, T, PQ, PR, PS, PT, QR, QS, QT, RS, RT, ST$	15
$AP, AQ, AR, AS, AT, BP, BQ, BR, BS, BT, PRT, PST, QRT, QST, ABT, APT, AQT$	10
$ART, AST, BPT, BQT, BRT, BST$	13
$ABS + PQR, ABR + PQS, ABQ + PRS, ABP + QRS, APQ + BRS, APR + BQS, APS + BQR, ARS + BPQ, AQS + BPR, AQR + BPS$	10
ошибка расщепленной делянки	
$ABPT + QRST, ABQT + PRST, ABRT + PQST, ABST + PQRT, APRT + BQST, AQST + BPRT, APST + BQRT, AQRT + BPST$	8
Сумма:	63

В этой таблице опущены все взаимодействия пяти факторов и взаимодействия более высоких порядков. Оценки ошибок целой и расщепленной делянок получаются по множествам смешанных взаимодействий четырех факторов, так как весьма вероятно, что этими взаимодействиями можно пренебречь. Если известно, что все или часть взаимодействий трех факторов или пары таких взаимодействий пренебрежимо малы, они могут быть присоединены к взаимодействиям, используемым для оценивания ошибки эксперимента.

В табл. 6.29 представлена часть каталога двухуровневых полных и дробных факторных планов со смешиванием эффектов в расщепленных делянках.

Таблица 6.29

Часть каталога факторных планов 2^7 со смешиванием эффектов в расщепленных делянках

Номер плана	Число целых делянок	Число расщеплен делянок	Факторы целой делянки	Факторы расщепленной делянки	Генераторы положительных соотношений	Генератор смешивания
1	4	4	A, B	P, Q, R, S	ABPQR	PQR
2	4	8	A, B	P, Q, R, S, T	ABPQRS	PQRS
3	4	16	A, B	P, Q, R, S, T, U	ABPQRST	PQT
4	4	32	A, B	P, Q, R, S, T, U, V	ABPQRSTU	QRT
5a	4	32	A, B	P, Q, R, S, T, U, V	ABPQRSTU	QSU
5b	4	32	A, B	P, Q, R, S, T, U, V, W	ABPQRSTUW	PRUV
6	4	4	A, B	P, Q, R, S	ABPQRS	
7	8	8	A, B	P, Q, R, S, T	ABPQRS	
8	8	8	A, B	P, Q, R, S, T, U	ABPQRS	
9	8	8	A, B	P, Q, R, S, T, U, V	ABPQRS	
10	8	8	A, B	P, Q, R, S, T, U, V, W	ABPQRS	
11	8	8	A, B	P, Q, R, S, T, U, V, W	ABPQRS	
12	8	8	A, B, C	P, Q, R, S	ABCPQR	
13	8	8	A, B, C	P, Q, R, S, T	ABCPQRS	
14	8	8	A, B, C	P, Q, R, S, T, U	ABCPQRS	
15	8	8	A, B, C	P, Q, R, S, T, U, V	ABCPQRS	
16	8	8	A, B, C	P, Q, R, S, T, U, V, W	ABCPQRS	
17a	8	8	A, B, C	P, Q, R, S, T, U, V	ABPQRS, ACPST	
17b	8	8	A, B, C	P, Q, R, S, T, U, V	ABPQRS, ACPSTU	
18	8	8	A, B, C	P, Q, R, S, T, U, V, W	ABPQRS, ACPSTU	
19	8	8	A, B, C, D	P, Q, R, S	ABPQRS, ACPSTU, W	
20	8	8	A, B, C, D	P, Q, R, S, T	ABPQRS, ACPSTU, W	
21	8	8	A, B, C, D	P, Q, R, S, T, U	ABPQRS, ACPSTU, W	
22	8	8	A, B, C, D	P, Q, R, S, T, U, V	ABPQRS, ACPSTU, W	
23a	8	8	A, B, C, D	P, Q, R, S, T, U, V	ABPQRS, ACPSTU, W	
23b	8	8	A, B, C, D	P, Q, R, S, T, U, V	ABPQRS, ACPSTU, W	

Номер плана	Число целых делянок	Число расщепл. делянок	Факторы целой делянки	Факторы расщепленной делянки	Генераторы взаимодействующих соотношений	Генератор смешивания
24	8	16	A, B, C, D	P, Q, R, S, T, U, V, W	ABCD, PQRSTUW, APQRS, BPQTU, CPRUV	PQR PQR QT PRT RSF PQ
25	16	4	A, B, C	P, Q, R	ABCRS	
26	16	4	A, B, C	P, Q, R, S	ABFQR, ACPST	
27	16	4	A, B, C	P, Q, R, S, T	ABFQRS, ACPQTU	
28	16	8	A, B, C	P, Q, R, S, T, U	ABFQRS, ACPQTU	
29	16	8	A, B, C	P, Q, R, S, T, U, V	PQRSTUW, APQRS, BPQTU, CPRUV	
30	16	8	A, B, C	P, Q, R, S, T, U, V, W	ABCFQR, ACPST, BQSC, DPRTV	
31	16	4	A, B, C, D	P, Q, R	PQRSTUW, APQRS, BPQTU, CPRUV	
32	16	4	A, B, C, D	P, Q, R, S	ABCFQR, ACPST, BQSC, DPRTV	
33	16	4	A, B, C, D	P, Q, R, S, T	PQRSTUW, APQRS, BPQTU, CPRUV	
34	16	8	A, B, C, D	P, Q, R, S, T, U	ABCFQR, ACPST, BQSC, DPRTV	
35а	16	8	A, B, C, D	P, Q, R, S, T, U, V	PQRSTUW, APQRS, BPQTU, CPRUV	
35б	16	8	A, B, C, D	P, Q, R, S, T, U, V, W	ABCFQR, ACPST, BQSC, DPRTV	
36	16	16	A, B, C, D	P, Q, R, S, T, U, V, W	PQRSTUW, APQRS, BPQTU, CPRUV	

Генератор взаимодействий, смешанных с эффектами целой делянки.

Условия целой делянки определяются комбинациями n_1 (=2, 3, 4) двухуровневых факторов, а условия расщепленной делянки — комбинациями уровней n_2 (=3, 4, ..., 8) двухуровневых факторов, причем $n_1 + n_2 = n$ (=5, 6, ..., 12). В некоторых из этих планов комбинации условий целой делянки повторяются, в других — нет. Планы, в которых эти

условия не повторяются, получены путем смешивания некоторых взаимодействий высоких порядков факторов расщепленной делянки с некоторыми или даже со всеми эффектами целой делянки. Смешивание такого типа приводит в результате к дробной реплике плана 2^n . Для многих таких дробных реплик число опытов целой делянки оказывается недостаточным, чтобы обеспечить оценивание всех главных эффектов и эффектов парных взаимодействий факторов целой делянки, а также достоверное оценивание ошибки эксперимента на целой делянке. Однако даже в случае, когда не удастся оценить ошибку целой делянки, значительный интерес представят сведения об относительных величинах эффектов целой делянки. Все эти планы позволяют найти все главные эффекты расщепленной делянки и эффекты парных взаимодействий при условии, что можно пренебречь взаимодействиями трех и более факторов. Некоторые из таких планов допускают также оценивание ряда взаимодействий трех факторов, если можно пренебречь всеми остальными такими взаимодействиями и взаимодействиями более высоких порядков.

Планы, в которых условия целой делянки повторяются, получены путем смешивания некоторых эффектов взаимодействий высоких порядков факторов расщепленной делянки с репликами целой делянки, а в некоторых случаях также с некоторыми или даже со всеми эффектами целой делянки. Планы, в которых эффект взаимодействия расщепленной делянки смешивается только с репликами целой делянки, являются полными планами. Планы, в которых некоторые взаимодействия факторов расщепленной делянки смешиваются с репликами целой делянки, а другие смешиваются с эффектами целой делянки, являются дробными планами. Планы, включающие повторение целой делянки, позволяют найти все главные эффекты и эффекты парных взаимодействий для целой делянки, а также все главные эффекты и эффекты парных взаимодействий для расщепленной делянки. Кроме того, они позволяют найти все парные взаимодействия между одним фактором целой делянки и одним фактором расщепленной делянки. Возможности оценивания эффектов взаимодействий трех факторов различны для разных планов.

Общие выводы

Подведем некоторые итоги

Дробные реплики находят широкое применение при получении линейных моделей. Целесообразность их применения возрастает с ростом количества факторов. В табл. 6.19 показано, что при исследовании влияния 15 факторов можно в 2048 раз сократить число

опытов, применяя реплику большой дробности (16 опытов вместо 32768). Эффективность применения дробных реплик зависит от удачного выбора системы смешивания линейных эффектов с эффектами взаимодействия, а также от умелой стратегии экспериментирования в случае значимости некоторых взаимодействий. Априорные сведения о взаимодействиях могут оказать большую услугу экспериментатору.

При построении дробных реплик используют следующее правило: для того чтобы сократить число опытов при введении в планирование нового фактора, нужно поместить этот фактор в вектор-столбец матрицы, принадлежащий взаимодействию, которым можно пренебречь.

Реплики, которые используются для сокращения опытов в 2^m раз, где $m=1, 2, 3, 4, \dots$, называются регулярными. Они пользуются большой популярностью, так как позволяют производить расчет коэффициентов уравнения так же просто, как и в случае полного факторного эксперимента.

При применении дробных реплик линейные эффекты смешиваются с эффектами взаимодействий. Чтобы определить систему смешивания, нужно знать определяющие контрасты и генерирующие соотношения. Определяющим контрастом называется символическое обозначение произведения любых столбцов, равное +1. Чтобы определить, какие взаимодействия смешаны с данным линейным эффектом, нужно умножить определяющий контраст на этот линейный эффект и получить генерирующие соотношения. Например, если имеются следующие генерирующие соотношения: $x_1=x_2x_3$, $x_2=x_1x_3$ и $x_3=x_1x_2$, то определяющий контраст будет $1=x_1x_2x_3$.

Эффективность реплики зависит от системы смешивания. Реплики, у которых линейные эффекты смешаны с взаимодействиями наивысшего порядка, являются наиболее эффективными, так как обладают наибольшей разрешающей способностью.

Для освобождения линейных эффектов от взаимодействий первого порядка можно использовать метод «перевала». Смысл метода в добавлении новой реплики, все знаки которой противоположны исходной реплике.

С ростом числа факторов быстро увеличивается число реплик различной дробности. Эти реплики характеризуются обобщающими определяющими контрастами, которые получаются перемножением по два, по три и т. д. исходных определяющих контрастов.

Мы научились строить полные и дробные факторные эксперименты. Теперь необходимо научиться их реализовывать.

7. Планирование, подготовка и проведение эксперимента

7.1 Методология и классификация экспериментальных исследований

Методология экспериментальных исследований – это общая структура (проект) эксперимента.

Включает следующие этапы:

1. Разработка плана – программы эксперимента, это:

- наименование темы исследования,
- рабочая гипотеза,
- методика эксперимента,
- перечень необходимых материалов, приборов, установок,
- список исполнителей,
- календарный план работ,
- смета на выполнение эксперимента.

Иногда дополнительно включают работы по конструированию и изготовлению приборов, аппаратов и др.

2. Оценка измерений и выбор средств измерений. Средства измерения могут быть выбраны стандартные или изготовлены специально для эксперимента. Проверка средств измерений.

3. Проведение эксперимента (этапы традиционного эксперимента, включая математическое планирование). В методике эксперимента подробно проектируют процесс проведения эксперимента:

- составляют последовательность проведения операций наблюдений и измерений;
- описывают каждую операцию с учетом выбранных средств;
- контролируют качество операций, чтобы при минимальном количестве измерений обеспечить повышенную надежность и заданную точность;
- разрабатывают форму журнала для записи результатов наблюдений и измерений;
- выбирают методы обработки и анализа экспериментальных данных, включая математические.

Наиболее важной составной частью научных исследований являются эксперименты. Это один из основных способов получить новые научные знания. Более двух третей всех трудовых ресурсов науки затрачивается на эксперименты. В основе экспериментального исследования находится эксперимент, представляющий собой

научно поставленный опыт или наблюдение явления в точно учитываемых условиях, позволяющих следить за его ходом, управлять им, воссоздавать его каждый раз при повторении этих условий. От обычного, обыденного, пассивного наблюдения эксперимент отличается активным воздействием исследователя на изучаемое явление.

Основной целью эксперимента является проверка теоретических положений (подтверждение рабочей гипотезы), а также более широкое и глубокое изучение темы научного исследования.

Различают эксперименты естественные и искусственные.

Естественные эксперименты характерны при изучении социальных явлений (социальный эксперимент) в обстановке, например, производства, быта и т.п. Искусственные эксперименты широко применяются во многих естественнонаучных исследованиях. В этом случае изучают явления, изолированные до требуемой степени, чтобы оценить их в количественном и качественном отношении.

Иногда возникает необходимость провести поисковые экспериментальные исследования. Они необходимы в том случае, если затруднительно классифицировать все факторы, влияющие на изучаемое явление вследствие отсутствия достаточных предварительных данных. На основе предварительного эксперимента строится программа исследований в полном объеме. Экспериментальные исследования бывают лабораторные и производственные. Лабораторные опыты проводят с применением типовых приборов, специальных моделирующих установок, стендов, оборудования и т.д. Эти исследования позволяют наиболее полно и доброкачественно, с требуемой повторяемостью изучить влияние одних характеристик при варьировании других. Лабораторные опыты в случае достаточно полного научного обоснования эксперимента (математическое планирование) позволяют получить хорошую научную информацию с минимальными затратами. Однако, такие эксперименты не всегда полностью моделируют реальный ход изучаемого процесса, поэтому возникает потребность в проведении производственного эксперимента. Производственные экспериментальные исследования имеют целью изучить процесс в реальных условиях с учетом воздействия различных случайных факторов производственной среды. Пассивные производственные эксперименты заключаются в сборе данных и анализе случайных отклонений от заданных параметров процесса. В активных экспериментах изменения параметров процесса заранее планируют и задают.

7.2. Планирование эксперимента

Рассмотрим основные этапы планирования экспериментов. При планировании эксперимента необходимо сделать следующее:

1. Проанализировать все относящиеся к изучаемому объекту данные, в том числе и данные из литературных источников, с помощью одного из вариантов метода множественной регрессии (достаточно много книг посвящено анализу несбалансированных данных прошлых экспериментов). Иногда (вероятно, в одном случае из четырех) результаты такого анализа окажутся весьма полезными при планировании дальнейшей экспериментальной работы.

2. Записать все факторы, которые предполагается варьировать, их диапазоны изменения и число уровней, назначаемое для каждого из них.

3. Перечислить все отклики, которые желательно измерять, с указанием имеющихся сведений о точности измерения каждого из них.

4. Составить матрицу влияния, отводя строку для каждого фактора из упомянутых в п. 2 и столбец для каждого отклика из п. 3. Каждый элемент такой матрицы должен содержать все имеющиеся сведения о влиянии соответствующего фактора на тот или иной отклик.

5. Указать (или высказать суждение), эффекты каких факторов не являются аддитивными и выписать соответствующие потенциальные парные взаимодействия.

6. Оценить допустимое количество опытов (с отличающимися условиями проведения экспериментов).

7. Проверить, превышает ли допустимое количество опытов число оцениваемых параметров, определяемое из пп. 2 и 5. Если нет, то невозможно изучить влияние выбранных факторов даже при варьировании их всего лишь на двух уровнях каждый.

8. Проанализировать возможности эксперимента, в котором большинство факторов варьируется на двух уровнях и лишь некоторые — на трех. При проведении такого анализа необходимо найти подмножество полного факторного плана типа $2^n 3^m$, которое позволило бы получить желаемые оценки с избыточными степенями свободы, необходимыми для изучения данных. Эта избыточность должна быть по крайней мере не меньше 8 и может составлять от 20 до 60 и более.

9. После построения плана тщательно проверить его с целью выявления нереализуемых или заведомо плохих опытов. Если таких опытов окажется несколько, следует ограничить диапазоны изменения

некоторых факторов или даже вместо одного плана составить и применить два или более частных плана.

10. В случае, когда используется план с группировкой и/или если некоторые факторы будут иметь случайные уровни (уровни случайно выбираются из некоторой совокупности), необходимо составить таблицу фиктивного дисперсионного анализа для выбранного плана. С ее помощью надо установить, достаточно ли число степеней свободы для суждения о каждом эффекте.

11. Целесообразно использовать все сведения, имеющиеся об объекте исследования, которые могут оказаться полезными для его изучения. Следует стремиться к рандомизации всех неконтролируемых воздействий на объект.

12. Если сырье для проведения опытов поступает постепенно, необходимо иметь уверенность в том, что будет накоплен его излишек для повторения опытов, для реализации последующих перспективных опытов, а также для наведения порядка в смешивании эффектов.

13. Такая же уверенность необходима и в отношении прогнозируемой продолжительности эксперимента и необходимой рабочей силы. Вы окажетесь в чрезвычайно затруднительном положении, если все ваши материальные средства, время и сырье будут затрачены при реализации *одного* плана с получением итоговых выводов в конце всего эксперимента. Поэтому следует резервировать от трети до половины своих ресурсов для последующей доработки.

14. Целесообразно повторить опыты, результаты которых представляются сомнительными.

Перечисленные рекомендации ни в коей мере не исключают необходимости общей *технической* подготовки и продумывания эксперимента, что признают целесообразными многие экспериментаторы. Подразумевается, что эти рекомендации должны прийти на смену старым представлениям о проведении эксперимента с поочередным варьированием факторов. Отказавшись от этих представлений, можно выиграть в общности и точности результатов.

План опытов составляют в виде таблицы, столбцы аргументов которой характеризуют серии опытов, а строка — количество опытов, общие затраты времени и труда. Такая таблица 7.1 показана при проведении эксперимента по исследованию свойств почвы.

Проведенные расчеты дают возможность построить календарный график опытов и определить денежные затраты на исследование. Календарный график опытов указывает, какие серии опытов следует провести в намеченные сроки. При построении такого графика необходимо принять во внимание затраты времени на проявление

осциллограмм, полевую обработку опытных данных, возможные перерывы из-за непогоды и т.д.

Календарные сроки назначают так, чтобы каждая серия опытов проводилась в предельно сжатый, точно ограниченный срок. Это нужно для того, чтобы дополнительные факторы были возможно более неизменными, что особенно важно для полевых исследований, так как иначе разброс точек опытов будет значительно больше и может стать таким, при котором результаты нельзя будет сопоставить.

Если календарный график показывает, что сроки исследования недопустимо растягиваются, необходимо решить, как их сократить — сузить ли исследование или понизить точность и надежность. Здесь все зависит от целей исследования. Календарные сроки можно сократить, если одновременно осуществлять (под единым руководством) опыты различных серий. В приведенном примере можно вести исследование сразу по обоим типам почв, это сократит наполовину сроки исследования, но потребуется удвоить комплект оборудования и соответственно увеличить количество работников.

В некоторых случаях графическое представление отдельных достаточно разветвленных частей исследования дает ясное представление о деталях методики и общего плана исследования. В качестве примера на рисунке 7.1 показана схема разбора пробы корнеплодов для определения качества механизированной уборки.

В денежные затраты на исследование включают оплату труда при проведении опытов, затраты на оборудование, материалы, на обработку опытных данных и составление общего отчета по исследованию.

Таблица 7.1

Планирование опытов, затрат времени и труда

Тип почвы	Влажность	Наладка плуга	Количество опытов при степени загрузки лемехов								Всего опытов	Общие затраты времени, ч	Общие затраты труда, чел.-ч
			0										
			1	2	3	4	5	6	7				
Обыкновенный чернозем	Нормальная	Неизменная	3	3	3	3	3	3	3	3	24	34	238
			1	1	1	1	1	1	1	1	8	11	77
Светло-каштановая	75% от нормальной	Неизменная	3	3	3	3	3	3	3	3	24	34	238
			1	1	1	1	1	1	1	1	8	11	77
			3	3	3	3	3	3	3	24	34	238	
			1	1	1	1	1	1	1	8	11	77	
	Итого		14	14	14	14	14	14	14	112	158	1106	

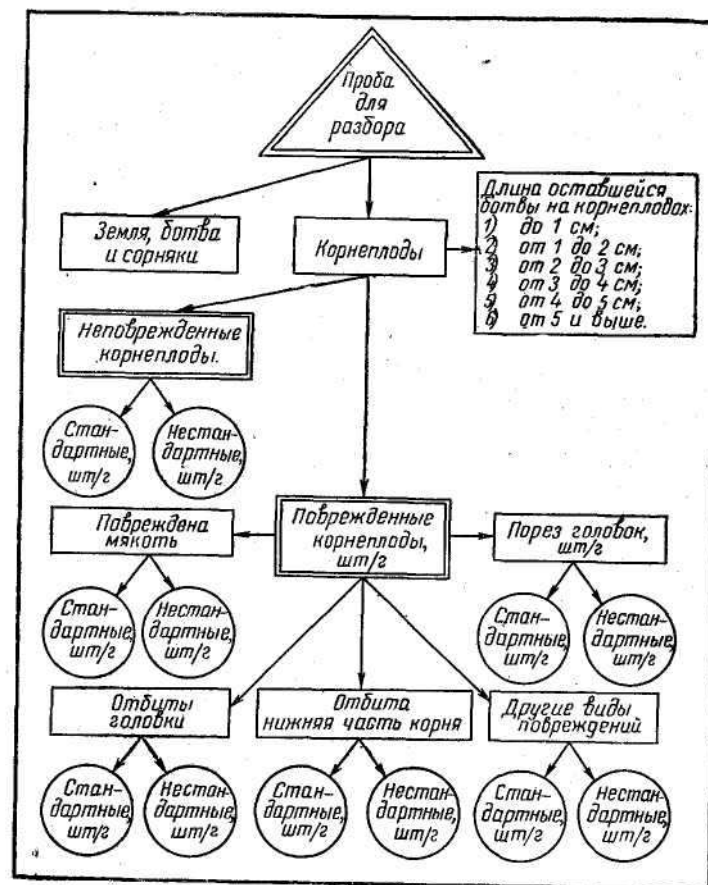


Рис. 7.1. Схема разбора пробы корнеплодов для определения качества механизированной уборки.

7.3. Подготовка к опытам

После того как установят рабочую гипотезу и разработают методику и план опытов, тщательно подготавливаются к их проведению. Разрабатывают лабораторные или полевые журналы, приобретают, производят, просматривают и калибруют приборы, инструменты и т. д., подготавливают материалы, объект и полевые участки.

Журнал заранее оформляют в соответствии с методикой и планом опытов так, чтобы, раскрыв его, можно было сразу понять, что и в какой последовательности надо делать. Измерениям, проводимым в одной из серий опытов, отводят не менее одной страницы или разворота журнала. Не рекомендуется записывать на эти же страницы (даже если там и остается свободное место) результаты других серий опытов. В заголовке таблицы измерений указывают дату опытов, объект измерений, основные приборы и оборудование, а также некоторые общие условия, при которых проводились измерения (состав и состояние почвы или температура окружающего воздуха, барометрическое давление и др.). Если отдельные измерения в течение одного опыта повторяются, для них отводят отдельные графы. Все графы данной серии опытов нумеруют. Последовательность граф в журнале должна соответствовать наилучшей последовательности измерений.

Если измерения в опыте проводят несколько человек одновременно, все они записывают результаты в специальные записные книжки, причем сразу же после каждой записи или после того, как выведут среднюю по ряду записей, сообщают руководителю данные измерений и немедленно заносят их в общий журнал. Таким образом, несколько участников одновременно проводимых измерений должны записывать результаты также в заранее разграфленные записные книжки, причем форма записей должна представлять часть формы общего журнала с обязательной датой и нумерацией опытов.

В журнале помещают все проводимые в опыте прямые (непосредственные) измерения и отметки; кроме того, если позволяют размеры журнала и удобство обработки данных, помещают графы для результатов посредственных измерений. Приведем формы полевого и лабораторно-полевого журналов (табл. 7..2).

Таблица 7.2

Полевой журнал		Динамометр		Агрегат		Агрегат		Агрегат					
Дата опытов _____		№ почвенных проб _____		_____		_____		_____					
Участок _____		_____		_____		_____		_____					
№ опыта	Степень затупления лемехов	№ динамометра, граммы	Длина гона, м	Время прохода гона, мин-сек	Глубина вспашки, см			Ширина захвата плуга, см			Производительность за час работы, га	Отметки	
					средняя	максимальная	минимальная	средняя	максимальная	минимальная			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	

Журнал лабораторно-полевых опытов		Осциллограф				
Дата опытов _____		Агрегат _____				
Барометрическое давление _____		_____				
Температура воздуха в тени _____		_____				
№ опыта	Высота препятствия, см	Форма препятствия	Передача	Статическое давление в шинах колес, кг/см ²	№ осциллограммы	Отметки
1	2					

Желательно, чтобы журнал имел прочный переплет. Следует все записи (по 1 крайней мере, прямых измерений и отметок) вести в одном журнале. Если отметки нельзя разместить в графе 1 примечаний, отведите для них специальные страницы.

Относительно подготовки оборудования для проведения опытов трудно дать какие-либо конкретные советы, так как оно может быть самым разнообразным. При подготовке оборудования обеспечивают полную надежность и безотказность действий приборов и механизмов, а также необходимую точность измерений.

При установке приборов и оборудования для измерений следует учитывать как удобство оперирования и отсчетов, так и возможность воздействия на приборы окружающей среды (нагрев от солнца или батареей парового отопления; наведение блуждающих токов от телевизионных станций и т. д.). При визуальных отсчетах шкалы приборов должны быть хорошо освещены и находиться в положении, исключающем параллакс. Дополнительные детали (например, штепсели, гири, осциллографическая бумага) размещают в строго определенных местах для удобства пользования во время измерений. Положение исследователя, измеряющего или управляющего приборами, должно быть возможно более естественным, не вызывающим утомления. При проведении опытов надо соблюдать технику безопасности труда участников измерений. Все приборы следует устанавливать правильно и устойчиво и, если требуется, с соответствующими амортизационными устройствами. Установка приборов не должна влиять на исследуемый технологический процесс или конструкцию. Перед опытами аппаратуру необходимо опробовать.

Динамограммы, фотографии, различные измерения и отметки необходимо нумеровать. Порядок нумерации устанавливают заранее. Весьма удобна нумерация, состоящая из сокращенной даты и номеров основного опыта и документа. Например, запись 3.7. 12. 2 означает, что 3 июля по основному опыту № 12 получен документ № 2.

7.4. Анкета для сбора априорной информации

Прежде чем приступать к проведению экспериментов, необходимо formalизовать сведения, имеющиеся об объекте исследования. Для этого можно воспользоваться анкетой, приведенной ниже.

Постановка задачи, выбор параметров оптимизации

1. Краткое описание процесса, объекта.
2. Формулировка цели исследования (если задач несколько — проранжировать их по степени важности).
3. Выбор параметров оптимизации (откликов).

Заполните следующую таблицу, включив в нее все возможные отклики

Номер отклика	Название	Размерность	Область определения	Точность	Примечание

4. Желаемый результат. Число и точность.
5. Какой результат будет считаться отличным, хорошим, удовлетворительным, неудовлетворительным.

Выбор факторов

1. Список всех «подозреваемых» факторов, которые могут влиять на процесс.
2. Список факторов, включаемых в реальный эксперимент.
3. Существуют ли возможности установления значения фактора на любом заданном уровне?
4. Сохраняются ли заданные значения уровней в течение опыта?
5. Могут ли некоторые комбинации уровней факторов привести к остановке процесса (например, взрыв, нетехнологичность и т. д.)?

Число опытов

1. Желаемое число опытов, ограничения на число опытов.
2. Желаемый срок проведения исследования.
3. Примерная длительность одного опыта.
4. Стоимость и затраты труда при проведении одного опыта серии.
5. Желаемое число уровней для одного фактора.
6. Возможность выполнения параллельных опытов и их желаемое число.
7. Возможность проведения параллельных измерений.
8. Желаемая стратегия проведения опытов (например, по одному в день и т. д.).

Учет априорной информации

1. Условия и результаты, достигнутые при изучении аналогичных процессов.
2. Результаты предварительного эксперимента и данные (литературные и собственные) о величине ошибки эксперимента.
3. Взаимодействия факторов.

В следующем разделе приведен конкретный пример постановки задачи, в котором использованы некоторые части этой анкеты.

7.5. Реализация плана эксперимента

К проведению опытов необходимо тщательно подготовиться, собрать опытную установку, проверить и прокалибровать приборы, подготовить исходное сырье, составить специальный журнал. Журнал заранее оформляют в соответствии с методикой и планом опытов так, чтобы была ясна последовательность действий. Первую страницу можно посвятить выбору цели исследования и параметрам оптимизации, с указанием их размерностей. Желательно перечислить все параметры, которые могут служить характеристиками процесса и указать, какая между ними существует корреляция. Если же сведения о корреляции отсутствуют, целесообразно подсчитать коэффициенты парной корреляции, проверить их значимость и выделить группу некоррелированных параметров. На второй странице перечислить факторы и поместить таблицу уровней факторов и интервалов варьирования. Не забудьте указать единицы измерения факторов! Для матрицы планирования удобно отвести разворот журнала, чтобы имелась возможность дополнить ее до расчетной матрицы, записать повторные опыты и примечания.

Чтобы облегчить работу лаборанта и исключить ошибки при выборе условий опыта, в рабочей матрице планирования целесообразно проставлять не только кодовые значения факторов, но и натуральные.

При составлении рабочей матрицы планирования необходимо оставить место для столбцов, в которых отмечаются даты постановки опытов и фамилии лаборантов, если опыты проводят несколько человек. Имея перед собой план опытов, необходимо подсчитать количество исходного сырья и заранее его подготовить. Желательно, чтобы сырье было однородное. Если требование однородности выполнить невозможно, нужно заблаговременно определить количество различных партий сырья и соответствующим образом разбить матрицу планирования на блоки. Отдельные страницы нужно отвести для расчетов, которые необходимы для определения количеств всех компонентов реакции и т. п., а также для анализа результатов эксперимента. Все расчеты должны сохраняться до окончания работы.

Исследователь должен быть обеспечен необходимой вычислительной техникой и принадлежностями для вычерчивания графиков.

При проведении опытов необходимо полностью соблюдать разработанную методику. Никогда не следует изменять методику в ходе исследования, ее можно лишь дополнять или, прекратив исследование, разработать новую и начать опыты вновь.

Если серия намерений началась, надо закончить ее быстро. Это даст возможность учесть систематические ошибки и лучше представить измерениями закономерность явления. Если измерения прерывают из-за неисправностей аппаратуры на длительное время, надо, устранив их, снова подготовиться к измерениям и всю серию измерений выполнить сначала.

Тот, кто записывает результат измерений, должен все свое внимание сосредоточить на точности отсчетов и правильности записей.

Нельзя произвольно изменять результаты измерений (записывать не то, что показывает прибор, а что кажется правильным), необоснованно отбрасывать некоторые измерения, переносить точки опытов после их проведения и т.д.

Как бы ни были неожиданны результаты, например опыты могут опровергнуть теоретические построения, которые исследователь считает незыблемыми, все исследование должно быть объективным от начала до конца.

Записи в журнале должны быть четкими и ясными. Надо заносить в примечания все появляющиеся при опытах и начальной обработке мысли, соображения, доводы за и против, отдельные интересные факты и др. О большом значении таких заметок говорилось уже ранее. Следует стремиться к тому, чтобы результаты каждого опыта обрабатывать первоначально сразу же после его проведения. В этих случаях необходимо выделить счетчика, который сразу же с максимальной точностью проводил бы все необходимые расчеты по только что полученным опытными данным. Если это невозможно, надо ежедневно подводить приближенные итоги опытов. Лучше всего результаты тут же наносить на график функциональной зависимости, чтобы видеть общую закономерность развития явления. Такое подведение итогов, представляющее собой первичный контроль, в какой-то степени гарантирует правильность и результативность исследования.

Систематическая обработка опытных данных — залог успеха. Следует предостеречься от излишней торопливости, когда, стремясь наверстать упущенное, исследователь спешно (без обработки и контроля) записывают множество измерений, «накручивают» динамограммы, делают десятки снимков. В итоге такой «работы» исследование может, оказаться безрезультатным из-за допущенных и своевременно не исправленных ошибок.

Если требуются более точные пояснения характера данной кривой, то тут же, в лаборатории или в поле, осуществляют фотокиносъемку, поясняющую физическую основу записи, или проводят

дополнительные опыты для установления плотности почв или смещения деталей и т. п. кратковременные отметки, результаты которых также кодируют и записывают в журнал. *Руководитель исследования (исследователь) ни в коем случае не должен рассчитывать только на свою память — все, заслуживающее внимания, должно быть записано.*

Особые трудности возникают в тех случаях, когда объекты исследования территориально разъединены, например исследования проводятся одновременно на пяти-шести полях. Необходимо стремиться к тому, чтобы ежедневно получать сводки. Для успешного подведения итогов измерений следует разработать подробные коды и, если необходимо, карты. Когда переданы, например, результаты измерений на участке *b* поля 2, то записывающий должен знать, где находится участок и кто проводил эти измерения.

Какие же можно сделать выводы по результатам начальной обработки данных опытов? Довольно часто бывает так, что точки перегибов кривых «нашупываются» труднее, чем это кажется вначале. Тогда нужно перегруппировать, сдвинуть опыты, а иногда и провести дополнительные.

Иногда опытами устанавливают, что принятая методика является недостаточно полной. Например, при исследовании высева семян дисковыми аппаратами в первых же опытах может быть выявлено, что необходимо изучить работу дисков с большими, чем это принято в методике, отверстиями. Возможно также, что понадобится исследовать влияние новых факторов, ранее считавшихся дополнительными. В таких случаях принятую методику надо дополнять в ходе самого исследования, принимая во внимание влияние этих дополнений на план опытов, на календарные сроки работы и затраты.

Могут появиться бракованные опыты, резко выходящие за пределы остальных. Прежде чем характеризовать опыт как бракованный, необходимо выяснить, почему он резко отличается от остальных: правильно ли велись отсчеты или исказились регулировки и вышли из строя измерительные приборы, а может быть, резко изменились дополнительные факторы, которые должны были оставаться неизменными. Если при внимательном рассмотрении причиной резкого отличия результатов является одна из перечисленных, опыт следует повторить при условиях, гарантирующих его от грубой ошибки (промаха). Записи по новому опыту надо вести заново, не уничтожая записи ошибочного опыта; последние надо выделить, например взять в скобки, так чтобы при необходимости можно было их прочесть. Это требование нужно соблюдать потому, что иногда опыты,

вначале кажущиеся ошибочными, впоследствии оказываются правильными.

Бракованные опыты могут быть и из-за ошибочности рабочей гипотезы или методики исследования. Если при повторении опыта в условиях, гарантирующих от промаха, получится неожиданный результат, значит брак возник по одной из этих причин.

Ошибочность рабочей гипотезы выясняется, если продолжение опытов дает результаты, отличные от рабочей гипотезы, но закономерно располагающиеся. Здесь прежде всего необходимо установить физико-механические или биологические основания ошибочности принятого варианта рабочей гипотезы и соответствие принятой методики новой закономерности развития явления. Если физико-механические или биологические основания новой закономерности установлены, а принятая методика (может быть, с дополнениями) обеспечивает получение результатов с достаточной точностью, опыты следует продолжать. Иным должно быть решение, если результаты опытов нельзя привести к какой-либо закономерности (конечно, с учетом неизбежного разброса точек). В этих случаях на основе полученных данных следует критически рассмотреть принятую методику и провести, если понадобится и окажется возможным, поисковые опыты. При ошибочности методики исследование в большинстве случаев прерывают и продолжают только после того, как выработают новую методику и снова подготовятся к опытам.

Пример 1. В качестве примера приведем оформление журнала при оптимизации процесса получения сульфадимизина.

Страница 1

Планирование эксперимента при оптимизации процесса получения сульфадимизина

Цель исследования: определение оптимальных условий процесса конденсации сульгина с ацетилацетоном в присутствии уксусной кислоты.

Параметры, характеризующие процесс: y_1 — выход сульфадимизина по сульгину, %, y_2 — качество сульфадимизина.

Формулировка задачи оптимизации. Достижение максимального выхода сульфадимизина, качество которого удовлетворяет требованиям фармакопеи: y_1 — параметр оптимизации ($y_1 \rightarrow 100\%$), y_2 — ограничение.

Качество продукта определяется по процентному содержанию сульфадимизина в получаемом продукте и по его температуре плавления. Согласно требованиям фармакопеи содержание основного вещества в получаемом продукте должно быть не менее 99%, а

температура плавления должна находиться в пределах 196—200° С, т. е. $y_2 \geq 99\%$, $196^\circ \text{C} < y_2 < 200^\circ \text{C}$.

Страница 2

Факторы, определяющие процесс: \bar{x}_1 — время реакции, час; \bar{x}_2 — содержание ацетилацетона в реакционной массе, %; \bar{x}_3 — содержание уксусной кислоты в реакционной массе, %; \bar{x}_4 — температура реакционной массы, °С; \bar{x}_5 — качество ацетилацетона, %; \bar{x}_6 — качество сульгина, %.

Выбор варьируемых факторов. Принято решение изменять в опытах первые три фактора. Качество ацетилацетона и сульгина решено поддерживать постоянным (таким, как на действующем производстве) $\bar{x}_5=90\%$; $\bar{x}_6=98\%$. Температура реакционной среды является производной состава и давления. Поэтому она, если не применять специальных способов воздействия на температуру, не является независимой величиной и не может служить в качестве фактора. Однако температуру необходимо контролировать в течение всех опытов.

Страница 3

Выбор технологии. Сульгин загружается одновременно с ацетилацетоном и уксусной кислотой. Реакция проводится при перемешивании реакционной смеси и непрерывном отгоне воды.

Необходимые анализы. Анализ исходного сырья: ацетилацетона, сульгина, уксусной кислоты (следует описание методик). Анализы получаемых продуктов: сульфадимизина в осадке, сульфадимизина в фильтрате, сульгина в фильтрате (следует описание методик).

Описание экспериментальной установки. Опыты проводятся на лабораторной установке, состоящей из стеклянной конической колбы емкостью 250 мл, снабженной металлической якорной мешалкой и обратным холодильником. Температура реакционной массы измеряется термомпарой, подключенной к электрическому потенциометру, и непрерывно записывается на картограмму. Колба обогревается электрической баней, наполненной вазелиновым маслом. Температура в бане автоматически регулируется с помощью реле и контактного термометра и поддерживается около 160° С.

Страница 4

Выбор основного уровня и интервалов варьирования. Для того чтобы выбрать уровни факторов, следует собрать и проанализировать литературные и заводские данные. По заводскому регламенту процесс проводится при следующих условиях: $\bar{x}_1=27$ час, $\bar{x}_2=4\%$, $\bar{x}_3=16\%$. При этом $y_1=84\%$.

Опубликованные данные и сведения из отчетов (априорная информация).

Влияние времени реакции (x_1). Данные об оптимальном времени реакции в лабораторных условиях противоречивы. Так, в отчете № 1 указано, что опыты проводились при $\bar{x}_1=21$ час, затем время уменьшили до 12 час. Уменьшение времени не снизило существенно выход реакции. В отчете № 2 описываются опыты с различным временем: 18, 24 и 30 час. Наилучший выход получен при $\bar{x}_1=24$ час.

Влияние избытка ацетилацетона (x_2). Данные о влиянии избытка ацетилацетона от стехиометрического соотношения также противоречивы. В одном отчете указано, что содержание ацетилацетона сверх 10% является нецелесообразным, в другом оптимальным считается 40% избытка ацетилацетона.

Влияние уксусной кислоты (x_3). Вопрос о влиянии процентного содержания уксусной кислоты специально не исследован. Считается, что x_3 целесообразно поддерживать около 16—17%. Предполагается, что это растворитель и его концентрация может изменяться в широких пределах.

На основании анализа имеющихся сведений решено выбрать следующие уровни и интервалы варьирования факторов (табл. 7.3)

Таблица 7.3

Факторы	Уровни			I	Размерность
	-1	0	+1		
\bar{x}_1	16	18	20	2	час
\bar{x}_2	20	24	28	4	%
\bar{x}_3	12	15	18	3	%

Страница 5



Расчет по стехиометрическим соотношениям на 12,5 г ацетилацетона:

$$\frac{100-214}{12,5-z} = \frac{214 \cdot 12,5}{100} = 26,7 \text{ г};$$

ацетилацетона — 12,5 г, сульгина — 26,7 г.

Расчет ацетилацетона с избытком 20%: 12,5+12,5·0,2=15 г и т. д.

Страница 6

Таблица 7.4

Матрица планирования и результаты эксперимента

Номер опыта в матрице	Случайный порядок реализации опытов	Дата проведения опытов *	x ₁		x ₂		x ₃		y ₁ , %	
			код	г	код	г	код	г	повторные опыты	средний результат
1	2	10/III	-	16	-	20	-	12	80,23	81,08
	9	5/IV							81,93	
2	6	24/III	+	20	-	20	-	12	86,50	85,65
	13	14/IV							84,80	
3	1	8/III	-	16	+	28	-	12	82,45	82,27
	15	21/IV							82,10	
4	7	27/III	+	20	+	28	-	12	89,50	90,40
	10	6/IV							91,30	
5	3	12/III	-	16	-	20	+	18	85,10	84,95
	16	27/IV							84,80	
6	8	1/IV	+	20	-	20	+	18	90,30	89,95
	14	16/IV							-	
7	14'	17/IV							89,60	
	4	15/III	-	16	+	28	+	18	85,60	85,25
8	12	12/IV							84,90	
	5	20/III	+	20	+	28	+	18	88,02	88,25
	11	9/IV							88,48	

* Начало проведения всех опытов в 8 ч. В таблице необходимо указать фамилии лаборантов по сменам. Для каждого опыта дать картограмму температуры.

Страница 7

y ₂ , %		y ₂ , °C		Примечания		
повторные опыты	средний результат	повторные опыты	средний результат	начало кипения	начало помутнения	выпадение осадка
94,2	97,05	196	196,5	8 ч 45 мин	20 ч 20 мин	20 ч 40 мин
99,9		197		8 ч 38 мин	20 ч 18 мин	20 ч 35 мин
99,6	99,80	197	196,5	8 ч 38 мин	20 ч 20 мин	20 ч 40 мин
100,0		196		8 ч 40 мин	20 ч 23 мин	20 ч 43 мин
99,2	99,60	195	195,5	8 ч 32 мин	20 ч 40 мин	20 ч 55 мин
100,0		196		8 ч 30 мин	20 ч 45 мин	21 ч
99,8	99,85	196	196,5	8 ч 20 мин	20 ч	20 ч 32 мин
99,9		197		8 ч 25 мин	20 ч 15 мин	21 ч
99,5	99,65	197	197,5	8 ч 25 мин	19 ч	19 ч 15 мин
99,8		198		8 ч 25 мин	19 ч 05 мин	19 ч 18 мин
99,6	99,65	196	196,0	8 ч 30 мин	20 ч 10 мин	20 ч 35 мин
-		-		При кипении из колбы сильно выбрасывало жидкость **		
99,7		196		8 ч 20 мин	20 ч	20 ч 20 мин
99,5	99,55	197	196,5	8 ч 25 мин	18 ч 15 мин	18 ч 35 мин
99,6		196		8 ч 28 мин	18 ч 45 мин	19 ч
99,5	99,60	197	197,0	8 ч 35 мин	20 ч 45 мин	21 ч
99,7		197		8 ч 32 мин	21 ч	21 ч 45 мин

** Опыт повторить.

Имея такую таблицу, можно приступить к обработке экспериментальных данных.

Каждая горизонтальная строка матрицы — это условия опыта. Условия опытов чрезвычайно разнообразны. Ведь мы занимаемся планированием многофакторного эксперимента, когда все факторы изменяются одновременно. Приступая к планированию эксперимента, мы должны отказаться от привычного однофакторного эксперимента, который проводится по принципу «изменяй один фактор, а прочие держи постоянными».

Мы хотим заниматься исследованием сложных многофакторных систем и понимаем, что однофакторный эксперимент нам не поможет. У. Р. Эшби во «Введении в кибернетику» писал: «Тот факт, что в течение столетий могли принимать такую догму, как «изменяйте факторы по одному», показывает, что ученые занимались в основном исследованием систем, допускающих этот метод, ибо в сложных системах он часто неприменим по существу».

Проанализируем, в чем состоит недостаток однофакторного эксперимента и почему им нецелесообразно пользоваться при исследовании многофакторных систем. При однофакторном экспе-

рименте, варьируя одним фактором и стабилизируя все прочие на произвольно выбранных уровнях, экспериментатор получает зависимость параметра оптимизации только от одного фактора и определяет локальный оптимум. Далее он повторяет аналогичную процедуру для второго, третьего и k -то фактора. В результате длительной и кропотливой работы, требующей много средств и времени, опытные данные представляются десятками графиков, которые в сущности имеют иллюстративный характер.

За время эксперимента могут происходить изменения в аппаратуре, сырье и т. д. Все это вносит изменения в результаты эксперимента, вследствие чего данные многих опытов являются несопоставимыми. В планировании эксперимента разработана четкая стратегия экспериментирования. Экспериментатор может минимизировать число опытов, пользуясь шаговым принципом и дробным планированием.

Имеются способы борьбы с неконтролируемым дрейфом, вызванным изменением аппаратуры, сырья и т. п. (об этом мы расскажем вам в этой разделе). Все это не предусмотрено в однофакторном эксперименте.

Давайте посмотрим, что значит однофакторный эксперимент при исследовании semifакторной системы. Итак, экспериментатор хочет исследовать влияние семи факторов на некоторый параметр оптимизации и решил проводить однофакторный эксперимент. Для того чтобы построить кривую, обычно берут четыре-пять экспериментальных точек. Возьмем четыре точки. Необходимое количество опытов при реализации всевозможных комбинаций равно $N=4^7=16384$. Совершенно ясно, что такое количество опытов реализовать невозможно. Значит, экспериментатор произвольно отбросит очень многие комбинации и реализует небольшую часть опытов, изменяя факторы по одному при постоянных значениях прочих факторов. Тогда естественно возникнет вопрос, как будут выглядеть кривые, если прочие факторы заставить на другом уровне? Несомненно, кривые изменятся. Перебрать все комбинации — значит поставить 16384 опыта.

На предыдущих страницах мы рассказывали вам о шаговом принципе исследования поверхности отклика и о дробном факторном эксперименте. Все эти приемы и методы предлагаются экспериментатору для разумной минимизации числа опытов.

Нам пришлось сделать довольно большое отступление. Возвратимся к матрице планирования.

Одновременное изменение всех факторов вносит в условия опытов большое разнообразие. Разнообразие увеличивается с ростом числа факторов.

Обратите внимание на табл. 6.16. В опыте № 1 все факторы находятся на нижних уровнях. Это значит, что опыт проводится при следующих условиях; \tilde{x}_1 — соотношение между NaOH и диэтилкарбаминоилхлоридом 1:1; \tilde{x}_2 — соотношение между пиперазином и диэтилкарбаминоилхлоридом 1 : 1; \tilde{x}_3 — время выдержки, 3 час; \tilde{x}_4 — температура, 20° С; \tilde{x}_5 — время прилива диэтилкарбаминоилхлорида, 20 мин,

В опыте № 2 первые два фактора поддерживаются на верхних уровнях, а все остальные — на нижних. В опыте № 3 на верхних уровнях находятся x_3 и x_4 и т. д. В последнем опыте все факторы, кроме x_5 , находятся на верхних уровнях.

В результате такого многообразия условий получаются различные значения параметра оптимизации. Так, наименьшее значение в матрице — 45,3%, а наибольшее — 64,8%. Эта разница весьма ощутима и можно сделать вывод, что условия опыта № 5 лучше, чем условия опыта № 6.

Но всегда ли легко определить, что один опыт лучше другого? Неправильно утверждать, что условия опыта № 3 более выгодны с точки зрения величины параметра оптимизации, чем опыта № 4 ($y_3=48,1$, $y_4=46,0$). Экспериментаторы, вооруженные статистическими методами, поступают осторожно. Они должны проверить, значимо ли отличаются результаты опытов № 3 и № 4 друг от друга. Интуитивное мнение является чрезвычайно слабым указанием на возможное превосходство опыта № 3. Нужны объективные оценки. Прежде всего вам должна быть известна ошибка опыта, которая может быть столь большой, что разница в выходе потонет на ее фоне. И, напротив, ошибка может иметь столь малую величину, что разница в 2,1% окажется значимой.

Если известна ошибка опыта, то значимость различий двух средних можно проверить с помощью f -критерия (критерия Стьюдента) по формуле

$$t = \frac{\bar{y}_1 - \bar{y}_2}{s \sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}}}$$

где \bar{y}_1 — среднее значение выхода в одном опыте, \bar{y}_2 — среднее значение выхода в другом опыте, s — ошибка опыта (рассматривается случай, когда ошибки для первого и второго опыта близки одна к

другой), n_1 — количество наблюдений в первом опыте, n_2 — количество наблюдений во втором опыте.

Эта формула предназначена для сравнения средних значений двух малых выборок с равными дисперсиями. Проверка значимости ведется по табулированным значениям t -критерия.

Так, если в нашем случае $s=1$, количество параллельных опытов одинаково и равно двум, то

$$t = \frac{2,1}{1 \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}}} = 2,1.$$

Число степеней свободы равно $n_1+n_2-2=2$. Табличное значение t -критерия для $f=2$ и 5%-ного уровня значимости равно 4,3. Это означает, что вероятность того, что при 2 степенях свободы значение величины t будет больше по абсолютной величине чем 4,3, равна 0,05. Поскольку экспериментальное значение t меньше табличного, то с вероятностью $P=1 - \alpha=0,95$ можно считать, что разницы между результатами двух опытов нет.

А теперь познакомимся с вычислением ошибки опыта, или, как ее часто называют, ошибки воспроизводимости.

7.6. Ошибки параллельных опытов

Каждый эксперимент содержит элемент неопределенности вследствие ограниченности экспериментального материала. Постановка повторных (или параллельных) опытов не дает полностью совпадающих результатов, потому что всегда существует ошибка опыта (ошибка воспроизводимости). Эту ошибку и нужно оценить по параллельным опытам. Для этого опыт воспроизводится по возможности в одинаковых условиях несколько раз и затем берется среднее арифметическое всех результатов. Как известно, среднее арифметическое \bar{y} равно сумме всех n отдельных результатов, деленной на количество параллельных опытов n

$$\bar{y} = \frac{y_1 + y_2 + \dots + y_n}{n} = \frac{\sum_{1}^n y_q}{n}.$$

Отклонение результата любого опыта от среднего арифметического можно представить как разность $y_q - \bar{y}$, где y_q — результат отдельного опыта. Наличие отклонения свидетельствует об изменчивости, вариации значений повторных опытов. Для измерения этой изменчивости чаще всего используют *дисперсию*. Как нам известно, дисперсией называется среднее значение квадрата отклонений

величины от ее среднего значения. Дисперсия обозначается s^2 и выражается формулой

$$s^2 = \frac{\sum_{1}^n (y_q - \bar{y})^2}{n - 1},$$

где $(n-1)$ — число степеней свободы, равное количеству опытов минус единица. Одна степень свободы использована для вычисления среднего.

Корень квадратный из дисперсии, взятый с положительным знаком, называется средним квадратическим отклонением, стандартом или квадратичной ошибкой

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{1}^n (y_q - \bar{y})^2}{n - 1}}.$$

Стандарт имеет размерность той величины, для которой он вычислен. *Дисперсия и стандарт* — это меры рассеяния, изменчивости. Чем больше дисперсия и стандарт, тем больше рассеяны значения параллельных опытов около среднего значения.

Рассказывая о расчете среднего значения, мы употребили такую формулировку: среднее арифметическое равно сумме всех n отдельных результатов, деленной на количество параллельных опытов n .

Такая формулировка может вызвать у вас некоторые размышления. Действительно, исследователь, имеющий математико-статистическую подготовку, может дополнить эту формулировку, и она будет выглядеть следующим образом: среднее арифметическое равно сумме всех n отдельных результатов, деленной на n , если они имеют нормальное распределение.

Например, наличие резко отклоняющихся результатов (так называемых грубых наблюдений) свидетельствует о нарушении закона нормального распределения. При наличии грубых наблюдений нужно сначала их исключить, а затем подсчитывать среднее арифметическое и дисперсию.

Далее мы остановимся на этом вопросе подробнее.

Надо всегда следить, чтобы не нарушались необходимые условия выполнения той или иной операции. Иначе мы рискуем принять ошибку за истину.

Ошибка опыта является суммарной величиной, результатом многих ошибок: ошибок измерений факторов, ошибок измерений параметра оптимизации и др. Каждую из этих ошибок можно, в свою очередь, разделить на составляющие.

Ошибки классифицируют по различным признакам. В качестве примера одной из возможных схем классификации ошибки измерения приведем схему, изображенную на рис. 7.2, которую предложил Ю.В.Кельница.

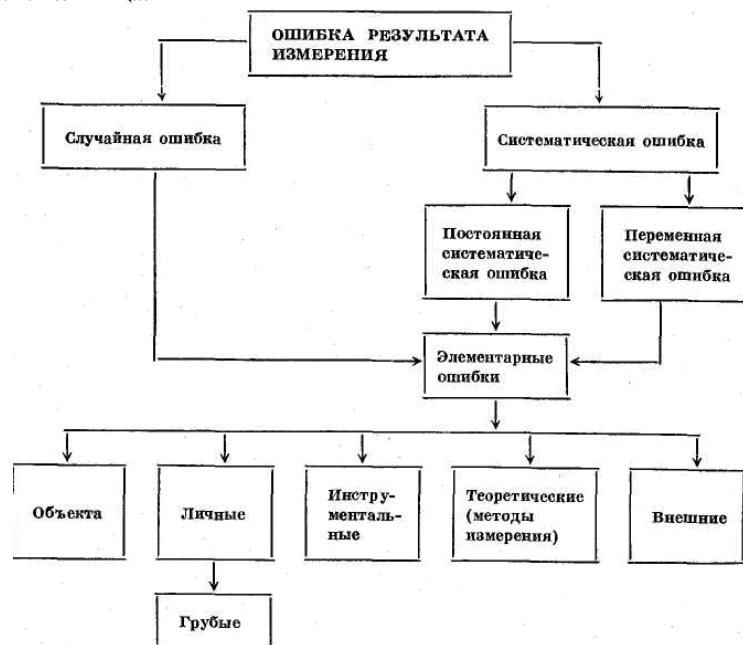


Рис.7.2. Схема классификации ошибки измерения

Как нам известно, все ошибки принято разделять на два класса: систематические и случайные. Систематические ошибки порождаются причинами, действующими регулярно, в определенном направлении. Чаще всего эти ошибки можно изучить и определить количественно. Систематические ошибки находят, калибруя измерительные приборы и сопоставляя опытные данные с изменяющимися внешними условиями (например, при градуировке термомпары по реперным точкам, при сравнении с эталонным прибором). Если систематические ошибки вызываются внешними условиями (переменной температуры, сырья и т. д.), следует компенсировать их влияние. Как это делать, мы покажем ниже. Случайными ошибками называются те, которые появляются нерегулярно, причины возникновения которых неизвестны и которые невозможно учесть заранее.

Систематические и случайные ошибки состоят из множества элементарных ошибок. Для того чтобы исключить инструментальные ошибки, следует проверять приборы перед опытом, иногда в течение опыта и обязательно после опыта. Ошибки при проведении самого опыта возникают вследствие неравномерного нагрева реакционной среды, разного способа перемешивания и т. п.

При повторении опытов такие ошибки могут вызвать большой разброс экспериментальных результатов.

Как мы уже знаем, очень важно исключить из экспериментальных данных грубые ошибки, так называемый брак при повторных опытах. Ни в коем случае нельзя вносить поправки произвольно. Для отброса ошибочных опытов существуют правила.

Для определения брака используют, например, критерий Стьюдента

$$\frac{y - \bar{y}}{s} \geq t.$$

Значение t берут из таблицы t -распределения Стьюдента. Опыт считается бракованным, если экспериментальное значение критерия t по модулю больше табличного значения.

Пример 2. Обратимся к конкретному примеру. При исследовании процесса коррозии четыре повторных опыта показали следующие значения скорости коррозии: 3,580, 2,370, 2,710 и 2,761 мг/см²·час

Результат первого опыта поставлен под сомнение, так как он выделяется на фоне остальных трех опытов.

Исключим первый опыт из расчета и по остальным произведем вычисление среднего арифметического и стандарта

$$\bar{y} = \frac{2,370 + 2,710 + 2,761}{3} = 2,613;$$

$$s = \sqrt{\frac{(-0,243)^2 + 0,097^2 + 0,148^2}{3 - 1}} = \sqrt{\frac{0,090}{2}} \approx 0,21.$$

Если произведем проверку по критерию Стьюдента, то получим

$$\frac{3,580 - 2,613}{0,21} = \frac{0,967}{0,21} = 4,6.$$

При числе степеней свободы $f=2$ и уровне значимости 0,05 $t=4,303$. Экспериментальное значение больше табличного, поэтому сомнительный результат можно считать браком.

Можно воспользоваться еще и другими критериями.

Пусть имеется n повторных наблюдений y_1, y_2, \dots, y_n и возникает подозрение, что i -е наблюдение несовместимо с остальными.

Подсчитаем среднее значение \bar{y} и ошибку $s_{(i)}$:

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}; \quad s_{\{y\}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\bar{y} - y_i)^2}{n-1}}$$

Найдем относительное отклонение для *i*-го определения

$$r_i = \frac{y_i - \bar{y}}{s_{\{y\}} \sqrt{\frac{n-1}{n}}}$$

Если найденное значение r_i для любого *i*-го измерения не превосходит по абсолютной величине табличного значения r для выбранного уровня значимости и числа степеней свободы $f=n-2$, то можно принять гипотезу об однородности результатов наблюдений.

При больших значениях числа степеней свободы r -распределение весьма близко к нормальному распределению. В этих случаях для проверки однородности наблюдений можно пользоваться трехсигмовым критерием 3σ , полагая, что выборочная дисперсия хорошо характеризует генеральную дисперсию. Если ни одно из отклонений при большом числе измерений не превосходит по абсолютной величине 3σ , то допустимо считать все наблюдения совместимыми. Критерий r_i применим для оценки любого *i*-го наблюдения. Для оценки специально выбранных наблюдений, минимальных или максимальных, используется распределение максимального отклонения:

$$r_{\max} = \frac{y_{\max} - \bar{y}}{s_{\{y\}} \sqrt{\frac{n-1}{n}}}, \quad r_{\min} = \frac{\bar{y} - y_{\min}}{s_{\{y\}} \sqrt{\frac{n-1}{n}}}$$

В табл. 7.5 приведены значения r_{\max} (r_{\min}) для уровня значимости 0,01 и 0,05 и числа степеней свободы от 1 до 23.

Таблица 7.5

Значения r_{\max} (r_{\min}) для уровней значимости 0,01 и 0,05

Число степеней свободы	Уровень значимости		Число степеней свободы	Уровень значимости		Число степеней свободы	Уровень значимости	
	0,01	0,05		0,01	0,05		0,01	0,05
1	1,414	1,412	9	2,606	2,343	17	2,932	2,600
2	1,723	1,689	10	2,663	2,387	18	2,959	2,623
3	1,955	1,869	11	2,714	2,426	19	2,984	2,644
4	2,130	1,996	12	2,759	2,461	20	3,008	2,644
5	2,265	2,093	13	2,800	2,493	21	3,030	2,683
6	2,374	2,172	14	2,837	2,523	22	3,051	2,701
7	2,464	2,237	15	2,871	2,551	23	3,071	2,717
8	2,540	2,294	16	2,903	2,557			

Если рассчитанное значение r_{\max} (r_{\min}) превышает табличное, то оцениваемый результат может быть отнесен к грубым и не включаться в расчет.

Предположим, что в первом опыте по экстракционному разделению циркония и гафния получены значения параллельных опытов 12,15; 10,86; 16,00. Оценим последнее значение:

$$\bar{y} = 13,00; \quad s_{\{y\}}^2 = 6,172; \quad s_{\{y\}} = 2,48; \\ r_{\max} = \frac{16,0 - 13,0}{2,02} = 1,48.$$

Табличное значение r_{\max} для уровня значимости 0,05 и одной степени свободы равно 1,412. Наблюдение 16,00 может быть признано грубым.

Здесь показаны самые простые приемы, которыми можно пользоваться при исключении ошибочных результатов. В литературе описаны и другие приемы.

Отметим еще, что повторные опыты нельзя путать с повторными измерениями в одном опыте. Такие измерения часто делаются и являются полезными, но не могут заменить повторных опытов.

7.7. Дисперсия параметра оптимизации

Мы рассмотрели, как подсчитывается дисперсия в каждом опыте, т. е. в каждой горизонтальной строке матрицы планирования.

Матрица планирования состоит из серии опытов, и дисперсия всего эксперимента получается в результате усреднения дисперсий всех опытов. По терминологии, принятой в планировании эксперимента, речь идет о подсчете дисперсии параметра оптимизации $s_{\{y\}}^2$ или, что то же самое, дисперсии воспроизводимости эксперимента $s_{\text{воспр}}^2$.

Как мы знаем, дисперсия в каждом опыте, состоящем из n повторных наблюдений, подсчитывается по формуле

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1}$$

При подсчете дисперсии параметра оптимизации квадрат разности между значением y_q в каждом опыте и средним значением из n повторных наблюдений \bar{y} нужно просуммировать по числу опытов в матрице N , а затем разделить на $N(n-1)$.

Так мы приходим к формуле

$$s_{\{y\}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^n (y_{iq} - \bar{y}_i)^2}{N(n-1)},$$

где $i=1, 2, \dots, N$; $q=1, 2, \dots, n$.

Такой формулой можно пользоваться в случаях, когда число повторных опытов одинаково во всей матрице.

Для двух повторных опытов формула принимает совсем простой вид

$$s_{\{y\}}^2 = \frac{2 \sum_{i=1}^N (y_{i1} - \bar{y}_i)^2}{N}.$$

Дисперсию воспроизводимости проще всего рассчитывать, когда соблюдается равенство числа повторных опытов во всех экспериментальных точках. На практике часто приходится сталкиваться со случаями, когда число повторных опытов различно. Это происходит вследствие отброса грубых наблюдений, неуверенности экспериментатора в правильности некоторых результатов (в таких случаях возникает желание еще и еще раз повторить опыт) и т. п.

Тогда при усреднении дисперсий приходится пользоваться средним взвешенным значением дисперсий, взятым с учетом числа степеней свободы

$$s_{\{y\}}^2 = \frac{s_1^2 f_1 + s_2^2 f_2 + \dots + s_N^2 f_N}{f_1 + f_2 + \dots + f_N} = \frac{\sum_{i=1}^N f_i s_i^2}{\sum_{i=1}^N f_i},$$

где s_1^2 — дисперсия первого опыта, s_2^2 — дисперсия второго опыта и т. д., f_1 — число степеней свободы в первом опыте, равное числу параллельных опытов n_1 минус 1, т. е. $f_1 = n_1 - 1$; f_2 — число степеней свободы во втором опыте и т. д.

Число степеней свободы средней дисперсии принимается равным сумме чисел степеней свободы дисперсий, из которых она вычислена.

Обратим внимание на то, что будет совершена ошибка, если взять среднее значение дисперсий без учета числа степеней свободы, а также если взять среднее значение стандартных отклонений. Стандартные отклонения нужно возвести в квадрат и затем взять взвешенное среднее, как указано выше.

Случай с неравным числом наблюдений, который мы рассмотрели выше, связан с нарушением ортогональности матрицы. Поэтому здесь

нельзя использовать расчетные формулы для коэффициентов, приведенные в разделах 5 и 6.

Этот вопрос мы рассмотрели в разделе 4, когда рассказывали о расчете дисперсии адекватности.

Итак, мы имеем формулы для расчета дисперсии воспроизводимости эксперимента. Но необходимо помнить, что формулами

$$s_{\{y\}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^n (y_{iq} - \bar{y}_i)^2}{N(n-1)} \quad \text{и} \quad s_{\{y\}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N f_i s_i^2}{\sum_{i=1}^N f_i}$$

можно пользоваться только в том случае, если дисперсии однородны. Последнее означает, что среди всех суммируемых дисперсий нет таких, которые бы значительно превышали все остальные.

Одним из требований регрессионного анализа, является однородность дисперсий.

Для проверки неоднородности дисперсий нужны количественные критерии, речь о которых пойдет ниже.

7.8. Проверка однородности дисперсий

Проверка однородности дисперсий производится с помощью различных статистических критериев. Простейшим из них является критерий Фишера, предназначенный для сравнения двух дисперсий. Критерий Фишера (F -критерий) представляет собою отношение большей дисперсии к меньшей. Полученная величина сравнивается с табличной величиной F -критерия (см. приведенную ниже таблицу).

Значения F-критерия Фишера при 5%-ном уровне значимости

f_1	$f_2=1$	2	3	4	5	6	12	24	∞
1	164,4	199,5	215,7	224,6	230,2	234,0	244,9	249,0	254,3
2	18,5	19,2	19,2	19,3	19,3	19,3	19,4	19,4	19,5
3	10,1	9,6	9,3	9,1	9,0	8,9	8,7	8,6	8,5
4	7,7	6,9	6,6	6,4	6,3	6,2	5,9	5,8	5,6
5	6,6	5,8	5,4	5,2	5,1	5,0	4,7	4,5	4,4
6	6,0	5,1	4,8	4,5	4,4	4,3	4,0	3,8	3,7
7	5,5	4,7	4,4	4,1	4,0	3,9	3,6	3,4	3,2
8	5,3	4,5	4,1	3,8	3,7	3,6	3,3	3,1	2,9
9	5,1	4,3	3,9	3,6	3,5	3,4	3,1	2,9	2,7
10	5,0	4,1	3,7	3,5	3,3	3,2	2,9	2,7	2,5
11	4,8	4,0	3,6	3,4	3,2	3,1	2,8	2,6	2,4
12	4,8	3,9	3,5	3,3	3,1	3,0	2,7	2,5	2,3
13	4,7	3,8	3,4	3,2	3,0	2,9	2,6	2,4	2,2
14	4,6	3,7	3,3	3,1	3,0	2,9	2,5	2,3	2,1
15	4,5	3,7	3,3	3,1	2,9	2,8	2,5	2,3	2,1
16	4,5	3,6	3,2	3,0	2,9	2,7	2,4	2,2	2,0
17	4,5	3,6	3,2	3,0	2,8	2,7	2,4	2,2	2,0
18	4,4	3,6	3,2	2,9	2,8	2,7	2,3	2,1	1,9
19	4,4	3,5	3,1	2,9	2,7	2,6	2,3	2,1	1,9
20	4,4	3,5	3,1	2,9	2,7	2,6	2,3	2,1	1,9
22	4,3	3,4	3,1	2,8	2,7	2,6	2,2	2,0	1,8
24	4,3	3,4	3,0	2,8	2,6	2,5	2,2	2,0	1,7
26	4,2	3,4	3,0	2,7	2,6	2,5	2,2	2,0	1,7
28	4,2	3,3	3,0	2,7	2,6	2,4	2,1	1,9	1,7
30	4,2	3,3	2,9	2,7	2,5	2,4	2,1	1,9	1,6
40	4,1	3,2	2,9	2,6	2,5	2,3	2,0	1,8	1,5
60	4,0	3,2	2,8	2,5	2,4	2,3	1,9	1,7	1,4
120	3,9	3,1	2,7	2,5	2,3	2,2	1,8	1,6	1,3
∞	3,8	3,0	2,6	2,4	2,2	2,1	1,8	1,5	1,0

Если полученное значение дисперсионного отношения больше приведенного в таблице для соответствующих степеней свободы и выбранного уровня значимости, это означает, что дисперсии значимо отличаются друг от друга, т. е. что они неоднородны.

Пример 3. Пусть $s_1^2=5,14$, для $n_1=7$ и $f_1=6$; $s_2^2=0,324$ для $n_2=6$ и $f_2=5$. В данном примере отношение дисперсий равно $5,14/0,324=15,9$ при $f_1=6$ и $f_2=5$. Из таблицы отношений дисперсий для различных степеней свободы и различного уровня значимости выбираем наиболее популярный уровень значимости 0,05. В таблице по горизонтали отложены числа степеней свободы для большей дисперсии f_1 , а по вертикали — числа степеней свободы для меньшей дисперсии f_2 . Для $f_1=6$ и $f_2=5$ $F_{\text{табл}}=4,40$. Это значит: вероятность того, что экспериментальное значение F будет больше чем 4,40, равна 0,05 или 5%. Наше $F_{\text{эсп}}=15,90$. Оно значительно превышает табличное значение.

Мы проверяли гипотезу об однородности дисперсий. Наша гипотеза состояла в том, что обе группы экспериментальных данных получены

из одной и той же совокупности и дают одинаковое рассеяние. Установили, что одна дисперсия значимо отличается от другой (для выбранного уровня значимости).

Если сравниваемое количество дисперсий больше двух и одна дисперсия значительно превышает остальные, можно воспользоваться критерием Кохрена. Этот критерий пригоден для случаев, когда во всех точках имеется одинаковое число повторных опытов. При этом подсчитывается дисперсия в каждой горизонтальной строке матрицы

$$s^2 = \frac{\sum_{q=1}^n (y_q - \bar{y})^2}{n-1},$$

а затем из всех дисперсий находится наибольшая s_{max}^2 , которая делится на сумму всех дисперсий. Критерий Кохрена — это отношение максимальной дисперсии к сумме всех дисперсий

$$G = \frac{s_{\text{max}}^2}{\sum_{i=1}^N s_i^2}.$$

С этим критерием связаны числа степеней свободы $f_1=n-1$ и $f_2=N$. Гипотеза об однородности дисперсий подтверждается, если экспериментальное значение критерия Кохрена не превышает табличного значения. Тогда можно усреднять дисперсии и пользоваться формулой

$$s^2(y) = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^n (y_{iq} - \bar{y}_i)^2}{N(n-1)}.$$

Пример 4. В начале раздела, показывая, как нужно оформлять журнал, мы привели матрицу 2^3 с двумя повторными опытами. Мы сказали: с такой таблицей можно приступить к обработке экспериментальных данных. Воспользуемся этой таблицей для расчета дисперсии воспроизводимости. Перепишем ее так, чтобы было удобно производить расчет (табл. 7.6).

Дисперсия в каждом опыте равна

$$s^2 = \frac{\sum_{q=1}^2 (y_q - \bar{y})^2}{2-1} = 2(\Delta y^2).$$

Максимальная дисперсия оказалась в опыте № 4.

Экспериментальный критерий Кохрена равен $G=1,620/5,214=0,31$. Табличный критерий Кохрена равен: $G=0,68$. Экспериментальный

критерий Кохрена не превышает значения табличного. Гипотеза об однородности дисперсий подтверждается.

Таблица 7.6

Расчет дисперсии воспроизводимости

Номер опыта	Матрица планирования	y'	y''	\bar{y}	Δy	$(\Delta y)^2$	s_i^2
1	(1)	80,23	81,93	81,08	-0,85	0,722	1,444
2	a	86,50	84,80	85,65	0,85	0,722	1,444
3	b	82,45	82,10	82,27	0,18	0,031	0,062
4	ab	89,50	91,30	90,40	-0,90	0,810	1,620
5	c	85,10	84,80	84,95	0,15	0,023	0,046
6	ac	90,30	89,60	89,95	0,35	0,123	0,246
7	bc	85,60	84,90	85,25	0,35	0,123	0,246
8	abc	88,02	88,48	88,25	-0,23	0,053	0,106
$\sum_{i=1}^N (\Delta y_i)^2$						2,607	

Дисперсия воспроизводимости равна

$$s_{(y)}^2 = \frac{2 \sum_{i=1}^8 (y_{iq} - \bar{y}_i)^2}{8} = \frac{2 \cdot 2,607}{8} = 0,652.$$

Пример 5. Теперь обратимся к примеру с различным числом повторных опытов (табл. 7.7)

Таблица 7.7

Матрица планирования 2^{3-1} с различным числом повторных опытов *

Номер опыта	Матрица планирования	y^I	y^{II}	y^{III}	y^{IV}	\bar{y}	Δy^I
1	c	87,31	86,01	—	—	86,66	0,65
2	abc	92,3	91,8	—	—	92,05	0,25
3	b	87,2	88,7	87,5	88,0	87,85	-0,65
4	a	84,0	84,9	84,2	—	84,37	-0,37

*y — выход реакции, %.

Таблица 7.7 (окончание)

Номер опыта	Δy^{II}	Δy^{III}	Δy^{IV}	$(\Delta y^I)^2$	$(\Delta y^{II})^2$	$(\Delta y^{III})^2$	$(\Delta y^{IV})^2$	f
1	-0,65			0,422	0,422			1
2	-0,25			0,062	0,062			1
3	0,85	-0,35	0,15	0,422	0,723	0,122	0,022	3
4	0,53	-0,17		0,137	0,281	0,029		2

Проведем подсчет дисперсии в каждом опыте и дисперсию воспроизводимости (если не возникнет предположение, что дисперсии неоднородны).

$$s_1^2 = (0,422 + 0,422)/(2 - 1) = 0,844;$$

$$s_2^2 = (0,062 + 0,062)/(2 - 1) = 0,124;$$

$$s_3^2 = (0,422 + 0,723 + 0,122 + 0,022)/(4 - 1) = 0,429;$$

$$s_4^2 = (0,137 + 0,281 + 0,029)/(3 - 1) = 0,223;$$

$$s_{(y)}^2 = \frac{0,844 \cdot 1 + 0,124 \cdot 1 + 0,429 \cdot 3 + 0,223 \cdot 2}{1 + 1 + 3 + 2} = \frac{2,701}{7} = 0,386.$$

В данном примере не возникает предположение о неоднородности дисперсий, поскольку все они имеют одинаковый порядок.

Если возникает предположение о наличии неоднородности, следует попытаться его проверить. Для этой цели можно воспользоваться критерием Бартлета. По уже знакомой вам формуле подсчитывается дисперсия воспроизводимости

$$s_{(y)}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N f_i s_i^2}{\sum_{i=1}^N f_i}.$$

Далее находится величина

$$\frac{1}{c} \left(f \lg s_{(y)}^2 - \sum_{i=1}^N f_i \lg s_i^2 \right),$$

где

$$c = 0,4343 \left[1 + \frac{1}{3(N-1)} \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{f_i} - \frac{1}{f} \right) \right].$$

Здесь число степеней свободы равно $N-1$, где N — число сравниваемых дисперсий. При планировании эксперимента типа 2^k это число равно числу опытов в матрице.

Бартлет показал, что величина

$$\frac{1}{c} \left(f \lg s_{(y)}^2 - \sum_{i=1}^N f_i \lg s_i^2 \right)$$

приближенно подчиняется χ^2 -распределению с $(N-1)$ степенями свободы. Значимость критерия Бартлета проверяется обычным способом.

Критерий Бартлета базируется на нормальном распределении. Если имеются отклонения от нормального распределения, то проверка неоднородности дисперсий может привести к ошибочным результатам.

Пример 6. Рассмотрим следующую задачу. В четырех опытах с неравным числом повторных наблюдений получены результаты, приведенные в табл. 7.8.

Таблица 7.8

Исходные данные для расчета критерия Бартлета

Номер опыта	s_i^2	f_i	Номер опыта	s_i^2	f_i
1	3,50	4	3	5,88	3
2	4,22	5	4	11,36	3

Рассчитаем $s_{(y)}^2$, и воспользуемся критерием Бартлета, а затем ответим на вопрос, верна ли гипотеза об однородности дисперсии. По данным табл. 7.8 мы получаем:

$$\sum_{i=1}^N f_i = 15 \text{ и } s_{(y)}^2 = 5,79.$$

Находим величину c

$$c = 0,4343 \left[1 + \frac{1}{3(4-1)} \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{5} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} - \frac{1}{15} \right) \right] = 0,4850.$$

Теперь мы можем определить χ^2

$$\chi^2 = \frac{1}{0,4850} (15 \lg 5,79 - 4 \lg 3,50 - 5 \lg 4,22 - 3 \lg 5,88 - 3 \lg 11,36) = 1,567.$$

Экспериментальное значение χ^2 критерия равно 1,567. Табличное значение для трех степеней свободы и уровня значимости 0,05 равно 7,815, и мы приходим к выводу, что дисперсии однородны.

Приступать к расчету ошибки воспроизводимости, к регрессионному анализу (а также к дисперсионному анализу) можно только после того, как дисперсии выдержали проверку на однородность. Экспериментаторы часто пренебрегают такой проверкой, объясняя это трудоемкостью расчетов и сложностью критерия Бартлета.

Экспериментаторам, которым претит кропотливая работа при экспериментальных расчетах, можно предложить использование F -критерия даже в тех случаях, когда число дисперсий больше двух. Делается это следующим образом. Из всех дисперсий выделяются наибольшая и наименьшая. По F -критерию производится проверка, значимо ли они различаются между собой. Ясно, что если наибольшая и наименьшая дисперсии не отличаются значимо, то дисперсии, имеющие промежуточные значения, также не могут значимо отличаться друг от друга. Тогда всю группу дисперсий можно считать принадлежащей к единой совокупности. В таких случаях нет надобности применять критерий Бартлета.

Мы показали, как нужно проверять гипотезу об однородности дисперсий. Вы теперь знаете, какими формулами нужно пользоваться, если гипотеза об однородности дисперсий верна. А что же делать экспериментатору, если дисперсии все-таки оказались неоднородными? В таких случаях часто оказывается полезным изменение масштаба для параметра оптимизации. При этом вводится некоторая математическая функция от параметра оптимизации, например квадратный корень или логарифм.

7.9. Рандомизация

Обычно предполагается, что среднеквадратическая ошибка (стандартное отклонение) наблюдений пренебрежимо мала по сравнению со всеми обнаруженными эффектами; в противном случае считается, что она точно известна. Столь нереальные предположения были введены, чтобы сделать возможными рассуждения о факторных параметрах, их интерпретации, ограничениях на них.

Но обычно стандартное отклонение σ неизвестно, и необходимо оценить его по данным, что наиболее просто достигается дублированием наблюдений. Надлежащим образом повторенный факторный эксперимент 2^2 (или в этом случае 2^{2+r}) обладает следующими преимуществами: во-первых, получается текущая оценка стандартного отклонения σ и, во-вторых, каждый параметр оценивается с меньшей дисперсией, равной $\sigma^2/4r$. Увеличение r (числа повторений) приведет к улучшению оценки ошибки и ко все более точным оценкам параметров.

Большинство читателей понимает, что подразумевается под надлежащим дублированием. Если было обращено должное внимание на рандомизацию порядка реализаций экспериментальных условий (в данном случае четырех), то дублирование почти наверняка будет надлежащим.

Чтобы исключить влияние систематических ошибок, вызванных внешними условиями (переменной температуры, сырья, лаборанта и т. д.), рекомендуется случайная последовательность при постановке опытов, запланированных матрицей. **Опыты необходимо рандомизировать во времени.** Термин «рандомизация» происходит от английского слова random — случайный.

Рандомизация в некотором смысле гарантирует от смещений двух типов. Нерандомизированный эксперимент может привести к смещенным оценкам параметров и к смещенной оценке дисперсии ошибки. Проводимая экспериментатором проверка значимости может потерять в этом случае всякий смысл, а вычисляемые им

доверительные интервалы могут иметь смещенные центры и искаженную ширину.

Степень риска при проведении нерандомизированных испытаний или экспериментов существенно различна в разных областях науки и даже в разных лабораториях. Оказывается, что довольно значительная часть всех научных и инженерных данных (возможно, порядка 90%) собирается в условиях отсутствия рандомизации. Однако мы не можем просто забраковать все полученные данные и считать их бессмысленными.

Почему рандомизация опытов важна, мы попытаемся показать на следующем примере.

Пример 7. В табл. 7.9 приведена матрица 2^3 , полученная из матрицы 2^2 обычным способом: два раза повторен план 2^2 , причем в первых четырех опытах x_3 имеет верхнее значение, а в последних четырех опытах — нижнее значение.

Таблица 7.9

Матрица 2^3 , нерандомизированная во времени

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	y	Номер опыта	x_1	x_2	x_3	y
1	+	+	+	y_1	5	+	+	-	y_5
2	-	-	+	y_2	6	-	-	-	y_6
3	+	-	+	y_3	7	+	-	-	y_7
4	-	+	+	y_4	8	-	+	-	y_8

Допустим, что экспериментатор может поставить в первый день четыре опыта и во второй день также четыре опыта.

Можно ли опыты ставить подряд и в первый день реализовать опыты № 1, 2, 3 и 4, а во второй — 5, 6, 7 и 8? Ставя опыты подряд, вы разбиваете матрицу на две части или на два блока: в первый блок входят опыты № 1, 2, 3 и 4, во второй — № 5, 6, 7 и 8. Если внешние условия первого дня каким-то образом отличались от внешних условий второго дня, то это способствовало возникновению некоторой систематической ошибки. Обозначим эту ошибку ε . Тогда четыре значения параметра оптимизации сдвинуты на величину ε по сравнению с истинными значениями. Пусть это будут параметры, входящие в первый блок: $y_1 + \varepsilon, y_2 + \varepsilon, y_3 + \varepsilon$ и $y_4 + \varepsilon$. Однако матрица построена так, что в первом блоке значения x_3 находятся на верхнем уровне, а во втором — на нижнем уровне. Тогда при подсчете b_3 получится следующая картина:

$$b_3 = \frac{1}{8} [(y_1 + \varepsilon) + (y_2 + \varepsilon) + (y_3 + \varepsilon) + (y_4 + \varepsilon) - y_5 - y_6 - y_7 - y_8] \rightarrow \beta_3 + \frac{\varepsilon}{2},$$

где β_3 — истинное значение коэффициента при x_3 . Таким образом, возможное различие во внешних условиях смешалось с величиной линейного коэффициента b_3 и исказило это значение. В такой последовательности опыты ставить нельзя. **Опыты нужно рандомизировать во времени, т. е. придать последовательности опытов случайный характер.**

Приведем простой пример рандомизации условий эксперимента. В полном факторном эксперименте 2^3 предполагается каждое значение параметра оптимизации определять по двум параллельным опытам. Нужно случайно расположить всего 16 опытов. Присвоим параллельным опытам номера с 9 по 16, и тогда опыт № 9 будет повторным по отношению к первому опыту, десятый — ко второму и т. д. Следующий этап рандомизации — **использование таблицы случайных чисел**. Фрагмент таблицы помещен в ниже.

В случайном месте таблицы выписываются числа с 1 по 16 с отбрасыванием чисел больше 16 и уже выписанных. В нашем случае, начиная с четвертого столбца, можно получить такую последовательность:

$$2; 15; 9; 5; 12; 14; 8; 13; 16; 1; 3; 7; 4; 6; 11; 10.$$

Это значит, что первым реализуется опыт № 2, вторым — опыт № 7 и т. д.

Выбранную случайным образом последовательность опытов нарушать не рекомендуется.

Рассмотрим некоторые условия, при которых рандомизация становится более или менее необходимой.

определенно отличается от альтернативной или конкурирующей модели, то вполне возможно, что единственный опыт окажется решающим в пользу той или иной модели. Хорошие экспериментаторы иногда могут провести эксперименты лишь при незначительном различающихся условиях и при этом получить решающие доказательства, если математическое ожидание различия велико. Под большим различием понимается, конечно, такое, которое во много раз превышает стандартную ошибку. Оцененное в 1912 г. изменение в перигее Меркурия, которое не могло быть объяснено теорией Ньютона, составляло 43 с за столетие — величину, незначительную согласно большинству стандартов. Но она была в 10 раз больше ее стандартной ошибки, и этого было достаточно, чтобы отправить в тропики две экспедиции (с целью первой проверки теории относительности).

Когда мы обращаемся к великим экспериментаторам, требование рандомизации является желательным. Описываемые ими эксперименты почти всегда потрясающие; результаты должны поражать всех (или почти всех) компетентных читателей. Однако тот, кто не верит все же на слово, может спланировать и провести эксперимент, который развенчает или, наоборот, подтвердит выдвинутые утверждения. Такие исследователи делают серьезную практическую работу, а не тривиальное повторение, поскольку эксперимент, повторяемый в другой лаборатории, является более жесткой проверкой, чем любое дублирование в одной и той же лаборатории. Едва ли, однако, это делается в соответствии со статистическим каноническим несмещенности. Тем не менее в течение веков частью научного кодекса было правило, в соответствии с которым работа одного исследователя должна проверяться другими или по крайней мере несколькими исследователями.

Теперь обратимся к таким экспериментальным ситуациям, в которых рандомизация, желательная теоретически, не является решающей, необходимой и, возможно, даже не имеет смысла. Предположим, что было проведено большое число опытов (скажем, 100) с тщательной рандомизацией, а еще 100 были выполнены без такой предосторожности. Наборы данных получаются в результате похожих, но не совсем одинаковых экспериментов. Если при анализе обоих наборов различие в структуре ошибки окажется неприемлемым, то в будущем следует настаивать на рандомизации всех опытов. Возможно, часть опытов, скажем, одну четверть, следовало бы использовать для наблюдения за устойчивостью изучаемой системы. Это еще раз

напоминает о том, чего требовал Шьюхарт, когда говорил, что система постоянно должна находиться в состоянии статистического контроля.

Мы не предполагаем, что рандомизацией пренебрегают только потому, что «все, кажется, идет хорошо». Экспериментатор может и не знать, насколько в самом деле все идет хорошо, пока не будет проведено множество хорошо рандомизированных опытов. Рандомизация, вообще говоря, достаточная для обоснованности выводов, может не всегда быть необходимой. Но такой вывод требует, кроме оптимизма, еще и доказательств.

Встречается много случаев, где рандомизация затруднена, дорога и неудобна. Случайное чередование экспериментальных условий иногда вызывает недовольство исследователя. Эта реакция может означать нечто большее, чем просто естественную реакцию на неизвестный способ. Если для изучаемой системы требуется много времени для возврата в состояние равновесия после внезапного изменения какого-либо фактора, то такое изменение может понизить уровень выхода экспериментального или промышленного производства до неприемлемой величины. Точно так же, если некоторая сложная система при необходимости варьирования некоторого структурного параметра (фактора) должна быть частично демонтирована, то по всей видимости случайная вариация этого параметра окажется неприемлемой. Статистик, конечно, может приспособиться к таким трудно варьируемым факторам, используя планы с расщепленными делянками или частично иерархические планы. Однако эти планы имеют одно неприятное свойство: эффекты легко варьируемых факторов всегда определяются более точно по сравнению с эффектами трудно варьируемых факторов.

Но бывают условия, при которых ничего нельзя сделать. Экспериментаторы в сельском хозяйстве не могут получить случайную выборку по годам, сравнивая разновидности или условия культивации; иногда они не в состоянии даже получить случайной выборки семян или подопытных животных. Операторы доменных печей не могут вводить различные количества кокса для загрузки в дому случайным образом. При исследовании рака легких не назначают случайным образом сигаретную нагрузку обследуемым людям. Можно было бы привести примеры и из многих других областей.

Рандомизация, конечно, может быть проведена неправильно и даже стать катастрофической. Если один способ обработки применяется «случайно» на одном поле, а другой — на другом поле, то точность сравнений внутри поля может быть потеряна. Способ лечения,

используемый в одной клинике, обычно нельзя надежно сравнивать со способом, применяемым в другой.

Обратим внимание еще на две экспериментальные ситуации, в которых обычная рандомизация противопоказана. Если экспериментатор знает, что случайная ошибка по сравнению с эффектами и взаимодействиями, представляющими интерес, мала, если опасность дрейфа из-за неуправляемых факторов невелика и если экспериментальное оборудование таково, что одновременно можно получать только одно наблюдение, то целесообразно организовать эксперимент в такой последовательности, чтобы по возможности раньше заметить простые неаддитивности, если они существуют. Планы, реализуемые последовательно, не представляют интереса в двухфакторных задачах, но оказываются полезными, начиная с трехфакторных задач.

Если случайная ошибка мала и должен одновременно производиться только один опыт, но в противоположность обсуждаемому выше случаю может обнаружиться дрейф по множеству опытов, то некоторые последовательности реализаций опытов существенно лучше других.

Когда полезна рандомизация?

Полезность рандомизации увеличивается по мере удаления от ситуаций, описанных выше.

Таким образом, если

1) экспериментаторы могут дать только грубые качественные оценки эффектов (кратные σ — стандартному отклонению отдельного наблюдения),

2) важные эффекты имеют порядок σ ,

3) эксперименты близки к завершению,

4) исследователи низшего ранга или молодые, а то и посредственные должны получить доказательства, которые убедили бы их скептических руководителей и

5) при экспериментировании с людьми изучаются опасные альтернативы, возможно, с угрозой для жизни, то рандомизация может стать существенной частью планирования эксперимента.

В случаях 2 и 5 особенно важно сохранить статистическую независимость наблюдений, так как для достижения приемлемого значения стандартной ошибки каждого эффекта экспериментаторы опираются на закон больших чисел. Рандомизация же создает условия для статистической независимости.

Пример 8.

Федерер описывает план 2^2 , реализованный в виде четырех рандомизированных блоков по четыре опыта. Отклики определены как проценты успешного воздействия на почки, причем все они получены при одинаковом числе прививок. Рассмотрим все остатки, удалив из табл. 7.11 эффекты строк и столбцов.

Таблица 7.11

Данные Нэйка из работы Федерера для плана 2^2 в виде четырех блоков

Блок	(1)	a	b	ab	Σ n	Среднее по строке
I	64	23	30	15 ¹⁾	132	33
II	75	14	50	33	172	43
III	76	12	41	17	146	36
IV	73	33	25	10	141	35
Σ c	288	82	146	75	591	148
$\Sigma - 148$ c	140	-66	-2	-73	-1	
Средние отклонения в столбцах:	35	-16	-1	-18		
Среднее по столбцу:	72	21	36	19		37
Остатки						
	-4 ²⁾	6	-2	0 ¹⁾		
	-3	-13	8	8		
	5	8	6	-1		
	3	14	-9	-7		

¹⁾ Наблюдение пропущено; введено новое значение так, чтобы получить нулевой остаток.

²⁾ Остаток = $d_{ij} = \text{Наблюдаемое значение} - \text{Предсказанное значение} = y_{ij} - Y_{ij} = y_{ij} - [y_{..} + (y_{i.} - y_{..}) + (y_{.j} - y_{..})] = y_{ij} - y_{i.} - (y_{.j} - y_{..})$.

Например, $d_{11} = 64 - 33 - (72 - 37) = 64 - 33 - 35 = -4$.

Не заметив никаких серьезных признаков неоднородности, будем считать, что остатки отражают случайные ошибки с $(4-1) (4-1) = 1$ степенями свободы. Тогда можно оценить дисперсию ошибки через средний квадрат остатков: $823/8 = 102,9$ и стандарта отклонения ошибки $s = 10,14$. Стандартная ошибка средних по четырем наблюдениям будет равна $s\sqrt{4} = 5,07$.

Средние отклики таковы

(1)	72
<i>a</i>	21
<i>b</i>	36
<i>ab</i>	19

Анализ этих данных показывает, что вычисление эффектов, вероятно, ничего не прояснит, но если возникают в этом сомнения, следует применить к этим средним откликам алгоритм Йетса и найти для *M*, *A*, *B* и \widehat{AB} соответственно 37; -17,3; -9,3; 8,5 со стандартной ошибкой $s/\sqrt{16}=2,54$. Единственное, что с полной очевидностью следует из этого эксперимента, это то, что отклик в (1) значительно превышает отклики при трех других комбинациях. На этот раз природа ответила нам на языке главных эффектов.

Основная идея этого примера состоит в том, чтобы показать способы анализа остатков, рассматриваемых как отражение случайных флуктуаций откликов. Здесь достаточно заметить, что остатки в первом столбце вовсе не больше, чем в остальных, и, таким образом, нет необходимости в преобразовании данных для получения некоей теоретической однородности.

Второстепенным же выводом является то, что деление на главные эффекты и взаимодействие не оправдалось и что это не редкий исход экспериментальной работы. Верхние уровни варьируемых факторов устранили степень воздействия на почки, и произошло это почти равномерно.

Результаты анализа можно представить в виде схемы дисперсионного анализа, как показано в табл. 7.12.

Таблица 7.12.

Дисперсионный анализ дублированного плана 2² Федерера

Источник изменчивости	Число степеней свободы	Суммы квадратов	Средние квадраты	
Блоки	3	221	73,7	Незначим
(1) или <i>a</i> , <i>b</i> , <i>ab</i>	1	6557	6557	Значим
Среди <i>a</i> , <i>b</i> , <i>ab</i>	2	766	383	
Остаток	8 ⁴⁾	823	103	Незначим
	14 ⁴⁾	8367	(при дополнении плана)	
		8363	(по исходным данным)	

⁴⁾ Одна степень свободы утрачена, поскольку данных в табл. 7.11 было только 15 (а не 16).

В заключение отметим, что во многих ситуациях рандомизация не нужна или не желательна, в других желательна, а в третьих — абсолютно необходима. Степень необходимости рандомизации зависит от отношения величин определяемых эффектов к стандартному отклонению и от близости к завершению программы работы.

7.10. Разбиение матрицы типа 2^k на блоки

Если экспериментатор располагает сведениями о предстоящих изменениях внешней среды, сырья, аппаратуры и т. п., то целесообразно планировать эксперимент таким образом, чтобы эффект влияния внешних условий был смешан с определенным взаимодействием, которое не жалко потерять. Так, при наличии двух партий сырья матрицу 2³ можно разбить на два блока таким образом, чтобы эффект сырья сказался на величине трехфакторного взаимодействия. Тогда все линейные коэффициенты и парные взаимодействия будут освобождены от влияния неоднородности сырья (табл. 7.13).

В этой матрице при составлении блока 1 отобраны все строки, для которых $x_1x_2x_3=+1$, а при составлении блока 2 — все строки, для которых $x_1x_2x_3=-1$. Различие в сырье можно рассматривать как новый фактор x_4 . Тогда матрица 2³, разбитая на два блока, представляет собой полуреплику 2⁴⁻¹ с определяющим контрастом $1=x_1x_2x_3x_4$

Таблица 7.13

Разбиение матрицы 2³ на два блока

Блок	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	<i>y</i>
1	+	-	-	+	+	-	-	+	$y_1 + \varepsilon$
	+	+	-	-	-	-	+	+	$y_2 + \varepsilon$
	+	+	+	+	+	+	-	+	$y_3 + \varepsilon$
	+	-	+	-	-	+	+	+	$y_4 + \varepsilon$
2	+	-	-	-	+	+	+	-	y_5
	+	+	-	+	-	+	-	-	y_7
	+	-	+	+	-	-	+	-	y_7
	+	+	+	-	+	-	-	-	y_8

Предлагается для данной матрицы (табл. 7.13) рассчитать все коэффициенты и посмотреть, какие коэффициенты смешаны с эффектом сырья:

$$b_0 = \frac{1}{8} [(y_1 + \varepsilon) + (y_2 + \varepsilon) + (y_3 + \varepsilon) + (y_4 + \varepsilon) + y_5 + y_6 + y_7 + y_8],$$

$$b_0 \rightarrow \beta_0 + \frac{\varepsilon}{2};$$

$$b_1 = \frac{1}{8} [-(y_1 + \varepsilon) + (y_2 + \varepsilon) - (y_3 + \varepsilon) + (y_4 + \varepsilon) - y_5 + y_6 - y_7 + y_8],$$

$$b_1 \rightarrow \beta_1;$$

$$b_2 = \frac{1}{8} [-(y_1 + \varepsilon) - (y_2 + \varepsilon) + (y_3 + \varepsilon) + (y_4 + \varepsilon) - y_5 - y_6 + y_7 + y_8],$$

$$b_2 \rightarrow \beta_2;$$

$$b_3 = \frac{1}{8} [(y_1 + \varepsilon) - (y_2 + \varepsilon) - (y_3 + \varepsilon) + (y_4 + \varepsilon) - y_5 + y_6 + y_7 - y_8],$$

$$b_3 \rightarrow \beta_3;$$

$$b_{12} = \frac{1}{8} [(y_1 + \varepsilon) - (y_2 + \varepsilon) - (y_3 + \varepsilon) + (y_4 + \varepsilon) + y_5 - y_6 - y_7 + y_8],$$

$$b_{12} \rightarrow \beta_{12};$$

$$b_{13} = \frac{1}{8} [-(y_1 + \varepsilon) - (y_2 + \varepsilon) + (y_3 + \varepsilon) + (y_4 + \varepsilon) + y_5 + y_6 - y_7 - y_8],$$

$$b_{13} \rightarrow \beta_{13};$$

$$b_{23} = \frac{1}{8} [-(y_1 + \varepsilon) + (y_2 + \varepsilon) - (y_3 + \varepsilon) + (y_4 + \varepsilon) + y_5 - y_6 + y_7 - y_8],$$

$$b_{23} \rightarrow \beta_{23};$$

$$b_{123} = \frac{1}{8} [(y_1 + \varepsilon) + (y_2 + \varepsilon) + (y_3 + \varepsilon) + (y_4 + \varepsilon) - y_5 - y_6 - y_7 - y_8],$$

$$b_{123} \rightarrow \beta_{123} + \frac{\varepsilon}{2}.$$

Эффект сырья отразился на подсчете свободного члена b_0 и эффекта взаимодействия второго порядка b_{123} .

Аналогично можно разбить на два блока любой эксперимент типа 2^k . Главное — правильно выбрать взаимодействие, которым можно безболезненно пожертвовать. При отсутствии априорных сведений выбирают взаимодействие самого высокого порядка: $x_1x_2x_3$ для 2^3 , $x_1x_2x_3x_4$ для 2^4 , $x_1x_2x_3x_4x_5$ для 2^5 и т. д. Но если экспериментатору известно, что одно из парных взаимодействий лишено, например, физико-химического смысла, то можно пожертвовать парным взаимодействием.

В практике встречается много задач, в которых взаимодействия высокого порядка оказываются более значимыми, чем парные взаимодействия. Когда взаимодействие выбрано, в первый блок группируются все опыты, в которых это взаимодействие равно +1, а во второй, где оно равно -1.

Теперь посмотрим, как можно разбить матрицу на четыре блока. Пусть нужно поставить эксперимент 2^4 . Заведомо известно, что имеется четыре источника неоднородности, которые могут значительно исказить результаты эксперимента. При наличии четырех источников неоднородности нужно матрицу 2^4 разбить на четыре блока так, чтобы линейные эффекты были освобождены от влияния межблокового эффекта. Чтобы произвести разбиение матрицы 2^4 на четыре блока по четыре опыта в каждом, нужно выбрать три взаимодействия, которыми можно пожертвовать (число взаимодействий определяется числом степеней свободы, смешивающимися с различием между блоками: $f=4-1=3$). Два таких взаимодействия можно выбрать произвольно, а третье оказывается однозначно определенным по следующему правилу: нужно взять алгебраическое произведение первых двух выбранных взаимодействий и заменить единицей каждый множитель, стоящий в квадрате. Так, если двумя произвольно выбранными взаимодействиями являются парные x_1x_2 и x_3x_4 , то третьим будет $x_1x_2x_3x_4$. Если выбранными являются тройные $x_1x_2x_3$ и $x_2x_3x_4$, то третьим будет x_1x_4 . При разбиении матрицы 2^4 на четыре блока одно из парных взаимодействий окажется неизбежно смешанным с межблоковым эффектом.

Пусть мы выбрали для смешивания три взаимодействия: $x_1x_2x_3$, $x_2x_3x_4$ и x_1x_4 . Включаем в первый блок те опыты, которые имеют четное количество букв, одинаковых с буквами, входящими в символы трех выбранных взаимодействий (при этом удобно пользоваться кодовым обозначением матрицы с помощью латинских букв).

При разбиении на блоки принято обозначать факторы заглавными латинскими буквами. Мы будем пользоваться этими обозначениями наряду с нашими x_j .

Опыт (1), где все факторы на нижних уровнях, удовлетворяет этому условию, так как имеется 0 общих букв со всеми взаимодействиями. Опыт *bc* также удовлетворяет этому условию, так как его символ имеет две общие буквы с $x_1x_2x_3$ (*ABC*) и $x_2x_3x_4$ (*BCD*) и ни одной с x_1x_4 (*AD*).

Двамя другими, удовлетворяющими условию опытами, будут *acd* и *abd*, имеющие по две буквы со всеми взаимодействиями.

В результате получается блок 1 (табл. 7.14).

Для определения состава следующего блока выбираем какое-либо неиспользованное испытание, например *a*, и умножаем на этот символ каждый член блока 1, получаем блок 2.

Блок 1	Блок 2	Блок 3	Блок 4
(1)	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>d</i>
<i>bc</i>	<i>abc</i>	<i>c</i>	<i>bcd</i>
<i>acd</i>	<i>cd</i>	<i>abcd</i>	<i>ac</i>
<i>abd</i>	<i>bd</i>	<i>ad</i>	<i>ab</i>

Аналогичная операция проводится для определения состава блоков 3 и 4. Путем выбора неиспользованного испытания *b* получаем блок 3, используя *d* — блок 4. Запишем эту матрицу в кодовом обозначении +1 и -1 и проверим, какие взаимодействия смешаны с межблоковым эффектом.

В матрице табл. 7.14 можно видеть, что в каждом блоке для всех эффектов, за исключением смешанных, соблюдается равенство числа +1 и -1. Следовательно, межблоковый эффект отразится на подсчете b_0, b_{14}, b_{123} и b_{234} . Остальные коэффициенты регрессии освобождены от влияния источников неоднородности.

Матрицу типа 2^k можно разбить на количество блоков 2^n (n — степень двойки) при $n < k$. Так, матрица 2^3 разбивается на два блока по четыре опыта в каждом и на четыре блока по два опыта в каждом. Матрица 2^4 — на два блока по восемь опытов в каждом, на четыре блока по четыре опыта и на восемь блоков по два опыта и т. д.

Таблица 7.14

Разбиение матрицы 2^4 на четыре блока

У	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7	y_8	y_9	y_{10}	y_{11}	y_{12}	y_{13}	y_{14}	y_{15}	y_{16}
$x_1x_2x_3x_4$	+	+					+	+			+	+			+	+
$x_2x_3x_4$									+	+	+	+	+	+	+	+
$x_1x_3x_4$		+	+		+		+		+		+		+			+
$x_1x_2x_4$		+	+		+			+		+	+		+			+
$x_1x_2x_3$					+	+	+	+	+	+	+	+				
x_1x_4	+		+		+		+		+		+			+		+
x_1x_3	+			+	+			+		+	+	+	+			
x_1x_2	+	+	+	+					+	+	+	+				
x_1x_5	+		+			+		+	+		+		+			+
x_1x_6	+			+		+	+			+	+		+			+
x_4			+	+			+	+			+	+	+	+		
x_3		+	+			+	+			+	+			+	+	
x_2		+		+		+		+	+		+			+		+
x_1			+	+	+	+					+	+			+	+
x_0	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Матрица	(1)	<i>bc</i>	<i>acd</i>	<i>abd</i>	<i>a</i>	<i>abc</i>	<i>cd</i>	<i>bd</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>abcd</i>	<i>ad</i>	<i>d</i>	<i>bcd</i>	<i>ac</i>	<i>ab</i>
Блок	1	2				3				4						

7.11. Использование алгоритмов отсеивания для выделения существенных факторов.

Исследуемые объекты, как правило, характеризуются большим числом факторов, влияющих на выходную переменную. Однако степень их влияния неодинакова. В зависимости от поставленной цели (оптимизация, моделирование и пр.) часть факторов может влиять существенно, а часть—несущественно. Ниже рассмотрены примеры на задачах химической технологии, в которых алгоритмы, описанные в разделе 4, используются для отсеивания несущественных с точки зрения поставленной цели факторов.

Выбор факторов в схеме хлорирования спирта. Система технологических аппаратов колонна — холодильник определяется в первом приближении выходной переменной — плотностью продукта и шестью факторами: x_1 — расходом хлора; x_2 — расходом воды, поступающей в колонну; x_3 — расходом флегмы; x_4 — температурой в колонне; x_5 — уровнем в колонне; x_6 — расходом воды, поступающей в холодильник.

Необходимо, используя результаты опроса экспертов, выделить существенные и несущественные факторы. Мнения четырех экспертов приведены в табл. 7.20 (число экспертов уменьшено с целью упрощения примера).

Таблица 7.20.

Номер эксперта	Ранги						$t_v^3 - t_v$	T_i
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6		
1	1,5	5,0	1,5	4,0	3,0	6,0	$2^3 - 2 = 6$	0,5
2	2,0	3,0	1,0	4,5	4,5	6,0	$2^3 - 2 = 6$	0,5
3	2,0	3,0	1,0	5,5	5,5	4,0	$2^3 - 2 = 6$	0,5
4	1,5	3,5	1,5	5,0	3,5	6,0	$(2^3 - 2 + 2^3 - 2) = 12$	1,0
$\sum a_{ij}$	7	14,5	5	19	16,5	22		
d_j	-7	0,5	-9	5	2,5	8		$\sum T_i = 2,5$
d_j^2	49	0,25	81	25	6,25	64	$S(d_j^2) = 225,5$	

Общее среднее рассчитывают по формуле

$$a = \frac{1}{2} m(n + 1)$$

— общее среднее таблицы рангов, где m — число экспертов,

$$a = \frac{1}{2} \cdot 4 \cdot (6 + 1) = 14.$$

Результаты расчета отклонений d_j и квадратов отклонений d_j^2 по формулам квадрата отклонений суммарных рангов от общего среднего:

$$d_j^2 = \left(\sum_{i=1}^m a_{ij} - a \right)^2,$$

и суммы квадратов отклонений:

$$S(d_j^2) = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m a_{ij} - a \right)^2.$$

Результаты расчета отклонений d_j и квадратов отклонений d_j^2 также приведены в табл. 7.20.

Показатель дробных рангов T_i рассчитывался по формуле

$$T_i = \frac{1}{12} \sum_{v=1}^g (t_v^3 - t_v),$$

где e — число строк матрицы, содержащей связанные ранги; g — число типов связанных рангов в строке; t — количество равных рангов в i -ой строке.

Поскольку используются дробные ранги, коэффициент конкордации рассчитывался по формуле

$$W_p = \frac{\sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m a_{ij} - a \right)^2}{\frac{1}{12} m^2 (n^3 - n) - m \sum_{i=1}^e T_i}$$

$$W_p = \frac{225,5}{\frac{1}{12} \cdot 4^2 (216 - 6) - 4 \cdot 2,5} = 0,83.$$

Расчет значения χ^2 -распределения проведем по формуле

$$\chi_p^2 = m(n - 1) W_p.$$

$$\chi_p^2 = 4(6 - 1) \cdot 0,83 = 16,6.$$

Поскольку из приложения для χ^2 -распределения

$$3 \chi_{\alpha}^2 = 11,07 \quad (f = n - 1 = 6 - 1 = 5, \alpha = 0,05), \text{ то } \chi_p^2 > \chi_{\alpha}^2.$$

Значит, мнения экспертов согласованы. Можно строить гистограмму

ранжирования по $\frac{\sum a_{ij}}{i}$ (см. табл. 7.20 и рис. 7.4).

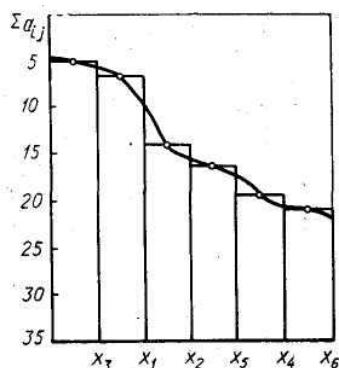


Рис. 7.4. Гистограмма ранжирования факторов в системе хлорирования спирта.

Из рисунка видно, что суммы рангов изменяются неравномерно, и поэтому одним из решений может быть признание существенными факторов x_1, x_2, x_3, x_5 и несущественными — x_4, x_6 . Однако более осторожный подход требует от исследователя изучения факторов большим количеством экспертов или исследования более тонким или менее субъективным методом (например, методом случайного баланса).

Выбор факторов при производстве синтетического каучука. С целью оценки правильности предварительных расчетов по оптимизации производства синтетического каучука, проведен опрос специалистов, работающих на этом производстве. Перечень факторов, предъявленный специалистам, приведен в табл. 7.21.

Таблица 7.21.

Перечень факторов для ранжирования	
Номер фактора	Наименование фактора
1	Относительная влажность крошки на входе в сушилку
2	pH в 6-ом аппарате
3	pH в 7-ом аппарате
4	Расход хлорида натрия
5	Расход серума в 6-ом аппарате
6	Расход серума в 7-ом аппарате
7	Температура серума
8	Дефо латекса
9	Процентное содержание масла в каучуке
10	Расход латекса-масла на машину
11	Поверхностное натяжение латекса

Задача экспертов — проранжировать 11 факторов по степени их влияния на скорость высыхания крошки каучука.

В табл. 7.22 приведена матрица рангов опроса 18-ти экспертов.

Поскольку некоторые эксперты не отдали предпочтения тем или иным факторам и присвоили им одинаковые ранги, матрица была преобразована (табл. 7.23). Смысл получения дробных рангов ясен из расчетов по данным, принадлежащим первому эксперту (первая строка табл. 7.22).

Таблица 7.22.

Перечень факторов для ранжирования

Номер эксперта	Номер фактора										
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	1	2	2	2	3	3	4	1	1	2	4
2	1	8	3	6	11	10	7	2	9	5	4
3	1	4	7	8	6	10	11	3	5	1	9
4	3	8	1	4	8	8	5	8	6	2	7
5	7	9	1	5	6	6	2	8	3	1	4
6	1	1	3	2	2	3	4	1	2	1	4
7	1	1	2	2	2	3	4	1	2	2	4
8	1	2	3	3	3	3	4	2	3	4	4
9	1	3	4	3	4	4	4	2	4	1	2
10	1	4	4	2	4	4	4	3	3	5	6
11	2	5	5	6	7	7	7	3	4	1	8
12	2	1	4	3	2	6	1	1	3	1	3
13	3	2	5	4	5	6	2	1	3	3	4
14	3	2	4	2	6	7	5	1	4	1	8
15	2	1	9	5	7	8	10	3	4	6	2
16	1	5	3	5	6	6	6	2	4	1	5
17	1	4	10	9	7	8	6	2	5	3	11
18	4	4	2	3	5	5	5	1	3	5	6

Факторы 1, 8, 9 занимают места 1, 2, 3, т. е. их ранг $(1+2+3) / 3 = 2$; факторы 2, 3, 4, 10 занимают места 4, 5, 6, 7, т. е. их ранг $(4+5+6+7) / 4 = 5,5$; и далее — $(8+9) / 2 = 8,5$, $(10+11) / 2 = 10,5$. Расчеты проводились в соответствии с алгоритмом 4.3.6

$$W_p = \frac{10\,994,0}{\frac{1}{12} \cdot 18^2 \cdot 11 \cdot 120 - \frac{1}{12} \cdot 18 \cdot 1194} = 0,324;$$

$$\chi_p^2 = 18 \cdot 10 \cdot 0,324 = 58,32;$$

$$\chi_{\alpha}^2 = 25,188 \quad (f = 11 - 1 = 10, \quad q = 0,005).$$

Таблица 7.23.

Преобразованная матрица рангов

Номер эксперта	Номер фактора											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	
1	2,0	5,5	5,5	5,5	8,5	8,5	10,5	2,0	2,0	5,5	10,5	3,4, 2,2
2	1,0	8,0	3,0	6,0	11,0	10,0	7,0	2,0	9,0	5,0	4,0	0
3	1,0	4,0	7,0	8,0	6,0	10,0	11,0	3,0	5,0	2,0	9,0	5
4	3,0	9,0	1,0	4,0	9,0	9,0	5,0	10,0	6,0	2,0	9,0	2, 2
5	9,0	11,0	1,5	6,0	7,5	7,5	3,0	10,0	4,0	1,5	5,0	4, 2, 3, 2
6	2,5	2,5	8,5	6,0	6,0	8,5	10,5	2,5	6,0	2,5	10,5	3, 5, 2
7	2,0	2,0	6,0	6,0	6,0	9,0	10,0	2,5	6,0	10,0	10,0	2, 5, 3
8	1,5	2,5	6,0	6,0	6,0	6,0	9,0	2,5	6,0	1,5	3,5	2, 2, 2, 5
9	1,0	5,5	7,0	5,5	9,0	9,0	7,0	3,5	3,5	1,0	11,0	2, 3
10	1,0	7,0	7,0	2,0	7,0	7,0	9,0	3,0	4,0	1,0	11,0	4, 2, 3
11	2,0	5,5	5,5	7,0	9,0	9,0	2,5	2,5	8,0	2,5	8,0	3, 2, 2, 2
12	2,5	2,5	10,0	8,0	5,5	11,0	2,5	1,0	5,0	5,0	7,5	2, 2, 2, 2
13	5,0	2,5	9,5	7,5	9,5	11,0	8,0	1,5	6,5	1,5	11,0	2, 2, 2, 2
14	5,0	3,5	6,5	3,5	9,0	10,0	8,0	1,5	4,0	6,0	11,0	0
15	2,0	1,0	9,0	5,0	7,0	8,0	10,0	3,0	5,0	1,5	7,0	2, 3, 3
16	1,5	7,0	4,0	7,0	10,0	10,0	10,0	3,0	5,0	3,0	11,0	0
17	1,0	4,0	10,0	9,0	7,0	8,0	6,0	2,0	5,0	8,5	11,0	2, 2, 4
18	5,5	5,5	2,0	3,5	8,5	8,5	8,5	1,0	3,5	75,0	160,5	$\Sigma T_i = 108$
Σa_{ij}	51,5	88,5	111,0	109,5	141,5	160,0	140,0	57,0	97,5	75,0	160,5	
d_j	56,5	19,5	3,0	2,5	33,5	52,0	32,0	51,0	10,5	33,0	52,5	
d_j^2	192,25	380,25	9,00	6,25	122,25	2704,00	1024,00	2601,00	110,25	1089,00	2756,25	$S(d_j^2) = 10994$

Поскольку $\chi_p^2 > \chi_{т}^2$, то принимается гипотеза о согласованности мнений экспертов. В результате анализа получено, что первые шесть мест заняли факторы 1, 8, 10, 2, 9, 4. Такое ранжирование факторов отличалось от полученного в предварительных исследованиях (ранее фактор «относительная влажность» вообще не учитывался). Новое разделение факторов на существенные и несущественные должно быть учтено при аналогичных исследованиях и проектировании новых производств.

Выбор типа сорбента по экспертным оценкам. Решалась задача выбора сорбента для извлечения ртути из отработанной серной кислоты. Для очистки отработанной серной кислоты могут быть использованы пять типов сорбентов — КУ-2 (y_1), ДК-3 (y_2), АВ-17 (y_3), АН-20 (y_4) и оксигидрид кремния (y_5). Каждый сорбент оценивается по 10-ти основным свойствам: полной обменной ёмкости (x_2), рабочей области рН (x_2), рабочей области температур (x_3), селективности (x_4), простоте выделения ртути (x_5), набуханию (x_6), удельной поверхности (x_7), механической прочности (x_8), химической стойкости (x_9), стоимостной характеристике (x_{10}).

От предыдущих задач эта отличается тем, что необходимо двойное ранжирование — и сорбентов и их свойств. Суммарная ранжировка свойств используется для расчета весов, которые в свою очередь используются для оценки типа сорбента.

Использовалась информация четырех экспертов. В табл. 7.24 приведены ранги, присвоенные экспертами каждому свойству, а также значения суммарных рангов и квадратов отклонений от среднего $a=22$.

Коэффициент конкордации $W_p = 0,741$ в соответствии с требованием

$$\chi_p^2 = m(n-1)W_p.$$

свидетельствует о согласованности мнений экспертов относительно важности свойств сорбентов. Полученная в табл. 7.24 суммарная ранжировка используется для получения весовых коэффициентов свойств по формуле

$$V_a = V_0 + \frac{y_a - y_0}{y_s - y_0} (V_s - V_0),$$

где $V_s, y_s; V_0, y_0$ — соответственно веса и суммарные ранги наиболее и наименее важного свойства.

Таблиц. 7.24

Ранжирование факторов и расчеты

Номер эксперта	Ранги				
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
1	1	5	4	2	7
2	1	8	9	2	5
3	2	7	8	1	5
4	1	6	7	2	5
Σa_{ij}	5	26	28	7	22
d_j	-17	4	6	-15	0
d_j^2	289	16	36	225	0
V_q	0,1852	0,0785	0,0616	0,1770	0,1008

Номер эксперта	Ранги				
	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}
1	8	9	6	3	10
2	10	6	3	7	4
3	10	3	6	4	9
4	10	9	4	3	8
Σa_{ij}	38	27	19	17	31
d_j	16	5	-3	-5	9
d_j^2	256	25	9	25	81
V_q	0,0185	0,0747	0,1156	0,1258	0,0543

Согласованность мнений группы экспертов относительно ранжирования типа сорбента по каждому свойству оценивалась на основании анкет с помощью коэффициента согласия W_p . В табл. 7.25 приведены суммарные ранги пяти типов сорбентов для каждого из 10-ти свойств и соответствующие им коэффициенты согласия. Оценка значимости с достаточной степенью точности может быть проведена по χ^2 -критерию. Для 10%-ного уровня значимости и числа степеней свободы $f=4$, $\chi^2_p = 7,78$. Таким образом, существует согласованность во мнениях экспертов по семи из десяти свойств, что можно считать удовлетворительным результатом.

Таблица 7.25.

Матрица суммарных рангов

Свойства сорбента	Ранги					Коэффициент согласия W_p	Критерий χ^2_p
	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5		
x_1	17	1	7	11	6	0,759	12,00
x_2	1	9	7	14	5	0,710	11,36
x_3	8	6	16	13	17	0,463	7,40
x_4	19	16	8	12	5	0,100	13,00
x_5	19	16	8	12	5	0,100	13,00
x_6	13	11	10	15	4	0,500	8,00
x_7	14	17	6	7	14	0,500	9,40
x_8	14	14	10	15	7	0,305	5,00
x_9	15	17	14	6	8	0,565	9,00
x_{10}	7	10	13	16	14	0,305	5,00

Суммарная взвешенная ранжировка сорбентов определяется в результате расчета произведения вектора-строки V_q на матрицу суммарных рангов A :

$$\|a_i\| = VA, \quad (i = 1, 2, \dots, n; \quad n = 5)$$

или

$$a_i = \sum_{q=1}^k \sum_{j=1}^m V_q a_{qj}^i$$

$$q = 1, 2, \dots, k, \quad k = 10; \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad m = 4.$$

Суммарную взвешенную ранжировку можно получить умножением последней строки табл. 7.24 на матрицу суммарных рангов (табл. 7.26). Результаты вычислений приведены в последней строке табл. 7.26.

Таким образом, по мнению данной группы экспертов для очистки отработанной серной кислоты от ртути наиболее предпочтительно использовать оксигидрид кремния.

Таблица 7.26.

Матрица суммарных рангов

Тип сорбента	Выходная переменная				
	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5
Суммарные взвешенные ранги	19,026	18,563	15,790	19,352	14,613
Результаты ранжировки типов сорбента	4	3	2	5	1

Выбор существенных факторов насыщенным дробным факторным экспериментом.

Перед тем как рассмотреть приводимый ниже пример выбора существенных факторов насыщенным дробным факторным экспериментом, приведем алгоритм насыщенного плана дробного факторного эксперимента.

Одной из целей использования математической модели является грубая оценка степени воздействия факторов на выходную переменную объекта исследования. Эта цель может быть достигнута различными методами, но всех их объединяет условие минимизации числа экспериментов. Этот критерий привел к построению насыщенных и сверхнасыщенных планов экспериментов, позволяющих разделить всю совокупность факторов на два класса: доминирующие факторы и «шумовой» фон (несущественные факторы).

Определение. Ненасыщенность, насыщенность и сверхнасыщенность планов определяются соотношением числа опытов плана эксперимента N и числа определенных параметров l :

$N - l > 0$ — ненасыщенный план;

$N - l = 0$ — насыщенный план;

$N - l < 0$ — сверхнасыщенный план.

Исходные данные. Имеется совокупность факторов, воздействующих на объект исследования. Известно, что степень влияния этих факторов на выходную переменную различна. Предлагается выделить существенные факторы с помощью минимально возможного числа экспериментов.

План эксперимента. Использование плана дробного факторного эксперимента в качестве насыщенного возможно при числе факторов $n=3$ ($N=4$), $n=7$ ($N=8$), $n=15$ ($N=16$), $n=31$ ($N=32$) и т.д. В этом случае можно получить математическую модель

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i x_i$$

и использовать критерий для отсеивания факторов.

Наличие смешанных оценок по этому плану для решения задачи отсеивания факторов не играет серьезной роли.

Расчет коэффициентов $b_0, b_1, \dots, b_n, \dots$ и оценка значимости факторов проводятся по алгоритму 5.6.2 и алгоритму дробного факторного эксперимента (ДФЭ) (в этом случае, естественно, достаточно провести параллельные опыты в одной точке).

Принятие решений. Коэффициенты, для которых t_{ip} оказалось меньше t_T ($f_0 = N_0 - 1, q = 0,05$), относят к «шумовому» фону, остальные

— считают значимыми. Иногда проверку значимости проводят по формуле:

$$|b_i| \geq t_T S_{b_i},$$

где $|b_i|$ — абсолютное значение i -го коэффициента; t_T — табличное значение критерия Стьюдента; S_{b_i} —

среднеквадратичное отклонение i -го коэффициента

$$S_{b_i} = \sqrt{\frac{s_0^2}{N}}$$

В этом случае коэффициенты, не удовлетворяющие условию $|b_i| \geq t_T S_{b_i}$, относятся к «шумовому» фону.

Теперь рассмотрим пример.

Требуется найти факторы, существенно влияющие на процесс получения металлического титана, включающий стадию хлорирования титановых шлаков. Для исследования отобраны 15 факторов: расход хлора (x_1); температура (x_2); концентрация углерода в шлаке (x_3); концентрация диоксида титана в расплаве (x_4); другие компоненты шлака ($x_5 - x_{11}$); компоненты расплава ($x_{12} - x_{15}$).

Переменной, характеризующей объект, является скорость хлорирования.

Для отбора существенных факторов применялся ДФЭ типа 2^{15-11} , содержащий 16 экспериментов (их количества достаточно для определения линейных коэффициентов и свободного члена). Уровни факторов и результаты эксперимента с двумя параллельными опытами приведены в табл. 7.27.

Коэффициенты рассчитывались по алгоритму 5.6.2. Согласно

$$S_{b_i} = \sqrt{\frac{s_0^2}{N}}$$

$$S_{b_i}^2 = \sqrt{\frac{39 \cdot 85}{16 \cdot 2}} = 1,12,$$

Тогда

$$t_T S_{b_i} = 2, 12 \cdot 1,12 = 2,37.$$

Используя условие $|b_i| \geq t_T S_{b_i}$, можно сделать вывод о незначимости факторов x_3, x_7, x_{10}, x_{14} . Таким образом, число факторов, которые можно использовать, например, для математической модели можно сократить до десяти.

Таблица 7.27.

Результаты эксперимента по отбору факторов

Номер опыта	Кодированные переменные	Компоненты шлака										Компоненты расплава				Скорость хлорирования	
		C	TiO ₂	Mg	Ca	Fe ^o	Fe ^п	FeS	Al	Mn	Ca	Fe	Na	Со _{отн}			
															QCl ₂		T
1	+	3,5	2	5,65	1,0	8,3	1	6,65	5,7	4,7	7	7	8	1:1	39,2		
2	+	750													48,0		
3	+	5,2	1	1,35	0,5	1,7	1	1,35	1,3	1,3	3	3	2	1:0,5	47,5		
4	+	800													46,60		
5	+	21,8	3	7,0	1,5	10,0	2	8,0	7,0	6,0	10	10	10	1:1,5	45,46		
6	+	11,4	2	4,3	0,5	6,6	0	5,3	4,4	3,4	4	4	0	1:0,5	43,7		
7	+														45,46		
8	+														33,4		
9	+														40,5		
10	+														48,2		
11	+														44,35		
12	+														48,70		
13	+														49,45		
14	+														92,5		
15	+														103,75		
16	+														106,75		
θ_i		8,69	3,75	1,20	28,79	8,38	-5,09	1,29	7,40	1,65	1,66	-5,12	-3,71	7,78	-0,68	-4,99	85,0
																	$s_0^2 = 39,85$

Отсевание факторов в процессе нейтрализации по плану Плаккетта – Бермана.

Перед тем как рассмотреть приводимый ниже пример по отсеиванию факторов в процессе нейтрализации по плану Плаккетта – Бермана приведем алгоритм насыщенного плана Плаккетта — Бермана.

Исходные данные те же, что и в предыдущем алгоритме.

План эксперимента и его построение. Плакеттом и Берманом были сконструированы ортогональные насыщенные планы, число экспериментов в которых кратно четырем:

$$N = 4p, p = 1, 2, \dots$$

Используя эти планы, можно исследовать объекты, имеющие $(4p - 1)$ факторов. Такие планы более выгодны, чем насыщенные планы ДФЭ, поскольку удовлетворяют условиям исследования через четыре фактора.

Алгоритм построения планов следующий. Факторы изменяются на двух уровнях: +1 и -1.

Первая строка матрицы плана задается таблицей 7.28, вторая и последующие строки получаются сдвигом всех элементов влево (или вправо) и перестановкой крайнего элемента на образовавшееся свободное место с другой стороны строки. Получаются одинаковые знаки по диагоналям матрицы. Этот процесс повторяется $(N - 2)$ раз.

Таблица 7.28.

Первые строки планов Плаккетта — Бермана

Номер опыта	Первая строка матрицы плана									
8	+	+	+	-	+	-	-			
12	+	+	+	+	+	+	-	-	+	-
16	+	+	+	+	+	+	+	-	-	-
20	+	+	+	+	+	+	+	+	-	-
24	+	+	+	+	+	+	+	+	+	-

Последняя строка плана составляется только из элементов - 1. Матрица плана имеет размерность $N \times (N - 1)$.

Построенные таким образом планы являются ортогональными и поэтому расчет коэффициентов и оценка их значимости проводится обычными методами.

Замечание 1. Иногда применяется несколько иной алгоритм построения плана, дающий тот же результат. Строка табл. 7.27 используется для построения столбца плана. Следующий столбец

получается сдвигом элементов первого столбца вниз или вверх и т. д. Последняя строка составляется из элементов — 1.

Замечание 2. Для расчета ошибки опыта s_0^2 в планах Плакетта — Бермана часто используют прием фиктивных переменных. Он заключается в том, что недостающие факторы (например, если в объекте $n=12$, а план предусматривает $n=15$, то недостающих факторов $n = 3$) заменяются фиктивными факторами. Эффекты этих факторов отличаются от нуля, если их взаимодействия значимы и ошибки измерения отсутствуют. Если считать, что величины взаимодействия факторов малы, а $b_{\phi_1}, b_{\phi_2}, \dots, b_{\phi_k} — k$ эффектов (коэффициентов) фиктивных переменных, то ошибка опыта будет определяться по формуле

$$s_0^2 = \frac{N(b_{\phi_1}^2 + b_{\phi_2}^2 + b_{\phi_k}^2)}{N - (n + 1)},$$

где N — число опытов по матрице планирования; n — число факторов; $N - (n+1)$ — число фиктивных факторов.

Переходим к рассмотрению примера.

Исследовалась возможность получения азотно-калийно-фосфорного удобрения частичной заменой поташа аммиаком при нейтрализации азотнокислой вытяжки. При исследовании последовательной нейтрализации вытяжки аммиаком и поташем особый интерес представляло выяснение степени ретроградации усвояемых форм пентоксида фосфора. Поэтому показателем процесса (y) служила степень усвояемости образующихся фосфорных соединений (процентное отношение количества водорастворимых и лимоннорастворимых форм фосфора к общему количеству фосфора в продуктах реакции). Выбраны следующие факторы: температура аммонизации, °C (x_1); продолжительность аммонизации, мин (x_2); норма аммиака (превышение от стехиометрической нормы, % (x_3); содержание примесей в исходной вытяжке, % (x_4 — x_7); температура при взаимодействии компонентов аммонизированной вытяжки с раствором карбоната калия, °C (x_8); продолжительность взаимодействия с карбонатом калия, мин (x_9); норма карбоната калия (превышение от стехиометрической нормы, %, x_{10}).

Постоянными оставались содержания в вытяжке $P_2O_5(6,9\%)$ и $CaO(11,0\%)$. Необходимо выделить существенные факторы в исследуемом процессе.

В качестве плана эксперимента использовался план Плакетта — Бермана для $N=12$, построенный в соответствии с замечанием 1 (см. выше). План приведен в табл. 7.29.

Таблица 7.29.

Результаты планирования отсеивающего эксперимента

Номер опыта	Кодированные переменные	План										Выходная переменная	\bar{y}		
		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}				
Верхний уровень		70	150	30	3,16	0,89	0,56	0,88	70	60	120				19,15
Нижний уровень		25	100	15	0	0	0	0	25	30	100				34,44
															85,08
															92,88
															90,91
															51,76
															101,33
															101,34
															98,62
															87,85
															84,49
															89,89
b_i		15,36	-2,83	-3,43	8,40	7,84	7,96	2,64	-13,23	-7,01	2,91				$s_0^2 = 1,48$

Средние значения степени усвояемости y определены по двум параллельным опытам. Ошибка опыта равна $s^2_0 = 1,48$, число степеней свободы $f_0 = 12(2-1) = 12$. Табличное значение критерия Стьюдента $t_\tau = 3,05$ ($f_0 = 12, q = 0,01$, см. приложение).

В соответствии с

$$s_{b_i} = \sqrt{\frac{s_0^2}{N}}$$

$s_{b_i} = 1,48/12,2 = 0,348$ и $t_\tau s_{b_i} = 3,05 \cdot 0,245 = 0,75$, т. е. $|b_i| > 0,73$. Таким образом, все коэффициенты оказались значимыми.

В дальнейшие исследования необходимо включить все 10 факторов.

Отсевание факторов методом случайного баланса при исследовании процесса изомеризации сульфаниламидного соединения.

Прежде чем привести пример отсеивания факторов методом случайного баланса, рассмотрим алгоритм метода случайного баланса (сверхнасыщенный план).

Исходные данные те же, что и в предыдущих алгоритмах.

В плане эксперимента по методу случайного баланса исследуемые факторы варьируются на двух уровнях — верхнем и нижнем. Для построения матрицы планирования предлагается «чистый» случайный баланс, при котором распределение уровней в столбцах осуществляется по таблице случайных чисел, или случайное смешивание двух дробных планов ПФЭ. Один из возможных планов случайного баланса (случайное смешивание ДФЭ 2^{5-1} и 2^{6-1}) приведен в табл. 7.30.

Условие

$$\sum_{u=1}^N x_u$$

должно выполняться всегда. Этот план может использоваться и для меньшего числа факторов.

Таблица 7.30.

План эксперимента

Номер опыта	План														Выходная переменная	
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	x_{11}	x_{12}	x_{13}	x_{14}	y	y^I
1	-	-	+	+	+	-	+	-	+	-	+	+	-	+	y_1	y^I_1
2	+	-	-	+	-	-	-	-	-	+	-	-	-	+	y_2	y^I_2
3	-	+	-	+	+	-	-	+	+	+	+	-	+	-	y_3	·
4	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	y_4	·
5	-	-	-	-	-	-	+	+	-	+	+	-	-	+	y_5	·
6	+	-	+	-	+	+	+	-	+	+	+	-	+	+	y_6	·
7	-	+	+	-	-	+	+	+	+	+	+	+	+	+	y_7	·
8	+	+	-	-	-	-	+	-	+	-	+	-	-	-	y_8	·
9	-	-	+	-	-	+	-	+	-	+	+	+	+	+	y_9	·
10	+	-	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-	+	+	y_{10}	·
11	-	+	-	-	+	+	-	+	-	-	-	-	-	-	y_{11}	·
12	+	+	+	-	+	-	+	-	-	-	-	-	+	-	y_{12}	·
13	-	-	-	+	+	+	-	+	+	+	+	+	+	-	y_{13}	·
14	+	-	+	+	-	-	+	+	+	+	+	-	-	-	y_{14}	·
15	-	+	+	+	-	-	+	+	+	+	+	+	+	+	y_{15}	·
16	+	+	-	+	+	+	+	-	-	-	+	-	+	+	y_{16}	y^I_{16}

Диаграммы рассеивания строят с целью выделения факторов или их взаимодействий. Выделение осуществляют визуально. Диаграммы рассеивания строят так: по оси абсцисс откладывают значения факторов для уровней «+» и «-», а по оси ординат — значения выходной переменной (рис. 7. 5.).

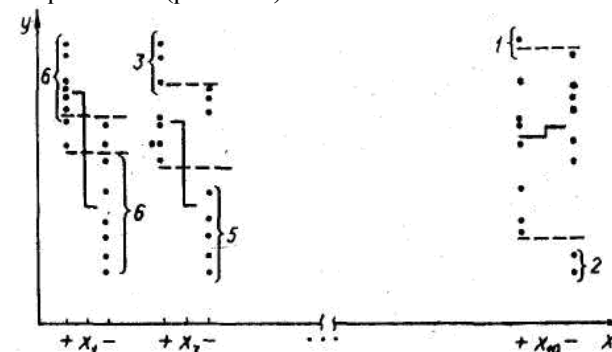


Рис. 7.5. Построение диаграмм рассеивания.

В каждом столбце x_i диаграммы рассеивания размещены все значения выходной переменной, которые разбиваются на две группы. Одна из групп соответствует тем опытам, где фактор был на нижнем уровне, другая — где фактор был на верхнем уровне.

Среди опытных данных на каждом уровне находят медиану Me . Медианой называется линия, по обе стороны которой находится одинаковое число точек. При нечетном числе точек медиана проходит через среднюю точку. Разность между медианами ΔMe двух уровней характеризует качественное влияние фактора x_i на выходную переменную. Таким образом, построение диаграммы рассеивания позволяет визуально по максимальному значению ΔMe выделить наиболее значимые факторы. Для этой же цели используют так называемые выделяющиеся точки L в нижней и верхней частях диаграммы рассеивания. Для фактора x_i их число равно $6+6=12$, для факторов x_3 и x_{10} соответственно $3+5 = 8$ и $1+2 = 3$ и т. д. На рис. 7.5 группы выделяющихся точек отмечены фигурными скобками.

Примечание. Иногда в качестве критерия значимости факторов на диаграмме рассеивания используют произведение разности между медианами на число выделяющихся точек

$$T = |\Delta MeL|.$$

Последовательное выделение существенных факторов. Для количественной оценки факторов нужно отделить значимые факторы от незначимых. Процедура выделения такова. Выбирают два-три фактора, имеющие максимальную разность между медианами или максимальное число выделяющихся точек. Строят таблицу с тремя или двумя входами. Допустим, это будут факторы x_1, x_3, x_4 (см. табл. 7.30). В клетки табл. 7.31 записывают значения выходной переменной для различных комбинаций уровней. Так, в первой клетке (слева вверху) записаны значения y_4 и y_{14} — те значения, которые получились, когда x_1, x_3, x_4 были на верхнем уровне и т. д.

Таблица 7.31.

Подготовка данных для оценки линейных эффектов

x_4	x_1+		x_1-	
	x_3+	x_3-	x_3+	x_3-
„+“	$\frac{y_4}{y_{14}}$ y_1	$\frac{y_2}{y_{16}}$ y_2	$\frac{y_1}{y_{15}}$ y_5	$\frac{y_3}{y_{13}}$ y_6
„-“	$\frac{y_6}{y_{12}}$ y_3	$\frac{y_8}{y_{10}}$ y_4	$\frac{y_7}{y_9}$ y_7	$\frac{y_5}{y_{11}}$ y_8

Вычисление линейных эффектов производят по формулам, смысл которых ясен из уравнений

$$\begin{aligned} \text{эф. } x_1 &= \frac{\bar{y}_1 + \bar{y}_2 + \bar{y}_3 + \bar{y}_4}{4} - \frac{\bar{y}_5 + \bar{y}_6 + \bar{y}_7 + \bar{y}_8}{4}; \\ \text{эф. } x_3 &= \frac{\bar{y}_1 + \bar{y}_3 + \bar{y}_5 + \bar{y}_7}{4} - \frac{\bar{y}_2 + \bar{y}_4 + \bar{y}_6 + \bar{y}_8}{4}; \\ \text{эф. } x_4 &= \frac{\bar{y}_1 + \bar{y}_2 + \bar{y}_5 + \bar{y}_6}{4} - \frac{\bar{y}_3 + \bar{y}_4 + \bar{y}_7 + \bar{y}_8}{4}. \end{aligned} \quad (A)$$

Оценки коэффициентов производят по формуле

$$b_i = \frac{\text{эф. } x_i}{2}.$$

Усреднение в клетках таблицы приходится делать потому, что в случайно организованном плане эксперимента различным комбинациям уровня соответствует различное число наблюдений.

Если есть основания к изменению выходной переменной принять гипотезу нормального распределения, то значимость эффектов можно оценить по критерию Стьюдента

$$t_p = \frac{\text{эф. } x_i \sqrt{\sum_i m_i}}{\sqrt{s_R^2}}, \quad (B)$$

где m_i — число наблюдений в i -ой клетке таблицы; s_R^2 — остаточная

дисперсия, находится как среднее по каждой $S_{R_i}^2$ для i -ой клетки таблицы; число степеней свободы $f = \sum m_i - a$, a — число среднеарифметических значений в таблице с несколькими входами.

Оценку рассеивания $S_{R_i}^2$ для каждой клетки находят относительно средних значений \bar{y}_i этой же клетки.

Оценка значимости эффектов по критерию Стьюдента вследствие громоздкости расчетов проводится не всегда.

Корректировка исходного вектора матрицы плана. После выделения эффектов проводят корректировку исходных данных матрицы плана. Для этого от всех y_N в плане эксперимента, где факторы x_i находятся на уровне «+», уменьшают на эф. X_i . Получают новый вектор результатов эксперимента y_N^I , освобожденный от влияния фактора x_i . Далее строится новая диаграмма рассеивания и

алгоритм повторяется. Таким же образом производится отсеивание эффектов парных взаимодействий.

Принятие решений. Процесс выделения существенных факторов можно закончить, если выполняется условие

$$F_p = \frac{s_r^2}{s_0^2} < F_T. \quad (f_r, f_0, q = 0,05),$$

где s_r^2 – оценка дисперсии результатов эксперимента относительно их среднеарифметического значения на r -ом шаге процедуры ; s_0^2 – ошибка опыта, полученная по нескольким параллельным наблюдениям.

Перейдем теперь к рассмотрению примера. Исследовался процесс получения сульфаниламидного соединения. Требовалось на первом этапе выделить существенные факторы с целью включения их в план второго порядка. Использовался метод случайного баланса. План эксперимента (сверхнасыщенный) составлялся как случайная выборка из полного факторного эксперимента 2^4 (табл. 7.33), в который включались 10 факторов (табл. 7.32). На первом этапе значимые факторы выделялись визуально по диаграмме рассеивания (рис. 7.6). Было выделено три фактора x_1, x_2, x_{10} (использовались медианы). Количественная оценка выделенных факторов (эффектов) проводилась с помощью таблиц с несколькими входами.

Таблица 7.32.

Параметры и факторы отсеивающего эксперимента

Номер фактора	Фактор	Нижний уровень	Верхний уровень	Единица измерения
x_1	Отношение растворителя к основному веществу	0,2	0,9	г/ч
x_2	Температура реакционной среды	130	165	°С
x_3	Время реакции (отсчет от заданной температуры)	20	80	мин
x_4	Перемешивание реакционной массы	Без перемешивания	С перемешиванием	—
x_5	Дисперсность исходного сырья	Мелкие частицы	Крупные частицы	мин
x_6	Содержание основного вещества в сырье	98,4	99,4	%
x_7	Время выхода на заданную температуру	8	15	мин
x_8	Способ окончания процесса	Самоохлаждение	Подача горячей воды	—
x_9	Разные сорта фильтров	Беззольный	Зольный	—
x_{10}	Разные исполнители	№ 1	№ 2	—

Таблица 7.33.

Результаты расчета отсеивающего эксперимента

Номер опыта	Факторы										Выходная переменная
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	
1	+	+	+	-	-	+	-	-	+	-	67,5
2	-	+	-	-	-	+	-	+	-	-	83,7
3	+	-	+	+	-	+	+	+	+	+	27,8
4	+	-	+	+	+	+	-	-	+	+	21,6
5	-	-	-	-	+	+	-	+	-	-	5,0
6	-	+	-	+	-	+	+	+	+	+	84,8
7	+	+	-	-	-	-	-	-	+	+	67,5
8	-	-	+	+	-	-	-	+	-	+	8,5
9	+	-	+	+	+	+	+	-	+	+	9,7
10	+	+	+	+	+	-	+	+	+	-	70,5
11	-	-	+	+	+	-	-	+	+	+	7,5
12	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	7,2
13	+	+	-	-	-	-	+	-	-	-	70,5
14	-	+	+	+	+	-	-	+	-	+	85,2
15	-	+	+	-	+	+	+	+	-	-	84,8
16	-	-	-	+	-	-	+	+	-	+	8,0

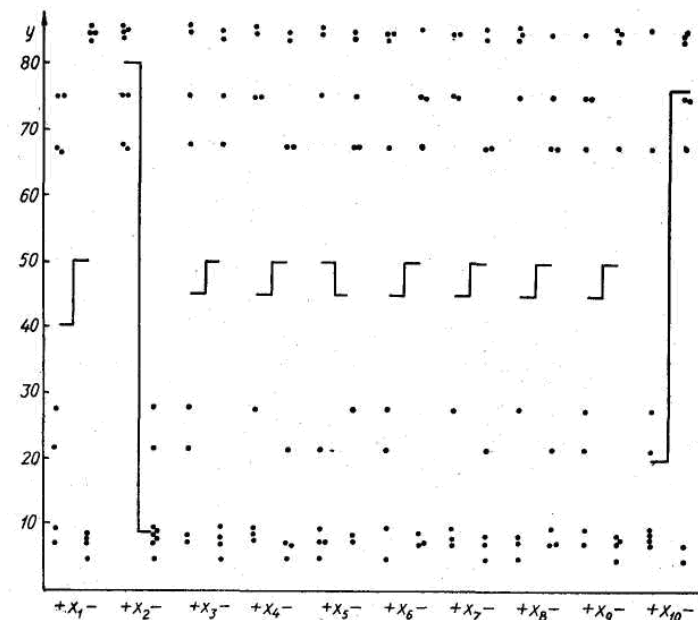


Рис. 7.6. Диаграмма рассеивания первого шага.

Построим табл. 7.34 на три входа.

Таблица 7.34.

Подготовка данных для оценки линейных эффектов

x_2	$x_1 \text{ „+“}$		$x_1 \text{ „-“}$	
	$x_{10} \text{ „+“}$	$x_{10} \text{ „-“}$	$x_{10} \text{ „+“}$	$x_{10} \text{ „-“}$
„+“	67,5 $\bar{y}_1=67,5$	67,5 70,5 70,5 $\bar{y}_2=69,5$	85,2 $\bar{y}_5=85,2$	83,7 84,8 84,8 $\bar{y}_6=84,4$
„-“	27,8 21,6 67,5 $\bar{y}_3=38,97$	7,2 $\bar{y}_4=7,2$	8,5 7,5 8,0 $\bar{y}_7=8,0$	5,0 $\bar{y}_8=5,0$

Линейные эффекты вычислим по формулам (А)

$$\begin{aligned} \text{эф } x_1 &= \frac{\bar{y}_1 + \bar{y}_2 + \bar{y}_3 + \bar{y}_4}{4} - \frac{\bar{y}_5 + \bar{y}_6 + \bar{y}_7 + \bar{y}_8}{4} = \\ &= \frac{67,5 + 69,5 + 38,97 + 7,2}{4} - \frac{85,2 + 84,4 + 8 + 5}{4} = \\ &= 45,79 - 45,65 = 0,14. \\ \text{эф } x_{10} &= \frac{\bar{y}_1 + \bar{y}_3 + \bar{y}_5 + \bar{y}_7}{4} - \frac{\bar{y}_2 + \bar{y}_4 + \bar{y}_6 + \bar{y}_8}{4} = \\ &= \frac{67,5 + 27,8 + 5 + 67,5}{4} - \frac{83,7 + 21,6 + 84,8 + 8,5}{4} = \\ &= 41,95 - 49,65 = -7,7; \\ \text{эф } x_2 &= \frac{\bar{y}_1 + \bar{y}_2 + \bar{y}_5 + \bar{y}_6}{4} - \frac{\bar{y}_3 + \bar{y}_4 + \bar{y}_7 + \bar{y}_8}{4} = \\ &= \frac{67,5 + 83,7 + 5 + 84,8}{4} - \frac{27,8 + 21,6 + 67,5 + 8,5}{4} = \\ &= 60,25 - 31,35 = 28,90. \end{aligned}$$

Эффект действия $x_2=28,90$ на порядок больше эффектов всех остальных факторов.

Оценим значимость эффектов по критерию Стьюдента. Для этого вычислим оценки дисперсий для каждой клетки табл.7.34

$$\begin{aligned} s_{R_1}^2 &= 0; \\ s_{R_2}^2 &= \frac{1}{2} [(67,5 - 69,5)^2 + (70,5 - 69,5)^2 + (70,5 - 69,5)^2] = 6,0; \\ s_{R_3}^2 &= \frac{1}{2} [(27,80 - 38,97)^2 + (21,60 - 38,97)^2 + \\ &+ (67,60 - 38,97)^2] = 413,48; \quad s_{R_4}^2 = 0; \quad s_{R_5}^2 = 0; \\ s_{R_6}^2 &= \frac{1}{2} [(83,7 - 84,4)^2 + (84,8 - 84,4)^2 + (84,8 - 84,4)^2] = 0,81; \\ s_{R_7}^2 &= (8,5 - 8)^2 + (7,5 - 8)^2 = 0,5; \quad s_{R_8}^2 = 0. \end{aligned}$$

Средняя дисперсия равна

$$s_R^2 = \frac{6,0 + 413,48 + 0,81 + 0,50}{8} \approx 52,60.$$

Значения критерия Стьюдента согласно (В)

$$\begin{aligned} t_{p_1} &= \frac{(67,5 + 69,5 + 38,97 + 7,2) - (85,2 + 84,4 + 8 + 5)\sqrt{16}}{\sqrt{52,6}} = \\ &= \frac{(183,17 - 182,6) \cdot 4}{7,2} = 0,32; \\ f_R &= 16 - 8 = 8; \quad t_T = 2,31. \\ t_{p_{10}} &= \frac{[(67,5 + 27,8 + 5 + 67,5) - (83,7 + 21,6 + 84,8 + 8,5)] \cdot 4}{7,2} = -17,11; \\ t_{p_2} &= \frac{[(67,5 + 83,7 + 5 + 84,8) - (27,8 + 21,6 + 67,5 + 8,5)] \cdot 4}{7,2} = 64,22. \end{aligned}$$

Сравнивая t_p с t_T ($t_T=2,31$ при $f_R=16-8=8$ и $q=0,05$), получаем, что фактор x_1 незначим. Исследователи также предложили не рассматривать на этом этапе фактор x_{10} . Тогда исходные данные корректируют по фактору x_2 , влияние которого на порядок больше, чем остальных.

Корректируют результаты наблюдений так: ко всем результатам, полученным на верхнем уровне x_2 , прибавляют -65 . Для скорректированных результатов эксперимента снова строят диаграмму рассеивания по основным эффектам и некоторым эффектам взаимодействия. На этой диаграмме визуальнo выделяют x_7 , x_8 и x_1 , x_2 (рис.7.7).



Рис. 7.7. Диаграмма рассеивания второго шага.

Расчеты эффектов производят согласно табл. 7.35.

Таблица 7.35.

Подготовка данных для оценки линейных эффектов

x ₆	x ₇ +		x ₇ -		x ₈		x ₉ +		x ₉ -		
	x ₁ x ₂ +	x ₁ x ₂ -	x ₁ x ₂ +	x ₁ x ₂ -	x ₁ x ₂ -	x ₁ x ₂ -	x ₁ x ₂ +	x ₁ x ₂ -	x ₁ x ₂ -	x ₁ x ₂ -	
+, +	70,5 8,0 y ₁ = 39,25	27,8 84,8 y ₂ = 56,3	5,0 8,5 y ₃ = 6,75	83,7 85,2 y ₄ = 84,45	70,5	84,8 9,7 7,2 y ₅ = 33,9	67,5 67,5 y ₆ = 67,5	21,6 85,2 y ₇ = 53,4			
+, -											
-											

Вычисляют линейные эффекты

В результате аналогичных расчетов значимым оказался эффект x_1x_2 (эффект x_1x_2 равен 11). Вновь производили корректировку данных эксперимента, при этом ко всем результатам, полученным на верхнем уровне x_1x_2 , прибавляли 11. Результаты четырех корректировок представлены в табл. 7.36.

Таблица 7.36.

Результаты корректировок по методу случайного баланса

Номер этапа	Эффекты, выделенные на основании визуальной оценки диаграммы рассеяния	Численные значения основных эффектов и эффектов взаимодействия	Вычисленные значения t -критерия
I	x_1	-3,05	1,09
	x_2	64,90	25,75*
II	x_1x_2	-13,30	5,60*
	x_7	-0,97	0,42
III	x_8	3,12	1,34
	x_3	4,25	3,58*
	x_8	4,72	4,00*
IV	x_2x_3	-5,02	4,25
	x_3x_4	-2,75	2,93*
V	x_5	-1,25	1,30
	x_1x_3	2,0	2,28*
	x_4	1,0	1,14

* Значимо для уровня значимости 0,05; $t_{0,05(12)} = 2,18$; $t_{0,05(8)} = 2,30$.

Этот этап отсеивания факторов производили в условиях, когда первоначально рассматривались 10 линейных факторов и 45 возможных парных взаимодействий. Выделены следующие эффекты: температура (x_2); взаимосвязь отношения растворителя к основному веществу и температуры (x_1x_2); время реакции (x_3); способ окончания процесса (x_8); взаимосвязь времени реакции с температурой (x_2x_3); взаимосвязь времени реакций с отношением растворителя к основному веществу (x_1x_3).

Эффект x_2 на порядок больше всех остальных. Температура оказывает резко выраженное положительное действие. Из анализа результатов видно, что все высокие значения выхода продукта получены при высокой температуре; x_2 — единственный фактор, дающий четкое распределение точек: на уровне +1 сконцентрированы все точки с высоким выходом, на уровне -1 — все точки с низким

выходом. Из дальнейшего анализа видно, что самые высокие выходы в опытах 2, 6, 14, 15 получены при x_2^+ и x_1^- .

Из первой диаграммы рассеивания видно, что эти две переменные имеют выделяющиеся точки на уровнях с разными знаками. Эффект взаимодействия x_1x_2 занимает второе место в ранжировании. Отношение растворителя к основному веществу непосредственно не влияет на выход продукта реакции, но проявляется прежде всего в эффекте взаимодействия x_1x_2 . Его отрицательное значение указывает на увеличение выхода при низком значении x_1 (отношение растворителя к основному веществу) и высоком x_2 (температура среды) или наоборот.

Аналогично можно интерпретировать и остальные выделенные эффекты взаимодействия.

Таким образом, в план эксперимента дальнейших исследований уверенно можно включить факторы x_2 , x_3 , x_8 и взаимодействия факторов x_1x_2 , x_1x_3 , x_3x_4 .

В этом разделе мы обратили внимание на то, что к опыту нужно тщательно готовиться: собрать и наладить опытную установку, проверить приборы, подготовить исходное сырье, разработать журнал. Тщательная подготовка к опыту будет способствовать уменьшению ошибки опыта. Ошибка опыта является суммарной величиной, состоящей из ряда ошибок: ошибок при измерении факторов, параметра оптимизации и ошибок при проведении опыта. Ошибки подразделяются на случайные и систематические. Для того чтобы компенсировать влияние систематических ошибок, опыты нужно рандомизировать во времени. Если экспериментатору заранее известны источники систематических ошибок, например, известно количество различных партий сырья, следует разбивать матрицу планирования на блоки. При этом межблоковый эффект заведомо смешивается с взаимодействиями, которыми экспериментатор может пренебречь.

Особое внимание следует уделять проверке однородности дисперсий, так как это — одна из предпосылок, лежащих в основе регрессионного анализа. Для проверки однородности дисперсий можно использовать критерии Фишера, Кохрена или Бартлетта. Очень важно отбросить грубые наблюдения — брак при постановке повторных опытов.

Воспроизводимость эксперимента является одним из важнейших требований планирования эксперимента.

8. Обработка экспериментальных данных

8.1. Задачи обработки опытных данных

Закономерности развития явлений

Вторым этапом исследования является обобщение экспериментальных данных.

Наблюдения обобщают не только по окончании опытов, но и в ходе их. Внимательный и добросовестный исследователь всегда стремится еще в процессе опытов установить закономерности, возможные отклонения и их причины, новые факторы, связи, взаимодействия. Для обобщения используют все материалы наблюдений: результаты измерений, описание развития явлений, фотографии, образцы, спектрограммы и т.д. Не следует забывать и мелких замечаний, так как иногда подмеченное во время опыта явление, кажущееся случайным, может объяснить причины и развитие явлений.

При проведении экспериментов и при обобщении их результатов используют индуктивный и дедуктивный методы. Исследователь должен помнить, что дедукция и индукция неразрывно связаны между собой и дополняют одна другую.

Сопоставляя все материалы исследования, исследователь ищет раскрытие связей, взаимодействия, функциональных зависимостей факторов; установив их, он выделяет главные связи, зависимости, взаимодействия и устанавливает общие закономерности явлений.

Эти закономерности должны отражать процессы развития явлений объективного мира. Закон есть внутренняя существенная связь явлений, обуславливающая их необходимое закономерное развитие, не зависящая от воли людей, он характеризуется всеобщностью, относительной устойчивостью и повторяемостью, то есть закон действует всегда и всюду, где есть соответствующие условия. Наилучшим способом проверки установленной закономерности является использование этой закономерности на практике. *Если открытые закономерности близки к действительности, они воспроизводимы.*

При обработке опытных данных надо стремиться как можно более разносторонне представить различные связи, отношения и опосредствования, отнюдь не ограничиваясь нахождением средних величин; сопоставлять значения отклонений, скорости изменения величин и соответствующих ускорений, максимумов и минимумов; проверять колебания на возможность гармонического анализа или

устанавливать показатели затухания; сравнивать различные величины, расположенные в порядке увеличения или уменьшения их значений, и применять другие приемы. В этом разделе указаны лишь основные приемы обработки опытных данных.

Теоретические обобщения

Как простые, так и более сложные отношения и связи желательно выражать *математически*, чтобы формулы отображали, вначале, быть может, и упрощенно, закономерности физических процессов. Только в этом случае математическое обобщение результатов исследования приближается к теоретическому обобщению. «Ясно, что математические формулы и теоретические исследования дают инженеру наибольшую силу даже и в разрешении чисто технических задач», — писал Н. Г. Чернышевский.

Если исследователь не устанавливает причин, обуславливающих закономерность, последняя всегда носит характер некоторой *вероятности* (то есть меры объективной возможности наступления явлений), *а не достоверности*. Закономерность достоверна лишь в том случае, если она необходимо вытекает из физической сущности наблюдаемых явлений. Например, при нагреве m сортов смазочных масел вязкость их падает. Будет ли уменьшаться при нагреве вязкость $m+1$ сорта масла? Не установив причин падения вязкости, уменьшение вязкости $m+1$ сорта при нагреве можно считать лишь вероятным в той или иной степени.

Когда исследовали молекулярно-кинетические особенности жидкостей, установили, что при изменении температуры изменяется энергия связи молекул и сила сцепления между ними; поэтому обнаруженная устойчивая и постоянная связь явлений при нагревании жидкостей стала законом, и этим были даны теоретические основы изменения вязкости жидкостей в функции температуры и давления.

Таким образом, *экспериментальное исследование, отличаясь от теоретического, вместе с тем является основой последнего и может перерасти в него.*

Экспериментальные данные обобщают в такой последовательности: *находят функциональные связи, устанавливают основные закономерности, раскрывают физическую сущность закономерностей, математически выражают их, а затем теоретически обобщают и развивают.*

К обобщению следует привлекать и материалы других исследований, из которых по каким-либо причинам не сделаны должные выводы.

Методы математической обработки опытных данных разработаны довольно широко и изложены нами в отдельных разделах настоящей

работы. В этом же разделе показаны лишь самые необходимые и наиболее встречающиеся способы.

Вместе с тем исследователь должен ясно представлять, что современный математический аппарат не средство украшения исследований, а могучий рычаг все более и более глубокого познания объективных законов природы.

8.2. Нахождение функциональных связей

Таблицы

Функциональные связи легче найти, если данные опытов представить таблицами и графиками.

В таблице вначале выделяют по физическому смыслу аргумент (фактор или независимую переменную), затем функцию (параметр или зависимую переменную).

Желательна следующая форма таблицы: номер и краткое, точное название; в первом столбце располагают значение аргумента, а в остальных — значения функции. Иногда целесообразно несколько столбцов объединять в один раздел с общей заголовочной частью и подзаголовками в каждом столбце. Аргумент располагают строго логично по основному, существенному признаку (например, по величине, в возрастающем или убывающем порядке). Все столбцы должны иметь краткие, ясные заголовки с указанием размерности помещаемых величин.

При заполнении таблицы следует помнить, что, если данных нет, надо ставить тире, а не ноль: ноль — это определенное значение аргумента или функции; запятые, отделяющие целую часть от дробной, в каждой графе следует располагать одну под другой (в линию).

Проще всего размещать в таблице результаты опытов с одной повторностью, так как при этом не требуется каких-либо вычислений.

Пусть, например, при измерениях оборотов коленчатого вала двигателя в лабораторный журнал синхронные данные записаны в следующем виде (заимствовано из работы В. И. Казарцева и И. М. Гусейнова).

Данные опытов (без выделения аргумента)

Сопrotивление трения, кг	6,70	5,85	8,00	5,50	6,10	7,50
Температура воды в радиаторе, град	77	78	72	80	78	74
Температура масла в картере, град ...	82	82	81	82	82	82
Обороты вала в минуту	1000	600	1400	400	800	1200

В таком виде данные опытов трудно читать, и закономерности

остаются неясными. Выделим по физическому смыслу аргумент. Понятно, что температура воды в радиаторе и температура масла в картере не может быть аргументом. Сопrotивление трения в опытах не регулировали, и интервалы по нему между данными различных опытов неравномерны. Из этих соображений считаем аргументом число оборотов вала двигателя в минуту и располагаем аргумент в возрастающем порядке [расположение ряда в определенном порядке (возрастание или убывание значений) называют также ранжированием].

За аргументом располагаем, как наиболее существенную функцию, данные о сопротивлении трения (табл. 8.1).

Таблица 8.1.

Данные опытов (аргумент выделен и расположен в порядке)

Число оборотов вала двигателя в минуту	Сопrotивление трения, кг	Температура воды в радиаторе, град	Температура масла в картере, град
400	5,50	80	82
600	5,85	78	82
800	6,10	78	82
1000	6,70	77	82
1200	7,50	74	82
1400	8,00	72	81

Как видно из таблицы, функциональные связи стали намного яснее. Общей закономерностью является увеличение сопротивления трения и понижение температуры воды в радиаторе в функции числа оборотов вала: температура же масла в функции оборотов вала падает медленно, так что принятыми способами измерения понижение температуры масла улавливается лишь при максимальных оборотах.

Сложнее составить таблицу при большой повторности измерений.

В таких случаях лучше использовать свойства вариационных рядов. Отметим, что в вариационный ряд объединяют только качественно однородные величины. Предположим, что произведено 36 замеров секундного расхода воды и получены следующие значения, л: 1,8; 32,7; 3,6; 1,9; 25,1 25,4; 5,3; 6,6; 24,7; 6,9; 7,7, 25,2; 8,8; 23,0; 9,7; 11,3; 20,7; 21,2; 21,8; 12,7; 21,5; 13,3; 21,8; 13,0; 14,5; 15,8; 14,1; 15,2; 17,2; 16,3; 17,9; 13,5; 16,6; 15,1; 17,0; 15,0;

Общая сумма опытных значений составляет 553,9 л за 36 сек. Средняя

$$\bar{a} = \frac{553,9}{36} = 15,4 \text{ л/сек.}$$

Для вычисления дисперсии и стандарта берем разности $(a_i - \bar{a})$

и их квадраты. Получаем (показаны вычисления только первых трех и последних трех разностей):

$$\begin{aligned}
 1,8 - 15,4 &= -13,6; & (-13,6)^2 &= 185,0; \\
 32,7 - 15,4 &= +17,3; & 17,3^2 &= 299,3; \\
 3,6 - 15,4 &= -11,8; & (-11,8)^2 &= 139,2; \\
 \dots & & & \\
 15,1 - 15,4 &= -0,3; & (-0,3)^2 &= 0,09; \\
 17,0 - 15,4 &= +1,6; & 1,6^2 &= 2,56; \\
 15,0 - 15,4 &= -0,4; & (-0,4)^2 &= 0,16.
 \end{aligned}$$

Общая сумма квадратов отклонений (разностей) 36 конкретных величин от средней будет равна 1862,9. Тогда дисперсия будет равна:

$$\sigma^2 = \frac{1862,9}{36 - 1} = 53,2 \text{ л}^2/\text{сек}^2,$$

а стандарт равен

$$\sigma = \sqrt{53,2} = 7,3 \text{ л/сек.}$$

Существенным признаком вариационного ряда является разделение всех полученных при измерении величин на группы или классы. Весьма желательно, чтобы классовые промежутки (интервалы) были равномерными (с постоянным шагом), так как это сильно облегчает обработку табличных данных. Каждый класс характеризуется двумя признаками: пределами, в которых заключаются входящие в класс величины, и количеством измерений (случаев), входящих в данный класс. Это количество называется частотой. Пределы классов не должны перекрывать один другого; например, нельзя назначать такие пределы для классов: 0—1; 1—2; 2—3 и т.д. Правильнее разбить классы в этом случае так: 0—1,0; 1,1—2,0; 2,1—3,0 и т. п.

Слишком узкие пределы (дробная разбивка на мелкие классы) усложняют вычисления и затевают общие закономерности распределения случаев измерения, но увеличивают точность вычислений, в пределе приближаясь к точности вычислений по всем измерениям в совокупности. Слишком широкие пределы яснее показывают закон распределения, но увеличивают ошибку вычислений, делают их менее близкими к конкретным данным опытов.

Таким образом, если исследователя интересует закономерность распределения случаев, количество классов, на которые разбивают все данные измерений, должно быть уменьшено, а широта пределов каждого класса (классовые интервалы) —увеличена. Наоборот, если в первую очередь важна точность вычислений средней величины, дисперсии и стандарта, количество классов надо увеличить, а

интервалы — сузить. Практика показывает, что количество классов не следует делать менее 5 и более 12 и что в пределах каждого класса должно находиться несколько измерений. В отдельных случаях количество классов должно быть больше 12.

Приводимые некоторыми исследователями формулы для разбивки измерений на классы слишком формализуют этот процесс и не имеют всесторонних обоснований. Поэтому мы рекомендуем предварительную (если исследователь не имеет особых оснований для другой разбивки) и простую зависимость количества классов от общего количества измерений:

Количество измерений	10—30	31—70	Более 70
Количество классов	5	6—9	10—12

Данные опытов разбивают на классы так: берут крайние значения измеренной величины, округляют в меньшую и большую сторону и делят на количество классов. Результат (классовый интервал) округляют так, чтобы средняя по классу была не слишком дробной величиной.

Возвратимся к примеру с секундным расходом воды. Рассмотрим сначала более дробную разбивку на классы с узкими пределами. Взяв по измерениям наибольшие и наименьшие значения, находим разницу между ними:

$$32,7 - 1,8 = 30,9 \text{ л/сек.}$$

Округляем результат до 30 л/сек, берем 10 классов и получаем классовый интервал в 3 л/сек. Распределив измерения по классам, составим таблицу 8.2 и проведем необходимые вычисления.

Таблица 8.2

Результаты разбивки опытных данных на 10 классов

Номера классов	Пределы наблюдавшей величины	Среднее по классу a_i	Количество наблюдений n_i	$a_i n_i$	Отклонения $\frac{a_i - \bar{a}}{a_i - a_i}$	$n_i(a_i - \bar{a})^2$
1	< 3,0	1,5	2	3,0	+13,8	380,8
2	3,1—6,0	4,5	2	9,0	10,8	233,2
3	6,1—9,0	7,5	4	30,0	7,8	243,2
4	9,1—12,0	10,5	2	21,0	4,8	46,0
5	12,1—15,0	13,5	7	94,5	1,8	22,4
6	15,1—18,0	16,5	8	132,0	-1,2	11,2
7	18,1—21,0	19,5	1	19,5	4,2	17,6
8	21,1—24,0	22,5	5	112,5	7,2	259,0
9	24,1—27,0	25,5	4	102,0	10,2	416,2
10	27,1 и >	28,5	1	28,5	13,2	174,2
			36	552		1803,8

Средняя по всему распределению

$$\bar{a} = \frac{552}{36} \approx 15,3 \text{ л/сек.}$$

По этой средней и вычислены отклонения $\bar{a} - a_i$.

Дисперсия распределения равна

$$\sigma^2 = \frac{1803,8}{36-1} \approx 51,5 \text{ л}^2/\text{сек}^2$$

и стандарт

$$\sigma = \sqrt{51,5} = 7,2 \text{ л/сек.}$$

Если сравнить эти вычисления с приведенными ранее (по всем измерениям), получим разницу в средних и в стандартах около 0,1 л/сек. Если же по таблице 8.2 посмотреть, как представлена закономерность распределения количества измерений, то можно увидеть, что наибольшее количество измерений группируется в пятом и шестом классах: оно резко падает в четвертом и седьмом классах, а в последующих опять возрастает и постепенно снижается к началу и концу опытного распределения.

Вычисления, показанные в таблице 8.2, были проведены по классическому способу. Есть другой способ вычислений, упрощающий их и обычно называемый способом сумм.

По способу сумм за условную среднюю принимают значение величины, соответствующее наибольшей частоте, то есть \bar{a}_y должна

соответствовать $n_{i_{\max}}$. Далее вычисляют восемь сумм по количеству наблюдений:

- 1) нарастающими итогами записывают суммы n_i сверху таблицы по $n_{i_{\max}}$, не включая последнего;
- 2) берут сумму этих нарастающих итогов α_i ;
- 3) также нарастающими итогами суммируют значения n_i снизу таблицы до $n_{i_{\max}}$, не включая значение $n_{i_{\max}}$;
- 4) берут сумму последних нарастающих итогов β_i ;
- 5—8) эти процессы суммирования повторяют с вновь полученными данными, не включая два максимальных нарастающих итога, так что получаются суммы α_2 и β_2 .

Затем вычисляют

$$\begin{aligned} S_1 &= \alpha_1 - \beta_1; \\ S_2 &= \alpha_1 + \beta_1 + 2\alpha_2 + 2\beta_2; \\ \bar{a} &= \bar{a}_y - \frac{k \cdot S_1}{n}, \end{aligned}$$

где \bar{a}_y — условная средняя;

k — классовый интервал;

n — общее количество наблюдений.

Если значения a_i убывают сверху вниз, знак в правой части последнего равенства изменяют на положительный.

Наконец, находят стандарт:

$$\sigma = k \sqrt{\frac{S_2 - \frac{S_1^2}{n}}{n-1}}$$

Определим по способу сумм среднюю и стандарт (по данным табл. 8.2).

Выпишем для этого значения n_i и проведем необходимые вычисления, принимая за условную среднюю данные по шестому классу, то есть $\bar{a}_y = 16,5$ л/сек.

n_i	$\alpha_{i=41}$	$\alpha_{i=46}$
2	2	2
2	4	6
4	8	14
2	10	24
7	17	—
8(max)	—	—
1	11	—
5	10	16
4	5	6
1	1	1
$n=36$	$\beta_1=27$	$\beta_2=23$

Из таблицы 8.2 следует, что классовый промежуток $k=3$ л/сек. Тогда

$$\begin{aligned} S_1 &= 41 - 27 = 14; \\ S_2 &= 41 + 27 + 2 \cdot 46 + 2 \cdot 23 = 206; \\ \bar{a} &= 16,5 - \frac{3 \cdot 14}{36} \approx 15,3 \text{ л/сек}; \\ \sigma &= 3 \sqrt{\frac{206 - \frac{14^2}{36}}{36-1}} = 7,2 \text{ л/сек.} \end{aligned}$$

Если классы будут с более широкими пределами, результаты получатся другие. Возьмем, например, шесть классов с интервалами 30/6=5 л/сек, распределим все измерения по классам и проведем необходимые (по классическому способу) действия. Получим результаты (табл. 8.3).

Таблица 8.3

Результаты разбивки опытных данных на 6 классов

№ класса	Пределы наблюдаемой величины	Среднее по классу a_i	Количество наблюдаемых n_i	$a_i n_i$	Отклонения $\bar{a}-a_i$	$n_i(\bar{a}-a_i)^2$
1	0—5,0	2,5	3	7,5	+13,1	514
2	5,1—10,0	7,5	6	45,0	8,1	393
3	10,1—15,0	12,5	8	100,0	3,1	77
4	15,1—20,0	17,5	8	140,0	-1,9	29
5	20,1—25,0	22,5	7	157,5	6,9	333
6	Более 25,0	27,5	4	110,0	11,9	566
	—	—	36	560	—	1912

Для таблицы 8.3 средняя распределения будет равна:

$$\bar{a} = \frac{560}{36} = 15,6 \text{ л/сек,}$$

дисперсия

$$\sigma^2 = \frac{1912}{36-1} = 54,6 \text{ л}^2/\text{сек}^2$$

и стандарт

$$\sigma = \sqrt{54,6} = 7,4 \text{ л/сек.}$$

По данным таблицы 8.3 проведем вычисления способом сумм, принимая $a_1=12,5$ л/сек, как ясно из таблицы, $k = 30: 6=5$ л/сек.

n_i	$\alpha_1=12$	$\alpha_2=3$
3	3	3
6	9	—
8	—	—
8	19	—
7	11	15
4	4	4
$n=36$	$\beta_1=34$	$\beta_2=19$

$$S_1 = 12 - 34 = -22; S_2 = 12 + 34 + 2 \cdot 3 + 2 \cdot 19 = 90;$$

$$\bar{a} = 12,5 - \frac{5(-22)}{36} = 15,6 \text{ л/сек;}$$

$$\sigma = 5 \sqrt{\frac{90 - \frac{(-22)^2}{36}}{36-1}} = 7,4 \text{ л/сек.}$$

Из этих двух примеров видно, что вычислять способом сумм проще.

Вернемся к таблице 8.3. При несколько большей, чем в вычислениях по таблице 8.2, разнице в общей средней количество измерений n_i распределено более закономерно и, можно предполагать, близко к нормальному закону.

До сих пор мы имели дело с простыми таблицами, представляющими непосредственные результаты измерений. Но часто необходимо составлять более сложные или сводные таблицы по ряду опытов при изменении основных факторов. Возьмем пример, в котором исследуется степень затупления лемеха плуга при вспашке поля. Множественность измерений требует первоначальной табличной обработки и вывода средних по глубине пахоты и сопротивлению машины при различном затуплении лемеха. Эту первоначальную обработку проводим при помощи таблиц, составленных по форме таблиц 8.2 и 8.3 (эту обработку из-за ее громоздкости мы опускаем), для каждой из степеней затупления лемеха. Затем данные этих таблиц переносим в сводную таблицу 8.4 и располагаем в функции степени затупления.

Таблица 8.4

Показатели вспашки в функции затупления лемехов

Степень затупления лемеха	Средняя глубина вспашки h , см	Среднее квадратическое отклонение глубины вспашки σ_h , см	Среднее удельное сопротивление пласта K , кг/см ² (почва каштановая)
0	23,4	1,0	0,43
1	23,2	1,6	0,47
2	22,4	1,8	0,55
3	19,8	2,3	0,79
4	19,1	1,8	0,76
5	18,6	2,4	0,83
6	18,5	2,5	0,85
7	18,4	2,7	0,87

Из таблицы 8.4 ясно видны функциональные зависимости, выражаемые самыми общими закономерностями: по мере затупления лемехов средняя глубина вспашки падает, среднее квадратическое отклонение (стандарт) и удельное сопротивление растут. Однако более точно характер изменения функций по таблицам определить трудно.

Графики

Графики наглядно показывают закон изменения $y=f(x)$. В. П. Горячкин говорил, что «...Закономерность ряда чисел воспринимается нашим сознанием только в грубых, общих чертах. Тот же ряд чисел, представленный в виде графика, уже сразу открывает развитие явления». Графики дают возможность наблюдать закономерности изменения функций как на плоскости, так и в пространстве. Далее мы излагаем построение и применение графиков в плоскости, в системе прямоугольных координат. Графики лучше вычерчивать на плотной бумаге, позволяющей стирать и вновь наносить линии и пользоваться ею неоднократно. Иногда необходимо применять бумагу с неравномерными шкалами — логарифмической, вероятностной и др. Во многих случаях лучше пользоваться хорошей плотной миллиметровой бумагой.

Графики могут быть составные, в них один лист накладывают на другой. В этом случае верхний лист должен быть прозрачным. Очень удобно представлять сложные функции на таких составных графиках, у которых можно передвигать прозрачный лист по непрозрачному и наблюдать за изменением функции.

Обычно по абсциссе откладывают значения аргумента, по ординате — значения функций. Общие правила для выбора масштабов: кривые по возможности располагают наклонно к осям координат (около 45°); результирующую, или основную, кривую вычерчивают на всем листе; начало отсчетов не обязательно размещать в пределах листа, желательно, чтобы наименьшее деление масштаба графика соответствовало абсолютной ошибке измерений: тогда ошибка отсчета по графику не будет превышать ошибки измерений.

Рекомендуемые масштабы шкал на миллиметровой бумаге: $1:1 \cdot 10^n$, $1:2 \cdot 10^n$; $1:5 \cdot 10^n$; при этом $n=0; 1; 2; 3 \dots$

Если отрезок m , мм, изображающий единицу величины u , назвать модулем шкалы и если известны пределы a и b изменения величины u , то длина шкалы будет равна:

$$l = m(b-a). \quad (8.1)$$

Полученную расчетом длину шкалы округляют в сторону увеличения. Заметим, что из уравнения (8.1) легко определить модуль шкалы при заданной длине ее.

Шкалы вычерчивают обязательно до нанесения на график результатов опытов. Необходимо выделить более длинными чертами (2—3 мм) крупные деления и подписать их соответствующими числовыми значениями. Промежутки между крупными делениями надо разбить (без подписи их) на 2; 5 или 10 мелких делений, отметив их короткими (1 мм) чертами. Если шкала начинается с нуля, он должен быть обозначен. Всем шкалам дают названия и указывают размерность откладываемой величины.

Только после вычерчивания шкал опытные данные наносят на график. Рекомендуется обозначать опытные точки так (каждое обозначение для одной какой-либо функции): точка, треугольник, квадрат, кружок, крестик. Точка опыта должна находиться в середине значка, размеры которого не должны быть большими.

График с нанесенными таким образом точками опытов (по табл. 8.4) показан на рисунке 8.1.

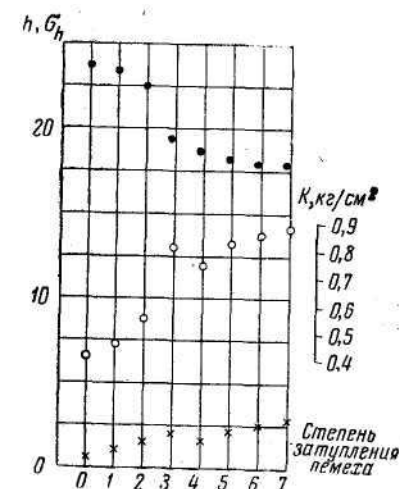


Рис. 8.1. График значений глубины вспашки h (точки), удельного сопротивления K (кружки) и среднеквадратических отклонений σ_h от средней глубины вспашки (крестики) в функции степени затупления лемеха.

График гораздо более ясно, чем таблица, показывает развитие явления в функциональной связи и законы этого развития.

Такого рода графики следует вычерчивать и в процессе исследования чтобы следить за его ходом. Если требуется график нумеруют и надписывают.

Таблицы не дают такого ясного и быстро находимого представления о функциональных связях и закономерностях, как графики. При непостоянном шаге таблиц (или разных интервалах между классами) математическая обработка их затруднена. Но таблицы более точно, чем графики, излагают результаты измерений; в таблице можно размещать изменение 5—9 зависимых величин, в то время как на графике хорошо обозреваемы только кривые 3—4 функций.

Таблицы с постоянным шагом (или одинаковым межклассовым интервалом) обрабатывают математически по-разному, в том числе непосредственно дифференцируют и интегрируют функции. Встречаются случаи, когда таблицы непригодны и возможно лишь графическое дифференцирование и интегрирование.

Общий вывод для исследователя: *в ходе исследования надо пользоваться и таблицами, и построенными по ним графиками; в тексте отчетов по исследованию нужно помещать преимущественно графики, перенося значительную часть табличного материала в приложения.*

Брак неоднократных измерений

При неоднократных измерениях какой-либо величины результаты отдельных измерений могут резко отличаться от остальных. Особенно ясно это видно при нанесении результатов измерений на график, когда отдельные точки выходят за пределы возможных ошибок.

Это происходит вследствие грубой ошибки в измерениях. В таких случаях нельзя вносить самовольно поправки. Измерения в этих опытах надо или повторить, убедившись предварительно в исправности аппаратуры, или отбросить, выяснив, что они являются явным браком.

Считается, что отклонение от средней арифметической не должно превышать предельной ошибки средней арифметической, то есть 3σ . Поэтому отклонение, превышающее по своему значению величину 3σ , показывает, что данное измерение было браковым и его следует отбросить, не принимая во внимание при дальнейших вычислениях.

Значит, брак возникает, если

$$a_{n+1} - \bar{a} > 3\sigma, \tag{8.2}$$

где a_{n+1} — сомнительный результат измерений. Более строго брак измерений определяют как

$$\frac{a_{n+1} - \bar{a}}{\sigma} \geq t. \tag{8.3}$$

Здесь значения \bar{a} и σ вычисляют по остальным измерениям (за исключением сомнительного), а значение t берут из таблицы 8.6, где H' — вероятность того, что значение $(a_{n+1} - \bar{a})$ не превышает некоторого значения $t\sigma$, которое подлежит определению.

Вероятность больше 0,05 (5%) исключена, так как в этом случае суждение может стать неправильным. Для точных вычислений лучше брать меньшие значения H' , например в 0,01 (1%). При установлении общих закономерностей можно брать $H' \approx 0,02—0,05$.

Приведем пример. Пусть измерения затрат мощности на привод механизма при одном и том же режиме работы дали следующие результаты: 2,2; 2,8; 2,4; 2,6; 4,3. Результат последнего измерения ставим под сомнение, по остальным производим вычисления \bar{a} и σ . Получаем:

$$\bar{a} = \frac{2,2 + 2,8 + 2,4 + 2,6}{4} = 2,5 \text{ кВт};$$

$$\sigma = \pm \sqrt{\frac{(-0,3)^2 + 0,3^2 + (-0,1)^2 + 0,1^2}{4-1}} \approx 0,26 \text{ кВт}.$$

Берем необходимое условие брака по формуле (8.2):

$$4,3 - 2,5 = 1,8 > 3 \cdot 0,26.$$

Таким образом, по упрощенной проверке результат сомнительного измерения является браком и не должен приниматься во внимание.

Если проверку произвести по формуле (8.3), получим:

$$\frac{4,3 - 2,5}{0,26} = 6,9 \geq t;$$

и так как при $n=4$ и $H'=0,01$ $t = 6,53$, сомнительное измерение можно считать браком и по более точному способу проверки. Неосторожная выбраковка измерений может существенно изменить результаты; промах также искажает их, поэтому исключать брак измерений надо достаточно обоснованно.

Все это относится к неоднократным прямым измерениям одной и той же величины. Если измеряемая величина является переменной, математически определять сомнительное значение как браковое нецелесообразно. В таких случаях следует находить брак измерений исходя из физических или биологических особенностей развития явления. Например, при измерении урожая на разных по обработке или почвенным условиям участках нельзя отбраковывать чисто

математически результаты, намного отклоняющиеся от средней по всей площади.

Таблица 8.6

Значения t при n измерениях

Количество измерений, n	Значение t при вероятности H'			
	0,05	0,02	0,01	0,001
2	15,561	38,973	77,964	779,696
3	4,969	8,042	11,460	36,486
4	3,558	5,077	6,530	14,468
5	3,041	4,105	5,043	9,432
6	2,777	3,635	4,355	7,409
7	2,616	3,360	3,963	6,370
8	2,508	3,180	3,711	5,733
9	2,431	3,053	3,536	5,314
10	2,372	2,959	3,409	5,014
11	2,327	2,887	3,310	4,791
12	2,291	2,829	3,233	4,618
13	2,261	2,782	3,170	4,481
14	2,236	2,743	3,118	4,369
15	2,215	2,710	3,075	4,276
16	2,197	2,683	3,038	4,198
17	2,181	2,658	3,006	4,131
18	2,168	2,637	2,997	4,074
19	2,156	2,618	2,953	4,024
20	2,145	2,602	2,932	3,979
21	2,135	2,587	2,912	3,941
22	2,127	2,575	2,895	3,905
23	2,119	2,562	2,880	3,874
24	2,112	2,552	2,865	3,845
25	2,105	2,541	2,852	3,819
26	2,099	2,532	2,840	3,796
27	2,094	2,524	2,830	3,775
28	2,088	2,517	2,820	3,755
29	2,083	2,509	2,810	3,737
30	2,079	2,503	2,802	3,719
40	2,048	2,456	2,742	3,602
60	2,018	2,411	2,683	3,492
120	1,988	2,368	2,628	3,388
∞	1,960	2,326	2,576	3,291

Сглаживание табличных данных и графиков

Полученные в таблицах ряды цифр или кривые графиков вследствие разных причин могут изменяться не плавно: кривые, проведенные по точкам опытов, будут ломаными. Прежде всего следует установить, не являются ли скачки цифр и изломы линий следствием естественных закономерностей, связанных с переходом количественных изменений в качественные, и, если потребуется, повторить все опыты, может быть, сузив их границы и приняв все меры к тому, чтобы исключить влияние ошибок наблюдения.

Затем надо решить, являются ли скачкообразные изменения необходимыми для объяснения явления. Например, при исследовании затрат энергии в трансмиссии в функции передаваемой мощности скачкообразные изменения не объясняют явления и зависят от случайных причин. В подобных случаях кривые должны протекать плавно, их надо сглаживать. Если же взять исследование вибрации деталей, то здесь предметом исследования являются сами скачкообразные изменения величины, связанные с сущностью явлений, и спрямлять, сглаживать их нельзя.

Физическим основанием сглаживания (выравнивания) кривых является плавность изменения функции при плавном изменении аргумента; выровненные кривые должны наиболее близко отображать общую закономерность развития явления. Последнее означает, что они не обязательно должны быть средними и что усреднение лишь один из приемов сглаживания и выравнивания. Отметим особо, что после проведенного выравнивания нельзя уничтожать первоначальные таблицы и графики: они — документ необходимой ступени исследования. В первую очередь выравнивают (сглаживают) данные непосредственных измерений.

Нельзя сглаживать результаты посредственных (вычисленных) измерений без предварительного выравнивания данных непосредственных измерений; в противном случае могут появиться большие ошибки, и данные посредственных измерений окажутся несопоставимыми с результатами непосредственных измерений. Например, при испытании двигателей измеряют крутящий момент и число оборотов вала за единицу времени. Если предварительно не сгладить результаты этих измерений, а лишь выровнять кривую вычисленной мощности, то все данные характеристики двигателя могут оказаться несопоставимыми.

Прежде всего следует установить, нет ли отдельных резких односторонних отклонений от плавных кривых развития явления, что удобнее всего делать по графику. Если эти отдельные (одно-два на всю

серию опытов) резкие односторонние отклонения находят объяснение в изменении условий измерений, их опускают, а вместо них при помощи интерполяции находят точки, близко расположенные к естественной плавной кривой развития. Если резкие односторонние отклонения не могут быть объяснены изменениями условий измерений, лучше повторить опыт и даже группу опытов (опыт, соответствующий резко отклоняющемуся от плавной кривой, и соседние). Например, по графику на рисунке 8.1 мы видим резкие односторонние отклонения от плавных кривых глубины пахоты и удельного сопротивления в точках, соответствующих степени затупления лемехов № 3. Так как известно, что на более плотных почвах плуг с затупленными лемехами идет мельче, можно предположить, что участок, отведенный под опыты с затуплением лемехов № 3, имел большую плотность почвы, чем остальные. При измерении плотности почвы на этом участке оказалась резко повышенной. Поэтому точки опыта с лемехами этой степени затупления (по глубине пахоты и удельному сопротивлению) опускаем и устанавливаем вместо них другие, найденные интерполированием. Следует отметить, что измерения в таких опытах вообще не являются браковыми и что к ним неприменим способ определения грубой ошибки (промаха), изложенный выше.

Такого рода опыты могут быть опущены лишь при установлении физической основы отклонения и при условии, что новые точки на плавной кривой можно найти при помощи интерполяции.

Далее надо выяснить, насколько разбросаны точки опытов в обе стороны от воображаемой плавной кривой, соединяющей их. Разброс опытных точек неизбежен, и надо решить, необходимо ли сглаживать (выравнивать) кривую. Дело в том, что сглаживание (или нахождение средней) любым методом может в той или иной степени изменить параметры опытной кривой, смягчить, уменьшить ее перегибы, и поэтому если на глаз линии графика вполне закономерны и проверка лекалом показывает, что все опытные точки могут быть соединены плавной кривой (то есть иначе, если разброс точек лежит в пределах ошибки чертежа), то выравнивания не требуется. Если же разброс точек опытов таков, что соединить их плавной кривой невозможно, нужно сгладить ее, сохранив общий характер развития, данный несглаженной функцией. Таковы в нашем примере точки средних квадратических отклонений по глубине пахоты.

Предварительное сглаживание данных таблиц и графиков особенно важно, если исследуют процесс деформации сельскохозяйственных материалов, в огромном своем большинстве анизотропных и поэтому

способных давать относительно большой разброс средних значений по опытам. Сглаживание проводят либо математическими методами, либо графически.

Фундаментальными методами математического сглаживания, дающими наиболее вероятный результат желаемой точности, являются разнообразно применяемые методы наименьших квадратов или наибольшего правдоподобия. Вместе с тем взятые в их классическом виде, эти методы, во-первых, предполагают, что вид зависимости $y=f(x)$ известен; при достаточно большом разбросе средних значений по опытам из-за этого могут быть ошибки в определении вида зависимости, а иногда получение такой зависимости и не является задачей обработки. Во-вторых, эти методы связаны с довольно большой вычислительной работой. Наконец, как это указано далее, для рационализации полученных зависимостей исследователя могут интересовать специфические особенности уравнений сглаженных кривых. Поэтому в дальнейшем изложении будут показаны лишь некоторые практические выводы, а также использование метода наименьших квадратов как меры аппроксимации.

Лучше всего метод наименьших квадратов применять для сглаживания в том случае, когда по физическому смыслу явления зависимость $y=f(x)$ должна быть прямолинейной.

Тогда, избрав по физическим соображениям начало или конец таблицы (графика), берут подряд несколько значений средних по опытам (желательно нечетное число), находят из них среднее арифметическое (здесь и далее предположены равноточность и равновесность измерений, как и постоянство шага таблиц и графиков) и этим среднеарифметическим заменяют опытное значение серединой из взятых точек; затем эту операцию неоднократно повторяют, передвигаясь каждый раз на один интервал таблицы, пока не будут исчерпаны все средние значения измерений по опытам. Если потребуются, сглаживание повторяют, учитывая, вновь полученные среднеарифметические значения.

В некоторых случаях применяют сглаживание по способу наименьших квадратов параболическим приближением:

$$y_{oc} = \frac{1}{35} [17y_0 + 12(y_1 + y_{-1}) - 3(y_2 + y_{-2})], \quad (8.4)$$

где y_2, y_{-1}, y_0, y_1 и y_2 —пять последующих значений функции из несглаженной таблицы; y_{oc} —есть сглаженное значение y_0 , которым его заменяют. Достоинство этого способа — его точность, особенно для параболической зависимости $y=f(x)$; недостаток — отсутствие сглаживания двух первых и двух последних точек, поэтому способ

наименьших квадратов применим лишь при 8—9 и большем количестве опытных точек.

Сгладим по этому способу данные третьего столбца таблицы 8.4. Вычисления ведем с верхней части столбца. Тогда $y_2=1,0$; $y_1 = 1,6$; $y_0=1,8$; $y_7 = 2,3$; $y_2=1,8$

Для степени затупления лемеха № 2 получаем:

$$y_{oc_2} = \frac{1}{35} [17 \cdot 1,8 + 12(2,3 + 1,6) - 3(1,8 + 1,0)] = 1,97.$$

Соответственно для следующих степеней затупления:

$$y_{oc_3} = \frac{1}{35} [17 \cdot 2,3 + 12(1,8 + 1,8) - 3(2,4 + 1,6)] = 2,01;$$

$$y_{oc_4} = \frac{1}{35} [17 \cdot 1,8 + 12(2,4 + 2,3) - 3(2,5 + 1,8)] = 2,12;$$

$$y_{oc_5} = \frac{1}{35} [17 \cdot 2,4 + 12(2,5 + 1,8) - 3(2,7 + 2,3)] = 2,21.$$

Следовательно, получили сглаженный по способу наименьших квадратов ряд точек средних квадратических отклонений глубины вспашки: 1,0; 1,6; 1,97; 2,01; 2,12; 2,21; 2,5 и 2,7. Если необходимо, сглаживание повторяют.

Как видно, сглаживание «скользит» вдоль рядов таблицы, причем выбор начала сглаживания зависит от того, какие две крайние точки ряда исследователь считает наиболее правильными, с них и начинают сглаживание.

В формуле (8.4) приведено пять значений функции для сглаживания, что дает, по нашему мнению, достаточно правильные результаты. Подобные формулы имеются и для другого числа значений функции, но меньшее число увеличивает ошибку, а большее оставляет по краям таблицы слишком много несглаженных результатов, что также увеличивает ошибку. Поэтому для многих исследований способ, представленный формулой (8.4), близок к оптимальному. В некоторых случаях его приходится применять не для всех точек, а лишь для некоторых их групп (участков кривой).

При многократном сглаживании математическими методами может возникнуть ошибка. Так, например, если кривую, по физическому смыслу гиперболическую, неоднократно сглаживать параболическими приближениями, то эта кривая становится близкой к параболе. Чтобы этого не случилось (или случилось в наименьшей степени), следует после каждого сглаживания ряда брать сумму квадратов отклонения найденных сглаженных значений функции от опытных точек. Наименьшая сумма квадратов отклонений будет соответствовать оптимальному сглаживанию.

Способ разностного сглаживания охватывает все ряды, но требует, чтобы разность в значениях функции между двумя последующими значениями не превышала 2—5% величины функции, поэтому его можно применять лишь к измерениям достаточно высокой степени точности и плавности.

Порядок разностного сглаживания.

1. Из таблицы берут значения аргумента (первый столбец) и функции (третий столбец).

2. Вычисляют средние межклассовые значения аргумента и заносят их во второй столбец.

3. Определяют разности значений функций по третьему столбцу и заносят в четвертый столбец против средних межклассовых значений аргумента.

4. Наносят значения разностей на график в функции средних значений аргумента.

5. На графике на глаз проводят линию, среднюю по отношению к точкам разностей.

6. Берут по графику сглаженные разности, заносят их в пятый столбец против несглаженных разностей.

7. Соответственно находят сглаженные значения функций и записывают последние в шестой столбец (против несглаженных значений функции третьего столбца).

Если первичное сглаживание недостаточно, проводят его вторично, так же как первое.

В таблице 8.6 показан пример разностного сглаживания.

Таблица 8.6

Пример разностного сглаживания

Толщина защитного покрытия, мк	Средние межклассовые значения толщины покрытия, мк	Срок службы защитной пленки, ч	Разность δ	Сглаженные разности δ' , ч	Сглаженный срок службы пленки, ч
1	—	61,7	—	—	61,7
2	1,5	62,8	1,1	1,1	62,8
3	2,5	65,0	2,2	1,9	64,7
4	3,5	67,4	2,4	2,7	67,4
5	4,5	71,1	3,7	3,4	70,8
6	5,5	75,0	3,9	4,0	74,8
7	6,5	79,5	4,5	4,5	79,3

Во втором столбце показаны средние межклассовые значения аргумента (толщины защитной пленки).

В третьем столбце приведены значения сроков истирания (в часах) защитной пленки в функции ее толщины.

В четвертом даны разности.

В пятом помещены сглаженные по рисунку 8.2 разности.

В шестом — сглаженные значения функции.

Заметим, что, получив в столбце 5 сглаженные значения разностей δ' , можно сглаживать функции (столбец 6) с любого члена, опытного ряда, получая каждый раз различные сглаженные ряды функций. Выбор члена ряда зависит от его значимости; в данном случае исходным был взят первый член опытного ряда функции (61,7 ч).

Сглаживание графика, или, что одно и то же, проведение плавной кривой по опытным точкам, имеющим разброс, также подчинено некоторым простым правилам. Чтобы провести плавную кривую, надо употреблять остро отточенный твердый карандаш и прозрачные, гибкие шаблоны (лекала, угольники, линейки). Не обязательно, чтобы кривая проходила через опытные точки, но необходимо сохранить общий характер закономерности; расположение кривой должно соответствовать физическому смыслу явления.

Основное правило графического сглаживания: *плавная кривая должна быть возможно ближе ко всем опытным точкам. Отсюда вытекают требования: сумма отрезков нормалей, опущенных из опытных точек на кривую, должна равняться нулю; если соединить все опытные точки прямыми и провести плавную кривую, то сумма площадей, отсеченных кривой по обе ее стороны, должна быть равна нулю (в обоих случаях принимают разные знаки для точек, находящихся по разные стороны от кривой); в обоих случаях также необходимо, чтобы сумма абсолютных величин, то есть отрезков нормалей или площадей, была минимальной.*

Вначале осторожно, без нажима, проводят первую кривую. Если она не удовлетворяет проверочным требованиям, ее не стирают, а наносят вторую линию. Если понадобится, вычерчивают третью. Затем тонкой линией обводят лучший вариант, а остальные стирают.

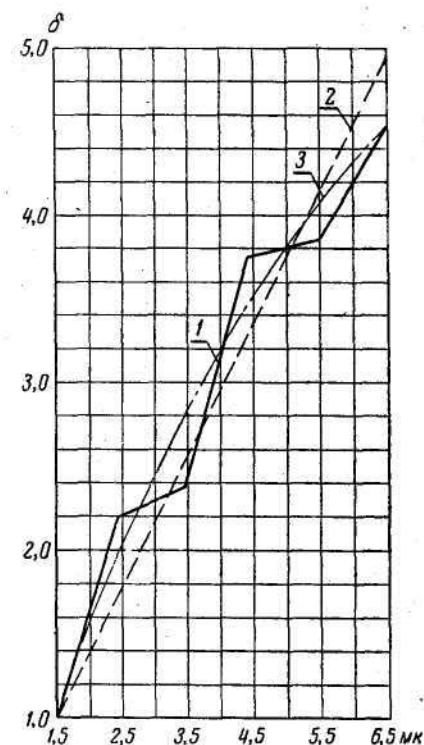


Рис. 8.2. Сглаживание графика разностей, нанесенных по данным таблицы 8.6.

Сгладим разности δ по таблице 8.6. На рисунке 8.2 показан график: разности в функции толщины пленки. Опытные точки соединены сплошной ломаной линией 1. Вначале проведем штриховую прямую 2, удовлетворяющую двум первым требованиям проверки. Но из чертежа ясно, что прямая не удовлетворяет третьему требованию: видно, что плавная кривая даст возможность провести ее более близко к опытным точкам. Применяя гибкий шаблон, подбираем закономерную кривую 3, наиболее удовлетворяющую всем трем требованиям проверки (показана штрих-пунктиром). Взяв ординаты, соответствующие точкам аргумента, получаем ряд сглаженных значений (округленно до десятых долей): $\delta' = 1,1; 1,9; 2,7; 3,4; 4,0$ и $4,5$ ч.

При точном и полном выполнении проверочных требований графический способ сглаживания кривых является наиболее общим и

универсальным, так как он не содержит принципиальных ошибок некоторых математических методов (например, сглаживание непараболической кривой параболическим приближением). Следует принять во внимание, что точность графического способа зависит от масштабов чертежа по обеим осям.

При любом способе сглаживания табличных данных и графиков следует помнить, что этот метод не должен нарушать физического смысла явления. При достаточном количестве измерений и малых интервалах изменения независимой переменной сглаженная кривая может хорошо характеризовать развитие явления. Если же измерений было мало или интервалы были неравномерны и слишком велики, невнимательно сглаженная кривая может не соответствовать развитию явления особенно по экстремумам.

Отклонения или ошибки кривых

Здесь укажем на основные методы оценки полученных кривых, характеризующих развитие явления.

1. Отклонения правильно сглаженных кривых от опытных точек объясняются преимущественно неточностью измерений и влиянием неучтенных или не нейтрализованных факторов. Такие кривые оценивают несколькими способами:

а) максимальной разностью ординат опыта и сглаженной кривой, лучше с указанием, к какому участку сглаженной кривой она относится. Если желательно указывать отклонение в относительных величинах, за единицу (или за сто) берут ординату сглаженной кривой. В некоторых случаях, когда максимальные отклонения примерно равны, желательно указать абсолютную или относительную область отклонений по абсциссе;

б) стандартом отклонений ординат сглаженной кривой от опытных точек, причем за среднюю берут ординаты соответствующих точек сглаженной кривой;

в) сравнением средней арифметической всех ординат опытных точек и такой же средней соответственных ординат сглаженной кривой. При правильном проведении сглаживания эти средние должны быть весьма близки. Целесообразно также вычислить относительную ошибку, если взять за единицу (или за сто) значение средней сглаженной кривой.

2. Если сравнивают несколько сглаженных кривых, описывающих в одних и тех же пределах закон развития явлений (или дающих характеристику такого закона), то за идеальную кривую принимают среднюю всех опытных кривых, как наиболее вероятную.

Чтобы оценить отклонения отдельных кривых от средней кривой, необходимо: сравнить формы кривых; найти максимальные отклонения от средней кривой и представить их в виде отношений к соответствующим точкам средней кривой (по ординатам); сравнить средние арифметические ординаты точек по каждой кривой и средней арифметической ординат соответствующих точек средней кривой; установить стандарты отклонений опытных кривых от соответствующих ординат усредненной кривой.

Для последних двух оценок должно быть взято достаточно большое количество измерений с постоянным шагом квантования.

3. При наличии теоретических кривых, то есть полученных из рациональных закономерностей (например, нормированной кривой нормального распределения), оценку соответствия сглаженной опытной кривой указанной теоретической кривой проводят по достаточно универсальному критерию χ^2 (критерий К. Пирсона).

Интерполяция и экстраполяция

Под **интерполяцией** подразумевается нахождение промежуточных значений функций (внутри опытного ряда).

Наиболее прост метод линейной интерполяции (применение пропорциональных частей).

Рассмотрим линейную функцию, которая имеет общий вид

$$y = ax + b, \quad (8.5)$$

где a и b — постоянные коэффициенты.

Графикам линейной функции служит прямая линия (рис. 8.3). Коэффициент a называется *угловым коэффициентом* этой прямой; чем $|a|$ больше, т. е. чем a больше по абсолютному значению, тем прямая идет круче.

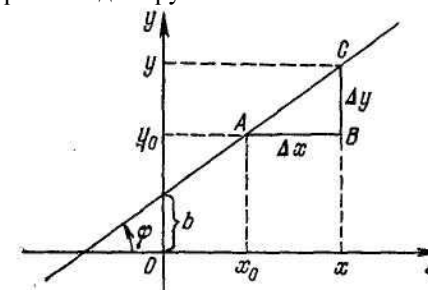


Рис. 8.3

Если аргумент изменился от некоторого значения x_0 до значения x , получив *приращение* Δx , а функция получила соответствующее приращение Δy , то из равенств

$$y_0 = ax_0 + b, y = ax + b$$

следует $y - y_0 = a(x - x_0)$, т. е.

$$\Delta y = a\Delta x$$

и

$$\Delta y / \Delta x = a \tag{8.6}$$

Итак, для линейной функции отношение приращения функции к приращению аргумента постоянно и равно угловому коэффициенту графика; *приращение линейной функции прямо пропорционально приращению аргумента.*

На рис. 8.3 изображен случай, когда $a > 0$. Если $a < 0$, то прямая проходит направо вниз (рис. 8.4).

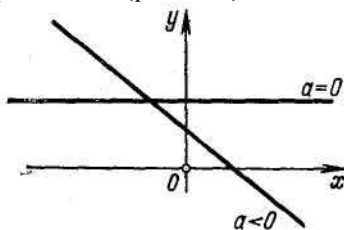


Рис. 8.4

Если $a=0$, то прямая параллельна оси x ; в этом случае функция постоянна, т. е. получается график константы.

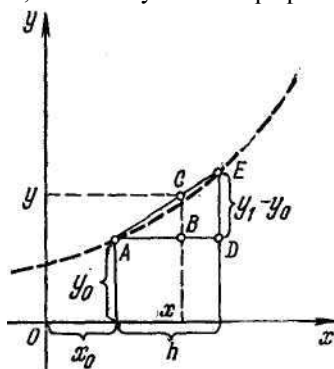


Рис. 8.5

На свойстве приращения линейной функции основана *линейная интерполяция*, которая состоит в следующем. Пусть значения некоторой функции $y=f(x)$, график которой изображен на рис. 8.5 пунктиром, известны при $x = x_0$ и $x = x_0 + h$,

$$f(x_0) = y_0, f(x_0 + h) = y_1$$

но неизвестны при промежуточных значениях x . Тогда мы приближенно заменяем данную функцию линейной, принимающей те же значения при $x = x_0$ и $x = x_0 + h$, т. е. заменяем дугу AE отрезком прямой. Из подобия треугольников ABC и ADE получаем тогда

$$y - y_0 / x - x_0 = y_1 - y_0 / h, \text{ т. е. } y = y_0 + [(y_1 - y_0) / h](x - x_0).$$

Такая замена возможна, если функция $f(x)$ на рассматриваемом интервале мало отличается от линейной.

Она широко применяется, в частности, для таблиц с достаточно малым шагом, когда последовательные значения функции P мало отличаются друг от друга. Когда функция на данном отрезке ее линейна или весьма близка к линейной, этот метод точен. Если не требуется высокая точность, его можно применить и к нелинейным функциям. Например, мы хотим в таблице 8.4 заменить новыми, найденными линейной интерполяцией, опущенные нами данные по средней глубине вспашки и среднему удельному сопротивлению при степени затупления лемехов № 3.

Берем разности между данными по ступеням затупления № 2 и 4:

$$\delta_h = 22,4 - 19,1 = 3,3 \text{ см;}$$

$$\delta_k = 0,76 - 0,55 = 0,21 \text{ кг/см}^2.$$

Между второй и четвертой степенью затупления два промежутка. Предполагая пропорциональность

$$\delta_x :: \delta_h :: \delta_k,$$

где σ_x — шаг таблицы, получаем

$$\frac{\delta_x}{2} :: \frac{3,3}{2} :: \frac{0,21}{2}$$

или степени затупления № 3 соответствует поправка на глубине 1,65 см и по удельному сопротивлению: 0,105 кг/см². Отсюда

$$h_3 = 22,4 - 1,65 \approx 20,7 \text{ см;}$$

$$K_3 = 0,55 + 0,105 \approx 0,66 \text{ кг/см}^2.$$

Более употребительно интерполирование по разностям. Предварительно составляют таблицу разностей различных порядков (табл. 8.7).

Таблица 8.7.

Схема табулирования (составления таблиц) разностей

		Разность порядка			
		первого	второго	третьего	четвертого
y	x	f(x ₀ - 2δ _x)	f(x ₀ - δ _x)	f(x ₀)	f(x ₀ + δ _x)
...	...	δ ₁ f(x ₀ - 2δ _x)	δ ₁ f(x ₀ - δ _x)	δ ₁ f(x ₀)	δ ₁ f(x ₀ + δ _x)
...	...	δ ₂ f(x ₀ - 2δ _x)	δ ₂ f(x ₀ - δ _x)	δ ₂ f(x ₀)	δ ₂ f(x ₀ + δ _x)
...	...	δ ₃ f(x ₀ - 2δ _x)	δ ₃ f(x ₀ - δ _x)	δ ₃ f(x ₀)	δ ₃ f(x ₀ + δ _x)
...	...	δ ₄ f(x ₀ - 2δ _x)	δ ₄ f(x ₀ - δ _x)	δ ₄ f(x ₀)	δ ₄ f(x ₀ + δ _x)
...	...	δ ₅ f(x ₀ - 2δ _x)	δ ₅ f(x ₀ - δ _x)	δ ₅ f(x ₀)	δ ₅ f(x ₀ + δ _x)
...	...	δ ₆ f(x ₀ - 2δ _x)	δ ₆ f(x ₀ - δ _x)	δ ₆ f(x ₀)	δ ₆ f(x ₀ + δ _x)
...	...	δ ₇ f(x ₀ - 2δ _x)	δ ₇ f(x ₀ - δ _x)	δ ₇ f(x ₀)	δ ₇ f(x ₀ + δ _x)
...	...	δ ₈ f(x ₀ - 2δ _x)	δ ₈ f(x ₀ - δ _x)	δ ₈ f(x ₀)	δ ₈ f(x ₀ + δ _x)
...	...	δ ₉ f(x ₀ - 2δ _x)	δ ₉ f(x ₀ - δ _x)	δ ₉ f(x ₀)	δ ₉ f(x ₀ + δ _x)
...	...	δ ₁₀ f(x ₀ - 2δ _x)	δ ₁₀ f(x ₀ - δ _x)	δ ₁₀ f(x ₀)	δ ₁₀ f(x ₀ + δ _x)

В этой схеме показаны разности до четвертого порядка включительно. Из таблицы видно, что число порядков может быть больше или меньше, так как наибольшее число их равно количеству взятых классов минус единица. Разности имеют соответственную значимость. Вычисляют разности до порядка, в котором практически все разности будут одинаковы.

Составим на основании таблицы 8.4 таблицу 8.8 разностей. При этом опускаем все нечетные классы (так как нами опущен класс, соответствующий степени затупления 3, и мы путем интерполяции ищем соответствующие значения h и K).

Для вычислений чаще применяют интерполяционную формулу Ньютона:

$$y = y_0 + u\delta_1 y_0 + \frac{u(u-1)}{2!} \delta_2 y_0 + \frac{u(u-1)(u-2)}{3!} \delta_3 y_0 + \dots + \frac{u(u-1)\dots(u-n+1)}{n!} \delta_n y_0, \tag{8.5}$$

где y — значение функции, соответствующей заданному промежуточному значению аргумента x;

y₀ — ближайшее к находимому y меньшее значение функции, ему соответствует аргумент x₀;

δ_i y₀ — соответствующая разность i-го порядка;

$$u = \frac{x - x_0}{\delta_x} \text{ — величина } u \text{ должна быть неотрицательной;}$$

n — общее количество порядков разностей.

Первые два члена правой части уравнения (8.5) дают линейную интерполяцию, остальные представляют степенной многочлен (бесконечный ряд). В зависимости от требуемой точности следует отбрасывать все члены слишком высоких степеней.

Таблица 8.8

Разности значений функций (столбцы функций h и K не приводятся)

Степень затупления лемеха	δ _{1h}	δ _{2h}	δ _{3h}	δ _{1k}	δ _{2k}	δ _{3k}
0	1,00			0,12		
2	3,30	+2,30		0,21	+0,09	
4	0,60	-2,70	-5,00	0,09	-0,12	-0,21
6						

Посмотрим, какими будут результаты более точного вычисления средней глубины вспашки и среднего удельного сопротивления при степени затупления 3.

Предварительно из таблицы 8.4 получаем (считая, что шаг таблицы увеличен вдвое):

$$\delta_x = 4 - 2 = 2; \quad u = + \left(\frac{3-4}{2} \right) = 0,5;$$

$$y_{0h} = 19,1; \quad y_{0k} = 0,55$$

Тогда по формуле (8.5), учитывая данные таблицы 8.8, получим:

$$y_h = 19,1 + 0,5 \cdot 3,3 + \frac{0,5(0,5-1)}{2!} (-2,7) + \\ + \frac{0,5(0,5-1)(0,5-2)}{3!} (-5,0) = 20,774 \approx 20,8 \text{ см};$$

$$y_k = 0,55 + 0,5 \cdot 0,21 + \frac{0,5(0,5-1)}{2!} (-0,12) + \\ + \frac{0,5(0,5-1)(0,5-2)}{3!} (-1) = 0,657 \approx 0,66 \text{ кг/см}^2.$$

Сравнивая результаты вычислений по обоим способам интерполяции, видим их эффективность в применении к данному случаю (участок, близкий к прямой).

Интерполяция по правильно вычерченному графику функции наиболее проста и не требует никаких вычислений.

Интерполяционная формула Лагранжа. Пусть при изучении некоторого явления установлено, что существует функциональная зависимость между величинами y и x , описывающая количественную сторону данного явления; при этом функция $y=\varphi(x)$ остается нам неизвестной, но на основании эксперимента установлены значения этой функции $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$ при некоторых значениях аргумента $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$, принадлежащих отрезку $[a, b]$.

Задача заключается в том, чтобы найти функцию, по возможности более простую с точки зрения вычислительной (например, многочлен), которая представляла бы неизвестную функцию $y=\varphi(x)$ на отрезке $[a, b]$ точно или приближенно. В более отвлеченной форме эту задачу можно сформулировать так: на отрезке $[a, b]$ заданы значения неизвестной функции $y=\varphi(x)$ в $n+1$ различных точках x_0, x_1, \dots, x_n .

$$y_0 = \varphi(x_0), \\ y_1 = \varphi(x_1), \dots, y_n = \varphi(x_n);$$

требуется найти многочлен $P(x)$ степени $\leq n$, приближенно выражающий функцию $\varphi(x)$.

В качестве такого многочлена естественно взять многочлен, значения которого в точках $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ совпадают с соответствующими значениями $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$ функции $\varphi(x)$ (рис. 8.6).

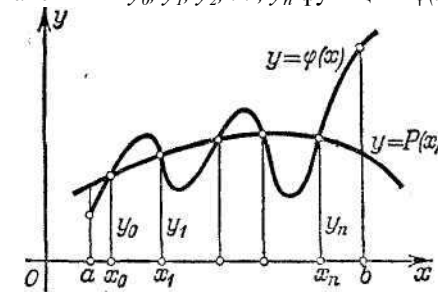


Рис. 8.6.

Тогда поставленная задача, называемая «задачей интерполирования функции», формулируется так: для данной функции $\varphi(x)$ найти многочлен $P(x)$ степени $\leq n$, который при заданных значениях x_0, x_1, \dots, x_n принимал бы значения

$$y_0 = \varphi(x_0), \quad y_1 = \varphi(x_1), \quad \dots, \quad y_n = \varphi(x_n).$$

В качестве искомого многочлена возьмем многочлен n -й степени вида

$$P(x) = C_0(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n) + \\ + C_1(x-x_0)(x-x_2)\dots(x-x_n) + \\ + C_2(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)\dots(x-x_n) + \dots \\ \dots + C_n(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1}) \quad (8.6)$$

и определим коэффициенты C_0, C_1, \dots, C_n так, чтобы выполнялись условия

$$P(x_0) = y_0, \quad P(x_1) = y_1, \quad \dots, \quad P(x_n) = y_n. \quad (8.7)$$

Положим в формуле (8.6) $x = x_0$; тогда, принимая во внимание равенства (8.7), получим:

$$y_0 = C_0(x_0-x_1)(x_0-x_2)\dots(x_0-x_n),$$

откуда

$$C_0 = \frac{y_0}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\dots(x_0-x_n)}.$$

Затем, положив $x = x_0$, получим:

$$y_1 = C_1 (x_1 - x_0) (x_1 - x_2) \dots (x_1 - x_n),$$

откуда

$$C_1 = \frac{y_1}{(x_1 - x_0) (x_1 - x_2) \dots (x_1 - x_n)}.$$

Таким же образом найдем:

$$C_2 = \frac{y_2}{(x_2 - x_0) (x_2 - x_1) (x_2 - x_3) \dots (x_2 - x_n)};$$

$$C_n = \frac{y_n}{(x_n - x_0) (x_n - x_1) (x_n - x_2) \dots (x_n - x_{n-1})}.$$

Подставляя найденные значения коэффициентов в формулу (8.6), получим:

$$P(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\dots(x_0-x_n)} y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\dots(x_1-x_n)} y_1 + \dots + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)\dots(x_n-x_{n-1})} y_n. \quad (8.8)$$

Эта формула называется *интерполяционной формулой Лагранжа*.

Отметим без доказательства, что если $\varphi(x)$ имеет производную $(n+1)$ -го порядка на отрезке $|a, b|$, то ошибка при замене функции $\varphi(x)$ многочленом $P(x)$, т.е. величина

$$R(x) = \varphi(x) - P(x)$$

удовлетворяет неравенству

$$|R(x)| < |(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)| \frac{1}{(n+1)!} \max |\varphi^{(n+1)}(x)|.$$

Пример. Из эксперимента получены такие значения функции $y = \varphi(x)$: $y_0 = 3$ при $x_0 = 1$; $y_1 = -5$ при $x_1 = 2$; $y_2 = -4$ при $x_2 = -4$. Требуется представить приближенно функцию $y = \varphi(x)$ многочленом 2-й степени.

Решение. По формуле (8.8) имеем (при $n = 2$):

$$P(x) = \frac{(x-2)(x+4)}{(1-2)(1+4)} \cdot 3 + \frac{(x-1)(x+4)}{(2-1)(2+4)} \cdot (-5) + \frac{(x-1)(x-2)}{(-4-1)(-4-2)} \cdot 4,$$

или

$$P(x) = -\frac{39}{30} x^2 - \frac{123}{30} x + \frac{252}{30}.$$

Под экстраполяцией понимается нахождение по опытному ряду значений функции других ее значений, находящихся вне опытного ряда. Когда пределы изменения факторов, полученные в опытах, почему-либо надо расширить, применяют экстраполяцию, но пользоваться ею следует осторожно. Если закономерности изменения

функций могут быть представлены рациональной формулой, лучше всего для экстраполяции выразить математически эти закономерности. Когда формула эмпирическая или есть только график опытных закономерностей, экстраполяция в пределах одного классического интервала (по аргументу) в каждую сторону (по формуле или продуманным продолжением плавной кривой) в большинстве случаев дает практически приемлемую точность, но более широкая экстраполяция будет ненадежной. Для экстраполяции можно воспользоваться формулой (8.5).

Изложенное в этом разделе позволяет установить функциональные связи, но не определяет их численно. Последнее является одной из задач изложения остальных разделов книги.

8.3. Анализ опытных данных

Задачи анализа

Чтобы полнее раскрыть закономерности развития явления, его связи и взаимодействия, необходимо тщательно рассмотреть сглаженные опытные данные таблиц и графиков.

Прежде всего необходимо установить физическую причинную связь между аргументом и функциями, пользуясь не только таблицами и графиками, но и отметками и всеми материалами, имеющимися в распоряжении исследователя. Возможно, что потребуются специальная серия опытов. Так, результаты исследования по первому примеру говорят о том, что по мере затупления лемехов глубина пахоты изменяется, но причину этого явление можно установить, только исследовав изменения формы затупляющегося лемеха и силы, действующие на него.

Определив причины изменения функции при изменении аргумента и необходимые связи, можно анализировать опытные данные и проводить теоретические обобщения.

Ранее нами была охарактеризована роль средней арифметической. Иногда одной средней арифметической недостаточно для характеристики физической сущности явления. Например, это бывает в случае, если наиболее часто полученное значение признака (при распределении всех случаев измерений по классам) явно сдвинуто от середины распределения к его началу или концу.

Такой сдвиг может полностью соответствовать физическому явлению. Если, например, на коленчатый вал двигателя внутреннего сгорания дать переменную нагрузку, в среднем близкую к нормальной, обороты вала при колебании нагрузки могут не дать симметричного распределения, близкого к нормальному, со

средней арифметической, соответствующей наибольшему количеству замеров.

Если при некоторой недогрузке (по крутящему моменту) обороты вала двигателя возрастут на $\Delta_2 n_d$, то при такой же перегрузке и работе на безрегуляторной ветви характеристики обороты снизятся на $\Delta_2 n_d$, причем, как правило, $\Delta_1 n_d \neq \Delta_2 n_d$ и часто $\Delta_2 n_d > \Delta_1 n_d$. Так, например, в результате полевых испытаний был получен такой вариационный ряд:

Средняя по классу об/мин . . .	1425	1475	1525	1575	1625	1675	1725	1775
Число случаев результатов измерений, попавших в классовой интервал n_i ...	99	110	91	121	178	622	980	311

Вычисленная по этому ряду средняя взвешенная равна:

$$\bar{a} \approx 1673 \text{ об/мин.}$$

При нормальной нагрузке на стенде двигатель развивал 1700 об/мин. Если при оценке нагрузки двигателя руководствоваться только средней \bar{a} , придем к выводу, что в среднем двигатель был при полевых испытаниях перегружен. Это заключение было бы из-за указанных физических причин неточным. В таких случаях в качестве характеристики загрузки лучше взять моду. **Мода**— это значение величины, встречающееся с наибольшей частотой. Если есть две близкие по числовому значению и рядом лежащие частоты, мода близка к среднему значению измеряемой величины по этим классам. Когда требуется более точно определить моду, по сгруппированным в классы значениям величин вычерчивают график и графически находят максимум кривой частот, который и будет определять искомую моду.

В рассматриваемом примере наибольшая (980) частота результатов измерений соответствует 1725 об/мин вала двигателя. Вместе с тем отметим, что соседний слева класс (622 случая) также показывает большой рост. Если не вычерчивать график, на этом основании можно взять взвешенную среднюю, значение которой приближенно дает моду:

$$\bar{a} = \frac{1675 \cdot 622 + 1725 \cdot 980}{622 + 980} \approx 1704 \text{ об/мин.}$$

Характеристика нагрузки двигателя оборотами его вала по моде будет значительно более близка к истине, чем по средней арифметической. В рассматриваемом случае двигатель по среднему крутящему моменту работал с небольшой недогрузкой.

В. П. Горячкин указывал, что при анализе явления нельзя ограничиваться одним графиком или рядом цифр. Исследователь должен изучить не только путь (состояние), но также скорость (движение) и ускорение (последнее может характеризовать зависимость данной системы от другой), эти глубоко верные соображения указывают на роль численного дифференцирования и интегрирования опытных функций.

Дифференцирование опытных функций.

Конечные разности и их связь с производными. Прежде чем перейти к дальнейшему изложению, рассмотрим одно из важных понятий современной математики, понятие *конечной разности*. Пусть $y=f(x)$; тогда при данном h выражение

$$\Delta_h y = f(x+h) - f(x)$$

называется *конечной разностью первого порядка* («первой разностью») функции f с шагом h , а выражение

$$\frac{1}{h} \Delta_h y = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

— *первой разделенной разностью*. Из определения производной ясно, что при достаточно малом h будет

$$\frac{1}{h} \Delta_h y \approx y', \tag{8.9}$$

точнее

$$y' = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \Delta_h y.$$

Пусть, например, $y = x^3$. Тогда

$$\Delta_h y = (x+h)^3 - x^3 = 3x^2h + 3xh^2 + h^3,$$

$$\frac{1}{h} \Delta_h y = 3x^2 + 3xh + h^2,$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left(\frac{1}{h} \Delta_h y \right) = \lim_{h \rightarrow 0} (3x^2 + 3xh + h^2) = 3x^2 = y'.$$

Из очевидных свойств разностей отметим такие:

$$\Delta_h (y_1 + y_2) = \Delta_h y_1 + \Delta_h y_2; \quad \Delta_h (Cy) = C \Delta_h y \quad (C = \text{const}).$$

От разности можно взять разность (*вторую*):

$$\Delta_h^2 y = \Delta_h (\Delta_h y) = \Delta_h [f(x+h) - f(x)] = [f(x+2h) - f(x+h)] - [f(x+h) - f(x)] = f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x).$$

Аналогично определяется вторая разделенная разность

$$\frac{1}{h} \Delta_h \left(\frac{1}{h} \Delta_h y \right) = \frac{1}{h^2} \Delta_h (\Delta_h y) = \frac{1}{h^2} \Delta_h^2 y = \frac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2}.$$

Так как взятие разделенной разности с малым шагом примерно равносильно дифференцированию, то *вторая разделенная разность с малым шагом приближенно равна второй производной, точнее,*

$$y'' = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^2} \Delta_h^2 y = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2}. \quad (8.10.)$$

Так, в предыдущем примере

$$\begin{aligned} \Delta_h^2 y &= \Delta_h (3x^2h + 3xh^2 + h^3) = \\ &= 3(x+h)^2h + 3(x+h)h^2 + h^3 - 3x^2h - 3xh^2 - h^3 = 6xh^2 + 6h^3; \\ \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^2} \Delta_h^2 y &= \lim_{h \rightarrow 0} (6x + 6h) = 6x = y''. \end{aligned}$$

Аналогично определяются третья разность

$$\Delta_h^3 y = \Delta_h (\Delta_h^2 y)$$

и третья разделенная разность

$$\frac{1}{h^3} \Delta_h^3 y,$$

которая в пределе дает третью производную y''' , и т. д.

Вычисление этих разностей особенно удобно, если функция задана табличным способом. Для таблицы общего вида можно написать $\Delta y_1 = y_2 - y_1$, $\Delta y_2 = y_3 - y_2$, ..., вообще $\Delta y_k = y_{k+1} - y_k$ здесь нижний индекс у Δy_k означает уже не шаг, который для таблицы зафиксирован, а номер разности. Далее $\Delta^2 y_1 = \Delta y_2 - \Delta y_1$, $\Delta^2 y_2 = \Delta y_3 - \Delta y_2$ и т. д. Например, при $h = 0,1$:

x	10,0	10,1	10,2	10,3	10,4	10,5	10,6	10,7
y	1,00000	1,00432	1,00860	1,01284	1,01703	1,02119	1,02531	1,02938
$10^5 \Delta y$	432	428	424	419	416	412	407	
$10^6 \Delta^2 y$	-4	-4	-5	-3	-4	-5		
$10^8 \Delta^3 y$	0	-1	2	-1	-1			

(Приведен отрывок из таблицы логарифмов, причем значения разностей умножены на 100 000, чтобы избавиться от десятичных нулей.)

Малость и почти постоянство вторых разностей в приведенном примере указывают на плавность хода изменения функции, на отсутствие случайных «выпадов» из этого хода. Такая закономерность может проявляться в разностях более высокого порядка и всегда свидетельствует о «правильности» хода изменения функции. Конечно, если шаг не мал, а также вблизи точек разрыва и т. п. разности могут и не быть малыми, но обычно в них проявляется та или иная закономерность. В то же время случайные ошибки в составлении таблицы резко проявляются в высших разностях и, таким образом, могут быть уловлены. Пусть, например, в приведенной таблице вместо 1,01284 по ошибке было бы написано 1,01294. Тогда четвертая строка имела бы вид -4, +6, -25, +7, -4, -5, т. е. закономерность, очевидно, нарушена. По этой же причине, если таблица получена из эксперимента, проведенного не с особенно высокой точностью, то разности выше второго порядка применяются редко; часто ограничиваются даже только первыми разностями.

Иногда разность $y_{k+1} - y_k$ сопоставляют не значению x_k , как выше, а значению $x_k + h/2$, которое обозначают

$$x_{k + \frac{1}{2}}$$

и условно называют *полуцелым*, в отличие от «целых» значений x_k (конечно, целыми или полуцелыми на самом деле являются номера, а не сами x). Тогда разность называется *центральной* и обозначается

$$\delta_{k + \frac{1}{2}} y = y_{k+1} - y_k.$$

При делении ее на шаг h получается разделенная центральная разность. Аналогично составляются центральные разности второго порядка

$$\delta_k^2 y = \delta_{k + \frac{1}{2}} y - \delta_{k - \frac{1}{2}} y;$$

они опять определены при «целых» значениях аргумента и т. д.

Из рис. 8.7 видно, что разделенная центральная разность, равная угловому коэффициенту хорды BC , ближе к производной (к угловому коэффициенту касательной в точке A), чем простая разделенная разность (угловой коэффициент хорды AD).

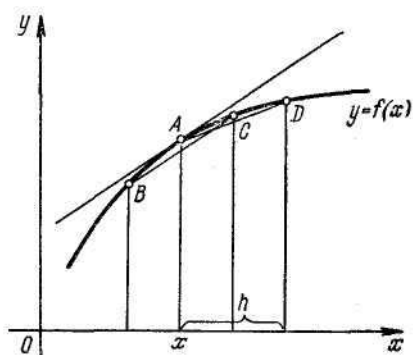


Рис. 8.7.

Это легко проверить с помощью ряда Тейлора : разность

$$\frac{\Delta y}{h} - y' = \frac{y(x+h) - y(x)}{h} - y'(x) = \frac{h}{2} y''(x) + \frac{h^2}{6} y'''(x) + \dots$$

при малых h имеет порядок h , тогда как разность

$$\frac{\delta y}{h} - y' = \frac{y(x+\frac{h}{2}) - y(x-\frac{h}{2})}{h} - y'(x) = \frac{h^2}{24} y'''(x) + \frac{h^4}{1920} y^{(5)}(x) + \dots$$

имеет порядок h^2 . (Аналогично находится порядок ошибки других приближенных формул при малом шаге.) Итак, приближенные значения производной лучше определять с помощью центральной разделенной разности, чем по формуле (8.9). В рассмотренном нами ниже методе численного дифференцирования будет указан еще более точный способ приближенного вычисления производных любого порядка.

Если разделенные разности при малом шаге близки к соответствующим производным и во многом им аналогичны, то сами (неразделенные) разности близки к соответствующим дифференциалам.

Например, из формул (8.10) видим, что

$$\frac{1}{h^2} \Delta_h^2 y = y'' + \alpha (|\alpha| \ll 1),$$

т. е. α — бесконечно малая при $h \rightarrow 0$; отсюда

$$\Delta_h^2 y = y'' h^2 + \alpha h^2 = y'' (\Delta x)^2 + \alpha h^2 = d^2 y + \alpha h^2 \quad (|\alpha h^2| \ll h^2).$$

Значит, при

$$y'' \neq 0, \Delta_h^2 y \text{ и } d^2 y$$

различаются на величину высшего порядка малости и при $h \rightarrow 0$ являются бесконечно малыми эквивалентными.

Численное дифференцирование. Численное дифференцирование обычно производится, если функция, от которой надо найти производную, задана таблично. Это можно сделать так: согласно методам, которые изложены выше, необходимо заменить рассматриваемую функцию многочленом, от которого и найти производную. Например, из формулы Ньютона получается

$$f'(x) \approx \frac{\Delta y_k}{h} + \frac{\Delta^2 y_k}{h} \left(\frac{s}{h} - \frac{1}{2} \right) + \frac{\Delta^3 y_k}{2h} \left[\left(\frac{s}{h} \right)^2 - 2 \left(\frac{s}{h} \right) + \frac{2}{3} \right];$$

взяв в формуле бесконечного ряда больше членов, можно получить более точный результат. В частности, полагая $x=x_k$ (т.е. $s=0$), получим

$$f'(x_k) \approx \frac{1}{h} \left(\Delta y_k - \frac{\Delta^2 y_k}{2} + \frac{\Delta^3 y_k}{3} \right).$$

более точная формула имеет вид бесконечного ряда

$$f'(x_k) = \frac{1}{h} \left(\frac{\Delta y_k}{1} - \frac{\Delta^2 y_k}{2} + \frac{\Delta^3 y_k}{3} - \frac{\Delta^4 y_k}{4} + \dots \right). \quad (8.11)$$

Подобным образом можно получить формулы для производных второго и последующих порядков.

Отметим, в частности, формулу, вытекающую из формулы Ньютона,

$$f'(x_k) = \frac{1}{2h} \left\{ (\Delta y_{k-1} + \Delta y_k) - \frac{1}{6} (\Delta^3 y_{k-2} + \Delta^3 y_{k-1}) + \frac{1}{30} (\Delta^5 y_{k-3} + \Delta^5 y_{k-2}) - \dots \right\}.$$

В ней последовательные члены имеют первый, третий, пятый и т. д. порядки малости и коэффициенты убывают быстрее, чем в ряде (8.11).

Если таблица функции получилась в результате эксперимента, то малая ошибка в значении функции после деления на малый шаг может привести к конечной и даже большой ошибке в значении производной. Еще хуже обстоит дело при вычислении производных высших порядков. Поэтому желательно, чтобы шаг таблицы был по крайней мере на порядок (т. е., скажем, в 10 раз) больше, чем возможная ошибка в значении функции; для вычисления производной второго порядка шаг должен быть на два порядка больше этой ошибки. Из-за этой трудности при дифференцировании эмпирических функций часто предпочитают пользоваться не интерполяционными, а другими эмпирическими формулами, которые составляются с учетом всех опытных данных и являются значительно более устойчивыми относительно случайных ошибок эксперимента.

О наилучшем приближении функций многочленами.

В связи с задачей, рассмотренной нами в предыдущих разделах, естественно поставить такой вопрос: пусть на отрезке $[a, b]$ задана

непрерывная функция $\varphi(x)$. Можно ли эту функцию с любой наперед заданной степенью точности приближенно представить в виде многочлена $P(x)$? Иначе говоря, можно ли подобрать такой многочлен $P(x)$, чтобы разность между $\varphi(x)$ и $P(x)$ по абсолютной величине во всех точках отрезка $[a, b]$ была меньше любого наперед заданного положительного числа ε ? Утвердительный ответ на этот вопрос содержится в следующей теореме, которую мы приводим здесь без доказательства:

Теорема Вейерштрасса. Если функция $\varphi(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$, то для любого $\varepsilon > 0$ существует такой многочлен $P(x)$, что во всех точках указанного отрезка выполняется неравенство $|\varphi(x) - P(x)| < \varepsilon$.

Приводим следующий способ непосредственного построения таких многочленов, которые приближенно равны непрерывной функции $\varphi(x)$ на заданном отрезке.

Пусть, например, функция $\varphi(x)$ непрерывна на отрезке $[0, 1]$. Составим выражение

$$B_n(x) = \sum_{m=0}^n \varphi\left(\frac{m}{n}\right) C_n^m x^m (1-x)^{n-m}.$$

Здесь C_n^m — биномиальные коэффициенты,

$\varphi\left(\frac{m}{n}\right)$ — значение данной функции в точке $x = m/n$

Выражение $B_n(x)$ является многочленом n -ой степени.

Если задано произвольное $\varepsilon > 0$, то можно подобрать такой приведенный выше многочлен (т. е. так выбрать его степень n), чтобы для всех значений x на отрезке $[0, 1]$ выполнялось неравенство $|B_n(x) - \varphi(x)| < \varepsilon$.

Отметим, что рассмотрение отрезка $[0, 1]$, а не произвольного отрезка $[a, b]$ не является существенным ограничением общности, так как с помощью замены переменного $x = a + t(b - a)$ можно любой отрезок $[a, b]$ преобразовать и отрезок $[0, 1]$. При этом многочлен n -ой степени преобразуется и многочлен той же степени.

Рассмотрим теперь на примере применения метода численного дифференцирования.

Для численного дифференцирования пригодны лишь хорошо сглаженные таблицы с постоянным шагом и сглаженные графики.

При численном дифференцировании табличных данных следует применять три формулы, по которым вычисляют производные по разностям. В начале таблицы разностей используют формулу:

$$f'(x)_{x=x_0} = \frac{1}{\delta_x} \left[\delta_1 y_0 - \frac{\delta_2 y_0}{2} + \frac{\delta_3 y_0}{3} - \frac{\delta_4 y_0}{4} + \dots + (-1)^{n-1} \frac{\delta_n y_0}{n} \right]. \quad (8.12)$$

Разности, берущиеся для вычислений по этой формуле, подчеркнуты в таблице 8.7 одной чертой. В конце таблицы разностей используется аналогичная формула:

$$f'(x)_{x=x_N} = \frac{1}{\delta_x} \left(\delta_1 y_N + \frac{\delta_2 y_{N-1}}{2} + \frac{\delta_3 y_{N-2}}{3} + \dots + \frac{\delta_n y_{N-n+1}}{n} \right). \quad (8.13)$$

Разности, берущиеся для вычислений по формуле (8.13), подчеркнуты в таблице 8.7 двумя чертами.

Третью формулу применяют для середины таблицы, то есть при вычислениях производных каждой точки x_n для которой можно построить необходимую горизонтальную строку разностей:

$$f'(x)_{x=x_n} = \frac{1}{\delta_x} \left(\frac{\delta_1 y_{n-1} + \delta_1 y_n}{2} - \frac{1}{6} \cdot \frac{\delta_3 y_{n-2} + \delta_3 y_{n-1}}{2} + \frac{1}{30} \frac{\delta_5 y_{n-3} + \delta_5 y_{n-2}}{2} \right). \quad (8.14)$$

Разности, берущиеся для вычислений по формуле (8.14), подчеркнуты в таблице 8.7 волнистой чертой.

Возьмем простой пример. Пусть необходимо найти производные $y=f(x)^3$ при $x=0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$.

Вначале составим таблицу 16 разностей. Разности третьего порядка одинаковы, и поэтому на нем заканчивается таблица разностей. Рассматривая таблицу 2.9, приходим к выводу, что для получения производных с использованием всех порядков разностей по формуле (2.12) (нисходящие разности) можно взять пять первых рядов сверху ($x=0, 1, 2, 3, 4$), по формуле (2.13) (восходящие разности) — пять последних рядов ($x=3, 4, 5, 6, 7$) и по формуле (2.14) (центральные разности) взять четыре средних ряда ($x=2, 3, 4, 5$). Вначале вычислим по формуле (8.12):

$$f'_0 = \frac{1}{1} \left(1 - \frac{6}{2} + \frac{6}{3} \right) = 0; \quad f'_1 = \frac{1}{1} \left(7 - \frac{12}{2} + \frac{6}{3} \right) = 3;$$

$$f'_2 = \frac{1}{1} \left(19 - \frac{18}{2} + \frac{6}{3} \right) = 12;$$

$$f'_3 = \frac{1}{1} \left(37 - \frac{24}{2} + \frac{6}{3} \right) = 27;$$

$$f'_4 = \frac{1}{1} \left(61 - \frac{30}{2} + \frac{6}{3} \right) = 48.$$

Таблица 8.9

Разности различных порядков

x	y=x ³	δ ₁	δ ₂	δ ₃
0	0	1		
1	1	7	6	
2	8	19	12	6
3	27	37	18	6
4	64	61	24	6
5	125	91	30	6
6	216	127	36	
7	343			

Затем пользуемся формулой (8.14):

$$f'_2 = \frac{1}{1} \left(\frac{7+19}{2} - \frac{1}{6} \cdot \frac{6+6}{2} \right) = 12;$$

$$f'_3 = \frac{1}{1} \left(\frac{19+37}{2} - \frac{1}{6} \cdot \frac{6+6}{2} \right) = 27;$$

$$f'_4 = \frac{1}{1} \left(\frac{37+61}{2} - \frac{1}{6} \cdot \frac{6+6}{6} \right) = 48;$$

$$f'_5 = \frac{1}{1} \left(\frac{61+91}{2} - \frac{1}{6} \cdot \frac{6+6}{2} \right) = 75.$$

Закончим вычисления при помощи формулы (8.13)

$$f'_3 = \frac{1}{1} \left(19 + \frac{12}{2} + \frac{6}{3} \right) = 27;$$

$$f'_4 = \frac{1}{1} \left(37 + \frac{18}{2} + \frac{6}{3} \right) = 48;$$

$$f'_5 = \frac{1}{1} \left(61 + \frac{24}{2} + \frac{6}{3} \right) = 75;$$

$$f'_6 = \frac{1}{1} \left(91 + \frac{30}{2} + \frac{6}{3} \right) = 108;$$

$$f'_7 = \frac{1}{1} \left(27 + \frac{36}{2} + \frac{6}{3} \right) = 147.$$

Перекрещивающиеся вычисления (f'_3 и f'_4) дали одинаковые результаты по всем формулам, так как по каждой использовались полностью все порядки разностей, поэтому лучше вначале определить производные по центральным разностям, потом по верхней невычисленной части ряда — по формуле (8.12), и, наконец, по нижней части — по формуле (8.14).

Так как $(x^3)' = 3x^2$, то легко убедиться в точности произведенных вычислений. Для второй производной применяю формулы:

$$f''(x)_{x=x_0} = \frac{1}{(\delta_x)^2} \left(\delta_2 y_0 - \delta_3 y_0 + \frac{11}{12} \delta_4 y_0 - \frac{10}{12} \delta_5 y_0 + \dots \right); \quad (8.15)$$

$$f''(x)_{x=x_n} = \frac{1}{(\delta_x)^2} \left(\delta_2 y_{n-1} - \frac{1}{12} \delta_4 y_{n-2} + \frac{1}{90} \delta_6 y_{n-3} \dots \right). \quad (8.16)$$

Например, используя данные таблицы 8.9, по формуле (8.15) получаем:

$$f''_0 = \frac{1}{1^2} (6 - 6) = 0; \quad f''_1 = \frac{1}{1^2} (12 - 6) = 6 \text{ и т. д.}$$

По формуле (8.16)

$$f''_6 = \frac{1}{1^2} (36) = 36; \quad f''_5 = \frac{1}{1^2} (30) = 30 \text{ и т. д.}$$

При дифференцировании опытных данных способом табличных разностей следует принимать во внимание, что наиболее точные результаты получаются, когда берут разности $(2n+1)$ порядков, то есть заканчивают нечетным порядком. Этот нечетный порядок выбирают с наименьшими разностями или, по крайней мере, без резкого увеличения значений разностей, что в некоторых случаях возможно.

Приведем пример. Средняя глубина вспашки в функции затупления лемехов — это путь, проходимый последними в плоскости,

нормальной к поверхности почвы. Поэтому нас может интересовать скорость заглубления лемехов в функции их затупления и соответствующее ускорение.

По таблице 8.4 с учетом проведенного сглаживания данных путем интерполяции составляем таблицу 8.10 разностей.

Таблица 8.10

Разности по глубине вспашки

Степень затупления лемехов	Глубина вспашки, см	Разности по глубине вспашки						
		δ_1	δ_2	δ_3	δ_4	δ_5	δ_6	δ_7
0	23,4	-0,2						
1	23,2	-0,8	-0,6					
2	22,4	-1,6	-0,8	-0,2	+0,9			
3	20,8	-1,7	-0,1	+0,7	+0,6	-0,3	-2,4	
4	19,1	-1,7	+1,2	+1,3	-2,1	-2,7	+5,2	+7,6
5	18,6	-0,5	+1,2	-0,8	-2,1	+2,5		
6	18,5	-0,1	+0,4	-0,4	+0,4			
7	18,4	-0,1	0,0					

Из таблицы 8.10 видно, что наименьшие значения разностей нечетных порядков дает третий порядок, поэтому им и ограничиваем вычисления. По центральным разностям определим производные при $x=2, 3, 4$ и 5 ; по нисходящим — при $x=0$ и 1 и по восходящим разностям — производные при $x=6$ и 7 .

Получим на единицу затупления лемехов, см:

$$f'_0 = -0,2 + \frac{0,6}{2} - \frac{0,2}{3} = 0,03;$$

$$f'_1 = -0,8 + \frac{0,8}{2} + \frac{0,7}{3} = -0,17;$$

$$f'_2 = \frac{-0,8 - 1,6}{2} - \frac{1}{6} \cdot \frac{0,7 - 0,2}{2} = -1,24;$$

$$f'_3 = \frac{-1,6 - 1,7}{2} - \frac{1}{6} \cdot \frac{0,7 + 1,3}{2} = -1,72;$$

$$f'_4 = \frac{-1,7 - 0,5}{2} - \frac{1}{6} \cdot \frac{1,3 - 0,8}{2} = -1,14;$$

$$f'_5 = \frac{-0,5 - 0,1}{2} - \frac{1}{6} \cdot \frac{-0,8 - 0,4}{2} = -0,40;$$

$$f'_6 = -0,1 + \frac{0,4}{2} - \frac{0,8}{3} = -0,17;$$

$$f'_7 = -0,1 + 0,0 - \frac{0,4}{3} = -0,23.$$

Как видно, скорость изменения глубины вспашки будет наибольшей при переходе на лемехи второй, третьей и четвертой степеней затупления. Отрицательные значения показывают, что плуг выглубляется. Полученные производные можно сгладить обычным путем.

При экспериментальных исследованиях вид функции, или, что одно и то же, опытная кривая, обычно получается или задается графически, а аналитическое выражение ее исследователю остается неизвестным. Если не требуется выразить функции хотя бы эмпирической формулой, в некоторых случаях проще дифференцирование и интегрирование проводить графически. При тщательном выполнении точность графика соответствует точности вычислений по формуле трапеций.

При исследовании могут быть случаи, когда вслед за получением графика функции надо получить график ее производной, чтобы установить закономерное изменение производной или подсчитать в любой точке плавно изменяющейся кривой как значения функции, так и значения ее производной.

Общие правила вычерчивания дифференциальной кривой поясняет рисунок 8.8.

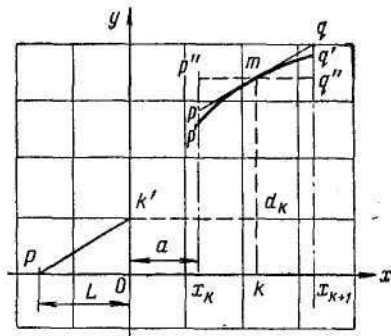


Рис. 8.8. Графическое дифференцирование.

Здесь $p'q'$ — отрезок опытной кривой, близкий к прямой и ограниченный ординатами точек x_k, x_{k+1} . Если провести прямую mk , параллельную оси ординат, так, чтобы было соблюдено равенство площадей, то есть $p'p''m \approx q'q''m$, то площадь прямоугольника $x_k p'' q'' x_{k+1}$ будет равна площади трапеции $x_k p' q' x_{k+1}$. Проведем касательную к кривой в точке m . Тогда $\Delta p p'' m = \Delta q q'' m$. Чем ближе отрезок $p'q'$ к прямой, тем ближе точка k к середине отрезка абсциссы $x_{k+1} - x_k$. На расстоянии L от начала отсчетов по оси абсцисс назначаем точку полюса P . Из полюса P проводим прямую, параллельную pq , до пересечения с осью ординат в точке k' . Тогда точка d_k пересечения нормали из точек k и k' , соответствующая точке m графика функции, будет расположена на искомой дифференциальной кривой. Таким образом, лучи из полюса P , параллельные касательным к кривым в точках их пересечения с осью ординат, дадут ординаты кривой, изображающей производную функцию, абсцисса же для каждой ординаты этой кривой совпадает с абсциссой точки касания соответствующей касательной.

Как видно, чем больше полюсное расстояние L , тем крупнее будет график производной. При дифференцировании модули по осям и полюсное расстояние связывает отношение:

$$M_{yд} = \frac{L \cdot M_y}{M_x}, \tag{8.17}$$

где $M_{yд}$ — модуль шкалы дифференциальной кривой, мм;
 M_x и M_y — модули шкал аргумента и функции мм;
 L — полюсное расстояние, мм.

График можно представить формулой:
 $y = f(x - a) + c$.

При изменении a весь чертеж, без изменения масштаба, сдвигается параллельно оси абсцисс. При изменении c (по чертежу $c=0$) весь чертеж, сохраняя масштаб, сдвигается параллельно оси ординат. Если полюс P с проведенными уже лучами смещать параллельно оси ординат без изменения величины L , то чертеж производной функции сдвинется на такое же расстояние относительно кривой функции с тем же масштабом; одновременно сместится также и начало отсчетов для ординат производной. Все это используют для наиболее удобного расположения дифференциальной кривой.

На основании графика функции берут $n+1$ точек, соответствующих значениям x_0, \dots, x_n абсцисс, причем равномерное распределение их по оси абсцисс не обязательно. Число n точек устанавливают в зависимости от вида графика функции, исходя из правил определения количества опытов. Кроме того, учитывают, что абсциссы $x_1 - x_2$,

$x_2 - x_3, \dots, x_{n-1} - x_n$ должны ограничивать участки кривой функции так, чтобы можно было точнее определить точки касания, то есть чтобы эти отрезки кривой были близки к прямой или симметричны дугам, ограничиваемым равными ординатами. Слишком малое число n увеличивает ошибку при графической интерполяции, слишком большое — повышает ошибки в проведении касательных. Если предполагают, что дифференциальная кривая будет иметь отрицательное значение, под графиком функции оставляют достаточное для этого место.

Чтобы более точно прочертить касательные, можно провести нормали к кривым (нормаль к кривой в точке касания составляет с касательной прямой угол) при помощи зеркала, поставленного перпендикулярно к плоскости чертежа. Обрез зеркала должен проходить через точку касания. Вращая зеркало вокруг вертикальной оси в точке касания, добиваются, чтобы отражение куска кривой в зеркале составляло с этим куском одну кривую без излома. В этот момент линия обреза зеркала расположена по нормали к кривой в точке касания.

Пример построения дифференциальной кривой дан на рисунке 8.9.

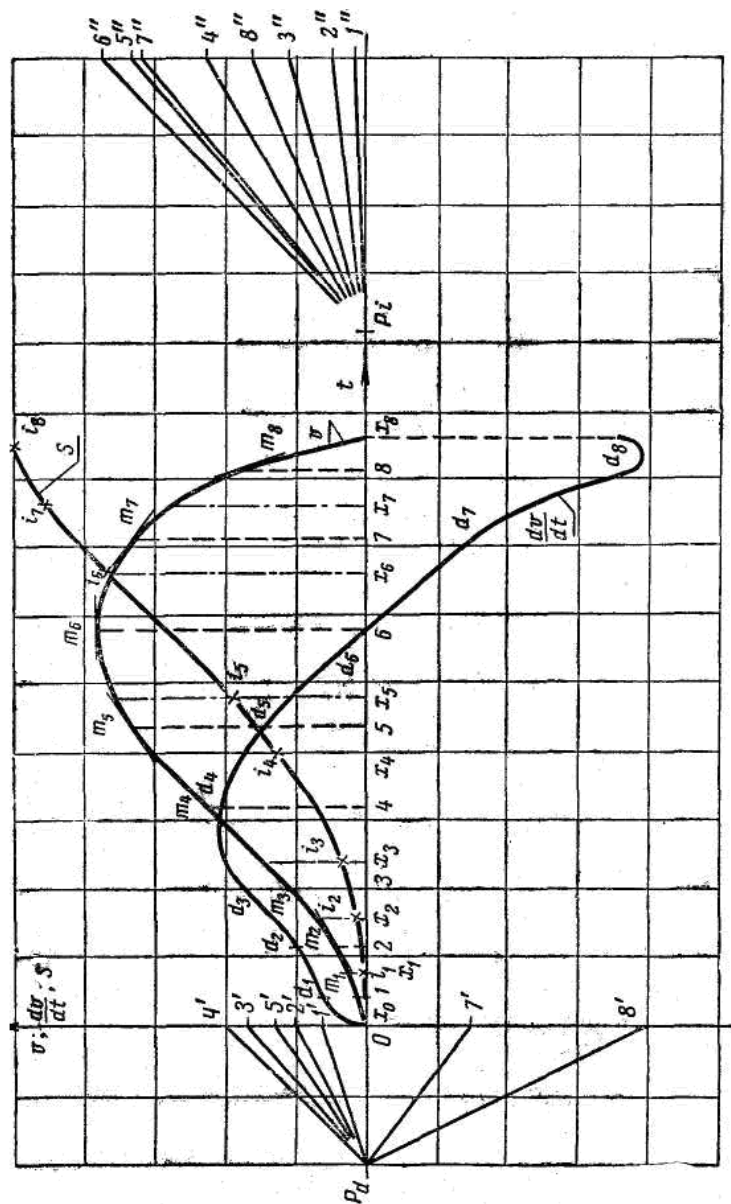


Рис. 8.9. Графическое дифференцирование и интегрирование

Основная кривая функции, найденная опытом, показывает изменение скорости v машины при трогании с места и последующей остановке в функции времени t . Кривая разбита на восемь участков, разграниченных ординатами из точек x_1, \dots, x_8 , показанными штрих-пунктиром. Штрихами обозначены средние ординаты 1, 2, 3 ... 8. После проведения из полюса P_d лучей 1', 2', 3' ... 8' найдены точки пересечения d_1, \dots, d_8 соответствующих нормалей к осям, которые и соединены плавной кривой, представляющей изменение ускорения dv/dt в функции времени.

Интегрирование опытных функций

Можно рекомендовать следующий порядок решения практических задач некоторых типов.

1. Находить площади неправильных фигур при помощи планиметра или нанесением в масштабе чертежа этой площади на миллиметровую бумагу с последующим подсчетом в квадратных миллиметрах. В некоторых случаях удобно весь чертеж площади разбить двумя взаимно перпендикулярными линиями на чертежи в прямоугольных координатах, назначить шкалы по осям и произвести вычисления по способу, изложенному ниже.

2. Определять площади динамограмм, записанных на ленте, методом ординат. Для этого общую длину нулевой линии разбивают на равные промежутки, по которым восстанавливают нормали к нулевой линии; точки пересечения нормалей с кривой динамограммы будут представлять текущие ординаты кривой. Наиболее удобно эту операцию проводить при помощи прозрачной миллиметровой бумаги, одну из линий которой совмещают с нулевой линией диаграммы; тогда промежутки удобно назначить через 1, 5 и 10 мм.

Суммируют все значения ординат, делят на их количество взятых ординат и получают среднюю ординату динамограммы. Умножая среднюю ординату на длину нулевой линии между крайними ординатами, получают площадь, заключенную между крайними ординатами.

3. Вычислять площади по таблицам с постоянным шагом по формуле:

$$\int_{x_1}^{x_n} y dx = \frac{3}{8} \delta_x [(y_1 + y_n) + 2(y_4 + y_7 + y_{10} + \dots) + 3(y_2 + y_3 + y_5 + y_6 + y_8 + y_9 + \dots)]. \quad (8.18)$$

Для примера возьмем из рисунка 8.9 данные по скорости, считая за единицу отсчета сторону нанесенной на рисунок квадратной сетки, и

вычислим площадь, ограниченную кривой скорости, представляющую собой пройденный путь S . Составим небольшую табличку.

Порядковый номер отсчета	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Значение времени, t	0	1	2	3	4	5	6	7	8
Скорость; v	0	0,3	1,1	2,1	3,0	3,6	3,7	3,3	2,0

Тогда по формуле (8.18) искомая площадь (путь S) при $\delta_i=1,0$ будет равна:

$$F = S = \frac{3}{8} 1,0 [(0 + 2,0) + 2(2,1 + 3,7) + 3(0,3 + 1,1 + 3,0 + 3,6 + 3,3 + 2,0)] = 20,1 \text{ единицы.}$$

Существуют более точные способы интегрирования по таблицам (методы Чебышева, Гаусса и др.)

Точность вычислений по формуле (8.18) зависит от значения n . Чем больше n , то есть чем меньше δ_x при одних и тех же крайних значениях y , тем точнее вычисления.

4. Графически строить интегральную кривую (кривую, ординаты которой в соответственных точках абсциссы пропорциональны значениям данного интеграла).

Для построения интегральной кривой опытную кривую разбивают на участки со средними ординатами так же, как и при дифференцировании. На рисунке 8.9 такой исходной кривой является кривая v , а интегральной кривой — кривая пройденного пути S в функции времени. Для построения интегральной кривой проектируют точки m_1, \dots, m_8 интегрируемой кривой на ось ординат; к найденным точкам пересечения $1'', 2'', \dots, 8''$ проводят лучи из полюса P_i . Если, как это показано на рисунке 8.9, кривая функции служит не только для получения производной, но и интегрального ее значения, полюс P_i во избежание путаницы лучей желательно разместить с другой стороны графика. От начальной точки x_0 прочерчивают до пересечения с нормалью к абсциссе x_1 отрезок, параллельный лучу $1''$. В точке пересечения получают первую найденную графически точку интегральной кривой i_1 . Из точки i_1 проводят до пересечения с нормалью к абсциссе x_2 отрезок прямой, параллельный лучу $2''$, и находят вторую точку интегральной кривой i_2 . Поступая аналогично, определяют точки i_3, \dots, i_8 интегральной кривой. Соединяя все найденные точки плавной кривой, получают графическое изображение интегральной функции. Чем больше полюсное расстояние для построения интегральной кривой, тем более полого расположены лучи, тем меньше ординаты графика интегральной кривой. Здесь модули по осям и полюсное расстояние связывает отношение:

$$M_{yi} = \frac{M_x \cdot M_y}{L}$$

Обозначения здесь те же, что и для формулы (8.17).

Чтобы разместить интегральную кривую на рисунке 8.9, полюсное расстояние при интегрировании взято в два раза большим, чем при дифференцировании.

Как уже говорилось, в случае выражения функции формулой, то рекомендуется проводить вычисление ее при помощи формулы трапеции, которая относится к формулам численного интегрирования. Рассмотрим этот метод.

Численное интегрирование

Общие замечания. Основной способ вычисления определенного интеграла с помощью неопределенного на практике не всегда возможен и целесообразен. Многие неопределенные интегралы даже от элементарных функций не выражаются через элементарные функции или имеют чрезмерно громоздкие выражения. Кроме того, функция, которую надо проинтегрировать, может быть задана не формулой, а как-либо иначе. В этих случаях для вычисления интегралов применяется целый ряд способов, о которых мы сейчас дадим общее представление.

1. *Интегралы могут выражаться через хорошо изученные и затабулированные неэлементарные «специальные» функции.*

Таковыми являются, например, функция ошибок

$$\text{Erf } x = \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (-\infty < x < \infty),$$

от английского «error function»;

интегралы Френеля (О. Френель, французский физик, создатель волновой теории света)

$$C(x) = \int_0^x \cos \frac{\pi t^2}{2} dt, \quad S(x) = \int_0^x \sin \frac{\pi t^2}{2} dt \quad (-\infty < x < \infty);$$

интегральная показательная функция

$$\text{Ei } x = \int_{-\infty}^x \frac{e^t}{t} dt \quad (-\infty < x < 0);$$

интегральный синус и интегральный косинус

$$\text{Si } x = \int_0^x \frac{\sin t}{t} dt \quad (-\infty < x < \infty),$$

$$\text{Ci } x = \int_x^\infty \frac{\cos t}{t} dt \quad (0 < x < \infty)$$

и многие другие функции.

Например, чтобы вычислить интеграл

$$I = \int_0^1 \frac{\sin^2 x}{x^2} dx,$$

произведем интегрирование по частям

$$u = \sin^2 x, \quad dv = x^{-2} dx,$$

$$I = \left. -\frac{\sin^2 x}{x} \right|_0^1 + \int_0^1 \frac{2 \sin x \cos x}{x} dx = -\sin^2 1 + \int_0^1 \frac{\sin 2x}{x} dx = |2x = t| =$$

$$= -\sin^2 1 + \int_0^2 \frac{\sin t}{t} dt = -\sin^2 1 + \text{Si } 2 = 0,8973;$$

2. Иногда удается найти точное значение для определенного интеграла с теми или иными пределами, не вычисляя неопределенного интеграла. Это часто бывает довольно трудно, хотя некоторые примеры будут даны в дальнейшем.

Например, в некоторых источниках мы можем прочитать, что

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \text{tg}^p x dx = \frac{\pi}{2} \left(\cos \frac{p\pi}{2} \right)^{-1} \quad (-1 < p < 1), \quad \int_0^{\pi} \ln \sin x dx = -\pi \ln 2 \text{ и т. п.,}$$

хотя соответствующие неопределенные интегралы не являются элементарными функциями.

3. Часто применяются разложения подынтегральной функции в ряды различного вида. Подробное описание этого метода будет дано далее, однако простые степенные ряды можно применять уже сейчас.

Например, применяя ряд для e^x , получим

$$\int_0^1 \frac{e^x - 1}{x} dx = \int_0^1 \frac{1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \dots - 1}{x} dx =$$

$$= \int_0^1 \left(\frac{1}{1!} + \frac{x}{2!} + \frac{x^2}{3!} + \dots \right) dx = \frac{1}{1!} + \frac{1}{2 \cdot 2!} + \frac{1}{3 \cdot 3!} + \dots = 1,318 \text{ (с точностью до } 0,001).$$

Как говорилось ранее, к подобным рядам на практике надо относиться как к конечным суммам, число членов которых берется в соответствии с требуемой степенью точности.

4. *Графическое интегрирование* применяется, если подынтегральная функция задана графиком. Оно основано на геометрическом смысле определенного интеграла, равного площади соответствующей криволинейной трапеции.

5. Наиболее универсальными методами, пригодными к интегралам от произвольных функций, заданных любым способом, в особенности таблично (это, в частности, удобно при применении вычислительных машин), являются методы численного интегрирования.

Формулы численного интегрирования.

Эти формулы дают приближенные значения определенного интеграла, если известны значения подынтегральной функции в некоторых точках (*узлах*) интервала интегрирования. Начнем с наиболее простой формулы. Пусть требуется вычислить

$$\int_a^b y dx, \quad y = f(x), \tag{8.19}$$

причем предполагается, что интервал интегрирования $a \leq x \leq b$ разбит на некоторое число n равных частей и заданы или вычислены значения подынтегральной функции в точках деления.

Обозначим

$$\frac{b-a}{n} = h, \quad f(a) = y_0, \quad f(a+h) = y_1,$$

$$f(a+2h) = y_2, \quad \dots, \quad f(a+nh) = f(b) = y_n.$$

Если провести ординаты для каждого из полученных узлов, то криволинейная трапеция, площадь которой равна интегралу (8.19), разбивается (рис. 8.10) на n столбиков, каждый из которых также представляет собой криволинейную трапецию. Заменяем эти столбики прямолинейными («школьными») трапециями, построенными на крайних ординатах, как показано на рис. 8.10. Площади этих трапеций последовательно равны

$$\frac{y_0 + y_1}{2} h, \quad \frac{y_1 + y_2}{2} h, \quad \dots, \quad \frac{y_{n-1} + y_n}{2} h.$$

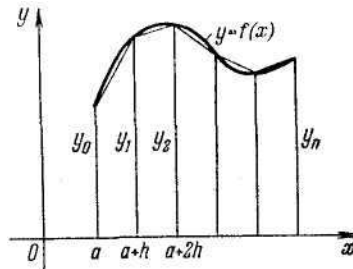


Рис. 8.10.

Сложив эти площади, мы получим площадь многоугольной фигуры, вписанной в исходную криволинейную трапецию. Если n достаточно велико, т. е. h достаточно мало, то эта площадь приближенно равна площади криволинейной трапеции, т. е. интегралу, и мы получаем

$$\int_a^b y \, dx \approx \frac{y_0 + y_1}{2} h + \frac{y_1 + y_2}{2} h + \dots + \frac{y_{n-1} + y_n}{2} h$$

или

$$\int_a^b y \, dx \approx h \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1} \right). \tag{8.20}$$

Это — так называемая *формула трапеций*.

Формуле трапеций можно дать истолкование, не зависящее от ее геометрического смысла. По сути дела, мы перед интегрированием заменили на каждом из интервалов $a \leq x \leq a+h$, $a+h \leq x \leq a+2h$ и т. д. рассматриваемую функцию $y = f(x)$ на линейную, принимающую те же значения в конечных точках, т. е. произвели линейную интерполяцию, после чего уже осуществили интегрирование. Но ранее были приведены интерполяционные формулы, дающие приближение функции с гораздо большей точностью, чем при линейной интерполяции. Поэтому формулы численного интегрирования, полученные на основе этих интерполяционных формул, являются значительно более точными, чем формула (8.20).

Если применить интерполяционный многочлен второй степени, то получится *формула Симпсона*. Предположим сначала, что значения интегрируемой функции даны в трех точках

$$y(x_0) = y_0, \quad y(x_0 + h) = y_1, \quad y(x_0 + 2h) = y_2.$$

Тогда интерполяционный многочлен второй степени, принимающий в этих точках такие же значения, выписывается по формуле Ньютона:

$$P(x) = y_0 + \Delta y_0 \frac{s}{h} + \frac{\Delta^2 y_0}{2} \frac{s}{h} \left(\frac{s}{h} - 1 \right) \quad (s = x - x_0).$$

Отсюда для интеграла получаем выражение

$$\int_{x_0}^{x_0+2h} P(x) \, dx = \int_{x_0}^{x_0+2h} \left[y_0 + \Delta y_0 \frac{s}{h} + \frac{\Delta^2 y_0}{2} \left(\frac{s^2}{h^2} - \frac{s}{h} \right) \right] ds = y_0 \cdot 2h + \Delta y_0 \cdot 2h + \frac{\Delta^2 y_0}{2} \cdot \frac{2}{3} h.$$

если, далее, подставить

$$\Delta y_0 = y_1 - y_0, \quad \Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0 = (y_2 - y_1) - (y_1 - y_0) = y_2 - 2y_1 + y_0,$$

то после приведения подобных членов получим

$$\int_{x_0}^{x_0+2h} f(x) \, dx \approx \int_{x_0}^{x_0+2h} P(x) \, dx = 2h \left[y_0 + (y_1 - y_0) + \frac{1}{6} (y_2 - 2y_1 + y_0) \right] = h \frac{y_0 + 4y_1 + y_2}{3}. \tag{8.21}$$

Если теперь отрезок интегрирования $a \leq x \leq b$ разбит на $2n$ равных частей с помощью точек деления

$$x_0 = a, \quad x_1 = a + h, \quad x_2 = a + 2h, \quad \dots, \quad x_{2n} = a + 2nh = b \quad \left(h = \frac{b-a}{2n} \right),$$

то к каждой паре из этих частей можно применить формулу (8.21)

$$\int_{x_0}^{x_0+2h} y \, dx \approx h \frac{y_0 + 4y_1 + y_2}{3}, \quad \int_{x_0+2h}^{x_0+4h} y \, dx \approx h \frac{y_2 + 4y_3 + y_4}{3}, \quad \dots, \quad \int_{x_0+(2n-2)h}^{x_0+2nh} y \, dx \approx h \frac{y_{2n-2} + 4y_{2n-1} + y_{2n}}{3}.$$

Сложив эти формулы и приведя подобные члены, получим формулу Симпсона:

$$\int_a^b y \, dx \approx \frac{h}{3} [(y_0 + y_{2n}) + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{2n-2}) + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{2n-1})]. \tag{8.22}$$

Перейдем теперь к оценке точности формул (8.20) и (8.22). Из формулы Ньютона видно, что при осуществлении линейной интерполяции получается ошибка порядка $\Delta^2 y$, т. е. порядка h^2 . При интегрировании она множится на длину h интервала интегрирования,

т. е. приобретает порядок h^3 . Но формула (8.20) получается в результате сложения n приближенных формул, каждая с ошибкой порядка h^3 , поэтому суммарная ошибка имеет порядок

$$n \cdot h^3 = \frac{b-a}{h} h^3 = (b-a) \cdot h^2,$$

т. е. порядок h^2 . Например, если число точек деления увеличить в два раза, то точность формулы (8.20) улучшится примерно в четыре раза.

Если рассуждать так же о формуле (8.22), то может показаться, что ее ошибка имеет порядок h^3 . На самом же деле точность выше. Действительно, когда мы в формуле Ньютона отбрасываем член $\Delta^3 u$, то делаем ошибку порядка h^3 ; но интеграл от этого члена равен нулю

$$\int_{x_0}^{x_0+2h} \frac{s}{h} \left(\frac{s}{h}-1\right) \left(\frac{s}{h}-2\right) dx = \int_0^{2h} \left[\left(\frac{s}{h}\right)^3 - 3\left(\frac{s}{h}\right)^2 + 2\frac{s}{h} \right] ds = \left(\frac{s^4}{4h^3} - \frac{3s^3}{3h^2} + \frac{2s^2}{2h} \right) \Big|_0^{2h} = 0.$$

Поэтому после интегрирования ошибку дает только следующий член формулы Ньютона, имеющий порядок h^4 . Значит, ошибка в формуле (8.21) имеет порядок h^5 , а в окончательной формуле (8.22) — порядок h^4 ; например, если увеличить число точек деления в два раза, то точность формулы (8.22) улучшится в 16 раз. В то же время формула (8.22) для применения ненамного сложнее формулы (8.20). Рассмотрим для примера интеграл

$$I = \int_0^1 \frac{1}{1+x^2} dx = \arctg x \Big|_0^1 = \frac{\pi}{4} = 0,785.$$

Если бы мы не знали ответа, то интеграл можно было бы приближенно вычислить по формулам (8.20) или (8.22). Примем для простоты $n=2$, т. е.

$$h=0,5, x_0=0; x_1=0,5; x_2=1; y_0=1,000; y_1=0,800; y_2=0,500.$$

Подсчет по формуле (8.20) дает

$$I \approx 0,5 \left(\frac{1,000+0,500}{2} + 0,800 \right) = 0,775; \text{ ошибка } \delta_{(33)} \approx 1,3\%.$$

Подсчет по формуле (8.22) дает

$$I \approx \frac{0,5}{3} (1,000 + 0,500 + 4 \cdot 0,800) = 0,783; \text{ ошибка } \delta_{(40)} \approx 0,3\%.$$

Отметим, что иногда применяются формулы с *неравноотстоящими узлами*.

Сравнение изменчивости (колеблемости) различных функций

При анализе опытных данных приходится сравнивать изменчивость различных функций. Если измерения однородны, сравнивают значения стандартов. Так, например, из данных о закономерностях изменения показателей вспашки в функции затупления лемеха (например, табл. 8.4) ясно, что стандарт глубины вспашки растет по мере затупления лемехов, и это характеризует качество вспашки.

Но возможно, что понадобится сравнить изменчивость неоднородных величин. В таком случае нельзя непосредственно сравнивать между собой значения стандартов, а следует вычислить значения коэффициентов вариации — безразмерных величин.

Коэффициент вариации представляет собой отношение стандарта к средней арифметической:

$$v = \frac{\sigma}{a} \tag{8.23}$$

чаще его выражают в процентах :

$$v = \frac{\sigma}{a} 100\%. \tag{8.24}$$

Например, при испытании машин хотят сравнить изменчивость скорости движения и расхода топлива. По размерным величинам это может оказаться затруднительным, а, используя коэффициенты вариации, сделать сравнение достаточно легко.

8.4. Выражение опытных закономерностей формулами

8.4.1. Рациональные и эмпирические формулы

Под рациональными формулами следует понимать такие, в которых все основные члены имеют размерность и строго логично вытекают из законов физики и механики. *Рациональные формулы не только представляют собой закономерность развития явления, но и объясняют его (хотя бы и в общей форме), показывая факторы и связи между ними.* Это важнейший тип формул, так как их всеобщность дает возможность теоретически исследовать все стороны явления.

Примерами рациональных формул могут служить: уравнение движения в общем виде; выражение мощности поршневого двигателя как функции индикаторного давления, механического к. п. д. двигателя, рабочего объема цилиндра, числа оборотов коленчатого

вала в единицу времени и тактности; формулы производительности тракторных агрегатов в функции ширины захвата, скорости движения и рабочего времени и др.

Для построения рациональной формулы надо знать физические и механические основы явления. Не следует увлекаться непродуманными математическими обобщениями; надо всегда помнить как о необходимости связи формул с реальными физическими процессами, так и о возможной ограниченности их приложения. «Торопливость в данном отношении, — писал В. П. Горячкин, — может скорее повредить, чем принести пользу, ибо легко приводит к ложным выводам... Самым рациональным было бы выходить из сущности процесса и сделать предположения, которые без затруднений приведут к уравнению».

Как выводить рациональные формулы? Приведем только самые общие рекомендации.

Вначале следует установить, какой закон или законы физики и механики применимы для объяснения явления. Затем следует решить вопрос о том, какой трансформации или дополнений требуют известные уже выражения законов в связи с особенностями развития явления. Далее решают, как лучше в общей и грубой схеме математически представить найденные зависимости. Наконец, эту схему уточняют, как бы отшлифовывают и проверяют на ряде примеров.

Развитие явления обычно может быть представлено дифференциальными уравнениями. При преобразовании первоначальных математических схем в дифференциальные уравнения следует стремиться к простым и ясным выражениям; это предполагает соответствующий выбор системы отсчета (координат), решение вопроса о порядках уравнений и о том, могут ли быть коэффициенты уравнений постоянными величинами.

Задача составления дифференциального уравнения в самом общем виде заключается в определении математической зависимости между переменными величинами и их приращениями, заменяемыми соответствующими дифференциалами. Беря приращения аргумента и функции, заменяя эти приращения соответствующими дифференциалами, составляют уравнение между переменными и их дифференциалами так, как если бы и те и другие были неизвестными величинами обычной алгебраической задачи.

Если в основе математической схемы развития явления лежит однофакторное исследование или однофакторная зависимость, это развитие можно выразить обыкновенными дифференциальными

уравнениями. В случае же многофакторной зависимости иногда требуется составить дифференциальные уравнения с частными производными.

Следует обратить особое внимание на то, чтобы формулировка теоретической разработки и сделанных допущений была ясной, полной и точной, исключавшей возможность неправильного понимания. Для обыкновенных дифференциальных уравнений надо точно формулировать начальные условия; для уравнения в частных производных важна точность формулировок как начальных, так и граничных условий.

Полученные дифференциальные уравнения перед дальнейшим теоретическим анализом следует решить точно или приближенно, с достаточной степенью точности, и пересчетами по всей длине опытных кривых установить максимальную ошибку теоретических уравнений, которая и оценивает их соответствие данным опытов. Эти уравнения полезно также всесторонне проанализировать для характеристики как их применения, так и различных связей между факторами.

Если развитие изучаемого явления имеет сходство частных свойств (признаков) с другим явлением, теория развития которого уже достаточно глубоко разработана (или, иначе, есть его теоретическая модель), можно использовать эти теоретические предпосылки для объяснения изучаемого явления. Такой метод умозаключений (метод аналогий) применим только в том случае, если взятая теоретическая модель или ее части соответствуют опытным данным.

Не всегда исследователю удастся обогатить науку открытием новых рациональных формул. В ряде случаев бывает полезно представить конкретную экспериментальную кривую, описывая ее чисто математически и преимущественно безразмерными величинами. Такие формулы называются *эмпирическими* и не имеют характера всеобщности, а показывают развитие явления только для условий, в которых производились опыты.

Эмпирическими формулами не следует пренебрегать. Большое количество применяющихся в технике формул является эмпирическими, хотя все они могут иметь лишь частное применение, ограниченное условиями получения экспериментальных кривых. Таковы, например, математические выражения функциональных зависимостей к. п. д. передачи в функции передаваемой мощности; показателя политропы сжатия в функции угловой скорости вала; расхода энергии в функции сопротивления; буксования в функции тяги; нагрева обмотки в функции нагрузки электродвигателя и продолжительности работы; износа подшипников в функции времени;

потери воды в каналах на испарение и фильтрацию в функции условий; толщины корки в слитках кипящей стали в функции высоты горизонта в слитке и времени; зависимости диффузии от температуры и концентрации углерода; силы резания металлов и т. п.

Кроме того, не надо забывать, что многие математические выражения закономерностей, будучи вначале эмпирическими, впоследствии были рационализированы, и что иногда сама структура эмпирической формулы указывает на пути превращения ее в рациональную.

В качестве первых шагов по рационализации эмпирических формул следует:

- изучить размерные цепи формулы, чтобы установить возможности рационального представления коэффициентов формулы, имеющих размерности; этим одновременно проверяют и саму формулу;

- изучить, не являются ли коэффициенты формулы, (включая безразмерные) и показатели степени ее членов функциями каких-либо независимых переменных, в том числе и не входящих непосредственно в формулу, но имеющих физическую связь с развитием того явления, которое представлено формулой;

- продумать приемлемую реформацию формулы, чтобы приблизить ее к рациональной, если показатели степени членов формулы численно приближаются к часто применяемым законам физики и механики (например, число 1,97 близко к числу 2).

Подбор эмпирической формулы.

Как говорилось ранее в результате эксперимента часто интересующая нас функция $y=f(x)$ оказывается заданной в табличном виде, и тогда может возникнуть вопрос о подборе для нее приближенной эмпирической формулы. При этом обычно начинают с того, что изображают значения функции на миллиметровке или иной приспособленной для этого бумаге. После этого выбирают вид формулы, которой будут пользоваться. Если этот вид не вытекает из каких-либо общих соображений, то обычно выбирают одну из функций, или простую комбинацию таких функций (сумму степенных или показательных функций и т. п.); конечно, для этого надо хорошо представлять себе графики этих функций. При этом следят за тем, чтобы подбираемая функция $\varphi(x)$ имела те же характерные особенности, что изучаемая функция $f(x)$: скажем, если по своему физическому смыслу $f(x)$ четная и $f(0)=0$, то и функция $\varphi(x)$ должна обладать этими свойствами и т. п. Иногда не удается

подобрать единую формулу на всем интервале изменения x и приходится разбивать этот интервал на части и на каждой подбирать свою формулу.

После выбора вида формулы нужно определить значения параметров, входящих в эту формулу.

Пусть, например, после построения точек получилась картина, изображенная на рис. 8.11.

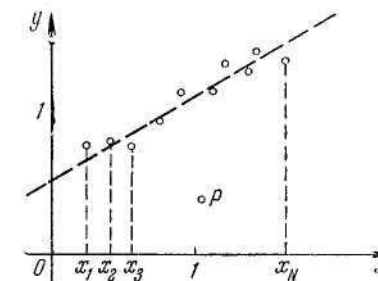


Рис. 8.11.

Если при эксперименте или при вычислениях не были исключены существенные ошибки, то точки, значительно выпадающие из общего хода зависимости, как точка P на чертеже, отбрасываются. Впрочем, иногда такие точки свидетельствуют о каких-то важных неучтенных факторах, и тогда их надо принять во внимание.

Оставшиеся точки на рис. 8.11 напоминают о линейной зависимости вида $y=ax+b$. Чтобы найти параметры a и b , проведем на чертеже прямую, к которой экспериментальные точки лежат ближе всего; это легко сделать, наложив на чертеж прозрачную линейку и передвинув ее на глаз в нужное положение.

Так, на рис. 8.11 получаем $b=0,50$, $a=\Delta y/\Delta x=0,58$, т. е.

$$y=0,58x + 0,50.$$

Описанный подбор линейной зависимости сравнительно прост. Поэтому при выборе зависимости другого типа часто стараются так ввести новые переменные, чтобы в них зависимость стала линейной, после чего уже найти параметры, входящие в эту зависимость (это метод выравнивания). Конечно, так можно делать, если таких параметров не более двух, так как у линейной функции имеются два параметра. Пусть, например, эксперимент привел к таблице значений:

x	0,00	0,10	0,20	0,30	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00
y	0,00	0,01	0,03	0,08	0,17	0,29	0,45	0,66	0,91	1,22	1,57

Изображение экспериментальных точек на миллиметровке напоминают о степенной функции вида $y=ax^a$. Чтобы найти параметры a и α , прологарифмируем это равенство и обозначим $lgy=Y, lgx=X, lga=A$. Тогда мы приходим к равенству $Y=aX+A$, т. е. в новых переменных зависимость является линейной. С помощью таблицы логарифмов построим таблицу значений новых переменных:

X	-1,0	-0,70	-0,52	-0,40	-0,30	-0,22	-0,15	-0,10	-0,05	0,00
Y	-2	-1,5	-1,1	-0,77	-0,54	-0,35	-0,18	-0,011	0,086	0,196

Полученные точки хорошо ложатся на прямую (рис. 8.12), при проведении которой надо больше ориентироваться на последние точки, известные с лучшей точностью.

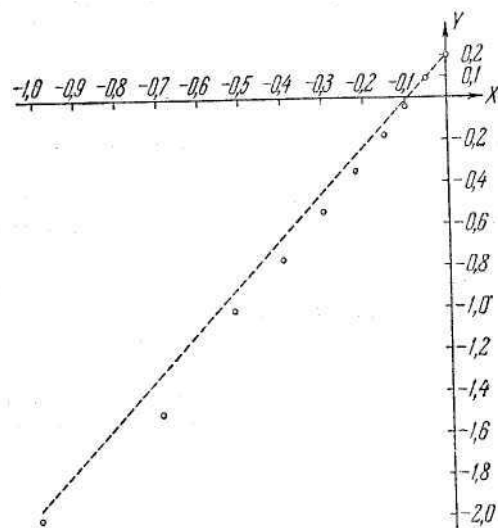


Рис. 8.12

Из чертежа получаем $A=0,196, \alpha=2,44$, т.е. $a=1,57$ и окончательно получаем $y=1,57x^{2,44}$

Вывод эмпирических формул

Для вывода эмпирических формул необходимо иметь экспериментально полученную функциональную зависимость, объясняемую в общем виде законами физики и механики.

Например, кривая глубины вспашки находится в функциональной зависимости от степени затупления лемехов, объясняемой в самом общем виде механикой явления (изменение формы лезвия лемехов изменяет соотношение действующих на лемех сил). Но детально изменения действия сил на лемех плуга неизвестны, неизвестными остаются и сложные зависимости глубины вспашки от свойств почвы. Поэтому составление рациональной формулы для данного примера пока затруднено, но эмпирическая формула может с достаточным приближением описать полученную экспериментальную кривую,

Основной метод построения эмпирических формул: подбор типа формулы и нахождение коэффициентов к ней. Проще всего тип формулы подобрать, пользуясь чертежами типовых кривых, для которых даны соответствующие уравнения.

Сравнивая графики экспериментальной кривой и график типовой формулы, устанавливают их общее соответствие. При этом всегда надо иметь в виду, что экспериментальная кривая может соответствовать лишь некоторой части алгебраически записанной кривой (например, экспериментальная кривая является выпуклой кривой, не имеющей выраженного максимума, вместе с тем ей может соответствовать уравнение параболы). *Подбор типа формулы — главное, что определяет результативность и точность эмпирической формулы*, и поэтому к нему надо отнестись с должным вниманием. Чем проще тип формулы, тем проще и быстрее можно определить ее параметры, поэтому предпочтительны более простые формулы, но не в ущерб точности.

Следует учесть также, что кривая изменения функции часто может быть представлена несколькими типами уравнений. *В этих случаях надо выбирать такой тип формулы, который в наибольшей мере соответствовал бы физическому смыслу явлений и мог бы быть улучшен превращением формулы в полуэмпирическую или полурациональную.*

После подбора типа эмпирической формулы для определения ее параметров могут быть использованы два способа: более точный, но

могущий быть трудоемким, — способ **наименьших квадратов** и более простой — способ **избранных точек**. Оба способа служат только для определения параметров уже избранного типа формулы. Параметры формулы надо вычислять с достаточной степенью точности, особенно если они относятся к показателям степени.

Способ наименьших квадратов. Проще всего определить этим способом параметры уравнения принятого типа, если исходное уравнение можно привести к линейному виду $y=a+bx$.

Тогда, если y — опытные сглаженные значения и n — число измерений (опытов), предполагаемых равноточными,

$$a = \frac{\sum x^2 \sum y - \sum x \sum xy}{n \sum x^2 - (\sum x)^2}, \tag{8.25}$$

$$b = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{n \sum x^2 - (\sum x)^2}. \tag{8.26}$$

В формулах (8.25) и (8.26) предположено, что все измерения равновесны. Если опытные точки имеют различные веса (например, когда берут средние по классам вариационного ряда), то следует учитывать веса наблюдений

Для взвешенных наблюдений коэффициенты формулы находят так:

$$a = \frac{\sum \omega x^2 \sum \omega y - \sum \omega x \sum \omega xy}{D}, \tag{8.27}$$

$$b = \frac{\sum \omega \sum \omega xy - \sum \omega x \sum \omega y}{D}, \tag{8.28}$$

где $D = \sum \omega \sum \omega x^2 - (\sum \omega x)^2$ и ω — веса наблюдений.

Если принятый вид уравнения не удастся привести к линейному, надо попробовать привести его к уравнению параболы:

$$y = a + bx + cx^2.$$

В этом случае

$$a = \frac{[\sum x^2 \sum x^4 - (\sum x^3)^2] \sum y - [\sum x \sum x^4 - \sum x^2 \sum x^3] \sum xy + [\sum x \sum x^3 - (\sum x^2)^2] \sum x^2 y}{E}, \tag{8.29}$$

$$b = \frac{[\sum x^2 \sum x^3 - \sum x \sum x^4] \sum y - [(\sum x^2)^2 - n \sum x^4] \sum xy + [\sum x \sum x^2 - n \sum x^3] \sum x^2 y}{E}, \tag{8.30}$$

$$c = \frac{[\sum x \sum x^3 - (\sum x^2)^2] \sum y - [n \sum x^3 - \sum x \sum x^2] \sum xy + [n \sum x^2 - (\sum x)^2] \sum x^2 y}{E}. \tag{8.31}$$

Здесь

$$E [\sum x^2 \sum x^4 - (\sum x^3)^2] n - [\sum x \sum x^4 - \sum x^2 \sum x^3] \sum x + [\sum x \sum x^3 - (\sum x^2)^2] \sum x^2.$$

Для облегчения подсчетов предварительно составляют таблицу сумм всех необходимых степеней.

Способ избранных точек. Порядок вычислений по этому способу прост.

1. На кривой сглаженного графика выбирают n точек (по числу подлежащих определению коэффициентов). Для удобства абсциссы этих точек должны совпадать с делениями шкалы по оси x и отстоять дальше одна от другой (но не на концах кривой, которые ненадежны).

2. Каждую из n пар опытных значений x и y подставляют в избранное уравнение, что дает систему n уравнений с n неизвестными.

3. Эту систему уравнений решают относительно неизвестных, то есть искомых коэффициентов формулы.

Если избранный тип уравнения линеен относительно определяемых коэффициентов или его можно привести к линейному виду, применяют определители, что упрощает вычисления.

После определения коэффициентов избранного уравнения устанавливают соответственно уравнения опытной сглаженной кривой, проверяя ряд точек (их количество должно быть не меньше, чем количество опытных точек). Составляют таблицу отклонений результатов вычислений от опытной кривой и определяют абсолютную и относительную ошибки принятой формулы.

Приведем пример. Пусть необходимо определить формулу для зависимости максимальных отклонений пропашного культиватора от прямой в функции скорости движения:

Скорость движения v , км/ч	Отклонение s , см
3,3.....	1,3
3,8.....	1,9
4,2.....	2,1
5,3.....	3,0
6,6.....	4,0
7,2.....	4,6

Рассмотрение графика функции показало, что он близок к прямой, и поэтому его можно представить уравнением:

$$s = a + bv.$$

Для упрощения расчетов составляем, вспомогательную таблицу 8.11 Находим по формулам (8.25) и (8.26) коэффициенты:

$$a = \frac{165,9 \cdot 16,9 - 30,4 \cdot 95,74}{6 \cdot 165,9 - 30,4^2} = -1,499;$$

$$b = \frac{6 \cdot 95,74 - 30,4 \cdot 16,9}{6 \cdot 165,9 - 30,4^2} = 0,852.$$

Итак, эмпирическая формула окончательно будет выражена в таком виде:

$$s = 0,852 v - 1,499.$$

Проверяя правильность формулы обратным просчетом, убеждаемся, что ошибка не превышает сотых долей сантиметра, то есть 1,5—2%, и лежит в пределах ошибки опытных данных.

Таблица 8.11

N	x	y	xy	x ²
1	3,3	1,3	4,30	10,9
2	3,8	1,9	7,22	14,2
3	4,2	2,1	8,82	17,6
4	5,3	3,0	15,90	28,0
5	6,6	4,0	26,40	43,5
6	7,2	4,6	33,10	51,7
Σ	30,4	16,9	95,74	165,9

Приведем еще один пример. Найдем эмпирическую формулу для кривой функциональной зависимости глубины пахоты от затупления лемеха (рис. 8.1). По типичным кривым подбираем подходящую, уравнение которой $y = ab^{-x^c}$ (см. Приложение).

Определяем, подходит ли эта формула по экстремальным значениям функции. Предположим, что для нас важно, чтобы формула соответствовала первоначальным степеням затупления. Убеждаемся, что при $x=0, y=a$. Это удовлетворяет наше требование, так как при $x=0 y=a=23,5$.

Коэффициенты формулы определяем по способу избранных точек. Для удобства расчета логарифмируем принятый вид формулы:

$$lgy = l g 23,5 - x^c l g b.$$

В таблице 8.12 первый (x) и второй (y) столбцы представляют степени затупления лемехов и сглаженные опытные значения глубины пахоты.

Таблица 8.12

Опытные и расчетные глубины вспашки в функции степени затупления лемехов

x	y	lg y	Значения по эмпирической формуле	Отклонения расчетных данных от опытных, см
0	23,5	1,371	23,5	0,0
1	23,1	1,364	23,2	0,1
2	22,4	1,350	22,2	0,2
3	20,8	1,318	20,8	0,0
4	19,2	1,284	19,1	0,1
5	18,6	1,270	18,9	0,3
6	18,5	1,268	18,7	0,2
7	18,4	1,265	18,3	0,1

В графе lgy помещены логарифмы значений глубины пахоты.

Для определения коэффициентов b и c используем координаты двух точек и составляем уравнения:

$$lgy_1 = 1,364 = 1,371 - 1^c lgb;$$

$$lgy_4 = 1,284 = 1,371 - 4^c lgb.$$

Из них находим, что $b=1,016$ и $c=1,82$. Таким образом, окончательно эмпирическая формула будет такой:

$$y = 23,5 \cdot 1,016^{-x^{1,82}}$$

Вычисляем для проверки значения y по найденной эмпирической формуле и заносим их в четвертый столбец таблицы 8.12. Средняя абсолютная ошибка формулы будет равна:

$$\Delta = \frac{0,0 + 0,1 + 0,2 + 0,0 + 0,1 + 0,3 + 0,2 + 0,1}{8} = 0,125 \text{ см.}$$

Отнесенная к средней глубине пахоты средняя относительная ошибка

$$\Delta_2 = \frac{0,125}{20,5} \cdot 100 = 0,61\%.$$

Максимальная относительная ошибка

$$\Delta_{2\max} = \frac{0,3}{18,6} \cdot 100 = 1,61\%.$$

Найденные формулы, применение которых желательно расширить за пределы опытов, целесообразно привести к дифференциальному виду и проверить на моделирующей машине, чтобы убедиться в том, что экстраполяция не принесет результатов, резко отклоняющихся от реального физического развития явления.

8. 5. Установление степени взаимной связи между явлениями

8.5.1. Понятие о корреляции

При определении общих закономерностей рассматривают, раскрывают функциональные связи, взаимодействия, зависимости; из всех этих связей и зависимостей выделяют главные, наиболее существенные. Раскрытие физической картины связей и взаимодействий помогает выделить наиболее существенные функциональные связи.

Есть более сложные случаи, когда явной функциональной связи между явлениями установить не удастся вследствие или слишком большого разброса результатом опытов, или влияния факторов, физическая роль которых в развитии явления неясна. В этом случае исследователь использует **корреляцию** — математический прием, позволяющий дать числовую оценку степени взаимной связи между явлениями. Корреляция иногда также показывает, что между явлениями, возможно, существует еще не вскрытая физическая причинная взаимосвязь.

Необходимо помнить, что корреляция является чисто математическим приемом, отнюдь не вскрывающим физики явления; поэтому данная этим приемом числовая оценка связей и зависимостей иногда оказывается формальной, показывающей лишь поверхность явления, а нетипичные опыты дают нетипичную корреляцию.

Как отмечалось раньше, решение задач оптимизации объекта исследования предполагает прежде всего установление количественной связи между переменными, характерными для рассматриваемого объекта.

Ранее был рассмотрен физический подход к нахождению этой связи. Здесь мы проанализируем статистические методы, используемые для этой цели.

Общим для всех статистических методов является то, что исследуемые переменные рассматриваются как случайные величины. Поэтому такие характеристики случайных величин, как закон распределения, математическое ожидание, дисперсия и т. п., играют в любом из этих методов важную, а иногда и определяющую роль.

Применение статистических методов для определения количественной связи между исследуемыми переменными предполагает наличие двух этапов:

1) эксперимент;

2) анализ статистического материала, накопленного в результате эксперимента.

Между этими этапами существует глубокая диалектическая взаимосвязь, условия и способы проведения эксперимента (план эксперимента) предопределяют и дальнейший выбор конкретного метода анализа результатов и, наоборот, выбор определенного метода анализа диктует использование определенного эксперимента.

Точное определение характеристик случайных величин, в частности, количественной связи между различными величинами, возможно только при бесконечном числе наблюдений. Поскольку реальный эксперимент всегда ограничен по своему «объему», анализ его результатов позволяет лишь приближенно оценить исследуемые величины и степень их взаимосвязи. Существующие статистические методы обязательно учитывают это обстоятельство, причем степень достоверности получаемых оценок всегда оговаривается. Собственно, основная задача математической статистики и заключается в том, чтобы на основании ограниченного по объему экспериментального материала, называемого **выборкой**, получать суждения (количественные и качественные) об исследуемых случайных величинах и оценивать степень их достоверности.

Различают две группы математико-статистических методов: статистическая оценка параметров и статистическая проверка гипотез.

Статистическая оценка параметров предусматривает получение оценок (точечных или интервальных) неизвестных параметров генеральной совокупности по параметрам выборки. В результате использования методов этой группы получают суждения типа «коэффициент корреляции между случайными величинами X и Y равен 0,72» (пример точечной оценки неизвестного параметра) или «математическое ожидание случайной величины Z с доверительной вероятностью 0,95 заключено в пределах $27,6 \pm 1,2$ (пример интервальной оценки неизвестного параметра).

Статистическая проверка гипотез предполагает выдвижение определенных допущений (гипотез) относительно неизвестных качественных (например, тип распределения) или количественных (например, дисперсия) характеристик случайных величин. Правильность этих гипотез проверяется по числовым значениям, полученным из выборки, и в зависимости от результата проверки гипотезы принимают или отвергают. В результате использования методов этой группы получают суждения типа «гипотеза о нормальном распределении случайной величины X не противоречит

экспериментальным данным и, следовательно, может быть принята в качестве рабочей» или «гипотеза о том, что коэффициент корреляции между случайными величинами X и Y равен нулю, с достоверной вероятностью 0,95 не согласуется с экспериментальными данными и должна быть отвергнута, т. е. между X и Y существует линейная зависимость».

Статистические методы с точки зрения их приложения могут быть разделены на методы, направленные на расчет неизвестных характеристик исследуемых случайных величин, и методы, направленные на определение неизвестных взаимосвязей между исследуемыми величинами. Нас будут интересовать последние, так как для управления и оптимизации объекта необходима именно информация о взаимосвязи между характерными величинами. Из методов определения статистической связи между различными величинами наибольшее развитие получили корреляционные.

В корреляционном анализе X и Y — это две равноправные измеримые случайные величины, появляющиеся в виде пар значений при многократном повторении опытов эксперимента. Таким образом, X и Y могут рассматриваться как компоненты двумерной случайной величины (X, Y) , между которыми ищется взаимосвязь. В производстве объектов ситуации такого рода чаще всего возникают при попытке установить связь между структурой и выходными характеристиками изготавливаемых объектов. Например, можно искать связь между парциальным давлением остаточного CO_2 в отпаянном ЭВП и сроком службы прибора. Если такая связь, т. е. корреляция, установлена, то оптимизацию ТП производства данного прибора с точки зрения повышения срока его службы можно проводить, не дожидаясь результатов испытаний на срок службы, а ориентируясь на давление CO_2 в отпаянном приборе. При этом оперативность управления процессом резко повышается.

8.5.2. Линейная корреляция

Рассмотрим сначала две случайные величины. Как отмечалось, при корреляционном анализе они предполагаются равнозначными и измеримыми. Задача состоит в обработке результатов наблюдений, в каждом из которых контролируются одновременно значения величин X и Y . Полученные результаты измерений объекта n состоят из n пар значений $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$, которые можно истолковать как реализации двумерного случайного вектора (X, Y) .

На первом этапе вычисляют среднеарифметические \bar{x} и \bar{y} значения, а также эмпирические дисперсии s_x и s_y :

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i; \tag{8.31}$$

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i; \tag{8.32}$$

$$s_x^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2; \tag{8.33}$$

$$s_y^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2. \tag{8.34}$$

Эти четыре эмпирических параметра характеризуют измеримые случайные величины X и Y по отдельности: \bar{x} и s_x^2 являются выборочными точечными оценками для математического ожидания μ_x и дисперсии σ случайной величины X ; \bar{y} и s_y^2 — такие же оценки для μ_y и σ_y^2 . При увеличении объема выборки n эти оценки становятся точнее, приближаясь к истинным параметрам μ и σ^2 исследуемой случайной величины:

$$\bar{x} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mu_x; \quad \bar{y} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mu_y; \quad s_{x,y}^2 \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \sigma_{x,y}^2.$$

Если с увеличением значений x растут (или, наоборот, уменьшаются) значения y , вычислением коэффициента корреляции оценивают, в какой степени связи этих величин приближаются к линейному закону. Корреляция является прямой, если с ростом значения x растут значения y , и обратной, если с ростом значения x значения y уменьшаются. Коэффициент корреляции r показывает тесноту (силу) прямолинейной связи; при установлении его мы ищем наиболее вероятное численное выражение связей.

Общая формула для вычисления коэффициента прямолинейной корреляции между рядами измерений x и y имеет вид:

$$r_{xy} = \frac{\Delta x \cdot \Delta y}{\sigma_{\Delta x} \cdot \sigma_{\Delta y}}. \tag{8.35}$$

При этом

$$\Delta x = x_i - \bar{x} \quad \text{и} \quad \Delta y = y_i - \bar{y},$$

т.е. Δx равно разности между данным значением измерения величины x и ее средним значением; аналогично определяют и величину Δy .

Коэффициент корреляции отвечает на вопрос: на сколько сигм в среднем изменится величина y , если величина x изменится на одну сигму (σ)? Формула (8.35) читается так: коэффициент корреляции между рядами значений x и y равен отношению средней произведений Δx на Δy к произведению стандартов величин Δx и Δy .

Оценка прямолинейной корреляции:

- если $r_{xy} = +1,0$ — полная прямая корреляция;
- если $r_{xy} = -1,0$ — полная обратная корреляция;
- чем меньше абсолютное значение r_{xy} , тем меньше сила связи, при $r_{xy} = 0$ связь полностью отсутствует.

Считается, что при $r_{xy} > 0,5$ (по абсолютной величине) корреляционная зависимость достаточно велика и можно говорить о закономерной связи явлений, если это не противоречит сущности явления. Для оценки надежности полученных значений r_{xy} вычисляют ошибку m_r коэффициента корреляции. Для этого значение r_{xy} возводят в квадрат, полученное вычитают из единицы и результат делят на корень квадратный из количества опытов:

$$m_r = \pm \frac{1 - r_{xy}^2}{\sqrt{n}} \quad (8.36)$$

Считается, что значение r_{xy} вполне надежно, если

$$r_{xy} \geq 3m_r.$$

Рассмотрим пример, для которого были ранее найдены некоторые функциональные зависимости. Посмотрим, какова сила связи величинами x и y . Для этого воспользуемся сглаженными данными о среднеквадратических отклонениях величины y и данными величины x (табл. 8.13).

Таблица 8.13

Общая схема расчетов коэффициента корреляции

x	y	Δx	Δy	$\Delta x \Delta y$	$(\Delta x)^2$	$(\Delta y)^2$
0	1,00	-3,5	-1,01	3,535	12,25	1,011
1	1,60	-2,5	-0,41	1,025	6,25	0,168
2	1,97	-1,5	-0,04	0,060	2,25	0,002
3	2,01	-0,5	0,00	0,000	0,25	0,000
4	2,12	+0,5	+0,11	0,055	0,25	0,012
5	2,21	+1,5	+0,20	0,300	2,25	0,040
6	2,50	+2,5	+0,49	1,225	6,25	0,240
7	2,70	+3,5	+0,69	2,415	12,25	0,475
28	16,11	0	~0	8,615	42,0	1,948

В нижней строке этой таблицы помещены суммарные результаты по столбцам. По этим результатам проведем заключительные вычисления:

$$\bar{x} = \frac{28}{8} = 3,5; \quad \bar{y} = \frac{16,11}{8} = 2,01 \text{ см};$$

$$\overline{\Delta x \Delta y} = \frac{8,615}{8} = 1,077;$$

$$\sigma_{\Delta x} = \sqrt{\frac{42}{8-1}} = 2,447; \quad \sigma_{\Delta y} = \sqrt{\frac{1,948}{8-1}} = 0,527 \text{ см}.$$

Наконец,

$$r_{xy} = \frac{\overline{\Delta x \Delta y}}{\sigma_{\Delta x} \sigma_{\Delta y}} = \frac{1,077}{2,447 \cdot 0,527} = 0,834.$$

Ошибка найденного коэффициента корреляции сравнительно невелика, что указывает на надежность числовой оценки:

$$m_r = \pm \frac{1 - 0,834^2}{\sqrt{8}} = \pm 0,109, \text{ или около } 11\%.$$

По величине r_{xy} можно заключить, что линейная корреляция между величинами x и соответствующими среднеквадратическими отклонениями величин y достаточно высока и может быть представлена правилом: чем больше x , больше y . В приведенном примере каждому значению x соответствовало одно значение y . На практике при обработке данных, разделенных на классы, каждому классу может соответствовать несколько значений y . В таком случае при расчетах по форме таблицы 8.13 проще в столбцах x и y повторять соответствующее количество раз одинаковые данные. Если количество таких повторений слишком велико, расчеты лучше вести с использованием корреляционных и вспомогательных таблиц.

Рассмотрим случай применения корреляционных таблиц. Чтобы вычислить тесноту связи при многих значениях переменных величин, удобно пользоваться иной формулой значения коэффициента корреляции:

$$r_{xy} = \frac{C_{xy}}{\sigma_x \sigma_y} \quad (8.37)$$

Здесь σ_x и σ_y — стандарты колеблющихся результатов измерений величин x и y .

Числитель правой части уравнения (8.37) носит название ковариации x и y ; его можно найти по удобной для последующих вычислений формуле:

$$C_{xy} = \frac{\sum n_{xy}xy}{n} - \bar{x} \cdot \bar{y}. \quad (8.38)$$

Здесь n_{xy} — частота некоторой пары значений переменных x и y ;

$\sum n_{xy}xy$ — условное обозначение суммы произведений отдельных сумм по столбцам x (или по строкам y) на соответствующие значения x (или y) в корреляционной таблице;

\bar{x} ; \bar{y} — средние значения переменных x и y ;

n — общее количество наблюдений.

Математический смысл ковариации раскрывается в приводимом ниже примере.

На рисунке 8.12 представлены результаты испытаний тракторных двигателей с различной степенью износа гильз, поршней и поршневых колец. При полной подаче топлива и номинальных оборотах измерялись: суммарная относительная неплотность f_s цилиндров дизеля, утечка газов Q из камер сгорания через картер и дымность выхлопа D %. По физическому смыслу за независимую переменную принята величина f_s . Если возьмем точки опытов, то увидим, что каждому среднему значению аргумента f_s может соответствовать не одно определенное значение функций Q и D , а несколько. Такая зависимость будет корреляционной, а сам график называют корреляционным полем. Отметим, что числа масштаба (среднеклассовые значения) стоят против середин клеток чертежа, и поэтому начало отсчетов находится вне чертежа.

Расположение результатов отдельных измерений на рисунке показывает, что налицо связь между величинами f_s , Q и D . Однако не ясно, во-первых, насколько тесна эта связь и, во-вторых, что теснее связано (при данных способах измерений) с замерах неплотностей — утечка газов или дымление? Ответ может дать сравнение коэффициентов корреляции.

Обозначим величину f_s через x , величины Q и D соответственно через y и z .

В целях лучшего понимания дальнейшего изложения по результатам опытов подготовим данные для проведения сглаженных кривых $y=f_1(x)$; $z=f_2(x)$.

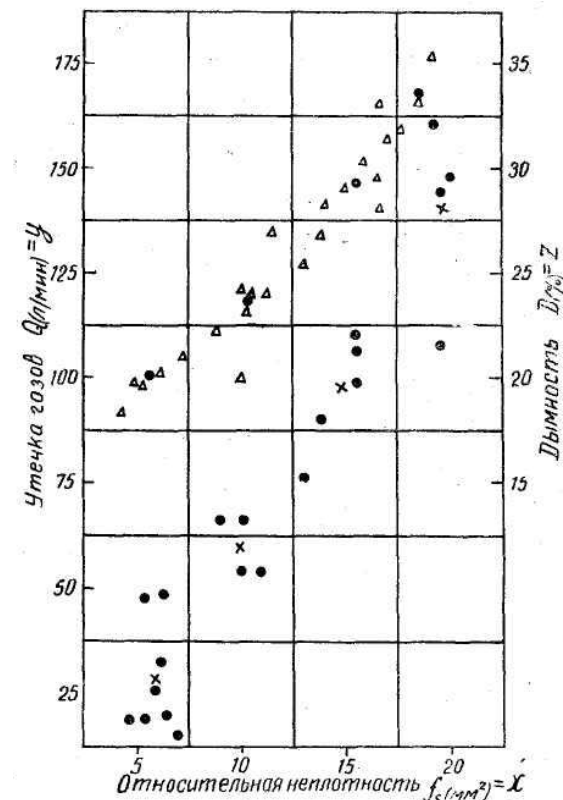


Рис. 8.12. Утечка в картер и дымность газов в выпускной трубе тракторного двигателя в зависимости от суммарной относительной неплотности его цилиндров. Точками обозначены результаты отдельных измерений величины $Q=y$; крестиками — частные средние этих измерений; треугольниками — результаты измерений величины $D=z$ и кружками — частные средние этих измерений.

Для удобства их построения определим арифметические частные средние \bar{y}_{x_i} этих зависимостей и нанесем их на чертеж. Например, взяв значения y , расположенные в интервале $x=2,5-7,5$ со средней классовой $x=5$ (восемь измерений), и определив их координаты, получим частную среднюю ординату:

$$\bar{y}_{x_1} = \frac{4,6 \cdot 19 + 5,4 \cdot 19 + 5,4 \cdot 48 + 6,2 \cdot 33,5 + 6,2 \cdot 48,5 + 6,1 \cdot 26 + 6,5 \cdot 20 + 7 \cdot 15}{4,6 + 5,4 + 5,4 + 6,2 + 6,2 + 6,1 + 6,5 + 7} = \frac{1350,8}{47,4} \approx 28,5.$$

Средняя абсцисса этой группы измерений будет

$$\bar{x}_{y_1} = \frac{1350,8}{19 + 19 + 48 + 48,5 + 33,5 + 26 + 20 + 15} \approx 5,9.$$

Далее возьмем группу значений y , расположенного в интервале $x=7,5-12,5$ со средней классовой $x=10$ (четыре измерения), и, вычислив координаты каждого измерения, получим частную среднюю арифметическую ординату:

$$\bar{y}_{x_2} = \frac{8,8 \cdot 66 + 10 \cdot 54 + 10 \cdot 66 + 11 \cdot 54}{8,8 + 10 + 10 + 11} = \frac{2374}{39,8} \approx 59,7.$$

Средняя абсцисса этой группы измерений будет

$$\bar{x}_{y_2} = \frac{2374}{66 + 66 + 54 + 54} = \frac{2374}{240} \approx 9,9.$$

Аналогично находим и остальные координаты: при среднем классомом значении $\bar{x}=15$, $\bar{y}=97,6$ и $\bar{x}=14,8$: при среднем классомом значении $x=20$, $\bar{y}_{x_1}=140$ и $\bar{x}_{y_1}=19,6$. По этим координатам на графике (рис. 8.12) построены точки частных средних значений y , отмеченные крестиками.

Таким же образом поступаем и с усреднением данных опытов по величине z . Например, по группе значений z , расположенной в интервале $x=2,5-7,5$ со среднем классомом значением $x=5$, получаем частную среднюю ординату:

$$\bar{z}_{x_1} = \frac{4,4 \cdot 18,4 + 4,8 \cdot 19,8 + 5,3 \cdot 19,6 + 6,2 \cdot 20,2 + 7,3 \cdot 21}{4,4 + 4,8 + 5,3 + 6,2 + 7,3} = \frac{558}{28} \approx 20.$$

Средняя абсцисса в этом случае будет:

$$\bar{x}_{z_1} = \frac{558}{18,4 + 19,8 + 19,6 + 20,2 + 21} \approx 5,6.$$

Аналогично вычисляем координаты остальных частных средних:

$$\bar{z}_{x_2} = 23,7 \text{ при } \bar{x}_{z_2} = 10,3; \bar{z}_{x_3} = 29,25 \text{ при } \bar{x}_{z_3} = 15,5 \text{ и } \bar{z}_{x_4} = 33,5 \text{ при } \bar{x}_{z_4} = 18,5.$$

Расположение этих средних показано на графике черными точками.

Значения частных средних по классам зависят от способа группировки измерений или опытов. Например, если группировку проводить по строкам y , то для $y=12,5-37,5$ со среднем классомой $y=25$ получим координаты:

$$\bar{y}_{y_1} = \frac{15,7 + 19 \cdot 4,6 + 19 \cdot 5,4 + 20 \cdot 6,5 + 26 \cdot 6,1 + 33,5 \cdot 6,2}{7 + 4,6 + 5,4 + 6,5 + 6,1 + 6,2} = \frac{792}{35,8} \approx 22,1;$$

$$\bar{x}_{y_1} = \frac{792}{15 + 19 + 19 + 20 + 26 + 33,5} \approx 6$$

или при среднем классомой $y=50$:

$$\bar{y}_{y_2} = \frac{48 \cdot 5,4 + 48 \cdot 6,2 + 54 \cdot 10 + 54 \cdot 11}{5,4 + 6,2 + 10 + 11} = \frac{1693}{32,6} \approx 53;$$

$$\bar{x}_{y_2} = \frac{1693}{48 + 48,5 + 54 + 54} \approx 8,3.$$

Это влияние способа группирования на координаты средних, объясняемое разбросом точек измерений, не должно смущать исследователя: хорошо сглаженная кривая, проведенная с учетом полученных средних, при любом способе группирования общих результатов по обоим способам будет давать однозначные значения x и y , x и z или y и z , т.е. каждому значению какой-либо величины будет соответствовать лишь одно значение каждой из других величин (при большом количестве измерений в качестве частных средних берут среднем классомые значения x и y (или x и z)).

Отметим, что если полученные средние (т.е. крестики или точки) соединить между собой отрезками прямых, то образуются ломаные, так называемые эмпирические линии регрессии, а сглаженные кривые будут близки к теоретическим линиям регрессии (на рисунке теоретические эмпирические линии регрессии не показаны, чтобы не загромождать рисунок).

Для облегчения последующих вычислений составим корреляционные таблицы, в первой строке которых расположим средние по классам значения x , а в первых столбцах — средние по классам значения y , а затем z . Таким образом, вначале определим коэффициент корреляции между x и y , или r_{xy} . В этом примере для наглядности разбивка граф в таблице 8.14 и клеток на рисунке 8.12 совпадает, так что остается лишь перенести число опытов в клетках в графы таблицы 8.14.

Таблица 8.14

Корреляционная таблица для x, y

y	x				m _y
	5	10	15	20	
25	6	—	—	—	6
50	2	2	—	—	4
75	—	2	1	—	3
100	—	—	4	1	5
125	—	—	—	—	0
150	—	—	—	3	3
n _x	8	4	5	4	21

Затем суммируют число точек по каждой строке y (m_y) и по каждому столбцу x (n_x).

Далее для вычисления средних значений x и y по корреляционной таблице найдем суммы произведений частот (число измерений в графах таблицы) на соответствующие значения x и y. Разделив общие суммы на общее количество измерений, найдем средние. Вычисления начнем со столбцов x для определения \bar{x} . В результате получим:

$$\begin{aligned}
 &6 \cdot 25 + 2 \cdot 50 = 250 \\
 &2 \cdot 50 + 2 \cdot 75 = 250 \\
 &1 \cdot 75 + 4 \cdot 100 = 475 \\
 &1 \cdot 100 + 3 \cdot 150 = 550 \\
 \hline
 &\Sigma y m_y = 1525 \\
 &\bar{y} = \frac{\Sigma y m_y}{n} = \frac{1525}{21} \approx 72,6.
 \end{aligned}$$

Таким же образом находим \bar{x} по строкам y:

$$\begin{aligned}
 &6 \cdot 5 = 30 \\
 &2 \cdot 5 + 2 \cdot 10 = 30 \\
 &2 \cdot 10 + 1 \cdot 5 = 35 \\
 &4 \cdot 15 + 1 \cdot 20 = 80 \\
 &0 = 0 \\
 &3 \cdot 20 = 60 \\
 \hline
 &\Sigma x n_x = 235 \\
 &\bar{x} = \frac{235}{21} \approx 11,2.
 \end{aligned}$$

Затем вычислим по формуле (8.38) величину ковариации c_{xy}.

Для получения $\Sigma n_{xy}xy$ перемножим отдельные суммы по столбцам x на соответствующие значения x; то же сделаем по строкам y. Результаты должны быть одинаковыми:

$$\begin{array}{r}
 250 \cdot 5 = 1\,250 \\
 250 \cdot 10 = 2\,500 \\
 475 \cdot 15 = 7\,125 \\
 550 \cdot 20 = 11\,000 \\
 \hline
 \Sigma n_x xy = 21\,875
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{r}
 30 \cdot 25 = 750 \\
 30 \cdot 50 = 1\,500 \\
 35 \cdot 75 = 2\,625 \\
 80 \cdot 100 = 8\,000 \\
 0 \cdot 125 = 0 \\
 60 \cdot 150 = 9\,000 \\
 \hline
 \Sigma n_y xy = 21\,875
 \end{array}$$

Тогда по формуле (8.38) получаем:

$$c_{xy} = \frac{21\,875}{21} - 72,6 \cdot 11,2 = 1041,67 - 813,12 = 228,55.$$

Для вычисления стандартов σ_x и σ_y по формуле

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m n_i (a_i - \bar{a})^2}{n - 1}}$$

составим таблицу 8.15.

Отсюда получаем:

$$\sigma_{x_i} = \sqrt{\frac{695,24}{21 - 1}} \approx 5,90; \sigma_{y_i} = \sqrt{\frac{37\,380,96}{21 - 1}} \approx 43,23.$$

Таблица 8.15

Определение данных для вычисления σ_x и σ_y

x _i	n _{x_i}	x _i - \bar{x}	(x _i - \bar{x}) ²	n _{x_i} (x _i - \bar{x}) ²	y _i	m _{y_i}	y _i - \bar{y}	(y _i - \bar{y}) ²	m _{y_i} (y _i - \bar{y}) ²
5	8	-6,2	38,44	307,52	25	6	-47,6	2265,76	13 594,56
10	4	-1,2	1,44	5,76	50	4	-22,6	510,76	2 043,04
15	5	+3,8	14,44	72,20	75	3	+2,4	5,76	17,28
20	4	+8,8	77,44	309,76	100	5	+27,4	750,76	3 753,80
—	—	—	—	—	125	0	+52,4	2745,76	0
—	—	—	—	—	150	3	+77,4	5990,76	17 972,28
Σ	21	—	—	695,24	Σ	21	—	—	37 380,96

Далее находим по формуле (8.37) значение коэффициента корреляции

$$r_{xy} = \frac{228,55}{5,9 \cdot 43,23} \approx 0,897$$

и по формуле (8.36) его ошибку

$$m_r = \pm \frac{1 - 0,897^2}{\sqrt{21}} \approx \pm 0,044.$$

Эта ошибка мала, и значение r_{xy} вполне надежно, так как

$$0,897 > 3 \cdot 0,044.$$

Этим примером вычисления ошибки коэффициента корреляции мы и ограничимся.

Как видно, прямолинейная связь кривой y (утечки газов) с независимой переменной x (относительная неплотность) весьма тесна. В самом деле, сглаженная кривая (близкая к кривой, носящей название теоретической линии регрессии) может быть выражена уравнением

Q л/мин = $4,4 f_s^{1,15}$; показатель степени мало отличается от единицы. В соответствии с физическим смыслом явления при $f_s=0$ $Q=0$. Но колебания результатов измерения здесь велики: для величины x коэффициент вариации

$$v_x = \frac{5,90}{11,2} 100 \approx 52,7\%,$$

а для величины y

$$v_y = \frac{43,23}{72,6} 100 = 59,6\%,$$

то есть еще больше. Так как сами по себе примененные для измерений приборы имеют высокую точность, делаем вывод, что утечка газов является сложной функцией, зависящей не только от рассматриваемых здесь факторов. Составим такую же корреляционную таблицу для $D=z$ и выполним аналогичные вычисления.

Таблица 8.16

Корреляционная таблица для x и z

z	x				m _z
	5	10	15	20	
20	5	2	—	—	7
25	—	5	2	—	7
30	—	—	6	1	7
35	—	—	1	2	3
n _x	5	7	9	3	24

Найдем среднюю \bar{z} :

$$\begin{aligned} 5 \cdot 20 &= 100 \\ 2 \cdot 20 + 5 \cdot 25 &= 165 \\ 2 \cdot 25 + 6 \cdot 30 + 1 \cdot 35 &= 265 \\ 1 \cdot 30 + 2 \cdot 35 &= 100 \\ \hline \Sigma z m_z &= 630 \\ \bar{z} &= \frac{630}{24} \approx 26,25. \end{aligned}$$

Определим среднюю \bar{x} :

$$\begin{aligned} 5 \cdot 5 + 2 \cdot 10 &= 45 \\ 5 \cdot 10 + 2 \cdot 10 &= 80 \\ 6 \cdot 15 + 1 \cdot 20 &= 110 \\ 1 \cdot 15 + 2 \cdot 20 &= 55 \\ \hline \Sigma x n_x &= 290 \\ \bar{x} &= \frac{290}{24} \approx 12,08. \end{aligned}$$

Далее вычислим $\Sigma n_{xz} xz$:

$$\begin{aligned} 100 \cdot 5 &= 500 & 45 \cdot 20 &= 900 \\ 165 \cdot 10 &= 1650 & 80 \cdot 25 &= 2000 \\ 265 \cdot 15 &= 3975 & 110 \cdot 30 &= 3300 \\ 100 \cdot 20 &= 2000 & 55 \cdot 35 &= 1925 \\ \hline \Sigma n_x xz &= 8125 & \Sigma n_z xz &= 8125 \end{aligned}$$

По формуле (8.38) получаем ковариацию

$$C_{xz} = \frac{8125}{24} - 26,25 \cdot 12,08 = 21,35.$$

Составим таблицу 8.17 и найдем стандарты σ'_x и σ'_z

Таблица 8.17

Определение данных для вычислений σ'_x и σ'_z

z	n _z	x - \bar{x}	$\Sigma (x - \bar{x})^2$	z - \bar{z}	n _z	z - \bar{z}	$\Sigma (z - \bar{z})^2$	n _{xz}	$\Sigma (x - \bar{x})(z - \bar{z})$
5	5	-7,08	50,13	20	7	-6,25	39,06	273,42	
10	7	-2,08	4,33	30,31	25	-1,25	1,56	10,92	
15	9	+2,92	8,53	76,77	30	+3,75	14,06	98,42	
20	3	+7,92	62,73	188,19	35	+8,75	76,56	229,68	
Σ	24	—	—	545,92	Σ	24	—	—	612,44

Из таблицы 8.17

$$\sigma'_x = \sqrt{\frac{545,92}{24-1}} \approx 4,87; \quad \sigma'_z = \sqrt{\frac{612,44}{24-1}} \approx 5,16,$$

поэтому

$$r_{xz} = \frac{21,35}{4,87 \cdot 5,16} \approx 0,852.$$

Сравнивая величины r_{xy} и r_{xz} , приходим к выводу, что кривая $z=D$ менее тесно связана прямолинейной связью с величиной $x=f_s$. Но, может быть, это зависит от разброса точек? Определим коэффициенты вариации;

$$v_x = \frac{4,87}{12,08} 100 = 39,5\%; \quad v_z = \frac{5,16}{26,25} 100 = 19,8\%.$$

Как видно, изменчивость результатов измерений здесь значительно меньшая, чем в первом случае, а разброс результатов измерений ординат незначительный

Таким образом, первый вывод, который следует сделать из изложенного, таков: кривая $z=D$ больше отклоняется от прямой, чем кривая $y=Q$. Действительно, сглаженной кривой с небольшой ошибкой удовлетворяет уравнение $D=0,2 f_s^{1,5} + 16,3$. Далее, дымление присуще двигателям и при отсутствии неплотностей (вернее, при весьма малой неплотности), и для данных условий в этик случаях $D \approx 16\%$.

Можно заметить, что значения \bar{x} и σ_x меняются в зависимости от того, рассчитаны ли эти значения для связи с y или для связи с z . Это объясняется различной группировкой измерений y и z , а следовательно, и различной их взаимосвязью с величиной x .

В приведенном примере вычисление ошибок связано со среднеклассовыми значениями функций, как наиболее вероятными. Если вычисления провести по всем отдельным точкам (несглаженным), ошибка будет больше, это означает, что расчет идет не только по наиболее вероятным точкам кривых закономерностей.

Отметим еще, что в литературе встречаются и другие обозначения эмпирической ковариации. Приведем одно из них. Как мы знаем, нас интересует наличие связи между X и Y , а также сила (теснота) этой связи. Информацию об этом дает эмпирическая ковариация между значениями x и y , которая определяется следующим образом:

$$\widehat{\text{cov}}(x, y) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}). \quad (8.39)$$

Нормируя $\widehat{\text{cov}}(x, y)$ с помощью среднеквадратичных отклонений s_x и s_y , получают эмпирический коэффициент корреляции между значениями x и y :

$$r_{xy} = \frac{\widehat{\text{cov}}(x, y)}{s_x s_y}. \quad (8.40)$$

Так как $\widehat{\text{cov}}(x, y) = \widehat{\text{cov}}(y, x)$, то $r_{xy} = r_{yx}$. Т.е. порядок индексов не важен, что и должно иметь место, так как случайные величины X и Y полагаем равноправными.

Эмпирический коэффициент r_{xy} — это выборочная оценка для истинного коэффициента корреляции ρ_{xy} , который является мерой силы (тесноты) и направления линейной связи между значениями компонент случайного вектора (X, Y) .

Если $|\rho_{xy}| = 1$, то существует линейная функциональная зависимость между x и y , т. е. в любой реализации случайного вектора (X, Y) компоненты x и y связаны одним и тем же коэффициентом пропорциональности γ , так что

$$(x_i - \mu_x) = \gamma (y_i - \mu_y), \quad i = 1, 2, \dots$$

В этом случае результаты наблюдений случайного вектора (X, Y) в выборке объема n находятся на одной прямой (рис. 8.14, а, б).

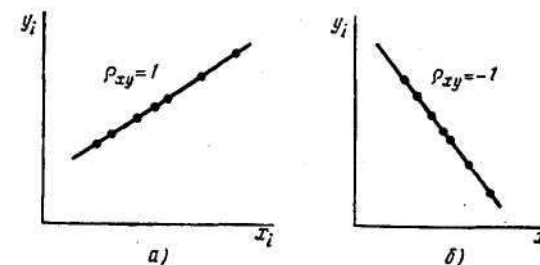


Рис. 8.14.

Если $0 < |\rho_{xy}| < 1$, то существует линейная связь между значениями x и y , внутренняя природа которой более сложна, чем простая линейная функциональная зависимость (это может быть случай, когда $X = X_1 + X_2$, $Y = Y_1 + Y_2$ и между X_1 и Y_1 имеется линейная функциональная зависимость, а X_2 и Y_2 — независимые случайные добавки). Результаты наблюдений случайного вектора (X, Y) в выборке объема n группируются вблизи некоторой прямой (рис. 8.15, а, б).

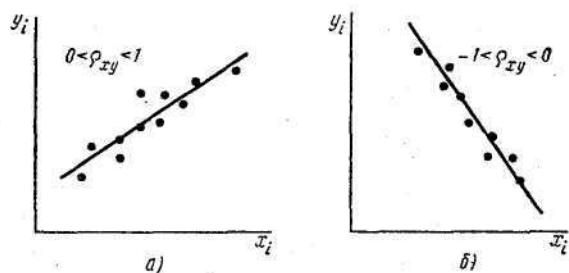


Рис. 8.15.

Если $\rho_{xy}=0$, то невозможно в общем случае сделать вывод о независимости случайных величин X и Y . Можно лишь утверждать, что линейная связь отсутствует (нелинейная связь при этом не исключается, как это видно из рис. 8.16, а, б).

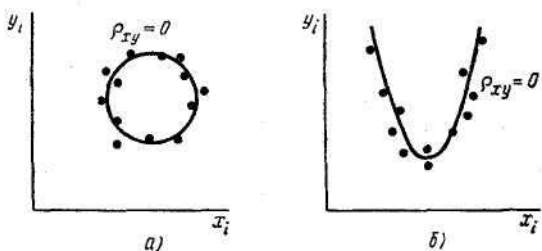


Рис. 8.16.

Однако существуют случаи, когда равенство $\rho_{xy}=0$ означает независимость случайных величин X и Y , например, если случайные величины X и Y имеют нормальное или равномерное распределение.

Из рассмотрения свойств коэффициента корреляции можно сделать вывод о том, что корреляционный анализ наиболее эффективен, когда есть основания предполагать преобладающий характер линейной связи между исследуемыми переменными. Применение корреляционного анализа в случае, когда возможна нелинейная зависимость между переменными, нецелесообразно. Однако использование физических представлений о природе исследуемых величин может расширить область применения корреляционного анализа за счет предварительного преобразования переменных. Например, анализ физики теплового пробоя диэлектриков приводит к следующему соотношению между пробивным напряжением U_{np} и толщиной диэлектрика d :

$$U_{np} \approx AV\sqrt{d}. \tag{8.41}$$

Учитывая это, можно подвергнуть корреляционному анализу следующие величины: а) $X = U_{np}^2, Y = d$; б) $X = U_{np}, Y = \sqrt{d}$. Какой из рассмотренных вариантов преобразования предпочесть? Общей рекомендацией на этот счет является следующая: преобразование исследуемых величин должно быть таким, чтобы закон распределения преобразованных величин был по возможности ближе к закону нормального распределения. При этом облегчается проверка статистической гипотезы о значимости корреляции (о проверке статистических гипотез см. далее).

В приведенном примере следует остановиться на первом варианте, так как обычно линейные размеры изготавливаемых структур подчиняются закону нормального распределения (хотя и не всегда). Если физическая модель теплового пробоя (8.41) верна, то и U_{np}^2 также будет иметь нормальное распределение. Последнее, однако, требует проверки, так как может оказаться, что в проводимых исследованиях пробой имеет не тепловой, а электрический характер, при котором U_{np} пропорционально d , а следовательно, в качестве исследуемых величин следует взять $X = U_{np}; Y = d$. Данный пример свидетельствует о том, что прежде чем обратиться к статистическим методам анализа, нужно тщательно проанализировать всю априорную информацию и изучить все возможные варианты исследования.

Допустим, что при обработке эксперимента получен эмпирический коэффициент корреляции $r_{xy}=0,52$. Можно ли считать установленной наличие линейной связи между исследуемыми случайными величинами? Не будем торопиться с выводами. Вспомним, что выборочные оценки сходятся к оцениваемым параметрам генеральной совокупности лишь при неограниченном возрастании объема выборки n . При любом конечном n они могут флуктуировать от выборки к выборке, отличаясь порой значительно от истинного значения оцениваемого параметра. Возможные отличия тем больше, чем меньше объем выборки, поэтому может оказаться, что в нашем случае $\rho_{xy} = 0$, а полученное значение $r_{xy}=0,52$ — не что иное, как вполне естественное (статистически незначимое) отклонение от истинного коэффициента корреляции, вызванное малым числом наблюдений.

Для решения вопроса о статистической значимости полученного выборочного коэффициента корреляции выдвигают гипотезу $H_0: \rho_{xy}=0$, а затем проверяют, не противоречит ли она экспериментальным данным. Эта проверка легко осуществляется, если известен закон распределения исследуемых случайных величин X и Y ,

Тогда по известным закону распределения и объему выборки n находят критическое значение эмпирического коэффициента корреляции, вероятность превышения которого в рамках гипотезы H_0 не может быть больше заданного малого числа α , называемого *уровнем значимости*. Если найденный из эксперимента эмпирический коэффициент корреляции r_{xy} превысил это критическое значение, то тем самым осуществилось событие, маловероятное в рамках выдвинутой гипотезы $H_0: \rho_{xy} = 0$. Это дискредитирует гипотезу H_0 , и ее отвергают, т. е. считают, что r_{xy} значимо отличается от нуля, так что $\rho_{xy} \neq 0$. Следовательно, существует линейная связь между переменными X и Y . Доверительная вероятность такого заключения равна $1 - \alpha$.

Если распределение исследуемых величин X и Y можно считать нормальным, то проверку значимости эмпирического коэффициента корреляции осуществляют по табл. 8.18, содержащей рассчитанные заранее наибольшие случайные значения коэффициента корреляции.

Таблица 8.18

Число степеней свободы $m=n-2$	Уровень значимости α		
	0,05	0,01	0,0027
5	0,75	0,87	0,93
10	0,58	0,71	0,78
15	0,48	0,61	0,68
20	0,42	0,53	0,61
25	0,38	0,49	0,55
30	0,35	0,45	0,51
35	0,32	0,42	0,48
40	0,30	0,39	0,45
50	0,27	0,35	0,41
60	0,25	0,33	0,37
70	0,23	0,30	0,35
80	0,22	0,28	0,33
90	0,21	0,26	0,31
100	0,19	0,25	0,29
150	0,16	0,21	0,24
200	0,14	0,18	0,21
300	0,11	0,15	0,17
500	0,09	0,11	0,13
1000 и более	0,05	0,09	0,1

Проверим, например, значим ли эмпирический коэффициент корреляции $r_{xy} = 0,52$, если он получен из выборки объема $n = 22$. Для $m=n-2=20$ можно вынести следующее суждение: «с доверительной вероятностью 0,95 корреляция значима ($r_{xy} > 0,42$)». Для $m = 20$

нельзя гарантировать значимость корреляции с большей доверительной вероятностью, так как $r_{xy} < 0,53$ и тем более $r_{xy} < 0,61$.

Проверим, какой вывод можно сделать, если значение $r_{xy} = 0,52$ было получено из выборки объема $n = 12$. Можно сделать вывод о том, что значение $r_{xy}=0,52$ в столь малой по объему выборке не позволяет утверждать с достаточно высокой доверительной вероятностью о наличии корреляции между исследуемыми величинами. При этом не отвергается наличие корреляции, а только утверждается, что даже такая большая цифра, как $r_{xy} = 0,52$, на малой выборке не позволяет определить существование корреляции, так как это значение, возможно, является случайной флуктуацией, вполне допустимой в рамках гипотезы $H_0: \rho_{xy} = 0$. Внимательный анализ табл. 8.18 позволяет сделать вывод о том, что в тех случаях, когда коэффициент корреляции ρ_{xy} мал ($\rho < 0,2$), определить его с достаточной достоверностью можно только на выборках большого объема ($n > 100$).

После того как установлена значимость коэффициента корреляции, он может быть использован для прогнозирования значений одной из случайных величин, если известно значение второй. Это прогнозирование основывается на следующих формулах:

$$M(x/y) = M(x) - (y - M(y)) \sigma_x \frac{\rho_{xy}}{\sigma_y}; \tag{8.42}$$

$$\sigma(x/y) = \sqrt{1 - \rho_{xy}^2} \sigma_x, \tag{8.43}$$

где $M(x/y)$ — условное математическое ожидание величины x при фиксированной величине y ; $\sigma(x/y)$ — условное среднеквадратичное отклонение величины x при фиксированной y .

Из (8.43) следует, что чем ближе коэффициент корреляции к единице, тем точнее могут быть предсказаны значения x по известным значениям y . Именно это обстоятельство позволяет использовать корреляционный анализ для управления объектами.

Проведенный анализ для двух переменных X и Y легко обобщается на случай многих переменных. Рассмотрим многомерный случайный вектор \mathbf{X} , реализациями которого являются наборы значений $(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{pi})$, $i = 1, 2, \dots, n$. Вычисляя попарные ковариации между компонентами этого случайного вектора $\widehat{\text{cov}}(x_k, x_l)$, образуют эмпирическую матрицу ковариации:

$$\widehat{V}_X = \begin{bmatrix} s_{x_1}^2 & \widehat{\text{COV}}(x_1, x_2) & \dots & \widehat{\text{COV}}(x_1, x_p) \\ \widehat{\text{COV}}(x_2, x_1) & s_{x_2}^2 & \dots & \widehat{\text{COV}}(x_2, x_p) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \widehat{\text{COV}}(x_p, x_1) & \widehat{\text{COV}}(x_p, x_2) & \dots & s_{x_p}^2 \end{bmatrix} \quad (8.44)$$

Эта матрица симметрична относительно главной диагонали, так как $\widehat{\text{COV}}(x_k, x_l) = \widehat{\text{COV}}(x_l, x_k)$; на главной диагонали находятся эмпирические дисперсии компонентов вектора **X**.

Нормируя элементы этой матрицы $\widehat{\text{COV}}(x_k, x_l)$ с помощью среднеквадратичных отклонений s_{x_k} и s_{x_l} , получают эмпирическую корреляционную матрицу

$$R_X = \begin{bmatrix} 1 & r_{12} & \dots & r_{1p} \\ r_{21} & 1 & \dots & r_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{p1} & r_{p2} & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (8.45)$$

Это симметричная матрица, на главной диагонали которой располагаются единицы.

Важным свойством корреляционной матрицы является то, что ее определитель удовлетворяет неравенству

$$0 \leq |R_X| \leq 1. \quad (8.46)$$

Определитель корреляционной матрицы характеризует глубину связи между компонентами вектора **X**: если $|R_X| \rightarrow 1$, то компоненты вектора **X** независимы, если $|R_X| \rightarrow 0$, то значение отдельного компонента является линейной комбинацией всех остальных. Последнее возможно даже в случае, когда в матрице **R_x** нет больших значений r_{hi} , т. е. корреляция может быть существенной в целом.

Корреляционную матрицу часто используют для сокращения числа выходных переменных, учитываемых при управлении объектом. Для этого сначала разбивают выходные параметры на группы так, чтобы в одну группу попали близкие параметры (сильно коррелированные), а в разные — параметры, слабо связанные между собой. Затем внутри каждой группы выбирают один или несколько параметров, а остальные исключают. Таким образом, управление объектом осуществляют, ориентируясь на оставленные параметры, общее число которых существенно меньше исходного числа параметров, что облегчает

управление. В то же время сильная корреляция между исключенными и оставленными параметрами автоматически обеспечивает нужный эффект управления и для исключенных параметров.

8.5.3. Нелинейная корреляция

Приведем понятие о нелинейной корреляции между двумя величинами, для чего воспользуемся только рассмотренной выше связью z и x как более выраженной криволинейной.

Общей мерой тесноты нелинейной корреляционной связи между двумя величинами является корреляционное отношение z к x :

$$\eta_{zx} = \frac{\sigma(\bar{z}_x)}{\sigma_z} \quad (8.47)$$

Эта формула отвечает на вопрос: какая часть полной колеблемости z обусловлена изменчивостью величины x .

В формуле (8.47) σ_z находят так, как было показано выше; числитель же правой части этой формулы (стандарт частных средних \bar{z}_x) представлен так:

$$\sigma(\bar{z}_x) = \sqrt{\frac{\sum n_{xi} (\bar{z}_{xi} - \bar{z})^2}{n - 1}}, \quad (8.48)$$

где \bar{z}_{xi} — частные средние значения z , определяемые для каждого интервала со среднеклассным значением x , что уже было выполнено ранее (см. Нахождение средних ординат). Вычислим по формуле (8.48) значение $\sigma(\bar{z}_x)$, учитывая, что $\bar{z} = 26,25$. Составим таблицу 8.19.

Таблица 8.19

Данные для вычисления $\sigma\bar{z}_x$				
\bar{z}_{xi}	$z_{xi} - \bar{z}$	$(z_{xi} - \bar{z})^2$	n_{xi}	$n_{xi} (z_{xi} - \bar{z})^2$
20,00	-6,25	39,06	5	195,30
23,70	-2,55	6,50	7	45,50
29,25	+3,00	9,00	9	81,00
33,50	+7,25	52,56	3	157,68
Σ	—	—	24	479,48

Отсюда

$$\sigma(\bar{z}_x) = \sqrt{\frac{479,48}{24 - 1}} \approx 4,57.$$

Так как ранее было получено значение $\sigma_z=5,16$, то по формуле (8.47) получим:

$$\eta_{zx} = \frac{4,57}{5,16} \approx 0,886.$$

Корреляционное отношение всегда положительно и находится между 0 и 1. Если оно равно нулю, корреляционная связь отсутствует. Чем больше значение корреляционного отношения, тем теснее корреляционная связь. Если значение корреляционного отношения совпадает со значением коэффициента корреляции, связь линейна. В других случаях $\eta > r$. Для нелинейных зависимостей корреляционное отношение является единственно правильным измерителем тесноты связи.

8.5.4. Множественная линейная корреляция

До сих пор разбиралась корреляция между двумя величинами: y и x , а также z и x . Но в ряде случаев приходится оценивать взаимосвязь между несколькими величинами, что является предметом множественной корреляции. Наиболее важное практическое значение имеет линейная множественная корреляция.

Мы остановимся на простом случае линейной корреляции между тремя величинами:

$$f_s = x, Q = y \text{ и } D = z.$$

При этом должны быть известны коэффициенты корреляции r_{xy} , r_{xz} и r_{yz} . Тогда мерой тесноты связи будет служить сводный (общий, совокупный) коэффициент множественной корреляции R . Он всегда положителен и заключен между 0 и 1.

Для определения тесноты связи между z и x , y в совокупности величина R вычисляется по уравнению:

$$R_{z,xy} = + \sqrt{\frac{r_{xz}^2 + r_{yz}^2 - 2r_{xy}r_{xz}r_{yz}}{1 - r_{xz}^2}}. \quad (8.49)$$

Для установления тесноты связи между y и x, z величина R будет равна:

$$R_{y,xz} = + \sqrt{\frac{r_{xy}^2 + r_{yz}^2 - 2r_{xy}r_{xz}r_{yz}}{1 - r_{xz}^2}}.$$

Аналогично составляется уравнение для $R_{x,yz}$.

Приведем пример вычисления коэффициента множественной корреляции, взяв за основу данные рисунка 8.12 и предыдущих вычислений коэффициентов корреляции.

Прежде всего необходимо найти значение коэффициента корреляции r_{yz} между величинами y и z . При составлении корреляционной таблицы

для y, z используем средние, полученные для облегчения проведения сглаженных кривых. Таким образом, выпишем для корреляционной таблицы данные о количестве измерений величины z , находящиеся в столбцах $\bar{y}_{x1}, \bar{y}_{x2}, \bar{y}_{x3}$ и \bar{y}_{x4} . Кроме того, отнесем полученное количество измерений величины Z к тем среднеклассовым значениям y , которым соответствуют $\bar{y}_{x1}, \bar{y}_{x2}, \bar{y}_{x3}$ и \bar{y}_{x4} . Тогда корреляционная таблица для y, z примет следующий вид (таб. 8.20).

Таблица 8.20

Корреляционная таблица для y, z

z	y						m _z
	25	50	75	100	125	150	
20	5	2	—	—	—	—	7
25	—	5	—	2	—	—	7
30	—	—	—	6	—	1	7
35	—	—	—	1	—	2	3
n _y	5	7	0	9	0	3	24

Вычислим \bar{z} :

$$\begin{aligned} & 5 \cdot 20 = 100 \\ & 2 \cdot 20 + 5 \cdot 25 = 165 \\ & 0 = 0 \\ & 2 \cdot 25 + 6 \cdot 30 + 1 \cdot 35 = 265 \\ & 0 = 0 \\ & 1 \cdot 30 + 2 \cdot 35 = 100 \\ & \hline \Sigma y m_z & = 630 \\ \bar{z} & = \frac{630}{24} \approx 26,25. \end{aligned}$$

Далее определим \bar{y} :

$$\begin{aligned} & 5 \cdot 25 + 2 \cdot 50 = 225 \\ & 5 \cdot 50 + 2 \cdot 100 = 450 \\ & 6 \cdot 100 + 1 \cdot 150 = 750 \\ & 1 \cdot 100 + 2 \cdot 150 = 400 \\ & \hline \Sigma z n_y & = 1825 \\ \bar{y} & = \frac{1825}{24} \approx 76,00. \end{aligned}$$

Вычисление средних здесь проверочное, причем значение y отклоняется незначительно от ранее полученного.

Проводим вычисления для нахождения ковариации C_{yz} :

$$\begin{array}{r}
 100 \cdot 25 = 2\,500 \quad 225 \cdot 20 = 4\,500 \\
 165 \cdot 50 = 8\,250 \quad 450 \cdot 25 = 11\,250 \\
 0 \cdot 75 = 0 \quad 750 \cdot 30 = 22\,500 \\
 265 \cdot 100 = 26\,500 \quad 400 \cdot 35 = 14\,000 \\
 0 \cdot 125 = 0 \quad \Sigma n_z yz = 52\,250 \\
 100 \cdot 150 = 15\,000 \\
 \hline
 \Sigma n_y yz = 52\,250 \\
 C_{yz} = \frac{52\,250}{24} - 26,25 \cdot 76,00 \approx 181,92.
 \end{array}$$

Вычислим, как и ранее, значение σ'_y , так как группировка y_i изменилась (по сравнению с ранее произведенными в табл. 8.15 вычислениями). Для этого составляем таблицу 8.21.

Таблица 8.21

Определение данных для вычисления σ'_y

y_i	n_{yi}	$y_i - \bar{y}$	$(y_i - \bar{y})^2$	$n_{yi} (y_i - \bar{y})^2$
25	5	-51	2601	13 005
50	7	-26	676	4 732
75	0	-1	1	0
100	9	+24	576	5 184
125	0	+49	2401	0
150	3	+74	5476	16 428
Σ	24	-	-	39 349

Отсюда

$$\sigma'_y = \sqrt{\frac{39\,349}{24-1}} \approx 41,4.$$

Группировка z_i по сравнению с ранее полученными данными (см. табл. 8.17) не изменилась, и поэтому берем $\sigma_z = 5,16$. Отсюда

$$r_{yz} = \frac{181,92}{41,4 \cdot 5,16} \approx 0,849.$$

Наконец, по формуле (8.49) определяем тесноту связи между z и x, y :

$$R_{z,xy} = + \sqrt{\frac{0,852^2 + 0,849^2 - 2 \cdot 0,897 \cdot 0,852 \cdot 0,849}{1 - 0,897^2}} \approx 0,874.$$

Общий вывод, который можно сделать из этого примера, таков: взаимная теснота связи всех трех величин ($x=f_s, y=Q$ и $z=D$) достаточно велика, и можно, учитывая физический смысл явлений сделать заключение о ясной функциональной связи, выраженной соответствующими уравнениями.

8.5.5. Корреляционные (регрессионные) уравнения

Нахождение численной величины тесноты связи между аргументом и функциями (и также межфункциональной) является одной из основных задач корреляционного анализа. Другой основной задачей будет отыскание форм корреляционной связи в виде уравнений, что особо важно при многофакторном исследовании.

В последнем случае результат (функция) зависит от нескольких факторов (аргументов). Общий вид корреляционного (регрессионного) уравнения таков:

$$F_{xyz\dots} = f(x, y, z, \dots), \quad (8.50)$$

где $F_{xyz\dots}$ — значение результата, которое мы назовем общим функционалом;

x, y, z, \dots — значения факторов, предполагаемых в качестве независимых величин.

Связи в уравнении (8.50) должны быть однозначны, что требует подготовки таблиц опытных данных.

Можно показать, что уравнением типа (8.50) разрешается пользоваться лишь в том случае, когда сила связи между результатом и факторами не меньше, чем сила связи факторов между собой. Далее, на надежность результата F_{xyz} влияет надежность полученных значений факторов x, y, z, \dots

Принимая, что уравнение (8.50) удовлетворяет этим условиям, можно для алгебраического построения его пользоваться двухфакторными матрицами.

Вначале записывают (при постоянном шаге квантования главного фактора) дискретные значения каждого из факторов в каждом шаге и соответствующий результат. Общее количество записей должно не только охватывать все особенности процесса, но и обеспечивать при классификации должную надежность при допустимой ошибке.

В соответствии с размахом колебаний значений каждого из факторов, записанные значения последних классифицируются и

устанавливаются среднеклассовые значения, против которых записывают средний результат. В таблице 8.22 показан пример такой обработки синхронных записей по трем факторам и соответствующим значениям результата.

В этой по возможности ранжированной таблице каждая строка представляет средние значения по классам и результату. Составление такой таблицы — одна из наиболее трудоемких частей работы. Уменьшая эту подготовительную работу, например, за счет увеличения числа классов, мы неизбежно увеличиваем последующие расчеты, не говоря уже о возможном уменьшении надежности средних по классам.

Таблица 8.22

Усредненные значения данных по факторам x, y, z и результата F_{xyz}

x	y	z	F_{xyz}	x	y	z	F_{xyz}
1	0,5	1	0,25	2	1,5	1	27,20
1	0,5	5	1,25	2	2,0	1	64,00
1	0,5	6	1,50	2	1,0	5	40,00
1	0,5	7	1,74	2	1,0	6	48,00
1	0,5	8	2,00	2	1,0	7	56,00
1	1,0	1	2,00	2	1,0	8	64,00
1	1,5	1	6,80	3	0,5	1	2,25
1	2,0	1	16,00	3	1,0	1	18,00
1	1,0	5	10,00	3	1,5	1	61,25
1	1,0	6	12,00	3	2,0	1	144,00
1	1,0	7	14,00	3	1,0	5	90,00
1	1,0	8	16,00	3	1,0	6	108,00
1	1,5	5	33,70	3	1,0	7	126,00
1	1,5	6	40,50	3	1,0	8	144,00
1	1,5	7	47,30	4	0,5	1	4,00
1	1,5	8	54,00	4	1,0	1	32,00
1	2,0	5	80,00	4	1,5	1	108,75
1	2,0	6	96,00	4	2,0	1	256,00
1	2,0	7	112,00	4	1,0	5	160,00
1	2,0	8	128,00	4	1,0	6	192,00
2	0,5	1	1,00	4	1,0	7	224,00
2	1,0	1	8,00	4	1,0	8	256,00

Ранжирование по факторам позволяет находить корреляционные уравнения уже по таблицам, аналогичным таблице 8.22, если их данные позволяют отобрать группы значений факторов, в которых было бы нейтрализовано влияние всех факторов, за исключением

одного. В этих целях отбирают группы чисел, в которых есть один переменный фактор при постоянстве остальных. Например, в таблице 8.22 этому соответствуют величины z при $x=y=1,0$ и результат изменяется только в функции величины z . Выписывая табличку

z	5	6	7	8
F_{xyz}	10	12	14	16

устанавливаем, что результат (назовем его функционалом F_z) можно выразить через величину z , или, иначе, $F_z = 2z$. Выписывая из таблицы 8.22 группу чисел при $x=2$ и $y=1$ и подставляя вместо значений z значения F_z , находим значение функционала F_{xz} . Наконец, при неизменных x и z (например, при $x=4$ и $z=1$), выполняя необходимые операции, находим общий функционал $F_{xyz} = 2x^2y^3z$. Отметим, что в некоторых случаях обобщенный коэффициент или (в случае полинома) свободный член уравнения можно найти только подбором по данным таблицы, аналогичной таблице 8.22.

Но далеко не всегда по исходной таблице усредненных данных можно определить общий функционал $F_{xyz} \dots$. Поэтому, чтобы определить общий функционал $F_{xyz} \dots$, можно использовать матричный анализ.

Для этого составляют двухфакторные матрицы. Далее в таблице 8.23 показана матрица x, y_i , в которой каждому шагу каждого из факторов соответствует результат a_{ij} .

Таблица 8.23

Двухфакторная матрица x_j, y_i

x_j	$j=1$	\dots	$j=n$	$\sum_1^n a_{ij}$	\bar{a}_i
y_i	a_{i1}	\dots	a_{in}		
$i=1$					
\dots					
$i=m$	a_{m1}	\dots	a_{mn}		
$\sum_1^m a_{ij}$				$\sum_1^m \sum_1^n a_{ij}$	
\bar{a}_j					\bar{a}_j

В принципе матрицы прямоугольны, хотя из-за компактности изложения в примерах приводятся квадратные матрицы.

В предпоследних столбце и строке помещены суммы по строкам $\sum_{i=1}^n a_{ij}$ и по столбцам $\sum_{i=1}^m a_{ij}$, как и сумма всех результатов $\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij}$. В последнем столбце помещены средние по строкам \bar{a}_i , а в последней строке — средние по столбцам \bar{a}_j , так же как и средняя из средних \bar{a}_{ij} , которую проще вычислить из соотношения:

$$\bar{a}_{ij} = \frac{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij}}{m \cdot n} \tag{8.51}$$

Двухфакторная матрица указанной в таблице 2.23 формы имеет ту особенность, что в ней ряды значений факторов усреднены, и поэтому ряды величин \bar{a}_i и \bar{a}_j в наибольшей возможной степени взаимно нейтральны и отображают дискретные значения зависимости результата от дискретных значений каждого из факторов. Все это позволяет найти уравнения рядов \bar{a}_i и \bar{a}_j ; эти ряды при необходимости сглаживают одним из способов. Назовем зависимость ряда \bar{a}_j от ряда x_j , выраженную уравнением, первичным — функционалом F_x , а соответствующую зависимость ряда \bar{a}_i от ряда y_i — первичным функционалом F_y . Разумеется, при числе матриц больше одной коды функционалов могут изменяться в соответствии с кодом факторов.

Число матриц для получения корреляционного уравнения равно числу сочетаний из K факторов по 2. Поэтому для составления уравнения по двум факторам нужна одна матрица, по трем факторам — три матрицы, по четырем — шесть матриц и т. д.

Приведем краткие правила вывода корреляционных уравнений и два примера для простых задач, решаемых без помощи ЭВМ.

1. Сначала определяют по всем матрицам первичные функционалы. Они могут быть или одночленами, или полиномами.

2. Затем определяют матричные функционалы (F_{xy} или F_{yz} и т.д.):

а) если первичные функционалы данной матрицы представлены одночленами, то для получения матричного функционала их

произведение делится на среднюю из средних. Иначе, матричный функционал факторов x и y

$$F_{xy} = \frac{F_x F_y}{\bar{a}_{ij}} \tag{8.52}$$

б) если первичные функционалы представлены полиномами, то для получения матричного функционала их алгебраически суммируют и из этой суммы вычитают среднюю из средних. Иначе, в этом случае

$$F_{xy} = F_x + F_y - \bar{a}_{ij} \tag{8.53}$$

в) если один первичный функционал представлен одночленом, а другой — полиномом, то один из них следует преобразовать так, чтобы в результате можно было пользоваться формулами (8.52) или (8.53).

Отметим, что получение первичных и матричных функционалов позволяет установить принципиальную структуру общей корреляционной формулы. Вспомогательные рисунки кривых функционалов также могут служить этой цели.

3. По матричным функционалам устанавливают общий функционал всех факторов $F_{xyz...}$ в виде корреляционного уравнения.

Для уяснения последующего принимают во внимание, что в матричных функционалах символы факторов могут повторяться в различных сочетаниях, в различных степенях и с различными коэффициентами. Поэтому действия по составлению корреляционного уравнения можно скорее назвать сопоставлением матричных функционалов с использованием своеобразных матричных норм, выбираемых из уравнений матричных функционалов;

а) если все матричные функционалы представлены одночленами, общий функционал (назовем его общим функционалом первого рода) может быть выражен произведением факторных символов высших степеней, взятых с соответствующими коэффициентами; если в уравнениях матричных функционалов есть одинаковые символы одной и той же степени, для произведения берут один из них. Таким образом, в этом случае

$$F'_{xyz...} = ax^{\max} y^{\max} z^{\max} \dots \tag{8.54}$$

где a — общий коэффициент, а верхними индексами обозначена указанная выборка из уравнений матричных функционалов;

б) если все матричные функционалы представлены полиномами, то общий функционал (назовем его функционалом второго рода) может быть представлен в виде алгебраической суммы символов факторов высших степеней с их коэффициентами и свободного члена матричных уравнений; если есть одинаковые символы одной и той же степени, для

суммирования берется один из них. То же относится к свободному члену.

В данном случае

$$F_{xyz\dots}^n = ax^{\max} + by^{\max} + cz^{\max} + \dots + d. \quad (8.55)$$

Заполним на основании данных таблицы 8.22 матрицу $xу$, что представлено таблицей 8.24, причем тут возможны два варианта:

а) если по исходной таблице усредненных данных имеется возможность заполнить матрицу с нейтрализацией всех остальных факторов (кроме необходимых двух, в данном случае x, y), то в большинстве случаев это дает более точное решение;

б) если такой возможности нет, в матричные клетки a_{ij} записывают все данные по соответствующим результатам, в суммирующих клетках — все суммы, в столбце \bar{a}_i и строке \bar{a}_j — средние по всем записям, получая, таким образом, среднему взвешенные значения результатов от данного фактора.

Таблица 8.24

Матрица $xу$ (при $z=1$)

y	x				Σ	\bar{a}_i
	1	2	3	4		
0,5	0,25	1,00	2,25	4,00	7,50	1,88
1,0	2,00	8,00	18,00	32,00	60,00	15,00
1,5	6,80	27,20	61,25	108,75	204,00	51,00
2,0	16,00	64,00	144,00	256,00	480,00	120,00
Σ	25,05	100,20	225,50	400,75	751,50	
\bar{a}_j	6,26	25,05	56,40	100,19		47,00

В таблице 8.24 возможности заполнения матрицы даны значениями результата при $z=1$.

Отсюда первичные функционалы (получены почти без сглаживания)

$$F_x = 6,26x^2 \text{ и } F_y = 15y^3.$$

На основании формулы (8.52) получаем:

$$F_{xy} = \frac{6,26 x^2 \cdot 15y^3}{47} = 2x^2 y^3.$$

Если записать в матрицу $xу$ все результаты таблицы 8.22 получим ряды (самой матрицы для краткости не приводим):

y	0,5	1,0	1,5	2,0
\bar{a}_i	1,75	80,65	47,40	112,00
x	1	2	3	4
\bar{a}_j	33,7	37,6	86,7	154,3

При общей средней, вычисленной по формуле (8.51), $\bar{a}_{ij} = 66,00$. Как видно, кривые значений \bar{a}_i и \bar{a}_j требуют тщательного сглаживания, особенно выделяются $\bar{a}_i = 80,65$ и $\bar{a}_j = 33,7$. Для улучшения сглаживания введем среднюю \bar{a}_{ij} , соответствующую $y=1,25$ и $x=2,50$. После сглаживания получаем:

$$F_x = 9,5x^2 \text{ и } F_y = 14y^3.$$

Тогда

$$F_{xy} = \frac{9,5 x^2 \cdot 14 y^3}{66} = 2,02 x^2 y^3.$$

На практике могут быть клетки матрицы с прочерками (пустые). При тщательно поставленных опытах и заполнении начальных, средних и конечных строк и столбцов могут быть получены удовлетворительные результаты, что может сказаться и на определении количества опытов при их планировании. Это лучше делать (при возможности заполнения вслед за каждым опытом с синхронной записью) по нескольким факторам подготовленной классификации (если знают размах колебаний факторов) и проведения последовательного анализа.

В таблицах 8.25 и 8.26 показаны матрицы xz и yz , причем результаты при $z=1$ опущены, чтобы не нарушать постоянства шага опытных данных.

Таблица 8.25

Матрица xz

z	x				Σ	\bar{a}_i
	1	2	3	4		
5	1,25; 10,00; 33,70; 80,00	40,00	90,00	160,00	414,95	59,3
6	1,50; 12,00; 40,50; 96,00	48,00	108,00	192,00	498,00	71,2
7	1,74; 14,00; 47,30; 112,00	56,00	126,00	224,00	581,04	83,00
8	2,00; 16,00; 54,00; 128,00	64,00	144,00	256,00	664,00	94,8
Σ	649,99	208,00	468,00	832,00	2157,99	
\bar{a}_i	40,70	52,00	117,00	208,00		76,30

Таблица 8.26

Матрица yz

z	y				Σ	\bar{a}_i
	0,5	1,0	1,5	2,0		
5	1,25	10,00	33,70	80,00	124,95	31,24
6	1,50	12,00	40,50	96,00	150,00	37,50
7	1,74	14,00	47,30	112,00	175,04	43,76
8	2,00	16,00	54,00	128,00	200,00	50,00
Σ	6,49	52,00	175,00	416,00	649,99	
\bar{a}_j	1,62	13,00	43,90	104,00		40,70

Сглаживая, получаем равенства $F_x = 13x^2$ (с наибольшей ошибкой для \bar{a}_{j1}) и $F_z = 11,9z$. Тогда

$$F_{xz} = \frac{13 \cdot 11,9 x^2 z}{76,3} = 2x^2 z.$$

По сглаживанию рядов \bar{a}_i и \bar{a}_j получаем:

$$F_y = 13y^3; F_z = 6,25z; F_{yz} = \frac{13 \cdot 6,25 y^3 z}{40,7} = 2y^3 z.$$

Сопоставляя матричные функционалы, получаем:

$$F_{xyz} = 2x^2 y^3 z.$$

Эта структура уравнения повторяет структуру формулы (8.54).

Объективное установление структуры корреляционного уравнения и степенных зависимостей — шаг на пути правильного установления и рациональной интерпретации закона развития явления. Эта структура может быть, конечно, установлена и логическим путем, если в ее основу положены известные законы развития явления.

Второй пример несколько сокращен: опущена исходная таблица усредненных результатов, аналогичная таблице 8.22 и часть пояснений. Этот пример представлен таблицами 8.27- 8.29.

Таблица 8.27.

Матрица xy

y	x				Σ	\bar{a}_i
	1	2	3	4		
0,5	-3,37	-0,38	4,63	11,62	12,50	3,13
1,0	-2,50	0,50	5,50	12,50	16,00	4,00
1,5	0,13	2,88	7,87	14,87	25,75	6,44
2,0	4,50	7,50	12,50	19,50	44,00	11,00
Σ	-1,24	10,50	30,50	58,49	98,25	
\bar{a}_j	-0,31	2,62	7,62	14,62		6,15

Таблица 2.28.

Матрица xz

z	x				Σ	\bar{a}_i
	1	2	3	4		
5	1,12	4,13	9,12	16,13	30,50	7,63
6	0,13	3,12	8,13	15,12	26,50	6,63
7	-0,89	2,13	7,12	14,13	22,49	5,62
8	-1,88	1,12	6,13	13,12	18,49	4,62
Σ	-1,52	10,50	30,50	58,50	97,98	
\bar{a}_j	-0,38	2,63	7,63	14,63		6,12

Таблица 8.29.

Матрица yz

z	y				Σ	\bar{a}_i
	0,5	1,0	1,5	2,0		
5	4,63	5,50	7,87	12,50	30,50	7,63
6	3,63	4,50	6,87	11,50	26,50	6,63
7	2,63	3,50	5,87	10,50	22,50	5,63
8	1,63	2,50	4,87	9,50	18,50	4,63
Σ	12,52	16,00	25,48	44,00	98,00	
\bar{a}_j	3,13	4,00	6,37	11,00		6,13

Рассматривая ряды средних, можно установить, что они не являются просто степенными функциями, а включают еще и второй одночлен. В самом деле, после сглаживания $F_x = x^2 - 1,38$ и $F_y = y^3 + 3$, так что соответствует формуле (8.53)

$$F_{xy} = x^2 + y^3 - 1,38 + 3 - 6,15 = x^2 + y^3 - 4,53.$$

В этом случае общая структура корреляционного уравнения близка к формуле (8.55).

Отсюда

$$F_x = x^2 - 1,37; F_z = 12,63 - z.$$

По формуле (8.53)

$$F_{xz} = x^2 - z + 12,63 - 1,37 - 6,12 = x^2 - z + 5,14.$$

Отсюда

$$F_y = y^3 + 3; F_z = 12,63 - z; F_{yz} = 12,63 + 3 - 6,13 + y^3 - z = y^3 - z + 9,50.$$

Сопоставляя матричные функционалы, находим, что общий вид корреляционного уравнения будет:

$$F_{xyz} = x^2 + y^3 - z + d.$$

Значение d определяем подбором; в данном случае $d=2$.

Описанные примеры приведены для расчетов вручную; но все изложенное имеет самостоятельное методическое значение.

В приложениях даны формы и аналитические выражения для встречающихся простых функционалов. В более сложных случаях исходную таблицу дискретных синхронных измерений, ранжированную по факторам, для получения корреляционного уравнения обрабатывают на ЭВМ. При использовании ЭВМ все расчеты обычно разбивают на три части: вычисление исходной таблицы (примерно по форме таблицы 8.22); определение принципиальной структуры корреляционного уравнения и установление численных значений показателей степеней, обобщенных коэффициентов и свободных членов.

Отметим, что если в какой-либо матрице ряд \bar{a}_i или \bar{a}_j имеет одинаковые (или почти одинаковые) значения, то соответствующий фактор не влияет на значение матричного функционала, и он из последнего может быть исключен.

В некоторых случаях простой корреляционной зависимости, как это показано в примерах, мы не получим, так как явление осложняется влиянием неучитываемых факторов (например, времени, химического состава обрабатываемой среды и др.). В таких случаях рекомендуется сначала определить структуру многофакторного регрессионного уравнения и лишь после этого уточнить входящие в состав уравнения члены, чтобы получить уравнение с наименьшей ошибкой. Структуру уравнения определяют либо логически (если общие законы взаимосвязи факторов известны), либо при помощи приближенного представления рядов средних \bar{a}_i и \bar{a}_j .

Первый способ не требует пояснений. При втором способе лучше построить графики первичных функционалов и по ним определить приближенные (с ошибкой) простые зависимости. Предположим, что при трех факторах x, y, z , эти зависимости дают функционалы

$$F_x = ax^k, F_y = by^l \text{ и } F_z = \frac{c}{z^m},$$

то есть грубо взятый функционал

$$F_x = ax^k, F_y = by^l \text{ и } F_z = \frac{c}{z^m},$$

Ценность предварительного определения структуры уравнения заключается в приближении его к рациональной форме. Затем уточняют значения каждого из функционалов так, чтобы получить минимальную ошибку.

Пусть, например, с допустимой ошибкой

$$F_x = a_1(x^k - a_2x + g_1); F_y = b_1(y^{0,8l} + b_2y - g_2) \text{ и } F_z = \frac{c}{z^{0,9m}}.$$

Тогда с приемлемой максимальной ошибкой (которую для опытных пределов следует указать)

$$F_{xyz} = d \frac{(x^k - a_2x + g_1)(y^{0,8l} + b_2y - g_2)}{z^{0,9m}}.$$

8.5.6. Ранговая корреляция

Задачей метода ранговой корреляции является оценка связи между упорядоченными объектами исследования. Для упорядочения объектов используются ранги и тогда задача состоит в том, чтобы по совокупности данных экспертами упорядочений составить усредненное упорядочение, наиболее близкое к истинному.

К решению задачи применяется статистический подход. Каждая данная экспертом ранжировка считается несовершенным, искаженным субъективными воздействиями вариантом правильного упорядочения объектов. Тогда к оценке полученных ранжировок можно применять статистические критерии, в частности, для согласованности мнений экспертов используется **коэффициент конкордации** (согласия), который меняется от нуля (нет согласия) до единицы (полное согласие).

Метод ранговой корреляции.

Имеются объекты x_1, x_2, \dots, x_n . Специалистам, хорошо знакомым с исследуемыми объектами, предлагается расположить объекты, предположим, в порядке убывания степени их влияния на некоторый показатель, т. е. присвоить ранг r_{ij} — ранг для каждого j -го объекта, данный i -ым экспертом.

Пояснение. Сводная матрица $[r_{ij}]$ размерами $m \times n$ содержит по строкам натуральный ряд чисел, расположенных в различном порядке. Среднее арифметическое натурального ряда чисел равно

$$\frac{1}{n} (1 + 2 + \dots + n) = \frac{n + 1}{2}$$

и тогда общее среднее равно

$$a = \frac{1}{2} m(n + 1).$$

В матрице $[r_{ij}]$ возможны и дробные ранги. Они появляются тогда, когда эксперт не может отдать предпочтение двум или большему числу объектов, например, если эксперт не может упорядочить объекты с рангами 4 и 5, то он может приписать этим двум объектам ранг $(4+5)/2=4,5$.

План эксперимента представляет собой анкеты, получаемые экспертами. Суммарная анкета — таблица, по строкам которой располагаются ранжировки экспертов, а по столбцам — ранги объектов исследования (табл. 8.30).

Расчет средних:

$$a_n = \frac{n+1}{2} \text{ — среднее ранжировочного ряда эксперта,}$$

где n — число объектов исследования;

$$a = \frac{1}{2} m(n+1) \text{ — общее среднее таблицы рангов,}$$

где m — число экспертов.

Таблица 8.30.

		Объекты исследования			
		x_1	x_2	...	x_n
Номер эксперта	1	r_{11}	r_{12}	...	r_{1n}
	2	r_{21}	r_{22}	...	r_{2n}

	m	r_{m1}	r_{m2}	...	r_{mn}
Сумма рангов		$\sum_{i=1}^m r_{i1}$	$\sum_{i=1}^m r_{i2}$...	$\sum_{i=1}^m r_{in}$

Расчет суммы квадратов отклонений. Первоначально рассчитываются квадраты отклонений суммарных рангов от общего среднего:

$$d_j^2 = \left(\sum_{i=1}^m a_{ij} - a \right)^2,$$

затем суммы квадратов отклонений:

$$S(d_j^2) = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m a_{ij} - a \right)^2.$$

Расчет максимальной суммы квадратов отклонений. Доказано, что при полном согласии мнений экспертов максимальная сумма квадратов будет равна:

$$S(d_j^2) = \frac{1}{12} m^2 (n^3 - n).$$

Расчет показателя дробных рангов. При наличии дробных рангов максимальная сумма квадратов уменьшается на

$$m \sum_{i=1}^e T_i,$$

где

$$T_i = \frac{1}{12} \sum_{v=1}^g (t_v^3 - t_v);$$

e — число строк матрицы, содержащей связанные ранги; g — число типов связанных рангов в строке; t — количество равных рангов в i -ой строке.

Расчет коэффициента конкордации. При отсутствии связанных рангов коэффициент конкордации получается как отношение рассчитанной $S(d_j^2)$ к максимальной $S(d_j^2)_{max}$:

$$W_p = \frac{S(d_j^2)}{S(d_j^2)_{max}} = \frac{\sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m a_{ij} - a \right)^2}{\frac{1}{12} m^2 (n^3 - n)};$$

при наличии связанных рангов

$$W_p = \frac{\sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m a_{ij} - a \right)^2}{\frac{1}{12} m^2 (n^3 - n) - m \sum_{i=1}^e T_i}.$$

Оценка коэффициента конкордации. Установлено, что для числа объектов $n > 7$ величина $[m(n-1)W_p]$ имеет χ^2 -распределение (при $n < 7$ используются специальные таблицы Кендалла):

$$\chi_p^2 = m(n-1)W_p.$$

Принятие решений. Если расчетное значение χ^2 -распределения окажется меньше табличного

$$\chi_p^2 < \chi_q^2 (f = n - 1, q = 0,05)$$

при числе степеней свободы f и заданном уровне значимости q , то мнения экспертов считают согласованными. В этом случае строят диаграмму рангов (гистограмму), где по оси абсцисс дискретно откладывают объекты ранжирования, а по оси ординат суммы рангов в обратном порядке. Вид сглаженной ранжировочной кривой в какой-то мере позволяет решить задачу классификации объектов (при двух классах).

Если приведенное выше неравенство не выполняется, т. е. мнения экспертов не согласованы, то одним из решений может быть изменение состава экспертов или их обучение. Иногда меняют и количество объектов.

Примечание. Кроме ранжирования объектов в некоторых случаях приходится с целью разработки весов ранжировать и качественные показатели объектов. При этом метод, естественно, усложняется.

9. Дополнительные методы обработка экспериментальных данных

Мы достаточно подробно изложили основные методы обработки опытных данных, при помощи которых исследователь может обнаружить и численно определить интересующие его закономерности развития явления и связи между различными его сторонами или между явлениями.

Средняя и стандарт (как показатель изменчивости средней) — фундаментальная основа обработки опытных данных. В большинстве случаев эти величины необходимы, но не всегда достаточны. Наше изложение включает поэтому некоторые дополнительные направления обработки опытных данных. Кроме того, далее приводятся характеристики других, не описанных в работе методов. Ознакомление с этими характеристиками поможет начинающему исследователю избрать те способы обработки, которые он считает необходимыми.

9.1. Анализ периодических колебаний

Гармонический анализ служит для выделения из гармонических колебаний основной частоты и ее гармоник и нахождения характеристик колебаний. Непрерывная или разрывная функции должны иметь ограниченную вариацию и разлагаться в ряд Фурье. Тогда она представляется в виде суммы постоянного члена (среднего

значения функции) и некоторого множества компонент с частотами $1/T$ (основная частота), $2/T$ (вторая гармоника), $3/T$ (третья гармоника)... где T — период.

Отыскание ряда Фурье, соответствующего заданному сложному колебанию, является первой целью исследователя при проведении гармонического анализа. Для нахождения коэффициентов ряда (например, кривых осциллограмм) используют либо один из численных методов интегрирования, либо подбирают значения по табличным данным. Следует помнить, что высокие гармоники вычисляются с большей ошибкой. Ошибку найденной формулы определяют двояко: *по максимальной разности амплитуд и по максимальной разности периодов опытной кривой и представленной формулой.* Второй целью исследователя (после отыскания формулы) является *оценка* (на основании физических и теоретических представлений) *найденных компонент* — степень их допустимости, примерное установление способов устранения недопустимых колебаний и, если имеется возможность повторить опыты с целесообразно измененным объектом, установление допустимых (в некоторых случаях желательных) колебаний. Примеры: колебания акустические и тепловые, искажения в электросхемах при усилении, колебания остова комбайна под воздействием собственных колебаний различных узлов.

Периодический анализ. Для некоторых периодических колебаний гармонический анализ или дает слишком большую ошибку, или их трудно обнаружить среди массы колебаний, вызванных фоном случайностей. Таковы, например, вынужденные колебания остова комбайна, вызванные микрорельефом почвы; вынужденные колебания плуга и деталей гусеничного трактора, вызванные перематыванием гусениц; высота струи дождевальной установки в функции времени и т. п.

В этих случаях задача, стоящая перед исследователем двояка: нахождение периодов, отыскание и характеристика изменения амплитуд. Последние в условиях работы машинно-тракторных агрегатов могут быть величиной более изменчивой, нежели периоды.

Результаты можно получить рядом методов, из которых мы выделим наиболее простые.

Если периодичность колебаний приблизительно известна (например, перематывание гусеничных звеньев), исследуют кривую для нахождения этой периодичности. Для этого отмечают на кривой участок, несколько больший заданной примерной периодичности. Таким образом, один из полупериодов искомым колебаний обязательно

будет находиться внутри принятого участка. Далее, взяв размеченную по предположенным периодам линейку или измеритель с раздвинутыми на этот период ножками, от оси первого полупериода на выделенном участке отмечают по всей кривой заданную периодичность и отклонения ее от осей полупериодов, на которые попадает отметка. Таким же образом поступают по очереди со следующими полупериодами. Очевидно, что искомое колебание будет с наименьшими отклонениями по периоду; вместе с тем обращают внимание и на форму этих периодических колебаний и другие дополнительные признаки, характеризующие искомое колебание. Может быть случай, когда на каком-то месте кривой периодичность резко изменяется. Тогда (если все измерения закончены и колебания заданной периодичности на всем протяжении кривой не найдены) те же действия повторяют с другого конца кривой, находят место разрыва закономерности и обсуждают причины, если все остальное показывает на то, что искомый период найден (детали формы, амплитуда). Как видно из этого описания, такой простой метод отыскания искомых колебаний не всегда эффективен.

Если периодичность колебаний неизвестна, надо воспользоваться методом огибающих, позволяющим установить суммарные амплитуды колебаний, частоты главных компонент и их амплитуды. По этому методу вначале двумя огибающими (нижней и верхней) обводят высокочастотные колебания. Тогда отрезки ординат между огибающими характеризуют амплитуды этих колебаний, колебания же полосы между огибающими покажут периоды и более низкочастотной волны. Если последние колебания неравномерны, тем же способом выделяют еще более низкочастотную волну. Таким образом можно исследовать в зависимости от масштаба записей несколько компонент. Вслед за этим каждая из компонент подвергается обсуждению (по связи с развитием физического явления); а в необходимых случаях – и математической обработке. Исследователь, имеющий даже небольшой опыт такого анализа (10—15 кривых), сможет анализировать трехкомпонентную кривую примерно за полчаса. Упомянем о том, что этот способ можно применить и для гармонического анализа.

Дисперсионный анализ. Этот анализ является перспективным в тех случаях, когда на общем случайно колеблющемся фоне проводятся серии опытов, каждая с определенной комбинацией факторов, предположительно влияющих на результат.

Ставится задача: найти степень значимости каждого из факторов для результата. Например, надо найти регулировки узлов самоходного комбайна, дающие минимум потерь на данном поле при прямом

комбайнировании. Здесь общий колеблющийся случайно фон — почва с ее различными плотностью и микрорельефом, стеблестой разного состояния, наличие куртин сорняков. Очевидно, что надо провести несколько серий опытов с изменением основных регулировок как рабочих узлов, так, быть может, скорости движения и давления в пневматиках.

Основную роль в дисперсионном анализе играет сравнение дисперсий с вычислением общей дисперсии по всем опытам и дисперсий по сериям опытов, а также так называемой остаточной дисперсии, которую дают случайные причины (в показанном выше примере состояние почвы и растительности).

Сравнивая дисперсии по сериям опытов и остаточную дисперсию, можно определить, является ли влияние каждого из факторов на потери существенно отличным от влияния случайных причин, и таким образом оценить влияние факторов на результат. К этому анализу, конечно, добавляется анализ средних, полученных по сериям опытов. Дисперсионный анализ может дать оценку не только каждого фактора в отдельности, но и всех (изменяемых в опыте) факторов в совокупности и их взаимодействий.

Техника вычислений в общей схеме такова. После отыскания средних — общих и по сериям вычисляют дисперсию общую по всем опытам, затем по сериям опытов и остаточную, причем при их вычислении учитываются соответствующие так называемые степени свободы (числа, показывающие количество свободно варьирующих элементов).

Наконец, при помощи определенных вероятностных критериев сравнивают итоги и проводят анализ влияния на результат различных факторов (желательно во взаимосвязи последних).

9.2. Метод факторного эксперимента при исследовании компонентных систем.

Задача факторного эксперимента при изучении компонентных (смесевых) систем не отличается от задачи факторного эксперимента второго порядка (см. п. 5.7). Однако при изучении свойств смесей, зависящих только от соотношений компонентов, желательно учитывать условие

$$\sum_{i=1}^n x_i = 1, \quad (9.1)$$

где x_i — относительные концентрации компонента ($x_i \geq 0$); n — количество компонентов ($n \geq 2$).

Условие (9.1) не позволяет использовать планы ПФЭ и модели типа

$$S_{\text{ост}} = (yy) - b_0(0y) + \sum_{i=1}^n b_i(iy) + \sum_{i < j}^n b_{ij}(ijy)$$

— матрица $(X^T X)^{-1}$ оказывается вырожденной.

Шеффе ввел каноническую форму полинома степени n :

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^n \beta_i x_i + \sum_{m=2}^p \left[\sum_{1 < i < j < q} \beta_{ij}^{(m)} x_i x_j (x_i - x_j)^{m-2} \right] + \sum_{m=3}^p \left[\sum_{1 < i_1 < i_2 < \dots < i_m < q} \beta_s x_{i_1}^{s_1} x_{i_2}^{s_2} \dots x_{i_m}^{s_m} \right], \quad (9.2)$$

где

$$s = i_1^{s_1} i_2^{s_2} \dots i_m^{s_m}; \quad s_1 + s_2 + \dots + s_m = p.$$

Наиболее часто пользуются следующими приведенными (каноническими) полиномами:

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 \quad (9.3)$$

— полином второго порядка для трехкомпонентной смеси;

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3 \quad (9.4)$$

— полином неполного третьего порядка для трехкомпонентной смеси;

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \gamma_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + \gamma_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \gamma_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \beta_{123} x_1 x_2 x_3 \quad (9.5)$$

— полином третьего порядка для трехкомпонентной смеси;

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \gamma_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + \gamma_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \gamma_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \delta_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2)^2 + \delta_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3)^2 + \delta_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3)^2 + \beta_{1123} x_1^2 x_2 x_3 + \beta_{1223} x_1 x_2^2 x_3 + \beta_{1233} x_1 x_2 x_3^2 \quad (9.6)$$

— полином четвертого порядка для трехкомпонентной смеси.

Пояснение. От стандартного полинома, например, второго порядка

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + b_{33} x_3^2 \quad (9.7)$$

к полиному Шеффе (9.3) переходят путем несложных преобразований условия

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1$$

в условия

$$\begin{aligned} b_0 x_1 + b_0 x_2 + b_0 x_3 &= b_0; \\ x_1^2 &= x_1 - x_1 x_2 - x_1 x_3; \\ x_2^2 &= x_2 - x_1 x_2 - x_2 x_3; \\ x_3^2 &= x_3 - x_1 x_3 - x_2 x_3; \end{aligned} \quad (9.8)$$

и подстановкой (9.8) в (9.7). Получают

$$\hat{y} = (b_0 + b_1 + b_{11}) x_1 + (b_0 + b_2 + b_{22}) x_2 + (b_0 + b_3 + b_{33}) x_3 + (b_{12} - b_{11} - b_{22}) x_1 x_2 + (b_{13} - b_{11} - b_{33}) x_1 x_3 + (b_{23} - b_{22} - b_{33}) x_2 x_3. \quad (9.9)$$

Симплекс-решетчатые планы Шеффе. Известно, что геометрическое место точек, удовлетворяющее условию (9.1), представляет собой $n-1$ правильный симплекс. Тогда факторное пространство может быть представлено симплексами с такой же системой координат. Планирование на симплексах осуществляется равномерным разбросом экспериментальных точек. Получаются $\{n, m\}$ -решетки, где n — число компонентов смеси; m — порядок полинома. Примеры $\{3, m\}$ -решеток с принятыми обозначениями выходной переменной приведены на рис. 9.1.

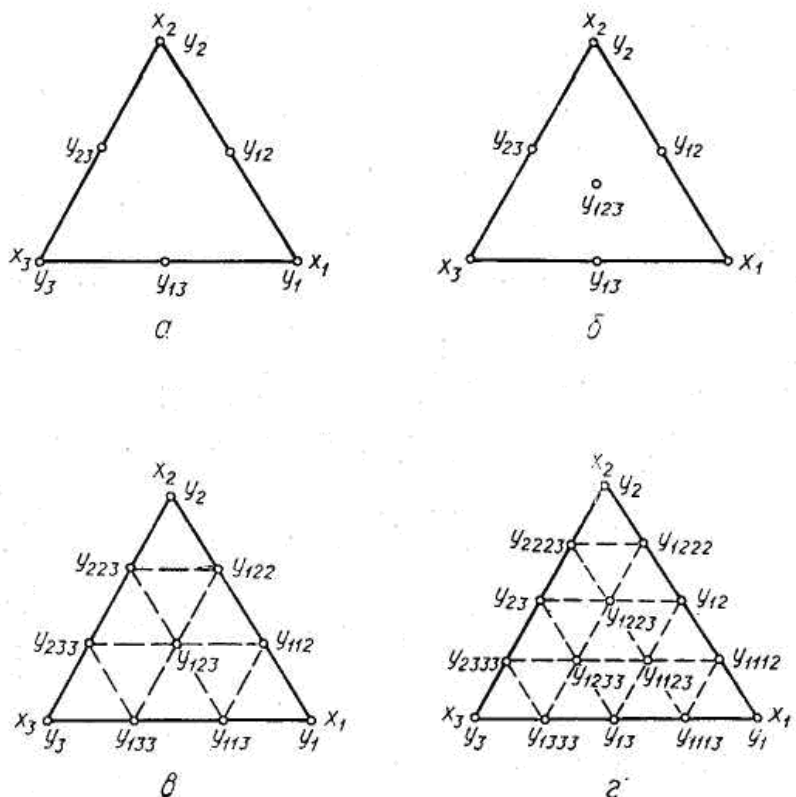


Рис. 9.1. $(3, m)$ -симплексные решетки для полинома порядка: а — второго; б — неполного третьего; в — третьего; г — четвертого.

Симплекс-решетчатые планы частично композиционные. Неполную кубическую решетку $\{3, 3^*\}$ (рис. 9. 1, б) можно получить из $\{3, 2\}$ (см. рис. 9.1, а) добавлением одной точки в центре симплекса; решетку $\{3, 4\}$ (см. рис. 9.1, г) — добавлением точек к решетке $\{3, 2\}$. (см. рис. 9.1, а).

Алгоритм симплекс-решетчатых планов второго порядка для трехкомпонентной смеси.

Исходные данные. Имеется трехкомпонентная смесь. Необходимо получить зависимость некоторого свойства y от состава смеси в виде (9.3) и проверить ее адекватность.

План эксперимента для рассматриваемого случая приведен в табл. 9.1.

В каждой точке решетки проводится одинаковое число (m) параллельных опытов.

Расчет коэффициентов уравнения. Расчет коэффициентов возможен методом наименьших квадратов по уравнению $\beta = (X'X)^{-1} X'Y$.

Таблица 9.1.

Номер опыта	План			Выходная переменная				
	x_1	x_2	x_3	$y_u^{(1)}$	$y_u^{(2)}$...	$y_u^{(m)}$	\bar{y}_u
1	1	0	0	$y_1^{(1)}$	$y_1^{(2)}$...	$y_1^{(m)}$	\bar{y}_1
2	0	1	0	$y_2^{(1)}$	$y_2^{(2)}$...	$y_2^{(m)}$	\bar{y}_2
3	0	0	1	$y_3^{(1)}$	$y_3^{(2)}$...	$y_3^{(m)}$	\bar{y}_3
4	0,5	0,5	0	$y_{12}^{(1)}$	$y_{12}^{(2)}$...	$y_{12}^{(m)}$	\bar{y}_{12}
5	0,5	0	0,5	$y_{13}^{(1)}$	$y_{13}^{(2)}$...	$y_{13}^{(m)}$	\bar{y}_{13}
6	0	0,5	0,5	$y_{23}^{(1)}$	$y_{23}^{(2)}$...	$y_{23}^{(m)}$	\bar{y}_{23}

Однако, учитывая, что план эксперимента насыщен (число неизвестных коэффициентов равно числу уравнений), несложными преобразованиями можно получить следующие расчетные уравнения:

$$\beta_1 = \bar{y}_1, \beta_2 = \bar{y}_2, \beta_3 = \bar{y}_3 \text{ или } \beta_i = \bar{y}_i; \tag{9.10}$$

$$\beta_{ij} = 4\bar{y}_{ij} - 2\bar{y}_i - 2\bar{y}_j, \text{ например, } \beta_{12} = 4\bar{y}_{12} - 2\bar{y}_1 - 2\bar{y}_2. \tag{9.11}$$

Проверка адекватности уравнения. Учитывая, что план эксперимента насыщенный, проверка адекватности по критерию Фишера невозможна. Для проверки адекватности необходимо выбрать несколько дополнительных точек плана, провести в них эксперимент и изучить разность между экспериментальным значением и полученным по уравнению. Эти точки выбирают либо в интересующей исследователя области, либо в точках, которые можно использовать для построения полинома более высокого порядка. Для получения дисперсии адекватности можно применять уравнение остаточной суммы

$$S_{\text{ост}} = \sum_{u=1}^g (y_{\text{э}u} - \hat{y}_u)^2; f_{\text{ад}} = g - 1, \quad (9.12)$$

где $y_{\text{э}u}$ — экспериментальные значения выходной переменной в дополнительных проверочных точках; \hat{y}_u — значения выходной переменной для условий X , проверочных точек, полученных по уравнению; g — число проверочных точек; $f_{\text{ад}}$ — дисперсия адекватности.

Если $g > 2$, то адекватность можно проверять по критерию Фишера, а ошибку опыта s_0^2 при равном числе параллельных опытов m рассчитать по формулам

$$s_0^2 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N s_u^2 = \frac{1}{N(m-1)} \sum_{u=1}^N \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \bar{y}_u)^2$$

для числа степеней свободы

$$f_0 = N(m-1).$$

(условие однородности дисперсий также необходимо проверять).

Если адекватность уравнения оценивается по одной проверочной точке, то удобнее пользоваться уравнениями, приведенными ниже. Для оценки используется t -критерий:

$$t_p = \frac{\Delta y \sqrt{m}}{s_0 \sqrt{1 + \xi}}, \quad (9.13)$$

где m — число параллельных опытов в каждой точке симплекса; разность Δy (между экспериментальным и теоретическим выходом)

$$\Delta y = (y_{\text{э}} - \hat{y}_{\text{т}}); \quad (9.14)$$

$s_0 = \sqrt{s_0^2}$ — среднеквадратичное отклонение опытных данных; ξ — величина, связанная с коэффициентами уравнения

$$\xi = \sum_{i=1}^n a_i^2 + \sum_{i < j} a_{ij}, \quad (9.15)$$

причем

$$a_i = x_i(2x_i - 1); a_{ij} = 4x_i x_j.$$

Ошибка опыта s_0^2 определяется также по формулам

$$s_0^2 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N s_u^2 = \frac{1}{N(m-1)} \sum_{u=1}^N \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \bar{y}_u)^2$$

для числа степеней свободы

$$f_0 = N(m-1).$$

Проверка адекватности производится по неравенству

$$t_p < t_{\tau}(l, f_0, q = 0,05) \quad (9.16)$$

для заданного уровня значимости; l — число коэффициентов уравнения регрессии; f_0 — число степеней свободы при определении ошибки опыта.

Примечание. В некоторых исследованиях, даже если число проверочных точек $g \gg 2$, оценку адекватности уравнения регрессии проводят в каждой точке по формулам (9.13) — (9.16).

Принятие решений. Если условие (9.16) не выполняется, то уравнение регрессии признается неадекватным и его порядок повышается. Если правило композиционности выполняется, то в план включают проверочную точку и переходят к расчетам коэффициентов уравнения более высокого порядка.

Если условие (9.16) выполняется, то обычно строят изолинии (линии равного выхода) соответствующего свойства непосредственно на симплексе. Графическое изображение зависимости свойства — состав позволяет решать задачи интерполяции и оптимизации (конечно, если число компонентов в смеси не превышает четырех).

Изучением свойств систем, зависящих от соотношения компонентов, и связанных между собой условием (9.1), в настоящее время занимаются химики, металлурги, строители и другие исследователи. Цель таких исследований — построение зависимостей свойств от состава и режима обработки (температуры, давления и др.), определение оптимального состава и режима по одному или нескольким показателям эффективности системы. Ниже приведены несколько примеров исследования сложных систем и их свойств.

Рассмотрим пример применения настоящего алгоритма при исследовании трехкомпонентной лицевой пленки в производстве синтетических материалов.

Полимерная смесь представляет собой систему из пигмента (x_1 , мас. %), полиуретана (x_2 , мас. %) и растворителя (x_3 , мас. %). После приготовления смеси нужного состава и окончания процесса полимеризации изготавливались образцы стандартных размеров, которые подвергались испытаниям. Показателями эффективности образцов являлись прочность ($y^{(1)}$, кг/см²), относительное удлинение ($y^{(2)}$, %), остаточное удлинение ($y^{(3)}$, %), паропроницаемость ($y^{(4)}$, %), светоотражение или интенсивность окрашивания ($y^{(6)}$, %).

Для построения моделей вида (9.3) по всем пяти показателям использовался симплекс-решетчатый план второго порядка, содержащий 6 опытов и 1 проверочную точку (табл. 9.2.). Проверочная точка выбиралась так, чтобы в случае неадекватности модели второго порядка ее можно было использовать при построении модели более высокого порядка. Число параллельных опытов равнялось двум.

Таблица 9.2.

План и результаты эксперимента

Номер опыта	План			Выходная переменная									
	x_1	x_2	x_3	$y_u^{(1)}$		$y_u^{(2)}$		$y_u^{(3)}$		$y_u^{(4)}$		$y_u^{(5)}$	
1	1	0	0	47,2	48,5	380	420	16	18	8,13	8,29	14,2	13,8
2	0	1	0	46,9	45,4	540	560	28	28	5,92	5,61	26,9	32,1
3	0	0	1	48,5	46,6	400	420	20	20	7,81	7,98	17,5	20,2
4	0,5	0,5	0	62,8	64,1	300	320	14	16	6,65	6,81	26,8	27,6
5	0,5	0	0,5	46,4	45,9	240	220	22	22	8,41	8,23	34,6	32,6
6	0	0,5	0,5	64,4	62,8	380	400	20	18	7,35	7,18	25,7	23,8
7	0,33	0,33	0,33	63,8	63,5	260	280	16	18	6,69	6,23	21,5	23,8

Коэффициенты моделей определялись по вышеприведенному алгоритму.

Так, для переменной «прочность» математическая модель имеет вид

$$\hat{y}^{(1)} = 47,85x_1 + 46,15x_2 + 47,55x_3 + 65,80x_1x_2 - 6,20x_1x_3 + 67,00x_2x_3.$$

Аналогично для других выходных переменных

$$\hat{y}^{(2)} = 400x_1 + 550x_2 + 410x_3 - 660x_1x_2 - 700x_1x_3 - 360x_2x_3;$$

$$\hat{y}^{(3)} = 17x_1 + 28x_2 + 20x_3 - 30x_1x_2 + 14x_1x_3 - 20x_2x_3;$$

$$\hat{y}^{(4)} = 8,21x_1 + 5,77x_2 + 7,89x_3 - 1,03x_1x_2 + 1,07x_1x_3 + 1,74x_2x_3;$$

$$\hat{y}^{(5)} = 14,0x_1 + 29,5x_2 + 18,8x_3 + 21,8x_1x_2 + 68,7x_1x_3 + 5,9x_2x_3.$$

Адекватность моделей оценивалась по t -критерию (формула (9.13)) в контрольной точке (опыт 7). Прежде всего рассчитывалась ошибка опыта по формулам

$$s_0^2 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N s_u^2 = \frac{1}{N(m-1)} \sum_{u=1}^N \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \bar{y}_u)^2$$

для числа степеней свободы

$$f_0 = N(m-1).$$

Она оказалась равной $s_0^2 = 1,19$ или $s_0 = 1,08$. Тогда, учитывая, что $\xi = 0,628$, находилось по формуле (9.15) в точке $\{0,33; 0,33; 0,33\}$

$$\hat{y} = 59,36 \text{ или } \Delta y = 63,65 - 59,36 = 4,19,$$

получим

$$t_p = \frac{4,19\sqrt{2}}{1,08\sqrt{1} + 0,628} \approx 3,38.$$

Табличное значение t -критерия ($f=7$ ($2-1$) и $q = 0,05$) равно 2,36, т. е. $t_p > t_T$. Таким образом, модель оказалась неадекватной. Остальные модели (кроме $y^{(3)}$) также оказались неадекватными.

С целью получения адекватных моделей исследователи перешли к неполному кубическому полиному (9.4) (использовался опыт 7). Для расчета недостающего коэффициента β_{123} использовалась формула

$$\beta_{ijk} = 27y_{ijk} - 12(\bar{y}_{ij} + \bar{y}_{ik} + \bar{y}_{jk}) + 3(\bar{y}_i + \bar{y}_j + \bar{y}_k).$$

$$\beta_{123} = 27 \frac{63,80 + 63,50}{2} - 12(63,45 + 46,15 + 63,60) + 3(47,85 + 46,15 + 47,55) = 64,80.$$

Тогда уравнение принимает вид

$$y^{(1)} = 47,85x_1 + 46,15x_2 + 47,55x_3 + 65,80x_1x_2 + 67,00x_2x_3 - 6,20x_1x_3 + 64,80x_1x_2x_3.$$

Адекватность уравнения проверялась по контрольным опытам 8 $\{0,33; 0,67; 0,00\}$ и 9 $\{0,00; 0,67; 0,33\}$. Модель оказалась адекватной $t_{1p} = 1,93$ и $t_{2p} = 1,89$ (против $t_T = 2,31$).

Адекватными оказались также модели с неполным кубическим полиномом по остальным выходным переменным:

$$y^{(2)} = 400x_1 + 550x_2 + 410x_3 - 660x_1x_2 - 700x_1x_3 - 360x_2x_3 + 210x_1x_2x_3;$$

$$y^{(4)} = 8,21x_1 + 5,77x_2 + 7,89x_3 - 1,03x_1x_2 + 1,07x_1x_3 + 1,74x_2x_3 - 27,7x_1x_2x_3;$$

$$y^{(5)} = 14,0x_1 + 29,5x_2 + 18,8x_3 + 21,8x_1x_2 + 68,7x_1x_3 + 5,9x_2x_3 - 238x_1x_2x_3.$$

Дальнейший анализ проводился с целью определения оптимального состава по каждой модели и нахождения некоторой компромиссной области свойств.

Алгоритм симплекс-решетчатых планов неполного третьего порядка для трехкомпонентной смеси.

Исходные данные. Имеется трехкомпонентная смесь. Необходимо получить зависимость некоторого свойства от состава смеси в виде (9.4) и проверить ее адекватность.

План эксперимента для рассматриваемого случая представлен в табл. 9.3 (см. рис. 9.1, б). Как и ранее, предполагается, что параллельные опыты проводятся в каждой точке симплексной решетки.

Таблица 9.3.

Номер опыта	План			Выходная переменная
	x_1	x_2	x_3	
1	1	0	0	y_1
2	0	1	0	y_2
3	0	0	1	y_3
4	0,5	0,5	0	y_{12}
5	0,5	0	0,5	y_{13}
6	0	0,5	0,5	y_{23}
7	0,333	0,333	0,333	y_{123}

Расчет коэффициентов уравнения для модели (9.4) удобно проводить

$\beta_1, \beta_2, \beta_3$ – по формуле (9.10);

$\beta_{12}, \beta_{13}, \beta_{23}$ – по формуле (9.11);

$$\beta_{ijk} = 27\bar{y}_{ijk} - 12(\bar{y}_{ij} + \bar{y}_{ik} + \bar{y}_{jk}) + 3(\bar{y}_i + \bar{y}_j + \bar{y}_k). \quad (9.17)$$

Оценка адекватности уравнения регрессии осуществляется по формулам (9.13), (9.15), (9.16), а коэффициент ξ определяется по формуле

$$\xi = \sum_{i=1}^n b_i^2 + \sum_{i<j} b_{ij} + \sum_{i<j<k} b_{ijk}. \quad (9.18)$$

где

$$b_i = \frac{1}{2} x_i(6x_i^2 - 2x_i + 1) - 3 \sum_{j=1}^n x_j^2;$$

$$b_{ij} = 4x_i x_j (3x_i - 3x_j - 2); \quad b_{ijk} = 27x_i x_j x_k.$$

При наличии параллельных опытов в каждой точке симплексной решетки ошибка опыта s_0^2 определяется по формулам

$$s_0^2 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N s_u^2 = \frac{1}{N(m-1)} \sum_{u=1}^N \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \bar{y}_u)^2$$

для числа степеней свободы

$$f_0 = N(m-1).$$

Принятие решений не отличается от предыдущего случая.

Пример исследование свойств смеси поверхностно-активных веществ при получении моющих средств. Исследовалась композиция, включающая три поверхностно-активных вещества (ПАВ), с целью получения моющего средства для автоматических стиральных машин. Факторами являлись содержание ПАВ— X_1, X_2 и X_3 , выходной переменной — моющая способность смеси y (в условных единицах). План эксперимента для получения модели второго порядка с четырьмя проверочными точками приведен в табл. 9.4.

Таблица 9.4.

Номер опыта	План			Выходная переменная			Расчеты	
	x_1	x_2	x_3	y	y_1	y_2	\hat{y}	s_u^2
1	1	0	0	y_1	24,0	24,4	24,20	0,080
2	0	1	0	y_2	26,3	25,0	25,65	0,245
3	0	0	1	y_3	17,8	17,3	17,55	0,125
4	0,5	0,5	0	y_{12}	17,4	16,99	17,20	0,080
5	0,5	0	0,5	y_{13}	19,07	18,02	18,55	0,540
6	0	0,5	0,5	y_{23}	19,47	18,06	18,77	0,980
7	0,5	0,25	0,25	y_{1123}	14,7	18,46	16,58	7,069
8	0,25	0,5	0,25	y_{1223}	15,56	17,9	16,73	2,738
9	0,25	0,25	0,5	y_{1233}	17,5	17,1	17,30	0,080
10	0,33	0,33	0,33	y_{123}	15,3	18,3	16,80	4,500

Проводилось по два параллельных опыта в каждой точке плана. Однородность дисперсий проверялась по критерию Кохрена. Получено: $G_p = 0,420$; $G_T = 0,602$ ($f_1=2-1=1, f_2=10, q=0,05$), т. е. дисперсии однородны. Тогда ошибка опыта $s_0^2=1,7$ получалась усреднением всех s_u^2 и число степеней свободы $f_0 = 10(2-1) = 10$.

Табличное значение критерия Стьюдента для $q = 0,05$ $t_{\tau} = 2,23$. Значение ξ может быть получено по формуле (9.15) или снято с контурных карт

(изолиний) для данного примера ($\xi = 0,6$). Находим расчетное \hat{y}_{1123} :

$$\hat{y}_{1123} = 24,2 \cdot 0,5 + 25,65 \cdot 0,25 + 17,55 \cdot 0,25 - 30,9 \cdot 0,5 \cdot 0,25 - \\ - 9,3 \cdot 0,5 \cdot 0,25 - 11,32 \cdot 0,25 \cdot 0,25 = 17,17.$$

Проверяем неадекватность модели по формуле (9.13) для опыта 7

$$t_{1123} = \frac{(\hat{y}_{1123} - y_{1123})\sqrt{2}}{1,771 + 0,6} \approx 0,506 < t_{\tau},$$

т. е. модель адекватна в проверяемой точке плана. Аналогичные результаты получаем и в других проверочных точках 8, 9, 10:

$$t_{1223} = 0,578; \quad t_{1233} = 0,489; \quad t_{123} = 0,057.$$

Поскольку во всех проверочных точках $t_p < t_{\tau}$, то гипотеза об адекватности модели принимается.

Полученную модель можно представить набором кривых равного выхода на плоскости правильного симплекса (рис. 9.2). В центральной части диаграммы моющее действие смеси минимально.

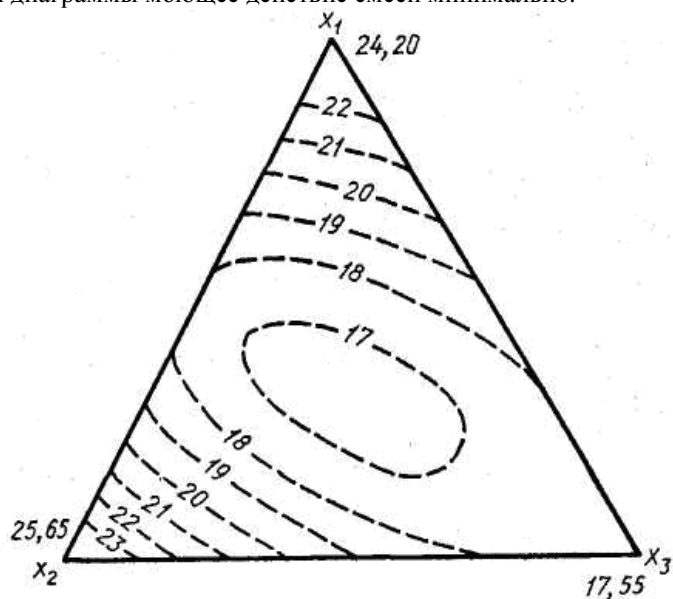


Рис. 9.2. Кривые равного выхода на плоскости правильного симплекса.

Пример оптимизации состава смеси по диаграммам состав — свойство. Приведенные выше кривые равного выхода позволяют решить и более сложную задачу оптимизации, когда выходных переменных (свойств) смеси несколько. Рассмотрим пример исследования моющей смеси, включающей три фактора — X_1 (сульфанол), X_2 (ситонол ДС-10) и X_3 (мыло СЖК С₁₇₋₂₀). Исследовались свойства: моющая способность — (y_1) и пенообразование (y_2). Цель исследования — получить максимальное моющее действие при значении пенообразования, не превышающем 0,3. В результате постановки эксперимента и обработки его результатов по приведенным выше алгоритмам получены адекватные уравнения пенообразования:

$$\hat{y}_2 = 0,843x_1 + 0,751x_2 + 0,40x_3 - 1,964x_1x_2 - 0,666x_1x_3 - \\ - 1,522x_2x_3 - 0,684x_1x_2x_3$$

и моющей способности

$$\hat{y}_1 = 23,1x_1 + 25,5x_2 + 7,6x_3 - 7,8x_1x_2 - 31,8x_1x_3 + 16,0x_2x_3 + \\ + 268,0x_1^2x_2x_3 - 248,8x_1x_2^2x_3 + 336,8x_1x_2x_3^2.$$

Кривые равного выхода, построенные по этим уравнениям, представлены на рис. 9.3. Если «двигаться» по кривой пенообразующей способности со значением 0,3, можно пересечь кривые моющей способности со значениями от 10 до 22, т. е. в простейшем случае оптимизацию можно осуществить графически.

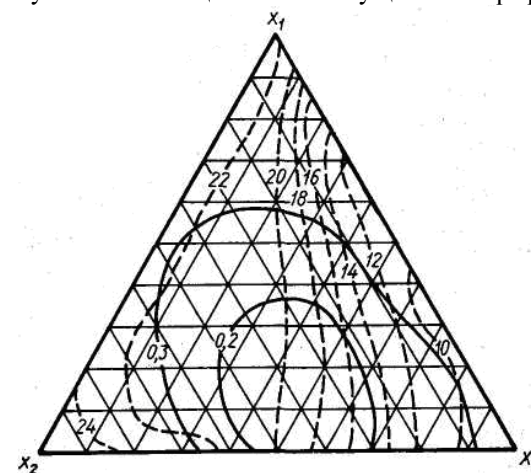


Рис. 9.3. Кривые равного выхода на плоскости правильного симплекса

С учетом технологических ограничений на содержание мыла и синтанола оптимальной выбрана область, обеспечивающая достаточно сильное моющее действие смеси при низком пенообразовании в следующем диапазоне изменений состава: сульфанол — 6—9, синтанол ДС-10 3—4, мыло 3—4,5%.

Алгоритм симплекс-решетчатых планов третьего порядка для трехкомпонентной смеси.

Исходные данные. Имеется трехкомпонентная смесь. Необходимо получить зависимость некоторого свойства от состава смеси в виде (9.5) и проверить ее адекватность.

План эксперимента для этого случая представлен в табл. 9.6 (см. рис. 9.1, в). Предполагается, что параллельные опыты проводятся в каждой точке симплексной решетки.

Таблица 9.6.

План эксперимента

Номер опыта	План			Выходная переменная
	x_1	x_2	x_3	
1	1	0	0	y_1
2	0	1	0	y_2
3	0	0	1	y_3
4	2/3	1/3	0	y_{112}
5	1/3	2/3	0	y_{122}
6	0	2/3	1/3	y_{223}
7	0	1/3	2/3	y_{233}
8	2/3	0	1/3	y_{113}
9	1/3	0	2/3	y_{133}
10	1/3	1/3	1/3	y_{123}

Коэффициенты регрессии $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ рассчитывают по формуле (9.10).

Коэффициенты β_{ij} рассчитываются по формулам

$$\beta_{12} = \frac{9}{4} (y_{112} + y_{122} - y_1 - y_2);$$

$$\beta_{13} = \frac{9}{4} (y_{113} + y_{133} - y_1 - y_3);$$

$$\beta_{23} = \frac{9}{4} (y_{223} + y_{233} - y_2 - y_3),$$

или в общем виде

$$\beta_{ij} = \frac{9}{4} (y_{iij} + y_{ijj} - y_i - y_j). \tag{9.19}$$

Коэффициенты γ_{ij} рассчитывают по формулам

$$\gamma_{12} = \frac{9}{4} (3y_{112} - 3y_{122} - y_1 + y_2);$$

$$\gamma_{13} = \frac{9}{4} (3y_{113} - 3y_{133} - y_1 + y_3);$$

$$\gamma_{23} = \frac{9}{4} (3y_{223} - 3y_{233} - y_2 + y_3),$$

или в общем виде

$$\gamma_{ij} = \frac{9}{4} (3y_{iij} - 3y_{ijj} - y_i + y_j). \tag{9.20}$$

Коэффициенты β_{ijk} рассчитываются по формулам

$$\beta_{123} = 27y_{123} - \frac{27}{4} (y_{112} + y_{122} + y_{113} +$$

$$+ y_{133} + y_{223} + y_{233}) + \frac{9}{2} (y_1 + y_2 + y_3),$$

или в общем виде

$$\beta_{ijk} = 27y_{ijk} - \frac{27}{4} (y_{iik} + y_{ijj} + y_{iik} +$$

$$+ y_{ikk} + y_{jjk} + y_{jkk}) + \frac{9}{2} (y_i + y_j + y_k). \tag{9.21}$$

Оценка адекватности уравнения регрессии осуществляется по формулам (9.13), (9.14), (9.16), а коэффициент ξ определяется по формуле

$$\xi = \sum_{i=1}^n c_i^2 + \sum_{i < j}^n c_{ij}^2 + \sum_{i < j}^n c_{iij}^2 + \sum_{i < j}^n c_{ijj}^2 + \sum_{i < j < k}^n c_{ijk}^2, \tag{9.22}$$

где

$$c_i = \frac{1}{2} x_i (3x_i - 1) (3x_i - 2);$$

$$c_{iij} = \frac{9}{2} x_i x_j (3x_i - 1);$$

$$c_{ijj} = \frac{9}{2} x_i x_j (3x_j - 1);$$

$$c_{ijk} = 27x_i x_j x_k.$$

Ошибка опыта s_0^2 определяется также по формулам

$$s_0^2 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N s_u^2 = \frac{1}{N(m-1)} \sum_{u=1}^N \sum_{k=1}^m (y_{uk} - \bar{y}_u)^2$$

для числа степеней свободы

$$f_0 = N(m-1).$$

Принятие решений не отличается от предыдущих случаев.

Примечание. Симплексную решетку при переходе к полиномам более высоких порядков можно достраивать точками из «последующих» планов.

Пример исследование свойств трехкомпонентной смеси бензинов. При исследовании свойств (октанового числа) трехкомпонентной смеси бензинов использовалось симплекс-решетчатое планирование. На первом этапе для получения математической модели использовался план, позволяющий получить полином второго порядка (9.3) (табл. 9.7, первые шесть опытов).

Таблица 9.7.

План и результаты эксперимента

Номер опыта	План			Выходная переменная (октановое число)		
	Факторы (состав смеси в долях)			y_{u_1}	y_{u_2}	\bar{y}_u
	x_1	x_2	x_3			
1	1,0	0	0	100,8	100,9	100,85
2	0	1,0	0	85,2	85,6	85,40
3	0	0	1,0	86,0	85,0	85,50
4	0,5	0,5	0	88,8	89,3	89,05
5	0,5	0	0,5	90,3	90,7	90,50
6	0	0,5	0,5	85,5	85,4	85,45
7	0,33	0,33	0,33	88,3	88,8	88,55
8	0,150	0,595	0,255	86,6	86,8	86,70
9	0,300	0,490	210	87,6	88,1	87,85

В каждой точке плана были реализованы по два параллельных опыта.

Средние значения октановых чисел приведены в последнем столбце таблицы. По формулам (9.10) и (9.11) получены коэффициенты модели:

$$\beta_1 = 100,85; \quad \beta_2 = 85,40; \quad \beta_3 = 85,50;$$

$$\beta_{12} = -16,30; \quad \beta_{13} = -10,70; \quad \beta_{23} \approx 0.$$

Таким образом, модель выглядит так:

$$\hat{y} = 100,85x_1 + 85,40x_2 + 85,50x_3 - 16,30x_1x_2 - 10,70x_1x_3.$$

Для проверки адекватности полученной математической модели реализовано по два параллельных опыта в трех проверочных точках (опыты 7, 8, 9), одна из которых (точка 7) расположена в центре симплекса. В случае неадекватности модели эта точка может использоваться для построения неполной кубической модели. Подстановкой

условий опытов 7, 8, 9 в полученную модель получим $\hat{y}_7, \hat{y}_8, \hat{y}_9$ и определим по формуле (9.14) разности

$$\Delta 7 = 88,55 - 87,58 = 0,97;$$

$$\Delta 8 = 86,70 - 85,88 = 0,82;$$

$$\Delta 9 = 87,85 - 86,99 = 0,86.$$

Согласно (9.13), с учетом $m=2, s_0=0,34$ и $\xi=0,628$ (по формуле (9.15)), вычислим значение t -критерия

$$t_p = \frac{0,97\sqrt{2}}{0,34\sqrt{1+0,628}} = 3,16.$$

Расчетное значение t -критерия превосходит табличное $t_7=2,26$ ($f_0=9, q=0,05$), т. е. модель второго порядка неадекватна.

Используя значение y_{123} , в центре симплекса рассчитаем по (9.17) $\beta_{123} = 26,10$.

Получим модель вида

$$\hat{y} = 100,85x_1 + 85,40x_2 + 85,50x_3 - 16,30x_1x_2 - 10,70x_1x_3 + 26,10x_1x_2x_3.$$

При проверке адекватности полученной неполной кубической модели использовались данные проверочных опытов в точках 8, 9. Проверка показала адекватность этой модели. Таким образом, для оптимизации процесса можно использовать неполный кубический полином.

9.3. Методы идентификации при получении математических моделей процессов

Задача идентификации математического описания является одной из центральных задач исследования объектов и процессов. Это вызвано необходимостью «привязки» общей математической модели, которая в большинстве случаев существует, к реальному объекту. «Привязка»

осуществляется расчетом параметров математической модели по результатам эксперимента на реальном объекте.

Если объект характеризуется n -мерным вектором состояния (выходные данные) $Y(t)$, m -мерным вектором управления (входные данные) $U(t)$, то математическое описание процесса можно представить в канонической или нормальной форме:

$$\dot{Y} = \frac{dY}{dt} = f(Y(t), U(t), A(t), \varepsilon(t), t), \quad (9.23)$$

где $A(t)$ — l -мерный вектор неизвестных параметров системы, состоящей из коэффициентов системы дифференциальных уравнений; $\varepsilon(t)$ — помехи (ошибки) объекта и измерительных приборов; t — время.

Решение задачи идентификации предполагает по данным наблюдения векторов $Y(t)$, $U(t)$ и, возможно, при наличии некоторых характеристик помехи $\varepsilon(t)$, определение неизвестных параметров и оценку внутренних, не доступных для измерения выходных переменных объекта (например, концентраций промежуточных продуктов).

Задача идентификации принадлежит к так называемым некорректно поставленным задачам, и ее решение возможно только приближенно.

Классификация методов идентификации. По мнению В. В. Кафарова и И. Н. Дорохова, методы идентификации удобно разделить на две большие группы по типу математического описания той системы, к которой они применяются. К *первой* группе относятся все методы идентификации, применяемые только к линейным системам, ко *второй* — методы, применяемые как к линейным, так и к существенно нелинейным системам.

В первую группу можно включить: нахождение весовых функций непосредственным решением интегрального уравнения свертки; определение параметров дифференциальных уравнений и передаточных функций по экспериментальным функциям отклика на входные возмущения стандартного типа (импульсное, ступенчатое, синусоидальное и др.).

Ко второй группе относят: метод адаптирующейся модели; методы статистической теории нелинейных систем; методы теории оптимальной фильтрации Калмана; методы байесовской идентификации; методы стохастической аппроксимации.

Для процессов характерны большие степени нелинейности, распределенность параметров, нестационарность переменных (дрейф основных показателей процесса). В этих условиях для идентификации объектов исследователи чаще всего применяют методы второй группы.

Особенно эффективны методы статистической идентификации

объектов на основе теории случайных процессов и решения задачи поиска импульсной функции по уравнению Винера—Хопфа. Собственно в теории управления применение этих методов и составляет суть методов идентификации.

В связи с этим представляется целесообразным рассмотреть основные алгоритмы статистической идентификации: оценки характеристик случайных процессов, сглаживания случайных процессов, решения интегрального уравнения Винера—Хопфа, расчета моментов.

9.3.1. Алгоритм оценки стационарности и эргодичности.

Эта оценка осуществляется с целью проверки исходных предпосылок теории случайных функций. Если случайные функции удовлетворяют требованиям стационарности и эргодичности, то в последующих расчетах можно пользоваться более простым математическим аппаратом (см. приложение 2). Известно, что реальные объекты не могут полностью удовлетворять требованиям стационарности и эргодичности, поэтому задачу оценки необходимо формулировать так: в какой мере свойства объекта отвечают требованиям стационарности и эргодичности?

Исходные данные. В результате наблюдения за объектом получены реализации входных $U(t)$ и выходных $Y(t)$ переменных во времени (случайные функции). Предполагается, что наблюдение возможно (объект оснащен приборами) и получена достаточно длительная реализация.

Определение. Случайные функции обладают свойством стационарности, если все их статистические характеристики (оценки математического ожидания $M[u(t)]$ и $M[y(t)]$, оценки дисперсий $D[u(t)]$ и $D[y(t)]$) постоянны во времени. Если случайная функция обладает свойством эргодичности, то статистические характеристики можно рассчитывать по одной достаточно длинной реализации (а не по множеству реализаций).

Допущение 1. Если исследуемые случайные процессы стационарны, то статистические характеристики, вычисляемые на коротких интервалах (частях реализации), не будут существенно меняться от интервала к интервалу.

Допущение 2. Для большинства технических приложений достаточно проверить слабую стационарность и эргодичность, т. е. тот факт, что средние значения случайных функций и квадратов случайных функций не зависят от времени.

Расчеты. 1. Реализация, например $y(t)$, длиной T (причем $T=N\Delta t$, где N — число участков разбиения реализации; Δt — интервал разбиения)

делится на n частей так, чтобы каждую из них можно было считать независимой (рис. 9.4).

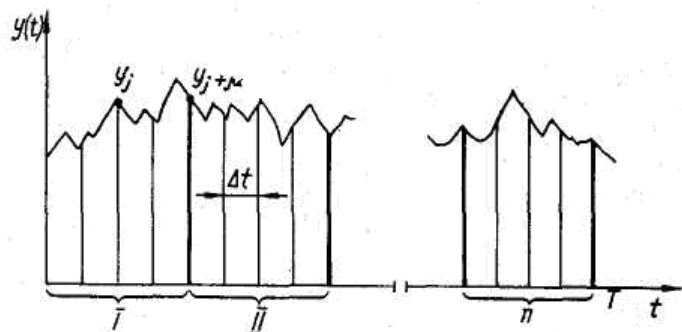


Рис. 9.4. Реализация случайной функции.

2. Вычисляются средние значения по i -ым частям реализации $M[y_i(N)]$ и средние значения квадрата $M[y_i^2(N)]$ ($i=1,2,\dots,n$):

$$M[y_i(N)] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N y_{iu}; \quad (9.24)$$

$$M[y_i^2(N)] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N y_{iu}^2. \quad (9.25)$$

3. Вычисляются средние значения для всей реализации:

$$M[y(N)] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N y_u; \quad (9.26)$$

$$M[y^2(N)] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N y_u^2. \quad (9.27)$$

4. Для проверки гипотезы о стационарности средние значения сравниваются попарно (для двух любых частей реализации):

$$|M[y_i(N)] - M[y_j(N)]| < \varepsilon; \quad (9.28)$$

$$|M[y_i^2(N)] - M[y_j^2(N)]| < \varepsilon', \quad (9.29)$$

где $i, j = 1, 2, \dots, n; i \neq j; \varepsilon$ — заданное число или один из непараметрических критериев (критерий серий или тренда).

5. Для проверки гипотезы об эргодичности сравниваются средние значения для всей реализации и средние значения по всем частям реализации:

$$|M[y(N)] - \overline{M[y(N)]}| < \varepsilon'_1; \quad (9.30)$$

$$|M[y^2(N)] - \overline{M[y^2(N)]}| < \varepsilon'_2, \quad (9.31)$$

где средние значения по всем участкам рассчитываются по формулам

$$\overline{M[y(N)]} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n M[y_i(N)]; \quad (9.32)$$

$$\overline{M[y^2(N)]} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n M[y_i^2(N)]. \quad (9.33)$$

Принятие решений. Если условия (9.28) — (9.33) выполняются, то случайные функции (реализации переменных по времени) признаются стационарными и эргодичными. Тогда все дальнейшие расчеты ведутся с использованием математического аппарата, рассмотренного ниже. В противном случае проводится фильтрация исходных реализаций.

9.3.2. Алгоритм текущего центрирования случайной функции.

Текущее центрирование применяется в том случае, когда исследователь выясняет, что в исследуемом случайном процессе имеются разночастотные колебания. Это могут быть, например, низкочастотные (полезный сигнал) и высокочастотные колебания (шум). Последние устраняют с помощью фильтров. Рассмотрим один из фильтров — *текущее среднее*.

Исходные данные. Имеются реализации случайных процессов. Выяснено, что они слабо-нестационарные (не выполняется условие (9.28)). Предлагается «отфильтровать» высокочастотные колебания, распределенные по всей длине реализации.

Расчет ординат по алгоритму текущего среднее производится так:

$$\hat{u}(t) = u(t) - \frac{1}{2\tau} \int_{t-\tau}^{t+\tau} u(q) dq, \quad (9.34)$$

где $\hat{u}(t)$ — центрированная и сглаженная случайная функция; $u(t)$ — исходная реализация; τ — интервал текущего усреднения ($\tau = \text{const}$). Обычно используют дискретный алгоритм (9.34)

$$\hat{u}_j(N) = u_j(N) - \overline{u}_j(N), \quad (9.35)$$

где $\hat{u}_j(N)$ — ординаты центрированного случайного процесса; $j=1, 2, \dots, N$ — номер ординаты случайного процесса; $j = (l+1) \div (N-l)$; $(2l+1)$ — интервал усреднения. Текущее среднее в интервале $[(j-l) \div (j+l)]$

$$\bar{u}_j(N) = \frac{1}{2l+1} \sum_{q=j-l}^{q=j+l} x_q. \quad (9.36)$$

Число ординат центрированного процесса

$$\dot{N} = N - 2l, \quad (9.37)$$

причем, очевидно, N должно быть значительно больше $2l$.

Примечание. Если гипотеза о стационарности случайных процессов (9.28) принимается, то центрирование проводится обычным вычитанием из ординат случайной функции по всей реализации:

$$\dot{u}(N) = u(N) - M[u(N)],$$

или

$$\dot{y}(N) = y(N) - M[y(N)], \quad (9.38)$$

где $M[y(N)]$ или $M[u(N)]$ рассчитывают по формуле (9.26).

9.3.3. Алгоритм расчета корреляционных функций.

Корреляционные функции оценивают связь между ординатами одной случайной функции (автокорреляционная функция $R_{uu}(\tau)$) или ординатами различных случайных функций (взаимокорреляционная функция $R_{yu}(\tau)$). Физически величина корреляционной функции для некоторого момента t_1 показывает, насколько значение случайного процесса в момент времени t_2 связано со значением, отстоящим от последнего на время $\tau = (t_2 - t_1)$:

$$R_{uu}(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{+T} u(t)u(t+\tau)dt, \quad (9.39)$$

$$R_{yu}(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{+T} u(t)y(t+\tau)dt. \quad (9.40)$$

Исходные данные. Имеются конечные реализации случайных процессов $u(t)$ и $y(t)$ объекта исследования. Реализации стационарны,

эргодичны и уже подвергнуты центрированию — $\dot{u}(t)$ и $\dot{y}(t)$.

Требуется рассчитать корреляционные функции для дискретных

$$\dot{u}(N) \text{ и } \dot{y}(N).$$

Расчет корреляционных функций производится по формулам автокорреляционной и взаимокорреляционной функции соответственно:

$$R_{uu}(\mu) = \frac{1}{N-\mu} \sum_{j=1}^{N-\mu} \dot{u}_j \dot{u}_{j+\mu}, \quad (9.41)$$

$$R_{yu}(\mu) = \frac{1}{N-\mu} \sum_{j=1}^{N-\mu} \dot{y}_j \dot{u}_{j+\mu}, \quad (9.42)$$

где μ — дискретный аргумент корреляционной функции ($\mu=0,1,2,\dots,p$); j — номер ординаты случайной функции ($j=1,2,\dots,N$).

Примечание. Вычисления по формулам производят до значения аргумента $\mu_{max} = (0,05 \div 0,10)$ (как для отрицательных, так и для положительных значений μ).

9.3.4. Алгоритм расчета функции веса по корреляционным функциям.

Определение функции веса (или импульсной функции) основано на ее связи с взаимокорреляционной функцией входной и выходной переменных и автокорреляционной функцией входной переменной (уравнение Винера—Хопфа):

$$R_{yu}(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} R_{uu}(t-\tau)k(t)dt. \quad (9.43)$$

Основная задача идентификации $k(t)$ —решение уравнения (9.43).

Исходные данные. По реализациям входных и выходных переменных получены автокорреляционная и взаимокорреляционная функции. Необходимо решить уравнение (9.43) и определить функцию веса $k(t)$.

Уравнение Винера—Хопфа можно решить несколькими методами. Рассмотрим метод сведения уравнения (9.43) к системе линейных алгебраических уравнений. Для этого представим его в виде

$$\frac{1}{T} R_{yu}(\tau) = \sum_{N_1=0}^N k(N_1 T) R_{uu}(\tau - N_1 T), \quad (9.44)$$

где N_1 — число участков разбиения реализаций; T — интервал времени участка реализаций; t — время (примем равным $N_1 T$).

Обозначив $k_N = k(N T)$ (N — номер, участка) и учитывая, что $k_0 = 0$, можно для каждого $\tau = 0, T, 2T, \dots, NT$ записать систему N линейных уравнений с N неизвестными:

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} R_{uy}(T) &= k_1 R_{uu}(0) + k_2 R_{uu}(T) + \dots + k_N R_{uu}[(N-1)T]; \\ \frac{1}{T} R_{uy}(2T) &= k_1 R_{uu}(T) + k_2 R_{uu}(0) + \dots + k_N R_{uu}[(N-2)T]; \\ &\dots \\ \frac{1}{T} R_{uy}(NT) &= k_1 R_{uu}[(N-1)T] + k_2 R_{uu}[(N-2)T] + \dots \\ &\dots + k_N R_{uu}(0). \end{aligned} \tag{9.45}$$

В матричной форме это уравнение можно записать так:

$$\frac{1}{T} R_{uy} = R_{uu} K, \tag{9.46}$$

где R_{uu} — квадратичная матрица с диагональю в виде корреляционной функции от нуля:

$$R_{uu} = \begin{bmatrix} R_{uu}(0) & R_{uu}(T) & \dots & R_{uu}[(N-1)T] \\ R_{uu}(T) & R_{uu}(0) & \dots & R_{uu}[(N-2)T] \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ R_{uu}[(N-1)T] & R_{uu}[(N-2)T] & \dots & R_{uu}(0) \end{bmatrix} \tag{9.47}$$

K — вектор-столбец функции веса для принятой дискретности NT ($N = 1, 2, \dots, N_1$):

$$K = \begin{bmatrix} k_1 \\ k_2 \\ \vdots \\ k_N \end{bmatrix}; \tag{9.48}$$

R_{uy} — вектор-столбец:

$$R_{uy} = \frac{1}{T} \begin{bmatrix} R_{uy}(T) \\ R_{uy}(2T) \\ \dots \\ R_{uy}(NT) \end{bmatrix}. \tag{9.49}$$

Уравнение (9.46) можно решать различными методами, которые, как известно, определяются методами обращения матриц (метод Гаусса, метод окаймления, метод главного элемента и др.):

$$K = R_{uu}^{-1} R_{uy}. \tag{9.50}$$

Если матрица R_{uu} плохо обусловленная, то решение K будет неустойчиво к ошибкам в $R_{uu}(t)$ и $R_{uy}(t)$. В этом случае приходится прибегать к алгоритмам регуляризации, позволяющим избежать некорректности решаемой задачи.

9.3.5. Алгоритм расчета моментов по весовой функции.

Важнейшей и наиболее полной характеристикой гидродинамической обстановки в аппарате является функция распределения частиц потока по времени пребывания их в аппарате. Дифференциальная функция распределения может быть отождествлена с C —кривой, которая, как известно, представляет собой график изменения концентрации индикатора на выходе из аппарата в зависимости от времени при импульсном вводе индикатора во входной поток.

Эта функция распределения совпадает с весовой функцией гидродинамического объекта.

При обработке результатов наблюдений удобно производить операции не с самой функцией распределения, а с ее вероятностными характеристиками. Такими характеристиками являются начальные μ_s и центральные ξ_s моменты случайных функций:

$$\mu_s = \int_0^{\infty} t^s k(t) dt; \tag{9.51}$$

$$\xi_s = \int_0^{\infty} (t - \bar{t})^s k(t) dt, \tag{9.52}$$

$s = 0, 1, 2, \dots, n.$

Интегрируются уравнения (9.51) и (9.52) одним из методов численного интегрирования, например, методом Симпсона:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{\Delta}{3} (y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + \dots + 4y_{n-1} + y_n), \tag{9.53}$$

где Δ — шаг разбиения интервала $[a, b]$; y_i — ординаты функции.

Исходные данные. Имеется весовая функция объекта исследования $k(t)$. Необходимо рассчитать начальные моменты этой функции.

Решение. Вычисляется начальный момент нулевого порядка ($s=0$):

$$\mu_0 = \int_0^{\infty} k(t) dt. \tag{9.54}$$

Если исследуется гидродинамика объекта, μ_0 соответствует общему количеству введенного в поток индикатора.

Вычисляется среднее время пребывания потока в аппарате, как отношение начального момента первого порядка к μ_0

$$\bar{t} = \frac{\int_0^{\infty} tk(t) dt}{\int_0^{\infty} k(t) dt} \quad (9.55)$$

Обычно здесь вводится безразмерное время для j -ой ординаты

$$\theta_j = \frac{t_j}{\bar{t}}, \quad (9.56)$$

и безразмерная ордината функции

$$y(\theta_j) = \frac{k(t_j)}{\mu_0} \quad (9.57)$$

Тогда расчет момента s -го порядка определяется по формуле

$$\mu_s = \theta \int_0^{\infty} \theta^s y(\theta) d\theta, \quad (9.58)$$

а решается (9.58) с учетом (9.53).

Принятие решений. После расчета начальных моментов μ_0, \dots, μ_4 возможен расчет чисел Пекле, которые определяют тип модели гидродинамической системы (идеальное вытеснение, перемешивание и др.).

Дополнение. Параметром, характеризующим гидродинамику системы, может быть критерий Пекле

$$Pe = \frac{uL}{D_{п.д}}, \quad (9.59)$$

где u — средняя скорость потока; L — длина аппарата; $D_{п.д}$ — коэффициент продольной диффузии.

В литературе показана связь моментов весовой функции с параметром Pe в виде системы уравнений

$$\begin{cases} \mu_0 = 1; \\ \mu_1 = 1; \\ \mu_2 = 1 + \frac{2(Pe-1+e^{-Pe})}{Pe^2}; \\ \mu_3 = 1 + \frac{6[Pe(Pe+1)-4+3Pe e^{-Pe} + 4e^{-Pe}]}{Pe^3}; \\ \mu_4 = 1 + 12 \frac{[Pe^3+4Pe^2-28+(9Pe^2+30Pe+26)e^{-Pe}] + 24e^{-2Pe}}{Pe^4}. \end{cases} \quad (9.60)$$

Зная μ_0, \dots, μ_4 и решив систему (9.60), можно найти значение Pe .

9.4. Примеры применения методов идентификации

Методы идентификации требуют обязательного применения ЭВМ в силу трудоемкости расчетов как самих статистических характеристик (корреляционных функций), так и неизвестных параметров дифференциальных уравнений. В приведенных ниже примерах исходная числовая информация не приводится из-за громоздкости, цифровые результаты расчетов иллюстрируются рисунками.

9.4.1. Исследование гидродинамической структуры потоков в изотермическом абсорбере.

Исследовалась структура потоков в изотермическом абсорбере, где водой абсорбировался хлороводород. Структура потоков определялась по статистическим характеристикам (моментам) весовой функции.

Последовательность оценки гидродинамической структуры потоков объекта следующая: 1) проведение эксперимента на действующем объекте; 2) сглаживание экспериментальных данных; 3) расчет корреляционных функций; 4) определение весовой функции и ее вероятностных характеристик (моментов); 5) оценка гидродинамической структуры потоков по рассчитанным моментам.

Эксперимент проводился на действующих абсорберах. Содержание хлороводорода измерялось во входном и выходном потоках (после поглощения основной части хлороводорода водой).

Сглаживание экспериментальных данных проводилось по алгоритму скользящего среднего 9.3.2. Интервал усреднения $(2l+1)=5$. Запись (сглаженная) концентраций хлороводорода на входе $x(t)$ и выходе $y(t)$ представлена на рис. 9.5.

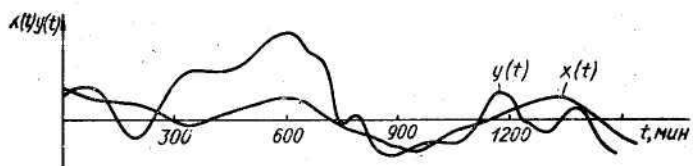


Рис. 9.5. Запись концентраций хлороводорода на входе $x(t)$ и на выходе $y(t)$ абсорбера.

Корреляционные функции рассчитывались по уравнениям (9.41) и (9.42) на. На рис. 9.6 приведены нормированные автокорреляционная и взаимно-корреляционная функции, отличающиеся от расчетных:

$$R_{xx}^*(\tau) = R_{xx}(\tau)/s_x^2;$$

$$R_{yx}^*(\tau) = R_{yx}(\tau)/s_x s_y,$$

где s_x^2 — оценка дисперсии входной переменной: s_x и s_y — оценки среднеквадратичных отклонений соответственно входной и выходной переменных.

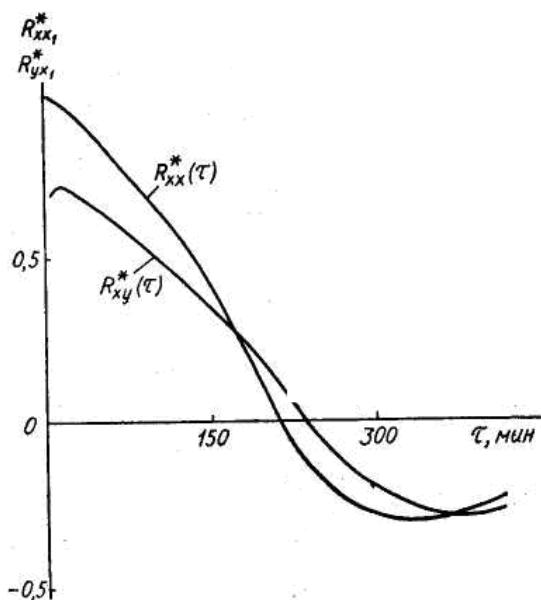


Рис. 9.6. Расчетные корреляционные функции к примеру 9.4.1.

Выборка данных, по которой считались корреляционная функции, равнялась 120 точкам, снятым с интервалом 30 мин.

Расчет весовой функции в соответствии с уравнением (9.43) проводился по алгоритму 9.3.4. Результаты расчета приведены на рис. 9.7. Расчеты проводились несколько раз с различными корреляционными функциями. Решение практически не менялось, что свидетельствует о его устойчивости.

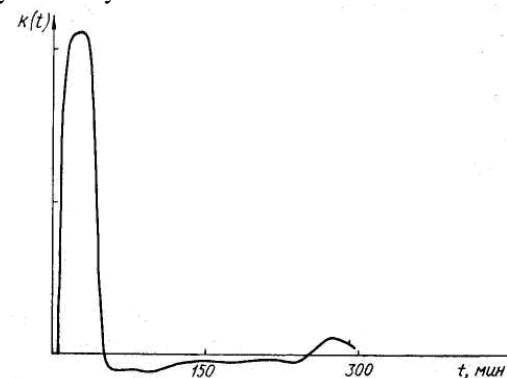


Рис. 9.7. Расчетная функция веса к примеру 9.4.1.

С целью оценки гидродинамической структуры абсорции использовался метод моментов и связь моментов с числами Пекле — алгоритм 9.3.5. По весовой функции рассчитывались ее моменты нулевого, первого, второго, третьего и четвертого порядков. Для расчета значений критерия Пекле Pe использовалась система уравнений (9.60). Критерий Pe рассчитывался по моменту μ_2 , а с помощью старших моментов проверялась адекватность принятой модели; уравнения системы (9.60) решались по стандартной программе — решение трансцендентных уравнений.

Использовался метод половинного деления. Получены близкие значения Pe : 63,45; 62,97 и 63,99.

Поскольку значение Pe более 30, можно считать, что гидродинамическая структура потоков в абсорбере соответствует режиму идеального вытеснения.

9.4.2. Исследование динамических характеристик объекта управления методом идентификации.

Исследовался объект управления, имеющий одну входную $u(t)$ и одну выходную $y(t)$ переменные. Известно, что объект характеризуется высоким уровнем помех, и детерминированные методы исследования неприемлемы. Их применение также осложнялось жесткими требованиями технологического регламента.

Исследователи собрали информацию, не нарушая режима работы объекта (т. е. в режиме нормальной эксплуатации объекта). Предварительные исследования показали, что для получения достоверных динамических характеристик объекта достаточно иметь реализацию «длиной» $T=3000$ мин с интервалом между измерениями $\Delta t = 5$ мин.

Получено четыре реализации, по которым рассчитаны автокорреляционные и взаимно-корреляционные функции в соответствии с алгоритмами 9.3.3. Параметры расчета корреляционных функций $\Delta t = 15$ мин и $\tau_{\max} = 500$ мин. На рис. 9.8 представлены автокорреляционные функции входной и выходной переменных исследуемого объекта по четырем реализациям.

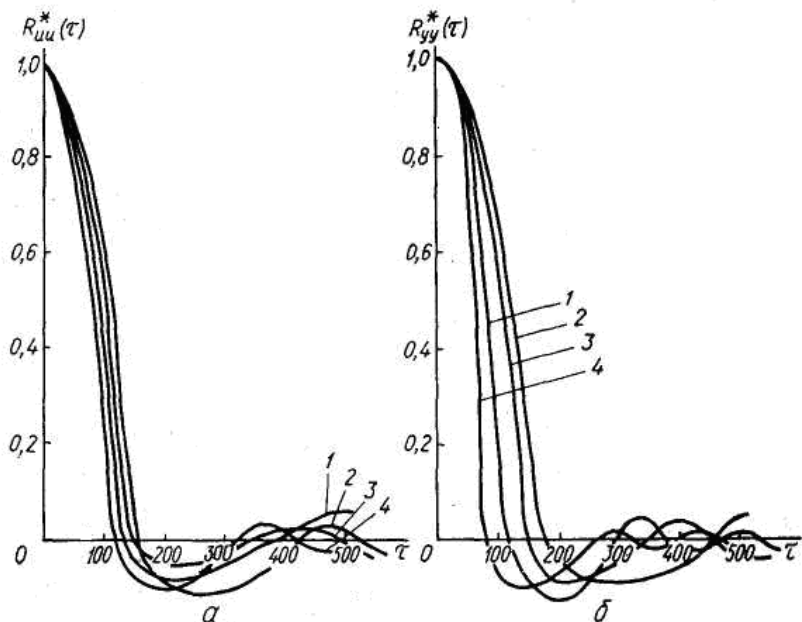


Рис. 9.8. Автокорреляционные функции входа и выхода к примеру 9.4.2.

Анализ показывает, что время спада корреляционных функций примерно одинаково и равно 300 мин. Таким образом, можно сказать, что объект с течением времени не изменяется (реализации получены, естественно, в различное время). Необходимости в сглаживании реализации нет.

Взаимно-корреляционные функции по всем четырем реализациям представлены на рис. 9.9.

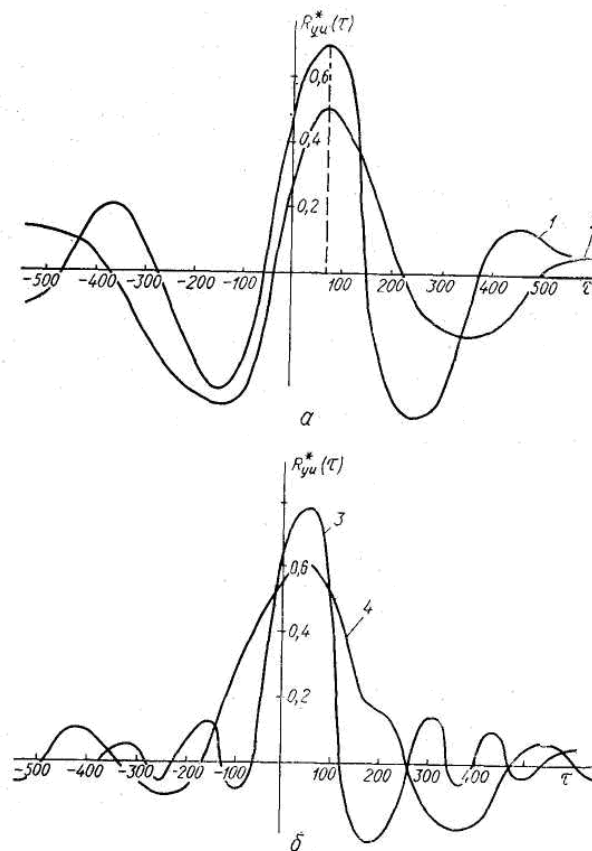


Рис. 9.9. Взаимно-корреляционные функции входа и выхода к примеру 9.4.2.

Из анализа кривых можно сделать следующие выводы:

1. Объект является инерционным, поскольку максимальные значения $R_{uv}^*(\tau)$ сдвинуты относительно начала координат.
2. Между входной и выходной переменными существует значительная корреляционная связь ($R_{uv}^*(\tau) \approx 0,6-0,7$).

Для нахождения математической модели в классе линейных систем воспользуемся уравнением Винера — Хопфа (9.43). Однако для

облегчения его решения предлагается выбрать из четырех компонентов корреляционных функций по одной для входа и выхода, аппроксимировать их аналитическими выражениями и только потом приступить к решению уравнения (9.43).

Приближенное аналитическое выражение для нормированной автокорреляционной функции входа $R_{uu}^*(\tau)$ имеет вид

$$R_{uu}^*(\tau) = e^{-0,008\tau} \cos \frac{\pi\tau}{200}, \quad \tau \geq 0,$$

а ее среднеквадратическое отклонение $s_u^2=0,33$. На рис. 9.10 приведена расчетная нормированная автокорреляционная функция и ее аппроксимация приведенным выше уравнением.

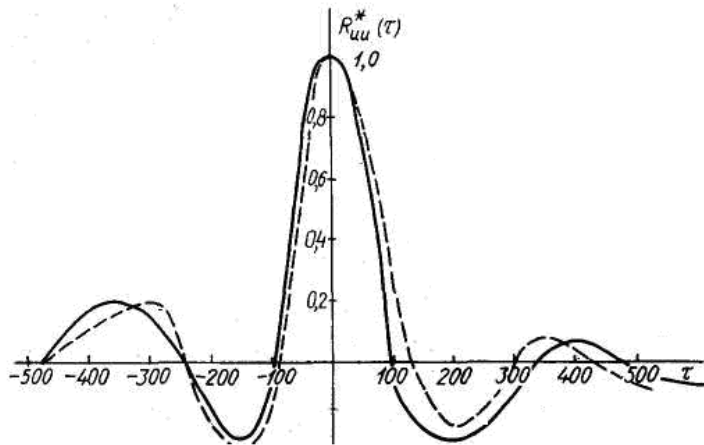


Рис. 9.10. Аппроксимация автокорреляционной функции.

Совпадение достаточно удовлетворительно.

Приближенное уравнение для нормированной взаимно-корреляционной функции имеет вид ($s_y=0,005$)

$$R_{uy}^*(\tau) = 0,45e^{-0,0056\tau} \left(\cos \frac{\pi\tau}{200} + 1,376 \sin \frac{\pi\tau}{200} \right), \quad \tau \geq 0;$$

$$R_{uy}^*(\tau) = 0,45e^{-0,008\tau} \left(\cos \frac{\pi\tau}{200} + 1,376 \sin \frac{\pi\tau}{200} \right), \quad \tau < 0.$$

Из рис. 9.11 видна удовлетворительная аппроксимация указанными уравнениями.

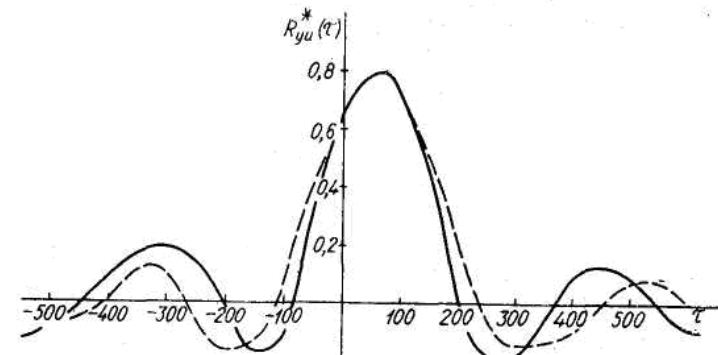


Рис. 9.11. Аппроксимация взаимно-корреляционной функции.

Как известно, уравнение Винера — Хопфа связывает натуральные автокорреляционные и взаимно-корреляционные функции, поэтому перейдем от нормированных функций к реальным

$$R_{uy}(\tau) = R_{uy}^*(\tau) s_u s_y;$$

$$R_{uu}(\tau) = R_{uu}^*(\tau) s_u^2,$$

вследствие чего получим

$$R_{uy}(\tau) = \begin{cases} 0,74 \cdot 10^{-3} e^{-0,0056\tau} \left(\cos \frac{\pi\tau}{200} + 1,376 \sin \frac{\pi\tau}{200} \right), & \tau \geq 0; \\ 0,74 \cdot 10^{-3} e^{-0,008\tau} \left(\cos \frac{\pi\tau}{200} + 1,376 \sin \frac{\pi\tau}{200} \right), & \tau < 0. \end{cases}$$

Таким образом, согласно уравнению Винера — Хопфа имеем

$$\begin{aligned} 0,74 \cdot 10^{-3} e^{-0,0056\tau} \left(\cos \frac{\pi\tau}{200} + 1,376 \sin \frac{\pi\tau}{200} \right) &= \\ &= \int_0^{\infty} k(t) e^{-0,008(\tau-t)} \cos \frac{\pi(\tau-t)}{200} dt. \end{aligned}$$

Отсюда, решив это уравнение известными методами, можно получить следующее уравнение импульсной функции:

$$k(t) = 8,5 \cdot 10^{-3} [0,74\delta(t) + 0,7e^{-0,0176t} -$$

$$- 2 \cdot 10^{-6} \cos 0,5te^{-0,0056t} - 1,3 \sin 0,05te^{-0,0056t}],$$

где $\delta(t)$ — дельта-функция.

Графически импульсная (весовая) функция представлена на рис. 9.12 без $\delta(t)$.

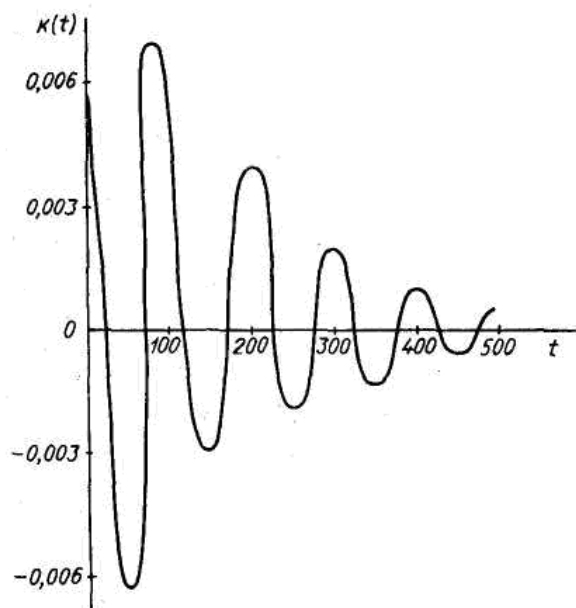


Рис. 9.12. Рассчитанная функция веса к примеру 9.4.2.

Если применить к полученному уравнению импульсной функции преобразование Лапласа, можно получить следующую передаточную функцию:

$$W_p = 8,5 \cdot 10^{-3} \frac{0,74p + 0,04}{p + 0,0176} \cdot \frac{(p + 0,008)^2 + 0,0026}{(p + 0,0056)^2 + 0,0026}$$

Дифференциальное уравнение, описывающее объект исследования, имеет вид

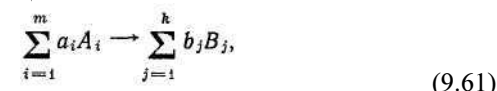
$$\begin{aligned} \frac{d^3 y}{dt^3} + 0,0288 \frac{d^2 y}{dt^2} + 0,0028 \frac{dy}{dt} + 4 \cdot 10^{-5} y &= \\ = 8,5 \cdot 10^{-3} \left(0,74 \frac{d^3 x}{dt^3} + 0,0518 \frac{d^2 x}{dt^2} + 0,0026 \frac{dx}{dt} + 0,0001 x \right). \end{aligned}$$

Полученную передаточную функцию или дифференциальное уравнение, т. е. математическую модель динамических свойств объекта, можно использовать для синтеза системы автоматического регулирования.

9.5. Метод исследования формальной кинетики в непрерывных технологических процессах

В настоящее время значительное внимание уделяется применению статистических методов вообще и методов планирования эксперимента в частности для изучения механизма и определения констант химических реакций. Многие методы исследования уже апробированы практикой и их можно алгоритмизировать, другие еще проверяются практически. В данном разделе рассмотрены наиболее употребляемые алгоритмы: линейризации кинетических зависимостей и минимизации квадратов разностей по концентрациям и скоростям химических превращений.

9.5.1. Алгоритм линейризации кинетических зависимостей.
Исходные данные. Предполагается, что механизм химической реакции может быть представлен реакцией



где A_i и B_j — исходные вещества и продукты реакции соответственно; a_i, b_j — стехиометрические коэффициенты.

Скорость этой реакции можно описать уравнением формальной кинетики:

$$R = \frac{d[c]}{dt} = k \prod_{i=1}^m [c_i]^{n_i}, \quad (9.62)$$

где k — константа скорости реакции; n_i — порядок реакции по i -му веществу; $[c_i]$ — концентрация i -го вещества.

Константа скорости реакции в зависимости от температуры изменяется по закономерности Аррениуса

$$k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}, \quad (9.63)$$

где k_0 — предэкспоненциальный множитель; E — энергия активации; R — универсальная газовая постоянная; T — абсолютная температура.

Линейризация уравнения (9.63). Логарифмирование (9.63) с учетом (9.63) дает

$$\ln R = \ln k_0 - \frac{E}{R} \frac{1}{T} + \sum_{i=1}^m n_i \ln [c_i]. \quad (9.64)$$

Обозначим переменные

$$\begin{aligned} \ln R &= \hat{y}; & \ln k_0 &= b'_0; \\ \ln \frac{1}{T} &= X_1; & -E/R &= b'_1; \\ \ln [c_1] &= X_2; & n_1 &= b'_2; \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \ln [c_m] &= X_{m+1}; & n_m &= b'_{m+1} \end{aligned}$$

(штрих у коэффициентов b_i означает, что они имеют размерность). Окончательно получим линейное уравнение

$$\hat{y} = b'_0 + b'_1 X_1 + b'_2 X_2 + \dots + b'_{m+1} X_{m+1}. \quad (9.65)$$

Для определения коэффициентов b'_i , $i=0, 1, \dots, m+1$ можно использовать планы ПФЭ или ДФЭ и соответствующие расчеты по алгоритмам 5.6.

Замечание. Переход от коэффициентов b_i , полученных по планам ПФЭ или ДФЭ с кодированными факторами, к коэффициентам b'_i , имеющим размерность, осуществляется по формулам

$$\begin{aligned} b'_i &= \frac{b_i}{\Delta X_i}, \\ b'_0 &= b_0 + \sum_{i=1}^{m+1} b_i \frac{X_{i0}}{\Delta X_i}, \end{aligned} \quad (9.66)$$

где ΔX_i — интервал варьирования факторов; X_{i0} — нулевой уровень факторов.

9.5.2. Алгоритм линеаризации кинетики процессов (частный случай).

Исходные данные. Предполагается, что кинетика исследуемого процесса может быть описана дифференциальным уравнением первого порядка

$$\frac{d[c]}{dt} = -k[c] \text{ или } \frac{dy}{dt} = -ky, \quad (9.67)$$

где $[c]=y$ — концентрация вещества; k — константа скорости реакции; t — длительность реакции.

Константа скорости реакции в исследуемом диапазоне температур не меняется.

Линеаризация уравнения (9.67). Решением уравнения (9.67) является

$$y = y_0 e^{-kt} \quad (9.68)$$

или после логарифмирования

$$\ln y = \ln y_0 - kt, \quad (9.69)$$

где y_0 — начальное значение концентрации вещества A (или другая переменная). Используя планы ПФЭ или ДФЭ, можно определить константу скорости k или длительность реакции в зависимости от режимных параметров (скоростей потоков, температуры исходных продуктов и т. д.).

9.5.3. Алгоритм определения кинетических констант по дифференциальным уравнениям.

Исходные данные. Известен механизм химической реакции. В соответствии с этим механизмом может быть записана система кинетических уравнений

$$\sum_{i=1}^g \frac{dc_i(t)}{dt} = \sum_{j=1}^n k_j \prod_{i=1}^m c_i^{n_i}(t). \quad (9.70)$$

Известны также начальные условия: $t = 0$; $c_0 = A$.

Константы скоростей реакций можно определять из условия минимума функционала

$$\Phi = \sum_{i=1}^g \int_0^T [c_i^2(t) - \hat{c}_i(t)]^2 \rightarrow \min_k, \quad (9.71)$$

где $c_i^2(t)$ — изменения концентраций веществ во времени, полученные экспериментально; $\hat{c}_i(t)$ — изменения концентраций веществ во времени, полученные численным интегрированием уравнения (9.68).

Решение задачи минимизации Φ осуществляют каким-либо методом нелинейного программирования или с использованием аналогоцифрового вычислительного комплекса.

9.5.4. Алгоритм определения кинетических констант по дифференциальным уравнениям (частный случай).

Исходные данные. Кинетика химических реакций описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений, содержащих в правой части суммы членов полиномов, линейных взаимодействий и квадратичных — по концентрациям реагирующих веществ. Необходимо определить константы скоростей реакций, которые в данном случае можно интерпретировать как линейные коэффициенты b_i (константы скоростей реакций первого порядка), как коэффициенты взаимодействий b_{ij} (константы скоростей реакций смешанного второго порядка), как квадратичные коэффициенты b_{ii} (константы скоростей реакций второго порядка).

План эксперимента разрабатывается так, чтобы полученные результаты позволили найти независимые оценки всех коэффициентов уравнения регрессии. Это может быть ПФЭ (ДФЭ), если в правой части системы кинетических уравнений имеются только линейные члены (концентрации) или их взаимодействия; или планы второго порядка (ЦКОП), если имеются реакции второго порядка.

Примечание. Помимо констант скоростей реакций, определяемых экспериментально, возможна оценка предложенного механизма реакций по адекватности уравнений регрессии.

Расчеты по рассмотренному методу не отличаются от алгоритмов ПФЭ или ЦКОП, однако в расчетах присутствуют некоторые операции, характерные для кинетических исследований.

Принятие решений связано с оценкой адекватности системы уравнений, т. е. с адекватностью предложенного механизма реакций.

9.6. Примеры исследования формальной кинетики технологических процессов

В этом разделе приведено несколько примеров исследования кинетических зависимостей химических процессов в соответствии с алгоритмами 9.5.

9.6.1. Исследование процесса сополимеризации с использованием алгоритма линейзации кинетических зависимостей.

Исследовалась кинетика процесса сополимеризации α , β , β -трифторстирола с метакриловой кислотой при небольших степенях превращения исходных мономеров в полимер. Было предложено следующее уравнение формальной кинетики:

$$W = k[C_1 + C_2]^{n_1}[C_3]^{n_2}, \quad k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}$$

где $[C_1]$, $[C_2]$ —концентрации исходных мономеров; $[C_3]$ —концентрация инициатора (перекиси бензоила); n_1 , n_2 —порядок реакции по суммарной концентрации мономеров и инициатору; E —энергия активации; k — суммарная константа реакции; k_0 — предэкспоненциальный множитель; R — универсальная газовая постоянная; T — абсолютная температура.

Приведенное уравнение справедливо (по априорным сведениям) в диапазонах изменения концентрации и температур: $[C_1] + [C_2]$ — $8,08 \div 11,18$ моль/л, $[C_3]$ — $0,0504 \div 0,1512$ моль/л, при $60 \div 80^\circ\text{C}$. Ставится задача определения всех констант уравнения формальной кинетики.

Решение. Логарифмируя уравнение кинетики, получим

$$\lg W = \lg k_0 + n_1 \lg [C_1 + C_2] + n_2 \lg [C_3] - \frac{E}{R} \lg e \frac{1}{T},$$

или в общем виде

$$\Lambda y = b'_0 + b'_1 X_1 + b'_2 X_2 - b'_3 X_3,$$

где

$$\Lambda y = \lg W, \quad b'_0 = \lg k_0, \quad b'_1 = n_1, \quad b'_2 = n_2, \quad b'_3 = \frac{E}{R} \lg e,$$

$$X_1 = \lg [C_1 + C_2], \quad X_2 = \lg [C_3], \quad X_3 = \frac{1}{T}.$$

Воспользуемся планом ПФЭ 2^4 . Для получения кодированных переменных x_i выберем приведенные выше диапазоны изменения концентраций и температур. Пересчитаем интервалы варьирования факторов и координаты центра плана (табл. 9.8). План эксперимента (табл. 9.9) реализован.

Таблица 9.8.

Исходные данные для планирования эксперимента

Наименование	$\lg [C_1 + C_2]$	$\lg [C_3]$	$\frac{1}{T}$
Интервал варьирования	0,0703	0,2380	0,00008
Нулевой уровень	0,9777	-1,0591	0,00292

Таблица 9.9.

План и результаты эксперимента

Номер опыта	Условия опыта в натуральном масштабе			Скорость сополимеризации $W \cdot 10^3$, моль/(л·с)	Факторы				Логарифм начальной скорости (средний по двум опытам) $\lg W_0$
	$[C_1 + C_2]$, моль/л	$[C_3]$, моль/л	T , °C		X_0	X_1	X_2	X_3	
1	11,18	0,0504	60	1,11	+	+	-	-	$\bar{3},0453$
2	8,08	0,0504	60	0,76	+	-	-	-	$\bar{4},8808$
3	11,18	0,0504	80	6,60	+	+	-	+	$\bar{3},8195$
4	8,08	0,0504	80	4,46	+	-	-	+	$\bar{3},6776$
5	11,18	0,1512	60	1,85	+	+	+	-	$\bar{3},2672$
6	8,08	0,1512	60	1,29	+	-	+	-	$\bar{3},1106$
7	11,18	0,1512	80	11,30	+	+	+	+	$\bar{2},0531$
8	8,08	0,1512	80	8,17	+	-	+	+	$\bar{3},9122$

Для получения $y = \lg W$ в процессе проведения каждого опыта получены кинетические кривые зависимости степени превращения вещества q от времени. Кривые аппроксимировали линейным уравнением регрессии

$$q = d_0 + d_1 t,$$

коэффициенты d_0, d_1 которого определяли методом наименьших квадратов. Это уравнение использовалось для расчета начальной скорости реакции — W_0 было получено как произведение коэффициента d_1 на исходную суммарную концентрацию мономеров. В плане эксперимента приведен расчетный столбец $y = \lg W_0$.

По результатам эксперимента (проводились два параллельных опыта по каждой строке матрицы планирования) в соответствии с уравнениями расчета дисперсий, получена дисперсия $s^2_0 = 0,0296$ ($s_0 = 5,43 \cdot 10^{-2}$) при $f_0 = 8$. Коэффициенты линейного уравнения

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3,$$

определяли в соответствии с алгоритмами определения коэффициентов

$$b_0 = -2,5292; \quad b_1 = 0,075; \quad b_2 = 0,115; \quad b_3 = 0,3948.$$

Ошибка коэффициентов b_i определялась по формуле

$$s_{b_i} = \sqrt{s^2_{ад}} = \frac{5,43 \cdot 10^{-2}}{8 \cdot 2} = 1,35 \cdot 10^{-2}.$$

Проверка значимости по t -критерию ($t_f = 2,31$) показала, что все коэффициенты значимы ($t_{pi} > t_T$). Проверка адекватности уравнения регрессии

$$s^2_{ад} = \frac{2 \sum_{u=1}^8 (\lg W_{0u} - \lg \hat{W}_{0u})^2}{8 - 4} = 0,09;$$

$$F_p = \frac{s^2_{ад}}{s^2_{\alpha}} = \frac{0,09}{0,0296} = 3,04;$$

$$F_p < F_T = 3,84 \quad (f_{ад} = 4, f_0 = 8, q = 0,05, \text{ см. Приложение 5})$$

Таким образом, уравнение регрессии адекватно эксперименту. Учитывая замечание к 9.5.1, перейдем от кодированных факторов к натуральным (9.66)

$$b'_1 = n_1 = \frac{b_1}{\Delta X_1} = \frac{0,075}{0,0703} = 1,05 \approx 1;$$

$$b'_2 = n_2 = \frac{b_2}{\Delta X_2} = \frac{0,115}{0,238} = 0,49 \approx 0,5;$$

$$b'_3 \approx E/R = \frac{b_3 \cdot 1}{\Delta X_3 \lg e} = \frac{0,3948 \cdot 1,987 \cdot 10^{-3} \cdot 2,3 \cdot 4,186}{8 \cdot 10^{-5}} = 94,41.$$

$$b'_0 = b_0 + b_1 \frac{X_{10}}{\Delta X_1} + b_2 \frac{X_{20}}{\Delta X_2} + b_3 \frac{X_{30}}{\Delta X_3} = 10,5123,$$

т. е. $k_0 = 0,3253 \cdot 10^{11}$.

Окончательный вид уравнения формальной кинетики следующий:

$$W = 0,3253 \cdot 10^{11} [C_1 + C_2]^1 [C_3]^{0,5} e^{-\frac{89,67}{T}}.$$

Легко доказать, что ошибки констант можно уменьшить, расширив интервалы варьирования факторов.

9.6.2. Исследование кинетики сушки волокнистых материалов методами планирования эксперимента.

Процесс сушки исследовался на лабораторном сушильном стенде, состоящем из горизонтальной и вертикальной сушильных камер, калорифера, паровых котлов и вентиляционной установки. Стенд предусматривает варьирование в достаточно широких пределах основных параметров процесса сушки, их контроль и регулирование. В эксперименте использовалась моченцовая льнотреста, полученная методом тепловой мочки. Льняная солома выдерживалась в течение трех суток в емкости с водой, температура которой поддерживалась в пределах 36—38°C. Перед экспериментом льнотреста отжималась с целью достижения необходимой исходной влажности (около 200%).

Выходной переменной процесса сушки принято влагосодержание материала y (%), определяемое по классической методике. В качестве варьируемых (режимных) переменных выбраны: температура сушильного агента x_1 (нагретый воздух) — возможные пределы варьирования — 80—150°C; скорость подачи сушильного агента x_2 — возможные пределы варьирования 1—10 м/с; влагосодержание сушильного агента x_3 — возможные пределы варьирования 10—120 г/кг сухого воздуха; плотность загрузки льнотресты на ленту конвейера x_4 — возможные пределы варьирования 0,5—3,5 кг/м².

При построении математической модели процесса сушки использован план типа ПФЭ 2⁴ с числом опытов $N = 16$. Для расчета ошибки опыта в центре плана реализованы три параллельных опыта.

Влагосодержание материала измеряли в фиксированные моменты времени с интервалом 1,5 мин, начиная с $\tau=3$ мин. Матрица планирования с указанием выбранных нулевых уровней и интервалов варьирования представлена в табл. 9.10.

Для каждого момента времени получены математические модели процесса сушки в виде полиномов, включающих линейные факторы x_i , и их взаимодействие $x_i x_j$.

Таблица 9.10

План и результаты эксперимента

Наименование	Факторы				Результаты эксперимента					y^*	R										
	x_1	x_2	x_3	x_4																	
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9												
Основной уровень	110	3,5	85	225																	
Интервал варьирования	10	0,5	15	25																	
Верхний уровень	120	4	100	250																	
Нижний уровень	100	3	70	200																	
Номер опыта	x_0	План				y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7	y_8	y_9							
1	+1	+1	+1	+1	+1	94,5	59,4	37,2	27,1	6,5	94,5	0,42558									
2	+1	+1	+1	+1	+1	98,0	65,4	40,0	30,9	8,6	8,6	0,40506									
3	+1	+1	+1	+1	+1	108,0	72,2	47,0	33,0	13,0	13,0	0,34622									
4	+1	+1	+1	+1	+1	110,0	78,7	52,0	37,6	21,5	110,0	0,26872									
5	+1	+1	+1	+1	+1	82,3	56,5	36,0	28,0	7,2	82,3	0,43872									
6	+1	+1	+1	+1	+1	84,6	63,5	39,4	31,5	14,4	14,4	0,40822									
7	+1	+1	+1	+1	+1	93,3	72,4	41,2	33,0	15,1	15,1	0,3117									
8	+1	+1	+1	+1	+1	102,0	76,6	45,0	34,0	16,0	102,0	0,30856									
9	+1	+1	+1	+1	+1	79,5	47,0	27,0	13,7	5,6	79,5	0,44161									
10	+1	+1	+1	+1	+1	89,9	59,7	34,0	19,0	7,8	7,8	0,40711									
11	+1	+1	+1	+1	+1	94,0	63,5	36,0	24,5	10,3	10,3	0,36810									
12	+1	+1	+1	+1	+1	102,5	69,0	44,0	30,0	16,6	102,5	0,30310									
13	+1	+1	+1	+1	+1	64,0	34,0	14,15	8,7	3,6	64,0	0,47910									
14	+1	+1	+1	+1	+1	78,4	42,0	17,5	9,8	5,6	78,4	0,43930									
15	+1	+1	+1	+1	+1	88,0	53,0	33,0	17,5	18,6	88,0	0,38720									
16	+1	+1	+1	+1	+1	93,5	56,2	36,0	22,5	12,5	93,5	0,37560									
17	+1	+1	+1	+1	+1	91,5	55,2	35,0	19,0	9,4	91,5										
18	+1	+1	+1	+1	+1	93,0	56,0	36,5	20,2	9,8	93,0										
19	+1	+1	+1	+1	+1																

Расчеты проводились по алгоритму 9.5.4. Модели для фиксированных моментов времени оказались адекватными, но использовать их невозможно, поскольку определенной закономерности в изменении коэффициентов от одного момента времени к другому не установлено (табл. 9.11).

Таблица 9.11.

Коэффициенты математических моделей процесса | сушки для фиксирования моментов времени (подчеркнуты незначимые коэффициенты)

Коэффициенты	Моменты времени τ , мин				
	3,0	4,5	6,0	7,5	9,0
b_0	91,31	60,71	35,94	28,28	10,225
b_1	-3,88	-3,46	-2,62	2,20	-1,74
b_2	-7,44	-7,28	-5,98	-4,26	-3,88
b_3	4,99	3,65	3,84	2,44	1,08
b_4	4,53	7,37	5,19	6,32	4,93
b_{12}	0,04	-0,95	0,46	0,26	0,79
b_{13}	-1,56	-0,38	-0,106	-0,75	-0,64
b_{14}	1,55	1,17	0,26	-0,05	0,06
b_{23}	1,59	0,98	1,10	0,78	0,23
b_{24}	1,39	0,39	1,27	1,12	-0,91
b_{34}	0,30	-2,81	0,92	2,53	-0,24

Тогда в математическую модель включили время с нулевым уровнем $X_{50}=6$ мин, верхним уровнем $X_{5B} = 9$ мин и нижним уровнем $X_{5H}=3$ мин; выбранные из столбцов $y_1—y_5$ значения y^* приведены в предпоследнем столбце табл. 9.10 ($x_5 = -x_1x_2$).

Выполненные по тем же алгоритмам расчеты и статистический анализ показали неадекватность как линейной, так и неполной квадратичной модели. Для получения адекватной модели привлечена априорная информация, на основе которой можно предположить, что процесс сушки можно описать кинетическим уравнением первого порядка вида (9.67)

$$\frac{dy}{d\tau} = -ky,$$

где τ — время (x_5); k — константа скорости реакции. Решением уравнения будет

$$y = y_0 e^{-k\tau} \tag{A}$$

или после логарифмирования

$$\ln y = \ln y_0 - k\tau, \tag{Б}$$

где y_0 — исходная влажность льнотресты.

Используя метод наименьших квадратов и рекомендации алгоритма 9.4.2, оценены значения константы скорости k для каждого опыта. Эти значения приведены в последнем столбце табл. 9.11.

Получено следующее уравнение регрессии $k=0,3829+0,01932x_1 + 0,04681x_2 - 0,01447x_3 - 0,0191x_4 + 0,00706x_2x_4 + 0,0063x_3x_4$.

Коэффициенты при взаимодействиях x_1x_2 , x_1x_3 , x_1x_4 и x_2x_3 оказались незначимыми (проверка производилась по t -критерию), а само уравнение — адекватным ($F_p = 18,40$, $F_T = 19,40$ при $f_1 = 8$, $f_2 = 2$).

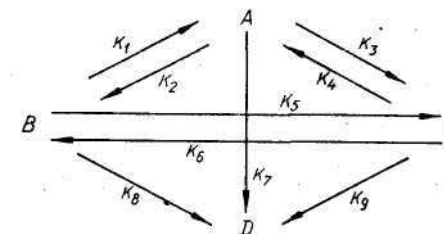
Для использования приведенного выше уравнения в расчетах необходимо перевести переменные x_i из кодированной формы в натуральную по уравнению (9.66). Полученное уравнение, описывающее зависимость константы скорости k от режимных параметров X_i , имеет вид

$$k = 0,11782 + 0,00193X_1 - 0,07686X_2 - 0,006527X_3 - 1,6675X_4 + 0,00051X_1X_3 + 0,22592X_2X_4 + 0,00672X_3X_4.$$

Используя это уравнение и уравнения (А) и (Б), можно вычислять продолжительность сушки льнотресты в зависимости от выбранных режимных факторов X_i (температуры и скорости подачи сушильного агента, его влагосодержания и плотности загрузки льнотресты на ленте конвейера). Полученные уравнения также можно использовать при решении задачи оптимизации процесса сушки льнотресты.

9.6.3. Исследование кинетики реакций каталитического окислительного дегидрирования бутенов в дивинил.

На основании априорных сведений принят механизм реакций, в котором исключена возможность, обратных превращений дивинила в бутилены:



где A, B, C, D — соответственно бутен-1, *транс*-бутен-2, *цис*-бутен-2, дивинил.

При изучении кинетики реакций окислительного дегидрирования установлен нулевой порядок по кислороду и первый порядок по бутиленам; специальными опытами доказано отсутствие тормозящего влияния продуктов реакции. Кинетика реакций представлена системой дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{dt} &= -(k_1 + k_3 + k_7)C_A + k_2C_B + k_4C_C; \\ \frac{dC_B}{dt} &= -(k_1 + k_5 + k_8)C_B + k_1C_A + k_6C_C; \\ \frac{dC_C}{dt} &= -(k_4 + k_6 + k_9)C_C + k_3C_A + k_5C_B; \\ \frac{dC_D}{dt} &= k_7C_A + k_8C_B + k_9C_C, \end{aligned}$$

где $k_i, i=1,2, \dots, 9$ — константы скоростей псевдомолекулярных реакций; C_A, C_B, C_C, C_D — концентрации реагентов в газовой фазе.

Ставится задача определить по экспериментальным данным константы скоростей реакций и показать адекватность предложенного механизма реакций.

Воспользуемся рекомендациями и определениями алгоритма 9.5.4. Обозначим начальные концентрации веществ A_0, B_0, C_0 соответственно через X_1, X_2, X_3 . Рассматривая скорости накопления веществ как отклики y_i , а начальные концентрации как зависимые факторы, получим систему уравнений

$$\begin{aligned} \wedge y_1 &= b_{01} + b_{11}x_1 + b_{21}x_2 + b_{31}x_3; \\ \wedge y_2 &= b_{02} + b_{12}x_1 + b_{22}x_2 + b_{32}x_3; \\ \wedge y_3 &= b_{03} + b_{13}x_1 + b_{23}x_2 + b_{33}x_3; \\ \wedge y_4 &= b_{04} + b_{14}x_1 + b_{24}x_2 + b_{34}x_3, \end{aligned}$$

где x_i связаны с X_i обычным кодированием.

Кинетику дегидрирования бутенов исследовали при различных температурах. Для каждой температуры составлялась своя матрица планирования эксперимента. Ниже приведены результаты для $T=669$ К. Исходные данные для планирования эксперимента приведены в табл. 9.12, а план эксперимента — в табл. 9.13. Учитывая линейность системы уравнений, достаточно использовать факторный план первого порядка ДФЭ 2^{3-1} или, для большей точности, ПФЭ 2^3 (см. табл. 9.13).

Таблица 9.12

Исходные данные для планирования эксперимента

Наименование	X_1	X_2	X_3
Интервал варьирования ΔX_i	0,00500	0,00386	0,00331
Нулевой уровень X_{i0}	0,01500	0,01158	0,00993

Таблица 9.13

План и результаты эксперимента

Номер опыта	План			Выходная переменная			
	x_1	x_2	x_3	y_1	y_2	y_3	y_4
1	-1	-1	-1	-0,288	0,046	0,003	0,272
2	-1	-1	+1	-0,263	0,077	-0,102	0,255
3	-1	+1	-1	-0,286	-0,124	0,041	0,257
4	+1	-1	-1	-0,737	0,068	0,033	0,370
5	+1	+1	+1	-0,678	-0,063	-0,060	0,426
6	+1	+1	-1	-0,725	-0,043	0,058	0,342
7	+1	-1	+1	-0,705	0,124	-0,130	0,356
8	-1	+1	+1	-0,276	-0,139	-0,180	0,262

Ошибку опыта определяли по параллельным опытам в некоторых точках факторного пространства. Скорость накопления веществ y (мол. доли/с) определяли по формулам

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{C_A(t) - C_{A_0}}{t}; & y_2 &= \frac{C_B(t) - C_{B_0}}{t}; \\ y_3 &= \frac{C_C(t) - C_{C_0}}{t}; & y_4 &= \frac{C_D(t) - C_{D_0}}{t}. \end{aligned}$$

В этих формулах, индекс 0 относится к начальным концентрациям бутенов, а t — к концентрациям, соответствующим времени t . Из приведенных формул ясно, что начальные участки кинетических кривых аппроксимированы прямой линией. Очевидно, что вычисленные оценки скоростей накопления реагентов не будут точно соответствовать экспериментальным данным, причем, чем реагирующее вещество более химически активно, тем большая возникает погрешность. В табл. 9.14 приведены константы скоростей реакций, полученных из расчетных значений коэффициентов b_i , системы линейных уравнений, а также их среднеквадратические ошибки.

Таблица 9.14.

Расчетные значения констант скоростей

	Константы скоростей, с ⁻¹								
	k_1	k_2	k_3	k_4	k_5	k_6	k_7	k_8	k_9
По плану	7,128	0,74	6,62	5,60	3,47	2,57	10,80	1,08	2,90
Ошибка $s(k_i)$	1,8	2,6	1,8	3,5	2,6	3,5	1,8	2,6	3,5

Исследователи не были удовлетворены полученными ошибками коэффициентов (последняя строка табл. 9.14) и провели поиск констант методом нелинейных оценок, используя критерии (9.71) и (9.72). Оценки констант были уточнены и была доказана адекватность предполагаемого механизма реакций.

Приложения

Приложение 1

Некоторые сведения по математической статистике

Величина X , которая при повторяющихся условиях опыта принимает то или иное значение, заранее не известное, называется случайной величиной. Случайная величина называется *дискретной*, если между любыми двумя ее значениями находится лишь конечное число других случайных величин. *Непрерывные* случайные величины представляют совокупность случайных величин, которые плотно заполняют некоторый промежуток.

Совокупность всех возможных значений случайной величины для всех возможных условий опыта называется генеральной совокупностью.

Совокупность ограниченного числа значений случайной величины, полученных в результате эксперимента, называется выборкой из генеральной совокупности.

Если N выборочных значений x_1, x_2, \dots, x_N случайной величины X получены для N независимо изменявшихся условий опыта, то x_1, x_2, \dots, x_N можно рассматривать как N независимых случайных величин.

Всякое соотношение, устанавливающее связь между возможными значениями случайной величины и соответствующими им вероятностями, называется законом распределения.

Для количественной характеристики свойств генеральной совокупности используется *функция распределения случайной величины* X , которая равна вероятности принятия случайной величиной значения, меньшего чем X

$$F(x) = P(X < x).$$

Общие свойства функции распределения:

1. Функция распределения $F(x)$ есть неубывающая функция своего аргумента, т. е. при $x_2 > x_1$ $F(x_2) \geq F(x_1)$.
2. $F(-\infty) = 0$.
3. $F(+\infty) = 1$.

Производная функция распределения непрерывной случайной величины X называется *плотностью распределения*

$$f(x) = F'(x).$$

Вероятность нахождения величины X в интервале от a до b выражается через плотность распределения

$$P(a < x < b) = \int_a^b f(x) dx$$

или через функцию распределения

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a).$$

Основные свойства плотности распределения:

1. Плотность распределения есть неотрицательная функция

$$f(x) \geq 0.$$

2. Интеграл в бесконечных пределах от плотности распределения равен единице:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1.$$

Центр группирования значений случайной величины X характеризуется числовой характеристикой — **математическим ожиданием** $M[X]$, которая определяется выражением

$$M[X] = \sum_{i=1}^{N \rightarrow \infty} p_i x_i$$

для дискретной случайной величины и

$$M[X] = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx$$

для непрерывной случайной величины.

Свойства математического ожидания:

- 1) $M[c] = c$, если $c = \text{const}$;
- 2) $M[cX] = cM[X]$;
- 3) $M[X + Y] = M[X] + M[Y]$
- 4) $M[a + bY] = a + bM[Y]$;
- 5) $M[XY] = M[X]M[Y]$,

если X и Y —независимые случайные величины.

Степень рассеивания значений случайной величины вокруг центра группирования характеризуется **дисперсией**. Для непрерывной случайной величины дисперсия равна

$$D[X] = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - M[X])^2 f(x) dx,$$

для дискретной

$$D[X] = \sum_{i=1}^{N \rightarrow \infty} (x_i - M[X])^2 p_i.$$

Дисперсию можно рассматривать как математическое ожидание квадратов отклонений

$$D[X] = M(X - M[X])^2.$$

Свойства дисперсии:

- 1) $D[c] = 0$, если $c = \text{const}$;
- 2) $D[cX] = c^2 D[X]$;
- 3) $D[X] = M[X^2] - (M[X])^2$;
- 4) $D[X + Y] = D[X] + D[Y]$,

если X и Y —независимые случайные величины.

Величина, равная квадратному корню из дисперсии, называется **средним квадратическим отклонением**.

Если значение случайной величины есть результат действия многочисленных независимых и примерно одинаково малых факторов, то случайная величина характеризуется **нормальным законом распределения**. Плотность вероятности нормального распределения имеет вид

$$f(x) = \frac{1}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x - m_x)^2}{2\sigma_x^2}}$$

где m_x — математическое ожидание генеральной совокупности; σ_x^2 — ее дисперсия.

Численные значения m_x и σ_x^2 полностью характеризуют генеральную совокупность нормально распределенной случайной величины. Многие технические и технологические переменные, определяющие работу объектов, имеют распределение, близкое к нормальному.

Характеристики распределения, полученные по данным выборки, называются **выборочными оценками**. Выборочные оценки a_N являются случайными величинами и зависят от распределения случайных величин X , числа опытов N . Выборочная оценка обладает практической ценностью, если она характеризуется свойствами: несмещенностью, состоятельностью, эффективностью.

Оценка a называется **несмещенной**, если при любом N ее математическое ожидание равно истинному значению параметра a :

$$M[a_N] = a.$$

Оценка a_N параметра a называется **состоятельной**, если при неограниченном увеличении N ее значение с вероятностью, равной единице, стремится к истинному значению параметра a :

$$\lim P\{a_N - a < \varepsilon\} = 1.$$

Оценка a_N называется *эффективной*, если среди прочих оценок того же параметра она обладает наименьшей дисперсией

$$D[a_N] = D_{\min}.$$

Оценка математического ожидания (средняя) для дискретной случайности величины определяется по формуле

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_u.$$

Оценка дисперсии вычисляется по формуле

$$s_x^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{u=1}^N (x_u - \bar{x})^2,$$

или

$$s_x^2 = \frac{1}{N-1} \left[\sum_{u=1}^N x_u^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{u=1}^N x_u \right)^2 \right].$$

Знаменатель выборочной дисперсии равен разности между объемом выборки и числом связей, наложенных на эту выборку. Эта разность f называется *числом степеней свободы выборки*.

Для определения точности оценки a_N пользуются *доверительным интервалом* $a_N \pm \varepsilon$, а для определения надежности — *доверительной вероятностью*

$$P(a_N - \varepsilon < a < a_N + \varepsilon) = p_\varepsilon,$$

т. е. неизвестное значение параметра a с вероятностью p_ε попадает в доверительный интервал $a_N \pm \varepsilon$. В технических расчетах обычно $p_\varepsilon = 0,95$.

Функцией распределения системы двух случайных величин (X, Y) называется функция двух аргументов $F(x, y)$, равная вероятности совместного выполнения двух неравенств:

$$(X < x, \quad Y < y),$$

т.е.

$$F(x, y) = P[(X < x)(Y < y)].$$

Вторая смешанная частная производная функция $F(x, y)$ по x и y называется *плотностью распределения* системы

$$f(x, y) = P''_{xy}(x, y).$$

Случайные величины X и Y называются *независимыми*, если закон распределения каждой из них не зависит от того, какое значение приняла другая. В противном случае величины X и Y называются *зависимыми*. Для характеристики системы случайных величин, описывающей связь между ними, используется *корреляционный момент*. Для дискретных случайных величин корреляционный момент выражается формулой

$$R_{xy} = \sum_i \sum_j (x_i - m_x)(y_j - m_y) p_{ij},$$

а для непрерывных случайных величин

$$R_{xy} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (x - m_x)(y - m_y)f(x, y) dx dy,$$

где m_x, m_y — математические ожидания соответственно случайных величин X и Y . Характеристика

$$r_{yx} = \frac{R_{xy}}{\sigma_x \sigma_y} = \frac{M\{(x - m_x)(y - m_y)\}}{\sigma_x \sigma_y}$$

где σ_x, σ_y — средние квадратические отклонения, называется *коэффициентом корреляции* величин X и Y . Для независимых случайных величин коэффициент корреляции равен нулю.

Свойства коэффициента корреляции:

- 1) коэффициент корреляции изменяется от -1 до $+1$
 $-1 \leq r_{yx} \leq 1$;
- 2) коэффициент корреляции симметричен относительно исследуемых случайных величин

$$r_{yx} = r_{xy};$$

- 3) если $r_{xy} > 0$, то случайные величины X и Y с точностью до случайных погрешностей одновременно убывают или возрастают; если $r_{xy} < 0$, то величина X и Y одновременно изменяются в противоположных направлениях;
- 4) коэффициент корреляции характеризует степень тесноты линейной зависимости между случайными величинами.

Приложение 2

Некоторые сведения по теории случайных функций

Функция, значение которой при каждом значении аргумента (или нескольких аргументов) является случайной величиной, называется случайной функцией.

Конкретный вид, принимаемый случайной функцией в результате опыта, называется реализацией случайной функции.

Случайные функции принято обозначать так: $X(t), Y(t), Z(t)$ и т. д., где t — аргумент случайной функции (в частности, время).

Полное описание случайной функции $X(t)$ при фиксированных значениях аргумента t дает одномерный закон распределения возможных значений случайной функции при этом значении аргумента, описываемый функцией распределения $F_1(x, t)$ или плотностью распределения $f_1(x, t)$.

Значения случайной функции $X(t)$ для двух фиксированных значений аргумента t_1 и t_2 образуют систему двух случайных величин $(X[t_1], X[t_2])$ с двумерной плотностью распределения $f_2(x_1, x_2, t_1, t_2)$. Ее знание

достаточно для нужд так называемой корреляционной теории случайных функций, хотя можно рассматривать и N -мерные плотности распределения.

Математическим ожиданием случайной функции $X(t)$ называется случайная функция $m_x(t)$ аргумента t , которая при каждом данном значении аргумента равна математическому ожиданию значения случайной функции при том же значении аргумента

$$m_x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} x f_1(x, t) dx.$$

Дисперсией случайной функции $X(t)$ называется неслучайная функция $D_x(t)$ аргумента t , которая при каждом данном значении аргумента равна дисперсии значения случайной функции при том же значении аргумента

$$D_x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} [X - m_x(t)]^2 f_1(x, t) dx.$$

Для учета связи между значениями случайной функции при различных значениях аргумента используется корреляционная функция — это неслучайная функция двух аргументов t_1 и t_2 $k_x(t_1, t_2)$, которая при каждой паре значений t_1 и t_2 равна корреляционному моменту соответствующих значений случайной функции

$$R_x(t_1, t_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} [X_1 - m_x(t_1)][X_2 - m_x(t_2)] f_2(x_1, x_2, t_1, t_2) dx_1 dx_2.$$

Аналогично можно найти корреляционную функцию связи или взаимную корреляционную функцию двух случайных функций $X(t_1)$ и $Y(t_2)$

$$R_{xy}(t_1, t_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} [X - m_x(t_1)][Y - m_y(t_2)] f(x, y, t_1, t_2) dx dy.$$

В теории случайных функций широко распространена теория стационарных процессов — принимается, что ее математическое ожидание и дисперсия зависят только от разности аргументов

$$m_x(t) = \text{const}, \quad D_x(t) = \text{const};$$

$$R_{xx}(t_1, t_2) = R_{xx}(t_2 - t_1) = R_{xx}(\tau), \quad t_2 - t_1 = \tau.$$

Основные свойства корреляционной функции стационарной случайной функции:

1) дисперсия стационарной случайной функции постоянна и равна значению корреляционной функции в начале координат

$$R_{xx}(0) = D_x(t);$$

2) корреляционная функция стационарной случайной функции является четной

$$R_{xx}(-\tau) = R_{xx}(\tau);$$

3) на практике широко используется нормированная корреляционная функция

$$R_{xx}^*(\tau) = \frac{R_{xx}(\tau)}{D_x(t)};$$

4) $R_{xx}^*(\tau)$ является коэффициентом корреляции для случайных величин, разделенных временем

$$R_{xx}^*(0) = 1.$$

Основные свойства взаимной корреляционной функции:

$$1) \sqrt{R_{xx}(0)} \cdot \sqrt{R_{yy}(0)} \geq |R_{xy}(\tau)|;$$

$$2) R_{yx}(\tau) = R_{xy}(-\tau);$$

$$3) R_{yx}^*(\tau) = \frac{R_{yx}(\tau)}{\sqrt{D_x(t)} \cdot \sqrt{D_y(t)}};$$

$$4) R_{yx}^*(0) = 1.$$

Большинство стационарных случайных функций обладает важным для практики *эргодическим свойством*, сущность которого заключается в том, что по достаточно длинной одной реализации $x(t)$ можно судить о всех свойствах случайной функции, не прибегая к анализу всех ее реализаций. Тогда все характеристики случайной функции можно получить в соответствии с формулами

$$m_x(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T x(t) dt;$$

$$D_x(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T [x(t) - m_x(t)]^2 dt;$$

$$R_{xx}(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T [x(t) - m_x(t)][x(t + \tau) - m_x(t)] dt;$$

$$R_{yx}(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T [x(t) - m_x(t)][y(t + \tau) - m_y(t)] dt,$$

где $x(t)$, $y(t)$ — реализации случайных функций.

Приложение 3

Процентные точки распределения χ^2

$f \backslash q$	99.5 %	97.5 %	95 %	5 %	2.5 %	0.5 %
1	$0,39 \cdot 10^{-4}$	$0,98 \cdot 10^{-3}$	$0,39 \cdot 10^{-2}$	3,841	5,024	7,879
2	0,110	0,050	0,103	5,991	7,378	10,597
3	0,072	0,216	0,352	7,815	9,348	12,838
4	0,207	0,484	0,711	9,488	11,143	14,860
5	0,412	0,831	1,145	11,070	12,832	16,750
6	0,676	1,237	1,635	12,592	14,449	18,548
7	0,989	1,690	2,167	14,067	16,013	20,278
8	1,344	2,180	2,733	15,507	17,535	21,955
9	1,735	2,700	3,325	16,919	19,023	23,589
10	2,156	3,247	3,940	18,307	20,483	25,188
11	2,630	3,816	4,575	19,575	21,920	26,757
12	3,074	4,404	5,226	21,026	23,336	28,300
13	3,565	5,009	5,892	22,362	24,736	29,819
14	4,075	5,629	6,571	23,685	26,119	31,319
15	4,601	6,262	7,261	24,996	27,448	32,801
16	5,142	6,908	7,962	26,296	28,845	34,267
17	5,697	7,564	8,672	27,587	30,191	35,718
18	6,256	8,231	9,390	28,869	31,526	37,156
19	6,844	8,907	10,117	30,144	32,852	38,582
20	7,434	9,591	10,851	31,410	34,170	39,997
21	8,034	10,283	11,591	32,671	35,479	41,401
22	8,643	10,982	12,338	33,924	36,781	42,796
23	9,260	11,688	13,091	35,172	38,076	44,181
24	9,886	12,401	13,848	36,415	39,364	45,558
25	10,520	13,120	14,611	37,652	40,646	46,928
26	11,160	13,844	15,379	38,885	41,923	48,290
27	11,808	14,573	16,151	40,113	43,194	49,645
28	12,461	15,308	16,928	41,337	44,461	50,993
29	13,121	16,047	17,708	42,557	45,722	52,336
30	13,787	16,791	18,493	43,763	46,979	53,672

Приложение 4

Процентные точки распределения Стьюдента

$f \backslash q$	10 %	5 %	2 %	1 %	$f \backslash q$	10 %	5 %	2 %	1 %
6	1,94	2,45	3,14	3,71	6	1,94	2,45	3,14	3,71
7	1,89	2,36	3,00	3,50	7	1,89	2,36	3,00	3,50
8	1,86	2,31	2,90	3,36	8	1,86	2,31	2,90	3,36
9	1,83	2,26	2,82	3,25	9	1,83	2,26	2,82	3,25
10	1,81	2,23	2,76	3,17	10	1,81	2,23	2,76	3,17
11	1,80	2,20	2,72	3,11	23	1,71	2,07	2,50	2,81
12	1,78	2,18	2,68	3,05	24	1,71	2,06	2,49	2,80
13	1,77	2,16	2,65	3,01	25	1,71	2,06	2,49	2,79
14	1,76	2,15	2,62	2,98	26	1,71	2,06	2,48	2,78
15	1,75	2,13	2,60	2,95	27	1,70	2,05	2,47	2,77
16	1,75	2,12	2,58	2,92	28	1,70	2,05	2,47	2,76
17	1,74	2,11	2,57	2,90	29	1,70	2,04	2,46	2,76
18	1,73	2,10	2,55	2,88	30	1,70	2,04	2,46	2,75
19	1,73	2,09	2,54	2,86	40	1,68	2,02	2,42	2,70
20	1,73	2,09	2,53	2,85	60	1,67	2,0	2,39	2,66
21	1,72	2,08	2,52	2,83	120	1,66	1,98	2,36	2,62
22	1,72	2,07	2,51	2,82	∞	1,64	1,96	2,33	2,58

Критерий Фишера при $q=0,05$

$q \backslash f$	1	2	3	4	5	6	8	12	24	∞
1	164,40	199,50	215,70	224,60	230,20	234,00	238,90	243,90	249,00	254,30
2	18,51	19,00	19,16	19,25	19,30	19,33	19,37	19,41	19,45	19,50
3	10,13	9,55	9,28	9,12	9,01	8,94	8,84	8,74	8,64	8,53
4	7,71	6,94	6,59	6,39	6,26	6,16	6,04	5,91	5,77	5,63
5	6,61	5,79	5,41	5,19	5,05	4,95	4,82	4,68	4,53	4,36
6	5,99	5,14	4,76	4,53	4,39	4,28	4,15	4,00	3,84	3,67
7	5,50	4,74	4,35	4,12	3,97	3,87	3,73	3,57	3,41	3,23
8	5,32	4,46	4,07	3,84	3,69	3,58	3,44	3,28	3,12	2,93
9	5,12	4,26	3,86	3,63	3,48	3,37	3,23	3,07	2,90	2,71
10	4,96	4,10	3,71	3,48	3,33	3,22	3,07	2,91	2,74	2,54
11	4,84	3,98	3,59	3,36	3,20	3,09	2,95	2,79	2,61	2,40
12	4,75	3,88	3,49	3,26	3,11	3,00	2,85	2,69	2,50	2,30
13	4,67	3,80	3,41	3,18	3,02	2,92	2,77	2,60	2,42	2,21
14	4,60	3,74	3,34	3,11	2,96	2,85	2,70	2,53	2,35	2,13
15	4,54	3,68	3,29	3,06	2,90	2,79	2,64	2,48	2,29	2,07
16	4,49	3,63	3,24	3,01	2,85	2,74	2,59	2,42	2,24	2,01
17	4,45	3,59	3,20	2,96	2,81	2,70	2,55	2,38	2,19	1,96
18	4,41	3,55	3,16	2,93	2,77	2,66	2,51	2,34	2,15	1,92
19	4,38	3,52	3,13	2,90	2,74	2,63	2,48	2,31	2,11	1,88
20	4,35	3,49	3,10	2,87	2,71	2,60	2,45	2,28	2,08	1,84
21	4,32	3,47	3,07	2,84	2,68	2,57	2,42	2,25	2,05	1,81
22	4,30	3,44	3,05	2,82	2,66	2,55	2,40	2,23	2,03	1,78
23	4,28	3,42	3,03	2,80	2,64	2,53	2,38	2,20	2,00	1,76
24	4,26	3,40	3,01	2,78	2,62	2,51	2,36	2,18	1,98	1,73
25	4,24	3,38	2,99	2,76	2,60	2,49	2,34	2,16	1,96	1,71
26	4,22	3,37	2,98	2,74	2,59	2,47	2,32	2,15	1,95	1,69
27	4,21	3,35	2,96	2,73	2,57	2,46	2,30	2,13	1,93	1,67
28	4,20	3,34	2,95	2,71	2,56	2,44	2,29	2,12	1,91	1,65
29	4,18	3,33	2,93	2,70	2,54	2,43	2,28	2,10	1,90	1,64
30	4,17	3,32	2,92	2,69	2,53	2,42	2,27	2,09	1,89	1,62
40	4,08	3,23	2,84	2,61	2,45	2,34	2,18	2,00	1,79	1,52
60	4,00	3,15	2,76	2,52	2,37	2,25	2,10	1,92	1,70	1,39
120	3,92	3,07	2,68	2,45	2,29	2,17	2,02	1,83	1,61	1,25
∞	3,84	2,99	2,60	2,37	2,21	2,09	1,94	1,75	1,52	1,00

Равномерно распределенные случайные числа

25	45	65	06	59	33	33	70	32	79	24	35	98	51	17	78	17	62	41	13	63	55	18	48	48	41	13	15	90
24	49	16	36	06	59	68	91	92	91	12	5	84	37	78	78	91	10	41	65	37	26	05	64	00	23	64	58	17
23	27	29	03	62	76	17	92	30	38	85	5	35	07	56	77	17	60	83	41	81	55	60	05	21	45	98	48	41
22	29	82	08	43	03	17	19	40	40	62	38	5	27	38	84	35	27	47	21	81	38	28	05	44	08	05	08	20
21	39	00	35	04	43	12	11	23	18	62	49	83	50	50	07	37	58	60	40	21	14	96	94	40	38	08	05	22
20	17	02	64	97	77	77	85	39	74	47	47	09	33	01	10	10	93	68	47	64	86	40	37	90	22	54	38	08
19	91	04	47	43	68	85	11	98	90	52	87	03	34	42	06	06	64	64	13	86	71	42	39	99	09	08	05	08
18	90	61	33	67	67	43	33	90	74	38	82	87	09	52	42	47	54	56	95	71	16	42	11	39	77	08	03	33
17	95	63	95	67	95	95	81	79	05	46	82	93	60	97	40	47	36	78	03	11	52	62	75	08	75	14	03	04
16	80	20	15	88	98	85	65	86	73	28	28	60	60	29	18	90	93	73	21	45	76	96	94	75	53	57	96	43
15	76	37	65	65	53	53	70	14	48	18	48	82	58	48	78	51	28	74	74	10	03	03	54	54	35	75	97	63
14	48	40	25	11	66	61	26	26	48	75	42	82	05	82	00	79	89	69	69	74	02	10	67	67	88	29	35	41
13	35	52	90	13	23	73	34	34	57	35	83	83	94	56	67	66	66	60	82	77	68	68	72	28	28	73	65	92
12	67	80	20	31	03	69	30	69	66	55	35	80	10	72	74	74	76	04	04	31	93	46	16	46	16	29	92	86
11	34	24	23	38	15	36	35	35	68	48	90	35	22	50	13	36	91	58	45	43	36	46	46	46	70	32	12	40
10	86	96	03	03	47	50	06	06	92	78	07	78	07	32	83	01	84	69	50	15	14	14	14	86	86	58	40	84
9	35	42	93	07	61	68	24	24	56	70	47	56	86	77	80	84	49	09	50	80	72	91	85	76	76	49	20	44
8	01	47	50	67	73	07	27	18	16	54	96	56	89	82	89	75	76	85	27	70	22	22	56	92	03	74	90	53
7	52	89	64	37	15	07	45	57	05	05	32	90	56	80	28	50	86	51	46	85	66	45	25	22	47	15	10	50
6	76	64	19	09	80	34	45	45	02	03	03	14	39	06	06	87	17	17	17	77	66	22	66	68	26	94	85	16
5	33	05	53	29	70	17	05	05	02	35	53	67	31	34	00	48	48	48	35	35	17	03	03	23	68	49	42	29
4	25	48	89	25	99	47	08	08	76	21	57	57	54	54	02	76	76	46	11	56	98	68	05	45	23	98	19	93
3	73	20	26	90	01	90	01	01	33	33	64	01	01	50	06	54	54	46	11	43	09	62	32	91	45	69	48	64
2	09	54	42	01	80	79	06	06	26	26	79	52	11	80	45	68	68	48	12	35	35	89	89	49	49	80	33	60
1	10	37	08	12	66	31	31	31	85	63	73	98	11	11	83	88	88	65	80	74	69	69	09	91	49	44	12	63

Критерий Кохрена при $q=0,05$

q f	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	16	36	144	∞
2	0,9985	0,9750	0,9392	0,9057	0,8772	0,8534	0,8332	0,8159	0,8010	0,7880	0,7341	0,6602	0,5813	0,5000
3	0,9669	0,8709	0,7977	0,7457	0,7071	0,6771	0,6530	0,6333	0,6167	0,6025	0,5466	0,4748	0,4031	0,3333
4	0,9065	0,7679	0,6841	0,6287	0,5895	0,5598	0,5365	0,5175	0,5017	0,4884	0,4366	0,3720	0,3093	0,2500
5	0,8412	0,6838	0,5981	0,5441	0,5065	0,4783	0,4564	0,4387	0,4241	0,4118	0,3645	0,3056	0,2513	0,2000
6	0,7808	0,6161	0,5321	0,4803	0,4447	0,4184	0,3980	0,3817	0,3682	0,3558	0,3135	0,2612	0,2119	0,1667
7	0,7271	0,5612	0,4800	0,4307	0,3974	0,3726	0,3535	0,3384	0,3259	0,3154	0,2756	0,2278	0,1833	0,1429
8	0,6798	0,5157	0,4377	0,3910	0,3595	0,3362	0,3185	0,3043	0,2926	0,2829	0,2462	0,2022	0,1616	0,1250
9	0,6385	0,4775	0,4027	0,3584	0,3286	0,3067	0,2901	0,2768	0,2659	0,2568	0,2226	0,1820	0,1446	0,1111
10	0,6020	0,4450	0,3733	0,3311	0,3029	0,2823	0,2666	0,2541	0,2439	0,2353	0,2032	0,1655	0,1308	0,1000
12	0,5410	0,3924	0,3264	0,2880	0,2624	0,2439	0,2299	0,2187	0,2098	0,2020	0,1737	0,1403	0,1100	0,0833
15	0,4709	0,3346	0,2758	0,2419	0,2195	0,2034	0,1911	0,1815	0,1736	0,1671	0,1429	0,1144	0,0889	0,0667
20	0,3894	0,2705	0,2205	0,1921	0,1735	0,1602	0,1501	0,1422	0,1357	0,1303	0,1108	0,0879	0,0675	0,0500
24	0,3434	0,2354	0,1907	0,1656	0,1493	0,1374	0,1286	0,1216	0,1160	0,1113	0,0942	0,0743	0,0557	0,0417
30	0,2929	0,1980	0,1593	0,1377	0,1237	0,1137	0,1061	0,1002	0,0958	0,0921	0,0771	0,0604	0,0457	0,0333
40	0,2370	0,1576	0,1259	0,1082	0,0968	0,0887	0,0827	0,0780	0,0745	0,0713	0,0595	0,0462	0,0347	0,0250
60	0,1737	0,1131	0,0895	0,0765	0,0682	0,0623	0,0583	0,0552	0,0520	0,0497	0,0411	0,0316	0,0234	0,0167
120	0,0998	0,0632	0,0495	0,0419	0,0371	0,0337	0,0312	0,0292	0,0279	0,0266	0,0218	0,0165	0,0120	0,0083
∞	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Матрица планирования для метода случайного баланса

Номер опыта	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	X_8	X_9	X_{10}	X_{11}	X_{12}	X_{13}	X_{14}	X_{15}	X_{16}	X_{17}	X_{18}	X_{19}
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
3	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
4	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
5	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
6	+1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
7	-1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
8	+1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
9	-1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
10	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
11	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
12	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
13	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
14	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
15	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
16	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1

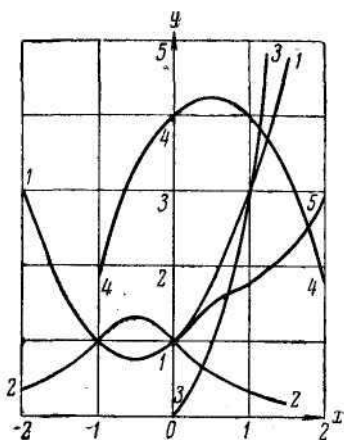


Рис. П.3. График функций:

- 1—1 — кривая типа $y=a+bx+cx^2$ при $a=b=c=1$;
- 2—2 — кривая типа $y = \frac{1}{a+bx+cx^2}$ при $a=b=c=1$;
- 3—3 — кривая типа $y=ax+cx^2+cx^3$ при $a=b=c=1$; и $x>0$;
- 4—4 — кривая типа $y=a+bx+cx$ при $a=4$; $b=1$ и $c=-1$;
- 5—5 — кривая типа $y=ax+bx^2+cx^3$ при $a<1,0$, $b<1,0$ и $c<1,0$.

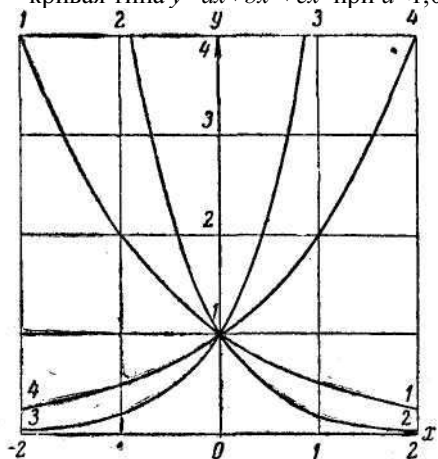


Рис. П.4. Кривые типа $y=a^x$:

- 1—1 — при $a=0,5$; 2—2 — при $a=0,2$; 3—3 — при $a=5$; 4—4 — при $a=2$.

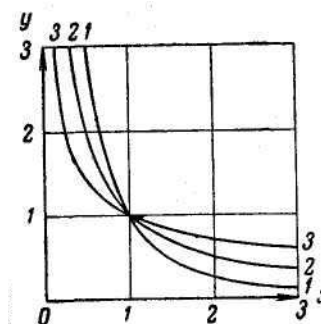


Рис. П.5. Кривые типа $y=x^{-m}$:

- 1—1 — при $m=2$; 2—2 — при $m=1$; 3—3 — при $m=0,5$

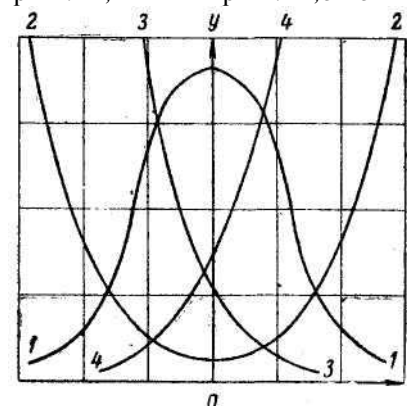


Рис. П.6. График функций:

- 1—1 — кривая типа $y = ab^{-xc}$ при $b>0$ и четном значении c ;
- 2—2 — кривая типа $y=ab^{xc}$ при $b>0$ и четном значении c ;
- 3—3 — кривая типа $y = ab^{-xc}$ при $b>0$ и нечетном значении c ;
- 4—4 — кривая типа $y = ab^{xc}$ при $b>0$ и нечетном значении c

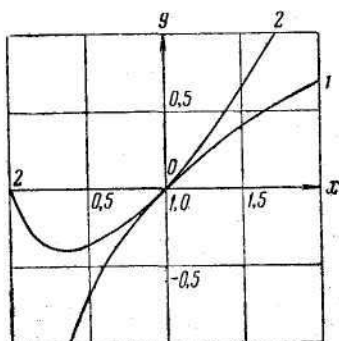


Рис. П.7. График функций:
1—1 — кривая типа $y = \ln|x|x$; 2—2 — кривая типа $y=x \ln|x|x$.

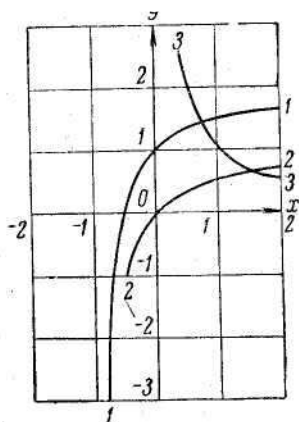


Рис. П.8. График функций:
1—1 — кривая типа $y = \frac{a+bx}{x} + c$ при $a=b=c=1$;
2—2 — кривая типа $y = a+bx$ при $a=b=1$;
3—3 — кривая типа $y=a/x$ при $a=1$.

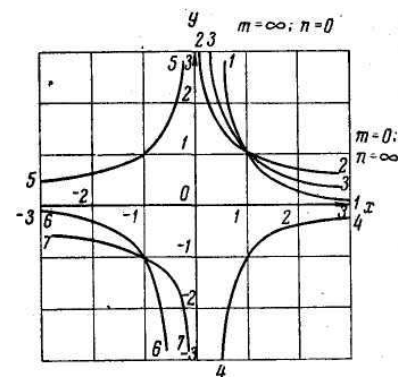


Рис. П.9. Кривые типа $x^m y^n = c$ при $c=1$:
1—1 — при $m=2, n=1$; 2—2 — при $m=1, n=2$; 3—3 — при $m=n=2$; 4—4 — при $m=3, n=2$; 5—5 — при $m=2, n=3$; 6—6 — при $m>n, m$ и n нечетные числа; 7—7 — при $m<n, m$ и n — нечетные числа.

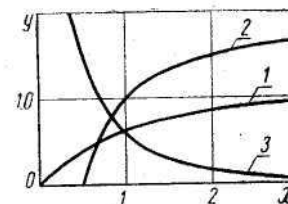


Рис. П.10. График функций:
1 — кривая типа $y=1-e^{-x}$; 2 — кривая типа $y=a-(b/x)$ при $a=2$ и $b=1$; 3 — кривая типа $y = \frac{1}{e^x - 1}$.

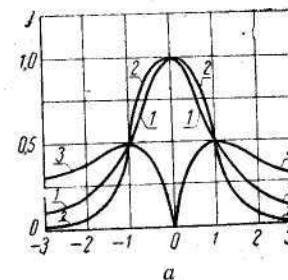


Рис. П.11. График функций $y = \frac{a}{1+x^n}$ при n — положительном:
1—1 — при $n=2, a=1$; 2—2 — при $n=4, a=1$; 3—3 — при $y = \frac{|x|}{1+x^2}$.

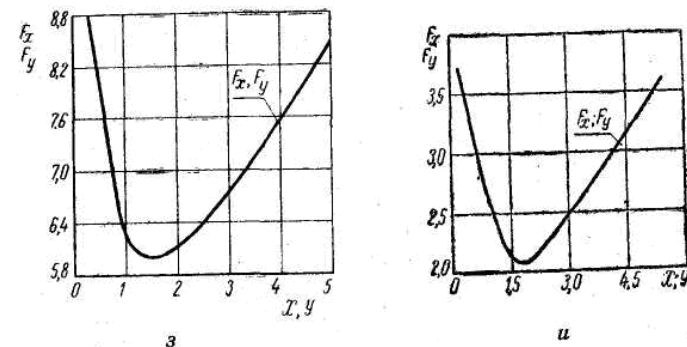
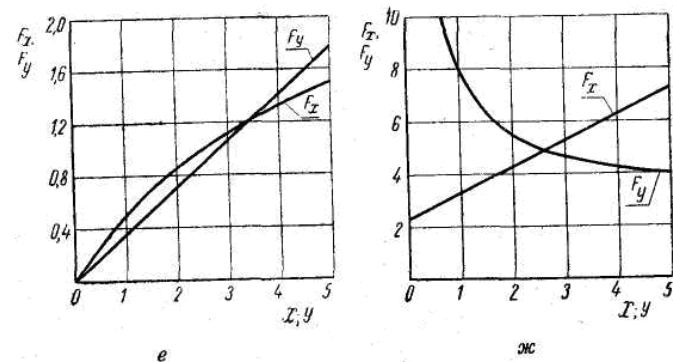
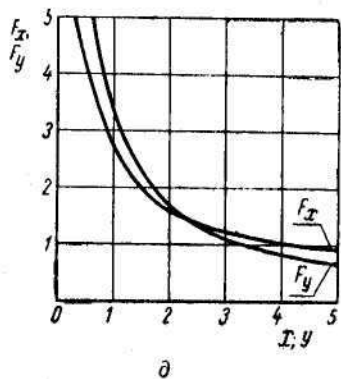
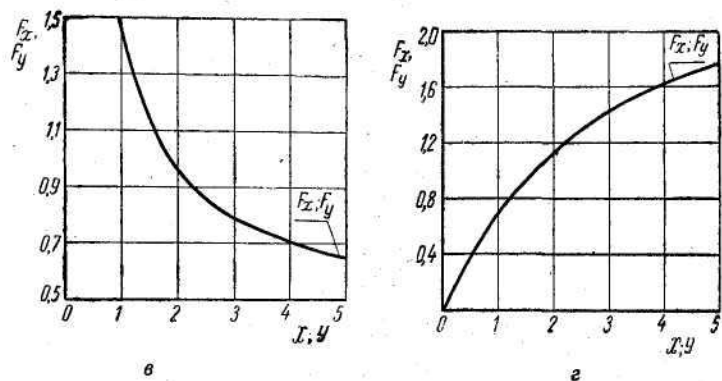
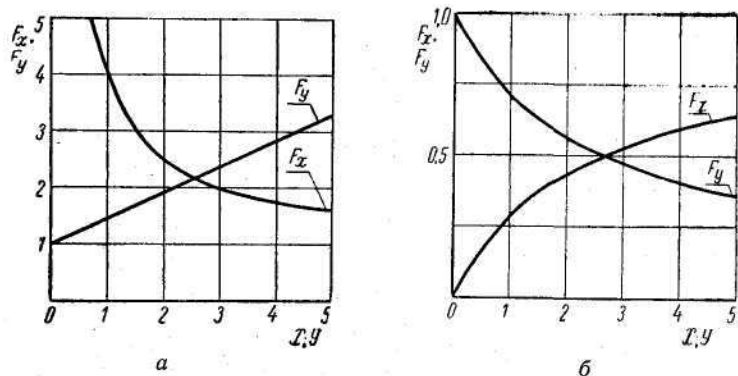


Рис. П.12. Простые типы матричных функционалов:

- а — функционал типа $F_{xy} = \frac{x+y}{x}$;
- б — функционал типа $F_{xy} = \frac{x}{x+y}$;
- в — функционал типа $F_{xy} = \frac{x+y}{xy}$;
- г — функционал типа $F_{xy} = \frac{xy}{x+y}$;
- д — функционал типа $F_{xy} = \frac{x+d}{xy}$;
- е — функционал типа $F_{xy} = \frac{xy}{x+d}$;
- ж — функционал типа $F_{xy} = -x + \frac{d}{y}$;
- з — функционал типа $F_{xy} = -x + y + \frac{d}{xy}$;
- и — функционал типа $F_{xy} = \frac{x}{y} + \frac{y}{x}$.

Все графики построены в системе прямоугольных координат с равномерными шкалами. Шкала независимой переменной направлена по оси абсцисс. В подписи к каждому графику указан тип уравнения, соответствующего кривым графика.

При подборе уравнений следует брать участки кривых, наиболее схожие по характеру со сглаженными опытными. Например, если кривая дана в области и положительных, и отрицательных значений независимой переменной, можно брать ее участок в необходимых пределах или в области положительных, или в области отрицательных значений аргумента.

Если условиям схожести удовлетворяют несколько участков кривых различного вида, выбирают формулу наиболее простую или такую, которую можно превратить в полуэмпирическую или полурациональную.

Список литературы

1. *Налимов В. В., Чернова Н. А.* Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. М., Наука, 1965.
2. *Зедгендзе И. Г.* Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем. М., Наука, 1976.
3. Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов /Под ред. Э. К. Лецкого. М., Мир, 1977.
4. *Писаренко В. Н., Погорелое А. Г.* Планирование кинетических исследований. М.—Л., Наука, 1969.
5. *Федоров В. В.* Теория оптимального эксперимента. М., Наука, 1971.
6. *Налимов В. В., Голикова Т. И.* Логические основания планирования эксперимента. М., Металлургия, 1976.
7. *Радченко Н.Г.* Устойчивые методы оценивания статистических моделей. К., ПП «Санспарель», 2005.
8. *Бабуров Э.Ф., Куликов Э.Л., Маригодов В.К.* Основы научных исследований. К., Вища школа, 1988.
9. *Веденяпин Г.В.* Общая методика экспериментального исследования и обработки опытных данных. М., Колос, 1973.
10. *Бендат Цок., Пирсол А.* Измерение и анализ случайных процессов. М., Мир, 1974.
11. *Дэниел К.* Применение статистики в промышленном эксперименте. М., Мир, 1979.
12. *Химмельблау Д.* Анализ процессов статистическими методами. М., Мир, 1973.
13. *Статюха Г. А., Ладиев Р. Я.* Байесов подход к анализу сложных ХТС. — Хим. технол., 1973, № 4, с. 43.
14. *Вознесенский В. А., Ковальчук А. Ф.* Принятие решений по статистическим моделям. М., Статистика, 1979.
15. *Адлер Ю. П., Маркова Е. В., Грановский Ю. В.* Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. М., Наука, 1976.
16. *Адлер Ю. П.* Введение в планирование эксперимента. М., Металлургия, 1969.
17. *Рузинов Л. П.* Статистические методы оптимизации химических процессов. М., Химия, 1972.
18. *Египко В. М.* Организация и проектирование систем автоматизации научно-технических экспериментов. Киев, Наукова думка, 1978.
19. *Островский Г. М., Бережнинский Т. А., Беляева А. Р.* Алгоритмы оптимизации химико-технологических процессов. М., Химия, 1978.
20. *Гурский Е. И.* Теория вероятностей с элементами математической статистики. М., Высшая школа, 1971.

Научно-практическое издание

Кононюк Анатолий Ефимович

Основы научных исследований

(Общая теория эксперимента)

Монография

Книга 2

Руководитель издательских проектов Кривенко А.А.

Оригинал-макет изготовлено издательством «КНТ»

Редакция авторская

Ответственный за выпуск

Подписано в печать 00.00.2011 г.

Формат 60x84/16.

Усл. печ. л. 16,5.

Тираж экз. Заказ №

Издательство «КНТ»

04210, г.Киев, пр. Героев Сталинграда, 8, корпус 8, оф. 1.

Тел./факс (044) 581-21-38.

E-mail: knt2012@ukr.net

Свидетельство субъекта издательского дела: ДК № 581 от 03.08.2001